



HAL
open science

**Estimation de paramètres et de conditions limites
thermiques en conduction instationnaire pour des
matériaux anisotropes. Apport des algorithmes
stochastiques à la conception optimale d'expérience.**

Emmanuel Ruffio

► **To cite this version:**

Emmanuel Ruffio. Estimation de paramètres et de conditions limites thermiques en conduction instationnaire pour des matériaux anisotropes. Apport des algorithmes stochastiques à la conception optimale d'expérience.. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2011. Français. NNT: . tel-00664748

HAL Id: tel-00664748

<https://theses.hal.science/tel-00664748>

Submitted on 31 Jan 2012

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.

THÈSE

Pour l'obtention du grade de

**DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE ET
D'AEROTECHNIQUE**

Institut P' département Fluides Thermique Combustion

Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006

Ecole doctorale : Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique

Secteur de recherche : Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par

Emmanuel Ruffio

**Estimation de paramètres et de conditions limites
thermiques en conduction instationnaire pour des
matériaux anisotropes. Apport des algorithmes
stochastiques à la conception optimale d'expérience.**

Directeur de thèse : **Daniel PETIT**

Co-encadrant : **Didier SAURY**

Soutenue le 1er décembre 2011

JURY

Denis MAILLET	Professeur, INPL, Nancy	Rapporteur
Jean-Christophe BATSALE	Professeur, Université de Bordeaux	Rapporteur
Mathilde WEBER	Ingénieur, Air Liquide, CRCO, Paris	Examineur
Olivier FUDYM	Professeur, Ecole des Mines d'Albi	Examineur
Daniel PETIT	Professeur, ENSMA, Poitiers	Examineur
Didier SAURY	Maître de Conférences, Université de Poitiers	Examineur

Remerciements

Voilà bientôt déjà 4 ans que j'ai intégré dans le Laboratoire d'Etudes Thermiques de Poitiers (LET) de l'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique (ENSMA) de Poitiers, qui a depuis été intégré au département Fluides Thermique Combustion (FTC) de l'Institut P'. Je me dois donc de remercier Denis LEMONNIER, directeur de recherche CNRS et directeur du Laboratoire, pour m'avoir accueilli pour mon stage de Master tout d'abord, puis pour ce doctorat.

J'adresse mes remerciements à tous les membres du jury, que j'ai eu le plaisir de rencontrer à de nombreuses reprises pendant les 3 années de thèse. Je remercie en particulier Denis MAILLET, Professeur à l'Institut National Polytechnique de Lorraine (INPL) à Nancy, ainsi que Jean-Christophe BATSALE, Professeur à l'Université de Bordeaux, pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ce manuscrit et pour les quelques heures nécessaires pour arriver au bout. Merci à vous pour les remarques, corrections et suggestions qui m'ont permis d'améliorer la version finale de ce rapport.

Mes remerciements vont ensuite Olivier FUDYM, Professeur à l'Ecole des Mines d'Albi, et Mathilde WEBER, Ingénieur au Centre de Recherche Claude Delorme (CRCD) d'Air Liquide à Paris, ainsi que les invités Benjamin REMY, Maître de Conférences à l'INPL à Nancy, Jonathan CORMIER, Maître de Conférences à l'Institut P' dans département Physique et Mécanique des Matériaux (PMM) et Manuel GIRAULT, Chargé de Recherche CNRS à l'Institut P' Dept. FTC pour avoir accepté d'examiner cette étude.

Comment évoquer la ville de Nancy sans parler du laboratoire du LEMTA et de Denis MAILLET, Benjamin REMY, Alain DEGIOVANNI et Youssef SOUHAR, qui nous ont partagé leur savoir faire et leur expérience et sans qui cette thèse aurait probablement pris un autre chemin.

Evoquer Air Liquide, c'est mentionner le projet Horizon Hydrogène Energie (H2E) et les partenaires avec qui ces travaux ont été réalisés. Je remercie ainsi non seulement Mathilde WEBER, Emmanuel DEMAËL et Fouad AMMOURI du CRCD, mais également Gilles CASSAND et Christophe LANGLOIS d'EADS-Composite Aquitaine de Bordeaux, Fabienne TOUCHARD et Benoit GENTILLEAU du département PMM de l'Institut P'. Ces réunions régulières ont permis de mieux cerner les problématiques et les enjeux industriels et d'abandonner ponctuellement la Sodexo pour le Plaza.

Autre sujet et autre problématique dans le cadre du groupe transverse « Matériaux, Conditions extrêmes », j'adresse mes remerciements à Jonathan CORMIER et Julien BEAUDET de l'Institut P' Dept. PMM qui ont permis la réalisation d'une partie de ces travaux de thèse (la torche oxyacétylène) et m'ont donné l'occasion de faire un peu de (vrai) thermique en abandonnant quelques instants les fades températures ambiantes pour celles à quatre chiffres.

* * *

Je tiens à remercier tout particulièrement mes directeurs de thèse Daniel PETIT, Professeur à l'ENSMA, et Didier SAURY, maître de conférence à l'Université de Poitiers, pour leur patience (notamment par rapport à la rédaction d'articles), leurs conseils ainsi que pour l'autonomie dont j'ai pu bénéficier. Remarquons (c'est remarquable) que Daniel, le numéricien, a l'immense honneur d'être né le même jour que moi (ou inversement), à l'année près. C'est ce même Daniel qui évoqua (sans

grand espoir apparemment), un jour, en travaux dirigés une possibilité de stage à Air Liquide. C'est ce stage qui fait, qu'aujourd'hui, j'écrive ces remerciements. On se rappellera par ailleurs cette partie de Go dans l'environnement particulier du CHU de Poitiers ou de ce passage éclair dans la Médina de Monastir. Quant à Didier, l'expérimentateur (mais pas seulement), indispensable pour mesurer des températures (en thermique, ça arrive), est le spécialiste de l'assemblage des vélos d'appartement.

Je me dois aussi de remercier Manuel GIRAULT, que j'ai périodiquement sollicité pendant mon master pour telle ou telle librairie de fortran (quelle idée aussi d'avoir jadis utilisé ça) puis par la suite pour tel ou tel aspect numérique. Mes remerciements vont aussi à Denis LEMONNIER qui a toujours répondu à mes questions sur l'opaque domaine qu'est le rayonnement (volumique) des corps.

Cette thèse étant numérique qu'à 98 % seulement (en temps), les 2 % restant (l'expérimental) sont toutefois absolument indispensables. Aussi, cette thèse n'aurait pas pu être achevée sans l'apport, l'aide et les compétences indispensables du service technique du laboratoire. On peut évoquer tout d'abord Christophe QUINTARD et Jacques NERAULT, du service informatique qui m'ont concrètement permis de travailler, puis l'équipe à qui je dois la réalisation et l'assemblage du banc expérimental, c'est à dire, Catherine FUENTES, Hervé ARLAUD, André PITEAU, Cyril ROMESTANT, Yann THOMAS et Jean-Christophe FRAUDEAU. Un laser en kit ne se monte pas comme une étagère. La documentation est un peu plus longue, un peu plus obscure et contrairement au laser, il est moins probable qu'une étagère nous passe à travers. Mes remerciements vont aussi à Hélène GRASSIN pour toutes les mesures de spectroscopie infrarouge et qui a espéré jusqu'à bout que les échantillons, donneraient autre chose qu'une ennuyeuse courbe constante égale à 0 (ou 1).

Je tiens aussi à remercier en particulier Catherine LAVALLADE pour réussir à supporter ce que j'ai en horreur, à savoir tout ce qui concerne, de près ou de loin, l'administratif (pour preuve, ma mutuelle n'a jamais entendu parlé de moi, sauf pour les cotisations mensuelles. . .) ainsi que tous les autres membres du laboratoire qui contribuent, chacun à leur manière, à rendre unique l'ambiance du laboratoire.

C'est bien connu, on dispose de beaucoup de temps libre en thèse (surtout en dernière année) pour acquérir quelque connaissance supplémentaire. Je remercie ainsi Franck MERCIER et à nouveau André PITEAU, pour avoir répondu à mes questions (souvent naïves) concernant l'électronique, la programmation des PIC et la fabrication des cartes.

Concernant la vie dans le bureau et la vie inter-bureau, je remercie Yassine (dont les compétences en anglais sont incontestables et incontestés, if if), Jérôme, Qaiser, Marouen et Kamélia. Je joins à ces remerciements les collègues des bureaux d'en face, parfois adversaires au tarôt ou au badminton, à savoir Rémi, Laurent, Nicolas (les deux), Noëlie, Daniel, Nicolas, Clémence, Damien, Bastien, Julien, Jean-François, Matthieu et les nouveaux venus.

Je remercie aussi sincèrement Frédéric PONS, maître de conférence à l'ENSMA, concrètement un de mes profs de math à l'ENSMA, pour avoir consacré plusieurs heures de ses vacances de Noël à lire le premier chapitre de ce manuscrit et pour m'avoir aidé à clarifier quelques notions de probabilité

pour la version finale de ce rapport (de là à dire que je n'ai pas compris de travers et que la rédaction est correcte...).

* * *

L'univers du laboratoire, c'est une chose, mais je ne peux pas ne pas évoquer l'aumônerie de l'ENSMA avec ses discussions et questions existentielles : que se passerait-il si nos yeux ne voyaient le monde qu'en transformée de Fourier ? Plutôt que de me risquer à faire une liste, vous vous reconnaitrez, merci à tous.

Merci à Jérôme pour m'avoir presque obligé à commencer le Kendo au début de ma thèse, un des (seuls) art martiaux où la souplesse n'est pas un prérequis. Une petite pensée au club (Jean, Nanou, Bibi, Raph, Thiborg, Max, TERENCE, Marc, Loïc, Damien, Nico, Flavien...) dont les entraînements ont achevé la plupart des journées de la semaine de ces trois dernières années.

Une pensée à toute la communauté locale de Jaunay-Clan pour m'avoir supporter et accompagner pendant les sept années qui viennent de s'écouler : André, Abel, Julien, Daniel et Janine, Marie-Thérèse, Laurent et Gwenaële, Dominique, Brigitte, Marguerite, Odile et Daniel, Reine et Philippe, Annette et Philippe, Catherine, Jeanne, Chantale, Arnaud et Véronique, Yannick et François, etc, etc, etc...

Merci enfin à Antoine, Edouard, Hélène et Jean-Baptiste et aux « compagnons d'infortune », Luc-Henry, Aurélie qui ont aussi connu une rédaction de thèse.

Je voudrais conclure sur une pointe d'optimisme avec ces quelques lignes, qui à mon sens, résume, bien que partiellement, l'essentiel.

Vanité des vanités, dit l'Ecclésiaste, vanité des vanités, tout est vanité.

Quel avantage revient-il à l'homme de toute la peine qu'il se donne sous le soleil ?

Une génération s'en va, une autre vient, et la terre subsiste toujours.

Le soleil se lève, le soleil se couche ; il soupire après le lieu d'où il se lève de nouveau.

Le vent se dirige vers le midi, tourne vers le nord ; puis il tourne encore, et reprend les mêmes circuits.

Tous les fleuves vont à la mer, et la mer n'est point remplie ; ils continuent à aller vers le lieu où ils se dirigent.

Toutes choses sont en travail au delà de ce qu'on peut dire ; l'oeil ne se rassasie pas de voir, et l'oreille ne se lasse pas d'entendre.

Ce qui a été, c'est ce qui sera, et ce qui s'est fait, c'est ce qui se fera, il n'y a rien de nouveau sous le soleil.

[...]

J'ai vu tout ce qui se fait sous le soleil ; et voici, tout est vanité et poursuite du vent.

Ecclésiaste 1.1-9, 1.14

Table des matières

Table des figures	xv
Liste des tableaux	xxi
Introduction générale	1
1 Outils pour l'estimation de paramètres en thermique	5
1 Les problèmes inverses en thermique	6
1.1 Estimation de paramètres et de conditions limites	6
1.2 Mesures, observables, sorties et estimateurs	6
1.3 Problème direct et problème inverse	9
2 Les méthodes d'estimation	10
2.1 Introduction	10
2.2 La qualité d'un estimateur	12
2.2.1 La robustesse d'un estimateur	12
2.2.2 Le biais	13
2.2.3 La variance	14
2.2.4 Comparaison des 6 méthodes d'estimation	15
2.3 La méthode des moindres-carrés ordinaires	16
2.3.1 Généralités	17
2.3.2 Les moindres-carrés linéaires	17
2.3.3 Biais et variance	19
2.3.4 Extensions de la méthode des moindres carrés	19
2.4 L'approche fréquentielle et Bayésienne des probabilités	21
2.4.1 Approche bayésienne des probabilités	21
2.4.2 Approche fréquentielle des probabilités	24

2.5	La méthode du maximum de vraisemblance (MLE)	25
2.5.1	Généralités	25
2.5.2	Liens avec l'estimation par moindres-carrés	26
2.5.3	Propriétés du maximum de vraisemblance	28
2.6	Méthode du maximum a posteriori (MAP)	28
2.7	Estimateur MAP dans la pratique	29
2.7.1	Les hypothèses	29
2.7.2	La fonction objectif et sa solution	30
2.7.3	Ecarts-types des estimations	31
2.7.4	Biais des estimations	33
3	Résolution du problème inverse	35
3.1	Linéarités et non-linéarités du problème direct et du problème inverse . .	35
3.1.1	Les systèmes linéaires	35
3.1.2	Le problème direct et le problème inverse	36
3.1.3	Le problème inverse	36
3.2	Problèmes inverses linéaires	37
3.3	Problèmes inverses non-linéaires	38
3.3.1	Les algorithmes d'ordre 1	39
3.3.2	Les algorithmes d'ordre supérieur	40
4	Incertitudes, erreurs et résidus	41
4.1	Les sources d'incertitudes dans un problème inverse	41
4.2	Influence du bruit de mesure	42
4.2.1	Origine du bruit de mesure	42
4.2.2	Influence du bruit de mesure	44
4.3	Incertitudes dues aux paramètres supposés connus	46
4.4	Influence de l'information a priori sur les résidus	48
4.5	Erreurs de modèle et analyse des résidus	49
4.5.1	Signature des résidus	49
4.5.2	Résidus normalisés et résidus studentisés	50
4.5.3	Ecart-type des résidus	50
5	Problèmes mal-posés	52
5.1	Introduction et généralités	52
5.1.1	Aspect théorique	52
5.1.2	Problèmes mal-posés	53
5.1.3	Problèmes mal-conditionnés	54
5.2	Outils de diagnostic	54
5.2.1	Coefficients de sensibilité réduite	55
5.2.2	Analyse graphique et matrice de corrélation	56

5.2.3	Critères numériques sur la matrice d'information	57
5.2.4	L'analyse par SVD (Singular Value Decomposition)	58
5.3	Outils de régularisation	61
5.3.1	Introduction d'information a priori	62
5.3.2	Troncature SVD	63
6	Synthèse	66
Références bibliographiques		69
2 La méthode flash 3D		71
1	Introduction	71
1.1	L'estimation de paramètres thermophysiques	71
1.1.1	Généralités	71
1.1.2	La conduction thermique dans les solides	72
1.1.3	Homogénéisation des matériaux	73
1.2	Les grandes catégories d'expériences	73
2	Etat de l'art des méthodes flash	74
2.1	Les origines de la méthode flash	75
2.2	Les évolutions de la méthode de Parker	75
2.3	Apport des méthodes numériques et des estimateurs	77
2.4	Apport des instruments de mesure	77
2.5	Apport des solutions analytiques	78
2.6	L'estimateur de la méthode flash 1D avec pertes	78
2.6.1	Le modèle	79
2.6.2	L'estimateur	80
2.6.3	Extension du modèle	81
3	La méthode flash 3D	86
3.1	Les matériaux anisotropes	86
3.2	Description et résolution analytique du système	87
3.2.1	Le système étudié et le modèle associé	87
3.2.2	La solution analytique	88
3.2.3	La forme spatiale de l'excitation	89
3.2.4	La forme temporelle de l'excitation : l'impulsion	91
3.2.5	La forme temporelle de l'excitation : l'échelon	92
3.2.6	Evaluation numérique de la solution	93
3.3	Harmoniques spatiales du champ de température	94
3.3.1	Description des harmoniques	94
3.3.2	Ecart-type des harmoniques	96

	3.3.3	Durée de vie des harmoniques	98
	3.3.4	Intérêts de travailler sur les harmoniques	99
4		La thermographie infrarouge	99
	4.1	Caméra infrarouge : principe de mesure	100
	4.2	De l'échantillon à l'optique de la caméra	101
	4.3	De l'optique au capteur	104
	4.4	Le capteur	104
	4.5	La résolution de mesure d'une caméra	108
	4.6	Les lois d'étalonnage	110
	4.7	Approximations de la loi d'étalonnage	112
5		Etat de l'art du traitement numérique	114
	5.1	Estimation par rapport des harmoniques	114
	5.1.1	Principe de l'estimation par rapport des harmoniques	115
	5.1.2	Matrice de variance-covariance des observables	115
	5.1.3	Estimateur proposé par Philippi et al.	117
	5.1.4	L'estimateur dit « ERH »	118
	5.1.5	Optimisation de l'estimateur ERH	120
	5.1.6	Synthèse sur l'estimateur « ERH »	121
	5.2	Estimation par normalisation des harmoniques (ENH)	123
	5.2.1	Principe de la normalisation des harmoniques	124
	5.2.2	Matrice de variance-covariance	125
	5.2.3	Exemple d'observables	127
	5.2.4	Choix de l'harmonique de référence	129
	5.2.5	Synthèse	130
	5.3	Estimation par traitement direct et séparation des harmoniques (EDSH)	131
	5.3.1	Principes	131
	5.3.2	Influence des covariances sur les écarts-types des estimations	132
	5.3.3	Synthèse	133
	5.4	Estimation directe et simultanée de tous les paramètres (ED)	134
	5.4.1	L'estimateur MLE sur les harmoniques	134
	5.4.2	La matrice de variance-covariance des observables	135
	5.4.3	Concentration de l'information dans les basses fréquences	135
	5.4.4	Correction de synchronisation et d'offset	137
	5.4.5	Correction de la dérive temporelle	139
	5.4.6	Quelle courbe de calibration ?	140
	5.4.7	Correction de la courbe de calibration	141
	5.4.8	Intérêts et inconvénients	146
	5.5	Comparaison des méthodes de traitement	146

6	Dispositif expérimental et application	148
6.1	L'excitation thermique - le laser CO ₂	148
6.2	Le capteur - la caméra infrarouge	149
7	Conclusion	151
Références bibliographiques		155
3 Estimation de conditions limites thermiques		161
1	Généralités	161
2	Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression	163
2.1	Modélisation du remplissage d'une bouteille	164
2.2	Problématique et objectifs	166
2.3	Caractérisation des matériaux	168
2.3.1	Diffusivité thermique du polymère	168
2.3.2	Diffusivités thermiques du matériau composite	174
2.4	Transfert thermique dans les parois	176
2.4.1	Modèle direct	176
2.4.2	Filtrage passe-bas de la paroi	179
2.4.3	Contenu fréquentiel du gaz dans la bouteille	181
2.4.4	Synthèse	181
2.5	Estimation dans la base de sinus	182
2.5.1	Choix de la base de fonctions	183
2.5.2	Troncature de la base de fonctions	183
2.5.3	Régularisation de la solution	184
2.5.4	Expression des sorties du modèle	184
2.5.5	Résolution du problème inverse	185
2.5.6	Estimation de la densité de flux	187
2.6	Estimation globale - Fonctions portes	189
2.7	Estimation globale - Fonctions triangulaires	191
2.8	Synthèse	192
3	Application à la torche oxyacétylène	193
3.1	Problématique et objectifs	194
3.2	La modélisation des transferts thermiques	196
3.3	Modèle avec condition de flux imposé - Base de fonctions gaussiennes	199
3.3.1	Analyse des sensibilités	200
3.4	Modèle avec condition de flux imposé - Base de fonctions rectangulaires	201
3.4.1	Analyse des sensibilités - Cas linéaire	202
3.4.2	Analyse des sensibilités - Cas non-linéaire	204

3.4.3	Résultats	205
3.5	Modèle avec facteur de forme	206
3.5.1	Sensibilités et réduction du modèle	206
3.5.2	Résultats	210
3.5.3	Synthèse	211
4	Conclusion	213
Références bibliographiques		217
4	Conception optimale d'expérience	219
1	Système étudié	219
1.1	Le dispositif	219
1.2	Solution du modèle	220
1.3	La solution du problème inverse	224
1.4	Influence des paramètres supposés connus	224
1.4.1	Le maximum de vraisemblance étendue	224
1.4.2	Les paramètres supposés connus et le maximum de vraisemblance	226
2	Conception optimale d'expérience	227
2.1	Le problème d'optimisation	227
2.2	Le paradoxe de la conception optimale d'expérience	227
2.3	Les critères d'optimalité standards	227
2.3.1	Critère « D-optimality »	228
2.3.2	Critère « E-optimality »	228
2.3.3	Critère « E'-optimality »	228
2.3.4	Critère « A-optimality »	229
2.3.5	Synthèses des critères	229
2.4	Le critère F	230
2.5	La conception optimale et la conception robuste	231
2.6	Cas du système monodimensionnel	232
2.7	Cas du système complet	236
3	Les métaheuristiques	238
3.1	Les heuristiques	239
3.2	Généralités sur les métaheuristiques	240
3.3	Optimisation par Essaims Particulaires (PSO)	242
3.4	Stratégies d'Evolution (ES)	243
3.5	La Recherche Aléatoire (RSA)	245
4	Mise en oeuvre des métaheuristiques	245
4.1	Comparer des métaheuristiques	246

4.1.1	Utilisation des quantiles	246
4.1.2	Comparaison relative	246
4.2	L'algorithme RSA : la référence des performances	247
4.3	Distribution des méthodes de gradient	248
4.4	Distribution du PSO	249
4.5	Distribution de l'ES	252
4.6	Comparaison des résultats	255
4.7	Le « meilleur » dispositif expérimental	258
5	Synthèse	258
Références bibliographiques		263
Conclusion générale et perspectives		267
Annexe		275
1	Valeurs numériques génériques des paramètres	276
2	Solution analytique monodimensionnelle	277
2.1	Mur soumis à un échelon de densité de flux	277
2.1.1	Le problème stationnaire	278
2.1.2	Le problème homogène	278
2.1.3	Solution analytique	281
2.1.4	Coefficients de sensibilité	281
2.2	Mur soumis à une excitation impulsionnelle	281
2.2.1	Solution analytique	281
2.2.2	Coefficients de sensibilité	282
2.3	Solution de l'équation transcendante	282
2.4	Mur isolé soumis à un échelon	285
2.5	Mur isolé soumis à un dirac	288
2.6	Mur semi-infini - Formulaire	288
3	Solution analytique tridimensionnelle	289
3.1	Utilisation des transformations intégrales	289
3.2	Forme spatiale de l'excitation thermique	291
3.2.1	Le flux uniforme	292
3.2.2	Le point	292
3.2.3	Le patch rectangulaire	292
3.2.4	Le spot cubique	293
3.3	Expression matricielle des harmoniques	293
3.3.1	Champ de température continu et discret	293
3.3.2	Orthogonalité de la base cosinus	294

	3.3.3	Première formulation	295
	3.3.4	Deuxième formulation	296
	3.4	Calcul de l'écart-type des harmoniques	297
	3.5	Modèle impulsionnel - Calcul des sensibilités	298
	3.6	Modèle échelon - Calcul des sensibilités	299
4		Méthode flash 3D - Quelques sources d'erreurs	301
	4.1	Approximation impulsionnelle de l'excitation thermique	301
		4.1.1 Etude de la différence	301
		4.1.2 Etude du rapport	303
		4.1.3 Synthèse	303
	4.2	Influence des conditions limites	303
	4.3	Approximation au premier ordre du logarithme	307
5		Estimateur ENH	310
	5.1	Inverse de la matrice de covariance	310
	5.2	Indépendance de la référence	311
		5.2.1 Aspects numériques	312
		5.2.2 Aspects expérimentaux	313
6		Estimation de l'émissivité	315
7		Filtrage des hautes fréquences par les caméras infrarouges	317
8		Les algorithmes PSO et ES appliqués à la fonction Rastrigin-2d	319
	8.1	La fonction test Rastrigin	319
	8.2	Application des Essaims Particulaires (PSO)	319
	8.3	Application des Stratégies d'Evolution (ES)	320
9		Estimation de densité de probabilité par les méthodes de noyau	322
	9.1	Les origines - les histogrammes	322
	9.2	La version élémentaire	323
	9.3	Généralités	323
	9.4	Approximations asymptotiques	326
	9.5	Conclusion	327
10		Modélisation 0D du remplissage d'une bouteille	328
	10.1	Modèle 0D	329
	10.2	Description des modèles de gaz considérés	330
		10.2.1 Cas du gaz parfait	330
		10.2.2 Cas du gaz de Van der Waals	330
		10.2.3 Cas du gaz réel	332
	10.3	Modélisation du remplissage	332
		10.3.1 Conditions de Laval - Débit massique de gaz	334
		10.3.2 Comparaison des conditions de Laval	339

10.3.3	Résolution numérique	343
10.4	Résultats	344
10.4.1	Remplissage à 50 bar	344
10.4.2	Remplissage à 350 bar	347
10.5	Synthèse	348
10.6	Supplément	350
10.6.1	Loi de Laplace	350
10.6.2	Vitesse du son dans un gaz de Van der Waals	350
10.6.3	Calcul des conditions au col avec un gaz de Van der Waals . . .	351
11	Régression de droite avec l'estimateur EMLE	352
	Références bibliographiques	355

Table des figures

1.1	Schéma de principe de l'estimation de paramètres	7
1.2	Données disponibles pour estimer \hat{a} et allure des estimateurs au voisinage de la solution	12
1.3	Compromis entre le biais et la variance. Exemple de situation où l'estimateur biaisé peut être préférable : ce que l'on perd en biais, on le gagne en variance.	13
1.4	Représentation d'un système	35
1.5	Les sources d'incertitudes dans les problèmes inverses	43
2.1	Méthode flash monodimensionnelle	79
2.2	Directions principales du tenseur des diffusivités	86
2.3	Schéma du modèle défini par le système d'équations.	87
2.4	Exemple de fonctions de forme et de leur transformée spatiale	90
2.5	Exemple de fonctions de base de la transformée 2D en cosinus	94
2.6	Evolution des premières harmoniques paires du champ de température en face arrière	97
2.7	Du détecteur infrarouge à la mesure de température	100
2.8	Loi de Planck et gamme de travail des caméras infrarouges	102
2.9	Phénomènes à l'origine du rayonnement reçu par le détecteur infrarouge . . .	103
2.10	Effet du détecteur infrarouge sur le champ de flux $\phi(x)$ incident sur les capteurs.	105
2.11	Atténuation des harmoniques de la scène thermique due au détecteur	107
2.12	Réponse de la caméra AGEMA 880SW à des fentes de tailles différentes . . .	109
2.13	Comparaison théorie-expérience des spectres fréquentiels obtenus avec l'AGEMA 880SW	110
2.14	Fonction de transfert de la caméra AGEMA 880SW	110
2.15	Comparaison entre la courbe d'étalonnage et sa linéarisation	113
2.16	Exemple d'observables simulés pour l'estimateur ERH	118

2.17	Erreur relative sur τ_x en fonction de Δt et des paramètres de l'expérience avec une méthode flash	123
2.18	Exemple d'observables simulés pour l'estimateur ENH	128
2.19	Evolution de la trace de la matrice d'information en fonction des harmoniques	137
2.20	Evolution de la trace, du conditionnement et de l'écart-type sur τ_x et τ_y en fonction du nombre d'harmoniques exploitées	138
2.21	Biais sur τ_x et τ_z généré par l'approximation linéaire de la loi d'étalonnage . .	142
2.22	Différentes parties du dispositif expérimental assurant l'excitation thermique de l'échantillon	149
2.23	Interface de contrôle du laser et logiciel d'export	150
2.24	Images aberrantes dans les instants qui suivent l'impulsion laser.	151
2.25	Différentes parties du dispositif expérimental assurant l'acquisition des données	151
3.1	Estimation des transferts thermiques à la surface d'un mur monodimensionnel	162
3.2	Modélisation 0D du remplissage d'une bouteille	165
3.3	Simulation numérique du remplissage d'une bouteille d'azote à 50 bar et à 300 bar	165
3.4	Schéma de la bouteille d'hydrogène	167
3.5	Echantillons à caractériser	168
3.6	Estimation des dimensions du champ de la caméra	169
3.7	Recadrage et export des mesures obtenues avec la caméra AGEMA	169
3.8	Sélection des harmoniques à utiliser pour l'estimation	171
3.9	Observables et résidus obtenus avec l'estimateur ENH sur un matériau polymère	172
3.10	Déformation du champ de niveau numérique du fait de la forte anisotropie du matériau composite	174
3.11	Diffusivités thermiques du composite dans le plan	175
3.12	Modélisation des transferts dans la paroi des bouteilles	177
3.13	Mur monodimensionnel vu comme un système entrées/sorties	179
3.14	Gain de la fonction de transfert $ \theta_p/\theta_{in} $ de la paroi de la bouteille	180
3.15	Evolution de la température au centre de la bouteille en fonction du temps et son contenu fréquentiel	182
3.16	Prolongement de T_{in} en une fonction impaire et effet de la troncature des fréquences	183
3.17	Estimation de la température de paroi interne à partir des mesures de température dans la paroi	186
3.18	Densité de flux de chaleur estimée au niveau des 4 thermocouples et conductance thermique.	188
3.19	Fonctions de base de type porte pour l'estimation de température et de densité de flux de chaleur	189

3.20	Estimation de T_{in} sur une base de fonctions portes par approche globale . . .	190
3.21	Fonctions de base de type triangle pour l'estimation de température et de densité de flux de chaleur	191
3.22	Estimation de T_{in} sur une base de fonctions triangulaires par approche globale	192
3.23	Comparaison entre la base des sinus avec $t_f = 230 s$ et la base SVD	193
3.24	Exemple de matériaux composites tissés	194
3.25	Exemples d'échantillons soumis à la torche oxyacétylène	194
3.26	Exemple de matériau dégradé après exposition à la torche oxyacétylène	195
3.27	Echantillon instrumenté et enceinte du dispositif	196
3.28	Positionnement des thermocouples et mesures de température	197
3.29	Schéma de l'échantillon avec ses conditions limites pour les deux modélisations des transferts thermiques avec la flamme	198
3.30	Observables, sorties du modèle et densité de flux obtenus pour un modèle avec condition de flux imposé paramétrée sur une base de fonctions gaussiennes. . .	201
3.31	Evolution des valeurs singulières normalisées de la matrice des sensibilités réduites avec une condition limite de flux imposé paramétrée par des fonctions portes	203
3.32	Les 4 premiers et derniers modes SVD de la matrice des sensibilités	203
3.33	Densité de flux utilisée pour le calcul des sensibilités aux paramètres de chaque maille pour différentes discrétisations et dans le cas du modèle non-linéaire. .	204
3.34	Evolution des valeurs singulières normalisées de la matrice des sensibilités réduites avec une condition limite de flux imposé paramétrée avec des fonctions portes.	205
3.35	Densité de flux de chaleur absorbée par la surface supérieure de l'échantillon en fonction de la paramétrisation	206
3.36	Solutions obtenues pour une condition limite modélisée avec une composante radiative et convective	207
3.37	Solution obtenue pour une condition limite avec uniquement la composante radiative	209
3.38	Les premiers modes (de V) de la base SVD de la fonction des facteurs de forme $C(x, y)$	211
3.39	Sorties du modèle et solution obtenue en utilisant 5 et 15 modes de la base SVD pour paramétrer $C(x, y)$	212
4.1	Schéma du système	220
4.2	Principe de la méthode des images	222
4.3	Champs de température dans l'échantillon.	223
4.4	Schéma du système simplifié	233

4.5	Evolution des critères d'optimalité et des écarts-types théoriques en fonction de la position du capteur.	235
4.6	Solutions obtenues après minimisation des critères D , E' , $F_{widetilde{\beta}}$ et FR_H .	237
4.7	Algorithme de gradient avec initialisation aléatoire.	239
4.8	3 principes des métaheuristiques	240
4.9	Pseudo code des Stratégies d'Evolution $(\lambda/\rho + \mu)$ -ES	244
4.10	Densité de probabilité et distribution cumulée du RSA	248
4.11	Centiles obtenus avec un algorithme de type gradient	249
4.12	Distribution des solutions fournies par le PSO en fonction du nombre d'évaluations n du critère $F_{\tilde{\beta}}$	251
4.13	Distribution des solutions fournies par l'ES en fonction du nombre d'évaluations n du critère $F_{\tilde{\beta}}$	254
4.14	Distribution des solutions fournies par l'ES avec un autre opérateur de remplacement	255
4.15	Densités de probabilité du PSO et RSA pour 3 valeurs de n	256
4.16	Positions des thermocouples obtenues avec les critères $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H	259
A.1	Mur monodimensionnel soumis à une densité de flux imposé et avec pertes latérales de chaleur.	277
A.2	Tracé des fonctions $\gamma_i(u)$ pour $H = 0.5$	283
A.3	Script MatLab qui retourne les n premières racines u_k	284
A.4	Les premières fonctions de la base $X_m = \cos(m \pi \frac{x}{l_x})$ ou $Y_n = \cos(n \pi \frac{y}{l_y})$	290
A.5	Evolution de l'erreur $f(u)$ et $g(u)$ en fonction de u sur la température en face avant lorsque l'on modélise une excitation par un dirac.	302
A.6	Principe de la méthode pour estimer les biais dus aux conditions limites. . . .	304
A.7	Evolution temporelle des fonctions $\omega_{m,n}$ et $\omega_{m,n}^e$	308
A.8	Exemple d'harmoniques expérimentales en face avant obtenues avec la caméra AGEMA 880SW	314
A.9	Estimation de l'émissivité par comparaison des niveaux numériques avec une peinture noire.	316
A.10	Fonction test Rastrigin en 1d et 2d	319
A.11	Minimisation de la fonction Rastrigin-2d avec le PSO	320
A.12	Minimisation de la fonction Rastrigin-2d avec l'ES	321
A.13	Représentation du modèle de la chaîne de remplissage	333
A.14	Détermination des conditions de Laval pour un gaz réel	338
A.15	Génération des tables $H_{PS}(P, s_0)$ et $CS_{PS}(P, s_0)$	338
A.16	Conditions de Laval pour différents modèles de gaz entre 1 et 100 bar	340
A.17	Conditions de Laval pour différents modèles de gaz entre 1 et 1000 bar	341

A.18	Comparaison des conditions de Laval pour l'azote et l'hydrogène	342
A.19	Schéma de principe de la simulation numérique	343
A.20	Simulation de remplissage à 50 <i>bar</i>	346
A.21	Simulation de remplissage à 350 <i>bar</i>	349
A.22	Comparaison des estimateurs MLE et EMLE	353

Liste des tableaux

1.1	Ecart-types estimés des estimateurs à partir d'un échantillon de $n_s = 1000$ estimations. L'écart-type théorique et la moyenne sont aussi présentés.	15
2.1	Ecart-types théoriques de la méthode flash avec la méthode MLE et pour les paramètres génériques	81
2.2	Ecart-types théoriques de la méthode flash avec le modèle étendu	83
2.3	Constantes de la loi de Planck et de la loi d'étalonnage	112
2.4	Influence de la prise en compte des covariances sur l'écart-type de τ_x	133
2.5	Ecart-types théoriques des estimations avec correction de synchronisation et correction d'offset	139
2.6	Ecart-types théoriques des estimations avec correction de synchronisation, correction d'offset et de dérive	140
2.7	Ecart-types théoriques des estimations avec toutes les corrections et la loi de calibration	145
2.8	Comparaison des estimateurs avec correction de synchronisation	147
3.1	Solution au problème d'estimation du matériau polymère	172
3.2	Variabilité de la solution en modifiant les paramètres d'entrée de l'algorithme	174
3.3	Valeurs des paramètres du modèle de transfert thermique dans les parois des bouteilles d'hydrogène	177
4.1	Valeurs des paramètres du modèle	223
4.2	Critères d'optimalité pour le dispositif proposé par Sawaf [1] et ceux obtenus avec les critères D , E' , $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H	238
4.3	Comparaison des algorithmes RSA, PSO, ES, GRAD	257

A.1	Valeurs génériques des paramètres thermophysiques et expérimentaux pour la méthode flash	276
A.2	Quelques expressions analytiques de la solution pour un mur monodimensionnel semi-infini soumis à diverses excitations	288
A.3	Ecart-type théorique des estimations en fonction de l'harmonique de référence	313
A.4	Grandeurs thermodynamiques critiques (température, pression, masse volumique) et valeurs des paramètres de l'équation d'état de Van der Waals.	331
A.5	Valeurs numériques des paramètres du remplissage à 50 <i>bar</i>	345
A.6	Valeurs numériques des paramètres thermodynamiques pour un remplissage à 350 <i>bar</i>	348

Nomenclature

Abréviations

PSO	Particle Swarm Optimization - Algorithme d'optimisation
ES	Evolution Strategy - Algorithme d'optimisation
RSA	Random Search Algorithm - Algorithme d'optimisation
GRAD	Algorithme d'optimisation de type gradient avec initialisation aléatoire
MLE	Maximum Likelihood Estimator - Estimateur
EMLE	Extended Maximum Likelihood Estimator - Estimateur
MAP	Maximum A Posteriori estimation - Estimateur
MSE	Mean Square Error - Moyenne des résidus au carré
RMS	Root Mean Square - Ecart-type des résidus
PDF	Probability density function - Densité de probabilité
CDF	Cumulative distribution function - Distribution de probabilité cumulée

Opérateurs

$E[\bullet]$	Espérance et moyenne
$\text{cov}(\bullet, \bullet)$	Covariance de deux variables aléatoires
$\sigma_{\bullet, \bullet}$	Idem
$\text{corr}(\bullet, \bullet)$	Corrélation de deux variables aléatoires
$\text{cov}(\bullet)$	Matrice de covariance d'un vecteur aléatoire
$\text{corr}(\bullet)$	Matrice de corrélation d'un vecteur aléatoire
$\text{var}(\bullet)$	Variance d'une variable aléatoire
σ_{\bullet}^2	Idem
$\text{std}(\bullet)$	Ecart-type d'une variable aléatoire
σ_{\bullet}	Idem
$\text{Im}(\bullet)$	Image d'une famille de vecteur
$\nabla \bullet$	Gradient d'une fonction
$\det(\bullet)$	Déterminant d'une matrice
$\text{trace}(\bullet)$	Trace d'une matrice
$\text{cond}(\bullet)$	Conditionnement d'une matrice symétrique définie positive
$\langle \bullet \bullet \rangle$	Produit scalaire classique sur les vecteurs
$\hat{\bullet}$	Transformée de Fourier d'une fonction
$\text{Re} \bullet$	Partie réelle d'un nombre complexe
$L_n(\bullet)$	La $n^{\text{ème}}$ ligne d'une matrice
$C_n(\bullet)$	La $n^{\text{ème}}$ colonne d'une matrice

Symboles latins

a, b	Paramètres du modèle linéaire $f(a, b)$
$a_{x/y/z}$	Diffusivité thermique dans une direction particulière
A_1	Critère d'optimalité A_1
A_2	Critère d'optimalité A_2
b	Effusivité thermique
$B_{m,n}(x, y)$	Base de fonctions utilisée pour projeter les champs de température
B_{cal}	Paramètre de calibration de la caméra infrarouge
$C(x, y)$	Fonction facteur de forme
c, c_1, c_2	Coefficients d'accélération des particules (algorithme PSO)
C	Correction sur la température initiale
$C_{m,n}$	Correction sur les harmoniques initiales
$C_{A,n}(y)$	CDF de l'algorithme A après n tirages aléatoires
$D_{m,n}$	Correction de dérive linéaire des harmoniques
$D_{A,n}(y)$	PDF de l'algorithme A après n tirages aléatoires
D	Critère d'optimalité D
d_x, d_y	Nombre de pixels par millimètre suivant x et y
e_Y	Vecteur des erreurs aléatoires sur les observables Y^*
e_β	Vecteur des erreurs aléatoires sur les paramètres β
e_γ	Vecteur des erreurs aléatoires sur les paramètres γ
e	Épaisseur des parois de la bouteille
$E_{m,n}$	Valeur limite adiabatique d'une harmonique
E	Critère d'optimalité E
E'	Critère d'optimalité E'
f_k	Fréquence d'oscillation de la fonction de base $Z_k(t)$
f	Fréquence
F_{cal}	Paramètre de calibration de la caméra infrarouge
F_β	Critère d'optimalité standard construit sur la solution β
FR_H	Critère d'optimalité robuste construit sur l'ensemble des solutions H
$Fo_{x/y}$	Nombre de Fourier suivant x ou y
H	Matrice de projection, appelée « Hat Matrix »
H	Ensemble des solutions, des scénarios possibles pour la conception robuste d'expérience
H	Nombre de Biot
h	Coefficient d'échange
h_{ext}	Coefficient d'échange externe à la bouteille
\mathbf{I}	Matrice identité

$L(\beta)$	Fonction de vraisemblance
l_x, l_y, l_z	Dimensions d'un échantillon
M^*	Vecteur des mesures (signaux électriques)
N_x, N_y	Nombre de pixels de l'image thermique
N	Nombre de particules (algorithme PSO)
p_i, t_i	Position et instant de la mesure ou de l'observable Y_i
p	Densité de puissance, de flux de chaleur
P	Puissance, flux de chaleur
$P(\beta)$	Fonction de log-vraisemblance
$p(\bullet)$	Probabilité ou densité de probabilité
p	Variable de Laplace
$P_{m,n}$	Vitesse d'accroissement limite adiabatique d'une harmonique
Q	Matrice de covariance inverse des paramètres χ
q	Densité d'énergie
Q	Quantité d'énergie
r	Vecteur des résidus
$r(\alpha_m, \beta_n)$	Fonction de forme du spot laser
$R_{m,n}$	Matrice de forme du spot laser
R_{cal}	Paramètre de calibration de la caméra infrarouge
S_\bullet	Matrice des sensibilités réduites par rapport à \bullet
$tv_{m,n}$	Durée de vie d'une harmonique
t_0	Correction sur l'instant initial
t_f	Instant final de l'estimation de condition limite
$T_0(x)$	Température initiale
T	Température (fonction ou vecteur)
T_{ext}	Température ambiante externe à la bouteille
T_{lim}	Température limite adiabatique
T	Période d'une fonction périodique
T_{obj}	Température de l'objet observée par la caméra infrarouge
T_{amb}	Température de l'environnement
$T_{in}(t)$	Température de paroi interne de la bouteille
$T_{in,k}(t)$	Température de paroi interne de la bouteille au niveau du thermocouple i
$T_{out}(t)$	Température de paroi externe de la bouteille
$T_p(t)$	Température à l'interface polymère/composite de la bouteille
$T_{fluide}(t)$	Température de référence du fluide dans la bouteille
T_f	Température de flamme équivalente à la torche
T_g	Température de référence du gaz
U, L	Vecteur des bornes inférieures et supérieures de β

u_k	Solutions de l'équation transcendante
V_m	Niveau numérique mesurée par la caméra infrarouge
$V(T)$	Niveau numérique mesurée correspondant à un corps noir à température T
V	Type de voisinage (algorithme PSO)
W	Matrice de covariance inverse de Y^* ($W = \text{cov}(Y^*)^{-1}$)
x_i	Abscisse du centre des pixels d'une image thermique
x_{TCi}	Abscisse du thermocouple i
X_\bullet	Matrice des sensibilités aux paramètres indiqués par \bullet
X	Matrice des sensibilités aux paramètres β
$X_m(x)$	Base de fonctions suivant x et indicées sur m
y_{TCi}	Ordonnée du thermocouple j
$Y_n(y)$	Base de fonctions suivant y et indicées sur n
Y^*	Vecteur des observables (dim. m) (calculés à partir des mesures) (variable aléatoire ou réalisation suivant le contexte)
Y	Vecteur des sorties du modèle (dim. m)
$Y_{m,n}(t)$	Observable associé (dépend de l'estimateur) à l'harmonique $\theta_{m,n}$
$Z_k(z)$	Base de fonctions suivant z et indicées sur k

Symboles grecs

α_m, β_n	Pulsations de l'harmonique d'indice (m, n)
$\alpha_{A,x}$	x -Quantile (de l'algorithme A si spécifié)
$\hat{\beta}$	Vecteur contenant les paramètres estimés
$\dot{\beta}$	Vecteur contenant les valeurs exactes de β
$\tilde{\beta}$	(1) Vecteur des paramètres a priori
$\tilde{\beta}$	(2) Vecteur des valeurs vraisemblables de β pour la conception optimale ou l'analyse des sensibilités dans le cas non-linéaire
β_{cal}	Vecteur contenant les paramètres de calibration R_{cal} et B_{cal}
β	Vecteur des paramètres inconnus (dim. n_β) (estimation de paramètres ou estimation de conditions limites)
γ	Vecteur des paramètres supposés connus
$\delta(i)$	Symbole de Kronecker
$\delta(x)$	Fonction de Dirac
Δ_x, Δ_y	Dimensions des pixels
Δ_i	Ecart de temps entre deux instants t_1^i et t_2^i
Δt_{porte}	Largeur d'une fonction porte
Δt_{tri}	Largeur de la base d'une fonction triangle

ϵ_{obj}	Emissivité de l'objet
η	Vecteur des paramètres inconnus dans la base SVD
η	Amplitude de la $i^{\text{ème}}$ fonction gaussienne de la base
$\theta_{m,n}$	Harmonique (coefficient de Fourier) associée à la fréquence (m, n)
$\theta_{m,n}^*$	Harmonique expérimentale
$\theta_{\bullet}(p)$	Transformée de Laplace de $T_{\bullet}(t)$
λ	(1) Valeurs propres d'une matrice
$\lambda_{x/y/z}$	(2) Conductivité thermique dans une direction particulière
λ	Nombre d'enfants générés à chaque génération (algorithme ES)
μ	Taille de la population (algorithme ES)
Π_{Δ}	Fonction porte de largeur Δ centrée sur l'origine
ρC	Capacité thermique volumique
ρ	Nombre de parents pour générer un enfant (algorithme ES)
σ_m	Ecart-type du bruit de mesure
$\sigma_{m,n}$	Ecart-type de l'harmonique $\theta_{m,n}$
$\sigma_{p,q}$	Ecart-type de l'harmonique de référence $\theta_{p,q}$
$\sigma_{x,TCi}$	Ecart-type, erreur de positionnement suivant x du thermocouple i
$\sigma_{y,TCi}$	Ecart-type, erreur de positionnement suivant y du thermocouple i
σ	Constante de Stefan-Boltzman
σ	Intensité de la mutation (algorithme ES)
σ_i	Ecart-type de la $i^{\text{ème}}$ fonction gaussienne de la base
$\tau_{x/y/z}$	L'inverse du temps caractéristique de diffusion selon une direction
ϕ	Densité de flux de chaleur
$\phi_{\bullet}(p)$	Transformée de Laplace de $\phi_{\bullet}(t)$
$\phi_{in,k}$	Densité de flux transféré à la paroi interne de la bouteille au niveau de thermocouple i
χ	Sous-ensemble de γ contenant les paramètres dont on spécifie une valeur a priori
ω	Inertie des particules (algorithme PSO)
ω	Valeurs singulières

Notations et indices

III_{nT}	Peigne de Dirac de période T
m	Nombre d'observables
(m, n)	Indices d'une harmonique
(p, q)	Indices de l'harmonique de référence
(m_i, n_i)	Indices de harmonique correspond au $i^{\text{ème}}$ observable
n_s	Nombre de réalisation d'une expérience aléatoire
n_x, n_y	Nombres de mailles suivant x et y
n_β	Nombre de paramètres inconnus (dim. de $\beta, \dot{\beta}, \hat{\beta}, \tilde{\beta}$)
$\tilde{\bullet}$	Valeur a priori ou valeur vraisemblable
\bullet	Valeur exacte
σ_{\bullet}^{ext}	Ecart-type étendu en prenant en compte l'incertitude sur γ
$\bullet_{c/p}$	Grandeur se référant au composite ou au polymère d'une bouteille
\bullet_C	Relatif à la fonction facteur de forme $C(x, y)$
\bullet_h	Relatif à la fonction d'échange $h(x, y)$

Introduction générale

L'énergie n'est ni propre, ni sale, bien au contraire. Elle est la source et le moyen de toute transformation du monde physique. La question de l'énergie (source, transport et utilisation) prend de plus en plus d'importance actuellement étant donnée la demande continuellement croissante de ces derniers siècles. Aussi, la découverte, ou à défaut, la recherche de moyens de substitution aux énergies fossiles est centrale.

L'hydrogène est un des vecteurs d'énergie qui connaîtra peut être un essor important à l'avenir. Bien qu'il présente certaines propriétés physiques le rendant attrayant, il n'est toujours qu'un vecteur. Cela signifie qu'il faut le fabriquer en consommant de l'énergie, contrairement aux énergies fossiles où l'homme n'a qu'à se servir.

Le contexte

Cette thèse intervient dans le cadre d'un projet national appelé H2E (Horizon Hydrogène Energie) porté par Air Liquide¹ et soutenu aujourd'hui par l'organisme OSEO. Cet organisme est un établissement public sous la tutelle du ministère de l'économie, de l'industrie et de l'emploi ainsi que du ministère en charge de la recherche et de l'enseignement supérieur. Il a pour mission de promouvoir et de soutenir le développement industriel par l'innovation technologique. OSEO a remplacé depuis le 1er Janvier 2008 l'AI (Agence de l'Innovation Industrielle). C'est dans ce cadre que le projet H2E, démarré en 2008 et qui devrait s'achever en 2015. Le projet H2E regroupe quinzaine de partenaires industriels et académiques dont le Laboratoire d'Etude Thermique (LET), qui a fusionné le 1^{er} janvier 2010 avec d'autres laboratoires pour former l'institut P' de Poitiers. Il fait dorénavant partie du département *Fluides Thermique*

1. Fondé en 1902, Air liquide est un groupe industriel français aujourd'hui d'envergure internationale, spécialiste des gaz industriels et médicaux. Il est présent dans 75 pays du monde et compte aujourd'hui environ 40000 salariés dans plus de 130 filiales. Il est spécialisé dans la production/séparation et l'approvisionnement de nombreux gaz (oxygène, hydrogène, azote, argon,...) aux applications très diverses.

Combustion (FTC).

L'objectif du projet H2E est de mettre en place une chaîne logistique complète de l'hydrogène allant de sa production à son utilisation en passant par son stockage et sa distribution. Ces deux derniers aspects mettent en oeuvre différentes technologies suivant les besoins. Utiliser l'hydrogène comme vecteur d'énergie nécessite le développement de systèmes de stockage. Le sous-programme d'H2E dans lequel on intervient, se consacre entre autre au stockage dans des bouteilles haute pression.

Les objectifs

Dans ce projet, le laboratoire a pour objectif d'étudier les transferts thermiques dans les parois des bouteilles d'hydrogène haute pression. L'analyse de ces transferts prend son importance dans la phase de remplissage ou de vidange des bouteilles. Les gaz ont en effet la fâcheuse habitude de chauffer lorsqu'on les comprime et de se refroidir lorsqu'on les détend. En pratique, la température du gaz lors d'un remplissage rapide avoisine la centaine de degrés Celsius ce qui soumet les matériaux des parois à des gradients thermiques et donc à des contraintes thermo-mécaniques.

Un des objectifs est donc de déterminer les gradients thermiques dans les parois des bouteilles pour être ensuite pris en compte dans les essais de fatigue thermomécanique. Ces essais font intervenir le département *Physique et Mécanique des Matériaux* (PMM) de l'institut P' et font l'objet d'une autre thèse.

Par ailleurs, les transferts thermiques fluide-paroi pourraient, hypothétiquement, être caractérisés au moyen de coefficients d'échange. Cela permettrait par exemple de pouvoir estimer la température des parois pendant un remplissage connaissant la température du gaz, ou à l'inverse estimer la température du gaz à partir de la température dans la paroi.

Quel que soit l'objectif, l'étude des transferts thermiques passe par l'utilisation de modèles qui font intervenir les propriétés thermophysiques des matériaux constitutifs de la bouteille. La connaissance de ces paramètres est donc essentielle.

Ces travaux sont réalisés en particulier avec deux partenaires, parmi tous ceux qui interviennent dans le projet H2E. Il s'agit d'Air Liquide, par l'intermédiaire du CRCD², pour tout ce qui concerne le remplissage des bouteilles d'hydrogène, ainsi que d'EADS Composite Aquitaine³ qui fabrique ces bouteilles et nous fournit les échantillons des matériaux utilisés.

2. Centre de Recherche Claude Delorme

3. Créé en 1984, EADS Composite Aquitaine, filiale d'EADS SOGERMA, située dans la région bordelaise, est

Plan du rapport

Les différents points évoqués dans la section précédente s'inscrivent dans le cadre plus général des problèmes inverses en thermique. L'estimation des propriétés thermophysiques des matériaux passe par la résolution d'un problème inverse d'estimation de paramètres. Quant à l'estimation du profil de température dans les parois de la bouteille, il s'agit d'estimer les conditions limites thermique fluide-paroi pour pouvoir ensuite calculer la température en tout point et à tout instant dans la paroi.

Dans le chapitre 1, on présente un certain nombre d'outils numériques fréquemment utilisés dans les problèmes inverses en thermique. On y aborde notamment :

- la notion de problème direct et de problème inverse
- la notion de mesures et d'observables
- la notion d'estimateurs, qui permet d'estimer des paramètres à partir de mesures, ainsi que certaines notions de statistiques.
- des algorithmes d'optimisation adaptés aux problèmes d'estimation de paramètres
- les sources d'erreurs, aléatoires ou systématiques, qui peuvent altérer les estimations
- la notion de problèmes mal-posés, comment les diagnostiquer à travers l'analyse des sensibilités, et comment y remédier avec des méthodes de régularisation.

Ces outils font partie d'un chapitre distinct étant donné le fait que les trois chapitres suivants font appels à eux.

Le chapitre 2 est consacré au problème inverse d'estimation de paramètres thermophysiques. On y développe la méthode flash 3D, qui est la méthode d'estimation utilisée pour estimer les diffusivités thermiques d'un matériau anisotrope. On présente en particulier :

- la méthode flash classique, monodimensionnelle, et quelques unes de ses évolutions
- la variante 3D apparue dans les années 1990 pour les matériaux qui présentent un comportement thermique anisotrope
- la thermographie infrarouge qui est l'appareil de mesure indispensable à la méthode flash 3D
- différents estimateurs qui permettent, à partir des mesures, d'estimer plus ou moins précisément les diffusivités thermiques
- le dispositif expérimental réalisé au laboratoire.

spécialisée dans l'étude, le développement et la mise en oeuvre de matériaux composites. Les premiers réservoirs bobinés pour le stockage de gaz sous pression sont réalisés à partir de 1992.

Dans le chapitre 3, c'est le problème inverse d'estimation de conditions limites dont il est question. Deux applications sont présentées :

- La première s'inscrit dans le cadre du projet H2E où l'on estime la température de la paroi interne de la bouteille d'hydrogène à partir de thermocouples placés dans cette même paroi.
- La seconde s'inscrit dans le cadre d'un échange avec le département *Physique et Mécanique des Matériaux* de P', au sujet de la résistance des matériaux composites à une flamme oxygène/acétylène.

Le chapitre 4 est dédié à la conception optimale d'expérience, qui peut être vue comme un outil, permettant d'aider « l'expérimentateur » à réaliser au mieux un dispositif expérimental pour un objectif donné. Les points abordés sont :

- la présentation du dispositif que l'on se propose d'optimiser
- la notion de critère d'optimalité
- la conception optimale et la conception robuste d'expérience
- les algorithmes d'optimisation, ou métaheuristiques, c'est à dire des algorithmes stochastiques qui permettent de résoudre le problème d'optimisation associé à la conception optimale
- la comparaison statistique des performances de quelques métaheuristiques dans le cas du dispositif étudié.

Chapitre 1

Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

Les méthodes inverses désignent un ensemble de méthodes permettant de résoudre un problème inverse. La notion de problème inverse est opposée à celle de problème direct. Un problème inverse consiste à déterminer les causes d'un phénomène observé alors qu'un problème direct détermine les effets à partir d'un ensemble de causes. A titre d'illustration, reprenons l'exemple présenté dans [1] : « on sait calculer la vitesse à un instant quelconque d'un point matériel de masse m soumis à une force connue si ses position et vitesse initiales sont données (c'est le problème direct). Un des problèmes inverses correspondant s'énonce ainsi : à partir de la mesure des positions (ou des vitesses) de ce point matériel, comment « remonter » à la force qui l'a mis en mouvement ? ».

Ce premier chapitre introduit la notion de problème inverse ainsi que différents outils utilisés en particulier dans les chapitres suivants. On aborde les points suivants :

- **La première partie** précise quelques points de terminologie à partir d'un exemple
- **La deuxième partie** présente la notion d'estimateur qui permet de faire le lien entre des mesures et un modèle en vue d'estimer des paramètres. On met en particulier l'accent sur le Maximum de Vraisemblance et la Maximum A Posteriori.
- La mise en oeuvre d'estimateurs conduit généralement à un problème de minimisation qui peut être résolu de manière explicite dans le cas linéaire ou avec des algorithmes d'optimisation dans le cas non-linéaire. Ces différents aspects font l'objet de **la troisième partie**.
- Les estimations sont sujettes à des erreurs aléatoires et systématiques. **La quatrième partie** présente ainsi certaines sources d'incertitude ainsi que leur effet sur la solution.
- **La cinquième partie** est consacrée à la notion de problème inverse mal posé et mal conditionné, ainsi qu'aux outils d'analyse des sensibilités et aux méthodes de régularisation.

1 Les problèmes inverses en thermique

1.1 Estimation de paramètres et de conditions limites

Il existe différents types de problème inverse en thermique ([2, p.7] et [3, p.36]), parmi lesquels :

- **Le problème d'estimation de paramètres** consiste à déterminer la valeur de différents paramètres physiques d'un système (ex : une conductivité thermique, un coefficient d'échange, une résistance thermique).
- **Le problème d'estimation de condition limite** consiste à déterminer une condition limite. Il s'agit par exemple de déterminer une condition limite de température imposée ou de densité de flux imposé.

Ces deux types de problème sont abordés dans ce rapport. Le chapitre 2 est dédié à l'estimation de la diffusivité thermique d'un matériau. Dans le chapitre 3, deux exemples de problème d'estimation de condition limite sont présentés.

L'estimation de paramètres consiste à estimer des paramètres scalaires alors que dans certaines situations, l'estimation de condition limite consiste à estimer une fonction inconnue de temps et/ou de l'espace. Cependant, en pratique, la fonction inconnue est paramétrée sur une base de fonctions. Les composantes de la fonction inconnue dans cette base constituent alors les paramètres à estimer. Ainsi, on se retrouve dans les deux cas à devoir estimer des paramètres. Les outils présentés dans ce chapitre s'appliquent indistinctement à ces deux types de problèmes inverses.

1.2 Mesures, observables, sorties et estimateurs

La figure (Fig.1.1) présente les grandes lignes de l'estimation de paramètres telle qu'elle est vue dans ce manuscrit. Par son objectif de remonter aux causes d'un phénomène observable et mesurable, les problèmes inverses font intervenir « côte à côte » un dispositif expérimental et un modèle de ce dispositif qui peut être numérique ou analytique.

Le dispositif expérimental (ou l'expérience) est doté de capteurs qui permettent de mesurer des grandeurs physiques à certaines positions et à certains instants. Pour cela, on utilise des appareils de mesure qui fournissent généralement en sortie un signal électrique, qui représente la grandeur physique à mesurer.

Le modèle, quant à lui, est construit sur des équations qui font intervenir des paramètres que l'on peut regrouper en deux¹ catégories :

1. Plus de 2 catégories sont parfois nécessaires, notamment en conception optimale d'expérience (Chap.4)

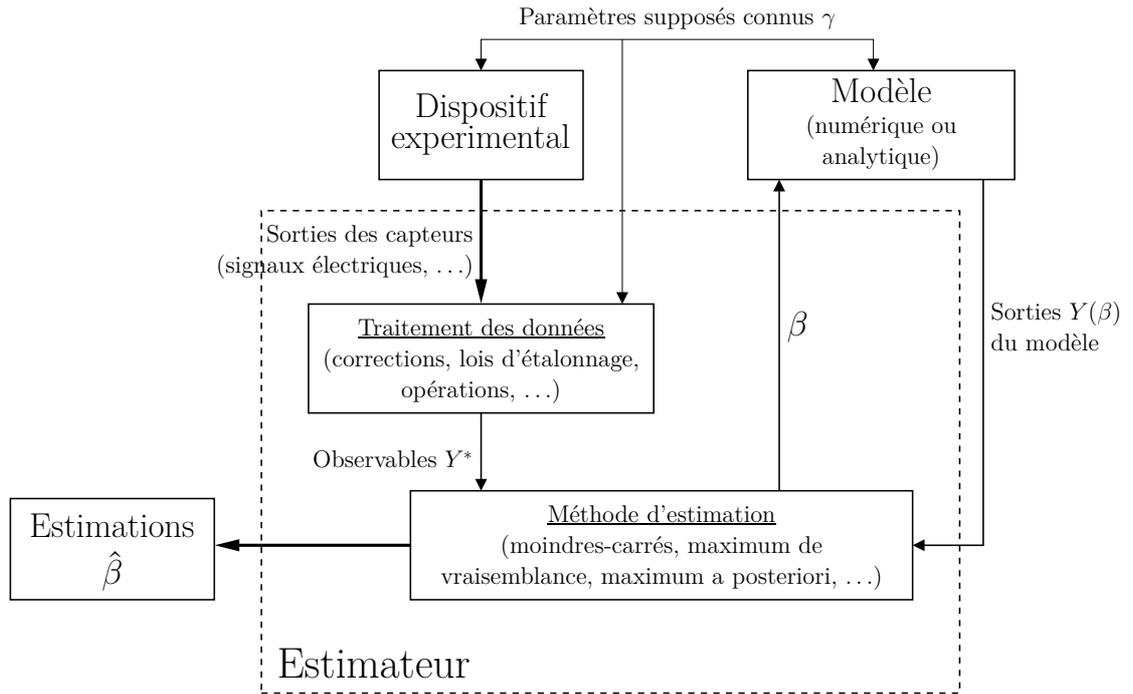


Figure 1.1 – Schéma de principe de l'estimation de paramètres

Le vecteur des paramètres connus γ : Ce vecteur regroupe tous les paramètres connus du modèle. Il s'agit par exemple des dimensions de l'échantillon, de la position d'un capteur, des paramètres des lois d'étalonnage, ... Cependant, comme ces paramètres ne sont généralement pas parfaitement connus, les paramètres de γ sont aussi qualifiés de **paramètres supposés connus**.

Le vecteur des paramètres inconnus β : Il s'agit des paramètres que l'on souhaite estimer à *partir* des mesures fournies par l'expérience.

Les **sorties du modèle** Y_i dépendent ainsi des paramètres β et γ ainsi que des variables explicatives, qui sont ici le temps et/ou l'espace. Les sorties sont regroupées dans un vecteur² noté $Y(\beta, \gamma)$.

L'estimation des paramètres inconnus β du modèle se fait en comparant les mesures issues de l'expérience et les données calculées par le modèle. La comparaison ne peut s'effectuer qu'avec des données correspondant physiquement à la même grandeur. Aussi, il peut être nécessaire d'appliquer des traitements aux mesures (signaux électriques) fournies par les capteurs pour rendre ces mesures compatibles avec les sorties du modèle. Plus généralement, il est possible d'appliquer aux mesures des opérations mathématiques plus complexes pour les rendre compatibles avec le modèle. A l'issue de ces opérations, on obtient des données compatibles avec les

². Dans tout ce manuscrit, un vecteur est implicitement un vecteur colonne.

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

sorties du modèle et que l'on appelle les **observables**. C'est ce terme qui reviendra de façon récurrente dans ce manuscrit.

Les observables sont notés Y_i^* et sont regroupés dans le vecteur Y^* . Les observables Y_i^* sont calculés en appliquant des fonctions f_i aux n mesures M_k^* . A chaque mesure correspond une position de mesure p_k et un instant de mesure t_k :

$$Y_i^* = f_i(M^*) \quad \text{avec} \quad M^* = \begin{bmatrix} M_1^*(p_1, t_1) \\ M_2^*(p_2, t_2) \\ \vdots \\ M_n^*(p_n, t_n) \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

Les dimensions du vecteur des observables Y^* et du vecteur des sorties Y sont nécessairement identiques. Le nombre d'éléments dans ces vecteurs est noté m . Ainsi :

$$Y^* = \begin{bmatrix} Y_1^* \\ Y_2^* \\ \vdots \\ Y_m^* \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad Y_{(\beta, \gamma)} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_m \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

Le nombre d'observables m n'est pas nécessairement égal au nombre de mesures n . Plusieurs mesures peuvent être utilisées pour calculer un unique observable.

L'estimation des paramètres β fait appel à un **estimateur**. L'estimateur désigne l'ensemble de la procédure utilisée pour estimer β à partir des mesures $M_k^*(p_k, t_k)$ fournies par les capteurs et du modèle $Y(\beta, \gamma)$. Plus formellement, l'estimateur de β est une variable aléatoire notée $\hat{\theta}_\gamma(M^*)$ qui est fonction des variables aléatoires M_k^* et des valeurs des paramètres supposés connus γ . On souhaite de plus que l'espérance mathématique de $\hat{\theta}(M^*, \gamma)$ soit « proche » de la valeur exacte $\dot{\beta}$ (déterministe) des paramètres inconnus β :

$$E \left[\hat{\beta}_\gamma(M^*) \right] \approx \dot{\beta} \quad (1.3)$$

Dans la suite, on confond l'estimateur $\hat{\beta}_\gamma(M^*)$ et les valeurs estimées, que l'on note également $\hat{\beta}$. Ces valeurs estimées sont calculées en appliquant l'estimateur aux réalisations des variables aléatoires M_k^* . Pour simplifier les notations, ces réalisations (c'est à dire les mesures) sont également notées M_k^* . On confond ainsi réalisation et variable aléatoire. De même, suivant le contexte, le vecteur des observables Y^* désigne une variable aléatoire (ici un vecteur aléatoire) ou une réalisation.

On verra dans l'exemple introductif de ce chapitre (§2 p10) et dans le chapitre 2 (§5 p114) que l'estimateur $\hat{\beta}_\gamma(M^*)$ n'est pas unique : il existe plusieurs façons de traiter les mesures M^* pour estimer β , et toutes ne sont pas aussi « performantes ».

Remarque sur le vecteur des observables Y^*

Dans ce rapport, les mesures et les observables sont placés dans un unique vecteur colonne et indicés par un unique paramètre. Il est également courant de distinguer l'indice temporelle et l'indice du capteur, auquel cas, l'expression (Eq.1.5) fait intervenir une double somme, sur le temps, et sur les capteurs. Cependant, cette décomposition ne s'avère ici pas nécessaire et n'est pas utilisée.

Exemple

Lorsque les sorties $Y_i(\beta, \gamma)$ du modèle direct correspondent à des températures, les fonctions $f_i(M)$ de l'expression (Eq.1.1) correspondent à la loi d'étalonnage qui permet de convertir la mesure $M_i(p_i, t_i)$, c'est à dire par exemple la tension électrique délivrée par un thermocouple, en une température. Cette température constitue l'observable Y_i^* qui ne dépend ici que de la mesure M_i . Soit $V(U)$ la loi d'étalonnage (tension-température) du thermocouple en question, on a :

$$Y_i^* = f_i(M) = V(M_i).$$

1.3 Problème direct et problème inverse

La notion de *problème direct* et de *problème inverse* se réfère au modèle (Fig.1.1). Les sorties $Y(\beta, \gamma)$ du modèle peuvent se voir comme les conséquences d'une cause, qui correspondrait ici aux paramètres β . Le problème inverse consiste à déterminer la cause à partir de l'observation Y^* des conséquences. En résumé :

Problème direct : Calculer $Y(\beta, \gamma)$ pour β et γ donnés.

Problème inverse : Calculer β pour Y^* et γ donnés.

La notion *d'entrées* (ou de données) et de *sorties*, de paramètres d'entrée et de sortie, est ambiguë puisque cela dépend si on fait référence au problème direct ou au problème inverse. Pour le problème direct, les paramètres β font partie des paramètres d'entrée, alors que pour le problème inverse, il s'agit des résultats.

Une des difficultés de l'estimation de paramètres vient du fait qu'on ne dispose pas de $Y(\beta, \gamma)$ pour estimer β mais uniquement d'une unique réalisation des variables aléatoires Y^* (les observables) qui se trouvent être bruités. En effet, une mesure physique M_k^* est toujours entachée d'un bruit, c'est à dire d'une perturbation « imprévisible » sur la valeur de la grandeur en question. Or si les mesures M^* sont bruitées, il en est de même pour les observables Y^* qui en dépendent. Le bruit e_i sur la valeur « exacte » des observables $\overline{Y_i^*}$ est généralement modélisé

en considérant qu'il suit une loi normale :

$$Y_i^* = \mathbb{E}[Y_i^*] + e_i \quad (1.4)$$

Avec $\mathbb{E}[Y_i^*]$ l'espérance de Y_i^* (la moyenne de réalisation).

Or si les observables sont des variables aléatoires, alors l'estimation $\hat{\beta}$ l'est également. On peut alors lui associer une densité de probabilité, puis une moyenne, un écart-type, ... L'objectif de l'estimateur est alors d'estimer $\hat{\beta}$ le plus précisément possible à partir de l'unique réalisation Y^* de la variable aléatoire associée aux observables. D'une réalisation à l'autre, l'estimation $\hat{\beta}$ change. Un bon estimateur est un estimateur pour lequel l'écart-type de $\hat{\beta}$ est faible.

2 Les méthodes d'estimation

Dans ce rapport, les estimateurs diffèrent généralement par la définition des observables Y^* . Cependant, pour une même définition de Y^* , on peut aussi utiliser différentes **méthodes d'estimation**. Alors que l'estimateur s'applique aux mesures M^* , la méthode d'estimation s'applique (dans ce rapport) aux observables Y^* . Elle définit la façon de comparer les sorties du modèle Y et les observables Y^* . En ce sens, la méthode d'estimation fait partie intégrante d'un estimateur. Elle permet de construire des estimateurs. Par exemple, la méthode des moindres-carrés est une méthode d'estimation qui consiste à minimiser l'écart quadratique $J(\beta)$ entre les sorties $Y(\beta)$ et les observables Y^* . L'estimation $\hat{\beta}$ correspond alors aux paramètres β qui minimisent $J(\beta)$, ce que l'on note habituellement :

$$J(\beta) = \sum_{i=1}^m (Y_i^* - Y_{i(\beta)})^2 \quad \implies \quad \hat{\beta} = \arg \min_{\beta} [J(\beta)] \quad (1.5)$$

2.1 Introduction

Pour un même problème d'estimation de paramètres, il n'y a pas unicité de l'estimateur et en particulier de *la méthode d'estimation* utilisée pour associer les observables et les sorties du modèle. Cela est illustré ici dans le cadre d'un problème de régression linéaire où l'objectif est de déterminer le coefficient directeur a d'une fonction linéaire $f(a)$:

$$f(x, a) = a x \quad (1.6)$$

Pour estimer a , on dispose d'un ensemble d'observables Y_i^* symbolisés par des croix sur la figure (Fig.1.2.a). Du fait de la présence d'un bruit, il n'est pas possible de trouver une valeur de a tel que les sorties du modèle $Y_i = f(x_i, a)$ soient égales aux observables. Aussi, il n'existe

pas de solution au sens classique, mais uniquement par rapport à une méthode d'estimation donnée. On propose ici 6 méthodes permettant d'estimer la valeur exacte \hat{a} :

1. trouver $\hat{a}^{(1)}$ tel que l'écart maximal $\max(|Y_i^* - Y_i|)$ entre les sorties du modèle et les mesures soit le plus petit possible
2. trouver $\hat{a}^{(2)}$ tel que la somme des écarts $|Y_i^* - Y_i|$ entre le modèle et l'expérience soit la plus petite possible
3. trouver $\hat{a}^{(3)}$ tel que la somme des écarts au carré³ $(Y_i^* - Y_i)^2$ soit la plus petite possible
4. trouver $\hat{a}^{(4)}$ tel que la médiane des écarts au carré soit la plus petite possible
5. calculer $\hat{a}^{(5)}$ en calculant la pente avec les deux points extrêmes
6. calculer $\hat{a}^{(6)}$ en calculant la pente en faisant la moyenne des pentes calculées à partir des paires de points statistiquement indépendantes $(x_1, x_n), (x_2, x_{n-1}), (x_3, x_{n-2}), \dots$

Pour les 4 premières méthodes d'estimation, il faut minimiser une fonction objectif, notée $J^{(i)}$, ce qui fait appel à un algorithme d'optimisation. Les fonctions objectifs $J^{(i)}$ sont définies par :

$$J^{(1)}(a) = \max_{1 \leq i \leq m} |Y_i^* - Y_i| \quad \text{Ecart maximum (Norme } L_\infty) \quad (1.7)$$

$$J^{(2)}(a) = \sum_{i=1}^m |Y_i^* - Y_i| \quad \text{Somme des écarts (Norme } L_1) \quad (1.8)$$

$$J^{(3)}(a) = \sum_{i=1}^m (Y_i^* - Y_i)^2 \quad \text{Somme des écarts quadratiques (Norme } L_2) \quad (1.9)$$

$$J^{(4)}(a) = \text{med} (Y_i^* - Y_i)^2 \quad \text{Médiane des écarts quadratiques} \quad (1.10)$$

Les observables Y_i^* ont été obtenus avec le modèle lui même en ajoutant un bruit gaussien d'écart-type $\sigma = 2$ aux sorties calculées avec $a = 2$. Les fonctions $J^{(i)}(a)$, associées aux 4 méthodes présentées ci-dessus, sont tracées sur la figure (Fig.1.2.b) pour $a \in [1; 3]$. Pour améliorer la lisibilité, chaque fonction a été multipliée par une constante. Les solutions $\hat{a}^{(i)}$ correspondent au minimum de chaque courbe. Les résultats sont présentés dans le tableau suivant :

Méthode	Estimation ($\hat{a} = 2$)	Ecart (%)
$J^{(1)}(a)$	$\hat{a} = 1,88$	6,0 %
$J^{(2)}(a)$	$\hat{a} = 2,03$	1,5 %
$J^{(3)}(a)$	$\hat{a} = 1,96$	2,0 %
$J^{(4)}(a)$	$\hat{a} = 2,26$	13 %
$J^{(5)}(a)$	$\hat{a} = 2,40$	20 %
$J^{(6)}(a)$	$\hat{a} = 2,01$	0,5 %

3. Ou à n'importe quelle puissance. On obtient la méthode des moindres carrés (en anglais « least squares method ») avec un exposant égal à 2.

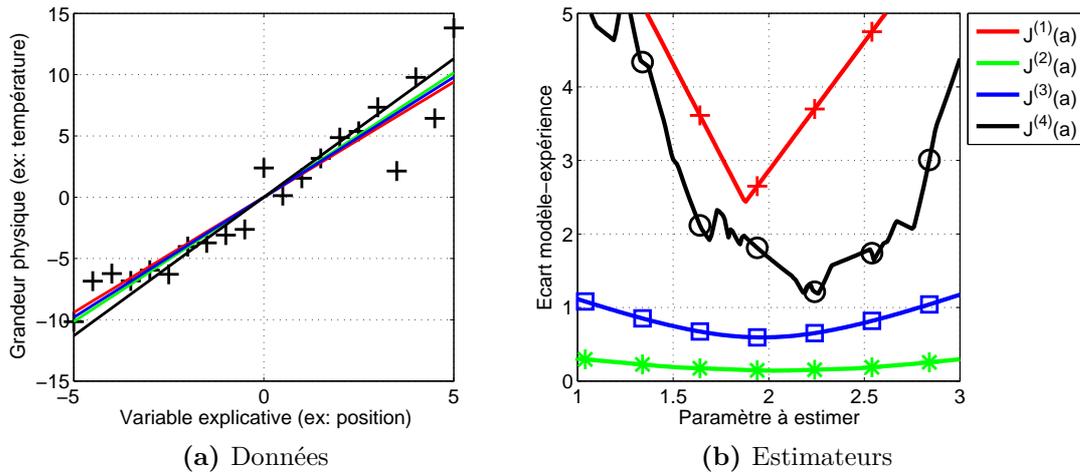


Figure 1.2 – Données disponibles pour estimer a et allure des estimateurs au voisinage de la solution. La courbe rouge « + » correspond à l'estimateur $J^{(1)}$ construit à partir de l'écart maximum, la courbe noir « o » à l'estimateur $J^{(4)}$ construit sur la médiane, la courbe bleu « □ » à l'estimateur $J^{(3)}$ basé sur les écarts quadratiques et la courbe verte « * » correspond à l'estimateur $J^{(2)}$ basé sur la somme des écarts absolus.

Les valeurs obtenues avec les méthodes 4 et 5 sont manifestement plus éloignées de la valeur exacte $\hat{a} = 2$ que les autres. Cependant, comme Y_i^* est aléatoire, ces résultats ne permettent pas de reconnaître le « meilleur » estimateur. Cependant, on s'attend à ce que certains estimateurs soient moins performants. Par exemple, l'estimateur $J^{(5)}(a)$ n'exploite que 2 points de mesure et ignore les 18 points restants. Dans le même esprit, l'estimateur $J^{(6)}(a)$ n'exploite pas tous les couples de points possibles. Une partie de « l'information » disponible dans les mesures n'est donc pas exploitée.

2.2 La qualité d'un estimateur

La qualité d'un estimateur, c'est à dire la qualité de ses estimations, peut se mesurer notamment avec son *biais*, sa *variance* et/ou sa *robustesse*.

2.2.1 La robustesse d'un estimateur

Un estimateur robuste est un estimateur qui n'est pas (trop) sensible à la présence de données aberrantes. Une seule donnée aberrante peut parfois complètement perturber le résultat de l'estimateur. Les estimateurs robustes sont capables de les repérer et de les exclure du processus d'estimation. L'estimateur $J^{(4)}$, en anglais « least median of squares [4] » du fait de l'utilisation de la médiane, est un estimateur très robuste qui tolère jusqu'à 50% de données aberrantes. C'est d'ailleurs le plus robuste possible car au delà, on n'est plus capable de distinguer les « bonnes » mesures des « mauvaises ». L'estimateur $J^{(2)}$ peut aussi être considéré comme un

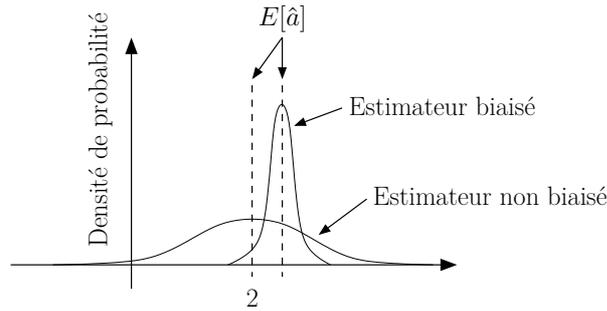


Figure 1.3 – Compromis entre le biais et la variance. Exemple de situation où l'estimateur biaisé peut être préférable : ce que l'on perd en biais, on le gagne en variance.

estimateur robuste [5, p.30], car le « poids » d'une mesure aberrante est simplement proportionnel à l'écart, et non proportionnel à son carré, comme c'est le cas avec l'estimateur $J^{(3)}$.

Cependant, dans les problèmes traités ici, la robustesse n'est pas un critère pertinent car les observables n'ont pas de point aberrant, c'est à dire de points qui s'écartent anormalement de la distribution de probabilité utilisée pour modéliser le bruit.

2.2.2 Le biais

Un estimateur est dit biaisé lorsque son espérance est différente de la valeur exacte $\hat{\beta}$ que l'on cherche à estimer. Si l'estimateur est non biaisé, cela signifie qu'en moyenne, il ne se trompe pas :

$$\text{Biais}(\hat{\beta}) = E[\hat{\beta}] - \hat{\beta} \quad (1.11)$$

En pratique, le biais entre la valeur moyenne et la valeur exacte n'est généralement pas connu sinon on pourrait définir un nouvel estimateur non biaisé puisqu'il suffirait de retrancher le biais à l'estimation.

Il n'est pas nécessaire d'utiliser systématiquement un estimateur non biaisé⁴. Il est parfois préférable d'utiliser un estimateur légèrement biaisé mais présentant un écart-type plus faible (Fig.1.3). Cette figure montre qu'avec l'estimateur non-biaisé, on peut obtenir des estimations très différentes de la valeur exacte, alors que l'estimateur biaisé sera en général plus proche de $\hat{a} = 2$.

Remarque sur l'origine du biais

Le biais dont il est ici question est celui généré par l'estimateur. En pratique, d'autres biais apparaissent à cause d'erreurs sur les données d'entrées, ou de biais sur les mesures ou encore à cause d'erreurs de modèle (§4 p41). Ce type d'erreur biaise l'estimation des paramètres, mais l'estimateur n'y est pour rien.

4. Voir à ce sujet la remarque de [6, p.67] : « ...the criterion of unbiasedness has caught the public imagination. This is probably because the word bias has certain unacceptable overtones. A statistic [estimator] that is biased seems to be something no one wants ».

2.2.3 La variance

La variance d'une variable aléatoire caractérise la dispersion de ses réalisations [1, 5]. Dans le cas des estimateurs, elle quantifie la dispersion des estimations autour de l'espérance de l'estimateur. On attend d'un bon estimateur qu'il ait une variance la plus faible possible de façon à ce que d'une série de données à l'autre, l'estimation $\hat{\beta}$ varie peu. Plus l'estimateur extrait d'information des observables, plus les écarts-types des estimations sont faibles.

Dans le cas plus général d'un estimateur $\hat{\beta}$, c'est à dire d'un vecteur aléatoire $\hat{\beta}$, on parle de *matrice de variance-covariance*. Cette matrice, notée $\text{cov}(\hat{\beta})$ et de dimension $n_\beta \times n_\beta$, est définie par :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \text{E} \left[(\hat{\beta} - \text{E} [\hat{\beta}]) (\hat{\beta} - \text{E} [\hat{\beta}])^T \right] = \begin{pmatrix} \text{var}(\hat{\beta}_1) & \text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) & \dots & \text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_{n_\beta}) \\ & \text{var}(\hat{\beta}_2) & \dots & \text{cov}(\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_{n_\beta}) \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{sym} & & & \text{var}(\hat{\beta}_{n_\beta}) \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

Les coefficients diagonaux de cette matrice sont les variances de chaque composante du vecteur $\hat{\beta}$. Les coefficients hors diagonaux sont les covariances. La covariance quantifie le niveau d'interdépendance entre deux variables aléatoires. Lorsque la covariance est élevée en valeur absolue, cela signifie que les deux variables suivent « souvent » les mêmes variations (qui peuvent être opposées) par rapport à leur moyenne respective. Lorsque la covariance est « faible », les deux variables ont alors des variations complètement découplées : les deux variables sont dites décorréelées. On peut aussi définir la matrice de variance-covariance normalisée dont les coefficients sont définis par :

$$\left(\text{cov}(\hat{\beta})_{\text{normalisée}} \right)_{i,j} = \frac{\text{cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j)}{\text{E} [\hat{\beta}_i] \text{E} [\hat{\beta}_j]} \quad (1.13)$$

Il existe également la matrice de corrélation :

$$\text{corr}(\hat{\beta}) = \begin{pmatrix} 1 & \text{corr}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) & \dots & \text{corr}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_{n_\beta}) \\ & 1 & \dots & \text{corr}(\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_{n_\beta}) \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{sym} & & & 1 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

avec $\left(\text{corr}(\hat{\beta}) \right)_{i,j} = \frac{\text{cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j)}{\sigma_{\hat{\beta}_i} \sigma_{\hat{\beta}_j}}$

La corrélation est une autre façon de comparer les variations de deux variables aléatoires scalaires $\hat{\beta}_1$ et $\hat{\beta}_2$. Il s'agit d'un scalaire égal à un facteur près à la covariance. Il présente ce-

pendant l'intérêt d'être adimensionné et prend ses valeurs uniquement dans $[-1; 1]$.

La variance et dans une moindre mesure, le biais, constituent deux propriétés importantes d'un estimateur. Le biais est peut être moins important car les estimateurs que l'on utilise généralement, ne sont pas ou peu biaisés comparés aux autres biais, générés par exemple par des erreurs sur les paramètres supposés connus.

2.2.4 Comparaison des 6 méthodes d'estimation

Pour estimer l'écart-type des 6 méthodes d'estimation, on peut générer par exemple $n_s = 1000$ vecteurs d'observables puis appliquer chaque méthode sur ces 1000 vecteurs. On obtient alors le tableau suivant :

Estimateur	Ecart-type	Ecart-type (théorique)
$J^{(1)}(a)$	0, 315	
$J^{(2)}(a)$	0, 180	
$J^{(3)}(a)$	● 0, 150	0, 144
$J^{(4)}(a)$	0, 289	
$J^{(5)}(a)$	0, 292	0, 283
$J^{(6)}(a)$	○ 0, 173	0, 163

Tableau 1.1 – Ecarts-types estimés des estimateurs à partir d'un échantillon de $n_s = 1000$ estimations. L'écart-type théorique et la moyenne sont aussi présentés.

Il apparaît clairement que l'estimateur avec l'écart-type minimal est l'estimateur $J^{(3)}$. D'après le théorème de Gauss-Markov⁵, c'est effectivement le « meilleur estimateur » non biaisé. Par ailleurs, malgré sa simplicité, l'estimateur $J^{(6)}$ présente un écart-type relativement faible et s'avère donc relativement performant pour estimer a dans ce cas précis. Quant à $J^{(5)}$, il est particulièrement mauvais puisqu'en exploitant uniquement les deux points extrêmes, sa variance ne diminue pas lorsque l'on augmente le nombre de points de mesure. Elle dépend seulement du bruit de mesure et de l'intervalle séparant les deux mesures. En effet, il est possible, pour

⁵. Le théorème suppose que le bruit de mesure est d'espérance nulle, non corrélé, et d'écart-type identique pour toutes les mesures (hypothèse d'homoscédasticité)

certaines estimateurs, de calculer l'écart-type théorique :

$$\begin{aligned}
 \text{var}(\hat{a}^{(5)}) &= \text{cov}(\hat{a}^{(5)}, \hat{a}^{(5)}) = \text{E} \left[\left(\hat{a}^{(5)} - \text{E} \left[\hat{a}^{(5)} \right] \right) \left(\hat{a}^{(5)} - \text{E} \left[\hat{a}^{(5)} \right] \right) \right] \\
 &= \text{E} \left[\left(\frac{Y_m^* - Y_1^*}{x_m - x_1} - \text{E} \left[\frac{Y_m^* - Y_1^*}{x_m - x_1} \right] \right)^2 \right] = \text{E} \left[\left(\frac{e_m - e_1}{x_m - x_1} \right)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{(x_m - x_1)^2} \left(\underbrace{\text{E} \left[e_m^2 \right]}_{=\sigma_m^2} - \underbrace{2\text{E} \left[e_m e_1 \right]}_{=0} + \underbrace{\text{E} \left[e_1^2 \right]}_{\sigma_m^2} \right) \\
 &= \frac{2\sigma_m^2}{(x_m - x_1)^2} \tag{1.15}
 \end{aligned}$$

$$\text{var}(\hat{a}^{(6)}) = \frac{2\sigma_m^2}{n_p^2} \sum_{k=1}^{n_p} \frac{1}{(x_{m-k+1} - x_k)^2} \tag{1.16}$$

Avec n_p le nombre de paires de points.

Deux hypothèses sont utilisées pour effectuer ces développements :

1. l'homoscédasticité : on suppose que les observables Y_i^* ont le même écart-type.
2. l'indépendance des observables Y_i^* : la composante aléatoire e_i d'une mesure ne dépend pas des autres observables.

Concernant la variance $\text{var}(\hat{a}^{(3)})$ de l'estimateur construit à partir de la méthode des moindres-carrés, on montre dans la suite (Eq.1.26) qu'elle peut se calculée avec la matrice des sensibilités X du modèle. Avec $n = 20$ le nombre d'observables, on a ainsi :

$$\text{var}(\hat{a}^{(3)}) = \sigma_m^2 \left[X^T X \right]^{-1} = \frac{\sigma_m^2}{\sum_{k=1}^n x_i^2} \tag{1.17}$$

2.3 La méthode des moindres-carrés ordinaires

La méthode des moindres carrés est apparue pour la première fois dans la littérature scientifique en 1805 mais était sans doute utilisée depuis quelques dizaines d'années, notamment par Gauss. Les problèmes d'alors étaient essentiellement astronomiques. C'est en effet la trajectoire des astres célestes qu'on cherchait à modéliser et à anticiper. L'année 1805 marque la publication par Legendre d'une annexe intitulée « Sur la méthode des moindres carrés » [7, p.58]. Ce texte, connu pour sa clarté, a contribué à généraliser l'utilisation de la méthode dans toute l'Europe : 10 ans plus tard, elle était devenue un outil classique.

Historiquement, l'idée était de « combiner des observations » pour estimer des paramètres avec une meilleure précision que ne l'aurait permise une seule observation. Avant l'apparition des moindres carrés, on utilisait essentiellement la moyenne pour combiner des observations.

Les astronomes avaient en effet conscience qu'elle permettait d'estimer des paramètres plus précisément. Cependant, ils n'utilisaient la moyenne *que* pour combiner des mesures faites dans les mêmes conditions et généralement par la même personne. Jusqu'à la fin du 18^{ème} siècle, ils étaient réticents à l'idée de combiner des observations issues de conditions différentes de peur qu'en les combinant, leurs erreurs se combinent également, au lieu de se compenser [7, p.4,16].

2.3.1 Généralités

La méthode des moindres carrés peut être utilisée dès que le nombre m d'observables Y^* est plus grand que le nombre n_β de paramètres β à estimer. On parle également de solution au sens des moindres carrés, car lorsque le nombre d'observables excède le nombre de degrés de liberté⁶, il n'existe aucun vecteur β permettant de vérifier simultanément les m équations suivantes entre les observables et les sorties Y du modèle :

$$\begin{pmatrix} Y_1^* \\ Y_2^* \\ \vdots \\ Y_m^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_m \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

L'approche des moindres carrés consiste à minimiser la somme quadratique $J(\beta)$ des résidus $r_i = Y_i^* - Y_i(\beta)$ définie sous forme vectorielle par :

$$J(\beta) = (Y^* - Y(\beta))^T (Y^* - Y(\beta)) \quad (1.19)$$

En procédant de la sorte, « *il s'établit une sorte d'équilibre qui empêche les extrêmes de prévaloir, très-propre à faire connaître l'état du système le plus proche de la vérité. [...] La méthode des moindres carrés fait connaître, en quelque sorte, le centre autour duquel viennent se ranger tous les résultats fournis par l'expérience, de manière à s'en écarter le moins qu'il est possible* »⁷.

2.3.2 Les moindres-carrés linéaires

On parle « des moindres-carrés linéaires » lorsque la méthode des moindres-carrés est appliquée à un modèle linéaire par rapport à β , et « des moindres-carrés non-linéaires » lorsque le modèle est non-linéaire. Si le modèle est linéaire par rapport aux paramètres inconnus β ⁸,

6. Le nombre de degrés de liberté correspond au nombre minimal de paramètres nécessaires pour décrire l'ensemble des données d'entrée d'un système.

7. Extraits de l'annexe publiée par Legendre en 1805 sur la méthode des moindres carrés [7, p.58]

8. La question de la linéarité ou de la non-linéarité des problèmes inverses, des modèles et des systèmes est abordée à la section §3 p35.

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

alors le minimum de $J(\beta)$ est connu de manière explicite. En effet, la sortie Y du modèle peut s'écrire comme une combinaison linéaire des paramètres β :

$$Y = X\beta \quad (1.20)$$

Avec X la matrice dite « des sensibilités ». Cette matrice, essentielle en problèmes inverses, est présentée par la suite (§3.1.3 p36). Le minimum de $J(\beta)$ peut être obtenu en annulant son gradient ∇J (le Hessien est défini positif) :

$$\nabla J = \frac{\partial J}{\partial \beta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial \beta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial J}{\partial \beta_{n_\beta}} \end{bmatrix} = -2 X^T (Y^* - X\beta) \quad (1.21)$$

La solution est alors explicite et s'écrit :

$$\frac{\partial J}{\partial \beta} = 0 \quad \implies \quad \hat{\beta} = [X^T X]^{-1} X^T Y^* \quad (1.22)$$

Lorsque le modèle est linéaire, l'expression ci-dessus montre que la solution $\hat{\beta}$ est une combinaison linéaire des observations Y^* , d'où le qualificatif *d'estimateur linéaire*. De plus, la solution n'existe que si $X^T X$ est inversible. Si ce n'est pas le cas, cela signifie que le problème est mal posé et doit être reformulé ou régularisé (§5 p52). La remarque tient toujours si $X^T X$ est inversible⁹ mais est mal conditionnée. Comme le fait remarquer [8, chap.1], que $X^T X$ soit inversible ou non, la solution Y est unique. Ce qui ne l'est pas, c'est la description de ce point Y . Si certaines colonnes de X sont linéairement dépendantes, il existe en effet une infinité de vecteurs β tels que $Y = X\beta$.

Les moindres-carrés linéaires consistent à appliquer une transformation linéaire aux observations (Eq.1.22) qui peut être décrite de façon purement géométrique [8, chap.1]. Le point $Y = X\hat{\beta}$ est donc obtenu en projetant Y^* sur l'espace $\text{Im}(X)$ engendré par les colonnes de la matrice des sensibilités, par l'intermédiaire d'une matrice de projection H (appelée aussi « hat matrix ») :

$$Y = X\hat{\beta} \quad \implies \quad Y = X \underbrace{\left([X^T X]^{-1} X^T \right)}_{\text{Matrice } H} Y^* \quad (1.23)$$

Cette matrice est utilisée par la suite pour calculer notamment les résidus (Eq.1.84 p48) et leurs écarts-types (§1.91 p50).

9. Numériquement, le déterminant d'une matrice est rarement parfaitement nul. Une matrice devrait donc toujours être inversible. Cette définition mathématique de l'inversibilité est un peu trop « binaire » dans le cas numérique. On utilise plutôt le nombre de conditionnement pour évaluer l'inversibilité d'une matrice.

2.3.3 Biais et variance

Soit $\dot{\beta}$ la valeur exacte des paramètres à estimer. Il s'agit de la valeur que l'on obtiendrait si les mesures étaient sans bruit (le modèle est supposé exact) :

$$E[Y^*] = Y = X\dot{\beta} \quad (1.24)$$

Le biais de l'estimateur des moindres-carrés peut être déterminé en calculant l'écart entre l'espérance de l'estimateur et la valeur exacte (Eq.1.11) :

$$E[\hat{\beta}] - \dot{\beta} = E\left[\left[X^T X\right]^{-1} X^T Y^*\right] - \dot{\beta} = \left[X^T X\right]^{-1} X^T E[Y^*] - \dot{\beta} = 0$$

Si le modèle est linéaire, l'estimateur des moindres-carrés est donc non biaisé (ou sans biais). Quant à la variance de cet estimateur, il suffit de reprendre la définition (Eq.1.12). Soit $F = \left[X^T X\right]$ et e le vecteur des erreurs e_i , on a :

$$\begin{aligned} \text{cov}(\hat{\beta}) &= E\left[\left(\hat{\beta} - E[\hat{\beta}]\right)\left(\hat{\beta} - E[\hat{\beta}]\right)^T\right] \\ &= E\left[F^{-1} X^T (Y^* - E[Y^*]) (Y^* - E[Y^*])^T X F^{-1}\right] \\ &= F^{-1} X^T \text{cov}(Y^*) X F^{-1} \\ &= F^{-1} X^T \text{cov}(e) X F^{-1} \quad \text{car } Y^* = E[Y^*] + e \end{aligned} \quad (1.25)$$

Si on suppose que le bruit de mesure est non corrélé, alors la matrice de variance-covariance associée à Y^* et notée $\text{cov}(e)$ est une matrice diagonale. De plus, on a supposé dans cette section que les variances sont identiques pour toutes les observations, donc la matrice de variance-covariance vaut $\text{cov}(Y^*) = \sigma_m^2 \mathbf{I}$. On retrouve alors l'expression classique :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \sigma_m^2 \left[X^T X\right]^{-1} \quad (1.26)$$

2.3.4 Extensions de la méthode des moindres carrés

Dans la version élémentaire des moindres carrés, on suppose que les observables ont tous la même variance (hypothèse d'homoscédasticité) et qu'ils sont décorrélés. Une première extension¹⁰ à cet estimateur est la méthode des *moindres-carrés pondérés*. Avec cette extension, l'hypothèse d'homoscédasticité n'est plus nécessaire, mais les observables sont toujours supposés décorrélés. Le principe est de donner un poids différent aux observables à travers la matrice diagonale W . Bien que l'on puisse utiliser n'importe quelle méthode pour pondérer les données,

10. Voir http://www.aiaccess.net/French/Glossaires/GlosMod/f_gm_moindres_carres_generalises.htm

il est courant de les pondérer en fonction de l'inverse de leur variance :

$$J(\beta) = (Y^* - Y)^T W (Y^* - Y) \quad \text{avec} \quad (W)_{i,i} = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (1.27)$$

Lorsque le modèle $Y(\beta, \gamma)$ est linéaire par rapport à β , la solution est explicite et est donnée par :

$$\hat{\beta} = [X W X]^{-1} X^T W Y^* \quad (1.28)$$

La matrice W dans l'expression (Eq.1.28) est ici diagonale. La matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ de la solution s'écrit :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = [X^T W X]^{-1} \quad (1.29)$$

Remarque

Les moindres-carrés pondérés permettent de prendre en compte le fait que la variance des observables n'est pas toujours constante. Cependant, rien ne nous empêche d'utiliser les moindres-carrés ordinaires alors que l'hypothèse d'homoscédasticité n'est pas vérifiée. Utiliser un estimateur non adapté augmente la variance de l'estimation. En effet, la méthode des moindres-carrés ordinaires donnera alors un poids excessif aux observables ayant une variance plus importante.

La méthode des *moindres-carrés généralisés* prend en compte également les éventuelles corrélations entre les observables [3, p.258]. On remplace alors la matrice W^{-1} par la matrice de variance-covariance $\text{cov}(Y^*) = \text{cov}(e)$ des mesures. On passe alors à la méthode du maximum de vraisemblance qui nécessite la connaissance de la loi de probabilité du bruit de mesure e . Dans notre cas, le vecteur e est supposé être un vecteur Gaussien. La matrice $W = [\text{cov}(e)]^{-1}$ caractérise ainsi complètement la densité de probabilité $\text{pdf}(e)$:

$$\text{pdf}(e) = \frac{1}{(2\pi \sigma_m)^{\frac{m}{2}} \sqrt{|W^{-1}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} e^T W e\right) \quad (1.30)$$

Quant à la solution $\hat{\beta}$ et à sa matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$, elles sont respectivement données par les expressions (Eq.1.28) et (Eq.1.29).

Remarque sur la matrice d'information

L'expression de la solution $\hat{\beta}$ et de la matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ font intervenir la matrice $F = X^T W X$. Cette matrice apparaît à de nombreuses reprises dans ce manuscrit. En effet, les deux méthodes d'estimation présentées par la suite, MLE et MAP, font intervenir cette matrice. Elle est parfois notée F par analogie à la matrice de Fisher. Fisher a développé une théorie de l'information¹¹ [9] qui s'appuie sur cette matrice. On utilise dans ce manuscrit le terme « matrice d'information » et non « matrice de Fisher », car l'estimateur MAP (§2.6 p28) s'écarte de la définition initiale. La matrice d'information se voit en effet parfois

11. Voir aussi http://fr.wikipedia.org/wiki/Information_de_Fisher

ajouter une matrice supplémentaire Q :

$$F = X^T W X + Q$$

De plus, la matrice de Fisher se réfère à la fonction de vraisemblance (§2.5 p25), alors que dans le cas de l'estimateur MAP, on travaille avec la densité de probabilité a posteriori des estimations.

2.4 L'approche fréquentielle et Bayésienne des probabilités

Historiquement, il n'y a pas eu et il n'y a toujours pas une seule manière de voir les probabilités. On distingue en effet deux approches : l'approche Bayésienne et l'approche Fréquentielle. Cette constatation, quelque peu déroutante, est bien résumée par Efron [10] : *Basically, there's only one way of doing physics, but there seems to be at least two ways to do statistics, and they don't always give the same answers.*

La distinction de ces deux approches est apparue à la fin du 19^{ème} siècle. Avant cette date, il semblerait qu'un certain flou ait subsisté et que la signification des probabilités dépendaient du praticien. Toutefois, d'après Sivia [11, p.9], il semblerait que ce soit la vision Bayésienne qui ait prévalu avec notamment Bernoulli, Bayes et Laplace.

2.4.1 Approche bayésienne des probabilités

L'approche Bayésienne consiste à voir dans les probabilités la mesure d'un niveau de confiance, un niveau de plausibilité ou de vraisemblance (voir [12, p.11], [11, p.8] et [3, p.437]). Elle apparaît la première fois¹² dans un essai de Thomas Bayes, publié en 1763 après sa mort [7, p.98]. Cependant, il ne s'agit là que d'un problème faisant appel aux statistiques Bayésienne [13, p.3] et non de la formulation du théorème de Bayes que l'on doit, elle, en partie à Laplace [7, p.102].

Le théorème de Bayes [11, 12, 14, 15] est le fondement des probabilités qui portent son nom. Le développement pour l'obtenir est techniquement simple, mais il semblerait que son interprétation ait amorcé un débat qui dure depuis 2 siècles et qui n'est pas terminé. Le théorème de Bayes s'obtient en partant de *la règle du produit* ou *règle des probabilités conditionnelles*. Soit deux événements A et B , cette règle affirme que la probabilité que A et B soient vrais $p(A, B)$ est égale à la probabilité que A soit vrai sachant que B est vrai $p(A|B)$, multiplié par la probabilité que B soit vrai $p(B)$:

$$p(A, B) = p(A|B) \times p(B) \tag{1.31}$$

Une particularité du terme de gauche est d'être symétrique. En effet, dire que A et B sont

12. D'après certains auteurs, il se pourrait très bien que ce que l'on appelle aujourd'hui « approche Bayésienne » soit assez différent de ce que pratiqua Thomas Bayes dans son essai.

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

vrais est équivalent à dire que B et A sont vrais. Cela permet d'écrire la relation précédente en inversant A et B :

$$p(A, B) = p(B, A) = p(B|A) \times p(A) \quad (1.32)$$

En égalant les deux expressions ci-dessus, on obtient le théorème de Bayes, parfois appelé *théorème de probabilité des causes* :

$$p(A|B) \times p(B) = p(B|A) \times p(A) \quad (1.33)$$

En l'état, l'intérêt de la relation n'est pas évident. Il apparaît lorsque l'on remplace les événements A et B par des termes plus explicites, par exemple « cause » et « effet », ou « observables Y » et « paramètres β » :

$$p(\beta = \dot{\beta} | Y = Y^*) = \frac{p(Y = Y^* | \beta = \dot{\beta}) \times p(\beta = \dot{\beta})}{p(Y = Y^*)} \quad (1.34)$$

Avec ici Y , β deux variables aléatoires continues et $\dot{\beta}$, Y^* des réalisations particulières de ces deux variables aléatoires. Ecrite plus succinctement, l'expression précédente devient :

$$p(\dot{\beta} | Y^*) = \frac{p(Y^* | \dot{\beta}) \times p(\dot{\beta})}{p(Y^*)} \quad (1.35)$$

L'intérêt de cette relation est de relier la quantité qui nous intéresse, $p(\dot{\beta} | Y^*)$, à des quantités que l'on peut calculer plus facilement. Par ailleurs, chaque terme de l'expression possède un nom et une signification particulière [11, p.6] :

$p(\dot{\beta} | Y^*)$: La **probabilité a posteriori** décrit notre niveau de connaissance sur les paramètres à la lumière des observations ou plus généralement sur les causes qui ont provoqué les observations.

$p(Y^* | \dot{\beta})$: La **fonction de vraisemblance** est la « probabilité » de voir apparaître les observations pour une valeur donnée des paramètres. C'est cette fonction que l'on exploite avec l'estimateur du maximum de vraisemblance (§2.5 p25).

$p(\dot{\beta})$: La **probabilité a priori** (ou probabilité marginale) sur les paramètres $\dot{\beta}$ (les vraies valeurs, les valeurs exactes) décrit notre niveau de connaissance avant l'expérience. Le théorème de Bayes requiert de la part de l'utilisateur de spécifier une distribution a priori de la solution.

$p(Y^*)$: La **probabilité a priori** (probabilité marginale) des observations est la probabilité de les obtenir en prenant en compte toutes les causes possibles (ici toutes les valeurs de β possibles). Dans certains cas, on peut utiliser la loi des probabilités totales pour calculer ce terme.

Pour calculer la densité marginale $p(Y^*)$, on peut utiliser le principe de marginalisation ([11, p.6] et [12, p.8]) qui s'apparente ici à déterminer la densité de probabilité des observations Y^* en prenant en compte toutes les causes possibles (toutes les valeurs possibles de $\dot{\beta}$) et leur probabilité d'apparition :

$$p(Y^*) = \int p(Y^*, \dot{\beta}) d\dot{\beta} = \int p(Y^*|\dot{\beta}) p(\dot{\beta}) d\dot{\beta} \quad (1.36)$$

Le théorème de Bayes décrit et porte en lui même un processus itératif à l'image du fonctionnement de notre cerveau¹³. A partir d'une connaissance a priori, d'une idée, d'un préjugé, on réalise de nouvelles observations qui viennent mettre à jour nos connaissances [6, p.134]. Dit autrement, on peut concevoir les probabilités Bayésiennes comme un moyen de quantifier et de traiter l'information :

probabilité a priori \implies observations \implies probabilité a posteriori

Un des points central sur lequel les probabilités Bayésiennes et ses partisans ont eu à se justifier, est le choix de la probabilité a priori des paramètres, c'est à dire sur la définition du terme $p(\beta)$. Un des problèmes courants est de savoir quelle distribution utiliser pour modéliser notre ignorance totale sur le résultat¹⁴ ou pour matérialiser notre volonté de ne pas influencer le résultat avec une quelconque information a priori. Comme le choix de la distribution apparaît parfois comme étant subjectif, les probabilités Bayésiennes sont parfois qualifiées (à tort, disent ses défenseurs [11, p.124]) de « subjectives ».

Le *principe d'indifférence* ou de *raison insuffisante* est souvent invoqué pour justifier l'utilisation d'une *densité de probabilité a priori* uniforme sur des paramètres inconnus. Cependant, ce n'est pas toujours celle qui est adaptée¹⁵ pour modéliser notre état d'ignorance¹⁶ ou notre volonté de ne pas vouloir orienter la solution.

Un des problèmes avec ces probabilités a priori sur les paramètres est la propriété d'invariance par changement de variable que l'on perd souvent avec l'approche Bayésienne. La propriété d'invariance est intéressante puisqu'elle permet de reparamétriser librement le problème sans changer la solution finale. Imaginons un problème où on cherche à estimer un paramètre x . Faute d'information a priori, nous choisissons d'utiliser une densité de probabilité uniforme pour $p(x)$. Mais si on paramétrise maintenant le problème en posant $y = 1/x$. Quel

13. Pour l'anecdote, voir [6, p.135] pour une interprétation Bayésienne des événements à propos de l'accident de la centrale nucléaire de Three Mile Island en 1979.

14. La question est centrale et qualifiée ironiquement de « the search of the holy grail » dans [13, p.5].

15. Par exemple, lorsque l'on souhaite estimer la moyenne et la variance d'une loi normale à partir d'observations, il est préférable, semble-t-il, d'utiliser comme densité a priori pour la moyenne μ une densité uniforme, et d'utiliser pour l'écart-type σ une densité uniforme sur $\log(\sigma)$ [11, p.108].

16. Voir à ce sujet les densités de Jeffreys ou « Jeffreys prior » dont l'objectif est de fournir un moyen de déterminer les densités non-informatives.

est la densité a priori à utiliser pour y ? En l'absence d'information, on est tenté d'utiliser une densité uniforme pour $p(y)$. Cependant, dans ce cas, les deux densités de probabilités $p(x)$ et $p(y)$ ne correspondent plus. Or aucune des paramétrisations n'est a priori plus légitime que l'autre. Cependant, la probabilité a priori n'a en général qu'un effet marginal sur la solution. En effet, dès que le nombre d'observables est relativement important, la sensibilité à la densité de probabilité a priori diminue.

Dans certaines situations¹⁷, on souhaite spécifier une probabilité informative sur certains paramètres car on dispose d'information a priori. Prenons l'exemple d'un capteur de température. Sa position n'est pas parfaitement connue, mais on en a une idée, puisqu'on l'a définie. On peut ainsi utiliser une loi gaussienne comme densité a priori pour spécifier sa position. L'écart-type de cette loi doit être estimé de manière plus ou moins subjective par l'utilisateur.

2.4.2 Approche fréquentielle des probabilités

L'approche fréquentielle des probabilités est apparue en « protestation » à cette vision des probabilités qualifiée de subjective [11, p.9]. Considérons une expérience aléatoire et A un événement, c'est à dire un résultat possible de l'expérience. Répétons cette expérience n fois dans les mêmes conditions et comptons le nombre de fois n_A qu'est réalisé l'événement A . La probabilité p_A est alors définie par [16, p.23] :

$$p_A = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n_A}{n} \quad (1.37)$$

Compter le nombre de réalisations d'un événement A parmi n réalisations de l'expérience, consiste à déterminer la fréquence d'apparition de cet événement, d'où l'expression « d'approche fréquentielle ». Ce type de probabilité se prête bien à l'étude des jeux de hasard, ou à tous les problèmes où l'on peut aisément concevoir, au moins mentalement, de répéter une expérience indéfiniment. Mais tous les problèmes de statistique ne s'y prêtent pas aussi bien. Comme le fait remarquer Sivia[11, p.9], « having to seek a frequency interpretation for every data analysis problem seems rather perverse ». L'exemple donné est celui de l'estimation de la masse de Saturne par Laplace mais la même question se pose pour des propriétés thermophysiques de matériau. Ces grandeurs peuvent-elles être considérées comme des variables aléatoires? Auxquelles on peut associer une densité de probabilité $p(\beta|Y^*)$? Même en imaginant une infinité d'univers indépendants, la masse de Saturne est-elle le résultat d'une expérience aléatoire? Toutefois, avec la notion de vraisemblance développée par Fisher (§2.5 p25), la question est moins problématique puisqu'en travaillant uniquement avec $p(Y^*|\beta)$, on évite d'introduire une

17. C'est le cas par exemple au chapitre 2, où l'instant initial t_0 , correspondant au début de l'expérience, n'est pas connu avec précision. On suppose ainsi que t_0 suit une loi gaussienne avec un écart-type d'une fraction de seconde ($\approx 0,1$ s), estimé à partir des caractéristiques techniques de la caméra infrarouge utilisée.

densité de probabilité sur β . La densité sur β prend également son sens lorsqu'elle porte sur les sorties de l'estimateur et non sur les paramètres eux-mêmes.

Par ailleurs, lorsqu'à l'issue de l'estimation, on fournit un écart-type sur les paramètres estimés, cette incertitude ne porte pas sur le paramètre lui-même, mais sur le résultat de l'estimateur. En effet, il ne serait pas correct d'introduire une densité de probabilité d'une grandeur qui n'est pas une variable aléatoire. Dans le cadre des probabilités Bayésiennes, la densité de probabilité ne décrit pas la dispersion du paramètre, mais seulement la connaissance que l'on en a. Un intervalle de confiance, ou n'importe quelle mesure de dispersion, ne s'interprète pas de la même façon [17] suivant que l'on considère l'approche fréquentielle ou Bayésienne.

2.5 La méthode du maximum de vraisemblance (MLE)

2.5.1 Généralités

La méthode du maximum de vraisemblance (MLE pour « Maximum Likelihood Estimation ») [8] a été proposée par R.A. Fisher [18]. La fonction de vraisemblance est une fonction des paramètres inconnus β et des observations Y^* . Cette fonction, notée $L(\beta)$, correspond à la probabilité¹⁸ d'obtenir les observations Y^* pour une valeur fixée des paramètres β . La solution au problème d'estimation de paramètres est obtenue en déterminant le vecteur β qui maximise la fonction de vraisemblance, c'est à dire qui maximise la probabilité d'obtenir les observables Y^* (une réalisation de la variable aléatoire). Cette fonction est définie à partir de la densité de probabilité des observations :

$$L(\beta) = p(\underbrace{Y^*}_{\text{Réalisation}} \mid \underbrace{\beta}_{\text{Déterministe}}) \quad (1.38)$$

Bien que le terme de gauche soit égal (en valeur) au terme de droite par définition, on utilise le terme de « vraisemblance » et non probabilité ou densité de probabilité. On peut donner plusieurs raisons à cela. Tout d'abord, le terme de droite correspond à la densité de probabilité que l'on a d'obtenir la réalisation Y^* pour une valeur donnée de β . D'une certaine manière, la fonction de vraisemblance inverse les rôles : c'est maintenant β que l'on fait varier.

Lorsque tous les observables sont indépendants, la densité de probabilité du vecteur Y^*

18. En réalité, ce n'est pas le cas. L'équivalence entre « probabilité » et « vraisemblance » peut exister uniquement lorsque l'on travaille avec des variables aléatoires discrètes. Dès que l'on travaille avec des variables continues, la fonction de vraisemblance n'a plus de réalité physique particulière. Elle peut être proportionnelle à la densité de probabilité mais ne donne aucune information sur la distribution du paramètre β que l'on souhaite estimer.

s'exprime comme le produit des densités de probabilité de chaque composante, d'où :

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^m p(Y_i^*|\beta) \quad (1.39)$$

Quant à la matrice de variance-covariance de l'estimateur, on peut montrer¹⁹ [8, chap.8 p.276] que celle-ci est l'opposée de l'inverse de la matrice Hessienne de $\ln(L(\beta))$:

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = -\left[\frac{\partial^2 \ln(L)}{\partial \beta^2}\right]^{-1} \quad (1.40)$$

2.5.2 Liens avec l'estimation par moindres-carrés

Lorsque chaque composante Y_i^* suit une loi normale d'espérance $E[Y_i^*|\beta] = Y_i(\beta)$ et de matrice de variance-covariance $\text{cov}(Y^*|\beta) = \text{cov}(e) = \sigma_m^2 \mathbf{I}$, l'expression devient :

$$L(\beta) = \left(\frac{1}{\sigma_m \sqrt{2\pi}}\right)^m \prod_{i=1}^m e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{Y_i^* - Y_i(\beta)}{\sigma_m}\right)^2} \quad (1.41)$$

Il est d'usage de prendre le logarithme de cette expression pour la simplifier. Cela est possible car la fonction de vraisemblance définie par Eq.1.41 est positive. On obtient ainsi :

$$\ln(L(\beta)) = m \ln\left(\frac{1}{\sigma_m \sqrt{2\pi}}\right) - \frac{1}{2\sigma_m^2} \sum_{i=1}^m (Y_i^* - Y_i(\beta))^2 \quad (1.42)$$

L'estimation par le maximum de vraisemblance consiste à maximiser cette quantité, ou bien à minimiser son opposée. Soit $L^*(\beta)$ la nouvelle fonction de vraisemblance. La solution $\hat{\beta}$ est finalement le minimum de l'expression suivante :

$$L^*(\beta) = \ln(L(\beta)) = \sum_{i=1}^m (Y_i^* - Y_i(\beta))^2 \quad (1.43)$$

On retrouve ainsi l'estimateur des moindres-carrés de la section précédente. On peut également retrouver de la même façon l'estimateur des moindres-carrés généralisés. L'estimation par moindres-carrés apparaît donc ici comme un cas particulier du maximum de vraisemblance. L'utilisation du maximum de vraisemblance est relativement simple pourvu que l'on connaisse le modèle exact de l'expérience et la densité de probabilité des observables.

19. Voir aussi http://en.wikipedia.org/wiki/Maximum_likelihood

Moyenne et écart-type d'une loi gaussienne

L'exemple classique pour illustrer l'estimation par maximum de vraisemblance consiste à retrouver les expressions permettant d'estimer la moyenne μ et l'écart-type σ_m d'un ensemble de m observations Y^* distribuées selon la loi normale. L'objectif est donc d'estimer le vecteur $\beta = [\mu, \sigma_m]^T$. En supposant que les observations sont indépendantes, la fonction de vraisemblance s'écrit :

$$L(\beta) = \left(\frac{1}{\sigma_m \sqrt{2\pi}} \right)^m \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{(Y_i^* - \mu)^2}{\sigma_m^2} \right)$$

En appliquant la fonction logarithme, on obtient :

$$\ln(L(\beta)) = -m \ln(\sigma_m) - m \ln(\sqrt{2\pi}) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{(Y_i^* - \mu)^2}{\sigma_m^2}$$

Pour déterminer le maximum de cette fonction, on cherche le zéro des dérivées par rapport à μ et σ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln(L(\beta))}{\partial \mu} &= \frac{1}{\sigma_m^2} \sum_{i=1}^m (Y_i^* - \mu) = 0 & \implies & \hat{\mu} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m Y_i^* \\ \frac{\partial \ln(L(\beta))}{\partial \sigma_m} &= -\frac{m}{\sigma_m} + \frac{1}{\sigma_m^3} \sum_{i=1}^m (Y_i^* - \mu)^2 = 0 & \implies & \hat{\sigma}_m = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (Y_i^* - \hat{\mu})^2} \end{aligned}$$

Manifestement, l'estimateur de la variance proposé par le maximum de vraisemblance²⁰ est biaisé ce qui est tout à fait cohérent avec ses propriétés. Le caractère non biaisé des estimateurs obtenus par le maximum de vraisemblance n'est vrai qu'asymptotiquement, lorsque le nombre de mesures tend vers l'infini.

On peut aussi déterminer la variance $\text{var}(\hat{\mu})$ de la moyenne μ et la variance $\text{var}(\hat{\sigma}_m)$ de l'écart-type σ_m . D'après l'équation (Eq.1.40), leur matrice de variance-covariance est égale à l'opposé de l'inverse du Hessien de $J(\beta)$:

$$\begin{aligned} \text{cov}(\hat{\beta}) &= \begin{bmatrix} \sigma_{\hat{\mu}}^2 & \sigma_{\hat{\mu}, \hat{\sigma}_m} \\ \sigma_{\hat{\mu}, \hat{\sigma}_m} & \sigma_{\hat{\sigma}_m}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\partial^2 J}{\partial \mu^2} & -\frac{\partial}{\partial \sigma_m} \frac{\partial J}{\partial \mu} \\ -\frac{\partial}{\partial \mu} \frac{\partial J}{\partial \sigma_m} & -\frac{\partial^2 J}{\partial \sigma_m^2} \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{m}{\hat{\sigma}_m^2} & -\frac{2}{\hat{\sigma}_m^3} \sum_{i=1}^m (Y_i^* - \hat{\mu}) \\ -\frac{2}{\hat{\sigma}_m^3} \underbrace{\sum_{i=1}^m (Y_i^* - \hat{\mu})}_{=0} & \frac{2m}{\hat{\sigma}_m^2} \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\hat{\sigma}_m^2}{m} & 0 \\ 0 & \frac{\hat{\sigma}_m^2}{2m} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

On retrouve ainsi l'écart-type de la moyenne $\sigma_{\hat{\mu}} = \hat{\sigma}_m / \sqrt{m}$ ainsi que l'écart-type (la dispersion) de l'écart-type $\text{std}[\hat{\sigma}_m] = \hat{\sigma}_m / \sqrt{2m}$.

20. A titre de comparaison, on peut aussi traiter cet exemple avec une approche Bayésienne [11, p.52].

2.5.3 Propriétés du maximum de vraisemblance

Pour la méthode des moindres-carrés ordinaires, le théorème de Gauss-Markov [8, ch.5] affirme qu'il s'agit du meilleur estimateur linéaire non biaisé, c'est à dire celui qui a la plus faible variance. Il s'applique lorsque les observables sont non corrélés et ont la même variance. La performance de l'estimateur des moindres carrés a été mise en évidence avec l'exemple de régression de droite (Tab.1.1).

Parmi les diverses propriétés de l'estimateur MLE [8, ch.8], on peut citer l'invariance par reparamétrisation et l'efficacité asymptotique. L'invariance par reparamétrisation signifie que les estimations ne dépendent pas de la façon de paramétrer le problème. La seconde signifie que l'estimateur atteint la borne de Cramer-Rao²¹ qui fixe la borne inférieure de la matrice de variance-covariance que l'on peut obtenir avec des estimateurs linéaires non-biaisés.

2.6 Méthode du maximum a posteriori (MAP)

La méthode du maximum de vraisemblance (MLE) présentée dans la section précédente s'appuie sur $p(Y^*|\hat{\beta})$. La méthode du maximum a posteriori (MAP), valable dans le cadre des probabilités Bayésiennes, est basée sur $p(\hat{\beta}|Y^*)$ (Eq.1.35) :

$$p(\hat{\beta}|Y^*) \propto p(Y^*|\hat{\beta}) \times p(\hat{\beta}) \quad (1.44)$$

L'expression ci-dessus est une autre manière d'écrire le théorème de Bayes. Cette écriture se prête plus particulièrement à l'estimation de paramètres. En effet, la probabilité a priori des observations $p(Y^*)$ (Eq.1.36) ne dépend pas des paramètres β et n'est donc ici qu'une constante de proportionnalité qu'il n'est pas nécessaire de conserver pour résoudre le problème d'autant plus qu'elle peut être difficile à calculer.

Pour le maximum de vraisemblance, l'estimation $\hat{\beta}$ est la valeur la plus vraisemblable, celle qui maximise la vraisemblance. Ici, l'estimation $\hat{\beta}$ est la valeur la plus probable étant données les observations Y^* . $\hat{\beta}$ est obtenue en maximisant $p(\hat{\beta}|Y^*)$:

$$\hat{\beta} = \arg \max_{\beta} [p(\beta|Y^*)] \quad (1.45)$$

La distribution $p(\hat{\beta}|Y^*)$ décrit notre niveau de connaissance sur $\hat{\beta}$ (à condition que le modèle soit exact). Que cette distribution soit (multi)normale ou non, on peut considérer la distribution (multi)normale approchée [11, p.21,46] au niveau du maximum $\hat{\beta}$. Pour cela, on calcule la dérivée seconde (le Hessien dans le cas plus général) de $P(\beta) = \ln(p(\beta|Y^*))$ à la solution $\beta = \hat{\beta}$. On

21. http://www.aiaccess.net/French/Glossaires/GlosMod/f_gm_cramer_rao.htm

obtient ainsi un résultat identique à celui obtenu précédemment avec les moindres carrés ou le maximum de vraisemblance, à savoir [11, p.49] :

$$p(\hat{\beta}|Y^*) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}(\hat{\beta} - \hat{\beta})^T \left[-\frac{\partial^2 P}{\partial \beta^2}\right] (\hat{\beta} - \hat{\beta})\right) \quad \text{avec} \quad P(\beta) = \ln(p(\beta|Y^*)) \quad (1.46)$$

La matrice $\frac{\partial^2 P}{\partial \beta^2}$ est définie négative puisqu'elle correspond à la matrice Hessienne calculée au maximum d'un paraboloïde. La matrice de variance-covariance correspondante est finalement :

$$\text{cov}(\hat{\beta}|Y^*) = -\left[\frac{\partial^2 P}{\partial \beta^2}(\hat{\beta})\right]^{-1} \quad (1.47)$$

La matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta}|Y^*)$ caractérise la dispersion (la forme) de la distribution $p(\hat{\beta}|Y^*)$ autour de l'estimation $\hat{\beta}$. La valeur exacte $\hat{\beta}$ des paramètres β est inaccessible. On ne peut que s'en approcher avec les données Y^* fournies par une expérience.

2.7 Estimateur MAP dans la pratique

2.7.1 Les hypothèses

En pratique, lorsque l'on souhaite estimer des paramètres par méthode inverse, c'est à dire avec un modèle et des observations, il arrive fréquemment que certains paramètres supposés connus du modèle ne soient pas aussi bien connus que ça. On peut même affirmer, en allant un peu plus loin, qu'en théorie, aucun paramètre n'est parfaitement connu. Par conséquent, tous les paramètres²² supposés connus γ devraient être estimés par l'estimateur, en même temps que les paramètres inconnus β . Cependant, ce point de vue, peut être un peu extrême, n'est pas toujours justifié car l'incertitude engendrée par la connaissance imparfaite de certains paramètres supposés connus peut être négligeable.

Avec l'approche Bayésienne, la distinction entre paramètres inconnus β et paramètres supposés connus γ n'a donc pas nécessairement de raison d'être puisque les paramètres inconnus ne sont pas complètement inconnus, et les paramètres connus ne le sont pas exactement. Dans la suite de cette section, β désigne tous les paramètres

En estimant non seulement les paramètres inconnus β mais aussi les paramètres supposés connus γ , l'augmentation de la variance que cela génère, a toute les chances d'être considérable

²². Un terme plus précis que « paramètre » est « degré de liberté ». Lorsque l'on suggère d'estimer tous les paramètres γ , il s'agit bien sûr des paramètres indépendants obtenus après une reparamétrisation éventuelle du problème. Par exemple, dans le cas de la méthode flash où l'objectif est d'estimer la diffusivité thermique, les solutions analytiques montrent que la diffusivité a et l'épaisseur de l'échantillon e ne sont pas indépendants. Bien qu'ils constituent 2 paramètres distincts, la solution analytique dépend en réalité uniquement du rapport $\tau = \frac{e^2}{a}$. a et e sont donc deux paramètres mais forment seulement 1 degré de liberté.

sauf si on spécifie correctement la densité de probabilité a priori (l'information a priori sur les paramètres). Aussi, on peut utiliser la loi normale pour décrire la connaissance que l'on a des paramètres supposés connus du modèle. Par exemple, la position d'un thermocouple, ou la taille d'un échantillon seront supposés suivre une loi normale. La moyenne et l'écart-type doivent être spécifiés par l'utilisateur. Cette information peut être considérée comme subjective car elle n'est généralement pas le résultat d'aucun calcul, mais peut être seulement une appréciation personnelle.

Supposons donc que la densité de probabilité a priori de $\dot{\beta}$ suit une loi multinormale caractérisée par la moyenne $\tilde{\beta}$ et la matrice de variance-covariance inverse $Q = [\text{cov}(\dot{\beta})]^{-1}$. Supposons également que le bruit de mesure est additif, qu'il suit une loi multinormale de moyenne nulle et qu'il est caractérisée par une matrice de variance-covariance $\text{cov}(e)$. Dans ces conditions, la fonction de vraisemblance $p(Y^*|\dot{\beta})$ suit aussi une loi multinormale caractérisée par une matrice de variance-covariance inverse $W = [\text{cov}(Y^*|\dot{\beta})]^{-1} = [\text{cov}(e)]^{-1}$. Quant à sa moyenne, elle est ici égale par définition à $E[Y^*|\dot{\beta}] = Y(\dot{\beta})$. En effet, comme le modèle est supposé exact, on a :

$$Y^* = Y(\dot{\beta}) + e \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} E[Y^*|\dot{\beta}] &= Y(\dot{\beta}) \\ \text{cov}(Y^*|\dot{\beta}) &= \text{cov}(e) \end{cases} \quad (1.48)$$

On a ainsi :

$$p(Y^*|\dot{\beta}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m |W^{-1}|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(Y^* - Y(\dot{\beta}))^T W (Y^* - Y(\dot{\beta}))\right) \quad (1.49)$$

$$p(\dot{\beta}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{n_\beta} |Q^{-1}|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\dot{\beta} - \tilde{\beta})^T Q (\dot{\beta} - \tilde{\beta})\right) \quad (1.50)$$

La densité de probabilité a posteriori $p(\dot{\beta}|Y^*)$ vaut donc :

$$\begin{aligned} p(\dot{\beta}|Y^*) &\propto p(Y^*|\dot{\beta}) \times p(\dot{\beta}) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(Y^* - Y(\dot{\beta}))^T W (Y^* - Y(\dot{\beta}))\right) \times \exp\left(-\frac{1}{2}(\dot{\beta} - \tilde{\beta})^T Q (\dot{\beta} - \tilde{\beta})\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2}(Y^* - Y(\dot{\beta}))^T W (Y^* - Y(\dot{\beta})) - \frac{1}{2}(\dot{\beta} - \tilde{\beta})^T Q (\dot{\beta} - \tilde{\beta})\right) \end{aligned} \quad (1.51)$$

2.7.2 La fonction objectif et sa solution

En maximisant la densité a posteriori $p(\dot{\beta}|Y^*)$, on obtient $\hat{\beta}$. Or maximiser cette quantité ou maximiser son logarithme est équivalent. De plus, maximiser le logarithme ou minimiser l'opposé du logarithme est également équivalent. La solution $\hat{\beta}$ peut donc être obtenue en

minimisant la fonction objectif $J(\beta)$ suivante :

$$J(\beta) = (Y^* - Y_{(\beta)})^T W (Y^* - Y_{(\beta)}) + (\beta - \tilde{\beta})^T Q (\beta - \tilde{\beta}) \quad (1.52)$$

La fonction objectif est composée de deux termes. Le premier est identique à celui des moindres-carrés généralisés ou du maximum de vraisemblance. Quant au second, il correspond à l'information a priori. Il s'apparente à un terme de contrainte qui tend à rapprocher la solution a posteriori $\hat{\beta}$ de la solution a priori $\tilde{\beta}$. Lorsque les variances de $\tilde{\beta}$ tendent vers 0, les coefficients diagonaux de Q tendent vers l'infini et la solution $\hat{\beta}$ tend vers $\tilde{\beta}$. A l'inverse, quand les variances de $\tilde{\beta}$ tendent vers l'infini, Q tend vers 0, et on retrouve la fonction des moindres-carrés.

Lorsque le modèle $Y(\beta)$ est linéaire (lorsque $Y(\beta) = X \beta$), on montre par la suite (Eq.1.74) que la solution $\hat{\beta}$ au problème de minimisation de (Eq.1.52) est donnée par :

$$\hat{\beta} = [X^T W X + Q]^{-1} [Q \tilde{\beta} + X^T W Y^*] \quad (1.53)$$

Cette expression peut aussi se montrer sous la forme suivante :

$$\hat{\beta} = \tilde{\beta} + [X^T W X + Q]^{-1} X^T W [Y^* - X \tilde{\beta}] \quad (1.54)$$

Cette deuxième expression met davantage en évidence la mise à jour de la valeur a priori $\tilde{\beta}$ par les mesures Y^* .

Remarque : méthode MAP et régularisation de Tikhonov

L'expression (Eq.1.52) a une forme de fonction assez similaire à celle que l'on pourrait obtenir avec une méthode de régularisation de type Tikhonov [3, 5, 14].

2.7.3 Ecart-types des estimations

La densité de probabilité $p(\hat{\beta}|Y^*)$ est multinormale et est ainsi entièrement caractérisée par sa moyenne (qui est aussi son maximum) $\hat{\beta}$ ainsi que par la matrice de variance covariance $\text{cov}(\hat{\beta}|Y^*)$. Cette dernière est donnée par l'expression (Eq.1.47) et vaut ici :

$$\text{cov}(\hat{\beta}|Y^*) = [X^T W X + Q]^{-1} \quad (1.55)$$

Etant données les mesures Y^* , cette matrice décrit notre niveau de connaissance sur $\hat{\beta}$ après l'expérience. On peut aussi calculer la matrice de variance-covariance de $\text{cov}(\hat{\beta})$, c'est à dire la dispersion des estimations $\hat{\beta}$. On calcule cette matrice en injectant l'expression de la solution

$\hat{\beta}$ (Eq.1.53) dans la définition de la covariance (Eq.1.12) :

$$\begin{aligned} \text{cov}(\hat{\beta}) &= \text{E} \left[(\hat{\beta} - \text{E}[\hat{\beta}]) (\hat{\beta} - \text{E}[\hat{\beta}])^T \right] \\ &= \left[X^T W X + Q \right]^{-1} X^T W X \left[X^T W X + Q \right]^{-1} \end{aligned} \quad (1.56)$$

L'exemple proposé par la suite (§5.3.1 p62) permet de clarifier le sens que l'on peut donner à ces deux matrices de variance-covariance. Dans le cadre des probabilités Bayésiennes, la seconde matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ n'a pas vraiment d'intérêt puisqu'elle caractérise seulement la dispersion numérique de la solution $\hat{\beta}$, c'est à dire la dispersion du maximum de $p(\hat{\beta}|Y^*)$.

Remarque sur les matrices $\text{cov}(Y^*|\hat{\beta})$ et $\text{cov}(Y^*)$

Dans l'expression (Eq.1.51), le terme $p(Y^*)$ a été omis puisqu'il ne dépend pas des paramètres β et n'influe donc pas sur la position du maximum de $p(\hat{\beta}|Y^*)$. Avec les hypothèses adoptées ici, à savoir (i) la normalité du bruit de mesure, (ii) la normalité de la densité de probabilité a priori $p(\hat{\beta})$ et (iii) la linéarité du modèle $Y(\beta)$, on sait que la densité de probabilité $p(Y^*)$ suit aussi une loi multinormale, caractérisée entièrement par son espérance et sa matrice de variance-covariance (à comparer à Eq.1.48) :

$$Y^* = X \hat{\beta} + e \quad \implies \quad \begin{cases} \text{E}[Y^*] &= X \text{E}[\hat{\beta}] = X \tilde{\beta} \\ \text{cov}(Y^*) &= \text{cov}(e) + X \text{cov}(\hat{\beta}) X^T = W^{-1} + X Q^{-1} X^T \end{cases} \quad (1.57)$$

On en déduit donc facilement la densité de probabilité a priori $p(Y^*)$ des observables Y^* :

$$p(Y^*) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m |\text{cov}(Y^*)^{-1}|}} \exp \left(-\frac{1}{2} (Y^* - \text{E}[Y^*])^T \text{cov}(Y^*)^{-1} (Y^* - \text{E}[Y^*]) \right) \quad (1.58)$$

La densité de probabilité $p(Y^*)$ est ici relativement simple à calculer. Dans le cas plus général où elle ne suit pas une loi normale, on peut utiliser l'expression (Eq.1.36). En l'appliquant ici, on a par exemple :

$$\begin{aligned} p(Y^*) &= \int_{\mathbb{R}^n} p(Y^*|\beta) p(\beta) d\beta \\ &\propto \int \exp \left(-\frac{1}{2} (Y^* - X \beta)^T W (Y^* - X \beta) \right) \exp \left(-\frac{1}{2} (\beta - \tilde{\beta})^T Q (\beta - \tilde{\beta}) \right) d\beta \\ &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} (Y^{*T} W Y^*) \right) \int \exp \left(-\frac{1}{2} \left[\beta^T \underbrace{(X^T W X + Q)}_F \beta - 2 \underbrace{(Y^{*T} W X + \tilde{\beta}^T Q)}_G \beta \right] \right) d\beta \\ &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} (Y^{*T} W Y^*) \right) \int \exp \left(-\frac{1}{2} \left[\left(\beta - \underbrace{F^{-1} G^T}_{=\hat{\beta} \text{ (Eq.1.53)}} \right)^T F \left(\beta - F^{-1} G^T \right) - G F^{-1} G^T \right] \right) d\beta \\ &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} (Y^{*T} W Y^* - G F^{-1} G^T) \right) \\ &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left[Y^{*T} \underbrace{(W - W X F^{-1} X^T W)}_{=M=\text{cov}(Y^*)^{-1}} Y^* - 2 \underbrace{\tilde{\beta}^T Q F^{-1} X^T W}_{N} Y^* \right] \right) \end{aligned}$$

$$\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left[(Y^* - \underbrace{M^{-1} N^T}_{=X \tilde{\beta}})^T \text{cov}(Y^*)^{-1} (Y^* - M^{-1} N^T) \right] \right) \quad (1.59)$$

On peut justifier l'égalité $M = \text{cov}(Y^*)^{-1}$ en montrant que le produit de M par $\text{cov}(Y^*)$ est l'identité :

$$\left[W - W X (X^T W X + Q)^{-1} X^T W \right] \left[X Q^{-1} X^T + W^{-1} \right] = \mathbf{I}$$

Finalement, on retrouve l'expression de l'espérance et de la matrice de variance-covariance de la relation (Eq.1.57).

2.7.4 Biais des estimations

Les expressions (Eq.1.53) et (Eq.1.54) montrent que l'estimation $\hat{\beta}$ est un compromis entre l'information a priori et l'information fournie par les mesures. Si on suppose que les paramètres a priori sont indépendants ($\text{cov}(\dot{\beta})$ est une matrice diagonale), alors en « augmentant » l'information a priori, c'est à dire en diminuant les écarts-types a priori, on augmente les coefficients diagonaux de Q , ce qui a pour effet de réduire l'influence des mesures sur l'estimation. On réduit également les coefficients diagonaux de la matrice de variance-covariance associée à $p(\dot{\beta}|Y^*)$ (Eq.1.55).

Ajouter de l'information réduit la variance des estimations mais cela introduit un biais. Cela signifie donc qu'en moyenne, si on répète l'expérience avec la même information a priori, l'estimation obtenue par la méthode MAP n'est pas égale aux paramètres exactes $\dot{\beta}$:

$$\mathbb{E} [\hat{\beta}] \neq \dot{\beta} \quad (1.60)$$

Dans cette expression, $\dot{\beta}$ désigne le vecteur des paramètres exactes et non la variable aléatoire associée.

Pour quantifier le biais de la méthode MAP, on peut calculer l'espérance de $\hat{\beta}$ à partir de l'expression (Eq.1.53) ou (Eq.1.54) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [\hat{\beta}] &= \left[X^T W X + Q \right]^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X^T W \mathbb{E} [Y^*] \right] \\ &= \left[X^T W X + Q \right]^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X^T W X \dot{\beta} + Q \dot{\beta} - Q \dot{\beta} \right] \\ &= \dot{\beta} + \underbrace{\left[X^T W X + Q \right]^{-1} Q (\tilde{\beta} - \dot{\beta})}_{\text{Biais}} \end{aligned} \quad (1.61)$$

Ainsi, si la valeur a priori $\tilde{\beta}$ est égale à $\dot{\beta}$, aucun biais n'est introduit, de même si $Q = 0$

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

(aucune information a priori). On en déduit donc aussi que la méthode MLE n'est pas biaisée.

On peut maintenant calculer la matrice de variance-covariance du biais :

$$\text{cov}\left(\mathbb{E}[\hat{\beta}] - \dot{\beta}\right) = \left[X^T W X + Q\right]^{-1} Q \text{cov}(\tilde{\beta} - \dot{\beta}) Q \left[X^T W X + Q\right]^{-1} \quad (1.62)$$

Avec ici $\dot{\beta}$ la valeur exacte des paramètres et non la variable aléatoire associée. Quant à $\tilde{\beta}$, il s'agit de la valeur moyenne (ou la plus probable) de $p(\dot{\beta})$. Cette valeur est spécifiée par l'utilisateur et peut ainsi être considérée comme une variable aléatoire. Comme il n'y a pas de raison apparente pour laquelle les paramètres de ce vecteur seraient systématiquement inférieurs ou supérieurs aux valeurs exactes de $\dot{\beta}$, il semble raisonnable de supposer qu'en moyenne, la valeur spécifiée par l'utilisateur est égale à $\dot{\beta}$, ce qui implique que $\mathbb{E}[\tilde{\beta} - \dot{\beta}] = 0$. Si on suppose de plus que l'écart entre $\tilde{\beta}$ et $\dot{\beta}$ suit une loi normale caractérisée par une matrice de variance-covariance égale à $\text{cov}(\dot{\beta})$, on obtient :

$$\text{cov}\left(\mathbb{E}[\hat{\beta}] - \dot{\beta}\right) = \left[X^T W X + Q\right]^{-1} Q \left[X^T W X + Q\right]^{-1} \quad (1.63)$$

Cette expression suggère qu'à mesure que le poids des mesures augmente, la matrice tend vers 0.

Les trois expressions précédentes sont valables lorsque le modèle $Y(\beta)$ est linéaire par rapport à β . Lorsque ce n'est plus le cas, les résultats sont identiques. Pour le montrer, on peut par exemple utiliser un développement au premier du modèle autour des paramètres exactes (inconnus) $\dot{\beta}$ (ou autour d'une estimation $\hat{\beta}$) :

$$Y^* = Y(\dot{\beta}) + X(\beta - \dot{\beta}) + e$$

Le modèle est maintenant linéaire par rapport à β . On en déduit l'expression de la solution puis du biais d'estimation :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\hat{\beta}] &= \mathbb{E}\left[\left[X^T W X + Q\right]^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X^T W \left(Y^* - Y(\dot{\beta}) + X\dot{\beta} + e\right)\right]\right] \\ &= \left[X^T W X + Q\right]^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X^T W \left(\underbrace{\mathbb{E}[Y^*]}_{=Y(\dot{\beta})} - Y(\dot{\beta}) + X\dot{\beta} + \underbrace{\mathbb{E}[e]}_{=0}\right)\right] \\ &= \dot{\beta} + \left[X^T W X + Q\right]^{-1} Q (\tilde{\beta} - \dot{\beta}) \end{aligned}$$

Un exemple d'utilisation de ce résultat est donné au chapitre 2 (§2.6.3 p81).

3 Résolution du problème inverse

3.1 Linéarités et non-linéarités du problème direct et du problème inverse

C'est la méthode d'estimation (§1.1 p7) qui fait correspondre une estimation $\hat{\beta}$ à un jeu de mesures Y^* . Les méthodes d'estimation les plus utilisées sont l'estimateur MLE et l'estimateur MAP. Dans ces deux cas, la solution $\hat{\beta}$ est obtenue en minimisant une fonction objectif.

La méthode pour minimiser cette fonctionnelle dépend des propriétés du problème inverse et notamment de sa linéarité ou de sa non-linéarité. L'objet de la première partie est de présenter ce que l'on entend par « système linéaire », par « problème direct linéaire » et « problème inverse linéaire ». Les deux sections suivantes présentent la méthode de minimisation lorsque le problème inverse est linéaire et lorsqu'il est non linéaire.

3.1.1 Les systèmes linéaires

On parle ici de système pour désigner un dispositif constitué d'un ensemble d'objets qui interagissent entre eux pour fournir un résultat suivant l'excitation appliquée au système. En faisant abstraction de son fonctionnement interne, un système est donc une boîte à laquelle on applique une *entrée* et qui donne une *sortie* (le résultat). Malgré l'utilisation du singulier, l'entrée et la sortie peuvent être des vecteurs.

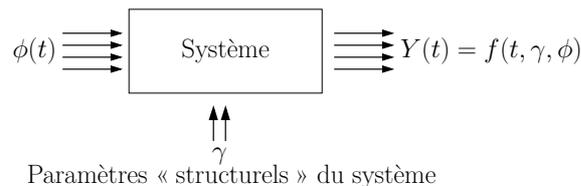


Figure 1.4 – Représentation d'un système

En thermique, un système peut désigner une expérience avec des sources et des mesures. Le comportement de ce système est représenté par des équations aux dérivées partielles, par des conditions aux limites et des conditions initiales. Les sorties sont souvent constituées d'une ou plusieurs mesures de température et les entrées sont souvent constituées des excitations thermiques du système.

Un système est dit « linéaire » si sa sortie dépend linéairement des entrées. Dans le cas d'un échantillon excité thermiquement par une condition limite de flux imposé, cela signifie que « si on chauffe deux fois plus » les écarts de température (les sorties) seront deux fois plus élevés.

De nombreux résultats des chapitres suivants sont obtenus en supposant les systèmes linéaires.

L'intérêt de ces systèmes est de permettre l'utilisation du principe de superposition et ainsi de calculer la réponse du système à une entrée instationnaire quelconque connaissant simplement la réponse impulsionnelle. De plus, comme on le verra dans les applications présentées par la suite, les calculs peuvent souvent être menés de façon analytique.

3.1.2 Le problème direct et le problème inverse

Le *problème direct* consiste à résoudre les équations du modèle qui relient les paramètres inconnus à estimer β aux observables Y . La notion de *problème direct* n'existe que par opposition au *problème inverse*. Par exemple, admettons que les inconnues β soient les propriétés thermo-physiques d'un matériau. On utilise tôt ou tard un modèle qui fait intervenir ces paramètres et qui va permettre de simuler les mesures. Le problème direct consiste à calculer les sorties (un champ de température ou seulement une partie) pour une valeur fixée des paramètres β .

3.1.3 Le problème inverse

Le problème inverse peut être linéaire ou non-linéaire indépendamment de la linéarité ou de la non-linéarité du problème direct. On dit que le problème inverse est linéaire lorsque les sorties du modèle dépendent linéairement des paramètres β par l'intermédiaire d'une matrice X indépendante de β , c'est à dire lorsque l'on peut écrire :

$$Y = [Y_1 \ Y_2 \ \dots \ Y_m]^T = X\beta \quad (1.64)$$

La matrice X est de dimension $m \times n_\beta$ et est appelée *matrice des sensibilités* par rapport à β . Ses composantes, les coefficients de sensibilité, correspondent à la dérivée des sorties du modèle par rapport aux paramètres β . Autrement dit, les sensibilités traduisent l'effet d'une petite modification d'un paramètre sur les sorties du modèle en gardant constant les autres paramètres :

$$X_{i,j} = \left. \frac{\partial Y_i}{\partial \beta_j} \right)_{\beta_k, k \neq j} \quad (1.65)$$

La matrice X s'écrit donc :

$$X = \begin{bmatrix} \frac{\partial Y_1}{\partial \beta_1} & \frac{\partial Y_1}{\partial \beta_2} & \cdots & \frac{\partial Y_1}{\partial \beta_{n_\beta}} \\ \frac{\partial Y_2}{\partial \beta_1} & \frac{\partial Y_2}{\partial \beta_2} & \cdots & \frac{\partial Y_2}{\partial \beta_{n_\beta}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial Y_m}{\partial \beta_1} & \frac{\partial Y_m}{\partial \beta_2} & \cdots & \frac{\partial Y_m}{\partial \beta_{n_\beta}} \end{bmatrix} \quad (1.66)$$

On peut aussi définir la matrice des sensibilités par rapport à d'autres paramètres, par exemple γ . On utilise alors la notation X_γ et X_β pour lever toute ambiguïté sur la matrice dont il est

question. Lorsque la confusion n'est pas possible, il arrive qu'on utilise X pour désigner X_β .

Lorsque le problème est non-linéaire par rapport à β , l'équation entre Y et β (Eq.1.64) n'est plus valable, mais on peut toujours définir la matrice des sensibilités locales en un point β_0 :

$$Y(\beta) = Y(\beta_0) + X(\beta_0) (\beta - \beta_0) \quad (1.67)$$

La matrice X , ou plus généralement $X(\beta_0)$, est utilisée dans la suite à de nombreuses reprises, et notamment (§4 p41) pour évaluer l'incertitude des estimations $\hat{\beta}$. On verra également (§5 p52) qu'elle permet de vérifier, dans une certaine mesure, que le problème inverse est bien-posé.

Importance de la paramétrisation

Si l'on considère le problème suivant, consistant à estimer la pulsation le déphasage ϕ et l'amplitude A du modèle suivant :

$$f(t, \underbrace{\phi, A}_\beta, \underbrace{\omega}_\gamma) = A \cos(\omega t + \phi)$$

Le problème inverse est visiblement non-linéaire étant donnée la présence de la fonction cosinus. Cependant, en utilisant l'identité trigonométrique adaptée, on obtient la formulation suivante :

$$\begin{aligned} f(t, \beta, \gamma) &= A \cos(\phi) \cos(\omega t) - A \sin(\phi) \sin(\omega t) \\ &= K_1 \cos(\omega t) - K_2 \sin(\omega t) \end{aligned}$$

Le problème inverse est maintenant linéaire! Une fois K_1 et K_2 estimés, on obtient aisément la solution A et ϕ . L'estimateur MLE étant invariant par changement de variable, la solution obtenue est identique. La situation est différente avec l'estimateur MAP. En pratique, on n'est pas face à des problèmes aussi académiques, mais il arrive qu'un changement de variable simplifie la résolution d'un problème en simplifiant la forme de la fonctionnelle associée à la méthode d'estimation utilisée.

3.2 Problèmes inverses linéaires

Que l'on utilise la méthode des moindres carrés, MLE ou MAP, la fonction objectif peut être mise sous la forme suivante :

$$J(\beta) = (Y^* - Y(\beta))^T W (Y^* - Y(\beta)) + (\tilde{\beta} - \beta)^T Q (\tilde{\beta} - \beta) \quad (1.68)$$

Avec $W = [\text{cov}(Y^*|\beta)]^{-1}$ et Q une matrice relative à la densité a priori $p(\beta)$ dans le cas de la méthode MAP (§2.7 p29) ou relative à une méthode de régularisation. Lorsqu'on utilise les moindres-carrés ordinaires, on a $W = I$ et $Q = 0$. Avec la méthode MLE, on a simplement

$Q = 0$.

Comme le problème inverse est supposé linéaire, les sorties du modèle Y dépendent linéairement des inconnues β :

$$Y = X\beta \quad (1.69)$$

La fonctionnelle $J(\beta)$ (Eq.1.68) s'écrit dans ces conditions :

$$J = (Y^* - X\beta)^T W (Y^* - X\beta) + (\tilde{\beta} - \beta)^T Q (\tilde{\beta} - \beta) \quad (1.70)$$

Il s'agit donc d'une forme quadratique ($\mathbb{R}^{n_\beta} \rightarrow \mathbb{R}$), c'est à dire « une parabole en dimension quelconque ». En effet, en développant l'expression, on obtient l'expression d'un parabolôïde :

$$J = \underbrace{Y^{*T} W Y^* + \tilde{\beta}^T Q \tilde{\beta}}_A - \underbrace{(2Y^{*T} W X + 2\tilde{\beta}^T Q)}_B \beta + \beta^T \underbrace{(X^T W X + Q)}_C \beta \quad (1.71)$$

$$= A + B\beta + \beta^T C\beta \quad (1.72)$$

Cette dernière expression montre que la fonctionnelle que l'on obtient avec ces estimateurs est particulièrement simple. Il s'agit d'une fonction quadratique possédant un unique minimum si la matrice Hessienne $C = X^T W X + Q$ est définie-positive²³. Quant à la solution $\hat{\beta}$ qui minimise $J(\beta)$, on peut l'obtenir de manière explicite en cherchant le zéro de son gradient. Comme C est une matrice symétrique, on a :

$$\nabla J = \frac{\partial J}{\partial \beta} = B^T + 2C\beta = 0 \quad \implies \quad \hat{\beta} = -\frac{1}{2}C^{-1}B^T \quad (1.73)$$

Finalement, la solution $\hat{\beta}$ est obtenue à l'aide de l'expression suivante :

$$\hat{\beta} = [X^T W X + Q]^{-1} [Q \tilde{\beta} + X^T W Y^*] \quad (1.74)$$

3.3 Problèmes inverses non-linéaires

Lorsque le problème inverse est non-linéaire, les choses se compliquent considérablement puisque la solution $\hat{\beta}$ ne peut plus être obtenue de manière explicite et le minimum doit être cherché à l'aide d'un algorithme d'optimisation.

Il est difficilement envisageable de créer une classification unique permettant de « mettre de l'ordre » dans tous les algorithmes existant, tant le sujet est vaste et étant donné les nombreux critères permettant de classer les algorithmes. Cependant, il existe quelques classifications

23. Une matrice est définie-positive si et seulement si toutes ses valeurs propres sont strictement positives.

communément admises de ces algorithmes. On distingue ainsi :

Les algorithmes de recherche locale et de recherche globale : Les algorithmes de recherche locale convergent vers un minimum local à partir d'un point d'initialisation alors que les algorithmes de recherche globale sont théoriquement capable de trouver le minimum global d'une fonction possédant des minimums locaux.

Les algorithmes d'ordre 0, d'ordre 1 (et supérieur) : Les algorithmes d'ordre 1 calculent le gradient de la fonction pour orienter la recherche vers le minimum. Les algorithmes d'ordre 0 n'utilisent que la valeur de la fonctionnelle.

Les algorithmes stochastiques et les algorithmes déterministes : Les algorithmes déterministes donnent toujours le même résultat lorsque les paramètres d'entrées sont identiques alors que les algorithmes stochastiques s'appuient sur le hasard pour trouver le minimum de la fonction. D'une exécution à l'autre, le résultat est donc différent.

Les algorithmes à base de population ou à individu unique : Les algorithmes à individu unique comme les algorithmes de gradient ou de Simplex [19, 20], ne manipulent qu'une seule solution (on parle aussi de candidat) qu'ils améliorent de manière itérative. Dans les algorithmes à base de populations, comme les Algorithmes Génétiques et les Essais Particulaires (voir §3 p238), on manipule un ensemble de candidats simultanément.

Les algorithmes dits stochastiques ou globaux, présentés par la suite, sont aussi appelés « métaheuristiques » (voir §3 p238). Cependant, sur les problèmes inverses que nous avons traités, ces algorithmes ne sont pas adaptés. Ils seront présentés plus en détails dans le chapitre traitant de la conception optimale d'expérience, c'est à dire là où leur utilisation est davantage justifiée. D'expérience, ils sont effectivement beaucoup moins performants que des algorithmes de type gradient pour les problèmes d'estimation de paramètres.

3.3.1 Les algorithmes d'ordre 1

En estimation de paramètres, les algorithmes les plus souvent utilisés jusqu'à maintenant sont les algorithmes de *type gradient*. Il s'agit d'algorithmes de recherche locale, déterministes, itératifs et d'ordre 1. Ils s'appuient sur le gradient de la fonction objectif $J(\beta)$ pour orienter la recherche vers le minimum. Le gradient d'une fonction donne en effet la direction de plus grande pente. Ainsi, la direction opposée au gradient correspond à la direction où la fonctionnelle diminue (localement) le plus vite. L'algorithme cherche alors dans cette direction le minimum de la fonction puis calcule à nouveau le gradient pour déterminer la nouvelle direction de recherche. Le processus est donc itératif et suit la relation de récurrence suivante :

$$\beta^{k+1} = \beta^k - \mu_k \nabla J(\beta_k) \quad (1.75)$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} \beta_k & \text{Estimation des paramètres } \beta \text{ à l'itération } k. \\ \mu_k & \text{Pas de déplacement dans la direction opposée au gradient } (\mu_k > 0) . \\ \nabla J & \text{Gradient de } J. \end{cases}$$

Remarque sur l'initialisation de ces algorithmes

L'inconvénient de ces algorithmes est leur sensibilité à l'initialisation β_0 . En effet, lorsque la fonctionnelle contient plusieurs minimums locaux, l'algorithme peut converger vers un minimum local si l'initialisation l'y conduit. Toutefois, cela est véritablement un problème si on ne peut pas le détecter facilement. Considérons un problème d'estimation de paramètres pour lequel la fonction objectif associée à l'estimateur a plusieurs minimums locaux. Dans la plupart des cas, une convergence prématurée vers une mauvaise solution est immédiatement visible puisque les sorties du modèle ne devraient pas coïncider avec les mesures. Si elles coïncident alors que la solution est visiblement fautive, cela signifie que le problème est mal posé et possède plusieurs solutions. Cependant, on peut anticiper en général ces situations lors de l'analyse des sensibilités (Voir §5 p52).

3.3.2 Les algorithmes d'ordre supérieur

Les algorithmes de gradient d'ordre 1, dits algorithmes de plus grande pente, n'utilisent que le gradient pour minimiser la fonction objectif. Dans de nombreux cas, l'utilisation seule du gradient requiert un nombre important d'itérations pour converger vers un minimum, c'est pourquoi ces algorithmes sont de moins en moins utilisés aujourd'hui.

Les algorithmes d'ordre 2 sont des algorithmes qui utilisent non seulement le gradient mais aussi la dérivée seconde, le Hessien, de $J(\beta)$. Ainsi, dans le cas d'une fonction quadratique, un algorithme d'ordre 2 est capable de trouver le minimum en une seule itération (voir exemple). Les fonctions que l'on traite ne sont pas quadratiques mais elles tendent à le devenir en s'approchant de plus en plus du minimum. Alors que les algorithmes d'ordre 1 sont lents au voisinage de la solution, les algorithmes d'ordre supérieur convergent très rapidement puisque le paraboloïde osculateur « colle » de mieux en mieux à la solution. Les algorithmes d'ordre 2 sont en effet capables de déterminer le minimum d'une fonction quadratique en une seule itération. La relation de récurrence entre les paramètres β à l'itération k et à l'itération $k + 1$ est de la forme suivante :

$$\beta^{k+1} = \beta^k - \mu_k A_k d_k \tag{1.76}$$

$$\text{Avec } \begin{cases} \beta_k & \text{Estimation des paramètres } \beta \text{ à l'itération } k. \\ \mu_k & \text{Pas de déplacement dans la direction opposée au gradient.} \\ A_k & \text{Matrice déterminée par l'algorithme.} \\ d_k & \text{Direction de descente déterminée par l'algorithme.} \end{cases}$$

De plus, au voisinage de la solution, l'algorithme ne calcule pas le Hessien, puisque cela serait trop coûteux en temps de calcul, mais il utilise une approximation. Ces algorithmes sont ainsi

qualifiés de « pseudo-ordre 2 ». Il existe plusieurs méthodes pour effectuer cette approximation. L'algorithme de « Levenberg-Marquardt » exploite les sensibilités du modèle par rapport à β pour l'estimer. L'algorithme de Levenberg-Marquardt est ainsi dédié aux problèmes de type moindres-carrés, où l'on compare des sorties d'un modèle et des mesures. Il n'est pas applicable dans le cas général à une fonction $J(\beta)$ car il s'appuie sur les sensibilités du modèle pour approximer le Hessien. Les sensibilités du modèle n'ont un sens que si on peut définir les sorties du modèle. On peut également citer les méthodes BFGS et DFP [21] qui utilisent une approximation du Hessien, basées elles, sur les évaluations du gradient des itérations précédentes.

Exemple

Soit β_0 la position actuelle. Si $J(\beta)$ est quadratique, la connaissance de $\frac{\partial J}{\partial \beta}(\beta_0)$ et de $\frac{\partial^2 J}{\partial \beta^2}(\beta_0)$ suffit pour identifier directement la position du minimum $\hat{\beta}$. Soit A la matrice $n_\beta \times n_\beta$ associée et C une constante, on a :

$$\begin{aligned} J(\beta_0) &= (\hat{\beta} - \beta_0)^T A(\hat{\beta} - \beta_0) + C \\ \frac{\partial J}{\partial \beta}(\beta_0) &= -2A^T(\hat{\beta} - \beta_0) = -2A(\hat{\beta} - \beta_0) \\ \frac{\partial^2 J}{\partial \beta^2}(\beta_0) &= 2A \end{aligned}$$

Les deux dernières relations permettent d'exprimer $\hat{\beta} - \beta_0$:

$$\hat{\beta} - \beta_0 = - \left[\frac{\partial^2 J}{\partial \beta^2} \right]^{-1} \frac{\partial J}{\partial \beta} \implies \hat{\beta} = \beta_0 - \left[\frac{\partial^2 J}{\partial \beta^2} \right]^{-1} \frac{\partial J}{\partial \beta}$$

On obtient donc la solution $\hat{\beta}$ en fonction de la position actuelle, du Hessien et du gradient.

4 Incertitudes, erreurs et résidus

La solution obtenue par un estimateur, n'a de sens que si on peut lui associer une incertitude pour savoir dans quelle mesure les valeurs obtenues sont dignes de confiance.

4.1 Les sources d'incertitudes dans un problème inverse

De façon à estimer l'incertitude sur les paramètres estimés, il est tout d'abord nécessaire d'identifier les différentes origines de ces incertitudes ([3, p.566] et [14]). La figure (Fig.1.5) présente les différentes parties du processus d'inversion :

1. A partir d'un *dispositif expérimental*, on mesure des grandeurs physiques par l'intermédiaire de capteurs qui fournissent en général une *tension électrique*.
2. La conversion dans l'unité de la grandeur physique n'est possible que par l'utilisation *d'une loi d'étalonnage* obtenue après la calibration du capteur dans un environnement contrôlé.

Ces grandeurs physiques, appelés *mesures*, subissent alors un possible traitement destiné à calculer les *observables* Y^* .

3. Une fois que l'expérience est réalisée et que l'on dispose de ces observables, la solution $\hat{\beta}$ est obtenue avec la méthode d'estimation.

A chacune de ces étapes, des sources d'incertitude viennent perturber le processus d'estimation et introduisent des erreurs sur la solution :

Le bruit de mesure : Dès que l'on utilise des capteurs pour mesurer une grandeur physique, les signaux électriques à la sortie de ces capteurs sont bruités.

Les erreurs sur les paramètres supposés connus γ et les erreurs d'étalonnage : La solution $\hat{\beta}$ peut se retrouver biaisée si des erreurs sur les paramètres supposés connus γ existent. Les erreurs d'étalonnage sont assez similaires si les erreurs portent sur les paramètres que cette loi fait intervenir.

Les erreurs numériques : Les erreurs numériques désignent les erreurs de résolution des modèles. Il ne s'agit pas des erreurs dues à la précision numérique finie des ordinateurs, qui est souvent bien suffisante pour nos problèmes, mais des erreurs dues au schéma numérique utilisé, à la troncature des séries infinies, au calcul des transformées inverses de Laplace, ...

Erreur d'hypothèse : Elles sont les plus difficiles à corriger. Elles peuvent être détectées par une analyse des résidus (§4.5 p49) mais il peut être difficile d'identifier leurs causes. Toutes les hypothèses que l'on peut effectuer lorsque l'on définit un modèle ne sont ni fausses ni vraies en soi, mais elles sont plus ou moins adaptées à la situation. Il est aussi possible de faire volontairement des hypothèses fortes, voir parfois excessives, de façon à simplifier le problème quitte à biaiser la solution tant que les erreurs restent acceptables au vue de l'objectif.

4.2 Influence du bruit de mesure

4.2.1 Origine du bruit de mesure

Le signal électrique délivré par un capteur est toujours perturbé par des signaux parasites que l'on désigne sous le terme de « bruit ». Des perturbations se superposent au signal à mesurer à toutes les étapes d'une chaîne de mesure [22] : capteur, électronique, ligne de transmission. On peut distinguer deux types de perturbations : les fluctuations aléatoires et les dérives. Les deux se distinguent par leur temps caractéristique très différent.

Les fluctuations sont dites « aléatoires » étant donné leur caractère imprévisible. Ces fluctuations sont très rapides vis à vis de la période d'acquisition de la mesure et ont généralement

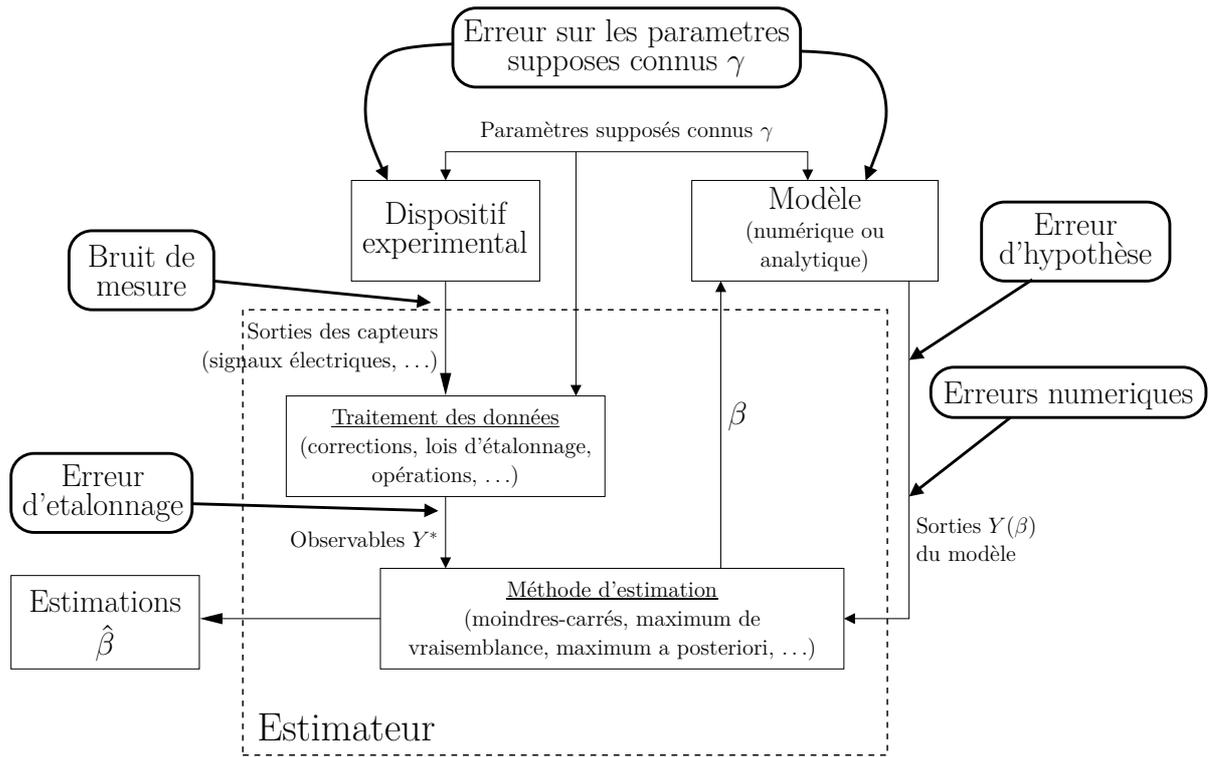


Figure 1.5 – Les sources d’incertitudes dans les problèmes inverses

leur origine dans la nature granulaire de la matière (et du rayonnement) et dans l’agitation thermique des particules. Ces fluctuations fixent une borne inférieure à la précision que l’on peut obtenir car elles ne sont pas du ressort de l’expérimentateur mais sont propres à la nature des choses.

Fluctuations provoquées par une physique non continue à l’échelle d’observation :

Toute grandeur physique (température, pression, luminance, etc. . .) n’est qu’une représentation mathématique et n’existe pas en tant que telle dans la nature. Par exemple, la notion de température n’existe pas toujours. Elle mesure l’agitation thermique (par nature « aléatoire ») d’un petit volume de fluide ou de matière. Lorsque ce volume devient trop petit, la température ne peut plus être définie. De même, la pression quantifie seulement la force exercée par les particules d’un fluide sur une paroi. Or le nombre de particules venant frapper cette paroi par unité de temps est lui aussi aléatoire. Ou encore, la luminance d’une surface est liée à la puissance radiative émise par un corps, c’est à dire le nombre de photons émis. Or ce nombre de photons émis est aléatoire (bruit photonique).

Perturbations dues à l’électronique de mesure :

La grandeur physique est également altérée le long de la chaîne de mesure. Par exemple, tous les composants d’un circuit électronique sont des générateurs d’un bruit thermique. Il est causé par l’agitation thermique des électrons qui génère une petite tension électrique aléatoire.

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

De plus, le caractère isolant ou conducteur d'un matériau dépend du nombre d'électrons dans la bande de conduction, c'est à dire des électrons qui ne sont plus rattachés à un atome en particulier et qui sont donc libres de se déplacer. Or ce nombre d'électrons dans la bande de conduction est aléatoire. Du fait de l'agitation, certains électrons quittent la bande de conduction pour rejoindre la bande de valence d'un atome pendant que d'autres font le chemin inverse.

Ainsi, tous les capteurs basés sur une variation de résistance ou de tension sont victimes du bruit thermique (par exemple les capteurs photoconductifs et photovoltaïques des caméras infrarouges). On peut cependant diminuer ce bruit dans des proportions considérables en diminuant la température. Par exemple, dans de nombreux modèles de caméra infrarouge, les capteurs qui « comptent » les photons incidents sont refroidis à $77\text{ K} = -196,15\text{ }^\circ\text{C}$.

On peut aussi citer le bruit électronique (le bruit des électrons), appelé aussi bruit quantique, bruit Schottky ou bruit de grenaille. Ce bruit est incompressible car lié à la nature quantifiée des charges électriques. Or comme pour les photons, l'intensité du courant électrique est variable puisque le nombre d'électrons qui traverse une paroi donnée n'est pas constant dans le temps.

Perturbations d'origine extérieure :

Les bruits cités précédemment sont internes au système de mesure. Mais des perturbations générées par l'environnement de la chaîne de mesure existent également. On peut ainsi citer [23] : la variation de tension d'alimentation, l'interaction des champs électromagnétiques sur les composants et circuits non blindés, les effets électrostatiques...

Les fluctuations de température des composants jouent également un rôle important. Cette variation n'est pas seulement générée par la variation de température ambiante, mais aussi par l'échauffement des composants eux mêmes. En effet, tous les composants électriques résistifs dissipent de la chaleur par effet joule. Les composants chauffent et voient donc leurs propriétés changer avec des temps caractéristiques qui peuvent être très voisins de ceux d'une expérience. C'est pourquoi, il est fréquent de laisser « chauffer » les instruments de mesure avant de pouvoir les utiliser de façon à ce que la température des composants internes atteigne le régime permanent.

4.2.2 Influence du bruit de mesure

La liste, non exhaustive, des perturbations précédentes peuvent se modéliser par une erreur e_i sur la mesure Y_i^* . Soit $E[Y_i]$ la valeur « exacte » de Y_i^* définie comme la moyenne de Y_i réalisée sur un nombre infini de réalisations. La mesure Y_i^* s'exprime alors comme la somme de la sortie du modèle $X\hat{\beta}$ (avec les paramètres exactes $\hat{\beta}$) et d'une perturbation :

$$Y_i^* = \mathbb{E}[Y_i^*] + e_i = X\hat{\beta} + e_i \quad (1.77)$$

Par nature, la perturbation e_i est « aléatoire ». A défaut de pouvoir évaluer cette grandeur, on décrit le comportement « en moyenne » avec des lois de probabilité. On suppose habituellement que e_i suit une loi de probabilité « gaussienne ». Il y a plusieurs raisons à cela [16] :

Une raison physique : En vertu du théorème centrale limite [5, 16]²⁴, la distribution gaussienne apparaît naturellement dans les phénomènes aléatoires et notamment lorsque l'on observe à l'échelle macroscopique un phénomène qui résulte de phénomènes microscopiques comme par exemple l'agitation thermique des atomes ou des électrons.

Une raison pratique : L'utilisation des lois gaussiennes est particulièrement pratique pour le développement des calculs, car toute transformation linéaire (et affine) de vecteur gaussien²⁵ est encore un vecteur gaussien.

Dans le cas d'un système linéaire, on a vu (Eq.1.74) que la solution $\hat{\beta}$ est explicite et l'expression est rappelée ici :

$$\hat{\beta} = [X^T W X + Q]^{-1} [Q\tilde{\beta} + X^T W Y^*]$$

Avec $W^{-1} = \text{cov}(Y^*|\beta) = \text{cov}(e)$ la matrice de variance-covariance du bruit de mesure, que l'on soit dans le cadre Bayésien ou non. La signification de Q^{-1} dépend du contexte. Dans le cadre Bayésien, il s'agit de la matrice de variance-covariance $Q^{-1} = \text{cov}(\tilde{\beta})$ associée à la densité de probabilité a priori $p(\tilde{\beta})$. Dans le cadre non Bayésien, Q peut être associée à une méthode de régularisation (par exemple la régulation de type Tikhonov [3, 5, 14]).

L'effet du bruit de mesure sur la dispersion numérique de l'estimation $\hat{\beta}$ peut être calculé en utilisant la décomposition Eq.1.77 :

$$\begin{aligned} \hat{\beta} &= [X^T W X + Q]^{-1} [Q\tilde{\beta} + X^T W (\mathbb{E}[Y_i^*] + e_Y)] \\ &= \underbrace{[X^T W X + Q]^{-1} [Q\tilde{\beta} + X^T W X \hat{\beta}]}_{\mathbb{E}[\hat{\beta}]} + \underbrace{[X^T W X + Q]^{-1} X^T W e_Y}_{e_{\hat{\beta}}} \\ &= \mathbb{E}[\hat{\beta}] + e_{\hat{\beta}} \end{aligned} \quad (1.78)$$

24. Le théorème centrale limite, ou théorème de la loi gaussienne limite, dit approximativement que sous certaines conditions, la somme d'un grand nombre de processus aléatoires indépendants se comporte comme une loi normale. Autrement dit, à défaut d'information supplémentaire, supposer que des perturbations suivent une loi normale est l'hypothèse la plus raisonnable.

25. Toutes les composantes suivent la loi gaussienne. On dit aussi que le vecteur suit une loi multinormale ou « multivariate normal distribution » [5, p.264]

L'effet du bruit de mesure sur l'estimation est modélisé par $e_{\hat{\beta}}$. Ce que l'on cherche à obtenir est bien sur $E[\hat{\beta}]$ mais cette valeur est inaccessible à cause de la présence du bruit e_Y . La seule chose que l'on peut faire est de regarder quelle est la dispersion de $e_{\hat{\beta}}$ pour avoir une idée de l'écart qu'il peut exister entre l'estimation $\hat{\beta}$ et son espérance²⁶ $E[\hat{\beta}]$.

Puisque e_Y est un vecteur Gaussien, $e_{\hat{\beta}}$ l'est également. Un vecteur Gaussien se caractérise par sa moyenne et sa matrice de variance-covariance. Par hypothèse, $E[e_Y] = 0$, donc $E[e_{\hat{\beta}}] = 0$. Comme $E[\hat{\beta}]$ est déterministe, la matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ est égale à la variance de sa perturbation $\text{cov}(e_{\hat{\beta}})$. En posant $F = X^T W X + Q$, on obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \text{cov}(e_{\hat{\beta}}) &= F^{-1} X^T W E[e_Y e_Y^T] W^T X F^{-1T} \\ &= F^{-1} X^T W \text{cov}(e_Y) W^T X F^{-1T} \end{aligned} \quad (1.79)$$

Or, par définition, $W = \text{cov}(Y^*|\beta)^{-1} = \text{cov}(e_Y)^{-1}$, $W^T = W$ et $F^{-1T} = F^{-1}$, d'où finalement :

$$\text{cov}(e_{\hat{\beta}}) = [X^T W X + Q]^{-1} X^T W X [X^T W X + Q]^{-1} \quad (1.80)$$

4.3 Incertitudes dues aux paramètres supposés connus

L'estimation de paramètres β à partir d'un modèle et d'une expérience fait intervenir de nombreux paramètres physiques (densité de flux de chaleur, température ambiante, dimension des différents éléments, loi d'étalonnage des capteurs, ...) que l'on ne cherche pas à estimer. Ces paramètres, notés précédemment γ , sont donc connus ou plus exactement supposés connus, et ne sont donc pas estimés par l'algorithme. Or une erreur sur ces paramètres peut avoir un effet important sur l'estimation.

Dans le reste de cette section, la signification des vecteurs β et γ dépend de la méthode d'estimation d'utilisée :

Méthode MLE : β correspond aux paramètres recherchés et γ correspond à tous les paramètres du modèle. Par défaut, la matrice Q n'intervient pas dans la méthode du maximum de vraisemblance mais peut apparaître lorsque l'on utilise une méthode de régularisation. C'est pourquoi, on la suppose non nulle dans la suite de cette section.

Méthode MAP : β ne correspond pas seulement aux paramètres recherchés mais inclut aussi certains paramètres du modèle. γ correspond aux autres paramètres du modèle supposés parfaitement connus et qui ne sont donc pas estimés. En théorie, tous les paramètres du modèle devraient l'être (le vecteur γ serait donc vide) mais procéder ainsi peut devenir

26. Du fait de l'éventuelle information a priori, l'espérance $E[\hat{\beta}]$ n'est pas nécessairement égale à la valeur exacte β des paramètres.

relativement fastidieux.

De façon générale, β désigne ici les paramètres à estimer et γ les paramètres connus fixés. Pour déterminer l'influence d'une erreur de ces paramètres connus [3, p.662] sur $\hat{\beta}$, on procède de la même manière que pour le calcul de la variance : on considère le développement limité du modèle $Y(\beta, \gamma)$ du premier ordre au point $(\dot{\beta}, \dot{\gamma})$:

$$Y(\dot{\beta} + d\beta, \dot{\gamma} + d\gamma) = Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) + \underbrace{\frac{\partial Y}{\partial \beta}(\dot{\beta}, \dot{\gamma})}_{X_\beta} d\beta + \underbrace{\frac{\partial Y}{\partial \gamma}(\dot{\beta}, \dot{\gamma})}_{X_\gamma} d\gamma \quad (1.81)$$

Pour évaluer l'erreur $d\beta$ sur l'estimation $\hat{\beta}$ due à $d\gamma = \gamma - \dot{\gamma}$, on peut remplacer le modèle $Y(\beta, \gamma)$ par son développement au premier ordre dans la fonction objectif $J(\beta, \gamma)$ (Eq.1.70) :

$$J_{(\beta, \gamma)} = \left(Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) - X_\beta(\beta - \dot{\beta}) - X_\gamma(\gamma - \dot{\gamma}) \right)^T W (\dots) + (\tilde{\beta} - \beta)^T Q (\tilde{\beta} - \beta)$$

Le modèle est maintenant linéaire par rapport β . De plus, X_γ et X_β ont été évaluées au point $(\dot{\beta}, \dot{\gamma})$ et ne dépendent donc pas de β . La solution est donc explicite :

$$\hat{\beta}(\gamma) = \left[X_\beta^T W X_\beta + Q \right]^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X_\beta^T W \left(Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) + X_\beta \dot{\beta} - X_\gamma(\gamma - \dot{\gamma}) \right) \right] \quad (1.82)$$

On peut maintenant déterminer l'erreur systématique $d\hat{\beta}$:

$$d\hat{\beta} = E \left[\hat{\beta}(\dot{\gamma} + d\gamma) - \hat{\beta}(\dot{\gamma}) \right] = - \left[X_\beta^T W X_\beta + Q \right]^{-1} X_\beta^T W X_\gamma d\gamma \quad (1.83)$$

Lorsque les sensibilités aux paramètres β et γ sont orthogonales, alors une erreur sur γ n'engendre aucune erreur sur β . Cette expression permet donc d'évaluer l'influence des différents paramètres connus du modèle. Elle est essentielle car dans de nombreux cas, l'effet du bruit de mesure est négligeable. L'utilisation de la seule relation (Eq.1.80), ce que l'on fait généralement, conduit souvent à sous-estimer l'incertitude des estimations. Ce problème est abordé plus en détails au chapitre 2.

On peut également s'intéresser aux résidus r entre les observables et le modèle pour les paramètres $\beta = \hat{\beta}(\dot{\gamma} + d\gamma)$, c'est à dire pour les paramètres estimés avec un modèle biaisé à cause de $d\gamma$. On utilise là encore le développement au premier ordre du modèle (Eq.1.81) :

$$\begin{aligned} r &= Y^* - Y(\hat{\beta}(\dot{\gamma} + d\gamma), \dot{\gamma} + d\gamma) \\ &= Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) - X_\beta(\hat{\beta}(\dot{\gamma} + d\gamma) - \dot{\beta}) - X_\gamma d\gamma \end{aligned}$$

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

On pose $F = X_\beta^T W X_\beta + Q$ et $H = X_\beta F^{-1} X_\beta^T W$. En remplaçant ensuite $\hat{\beta}_{(\dot{\gamma}+e_\gamma)}$ par son expression (Eq.1.82), on a :

$$\begin{aligned}
 r &= Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) - X_\beta \left[F^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X_\beta^T W (Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) + X_\beta \dot{\beta} - X_\gamma d\gamma) \right] - \tilde{\beta} \right] - X_\gamma d\gamma \\
 &= Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) - X_\beta F^{-1} Q \tilde{\beta} - H(Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma})) - H X_\beta \dot{\beta} + H X_\gamma d\gamma + X_\beta \dot{\beta} - X_\gamma d\gamma \\
 &= [\mathbf{I} - H](Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma})) - X_\beta F^{-1} Q \tilde{\beta} + [\mathbf{I} - H] X_\beta \dot{\beta} - [\mathbf{I} - H] X_\gamma d\gamma \\
 &= [\mathbf{I} - H](Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) + X_\beta \dot{\beta} - X_\gamma d\gamma) - X_\beta F^{-1} Q \tilde{\beta}
 \end{aligned}$$

En remarquant que :

$$H X_\beta \dot{\beta} = X_\beta F^{-1} X_\beta^T W X_\beta \dot{\beta} + (X_\beta F^{-1} Q \dot{\beta} - X_\beta F^{-1} Q \dot{\beta}) = X_\beta \dot{\beta} - X_\beta F^{-1} Q \dot{\beta}$$

On obtient finalement :

$$r = \underbrace{[\mathbf{I} - H](Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}))}_{\text{Composante aléatoire}} - \underbrace{[\mathbf{I} - H] X_\gamma d\gamma}_{\text{Paramètres supposés connus}} + \underbrace{X_\beta F^{-1} Q (\dot{\beta} - \tilde{\beta})}_{\text{Information a priori}} \quad (1.84)$$

A partir de cette expression, qui est la plus générale dans cette étude, on peut déterminer les biais systématiques des résidus en appliquant l'opérateur moyenne :

$$E[r] = -[\mathbf{I} - H] X_\gamma d\gamma + X_\beta F^{-1} Q (\dot{\beta} - \tilde{\beta}) \quad (1.85)$$

Lorsque l'on fait tendre (dans le cadre Bayésien) les écarts-types de la densité de probabilité a priori $p(\dot{\beta})$ vers l'infini, alors l'inverse de la matrice de variance-covariance Q tend vers 0, on a ainsi :

$$E[r] = -[\mathbf{I} - \underbrace{X_\beta F^{-1} X_\beta^T W}_H] X_\gamma \underbrace{(\gamma - \dot{\gamma})}_{d\gamma} \quad (1.86)$$

Dans le cadre non-Bayésien, on obtient le même résultat si aucune régularisation n'est utilisée. Les deux expressions (Eq.1.85) et (Eq.1.86) montrent que les résidus ne sont plus centrés en 0. Une des applications de l'expression (Eq.1.86) est proposée dans [3, p.336]. L'objectif est d'estimer les biais e_γ (à l'issue de l'estimation) à partir des résidus.

4.4 Influence de l'information a priori sur les résidus

Dans le contexte des probabilités Bayésiennes, la densité de probabilité associée à un paramètre est une mesure de l'information dont on dispose sur ce paramètre. L'estimateur MAP permet d'introduire de l'information a priori dans le processus d'estimation. Cela permet entre autre, d'ajouter des paramètres supposés connus dans la liste des paramètres à estimer sans pour autant dégrader la qualité de l'estimation. En utilisant la loi normale pour « modéliser

notre information », on a montré que les résidus sont donnés par l'expression (Eq.1.84). En calculant l'espérance des résidus, on constate que l'information a priori biaise le modèle puisque les résidus sont signés :

$$E[r] = X [X^T W X + Q]^{-1} Q (\dot{\beta} - \tilde{\beta})$$

Le biais de modèle introduit par l'information a priori est relativement limité si $X^T W X$ a plus de poids que Q et est nul lorsque les valeurs a priori sont égales aux valeurs exactes. De plus, dans certaines conditions, ce biais tend vers 0 lorsque le nombre de mesures augmente, contrairement aux biais dus aux erreurs sur paramètres supposés connus qui tendent généralement vers une constante (Eq.1.86) qui n'est pas nécessairement nulle.

4.5 Erreurs de modèle et analyse des résidus

4.5.1 Signature des résidus

Quelle que soit l'origine des erreurs de modèle, elles laissent généralement une signature dans les résidus. Un bon modèle est capable de reproduire parfaitement la composante déterministe des observables mais n'est généralement pas capable de reproduire le bruit lorsque le problème est sur-déterminé.

Des résidus signés signifient que le modèle est biaisé, mais si les résidus sont non-signés, on ne peut rien dire : le modèle peut être biaisé ou non. Ce peut être le cas avec les problèmes d'estimation de condition limite (voir Chap.3) où les paramètres à estimer peuvent compenser les erreurs de modèle. C'est cependant moins probable dans le cas d'un problème d'estimation de paramètres thermophysiques, car le nombre de degrés de liberté est beaucoup plus faible.

Bien que les observables et les résidus soient liés, ils peuvent avoir des caractéristiques statistiques différentes. Généralement, les résidus sont corrélés, et ce, même si les observables ne le sont pas. La corrélation des résidus est intrinsèque à la méthode d'estimation et ne peut pas être évitée. De même, si les observables ont la même variance, ce n'est généralement pas le cas des résidus.

Toutefois, si l'estimateur est linéaire et si le bruit suit une loi gaussienne de moyenne nulle, alors les résidus doivent en faire de même. Le critère permettant alors de déceler une erreur de modèle est la présence de résidus non centrés, c'est à dire pour lesquels la moyenne d'ensemble (sur les réalisations) est non nulle.

4.5.2 Résidus normalisés et résidus studentisés

Les résidus « classiques » sont définis comme étant l'écart entre les sorties du modèle Y et les observables Y^* . Il existe aussi les résidus normalisés z , obtenus en divisant les résidus r par une estimation globale de leur écart-type :

$$z_i = \frac{r_i}{\sqrt{\text{MSE}}} \quad \text{avec} \quad \text{MSE} = \frac{1}{m} \sum r_i^2 \quad (1.87)$$

Cependant, cette approche perd de son sens lorsque les écarts-types des résidus sont très inhomogènes. Dans la section suivante (§4.5.3 p50), on montre effectivement que les résidus r_i n'ont généralement pas le même écart-type, si bien qu'il n'est pas toujours pertinent de les normaliser avec le MSE. De manière à pouvoir analyser les résidus et les comparer, il est préférable d'utiliser les résidus standardisés ou studentisés²⁷ e (« studentized residuals ») calculés en divisant les résidus r_i par leur écart-type σ_{r_i} :

$$e_i = \frac{r_i}{\text{std}(r_i)} \quad (1.88)$$

L'écart-type $\text{std}(r_i)$ du résidu r_i peut être calculé avec la relation (Eq.1.91) présentée ci-dessous. On a alors :

$$e_i = \frac{r_i}{\sqrt{\text{cov}(r)_{i,i}}} = \frac{r_i}{\sqrt{\{(\mathbf{I} - H)W^{-1}(\mathbf{I} - H)^T\}_{i,i}}} \quad (1.89)$$

4.5.3 Ecart-type des résidus

Pour calculer les écarts-types des résidus, on suppose ici que le modèle $Y(\beta)$ est linéaire ou a été linéarisé autour d'une solution. Si le modèle est sans erreur, alors l'expression des résidus s'obtient à partir de la relation (Eq.1.84) :

$$r = [\mathbf{I} - H](Y^* - Y(\hat{\beta}, \hat{\gamma})) + X_\beta F^{-1} Q (\hat{\beta} - \tilde{\beta}) \quad (1.90)$$

La matrice de variance-covariance $\text{cov}(r)$ caractérise alors la dispersion numérique des résidus :

$$\text{cov}(r) = (\mathbf{I} - H)W^{-1}(\mathbf{I} - H)^T \quad (1.91)$$

Hypothèse d'homoscédasticité et aucune information a priori :

Avec l'hypothèse d'homoscédasticité et aucune information a priori $Q = 0$, on a :

$$W^{-1} = \text{cov}(e) = \sigma_m^2 \mathbf{I} \quad \text{et} \quad H = X [X^T X]^{-1} X^T$$

27. Il existe deux versions des résidus studentisés appelés « résidus studentisés internes » et « résidus studentisés externes ». Les premiers sont calculés comme détaillé ici, alors que pour les seconds, le résidu e_i est calculé en excluant l'observable i .

La matrice de variance-covariance des résidus (Eq.1.91) est maintenant :

$$\begin{aligned}
 \text{cov}(r) &= (\mathbf{I} - H) \text{cov}(Y^*) (\mathbf{I} - H)^T \\
 &= \sigma_m^2 (\mathbf{I} - H) (\mathbf{I} - H) && H \text{ est symétrique} \\
 &= \sigma_m^2 (\mathbf{I} - H) && H \text{ est idempotente}
 \end{aligned} \tag{1.92}$$

Plusieurs remarques à propos de cette expression :

1. Même si les observables sont indépendants, ce n'est pas nécessairement le cas des résidus. Ils sont en réalité toujours (ou presque) corrélés.
2. Les écarts-types des résidus ne sont pas uniformes même si l'on fait l'hypothèse d'homoscédasticité.
3. L'écart-type des résidus est toujours inférieur à l'écart-type des erreurs de mesures puisque tous les coefficients diagonaux de H sont positifs. En effet, $[X^T X]^{-1}$ est une matrice définie positive si bien que $\forall u \in \mathbb{R}^{n_\beta}$, $u^T [X^T X]^{-1} u > 0$. Avec u la $i^{\text{ème}}$ colonne de X^T , on montre que $H_{i,i}$ est positif.

Cas de la moyenne

Il existe un cas trivial pour lequel il est aisé de voir que les résidus ne se comportent pas de la même manière que les erreurs de mesure : On cherche à estimer la moyenne μ d'un ensemble de m mesures Y^* identiquement distribuées avec l'écart-type σ_m . Le modèle correspondant est le suivant :

$$Y = X \mu \quad \text{avec} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{m \times 1}$$

$$\text{Avec} \quad \begin{cases} X^T X = m \\ X X^T = \mathbf{1}_{m,m} \end{cases} \implies H = X [X^T X]^{-1} X^T = \frac{1}{m} \mathbf{1}_{m,m}$$

$\mathbf{1}_{m,m}$ désigne une matrice remplie de 1 de dimension $m \times m$. Les coefficients diagonaux de $\text{cov}(r)$ sont donc :

$$\text{cov}(r)_{i,i} = \sigma_m^2 (1 - H_{i,i}) = \sigma_m^2 \frac{m-1}{m}$$

Lorsque le nombre m de mesures augmente, l'écart-type des résidus tend vers l'écart-type des mesures. A la limite inférieure, lorsqu'il n'y a qu'une seule mesure, le résidu est toujours nul car la moyenne est égale à la mesure. Pour autant, l'écart-type de la distribution de la moyenne n'est pas nul mais égal à σ_m :

$$\text{cov}(\mu) = \sigma_m^2 [X^T X]^{-1} = \frac{\sigma_m^2}{m}$$

On peut également calculer les termes hors-diagonaux de $\text{cov}(r)$:

$$\text{cov}(r)_{i,j} = -\frac{\sigma_m^2}{m} \quad \text{avec} \quad i \neq j$$

Les coefficients hors-diagonaux sont non nuls, donc les résidus sont corrélés. Par ailleurs, le niveau de corrélation diminue avec le nombre de mesures m et tend vers 0 quand m tend vers l'infini.

5 Problèmes mal-posés

Cette section présente la notion de « problème mal-posé » et de « problème bien-posé ». Le caractère mal-posé est sans doute une caractéristique des problèmes inverses. Les problèmes directs sont en effet généralement bien-posés.

Certains résultats théoriques sont tout d'abord rappelés dans une première section. On présente ensuite quelques méthodes de diagnostic permettant d'anticiper le caractère mal-posé d'un problème inverse en insistant sur l'une d'entre elle. Enfin, quelques méthodes de régularisation sont évoquées pour l'estimation de paramètres. Quelques méthodes de régularisation pour l'estimation de fonction seront évoquées au chapitre 3.

5.1 Introduction et généralités

5.1.1 Aspect théorique

Un problème direct consiste à calculer les sorties d'un modèle pour une valeur fixée des différents paramètres que le modèle fait intervenir. Le problème inverse d'estimation de paramètres correspondant consiste à estimer la valeur de certains de ces différents paramètres à partir des sorties d'un modèle. Considérons, pour simplifier, le cas des problèmes inverses linéaires²⁸ pour lesquels la sortie du modèle dépend linéairement des paramètres à estimer :

$$Y = X \beta \quad (1.93)$$

L'application linéaire X permet de passer de l'espace des paramètres à l'espace des observations. Calculer Y pour β fixé consiste à résoudre le problème direct. Ce dernier ne pose donc visiblement jamais de problème : une fois X et β définis, le calcul de Y est direct. Dans le cas du problème inverse, la solution $\hat{\beta}$, présentée dans les sections précédentes, s'exprime de la façon suivante (avec éventuellement un terme supplémentaire pour l'estimateur MAP) :

$$\hat{\beta} = \left[X^T W X \right]^{-1} X^T W Y^* \quad (1.94)$$

L'opération inverse qui consiste à passer de l'espace des observables à l'espace des paramètres, n'existe pas toujours. C'est le cas lorsque la matrice d'information $X^T W X$ n'est pas inversible.

28. Le principe est identique pour les problèmes non-linéaires.

5.1.2 Problèmes mal-posés

Un problème est considéré bien-posé, généralement au sens d'Hadamard²⁹ ([14], [24, p.31], [3, p.259], [5, p.11]), si les conditions suivantes sont remplies :

Existence : Pour tout ensemble d'observables valides, une solution existe.

Unicité : Pour tout ensemble d'observables valides, la solution est unique.

Continuité : La solution dépend continument des observables.

La condition d'existence :

La condition d'existence d'une solution est vérifiée à partir du moment où $[X^T W X]^{-1}$ (au sens de l'estimateur) est calculable [14]. La condition d'existence correspond également à la surjectivité de l'opérateur H [14] : toute solution dans l'espace des observations admet une solution dans l'espace des paramètres.

La condition d'unicité :

La condition d'unicité est essentielle. L'unicité correspond à l'injectivité de l'application linéaire X [14] : à tout vecteur d'observables correspond au maximum une solution. Par exemple lorsqu'un problème est sous-déterminé, plusieurs vecteurs β peuvent donner le même vecteur de sortie Y du modèle.

Par unicité, on entend unicité dans l'espace des paramètres : la solution $\hat{\beta}$ est unique. L'interprétation géométrique des moindres-carrés montre en effet que la projection des observables sur l'espace $\text{Im}(X)$ (généralisé par les colonnes de la matrice des sensibilités) est toujours unique (pour un problème linéaire) mais ce sont les coordonnées $\hat{\beta}$ de la solution qui ne le sont pas toujours. Pour les problèmes non-linéaires, on peut par contre imaginer plusieurs solutions à la projection orthogonale de Y^* .

La condition de continuité :

Comme son nom l'indique, cette condition est remplie lorsque l'estimateur est continu. On trouve également une autre formulation [5, 14], mais dont le sens n'est plus tout à fait le même, c'est de parler de stabilité et non de continuité. La stabilité implique que la solution n'est pas trop sensible à des petites variations des observables.

29. Malheureusement, même si la définition de « bien-posé » est souvent celle d'Hadamard, on trouve plusieurs définitions dans la littérature. Par exemple, la condition d'existence de [5] semble reposer sur la capacité du modèle à reproduire parfaitement les mesures, mêmes bruitées. Par ailleurs, la 3^{ème} condition peut poser des problèmes d'interprétation quant au problème de la continuité et de la stabilité. La continuité est toujours assurée pour les estimateurs linéaires puisqu'ils sont linéaires et pour ce qui est de la stabilité, la notion est un peu arbitraire.

Les notions d'existence, d'unicité et de continuité de la solution sont parfois délicates à appliquer numériquement, notamment dans le cas où le problème inverse est linéaire. En effet, si $(X^T W X)^{-1}$ est calculable, alors la solution existe. De plus, elle est unique (puisque l'opérateur est linéaire) et la solution dépend continument des données (puisque l'opérateur est linéaire). Par conséquent, on pourrait dire, à la limite, que tout problème inverse linéaire est bien-posé (sauf cas évident où $\det(X^T W X) = 0$).

De plus, comme le fait remarquer Wikipedia³⁰ un problème inverse peut être bien-posé et mal-conditionné, la notion de problème « mal-conditionné » est sans doute plus utile dans la pratique.

5.1.3 Problèmes mal-conditionnés

Le nombre de conditionnement [14] est un scalaire qui quantifie la sensibilité de la solution $\hat{\beta}$ d'un système linéaire, caractérisé par la matrice inversible A , à des perturbations sur les données :

$$A \beta = B \quad \implies \quad \hat{\beta} = A^{-1} B \quad (1.95)$$

Le conditionnement d'une matrice A est défini par :

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\| = \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}} = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}} \geq 1 \quad (1.96)$$

Avec ω_{\max} et ω_{\min} respectivement à la plus grande et plus petite valeur singulière de A et $\lambda_{\max}(A^T A)$ et $\lambda_{\min}(A^T A)$ la plus grande et la plus petite valeur propre de $A^T A$. Dans le cas particulier où A est carré et symétrique, on a alors :

$$\text{cond}(A) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A)^2}{\lambda_{\min}(A)^2}} = \left| \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \right| \quad (1.97)$$

Le nombre de conditionnement peut aussi se voir comme l'amplification maximale d'une erreur sur Y sur β :

$$\frac{\|\delta\beta\|}{\|\beta\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\delta Y\|}{\|Y\|} \quad (1.98)$$

5.2 Outils de diagnostic

Cette section présente différents outils permettant de détecter le caractère mal-posé d'un problème avant l'estimation proprement dite. L'intérêt de ces outils est de pouvoir vérifier la faisabilité d'une estimation sans avoir à réaliser physiquement le dispositif expérimental associé.

30. http://en.wikipedia.org/wiki/Well-posed_problem, 10-08-2011.

L'étude numérique est en effet un critère nécessaire pour qu'une estimation soit possible.

Les trois outils présentés ici sont :

1. Analyses graphiques des sensibilités et matrice de corrélation
2. Critères numériques relatifs à la matrice d'information
3. Analyse par SVD pour identifier les corrélations

5.2.1 Coefficients de sensibilité réduite

On a utilisé à de nombreuses reprises dans les parties précédentes les coefficients de sensibilité à travers la matrice des sensibilités. Les colonnes de cette matrice correspondent en effet au vecteur des sensibilités des différents paramètres, c'est à dire la dérivée des sorties du modèle par rapport aux paramètres. Ou dit encore autrement, l'effet d'une petite modification d'un paramètre sur les sorties du modèle :

$$X_{\beta_i} = \left[\frac{\partial Y_1}{\partial \beta_i} \quad \frac{\partial Y_2}{\partial \beta_i} \quad \cdots \quad \frac{\partial Y_m}{\partial \beta_i} \right]^T \quad (1.99)$$

Avec cette définition, les coefficients de sensibilité aux différents paramètres n'ont pas la même unité. On peut normaliser les unités en multipliant les sensibilités par leur paramètre respectif. On obtient ainsi les coefficients de sensibilité réduite. Le vecteur des sensibilités réduites au paramètre β_i est alors :

$$S_{\beta_i} = \begin{bmatrix} \beta_i \frac{\partial Y_1}{\partial \beta_i} \\ \beta_i \frac{\partial Y_2}{\partial \beta_i} \\ \vdots \\ \beta_i \frac{\partial Y_m}{\partial \beta_i} \end{bmatrix} \quad (1.100)$$

De cette façon, si les observables Y^* correspondent à des températures, la matrice des sensibilités réduites S a la dimension d'une température. Une situation problématique apparaît lorsque le paramètre β_i est nul. On peut alors normaliser les sensibilités par l'intervalle de variation des paramètres plutôt que par leur valeur [25, p.40].

Avec la définition utilisée ici, le vecteur des sensibilités réduites correspondant au paramètre β_i , correspond à la variation des sorties Y générée par une variation relative du paramètre β_i :

$$S_{\beta_i}(t_k) = \beta_i \frac{\partial Y_k}{\partial \beta_i} \quad \ll = \frac{\partial Y(t_k)}{\partial \beta_i / \beta_i} \gg \quad (1.101)$$

Remarque : l'interprétation des coefficients de sensibilité réduite

On peut donner une signification concrète aux coefficients de sensibilité réduite définis ci-dessus. Les paramètres inconnus que l'on cherche à estimer ont probablement des unités différentes et donc des échelles de valeur

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

différentes. Or pour certains algorithmes de minimisation, il est préférable de normaliser les paramètres de façon à ce que l'algorithme ne manipule que des variables dont les valeurs sont comparables. Pour normaliser tous les paramètres β_i à 1, il suffit de considérer la paramétrisation α suivante :

$$\beta_i \implies \beta_i^0 \alpha_i \quad (1.102)$$

L'exposant ⁰ indique que la grandeur reste constante et égale à sa valeur initiale (nominale). Dorénavant, le paramètre que l'on estime est α_i et non β_i . Ainsi, tous les paramètres à estimer α_i valent initialement 1. Par ailleurs, la sensibilité au paramètre α_i est égale à la sensibilité réduite du paramètre β_i :

$$\frac{\partial Y(\beta_i^0 \alpha_i)}{\partial \alpha_i} = \beta_i^0 \frac{\partial Y(\beta_i^0 \alpha_i)}{\partial \beta_i} = \beta_i^0 \frac{\partial Y(\beta_i)}{\partial \beta_i} \quad (1.103)$$

Pour cette raison, il est pratique d'utiliser les sensibilités réduites pour calculer la matrice de variance-covariance $\text{cov}(\beta)$ car on obtient directement les écarts-types relatifs $\sigma_{\beta_i}/\beta_i^0$.

5.2.2 Analyse graphique et matrice de corrélation

L'analyse graphique [14] des coefficients de sensibilité est une méthode très répandue pour tenter de déceler d'éventuelles corrélations entre les paramètres β . Si une corrélation existe entre les paramètres, alors la condition d'unicité, la 2^{ème} condition d'Hadamard, n'est plus satisfaite. En effet, l'existence d'une corrélation signifie que l'effet d'un paramètre peut être reproduit à l'identique avec une combinaison linéaire des autres paramètres. Une colonne de X_β est donc égale à une combinaison linéaire de ses autres colonnes.

Une première approche est de tracer les différents vecteurs des sensibilités réduites en fonction du temps (s'il s'agit de la variable explicative). On peut alors déceler une corrélation entre deux paramètres s'il s'avère que deux courbes sont proportionnelles.

Dans le même ordre d'idée, au lieu de tracer directement les coefficients de sensibilité réduite, on peut tracer leur rapport deux à deux. Si deux paramètres sont corrélés, alors le rapport de leurs sensibilités devrait être constant. Il est aussi possible de tracer les sensibilités d'un paramètre par rapport aux sensibilités d'un second paramètre [3, p.328]. Si les deux paramètres sont corrélés, on doit obtenir une droite. Avec 3 paramètres à estimer, on obtient 3 paires de paramètres et donc trois courbes.

La matrice de corrélation (Eq.1.14) est un outil complémentaire capable de détecter une corrélation entre deux paramètres. L'intérêt est de pouvoir visualiser « d'un coup d'oeil » l'ensemble des corrélations entre les paramètres.

5.2.3 Critères numériques sur la matrice d'information

La matrice d'information, définie précédemment (Remarque. p20), intervient aussi bien dans la fonction objectif (Eq.1.72), dans l'expression de la solution $\hat{\beta}$ ci-dessous, que dans la matrice de variance-covariance (Eq.1.55) :

$$\hat{\beta} = \left[\underbrace{X^T W X + Q}_{\text{Matrice d'information}} \right]^{-1} \left[Q \tilde{\beta} + X^T W Y^* \right]$$

Sans inverser la matrice d'information, la solution du problème inverse est simplement la solution du système linéaire suivant :

$$\left[X^T W X + Q \right] \beta = Q \tilde{\beta} + X^T W Y^* \quad (1.104)$$

Ou de façon équivalente après normalisation des paramètres, s'ils sont non nuls :

$$\left[\underbrace{S^T W S + Q'}_F \right] \alpha = Q' \tilde{\alpha} + S^T W Y^* \quad (1.105)$$

Le conditionnement de la matrice d'information :

Le conditionnement³¹ de la matrice F permet de déceler des corrélations entre plusieurs paramètres, et pas seulement entre deux paramètres. En effet, si une combinaison linéaire existe, alors une des valeurs propres est nulle et le conditionnement est infini (§5.1.3 p54). Un nombre de conditionnement faible signifie que les variations du terme de droite dues au bruit de mesure ne seront pas trop amplifiées. A l'inverse, lorsque le conditionnement est grand, le problème est mal-conditionné, et la solution est très sensible à des variations des observables.

Pour éviter d'additionner des grandeurs avec des unités différentes, il est préférable de calculer le conditionnement avec les sensibilités réduites. Enfin, le nombre de conditionnement dépend de la paramétrisation. Cela signifie que le conditionnement dépend de la manière de définir les sensibilités réduites.

Le déterminant de la matrice d'information :

Le déterminant³² présente en partie le même intérêt que le conditionnement : il est nul si les paramètres sont corrélés. Le déterminant est le produit des valeurs propres :

$$\det(F) = \prod \lambda_i \quad \text{avec } \lambda_i \text{ les valeurs propres de } F \quad (1.106)$$

31. On peut aussi établir un lien entre le conditionnement et l'hyperellipsoïde de confiance (Voir « E'-optimality criterion » chapitre 3 sur les critères d'optimalité).

32. Le déterminant est proportionnel au volume de l'hyperellipsoïde de confiance (Voir « D-optimality criterion » chapitre 3).

Un « grand³³ » déterminant suggère que les valeurs propres sont également importantes, mais ce n'est pas systématique. C'est pourquoi la valeur du déterminant est intéressante, mais il est sans doute indispensable d'évaluer également le conditionnement pour s'assurer qu'il n'y a pas une grande disparité des valeurs propres.

Avec seulement deux valeurs scalaires, le déterminant et le conditionnement fournissent des informations utiles pour évaluer le caractère bien-posé d'un problème inverse (voir par exemple [26]). Aussi, on utilise souvent ces critères pour comparer deux expériences entre elles. En effet, les matrices de sensibilité dépendent de la métrologie utilisée. On peut par exemple placer les capteurs de façon à ce que le déterminant et le conditionnement soient les meilleurs possibles. C'est la conception optimale d'expérience (Chap.4).

5.2.4 L'analyse par SVD (Singular Value Decomposition)

L'outil le plus performant, à mon sens, consiste à décomposer la matrice des sensibilités X_β en valeurs singulières (SVD) ([3, p.264], [5, p.56], [14] et [27, p.9]). La SVD est basée sur la propriété suivante :

Toute matrice (carrée ou non) peut se décomposer en un produit de (1) une matrice de rotation par (2) une matrice d'homothétie puis par (3) une autre matrice de rotation.

Dans le cas de la décomposition en valeurs singulières, la matrice d'homothétie contient uniquement des coefficients positifs donc il n'est plus possible d'utiliser uniquement des matrices de rotation (déterminant 1) mais il faut aussi utiliser des matrices de réflexion (déterminant -1). Soit A une matrice de dimension $m \times n$, la décomposition en valeurs singulières de A s'écrit :

$$A = U \Omega V^T \quad \text{avec} \quad \begin{cases} U & \text{une matrice orthogonale de dimension } m \times m. \\ \Omega & \text{une matrice d'homothétie de dimension } m \times n. \\ V & \text{une matrice orthogonale de dimension } n \times n. \end{cases} \quad (1.107)$$

U et V sont des matrices orthogonales. L'inverse d'une matrice orthogonale est sa transposée et le déterminant d'une matrice orthogonale vaut 1 ou -1 . Les colonnes sont de plus normalisées (leur norme vaut 1). Quant à la matrice d'homothétie, il s'agit d'une matrice rectangulaire « diagonale³⁴ » dont les coefficients diagonaux sont les valeurs singulières de la matrice A . Il s'agit de valeurs scalaires positives ou nulles. Pour des questions pratiques, elles sont ordonnées dans l'ordre décroissant.

33. Le terme « grand » prend un sens lorsque l'on compare des dispositifs expérimentaux entre eux ou lorsque l'on se donne un volume de référence pour l'hyperellipsoïde de confiance.

34. Tous les coefficients i, j sont nuls si $i \neq j$.

La définition de la SVD ci-dessus correspond à la « SVD complète » (« full SVD »). On peut définir la « SVD réduite » (« reduced SVD ») en remarquant que les $m - n$ dernières lignes de Ω sont nulles, donc les $m - n$ dernières colonnes de U sont inutiles (dans le cas où $m \geq n$, c'est à dire lorsque A possède plus de lignes que de colonnes).

L'exemple présenté ici permet d'illustrer la méthode d'analyse des sensibilités par décomposition SVD et de montrer pourquoi cette méthode est particulièrement adaptée pour identifier les corrélations entre les paramètres.

Considérons un ensemble d'observables Y_i^* avec $i \in [1; 10]$ qui évoluent linéairement par rapport au temps t . L'observable Y_i^* correspond à l'instant $t_i = i \Delta t$. Deux modèles sont considérés. Ils sont tous les deux *linéaires* par rapport à leur trois paramètres $\beta = [a \ b \ c]^T$. Le premier est mal-posé et le second est potentiellement mal-conditionné (cela dépend de l'horizon temporel t). L'objectif est d'estimer β pour chaque modèle :

$$Y^{(1)} = at + 2bt + c = (a + 2b)t + c \tag{1.108}$$

$$Y^{(2)} = at + 2b(1 - e^{-3t})t + c = (a + 2b(1 - e^{-3t}))t + c \tag{1.109}$$

La décomposition SVD de la matrice des sensibilités $X_\beta^{(1)}$ vaut (l'exposant 1 signifie que la matrice correspond au modèle $Y^{(1)}$ (Eq.1.108)) :

$$X_\beta^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 1 \\ 3 & 6 & 1 \\ 4 & 8 & 1 \\ 5 & 10 & 1 \\ 6 & 12 & 1 \\ 7 & 14 & 1 \\ 8 & 16 & 1 \\ 9 & 18 & 1 \\ 10 & 20 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -0,05 & 0,59 & -0,38 \\ -0,10 & 0,49 & -0,07 \\ -0,15 & 0,39 & 0,37 \\ -0,20 & 0,29 & -0,09 \\ -0,26 & 0,19 & -0,10 \\ -0,31 & 0,10 & 0,79 \\ -0,36 & 0,00 & -0,12 \\ -0,41 & -0,10 & -0,13 \\ -0,46 & -0,20 & -0,14 \\ -0,51 & -0,29 & -0,15 \end{bmatrix}}_{U \text{ dim } m \times n_\beta} \underbrace{\begin{bmatrix} 43,964 & & \\ & 1,461 & \\ & & \mathbf{0,000} \end{bmatrix}}_{\Omega \text{ dim } n_\beta \times n_\beta} \underbrace{\begin{bmatrix} -0,45 & -0,89 & -0,06 \\ -0,03 & -0,06 & 1,00 \\ -\mathbf{0,89} & \mathbf{0,45} & 0,00 \end{bmatrix}}_{V^T \text{ dim } n_\beta \times n_\beta} \tag{1.110}$$

Le nombre de conditionnement de la matrice $X^T X$ est ici infini ($\text{cond}(X^T X) = \infty$). L'intérêt de la SVD pour l'analyse des résidus, réside dans l'analyse des matrices Ω et V^T . La matrice Ω , qui a pour coefficient diagonaux les valeurs singulières de X_α , montre qu'une valeur singulière nulle est associée à une combinaison particulière des paramètres β . Cette combinaison correspond à la dernière ligne de V^T . La SVD nous informe que l'effet de β_1 sur les sorties peut être entièrement compensée avec β_2 . Pour illustrer cela, prenons comme vecteur paramètre β

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

un vecteur *proportionnel* à la dernière ligne de V^T :

$$\alpha = kL_3(V^T) = k[0,894 \quad -0,447 \quad 0,00]^T \quad (1.111)$$

Avec $L_k(V^T)$ la $k^{\text{ème}}$ ligne de V^T . Multiplions l'expression (Eq.1.110) par ce vecteur α :

$$\begin{aligned} Y &= U \Omega V^T \alpha \\ &= U \Omega \begin{bmatrix} \langle L_1(V^T) | \alpha \rangle \\ \langle L_2(V^T) | \alpha \rangle \\ \langle L_3(V^T) | \alpha \rangle \end{bmatrix} = U \Omega \begin{bmatrix} \langle L_1(V^T) | kL_3(V^T) \rangle \\ \langle L_2(V^T) | kL_3(V^T) \rangle \\ \langle L_3(V^T) | kL_3(V^T) \rangle \end{bmatrix} \begin{matrix} = 0 \\ = 0 \\ = k \text{ car } \|L_3(V^T)\|_2 = 1 \end{matrix} \\ &= U \begin{bmatrix} 43,964 & & \\ & 1,461 & \\ & & \mathbf{0,000} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{k} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.112)$$

Avec $\langle \bullet | \bullet \rangle$ le au produit scalaire habituel sur les vecteurs.

Ainsi, appliquer en entrée du modèle un vecteur proportionnel à la dernière ligne de V^T n'a aucun effet sur les sorties du modèle : $Y = X_\beta \beta = X_\beta k L_3(V^T) = 0$. Cette corrélation n'est pas surprenante puisque l'on remarque que 2^{ème} colonne de $X_\beta^{(1)}$ est le double de la 1^{ère}. Soit $C_k(X)$ la $k^{\text{ème}}$ colonne de X , on a :

$$2C_1(X) - 1C_2(X) + 0C_3(X) = 0 \quad \implies \quad \text{rang}(X_\beta^{(1)}) = 2 < 3g \quad (1.113)$$

On retrouvera la présence de valeurs singulières nulles dans la deuxième application présentée au chapitre 3 (§3 p193). Cependant, en général, les valeurs singulières ne sont généralement pas rigoureusement nulles. Par exemple, dans le cas du second modèle, la décomposition SVD de la matrice $X_\beta^{(2)}$ vaut :

$$X_\beta^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 1,90 & 1 \\ 2 & 3,99 & 1 \\ 3 & 6,00 & 1 \\ 4 & 8,00 & 1 \\ 5 & 10,00 & 1 \\ 6 & 12,00 & 1 \\ 7 & 14,00 & 1 \\ 8 & 16,00 & 1 \\ 9 & 18,00 & 1 \\ 10 & 20,00 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -0,05 & 0,59 & -0,80 \\ -0,10 & 0,49 & 0,28 \\ -0,15 & 0,39 & 0,32 \\ -0,20 & 0,29 & 0,26 \\ -0,26 & 0,19 & 0,18 \\ -0,31 & 0,10 & 0,10 \\ -0,36 & 0,00 & 0,03 \\ -0,41 & -0,10 & -0,05 \\ -0,46 & -0,20 & -0,13 \\ -0,51 & -0,29 & -0,20 \end{bmatrix}}_{U \text{ dim } m \times n_\beta} \underbrace{\begin{bmatrix} 43,959 & & \\ & 1,465 & \\ & & \mathbf{0,034} \end{bmatrix}}_{\Omega \text{ dim } n_\beta \times n_\beta} \underbrace{\begin{bmatrix} -0,45 & -0,89 & -0,06 \\ -0,01 & -0,07 & 1,00 \\ -0,89 & \mathbf{0,45} & \mathbf{0,02} \end{bmatrix}}_{V^T \text{ dim } n_\beta \times n_\beta} \quad (1.114)$$

Le conditionnement de $X^T X$ vaut maintenant $\text{cond}(X^T X) = 43,96^2/0,03^2 \approx 2,1 \times 10^6$. La combinaison linéaire indiquée par la dernière ligne de V^T n'est plus sans effet sur Y . Cependant, cette combinaison des paramètres a un effet environ 100 fois plus faible que la deuxième combinaison, associée à la valeur singulière 1,46.

On peut aussi noter que les valeurs singulières de $X_\beta^{(2)}$ sont très proches de celles de $X_\beta^{(1)}$. Une des propriétés de la décomposition SVD est effectivement d'être relativement stable aux perturbations de la matrice que l'on décompose [27, p.14].

L'analyse des sensibilités par SVD réunit donc l'ensemble des outils présentés dans les sections précédentes. La matrice Ω nous donne les valeurs singulières de X_β ce qui permet, dans certaines conditions, de calculer le conditionnement et le déterminant de la matrice $X^T W X$. La SVD donne aussi les combinaisons linéaires de paramètres qui sont problématiques ce que ne fait pas la matrice de corrélation, et qui devient difficile avec une analyse graphique dès que le nombre de paramètres devient conséquent.

5.3 Outils de régularisation

Lorsqu'un problème inverse est mal-conditionné, voir mal-posé, il n'existe pas de solution ou alors avec une variance telle, qu'elle en perd son intérêt. Pour rendre un problème bien-conditionné, il faut le régulariser [14]. Il s'agit de modifier l'estimateur en ajoutant des contraintes sur la solution, ce qui revient, d'une certaine manière, à introduire de l'information externe dans l'estimateur.

Parmi les méthodes de régularisation existantes, certaines s'avèrent être plus ou moins adaptées à certains types de problèmes inverses. Les méthodes évoquées sont utilisées par la suite en estimation de paramètres et en estimation de conditions limites.

Un problème d'estimation de paramètres (au sens large) est mal-conditionné lorsque certaines combinaisons de paramètres ont des sensibilités trop faibles, c'est à dire lorsqu'il existe des corrélations importantes entre les colonnes de la matrice des sensibilités. Cela signifie que les observables fournis par l'expérience n'apportent pas d'information sur ces combinaisons. Il y a alors deux possibilités :

Réduire le nombre de paramètres : En estimation de paramètres thermophysiques, la marge de manoeuvre est assez réduite, mais en estimation de conditions limites, et en particulier de fonctions, une telle approche est relativement efficace (voir §2 p163 et §3.5 p206).

Changer les observables : Cela consiste à modifier l'expérience prévue en utilisant des observables qui fournissent davantage d'information (ex : modifier la position des capteurs).

Le problème qui consiste à déterminer les observables optimaux pour un problème d'estimation de paramètres fait partie de ce que l'on appelle « la conception optimale d'expérience » (voir Chap.4).

5.3.1 Introduction d'information a priori

On a montré que sous certaines conditions, la fonction objectif associée à la méthode d'estimation Bayésienne MAP s'écrit (Eq.1.52 p31) :

$$J(\beta) = (Y^* - Y)^T W (Y^* - Y) + (\beta - \tilde{\beta})^T Q (\beta - \tilde{\beta}) \quad (1.115)$$

D'une certaine manière, l'estimation MAP intègre automatiquement une procédure de régularisation. Si l'expérience ne fournit pas suffisamment d'information sur les paramètres, alors c'est l'information a priori fournie par l'utilisateur qui compense ce manque. Par exemple, utilisons l'estimateur MAP pour déterminer les paramètres a et b du modèle $Y^{(1)}$ suivant : (Eq.1.108 p59) :

$$Y^{(1)} = a t + 2b t + c = (a + 2b) t + c$$

Aucune information a priori sur a et c n'est spécifiée ($\sigma_a \rightarrow \infty$ et $\sigma_c \rightarrow \infty$) n'est spécifiée mais on suppose qu'une autre expérience nous a renseigné sur b : il est voisin de 4 avec un écart-type de 1. La loi de densité a priori de b est supposée suivre une loi normale. Pour cet exemple numérique, le vecteur des observables Y^* de dimension $m = 10$ correspond à une réalisation du vecteur aléatoire suivant :

$$Y^* = \alpha t + \beta + e \quad \text{avec} \quad t = [1 \ 2 \ 3 \ \dots \ 10]^T \quad (1.116)$$

Avec $\alpha = 2$, $\beta = 2$ et e un vecteur d'erreur aléatoire normale $\mathcal{N}(\mu = 0, \sigma_m = 1)$.

La solution obtenue $\hat{\beta}$ avec une réalisation du vecteur e est (Eq.1.74 p38) :

$$\hat{\beta} = [X^T W X + Q]^{-1} [Q \tilde{\beta} + X^T W Y^*] = \begin{bmatrix} -5, 76 \\ \mathbf{4, 00} \\ 1, 30 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} (a) \\ (b) \\ (c) \end{matrix}$$

$$\text{Avec} \quad W = \text{cov}(Y^*|\beta)^{-1} = \frac{1}{\sigma_m^2} \mathbf{I} \quad \text{et} \quad Q = \text{cov}(\dot{\beta})^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{1^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \tilde{\beta} = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Comme a et b ont le même effet, à un facteur près, sur les observables, il existe une infinité de couple (a, b) solutions au problème. Cependant, comme on a spécifié que « par défaut » b vaut 4, c'est cette valeur qui est conservée. Quant à la matrice de variance-covariance relative à la

densité de probabilité a posteriori (et gaussienne) $p(\hat{\beta}|Y^*)$, elle vaut (Eq.1.55 p31) :

$$\text{cov}(\hat{\beta}|Y^*) = [X_\beta W X_\beta + Q]^{-1} = \begin{bmatrix} 4,01 & -2,00 & -0,07 \\ -2,00 & \mathbf{1,00} & 0,00 \\ -0,07 & 0,00 & 0,47 \end{bmatrix}$$

$$\text{D'où : } \text{std}(\hat{\beta}|Y^*) = \begin{bmatrix} \sigma_a \\ \sigma_b \\ \sigma_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,003 \\ 1,000 \\ 0,683 \end{bmatrix}$$

On constate ainsi que l'écart-type a posteriori de b vaut 1 ce qui est égal à l'écart-type a priori fourni par l'utilisateur. Comme les observables ne fournissent pas d'information sur b , toute l'information a posteriori vient de l'information a priori. Quant au paramètre a , il s'est « adapté » à la valeur de b .

La particularité de l'estimateur MAP comparé au MLE, est que les écarts-types théoriques ne correspondent pas à la dispersion des estimations. Par exemple, le paramètre b vaudra ici toujours 4 (la valeur a priori), peu importent les observables Y^* . Sa dispersion est donc nulle, mais son écart-type vaut 1. La matrice de variance-covariance de la dispersion de l'estimateur est (Eq.1.56 p32) :

$$\begin{aligned} \text{cov}(\hat{\beta}) &= [X_\beta W X_\beta + Q]^{-1} X_\beta W X_\beta [X_\beta W X_\beta + Q]^{-1} \\ \implies \text{std}(\hat{\beta}) &= \begin{bmatrix} \sigma_a \\ \sigma_b \\ \sigma_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,11 \\ \mathbf{0,00} \\ 0,68 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1.117)$$

La matrice de variance-covariance de la dispersion vaut :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \begin{bmatrix} 0,012 & \mathbf{0,000} & -0,067 \\ \mathbf{0,000} & \mathbf{0,000} & \mathbf{0,000} \\ -0,067 & \mathbf{0,000} & 0,467 \end{bmatrix}$$

Les covariances $\text{cov}(\hat{b}, \hat{a})$ et $\text{cov}(\hat{b}, \hat{c})$ sont nulles puisque \hat{b} est constant.

5.3.2 Troncature SVD

La régularisation par troncature SVD, dite méthode « TSVD » est la suite logique de la section traitant de l'analyse des sensibilités par la SVD (§5.2.4 p58). Le principe de la régularisation par troncature SVD est de diminuer le nombre de degrés de liberté du problème [14], ce qui revient en fait à diminuer le nombre de paramètres. Cependant, on ne va pas supprimer

Chapitre 1. Outils pour l'estimation de paramètres en thermique

« réellement » de paramètres puisque le vecteur β est gardé intact. Ce que l'on supprime, c'est certaines corrélations entre paramètres en commençant par celles qui ont le moins d'influence. Ce sont en effet ces corrélations qui génèrent la grande sensibilité de la solution $\hat{\beta}$ au bruit de mesure. Dans le cas d'un système linéaire, on a :

$$Y = X \beta$$

En introduisant la décomposition SVD de X , on a :

$$\begin{aligned} Y &= U \Omega \underbrace{V^T \beta}_{\eta} \\ &= U \Omega \eta \end{aligned} \quad (1.118)$$

Au lieu d'estimer β , on va estimer tout d'abord le vecteur η . C'est à ce vecteur que l'on va enlever des paramètres et non à β . Une fois qu'il sera estimé, on obtiendra β par la relation suivante :

$$V^T \beta = \eta \implies \beta = V \eta \quad (V \text{ orthogonale}) \quad (1.119)$$

Le fait d'avoir changé la paramétrisation du problème par une application linéaire orthogonale n'en modifie pas le conditionnement donc les paramètres η sont toujours aussi corrélés que β . Cependant, certaines composantes de η sont associées à de petites valeurs singulières, ce qui signifie que les composantes en question³⁵ n'ont pratiquement aucun effet sur les sorties Y . On peut donc leur attribuer la valeur que l'on souhaite et en particulier 0 :

$$\begin{aligned} Y &= U \begin{bmatrix} \omega_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \omega_{n_\beta-r+1} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \omega_{n_\beta} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_{n_\beta-r+1} = 0 \\ \vdots \\ \eta_{n_\beta} = 0 \end{bmatrix} \\ &= U_t \begin{bmatrix} \omega_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \omega_{n-r} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_{n-r} \end{bmatrix} = U_t \Omega_t \eta_t \end{aligned}$$

L'indice t signifie « tronqué ». Les r dernières colonnes de U ont en effet été supprimées ainsi que les r dernières valeurs singulières de Ω . En tronquant les paramètres (ou les valeurs singulières),

³⁵. Comme les valeurs singulières sont organisées de manière décroissante dans la SVD, les composantes en question, sont les dernières du vecteur η .

on a amélioré le conditionnement de $X^T X$:

$$\text{cond}(X^T X) = \left(\frac{\omega_1}{\omega_{n_\beta}} \right)^2 \xrightarrow{\text{Troncature SVD}} \text{cond}\left((U_t \Omega_t)^T U_t \Omega_t\right) = \text{cond}\left(\Omega_t^T \Omega_t\right) = \left(\frac{\omega_1}{\omega_{n-r}} \right)^2$$

En pratique, le nombre r est déterminé en étudiant l'amélioration du conditionnement qu'il apporte, ainsi que le gain biais/variance obtenu [14].

Cas du modèle $Y^{(1)}$

Appliquons la méthode de régularisation par TSVD au modèle $Y^{(1)}$ pour estimer les paramètres $\beta = [a \ b \ c]^T$. La décomposition SVD de la matrice des sensibilités X_β vaut :

$$Y = X \beta = U \Omega V^T \beta \tag{1.120}$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} -0,05 & -0,59 & -0,38 \\ -0,10 & -0,49 & -0,07 \\ -0,15 & -0,39 & 0,37 \\ -0,20 & -0,29 & -0,09 \\ -0,26 & -0,19 & -0,10 \\ -0,31 & -0,10 & 0,79 \\ -0,36 & 0,00 & -0,12 \\ -0,41 & 0,10 & -0,13 \\ -0,46 & 0,20 & -0,14 \\ -0,51 & 0,29 & -0,15 \end{bmatrix}}_U \underbrace{\begin{bmatrix} 43,96 & & \\ & 1,46 & \\ & & 0,00 \end{bmatrix}}_\Omega \underbrace{\begin{bmatrix} -0,45 & -0,89 & -0,06 \\ 0,03 & 0,06 & -1,00 \\ 0,89 & -0,45 & 0,00 \end{bmatrix}}_{V^T} \beta$$

Après troncature, on a :

$$Y = \underbrace{\begin{bmatrix} -0,05 & -0,59 \\ -0,10 & -0,49 \\ -0,15 & -0,39 \\ -0,20 & -0,29 \\ -0,26 & -0,19 \\ -0,31 & -0,10 \\ -0,36 & 0,00 \\ -0,41 & 0,10 \\ -0,46 & 0,20 \\ -0,51 & 0,29 \end{bmatrix}}_{U_t} \underbrace{\begin{bmatrix} 43,96 & \\ & 1,46 \end{bmatrix}}_{\Omega_t} \underbrace{\begin{bmatrix} -0,45 & -0,89 & -0,06 \\ 0,03 & 0,06 & -1,00 \end{bmatrix}}_{\eta_t} \beta = U_t \Omega_t \eta_t$$

On obtient ensuite la solution $\hat{\eta}$ à partir des observables :

$$\hat{\eta}_t = \left[X_t^T W X_t \right]^{-1} X_t W Y^* = \begin{bmatrix} -1,467 \\ -1,910 \end{bmatrix} \tag{1.121}$$

En ajoutant les composantes nulles de η qui ont été tronquées :

$$\hat{\beta} = V \hat{\eta}'_t = V \begin{bmatrix} -1,467 \\ -1,910 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,600 \\ 1,200 \\ 2,000 \end{bmatrix} \quad (1.122)$$

Comme la valeur singulière est rigoureusement nulle, le fait de la tronquer dans les valeurs singulières n'a pas biaisé le modèle. On peut vérifier que les sorties du modèle $Y = X \hat{\beta}$ correspondent parfaitement aux observables Y^* (elles n'étaient pas bruitées).

On constate donc sur cet exemple que la TSVD a sélectionné une solution particulière parmi l'infinité de solutions existante. Cette solution est la seule qui soit orthogonale à la troisième ligne de V^T (le troisième vecteur de la base orthonormée donnée par la SVD). L'orthogonalité implique effectivement que $\langle \hat{\beta} | C_3(V) \rangle = 0$ c'est à dire $0,89\beta_1 - 0,45\beta_2 = 0$ d'où $\beta_1 = 0,5\beta_2$.

6 Synthèse

Dans ce chapitre, des outils numériques, utilisés dans les chapitres suivants, ont été présentés. Ils s'appliquent en particulier sur les deux types de problèmes inverses traités dans ce manuscrit :

- Problèmes inverse d'estimation de paramètres au chapitre 2
- Problèmes inverse d'estimation de conditions limites au chapitre 3

Cela a également été l'occasion de rappeler l'objectif des problèmes inverses. Contrairement aux problèmes directs où l'on calcule les effets (les sorties d'un modèle) à partir d'une cause (les données d'entrée du problème), les problèmes inverses tentent d'identifier ces causes à partir d'*observables*. La notion d'observables généralise ici celle de *mesures*. Dans certains cas, *mesure* et *observable* désignent la même chose. Cependant, au chapitre 2, les deux notions sont clairement différentes. Une mesure désigne la grandeur fournie par un appareil de mesure alors qu'un observable désigne la grandeur qui est comparée au modèle par l'intermédiaire d'*une méthode d'estimation*. On préfère cependant ici réserver le terme d'estimateur à la procédure d'estimation en général qui permet d'estimer des paramètres inconnus à partir d'observables.

Il existe généralement plusieurs estimateurs pour un même paramètre mais tous ne sont pas aussi performants (voir chapitre 2). La performance d'un estimateur se mesure généralement avec la variance et le biais des estimations qu'il fournit. A l'issue de l'estimation, des expressions permettent en effet de calculer la dispersion de la solution générée par le bruit de mesure et éventuellement de l'incertitude sur les paramètres supposés connus (voir chapitre 4). On considère ici qu'une estimation est de qualité lorsqu'elle présente une faible dispersion.

Par ailleurs, la qualité des estimateurs dépend aussi de *la méthode d'estimation* qu'ils utilisent, notamment le Maximum de Vraisemblance (MLE) et le Maximum A Posteriori (MAP). Bien que techniquement assez semblables, ces deux méthodes sont issues de deux conceptions différentes des probabilités : l'approche fréquentielle et l'approche Bayésienne.

Avec ces deux méthodes, on aboutit généralement à un problème de minimisation dont la résolution est explicite, lorsque le problème inverse est linéaire, ou fait intervenir un algorithme d'optimisation lorsqu'il est non-linéaire.

La notion de problème « mal-posé » fait l'objet de la dernière partie. Il arrive que l'expérience ne soit pas compatible avec les objectifs, auquel cas, la solution peut ne pas être unique ou être très sensible au bruit de mesure. Cette situation peut être anticipée en analysant la matrice de sensibilités. L'analyse par décomposition en valeurs singulières (SVD) de cette matrice s'avère être très performante pour cela. Une fois que l'on a identifié les causes du mauvais conditionnement d'un problème, on peut, suivant le type de problème inverse, soit modifier l'expérience pour que les observables soient mieux adaptés (voir Chapitre 4), soit revoir à la baisse les objectifs en utilisant des méthodes de régularisation qui permettent de contraindre la solution et de stabiliser les estimateurs mais qui ont pour conséquence de biaiser la solution.

Références bibliographiques

- [1] D. PETIT AND D. MAILLET. *Techniques inverses et estimation de paramètres. partie 1.* Techniques de l'Ingénieur **AF4515** (2008).
- [2] M. NECATI ÖZISIK AND H. R. B. ORLANDE. *Inverse heat transfer.* Taylor et Francis, Inc (2000).
- [3] H. R.B. ORLANDE, O. FUDYM, D. MAILLET, AND R. M. COTTA. *Thermal measurements and inverse techniques.* CRC Press Taylor & Francis Group (2011).
- [4] P. J. ROUSSEEUW. *Least median of squares regression.* Journal of the American Statistical Association- Theory and Methods Section **79**(388) December (1984).
- [5] R. C. ASTER, B. BORCHERS, AND C. H. THURBER. *Parameter estimation and inverse problems.* Elsevier Academic press (2005).
- [6] D. SALSBURG. *The Lady Tasting Tea - How Statistics Revolutionized Science in the Twentieth Century.* Holt (2001).
- [7] S. M. STIGLER. *The history of statistics - The measurement of uncertainty before 1900.* The Belknap Press of Harvard University Press (1986).
- [8] D. RUSSEL AND J.G. MACKINNON. *Statistical and Computational Inverse Problems.* Oxford University Press (1993).
- [9] R. A. FISHER. *Theory of statistical estimation.* Proceedings of the Cambridge Philosophical Society **22** (1925).
- [10] B. EFRON. *Bayesians, frequentists, and scientists.* Journal of the American Statistical Association **100**(469) (2005).
- [11] D. S. SIVIA AND J. SKILLING. *Data analysis - A Bayesian tutorial - second edition.* Oxford university press (2006).
- [12] A. GELMAN, J. B. CARLIN, H. S. STERN, AND D. B. RUBIN. *Bayesian Data Analysis.* Chapman & Hall/Crc (2004).
- [13] S. E. FIENBERG. *When did bayesian inference become « bayesian ».* Bayesian analysis **1**(1) (2006).

Références bibliographiques

- [14] D. PETIT AND D. MAILLET. *Techniques inverses et estimation de paramètres. partie 2*. Techniques de l'Ingénieur **AF4516** (2008).
- [15] J. KAIPIO AND E. SOMERSALO. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer (2005).
- [16] P. BRÉMAUD. *Introduction aux probabilités*. Springer-Verlag (1988).
- [17] B. LECOUTRE. *Et si vous étiez un bayésien qui s'ignore ?* Modulad **32** (2005).
- [18] R. A. FISHER. *On the mathematical foundations of theoretical statistics*. Philosophical Transactions of the Royal Society **A**, **222** (1922).
- [19] F.H. WALTERS, S. L. MORGAN, L.R.(JR) PARKER, AND S.N. DEMING. *Statistical and Computational Inverse Problems*. CRC Press LLC (1991).
- [20] C. PORTE. *Méthodes directes d'optimisation - méthodes à une variable et simplex*. Techniques de l'Ingénieur **P228** (2002).
- [21] W.H. PRESS, B.P. FLANNERY, S. A. TEUKOLSKY, AND W.T. VETTERLING. *Numerical recipes - The Art of Scientific Computing (Fortran Version)*. Cambridge University Press (1989).
- [22] J-P GOURE AND G. BRUN. *Bruit dans les mesures optiques*. Techniques de l'Ingénieur **R358** (1997).
- [23] G. CHOUTEAU. *Bruit dans les mesures électriques*. Techniques de l'Ingénieur **R450** (1997).
- [24] H. W. ENGL, M. HANKE, AND A. NEUBAUER. *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer Academic Publishers (1996).
- [25] S. GARCIA. *Regularization of Inverse Problems*. Thèse de Doctorat, Université de Nantes - ISITEM (1999).
- [26] F. MZALI, L. SASSI, A. JEMNI, S. BENNASRALLAH, AND D. PETIT. Simultaneous identification of thermophysical properties of orthotropic solids. In *4th International Conference on Inverse Problems in Engineering (ICIPE)*, Rio de Janeiro, Brazil (2002).
- [27] A. BJÖRCK. *Numerical methods for least squares problems*. SIAM - Society for Industrial and Applied Mathematics (1996).

Chapitre 2

La méthode flash 3D

Après un chapitre introductif sur différents outils numériques utilisés en thermique : les estimateurs, les méthodes de minimisation, le calcul d'incertitude et les méthodes de régularisation, ce second chapitre est consacré à la méthode flash 3D qui est une évolution de la méthode flash. On y aborde :

1. Des généralités sur les propriétés thermophysiques, sur les méthodes d'estimations et la question de l'homogénéisation des matériaux,
2. La méthode flash 1D, ses origines et certaines évolutions,
3. La méthode flash 3D, variantes de la méthode flash 1D pour les matériaux anisotropes du point de vue thermique,
4. La thermographie infrarouge et son effet filtre sur les champs de température,
5. Des estimateurs pour la diffusivité thermique que l'on compare grâce à leur écart-type théorique,
6. La présentation du dispositif expérimental réalisé au laboratoire

1 Introduction

1.1 L'estimation de paramètres thermophysiques

1.1.1 Généralités

Le problème d'estimation de paramètres est un type particulier de problème inverse. Le terme « paramètre » se réfère ici implicitement à la notion de paramètres physiques à un système.

Les paramètres dont il est question ici, sont les paramètres thermophysiques de matériaux en conduction thermique. Ils sont intégrés dans une équation aux dérivées partielles qui permet de décrire le comportement thermique du matériau. Contrairement aux matériaux homogènes pour

lesquels on peut définir sans trop de difficultés des propriétés thermophysiques, les matériaux composites¹, poreux² et/ou multicouches³ peuvent rendre la notion de propriété thermophysique plus difficile à définir.

1.1.2 La conduction thermique dans les solides

La conduction thermique est un des trois modes de transfert de l'énergie thermique. Elle correspond à la propagation de l'énergie dans un matériau dès lors qu'il existe un gradient de température. La loi de Fourier exprime le vecteur densité de flux de chaleur :

$$\phi = -\overline{\overline{\lambda}}(T)\nabla T \quad [W\ m^{-2}] \quad (2.1)$$

$\overline{\overline{\lambda}}$ en $[W\ m^{-1}\ K^{-1}]$ est le tenseur des conductivités thermiques. Il est symétrique et peut dépendre de la température. Il s'écrit en coordonnées cartésiennes :

$$\overline{\overline{\lambda}}(T) = \begin{bmatrix} \lambda_x & \lambda_{xy} & \lambda_{xz} \\ & \lambda_y & \lambda_{yz} \\ \text{sym} & & \lambda_z \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

L'application du principe de conservation de l'énergie dans un solide permet d'obtenir l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\text{div}(\phi) + s \quad (2.3)$$

Avec E en $[J\ m^{-3}]$ l'énergie par unité de volume, $\text{div}(\phi)$ la divergence du flux de chaleur et s une source volumique de chaleur. Dans le cas des solides, on peut relier la variation d'énergie dE à la variation de température dT avec la capacité thermique volumique⁴ $\rho C(T)$ en $[J\ ^\circ C\ m^{-3}]$ qui peut dépendre de la température :

$$dE = \rho C(T) dT \quad (2.4)$$

En supposant qu'il n'y pas de source volumique de chaleur ($s = 0$), on obtient l'équation de la chaleur exprimée en température en injectant (Eq.2.1) et (Eq.2.4) dans (Eq.2.3) :

$$\rho C(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\overline{\overline{\lambda}}(T) \nabla T) \quad (2.5)$$

1. Le matériau composite est un assemblage d'au moins deux matériaux non miscibles.
 2. Un matériau poreux est un solide de forme complexe renfermant des cavités appelées pores. Ces cavités peuvent communiquer entre elles et contenir une ou plusieurs phases fluides. . . [1].
 3. Un matériau multicouche est constitué d'une juxtaposition de différents matériaux disposés en couches.
 4. Ce paramètre est le produit de la masse volumique ρ et de la capacité thermique massique C . En conduction thermique, ces deux paramètres sont couplés si bien qu'il n'est pas nécessaire de les distinguer.

Lorsque la capacité thermique volumique $\rho C(T)$ est indépendante de la température et homogène et constante dans l'espace, on peut alors introduire le tenseur des diffusivités \bar{a} en $[m^2 s^{-1}]$ et écrire l'équation de la chaleur sous la forme suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\bar{a} \nabla T) \quad \text{avec} \quad \bar{a} = \frac{\bar{\lambda}}{\rho C} \quad (2.6)$$

1.1.3 Homogénéisation des matériaux

Un matériau homogène est une idéalisation de la réalité. Un matériau est dit homogène lorsqu'il se comporte comme tel à notre échelle d'observation. Certains matériaux vérifient bien cette hypothèse. Il s'agit par exemple des matériaux polymères, des aciers, ... et plus généralement des matériaux dont les inhomogénéités sont petites par rapport à notre échelle d'observation.

Pour certains matériaux, comme par exemple les matériaux composites, les inhomogénéités peuvent être visibles à notre échelle d'observation. Cependant, il n'est pas évident que le comportement thermique soit très influencé par ces inhomogénéités. En effet, on peut parfois modéliser le matériau non homogène comme étant homogène. Cela est possible lorsque le VER [2] (pour « volume élémentaire représentatif ») est petit par rapport à l'échelle d'observation. Le VER peut être vu comme le volume nécessaire qu'il faut considérer pour que les hétérogénéités locales n'aient pas d'influence significative à notre échelle d'observation.

1.2 Les grandes catégories d'expériences

Si le matériau est homogène et si les propriétés thermophysiques sont indépendantes de la température, on peut définir l'effusivité thermique b d'un matériau à partir du produit de la conductivité et de la capacité thermique volumique :

$$b = \sqrt{\lambda \rho C} \quad \text{en} \quad [J \cdot C^{-1} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1/2}] \quad (2.7)$$

Cette grandeur intervient dès que l'on met deux matériaux avec des températures différentes en contact, ou lorsque l'on applique une densité de flux sur un matériau. L'effusivité caractérise ainsi la résistance de la température de surface à un changement de densité de flux : *Plus l'effusivité thermique d'un matériau est faible et plus la température de surface sera sensible aux changements de la densité de flux thermique en surface* [3].

Les 4 propriétés thermophysiques ρC , λ , a , b sont redondantes. Il suffit d'en connaître deux pour pouvoir toutes les calculer. Certains dispositifs expérimentaux permettent d'estimer deux propriétés simultanément. La tâche est assez difficile car elle requiert une bonne connaissance

des paramètres constitutifs de l'expérience. Par ailleurs, les approches existantes sont parfois dédiées à un type particulier de matériau. Par exemple, la méthode du tricouche, développée par Jannot [4] permet d'estimer la conductivité thermique, mais l'estimation de la diffusivité n'est possible que si la densité et la diffusivité thermique du matériau sont suffisantes. On peut aussi évoquer la méthode proposée par Monde [5] pour estimer la diffusivité et la conductivité simultanément, mais elle n'est compatible qu'avec un type de géométrie particulier.

En règle générale, on préfère utiliser deux expériences indépendantes, chacune prévue et optimisée pour estimer un paramètre thermophysique. Un des paramètres que l'on choisit souvent est la diffusivité thermique qui est un des plus simples à estimer. En effet, la diffusivité thermique a s'exprime en $[m^2 s^{-1}]$ ce qui signifie qu'il n'est pas nécessaire de mesurer une température et un flux de chaleur pour estimer ce paramètre. Cependant, on ne peut pas éviter la mesure d'une distance et d'un temps. Quant à la conductivité thermique⁵ λ , elle s'exprime en $[Wm^{-1}C^{-1}]$. Elle fait donc intervenir à la fois la température et la puissance. Il n'est donc pas possible d'estimer λ si on ne mesure pas ces grandeurs ou si on n'utilise pas un autre matériau de référence. Peu de méthodes permettent d'estimer deux propriétés simultanément⁶, mais elles sont par contre nombreuses à pouvoir en estimer un [6]. Le classement ci-dessous consiste à distinguer les méthodes suivant leur régime de fonctionnement :

- Méthodes en régime permanent pour estimer la *conductivité* (plaque chaude [6, 7], plaque chaude gardée [8, 9])
- Méthodes en régime variable pour tous les autres paramètres thermophysiques (fil chaud [6, 9–11], fil chaud appliqué aux fluides [12], ruban chaud [10], plan chaud [6, 13, 14], méthode flash [6], méthodes pour l'effusivité thermique [3, 15], méthodes dites « thermal wave » [16–19])
- Méthodes calorimétriques pour estimer la *capacité thermique* [20, 21]

2 Etat de l'art des méthodes flash

A l'origine, la méthode flash est associée à un dispositif bien particulier permettant d'estimer la diffusivité thermique d'un matériau homogène isotrope. Cependant, la méthode a évolué et de nombreuses versions sont apparues. Comme le fait remarquer Degiovanni [6], l'expression *méthode flash* est aujourd'hui un nom générique pour désigner une classe de méthodes basées sur une excitation thermique par rayonnement, mais pas nécessairement impulsionnelle.

5. La remarque vaut également pour la capacité thermique et l'effusivité thermique.

6. En théorie, beaucoup des méthodes évoquées dans cette section le pourraient, mais elles font intervenir des grandeurs mal maîtrisées expérimentalement, comme la puissance thermique absorbée par le matériau, les pertes surfaciques avec l'environnement, etc

2.1 Les origines de la méthode flash

La méthode voit le jour publiquement en 1961 avec une publication de Parker [22]. Le principe est alors de déposer une quantité d'énergie de manière impulsionnelle⁷ sur la face avant d'un échantillon plan. On mesure ensuite l'évolution de la température relative $T(t)$ en face arrière avec un thermocouple. On suppose le matériau homogène, parfaitement opaque aux rayonnements et parfaitement isolé de l'environnement. L'énergie déposée doit l'être de façon uniforme pour que les transferts de chaleur soient monodimensionnels. Du fait de l'hypothèse d'isolation, l'énergie déposée se conserve et la température du matériau converge vers une température limite T_{lim} . La vitesse de convergence dépend évidemment de la vitesse à laquelle s'homogénéise la température dans le matériau. La convergence est ainsi plus rapide pour les matériaux conducteurs que pour les isolants.

La méthode de traitement des données, proposée par Parker, est une méthode graphique qui se base uniquement sur le temps de demi montée, c'est à dire lorsque le rapport $T(t_{1/2})/T_{lim}$ vaut 0,5 et que l'on obtient en connaissant la température initiale et la température maximale. La diffusivité est ensuite obtenue à partir de l'expression suivante :

$$Fo = \frac{a t_{1/2}}{e^2} = 0,139 \quad (2.8)$$

Remarque sur la valeur 0,139

La valeur 0,139 correspond à la valeur du nombre de Fourier $Fo = a t/e^2$ lorsque $T(t)/T_{lim} = 0,5$. Le temps de demi montée correspond à la mesure la plus sensible à une variation de la diffusivité.

2.2 Les évolutions de la méthode de Parker

La méthode flash a été par la suite améliorée.

Prise en compte des pertes

Une des premières améliorations fut de prendre en compte les pertes thermiques qui rendaient difficile l'estimation de la température limite. En présence de pertes, la température T_{lim} n'est jamais atteinte.

Excitation uniforme et localisée, impulsionnelle ou échelon

Une excitation uniforme appliquée à un matériau isotrope provoque un transfert de chaleur monodimensionnel. Une telle excitation n'est pas toujours facilement réalisable et cette difficulté est à l'origine d'un possible biais d'estimation [23]. On peut aussi volontairement utiliser

7. Une excitation impulsionnelle n'est qu'une approximation valable dans certaines situations. Voir Annexe 4.1 p301.

une excitation localisée pour provoquer des transferts bidimensionnels et ainsi pouvoir estimer la diffusivité thermique dans deux directions simultanément [24–26] à partir de mesures de température ponctuelles. D'autres méthodes s'appuient sur la thermographie et permettent de faire abstraction de la forme spatiale de l'excitation [27–29], voire également de la forme temporelle de l'excitation [30]. L'estimation de la diffusivité dans le plan d'un matériau peut aussi se faire de façon plus « directe » en découpant puis en assemblant des tranches d'un matériau [31] pour le soumettre à une méthode flash classique.

Il existe aussi des tentatives pour modifier le type d'excitation thermique en remplaçant une impulsion par un échelon [32], ou par une succession d'impulsions [33]. On trouve aussi une variante où le matériau isolant est placé entre deux parois d'un matériau conducteur [34]. Trois thermocouples sont utilisés dont deux qui fixent les conditions limites.

Prise en compte des incertitudes

L'incertitude des estimations obtenues par la méthode flash est difficile à évaluer précisément, étant donné le nombre important de sources d'erreurs. Hay [35] présente un diagramme d'Ishikawa qui distingue 5 origines des erreurs : moyens, matière, méthode, milieu, main d'oeuvre pour essayer de dresser une liste relativement exhaustive. Les sources d'incertitudes lors de l'utilisation d'une méthode flash sont souvent évoquées mais il n'existe pas toujours de méthodes quantitatives pour les évaluer. Les sources d'erreurs souvent évoquées que l'on retrouve régulièrement sont :

- L'influence de la non-uniformité du flash [23, 36, 37]
- La non linéarité des propriétés thermophysiques [35]
- L'influence des pertes avec l'environnement [37], et sa modélisation avec un ou deux coefficients d'échange [38]
- L'influence du capteur sur la mesure de température [35, 36, 39] et celle de son temps de réponse [36, 37]
- L'effet de l'excitation de longueur finie alors que le modèle la suppose impulsionnelle [35–37, 40, 41]
- L'effet d'une peinture sur l'échantillon [41–43]

Estimation à haute température

Les applications industrielles soumettent les matériaux à des températures toujours plus élevées si bien que la connaissance de leurs propriétés en fonction de la température est essentielle. Pour adapter la méthode flash à ces contraintes, l'approche usuelle consiste à augmenter la température de l'environnement et de l'échantillon, puis à appliquer la méthode flash. Pour cela, on peut placer l'échantillon dans un four [26, 44–47]. D'autres approches sont en développement et consistent par exemple à exciter périodiquement un échantillon pendant qu'il se refroidit [46].

Application aux matériaux semi-transparentes

La méthode flash suppose par ailleurs que les matériaux sont opaques, aussi bien à l'excitation qu'à leur rayonnement propre. Des développements permettent de s'affranchir en partie de ces hypothèses en prenant en compte les transferts par rayonnement et par conduction. On peut ainsi distinguer la diffusivité phonique (due aux phonons) de la diffusion par rayonnement (due aux photons) [48–52].

Application aux matériaux bicouches et au contrôle non destructif

Concernant les matériaux bicouches, l'objectif est de caractériser un revêtement protecteur placé sur un substrat. La méthode flash ne sert ici pas seulement à caractériser un revêtement mais elle est aussi une méthode de contrôle non destructif [53–58].

2.3 Apport des méthodes numériques et des estimateurs

A l'origine, la méthode de Parker permet d'estimer la diffusivité à partir du temps de demi-montée (Eq.2.8) et de la température limite. Une telle méthode était à l'époque très pratique puisqu'on ne disposait d'aucun moyen de calculs performants. Elle présente l'inconvénient de n'exploiter qu'une petite partie du thermogramme. La méthode dite « des temps partiels » [15, 38, 59] a permis d'améliorer la précision de l'estimation en utilisant plusieurs points du thermogramme tout en prenant en compte les pertes avec l'environnement. La méthode des « moments partiels » [15, 38] va plus loin en exploitant tout le thermogramme pour calculer les moments⁸ d'ordre 0 et -1 . On peut aussi évoquer la méthode de la « transformation logarithmique » [60]. L'idée est simplement d'appliquer une transformation aux mesures de façon à transformer le problème en un simple problème d'estimation de droite. Etant donnée la puissance de calcul disponible actuellement, cette volonté de chercher un raccourci, une astuce, pour simplifier l'estimation n'a plus vraiment lieu d'être. L'application directe des estimateurs à minimum de variance⁹ aux mesures fournit les estimations non biaisées avec la plus faible variance possible.

2.4 Apport des instruments de mesure

Les instruments de mesure ont également considérablement évolué. Les progrès au niveau de l'électronique, des amplificateurs, des convertisseurs AN et des fréquences de fonctionnement ont permis de mesurer un signal électrique avec une meilleure précision.

8. Généralisation de la moyenne (moment d'ordre 1), de la variance (moment d'ordre 2) et de l'asymétrie (moment d'ordre 3) à un ordre quelconque.

9. Voir les méthodes du Maximum de Vraisemblance (§2.5 p25) et du Maximum a Posteriori (§2.6 p28).

Les progrès de l'électronique et des détecteurs infrarouges ont permis l'apparition de caméras infrarouges de plus en plus performantes. Dans certaines conditions, ces outils permettent de connaître l'évolution spatio-temporelle (au pixel près) de la température d'une surface. Une caméra infrarouge, c'est « l'équivalent » de dizaines de milliers, voire centaines de milliers de capteurs placés sur un échantillon. Cette surabondance d'information a permis l'apparition de nouvelles méthodes [27, 29, 30] d'estimation de la diffusivité thermique dans chaque direction de matériaux anisotropes. La thermographie permet également d'estimer, non plus une ou trois diffusivités, mais la diffusivité thermique en chaque pixel de l'image thermique [28, 61] (voir aussi Orlande [62, p.270]).

2.5 Apport des solutions analytiques

L'estimation de paramètres thermophysiques s'associe particulièrement bien aux solutions analytiques. Une raison à cela est que l'utilisateur est libre de choisir le dispositif expérimental, les conditions limites, le type d'excitation... qui correspondent à sa solution analytique.

Contrairement aux approches numériques (par exemple volumes finis), où les sorties d'un modèle sont calculées pour des paramètres fixés, la solution analytique contient, d'une certaine manière, toutes les solutions. Elle permet d'apprécier facilement comment évoluent les sorties en fonction des paramètres d'entrée et éventuellement de déceler des astuces ou des conditions expérimentales qui amélioreraient la qualité de l'estimation. Le calcul des sensibilités se fait simplement par dérivation de l'expression.

Par ailleurs, l'utilisation de solutions analytiques permet de s'affranchir des éventuelles erreurs dues à la méthode numérique utilisée pour la résolution. La troncature des séries infinies souvent nécessaire ne change rien puisqu'il n'est généralement pas difficile de majorer la partie tronquée de la série. On peut toutefois distinguer les solutions analytiques de ce que l'on pourrait appeler des solutions « pseudo analytiques » qui s'expriment dans des espaces particuliers, comme l'espace de Laplace. Si la solution dans l'espace physique est nécessaire, les méthodes numériques de transformée inverse doivent être utilisées. Dans le cas de la transformée inverse de Laplace, il existe plusieurs algorithmes plus ou moins performants (voir §2.5.4 p184) suivant le problème considéré si bien qu'il subsiste parfois un doute sur la validité des résultats.

2.6 L'estimateur de la méthode flash 1D avec pertes

La méthode flash 3D (§3 p86) s'appuie en grande partie sur certains résultats développés ici pour la méthode flash 1D. C'est aussi le cas de la comparaison des estimateurs (§5 p114). On montre également comme la méthode MAP permet de corriger l'erreur de synchronisation modèle-expérience ainsi que l'erreur sur la température initiale.

2.6.1 Le modèle

La méthode flash classique suppose que l'échantillon, d'épaisseur l_z , est plan, isotrope, homogène et opaque à l'excitation. Les conditions limites sur ses faces avant et arrière sont de type convectif. Les échanges radiatifs et convectifs sont linéarisés et intégrés dans un coefficient d'échange h . La température (relative) du fluide est nulle. A l'instant initial, une des faces de l'échantillon est soumise à une densité de chaleur impulsionnelle uniformément répartie sur la face avant ($z = 0$) de l'échantillon :

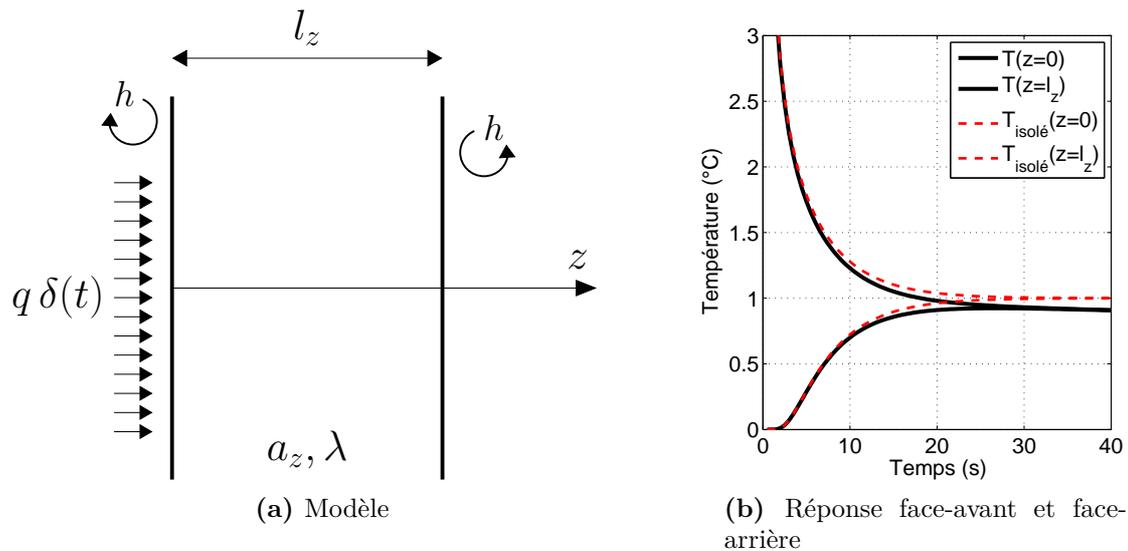


Figure 2.1 – Méthode flash monodimensionnelle. La figure (b) montre la réponse en face avant et en face arrière dans le cas où $H = h l_z / \lambda = 0,05$ et $H = 0$ (mur isolé). Les paramètres sont spécifiés dans le tableau (Tab.A.1 p276).

Le système d'équations associé à ce modèle (Fig.2.1) est donc le suivant :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial T}{\partial t} &= a_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} && \text{pour } 0 < z < l_z \\
 -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} &= -hT + q \delta(t) && \text{pour } z = 0 \\
 -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} &= hT && \text{pour } z = l_z \\
 T &= 0 && \text{pour } t = 0
 \end{aligned}$$

Ce modèle fait intervenir les paramètres inconnus $[a_z, \lambda, h, q]^T$ qu'il va donc falloir estimer. Cependant, la solution analytique ci-dessous (Annexe 2 p277) montre que tous ces paramètres ne sont pas indépendants : il y a 4 paramètres inconnus mais seulement 3 degrés de liberté, à savoir les paramètres $[\tau_z, T_{lim}, H]^T$.

$$T(z,t) = 2 T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \quad (2.9)$$

$$\text{Avec } \begin{cases} T_{lim} &= \frac{q}{\rho C l_z} \\ \tau_z &= \frac{a_z}{l_z^2} \\ H &= \frac{h l_z}{\lambda_z} \\ Z_k &= u_k \cos(u_k z / l_z) + H \sin(u_k z / l_z) \end{cases}$$

Les coefficients u_k sont les solutions strictement positives de l'équation transcendante suivante (Annexe 2.3 p282) :

$$2Hu \cos(u) = \sin(u) (u^2 - H^2) \quad (2.10)$$

La figure (Fig.2.1.b) montre le comportement du matériau lorsqu'on le soumet à une excitation impulsionnelle. Sa température en face avant tend vers l'infini en $t = 0^+$ et décroît de façon monotone jusqu'à la température limite adiabatique T_{lim} si l'échantillon est isolé, ou vers 0 sinon. En face arrière, la température augmente avec un temps de retard correspondant au temps nécessaire au matériau pour diffuser l'énergie reçue en face avant. En comparant les cas isolé et non isolé, on constate que les pertes avec l'environnement se ne manifestent qu'aux temps « longs ». Dans un environnement au repos et à température ambiante, l'effet des pertes avec l'environnement est faible aux temps courts.

2.6.2 L'estimateur

La solution analytique (Eq.2.9) montre que la diffusivité a_z n'est pas indépendante de l'épaisseur l_z . Estimer a_z nécessite tout d'abord d'estimer τ_z . Les 3 paramètres inconnus sont :

$$\beta = [\tau_z, T_{lim}, H]^T$$

Pour les estimer, n'importe quel estimateur évoqué précédemment convient (§2.3 p77). Cependant, le meilleur estimateur linéaire non biaisé étant donné par le maximum de vraisemblance (MLE), c'est lui que l'on utilise ici.

Le problème inverse étant ici non-linéaire (§3.1.3 p36), l'estimation est obtenue avec un algorithme de type gradient (§3.3 p38). Cependant, le calcul de l'écart-type théorique ne fait pas appel à un algorithme puisque l'on considère le modèle linéarisé en un point particulier β_0 . Le calcul de la matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ (Eq.1.29 p20) n'est possible que si on connaît les sensibilités X_β du modèle (Annexe 2.2.2 p282), or celles-ci dépendent de la solution de l'estimation. La seule chose que l'on puisse faire est donc de calculer cette matrice avec des valeurs approchées (ici β_0) que l'on estime être de bonnes approximations de la solution. Les écarts-types des paramètres β sont donnés dans le tableau (Tab.2.1). Pour avoir des ordres de grandeur à l'esprit, la température limite T_{lim} et l'écart-type σ_m du bruit de mesure¹⁰ ont été

10. Le bruit de mesure est supposé Gaussien, additif, indépendant du capteur et constant dans le temps. On a ainsi $\text{cov}(Y^*|\beta) = \sigma_m^2 \mathbf{I}$.

Paramètres	Valeurs	Ecart-type	Ecart-type relatif
<i>Matériau isolant (Face avant)</i>			
τ_z	$2.10^{-2} s^{-1}$	$5,44.10^{-4} s^{-1}$	2,72 %
T_{lim}	$4.10^{-2} ^\circ C$	$6,29.10^{-4} s^{-1}$	1,57 %
H	5.10^{-2}	$8,40.10^{-3} s^{-1}$	16,8 %
<i>Matériau isolant (Face arrière)</i>			
τ_z	$2.10^{-2} s^{-1}$	$4,56.10^{-4} s^{-1}$	2,28 %
T_{lim}	$4.10^{-2} ^\circ C$	$1,38.10^{-4} s^{-1}$	3,44 %
H	5.10^{-2}	$2,75.10^{-3} s^{-1}$	55,0 %
<i>Matériau conducteur (Face avant)</i>			
τ_z	$2.10^{-1} s^{-1}$	$4,47.10^{-3} s^{-1}$	2,72 %
T_{lim}	$4.10^{-2} ^\circ C$	$3,31.10^{-4} s^{-1}$	0,83 %
H	5.10^{-2}	$1,03.10^{-3} s^{-1}$	2,06 %
<i>Matériau conducteur (Face arrière)</i>			
τ_z	$2.10^{-1} s^{-1}$	$5,95.10^{-3} s^{-1}$	2,98 %
T_{lim}	$4.10^{-2} ^\circ C$	$3,43.10^{-4} s^{-1}$	8,58 %
H	5.10^{-2}	$2,28.10^{-3} s^{-1}$	4,57 %

Tableau 2.1 – Ecart-types théoriques de la méthode flash avec la méthode MLE et pour les paramètres génériques (Tab.A.1 p276)

choisis de façon à être cohérents avec les résultats des sections suivantes :

$$T_{lim} = 0,04 ^\circ C \quad \text{et} \quad \sigma_m = 0,002 ^\circ C$$

Remarque sur les valeurs de T_{lim} et σ_m

Ces valeurs, en apparence faibles, correspondent aux valeurs que l'on rencontre par la suite avec le modèle 3D. T_{lim} correspond à la température limite obtenue avec un échantillon de dimension $l_x \times l_y \times l_z$ lorsqu'il reçoit une énergie $Q = 1 J$. Cette énergie correspond à celle déposée par un laser 100 W pendant 10 ms. σ_m correspond à l'écart-type du champ moyen d'une caméra infrarouge possédant $N_x \times N_y = 2500$ pixels avec un écart-type de chaque pixel égal à $0,1 ^\circ C$. Avec ces valeurs de T_{lim} et σ_m , le rapport signal sur bruit T_{lim}/σ_m n'est plutôt faible (environ 20) mais cela n'est pas vraiment problématique pour l'estimation de τ_z puisque l'écart-type relatif théorique reste raisonnable (environ 3%) (Tab.2.1).

2.6.3 Extension du modèle

L'expression analytique du modèle (Eq.2.9) est bien adaptée à des données simulées. Face à des données réelles, un modèle de ce type peut présenter des biais car il suppose notamment deux choses :

1. L'instant initial du modèle correspond parfaitement à l'instant initial de l'expérience. Or cela n'est bien sur pas le cas puisque l'excitation réelle n'est pas impulsionnelle¹¹ et une

11. Comme cela fut évoqué dans les sections précédentes, une façon de corriger le modèle de la méthode flash

synchronisation précise entre l'excitation thermique et les appareils de mesure est difficile à réaliser.

2. Les observables sont calculés à partir des mesures de température en leur retranchant la valeur de la température initiale qui est mal connue. Même si celle-ci est calculée en moyennant un grand nombre de mesures, il peut être utile de laisser à l'algorithme la possibilité d'ajuster cette valeur.

On enrichit ainsi le modèle avec l'instant initial t_0 et la correction C sur la température initiale :

$$T(z,t) = C + 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 (t-t_0)} \quad (2.11)$$

Il est intéressant d'utiliser maintenant la méthode MAP (§2.6 p28) pour pouvoir intégrer de l'information a priori. On peut par exemple spécifier à la méthode MAP que les paramètres t_0 et C ont les valeurs a priori et les écarts-types a priori suivants :

$$\begin{aligned} \tilde{t}_0 &= 0 \text{ s} & \pm \sigma_{t_0}^{\text{prior}} &= 0,1 \text{ s} \\ \tilde{C} &= 0 \text{ }^\circ\text{C} & \pm \sigma_C^{\text{prior}} &= 10 \sigma_m = 0,02 \text{ }^\circ\text{C} \end{aligned}$$

Les mesures sont réalisées par thermographie infrarouge. Le bruit de mesure σ_m vaut $0,002 \text{ }^\circ\text{C}$ et l'énergie injectée au matériau est telle que T_{lim} vaut $0,04 \text{ }^\circ\text{C}$.

Comme le montre le tableau (Tab.2.2), les effets de t_0 et C sur σ_{τ_z} sont sensibles. Dans le cas d'un matériau isolant en face avant, σ_{τ_z} augmente de 20 % en ajoutant le paramètre t_0 , et de 80 % en ajoutant C et t_0 . En face arrière, c'est l'ajout du paramètre t_0 qui dégrade fortement l'estimation de τ_z puisque son écart-type augmente de 240 %. L'augmentation de l'écart-type est systématique et vaut pour tous les paramètres. En ajoutant des degrés de liberté au modèle, on augmente la variance mais on améliore les résidus.

Dans le cas de la méthode flash face-arrière, le fait d'intégrer le paramètre t_0 augmente considérablement σ_{τ_z} ce qui signifie que t_0 et τ_z sont deux paramètres assez liés puisque si leurs sensibilités étaient indépendantes, ajouter t_0 n'aurait pas modifié σ_{τ_z} . En face arrière, on constate aussi qu'il est difficile d'estimer t_0 . Son écart-type théorique (0,27 s et 0,32 s suivant la situation) est 3 fois supérieur à l'écart-type a priori σ_{t_0} . Cela signifie qu'en intégrant l'information a priori dans la méthode MAP, l'écart-type de tous les paramètres et notamment τ_z devrait diminuer significativement. Cela est effectivement le cas comme le montrent les valeurs entre parenthèses du tableau. On divise ainsi par plus de 2 l'écart-type de τ_z et par 10 l'écart-type de t_0 .

pour prendre en compte le caractère non impulsionnel de l'excitation est de décaler l'origine des temps.

Param- ètres	Ecart-type initial	Ajout de t_0	Ajout de C et t_0
<i>Matériau isolant (Face avant)</i>			
τ_z	2,72 %	3,37 % (3,37)	4,86 % (4,85) [biais = 0,28 %]
T_{lim}	1,57 %	2,16 % (2,16)	2,83 % (2,82) [biais = 7,12 %]
H	16,8 %	25,0 % (25,0)	91,5 % (91,0) [biais = 0,15 %]
t_0		0,0014 s (0,0014)	0,0014 s (0,0014) [biais = 0,000 s]
C			0,0016 °C (0,0016) [biais = 0,0001 °C]
<i>Matériau isolant (Face arrière)</i>			
τ_z	2,28 %	7,17 % (3,27)	7,56 % (3,52) [biais = 1,97 %]
T_{lim}	3,44 %	5,86 % (3,81)	6,60 % (3,81) [biais = 19,8 %]
H	55,0 %	89,7 % (60,2)	91,9 % (62,8) [biais = 1,51 %]
t_0		0,27 s (0,094)	0,32 s (0,096) [biais = 0,091 s]
C			0,00045 °C (0,00039) [biais = 0,0001 °C]
<i>Matériau conducteur (Face avant)</i>			
τ_z	2,72 %	3,11 % (3,11)	6,06 % (5,99)
T_{lim}	0,83 %	0,83 % (0,83)	8,22 % (8,08)
H	2,06 %	2,88 % (2,88)	17,0 % (16,7)
t_0		0,0040 s (0,0040)	0,0086 s (0,0085)
C			0,0034 °C (0,0033)
<i>Matériau conducteur (Face arrière)</i>			
τ_z	2,98 %	7,32 % (6,74)	7,56 % (6,79)
T_{lim}	8,58 %	0,96 % (0,95)	3,96 % (3,67)
H	4,57 %	8,65 % (8,06)	9,27 % (9,07)
t_0		0,047 s (0,043)	0,061 s (0,052)
C			0,0015 °C (0,0015)

Tableau 2.2 – Ecart-types théoriques de la méthode flash avec le modèle étendu dans lequel on a ajouté l'erreur de synchronisation t_0 seule dans un premier temps, puis l'erreur d'offset C . Les valeurs entre parenthèses correspondent aux valeurs obtenues avec la méthode MAP qui prend en compte l'information a priori. Toutes les valeurs du tableau ont été calculées à partir de l'expression (Eq.1.55 p31). Les valeurs entre crochets correspondent à l'écart-type du biais, calculé avec l'expression (Eq.1.63 p34).

Dans certains cas, le gain apporté par la méthode MAP est minime et la méthode MLE pourrait être utilisé. En effet, l'écart-type de t_0 est très inférieur à l'écart-type a priori : les observables fournissent tellement d'information que l'information a priori sur t_0 et C n'a pas d'effet significatif.

On pourrait également corriger l'éventuelle dérive temporelle des appareils de mesure en ajoutant un terme supplémentaire. Cela est présenté dans le cadre de la méthode flash 3D (§5.4.5 p139).

Chapitre 2. La méthode flash 3D

On vient de voir que la méthode MAP permet de réduire l'incertitude sur les estimations. Cependant, en contrepartie, elle introduit un biais (§2.7.4 p33) :

$$\mathbb{E} [\hat{\beta}] - \dot{\beta} = \underbrace{[X^T W X + Q]^{-1}}_B Q (\tilde{\beta} - \dot{\beta}) \neq 0 \quad (2.12)$$

Contrairement au calcul de la matrice de variance-covariance $\text{cov}(\dot{\beta}|Y^*)$ qui ne nécessite pas la connaissance de $\dot{\beta}$, le biais ne peut pas être évalué sans connaître ce vecteur. On peut toutefois calculer la matrice B définie dans l'expression ci-dessus. Dans le cas de la méthode flash face avant appliquée au matériau isolant avec le modèle étendu (ajout de t_0 et C), on a par exemple :

$$\mathbb{E} [\hat{\beta}] - \dot{\beta} = \begin{bmatrix} \mathbb{E} [\hat{\tau}_z] - \dot{\tau}_z \\ \mathbb{E} [T_{lim}] - \dot{T}_{lim} \\ \mathbb{E} [H] - \dot{H} \\ \mathbb{E} [t_0] - \dot{t}_0 \\ \mathbb{E} [C] - \dot{C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -0,0001 & 0,0028 \\ 0 & 0 & 0 & -0,0016 & 0,1777 \\ 0 & 0 & 0 & -0,0001 & 0,0029 \\ 0 & 0 & 0 & 0,0002 & -0,0003 \\ 0 & 0 & 0 & 0,0000 & 0,0066 \end{bmatrix} (\tilde{\beta} - \dot{\beta}) \quad (2.13)$$

On constate tout d'abord qu'un biais existe pour tous les paramètres. Comme aucune information a priori concernant les paramètres τ_z , T_{lim} et H n'est fournie, celle-ci ne peut pas biaiser l'estimation. Aussi, il n'est pas étonnant que les 3 premières colonnes de B soient nulles. Quant aux 2 dernières colonnes de B , elles correspondent respectivement aux paramètres t_0 et C . Le biais est donc la combinaison linéaire des écarts entre \tilde{t}_0 et \dot{t}_0 ainsi que de \tilde{C} et \dot{C} . Si on ne s'intéresse au biais sur τ_z uniquement (la première ligne de B), on obtient après normalisation par $\tilde{\tau}_z$, $\sigma_{\tau_z}^{\text{prior}}$ et σ_C^{prior} (les écarts-types a priori sur τ_z et C) :

$$\frac{\mathbb{E} [\hat{\tau}_z] - \dot{\tau}_z}{\tilde{\tau}_z} = -0,0003 \frac{\tilde{\tau}_z - \dot{\tau}_z}{\sigma_{\tau_z}^{\text{prior}}} + 0,0028 \frac{\tilde{C} - \dot{C}}{\sigma_C^{\text{prior}}} \quad (2.14)$$

Ainsi, si l'écart entre la valeur a priori $\tilde{\tau}_z$ de τ_z et la valeur exacte $\dot{\tau}_z$ vaut $\sigma_{\tau_z}^{\text{prior}}$, le biais engendré est ici de 0,03%. Concernant le paramètre C , le biais engendré par un écart d'un écart-type est de 0,3%.

On peut également calculer un écart-type du biais sur chaque paramètre à partir de l'expression (Eq.1.63 p34) :

$$\text{cov}(\mathbb{E} [\hat{\beta}] - \dot{\beta}) = [X^T W X + Q]^{-1} Q [X^T W X + Q]^{-1}$$

Cette expression considère que la valeur $\tilde{\beta}$, qui est spécifiée par l'utilisateur, est une variable aléatoire. L'expression suppose qu'en moyenne, l'utilisateur ne se trompe pas, donc $\mathbb{E} [\tilde{\beta}] = \dot{\beta}$. Elle suppose de plus que l'écart $\tilde{\beta} - \dot{\beta}$ suit une loi normale caractérisée par une matrice de

variance-covariance égale à celle qui caractérise la densité a priori de $\hat{\beta}$, c'est à dire $p(\hat{\beta})$. En prenant la racine carré des coefficients diagonaux, on obtient un écart-type qui caractérise le biais de chaque paramètre. Il s'agit des valeurs entre crochets dans le tableau (Tab.2.2). Le biais dont il est question, est le biais généré par l'écart entre les valeurs a priori et les valeurs exactes et non du biais résultant d'une erreur de modèle. Ce dernier peut être plus important.

Les écarts-types des biais concernant les paramètres t_0 et C pour le matériau isolant sont relativement faibles et notamment pour une méthode flash face-avant. Par exemple, l'écart-type a posteriori de t_0 vaut $0,0014 s$ alors que l'écart-type a priori vaut $0,1 s$. Il y a donc un facteur d'environ 100 entre les deux, ce qui signifie que l'information relative au paramètre t_0 fournie par les observables est conséquente. Si l'expérience ne fournissait aucune information sur t_0 , l'écart-type a posteriori serait égal à l'écart-type a priori (voir exemple §5.3.1 p62). Plus la quantité d'information sur t_0 est importante, moins l'estimation aura tendance à dépendre de la valeur a priori.

Quant au biais de T_{lim} , on constate qu'il est relativement important. Ce dernier n'est pas du à une erreur entre \tilde{T}_{lim} et \dot{T}_{lim} puisque l'écart-type a priori $\sigma_{T_{lim}}^{prior}$ est infini, mais comme le suggère l'expression (Eq.2.13), le biais sur T_{lim} est avant tout du à l'écart \tilde{C} et \dot{C} .

Remarque :

On évoquait dans le chapitre précédent (§5.2.1 p55) qu'il n'est pas rare de devoir estimer des paramètres a priori nuls. Le modèle ci-dessus est typiquement un cas où la définition classique des coefficients de sensibilité réduite pose problème.

3 La méthode flash 3D

On se place maintenant dans un cas plus général, où les transferts de chaleur ne sont plus seulement suivant l'épaisseur du matériau mais aussi dans le plan.

Le principe de la méthode flash 3D [27, 63] consiste à appliquer une densité d'énergie non-uniforme de façon à générer des transferts de chaleur dans toutes les directions du matériau. Une caméra infrarouge relève le champ de température en fonction du temps en face avant ou en face arrière. Toutes ces données sont ensuite traitées pour extraire les diffusivités thermiques dans chaque direction d'un matériau anisotrope.

3.1 Les matériaux anisotropes

Avec des matériaux anisotropes, la chaleur peut se propager plus rapidement dans certaines directions. Il faut alors revenir à l'équation plus générale de la chaleur faisant intervenir le tenseur des diffusivités (Eq.2.6). Si le tenseur est symétrique, alors il existe une base orthogonale dans laquelle il est diagonal. Dans cette base (x, y, z) , l'équation de la chaleur s'écrit :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \lambda_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \tag{2.15}$$

Un exemple est présenté sur la figure (Fig.2.2). Un matériau composite à base de fibres est schématisé. Ici, les deux directions principales x et y du tenseur ne suivent pas les fibres. La forme de l'ellipse, plus allongée suivant x , signifie que la conduction de la chaleur est favorisée dans cette direction. Les fibres, supposées ici plus conductrices que la matrice, favorisent le transfert suivant x par leurs orientations.

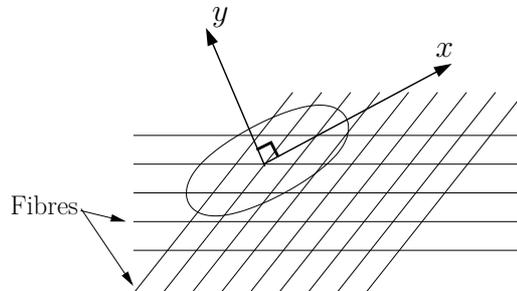


Figure 2.2 – Directions principales du tenseur des diffusivités thermiques dans le cas d'un matériau composite à base de fibres. L'ellipse montre très schématiquement l'allure des courbes d'isotherme obtenues avec le matériau homogène équivalent si l'on déposait de l'énergie ponctuellement au centre du repère.

3.2 Description et résolution analytique du système

3.2.1 Le système étudié et le modèle associé

On considère un échantillon parallélépipédique isolé sur les faces latérales et soumis à une densité de flux non-uniforme sur la face avant (Fig.2.3). Il nous faut ici résoudre le problème de conduction instationnaire 3D suivant :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + a_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + a_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.16a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = 0 \text{ et } x = l_x \quad (2.16b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad \text{pour } y = 0 \text{ et } y = l_y \quad (2.16c)$$

$$-\lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} = -hT + \Phi(x, y, t) \quad \text{pour } z = 0 \quad (2.16d)$$

$$-\lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} = hT \quad \text{pour } z = l_z \quad (2.16e)$$

$$T = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (2.16f)$$

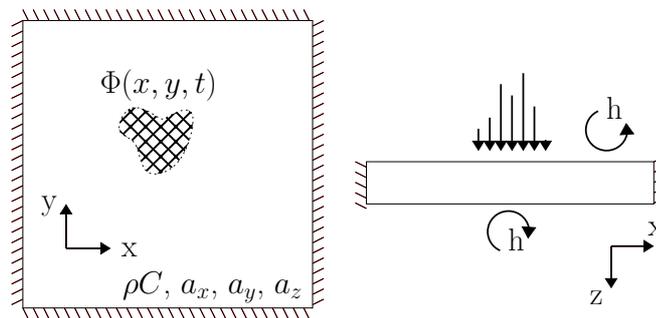


Figure 2.3 – Schéma du modèle défini par le système d'équations.

Les hypothèses utilisées pour ce modèle sont les suivantes :

1. L'échantillon est supposé plan pour pouvoir travailler dans un repère cartésien.
2. La conductivité thermique et la capacité thermique sont supposées uniformes et indépendantes de la température ce qui est justifié si on travaille avec de faibles élévations de température. Les diffusivités thermiques sont donc uniformes : le matériau est homogène.
3. On suppose que le matériau est homogénéisé et que son tenseur des diffusivités est diagonal. En d'autres termes, on suppose que l'on connaît les directions principales du matériau qui correspondent aux axes x , y et z du repère cartésien.
4. Les transferts thermiques dans l'échantillon sont uniquement conductifs.

5. Les pertes thermiques en face avant et en face arrière sont linéarisées et modélisées avec un coefficient d'échange h uniforme par rapport à une température de référence nulle.
6. L'isolation des échantillons est supposée parfaite sur les bords latéraux.

Remarque sur les parois latérales isolées

Le modèle suppose que les parois latérales (en x et y) sont parfaitement isolées. Il n'est pas nécessaire que les dimensions l_x et l_y spécifiées dans le modèle correspondent aux dimensions réelles de l'échantillon. Sur l'image thermique de l'échantillon fournie par la caméra infrarouge, on peut choisir librement les bords « virtuels » de l'échantillon tant que l'on s'assure qu'aucun flux de chaleur ne les traverse. Quelques résultats sont présentés dans l'annexe (Annexe 4.2 p303) lorsque cette condition n'est plus respectée.

3.2.2 La solution analytique

La solution du système (Eq.2.16) peut être obtenue en utilisant les transformées intégrales¹² (§3.1 p289). Pour résoudre ce système, on utilise ici la transformée de Laplace en temps et une transformée de Fourier cosinus en espace¹³ :

$$\theta(\alpha_m, \beta_n, z, p) = \int_0^\infty \int_0^{l_x} \int_0^{l_y} T(x,y,z,t) X_m(x) Y_n(y) e^{-pt} dt dx dy \quad (2.17)$$

$$\text{Avec : } X_m(x) = \cos(\alpha_m x) \quad \text{et} \quad Y_n(y) = \cos(\beta_n y)$$

L'intérêt des transformées intégrales est de se placer dans une base de fonctions où la résolution du système est plus simple. On passe en effet d'un système *d'équations différentielles* dont les variables explicatives sont x, y, z, t à un système *d'équations algébriques* où les variables sont z, p, α_m, β_n , respectivement la position suivant l'axe z , la variable de Laplace et les pulsations en x et y associées aux fréquences spatiales d'indice m et n . La solution $\theta(\alpha_m, \beta_n, z, p)$ s'écrit alors dans l'espace transformé (Annexe 3 p289) :

$$\theta(\alpha_m, \beta_n, z, p) = \Phi \frac{[\cosh(\gamma l_z) + \frac{h}{\lambda \gamma} \sinh(\gamma l_z)] \cosh(\gamma z) - [\frac{h}{\lambda \gamma} \cosh(\gamma l_z) + \sinh(\gamma l_z)] \sinh(\gamma z)}{2h \cosh(\gamma l_z) + \lambda \gamma \sinh(\gamma l_z) + \frac{h^2}{\lambda \gamma} \sinh(\gamma l_z)} \quad (2.18)$$

$$= \Phi_{(\alpha_m, \beta_n, p)} \mathcal{H}(z, \gamma) \quad (2.19)$$

Avec :

$$\begin{cases} \gamma^2 & = \frac{p}{a_z} + \frac{a_x}{a_z} \alpha_m^2 + \frac{a_y}{a_z} \beta_n^2 \\ \alpha_m & = \frac{m\pi}{l_x} \\ \beta_n & = \frac{n\pi}{l_y} \\ \Phi(\alpha_m, \beta_n, p) & \text{La transformée de l'excitation thermique } \Phi(x, y, t). \end{cases}$$

12. Il existe une autre méthode très répandue pour obtenir la solution analytique de problèmes linéaires aux conditions limites un peu complexes. Il s'agit des fonctions de Green ([64, p.214]).

13. La transformée en espace à utiliser dépend des conditions limites du problème. Lorsque les bords latéraux de l'échantillon sont isolés, on utilise la transformée en cosinus. Si la température est imposée aux bords, il faut utiliser la transformée en sinus.

L'expression ci-dessus est valable quel que soit z . L'expression (Eq.2.18) se simplifie en $z = 0$ (face avant) et $z = l_z$ (face arrière). On obtient alors ce qui est accessible par la thermographie infrarouge :

$$\theta(\alpha_m, \beta_n, 0, p) = \Phi_{(\alpha_m, \beta_n, p)} \frac{\cosh(\gamma l_z) + \frac{h}{\lambda \gamma} \sinh(\gamma l_z)}{2h \cosh(\gamma l_z) + \lambda \gamma \sinh(\gamma l_z) + \frac{h^2}{\lambda \gamma} \sinh(\gamma l_z)} \quad (2.20)$$

$$\theta(\alpha_m, \beta_n, l_z, p) = \Phi_{(\alpha_m, \beta_n, p)} \frac{1}{2h \cosh(\gamma l_z) + \lambda \gamma \sinh(\gamma l_z) + \frac{h^2}{\lambda \gamma} \sinh(\gamma l_z)} \quad (2.21)$$

Ces deux expressions correspondent à la composante du champ de température, en face avant et arrière, dans la base de fonctions cosinus $X_m(x)$ et $Y_n(y)$ en fonction du temps (de p).

3.2.3 La forme spatiale de l'excitation

Afin de pouvoir utiliser les expressions analytiques précédentes pour calculer numériquement les champs de température, il faut spécifier la valeur de la fonction $\Phi(\alpha_m, \beta_n, p)$. Pour simplifier les développements, on suppose que la fonction d'excitation Φ peut se décomposer en un produit d'une fonction de l'espace et d'une fonction du temps. Cette hypothèse restreint l'ensemble des excitations qu'il est mathématiquement possible de considérer. Cependant, en pratique, cette décomposition s'avère pertinente, notamment pour les excitations de courte durée :

$$\underbrace{\Phi(x, y, t)}_{[W m^{-2}]} = \underbrace{Q}_{[J]} \underbrace{r(x, y)}_{[m^{-2}]} \underbrace{u(t)}_{[s^{-1}]} \iff \underbrace{\Phi(\alpha_m, \beta_n, p)}_{[J]} = \underbrace{Q}_{[J]} \underbrace{r(\alpha_m, \beta_n)}_{[-]} \underbrace{u(p)}_{[-]} \quad (2.22)$$

La fonction $r(x, y)$ est appelée « fonction de forme » et décrit la répartition spatiale de l'énergie de l'excitation. Il s'agit d'une fonction positive mais non bornée. Le paramètre Q en $[J]$ correspond à l'énergie fournie à l'échantillon pendant toute la durée de l'expérience. $u(t)$ décrit la répartition temporelle de l'énergie.

Dans la solution analytique (Eq.2.18), c'est la transformée de $r(x, y)$ qui intervient. Avec $X_m(x)$ et $Y_n(y)$ la base de fonctions dans laquelle la solution a été déterminée, la transformée de la fonction $r(x, y)$, prend ses valeurs dans \mathcal{N}^2 et vaut :

$$r(\alpha_m, \beta_n) = \int_{x=0}^{l_x} \int_{y=0}^{l_y} r(x, y) X_m(x) Y_n(y) dx dy = R_{m,n} \quad (2.23)$$

La figure (Fig.2.4) présente quelques fonctions de forme rencontrées usuellement et utilisées notamment pour des tests numériques. Les transformées spatiales de ces fonctions sont données en annexe (Annexe 3.2 p291) :

Le flux uniforme : L'énergie Q est répartie de façon uniforme en espace. La fonction de forme vaut $r(x, y) = \frac{1}{l_x l_y}$. Sa transformée vaut donc 1 en $(m, n) = (0, 0)$ et 0 sinon.

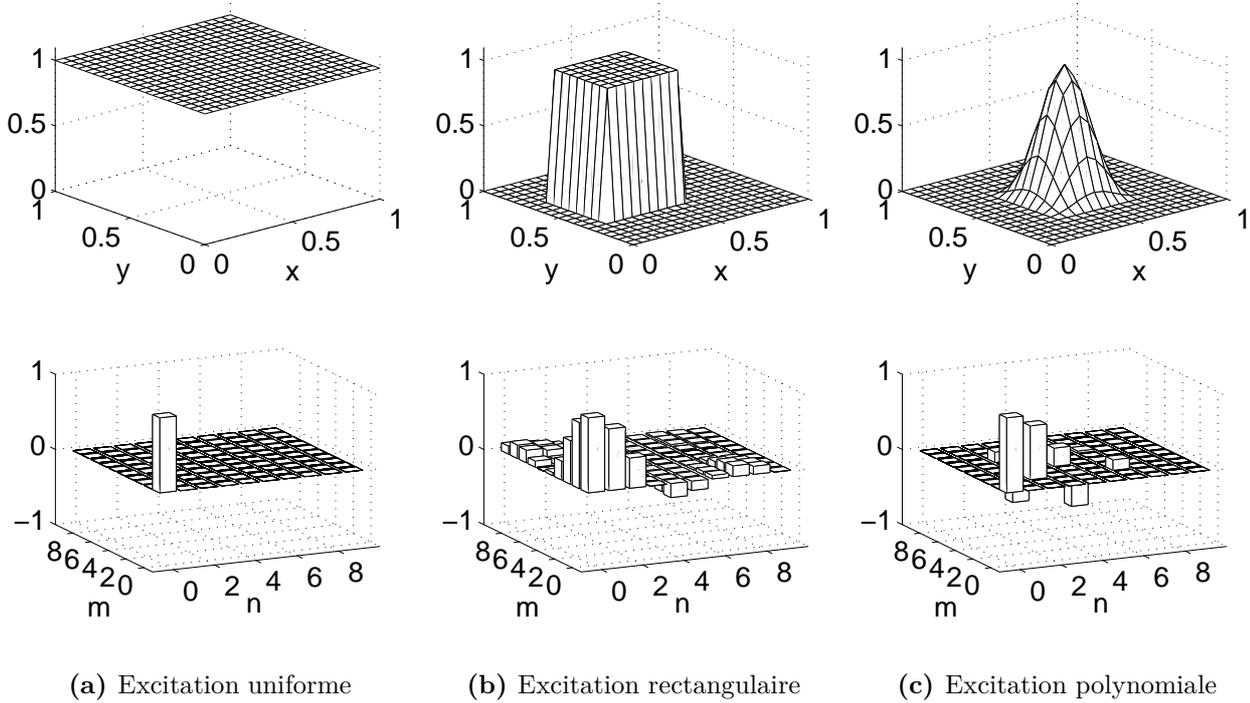


Figure 2.4 – Exemples de fonctions de forme $r(x, y)$ avec leur transformée spatiale respective $r(\alpha_m, \beta_n)$ normalisée par la valeur à l'origine $r(\alpha_m = 0, \beta_n = 0)$. Seules les 10 premières harmoniques dans chaque direction sont affichées. Lorsque l'excitation est centrée sur l'échantillon et est symétrique, les coefficients correspondant aux fréquences paires (m ou n pair) sont nuls.

Le patch rectangulaire : L'énergie est répartie uniformément sur une zone rectangulaire de l'échantillon. Sa transformée fait intervenir la fonction sinus cardinal.

Le spot cubique : Le spot cubique est utilisé pour simuler une excitation gaussienne. De par sa définition, il est à variables séparables en espace, ce qui le rend plus simple à utiliser. Comme il est centré sur l'échantillon, sa transformée est nulle si m ou n est impair. La fonction $r(x, y)$, qui le définit, est la suivante (Annexe 3.2.4 p293) :

$$r(x, y) = f(x) f(y) \quad \text{avec} \quad f(x) = \frac{1}{s} \begin{cases} 1 - 3 \left(\frac{x}{s}\right)^2 - 2 \left(\frac{x}{s}\right)^3 & \text{pour } -s \leq x < 0 \\ 1 - 3 \left(\frac{x}{s}\right)^2 + 2 \left(\frac{x}{s}\right)^3 & \text{pour } 0 \leq x \leq s \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.24)$$

Avec s le rayon du spot cubique en $[m]$.

3.2.4 La forme temporelle de l'excitation : l'impulsion

Pour la forme temporelle $u(t)$ de l'excitation, le choix est plus restreint. Seule l'excitation impulsionnelle permet de poursuivre le développement analytique. La transformée de Laplace d'un Dirac $\delta(t)$ vaut en effet :

$$u(p) = \int_0^\infty u(t) e^{-pt} dt = \int_0^\infty \delta(t) e^{-pt} dt = 1$$

Dès lors, la solution $\theta(\alpha_m, \beta_n, z, p)$ (Eq.2.19) dépend de la variable de Laplace p uniquement à travers le paramètre γ (Eq.2.19) :

$$\begin{aligned} \theta(\alpha_m, \beta_n, z, p) &= \Phi_{(\alpha_m, \beta_n, p)} \underbrace{\mathcal{H}(z, \gamma)}_{\text{ou } \mathcal{H}(z, \gamma^2)} \\ &= Q R_{m,n} \mathcal{H}\left(z, \underbrace{p + a_x \alpha_m^2 + a_y \beta_n^2}_{\gamma^2}\right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Or la propriété de translation de Laplace dit que :

$$\mathcal{L}^{-1} \{\mathcal{H}(p + k)\} = e^{-kt} \mathcal{L}^{-1} \{\mathcal{H}(p)\} \quad \text{avec ici } k = a_x \alpha_m^2 + a_y \beta_n^2 \quad (2.26)$$

En l'appliquant à (Eq.2.25), on dissocie les diffusivités thermiques a_x et a_y de $\mathcal{H}(z, \gamma^2)$:

$$\theta(\alpha_m, \beta_n, z, t) = Q R_{m,n} \mathcal{L}^{-1} \{\mathcal{H}(z, p)\} e^{-a_x \alpha_m^2 t - a_y \beta_n^2 t} \quad (2.27)$$

Or la température moyenne du champ de température, à une position z et à instant t , est obtenue en calculant la transformée de $\theta(\alpha_m, \beta_n, z, p)$ pour $(m, n) = 0$. Comme $R_{0,0} = 1$, le champ moyen vaut :

$$\theta(\alpha_0, \beta_0, z, p) = Q \mathcal{H}(z, p) \quad (2.28)$$

On peut montrer que cette expression est la solution du problème monodimensionnel dans l'espace de Laplace avec les mêmes conditions limites en z que le modèle tridimensionnel (Eq.2.16). En injectant son expression (Eq.2.9 p79) avec $T_{lim} = 1$ dans (Eq.2.27), on a :

$$\theta(\alpha_m, \beta_n, z, t) = Q R_{m,n} \left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right] e^{-(\tau_x m^2 + \tau_y n^2) \pi^2 t} \quad (2.29)$$

Chapitre 2. La méthode flash 3D

En revenant dans l'espace réel, on obtient l'expression de la température en tout point (x, y, z) et à tout instant t (voir Annexe A.3.39 p291) :

$$T(x,y,z,t) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u_k Q R_{m,n}}{\rho C} \frac{X_m(x)}{\|X_m\|^2} \frac{Y_n(y)}{\|Y_n\|^2} \frac{Z_k(z)}{\|Z_k\|^2} e^{-(\tau_x m^2 \pi^2 + \tau_y n^2 \pi^2 + \tau_z u_k^2)t} \quad (2.30)$$

Avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_x = a_x/l_x^2 \quad \text{et} \quad \tau_y = a_y/l_y^2 \quad \text{et} \quad \tau_z = a_z/l_z^2 \\ X_m(x) = \cos(m\pi x/l_x) \quad \text{et} \quad m \geq 0 \\ Y_n(y) = \cos(n\pi y/l_y) \quad \text{et} \quad n \geq 0 \\ Z_k(z) = u_k \cos(u_k z/l_z) + H \sin(u_k z/l_z) \\ u_k = \text{Solutions positives de l'équation transcendante (Eq.2.10)} \\ \|X_m\|^2 = \begin{cases} l_x & \text{si } m = 0 \\ l_x/2 & \text{si } m > 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \|Y_n\|^2 = \begin{cases} l_y & \text{si } n = 0 \\ l_y/2 & \text{si } n > 0 \end{cases} \\ \|Z_k\|^2 = \frac{l_z}{2} [u_k^2 + H^2 + 2H] \end{array} \right.$$

Ce modèle est utilisé pour estimer les diffusivités thermiques a_x, a_y, a_z en $[m^2 s^{-1}]$ à travers l'estimation des paramètres τ_x, τ_y, τ_z . Toutefois, d'autres paramètres inconnus interviennent également et doivent donc être estimés simultanément à τ_x, τ_y, τ_z :

- La capacité thermique volumique : ρC en $[J m^{-3} \text{ } ^\circ C^{-1}]$
- Le coefficient d'échange h à travers le nombre de Biot : H
- Les coefficients de la transformée de la fonction de forme : $R_{m,n}$ en $[m^{-2}]$
- L'énergie absorbée par le matériau : Q en $[J]$

Cependant, 3 d'entre eux peuvent être agrégés dans un unique paramètre $E_{m,n}$ défini par :

$$E_{m,n} = \frac{Q}{\rho C l_x l_y l_z} R_{m,n} = T_{lim} R_{m,n} \quad (2.31)$$

Remarque sur les paramètres $E_{m,n}$:

Le fait de rassembler des paramètres mal connus vaut à $E_{m,n}$ le surnom un peu familier de « paramètre poubelle ». On lui ajoutera par la suite le coefficient issu de la linéarisation de la loi d'étalement de la caméra infrarouge.

3.2.5 La forme temporelle de l'excitation : l'échelon

Pour obtenir la réponse à un échelon, on ne peut pas facilement reproduire la méthode utilisée pour l'impulsion. En effet, si $u(t)$ est un échelon, sa transformée de Laplace est $u(p) = 1/p$. Or faire intervenir p dans l'expression de θ nous empêche d'utiliser la propriété de translation

de Laplace. Le plus naturel est finalement d'intégrer la solution impulsionnelle (Eq.2.30) :

$$T(x,y,z,t) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{u_k P_{m,n} l_x l_y l_z}{\tau_x (m\pi)^2 + \tau_y (n\pi)^2 + \tau_z u_k^2} \times \frac{X_m(x)}{\|X_m\|^2} \frac{Y_n(y)}{\|Y_n\|^2} \frac{Z_k(z)}{\|Z_k\|^2} \left(1 - e^{-\left(\tau_x (m\pi)^2 + \tau_y (n\pi)^2 + \tau_z u_k^2\right)t} \right) \right] \quad (2.32)$$

$$\text{Avec : } P_{m,n} = \frac{P R_{m,n}}{\rho C l_x l_y l_z}$$

P en $[W]$, est ici la puissance absorbée par l'échantillon.

3.2.6 Evaluation numérique de la solution

Les expressions (Eq.2.30 et Eq.2.32) font intervenir 3 séries qu'il faut tronquer pour pouvoir les évaluer numériquement. A titre d'exemple, considérons uniquement la solution impulsionnelle et supposons que la fonction de forme soit à variables séparables de sorte que $r(x, y) = f_x(x) f_y(y)$. Ainsi, l'expression de T peut se scinder en 3 séries distinctes :

$$\begin{aligned} T(x,y,z,t) &= \left(\sum_{k=1}^K \bullet + \sum_{k=K+1}^{\infty} \bullet \right) \left(\sum_{m=0}^M \bullet + \sum_{m=M+1}^{\infty} \bullet \right) \left(\sum_{n=0}^N \bullet + \sum_{n=N+1}^{\infty} \bullet \right) \\ &= (S_K + e_K) (S_M + e_M) (S_N + e_N) \\ &= S_K S_M S_N + (e_K S_M S_N + e_M S_K S_N + e_N S_K S_M) + \\ &\quad (e_K e_M S_N + e_N e_K S_M + e_M e_N S_K) + e_K e_M e_N \end{aligned} \quad (2.33)$$

Pour évaluer l'erreur commise sur T , on peut conserver uniquement les termes d'ordre 1. Comme ces termes peuvent être majorés sans difficulté, on obtient une majoration de l'erreur de troncature. Par exemple, pour la série temporelle dont l'indice de sommation est k , on peut majorer l'erreur de troncature $e_K(z, t)$ lorsqu'elle est tronquée après l'indice K :

$$e_K(z,t) = 2 \sum_{k=K+1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} < 2 \sum_{k=K+1}^{\infty} e^{-\tau_z u_k^2 t}$$

On peut montrer que si $u_k > H$ alors $u_k > (k-1)\pi$, ce qui permet de simplifier davantage :

$$\begin{aligned} e_K(z,t) &< 2 \sum_{k=K}^{\infty} e^{-\tau_z \pi^2 k^2 t} < 2 \sum_{k=K}^{\infty} e^{-\tau_z \pi^2 k K t} \\ &< 2 \frac{e^{-\tau_z \pi^2 K^2 t}}{1 - e^{-\tau_z \pi^2 K t}} \end{aligned}$$

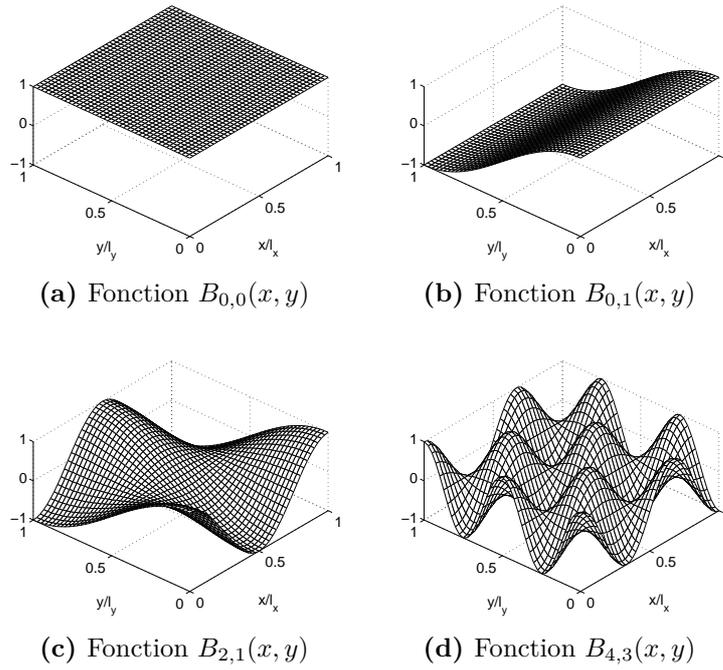


Figure 2.5 – Exemple de fonctions de base $B_{m,n}(x, y) = \cos(m\pi x) \cos(n\pi y)/(l_x l_y)$ de la transformée 2D en cosinus. De manière à normaliser les graphiques, x et y sont ici adimensionné par l_x et l_y .

On obtient donc finalement :

$$e_K(z,t) < 4 \frac{e^{-\tau_z \pi^2 t K (K-1/2)}}{\sinh\left(\frac{1}{2} \tau_z \pi^2 K\right)} \quad (2.34)$$

Quant aux séries en M et N , on peut poursuivre le calcul après avoir défini la forme de l'excitation ou majorer l'erreur en supposant l'excitation localisée (spatialement impulsionnelle). Ainsi, tous les coefficients $R_{m,n}$ valent 0, 1 ou -1 , ce qui permet d'obtenir une majoration similaire à celle donnée ci-dessus.

3.3 Harmoniques spatiales du champ de température

3.3.1 Description des harmoniques

Un champ de température $T(x, y, z, t)$ à un instant donné sur une des faces du matériau est une fonction bidimensionnelle qui peut être décrite dans la base de fonctions de notre choix. Cependant, dans notre situation, il y a une base qui se prête particulièrement bien à l'analyse des champs de température. Il s'agit, à un facteur près, de la même base de fonctions que celle utilisée pour déterminer la solution analytique du modèle. Toute fonction continue sur $[0; l_x] \times [0; l_y]$ peut en effet s'exprimer dans la base de fonctions $B_{m,n}(x, y)$ (Fig.2.5) définies par :

$$B_{m,n}(x, y) = \frac{1}{l_x l_y} \cos(m\pi x/l_x) \cos(n\pi y/l_y) \quad (2.35)$$

Soit $\theta_{m,n}(z, t)$ la composante du champ de température dans la base $B_{m,n}(x, y)$. $\theta_{m,n}(z, t)$ est obtenue en projetant le champ $T(x, y, z, t)$ sur $B_{m,n}(x, y)$:

$$\begin{aligned}\theta_{m,n}(z, t) &= \langle T(x, y, z, t) | B_{m,n}(x, y) \rangle \\ &= \frac{1}{l_x l_y} \int_{x=0}^{l_x} \int_{y=0}^{l_y} T(x, y, z, t) \cos(m\pi x/l_x) \cos(n\pi y/l_y) dx dy\end{aligned}$$

En injectant (Eq.2.30) dans l'expression précédente, on obtient :

$$\theta_{m,n}(z, t) = \underbrace{E_{m,n}}_{\text{Signature de l'excitation}} \underbrace{\left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right]}_{\text{Solution du problème 1D}} \underbrace{e^{-\left(\tau_x(m\pi)^2 + \tau_y(n\pi)^2\right)t}}_{\text{Evanescence des harmoniques}} \quad (2.36)$$

Comme les fonctions $B_{m,n}$ sont orthogonales et égales à $X_m(x) Y_n(y)$ à un facteur près, le fait de projeter dessus, permet de supprimer les deux séries indicées sur m et n .

L'expression (Eq.2.36) est l'évolution (temporelle) de chaque harmonique du champ de température c'est à dire la vitesse à laquelle elles disparaissent. On distingue trois termes ayant chacun une signification particulière :

Signature de l'excitation thermique : Lorsque l'on excite un matériau par un flux de chaleur imposé non uniforme, ce dernier applique sa signature à l'échantillon : les fréquences spatiales de l'excitation sont transférées au matériau. Une harmonique n'est ainsi présente dans le champ de température (face avant ou face arrière) que si elle était présente dans l'excitation thermique. La quantité d'information que l'on peut extraire des champs de température dépend donc, d'une certaine manière, de la fonction de forme.

Solution du problème 1D : Ce terme central correspond (à un facteur près) à l'évolution du champ moyen et est commun à toutes les harmoniques. C'est le seul terme à dépendre de z et de H . On constate donc que si la méthode flash 3D est réalisée en face avant, les amplitudes de toutes les harmoniques sont infinies à $t = 0^+$ puis tendent vers 0 lorsque $t \rightarrow \infty$. Si la méthode est réalisée en face arrière, toutes les harmoniques sont nulles à $t = 0$ (puisque la face arrière n'a pas encore chauffé), puis croissent vers un maximum avant de tendre à nouveau vers 0. Par ailleurs, si le matériau est très diffusif dans l'épaisseur ($\tau_z = a_z/l_z^2$ grand), toutes les harmoniques en sont affectées. En face avant, cela provoque une disparition rapide et en face arrière, une apparition rapide.

Evanescence des harmoniques : Ce terme caractérise leur vitesse d'évanescence (de disparition). Il montre que plus le matériau est diffusif dans le plan (τ_x et τ_y grand) et/ou plus la fréquence de l'harmonique est élevée (m et/ou n grand), plus l'harmonique disparaît rapidement. En effet, lorsqu'un matériau est très diffusif, l'empreinte laissée par l'excita-

tion thermique s'estompe rapidement : elle devient « floue » ce qui signifie que les hautes fréquences disparaissent plus vite que les basses fréquences.

La figure (Fig.2.6) présente l'évolution des harmoniques en face avant et en face arrière pour un matériau isolant. Le cas d'un matériau conducteur est aussi présenté à titre indicatif mais les données associées à chaque sous figure correspondent uniquement au matériau isolant. Le taux d'exploitation et le seuil d'exploitabilité n'ont pas d'intérêt pour le moment mais sont utilisés dans la suite de ce chapitre. Les valeurs des paramètres utilisés pour générer cette figure sont fournies en annexe (Tab.A.1 p276).

3.3.2 Ecart-type des harmoniques

Remarquons tout d'abord qu'en pratique, les harmoniques sont calculées à partir des températures fournies par la caméra infrarouge. Or ces températures sont entachées d'un bruit de mesure. Les harmoniques le sont donc également. Lorsque l'on suppose que chaque pixel de la caméra est indépendant des autres, on peut montrer (Annexe 3.4 p297) que la variance de l'harmonique $\theta_{m,n}$ est égale à :

$$\sigma_{m,n}^2 = \frac{1}{4} \frac{\sigma_m^2}{N_x N_y} \left(1 + \delta(m)\right) \left(1 + \delta(n)\right) \quad (2.37)$$

$$\text{Avec} \begin{cases} \sigma_m & \text{L'écart-type du bruit de mesure sur des pixels de la caméra} \\ N_x & \text{Le nombre de pixels de la caméra selon l'axe } x \\ N_y & \text{Le nombre de pixels de la caméra selon l'axe } y \\ \delta(i) & \text{Symbole de Kronecker : } \delta(i) = 1 \text{ si } i = 0 \text{ et } 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Cette expression montre que c'est l'harmonique $\theta_{0,0}$, c'est à dire le champ moyen, qui a la dispersion la plus importante. En théorie, l'écart-type de l'harmonique $\theta_{0,0}$ est en effet 2 fois supérieur à l'écart-type des autres harmoniques $\theta_{m,n}$ avec $m, n > 0$.

Remarque 1 :

On reconnaît aussi sur l'expression (Eq.2.37) l'hypothèse de bruit blanc des pixels puisque l'écart-type sur chaque harmonique ne dépend pas de la fréquence, excepté pour les fréquences avec m ou n nul. Les hautes fréquences ont une amplitude plus faible mais un écart-type constant si bien que plus les fréquences sont élevées, plus le rapport signal/bruit est faible.

Remarque 2 :

L'écart-type $\sigma_{m,n}$ ne dépend pas de m et n excepté pour quelques cas particuliers. Ce comportement est caractéristique des bruits blancs. Ils occupent tout le spectre fréquentiel.

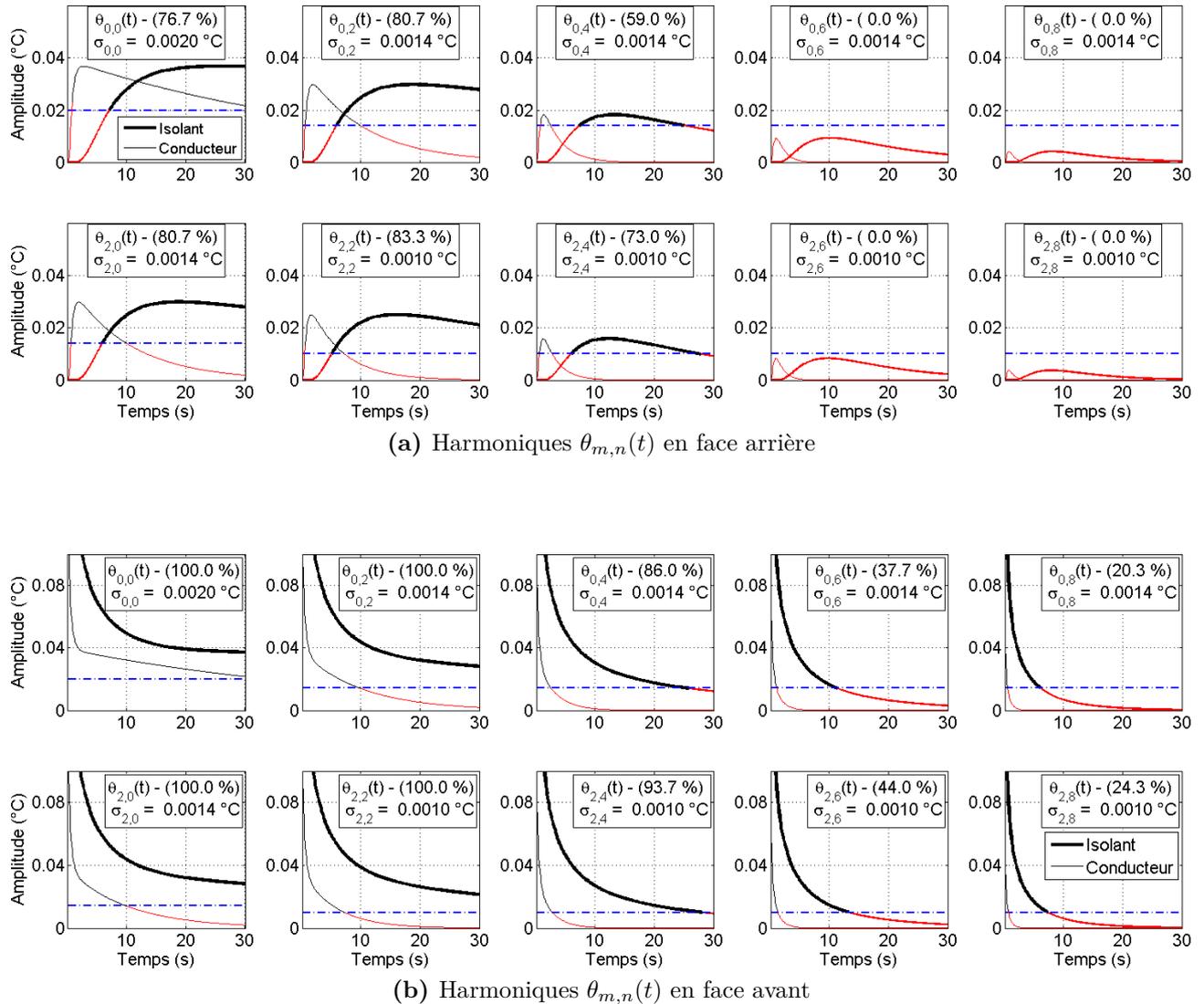


Figure 2.6 – Evolution en valeur absolue, de 10 harmoniques paires de basse fréquence du champ de température en face arrière (a) et en face avant (b). Chaque sous figure correspond à une harmonique $\theta_{m,n}$. Les deux courbes de chaque sous figure correspondent à deux matériaux différents (Tab.A.1 p276) : un isolant (lignes épaisses) et un conducteur (lignes fines). Quant aux données affichées avec chaque harmonique, on y trouve : (1) de quelle harmonique $\theta_{m,n}$ il s'agit, (2) quel est le taux (en %) de mesures exploitables et (3) l'écart-type $\sigma_{m,n}$ de l'harmonique en question. Une harmonique $\theta_{m,n}(t_k)$, à un instant donné t_k , est exploitable si son amplitude est supérieure à $\kappa \sigma_{m,n}$ avec κ le rapport signal/bruit minimal (ici $\kappa = 10$). Le seuil de validité correspond à la ligne discontinue bleue. Cette notion d'exploitabilité n'a d'intérêt que pour certains estimateurs.

3.3.3 Durée de vie des harmoniques

Chaque harmonique disparaît à sa vitesse propre ce qui signifie que certaines d'entre elles disparaissent si vite qu'on ne peut pas les mesurer. D'autres au contraire vont perdurer. De manière à quantifier ce phénomène plus précisément, on est amené à définir « la durée de vie » d'une harmonique. Analytiquement, elle ne disparaît jamais, puisque son amplitude ne fait que tendre vers 0. Il faut donc définir un seuil de détection qui peut être l'écart-type de l'harmonique elle-même. On dit alors qu'une harmonique existe tant que son amplitude est supérieure à son écart-type. Soit $tv_{m,n}(z)$ la durée de vie de l'harmonique $\theta_{m,n}$. $tv_{m,n}$ est la solution de l'équation suivante :

$$|\theta_{m,n}(z, t_v)| = \sigma_{m,n}$$

Ou encore :

$$2 \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k}(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H}}_{y_h(t)} e^{-\tau_z u_k^2 t_v} e^{-[\tau_x(m\pi)^2 + \tau_y(n\pi)^2] t_v} = \frac{\sigma_{m,n}}{|E_{m,n}|} \quad (2.38)$$

Remarque : limite d'exploitation

Cette notion de durée de vie des harmoniques donne une limite sur le nombre de fréquences exploitables. En effet, avec un modèle impulsionnel, il faut attendre plus de 10 fois la durée de l'impulsion laser (Annexe 4.1 p301) pour que l'erreur de modèle due à l'hypothèse d'une excitation parfaitement impulsionnelle se résorbe. Cet instant minimum rend inutile la présence d'harmoniques dont la durée de vie est inférieure à cette valeur. Cette limite disparaît si on utilise un modèle en créneau, plus réaliste, surtout avec un laser.

Exemple : Calcul de la durée de vie pour un matériau isolant

Pour illustrer ceci, prenons une excitation cubique (Annexe 3.2 p291) de rayon normalisé $s = 0,5$ (concrètement $l_x/4$) caractérisée par sa matrice de forme $R_{m,n}$ (Eq.2.23) :

$$R_{m,n} = \left(\begin{array}{c|cccccc} & \beta_0 & \beta_2 & \beta_4 & \beta_6 & \beta_8 & \beta_{10} \\ \hline \alpha_0 & 1,0000 & -0,8460 & 0,4928 & -0,1633 & 0 & 0,0185 \\ \alpha_2 & -0,8460 & 0,7157 & -0,4169 & 0,1382 & 0 & -0,0156 \\ \alpha_4 & 0,4928 & -0,4169 & 0,2428 & -0,0805 & 0 & 0,0091 \\ \alpha_6 & -0,1633 & 0,1382 & -0,0805 & 0,0267 & 0 & -0,0030 \end{array} \right) \quad (2.39)$$

A partir de $R_{m,n}$, on calcule les paramètres $E_{m,n}$ avec l'expression (Eq.2.31) et les valeurs numériques des paramètres (Tab.A.1 p276). On calcule ensuite le rapport $\sigma_{m,n}/|E_{m,n}|$, puis on détermine la durée de vie $tv_{m,n}(z)$ des 20 harmoniques ci-dessus en résolvant les 20 équations (Eq.2.38) :

$$tv_{m,n}(z=0) = \left(\begin{array}{c|cccccc} & \beta_0 & \beta_2 & \beta_4 & \beta_6 & \beta_8 & \beta_{10} \\ \hline \alpha_0 & 1571,68 & 78,65 & 17,80 & 6,24 & & 1,17 \\ \alpha_2 & 78,65 & 42,06 & 15,09 & 6,02 & & 1,24 \\ \alpha_4 & 17,80 & 15,09 & 8,53 & 4,09 & & 0,86 \\ \alpha_6 & 6,24 & 6,02 & 4,09 & 2,10 & & 0,35 \end{array} \right) \quad (2.40)$$

Les hautes fréquences disparaissent très vite. L'harmonique (10, 10) n'est décelable que pendant environ 1 centième de seconde. En face arrière, les tendances sont identiques, mais l'effet filtre du matériau est plus important. Seules les basses fréquences sont accessibles :

$$tv_{m,n(z=1)} = \left(\begin{array}{c|cccccc} & \beta_0 & \beta_2 & \beta_4 & \beta_6 & \beta_8 & \beta_{10} \\ \hline \alpha_0 & 1571,16 & 78,62 & 17,56 & & & \\ \alpha_2 & 78,62 & 42,05 & 14,69 & & & \\ \alpha_4 & 17,56 & 14,69 & 6,85 & & & \\ \alpha_6 & & & & & & \end{array} \right) \quad (2.41)$$

L'harmonique $\theta_{0,0}$ est donc mesurable pendant 30 min. $\theta_{2,0}$ pendant 1 min 18 s. Les coefficients « vides » des deux matrices précédentes signifient que les valeurs ne sont pas définies : l'équation (Eq.2.38) n'admet pas de solution.

Pour les basses fréquences, on remarque que les durées de vie sont identiques en face avant ou en face arrière. Ces harmoniques ont le temps de s'uniformiser dans l'épaisseur du matériau.

3.3.4 Intérêts de travailler sur les harmoniques

Les harmoniques ne sont qu'une autre représentation du champ de température. Elles contiennent autant de données que les mesures individuelles de température. Cependant, l'information n'est pas répartie de la même façon et son extraction est plus simple que dans la base habituelle (x, y) . Dans la base habituelle, chaque composante de l'image (chaque pixel) dépend des autres composantes de l'image¹⁴, alors que chaque harmonique est indépendante des autres. Si une composante est nulle à un instant, cela signifie qu'elle a été et restera toujours nulle. Cette propriété d'indépendance nous permet de choisir celles qu'on souhaite exploiter et celles qu'on va rejeter. Comme l'information sur les diffusivités thermique est condensée dans les basses fréquences, le nombre d'observables à utiliser s'en trouve réduit : Au lieu d'exploiter les $N_x \times N_y$ pixels, on peut se contenter des $M \times N$ premières harmoniques paires¹⁵, car les harmoniques impaires peuvent être annulées si l'excitation thermique est symétrique.

4 La thermographie infrarouge

La thermographie infrarouge est l'outil de mesure particulièrement adapté à la mise en oeuvre de la méthode flash 3D. Cette section présente brièvement le principe de la thermographie. Des ouvrages entiers lui sont consacrés [65–67]. Des articles plus récents et plus synthétiques existent aussi [68, 69]. Des rappels sur les transferts par rayonnement sont disponibles

14. Imaginons que l'on chauffe un pixel de l'image, tous les pixels finiront par en être modifié.

15. Avec une caméra infrarouge AGEMA 880SW, la résolution est de 280×280 pixels. Le taux de compression $N_x \times N_y / (N \times M)$ est donc d'environ 5000.

dans [70]. Différentes technologies de détecteur infrarouge sont présentées dans [71]. Et une présentation des sources de bruit dans les situations de mesure par thermographie dans [72].

4.1 Caméra infrarouge : principe de mesure

La thermographie infrarouge est apparue à la fin des années 1950. Il s'agit de « la technique permettant d'obtenir, au moyen d'un appareillage approprié, l'image thermique d'une scène thermique¹⁶ observée dans un domaine spectral de l'infrarouge » [65].

L'utilisation des caméras infrarouges requiert un peu de soin pour obtenir des résultats qui aient un sens. L'introduction de Pajani [65] est à ce titre assez évocatrice, et peut être un peu provocatrice, des problèmes existants en thermographie :

« La caméra infrarouge [...] ne sait rien des températures de la scène thermique qu'elle observe. Dans la plupart des cas, l'opérateur cherche à connaître ces températures. Dans le cas général, cette recherche est vaine [...].

La thermographie est vaine pour la mesure des températures de surface des objets placés dans des environnements perturbateurs [...].

La thermographie est vaine pour la mesure des températures si l'on ne prend soin au préalable de caractériser la situation de mesure [...]. »

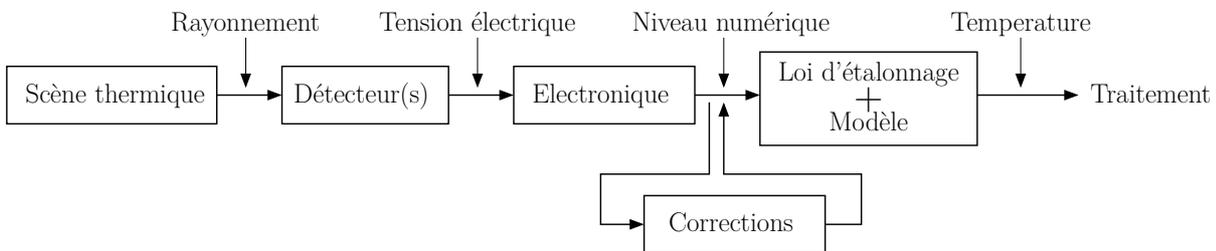


Figure 2.7 – Du détecteur infrarouge à la mesure de température.

Une caméra infrarouge mesure le flux reçu (en W) par rayonnement sur son/ses capteur(s), en provenance d'une scène thermique, et fournit en sortie une grandeur proportionnelle à ce flux, appelé « niveau numérique » (NN ou DL pour « digital level ») ou « unité isothermique » (UI) suivant le type de caméra (Fig.2.7). Par l'utilisation complémentaire d'un modèle de la situation de mesure et la connaissance des paramètres associés, on peut remonter à la température de l'objet.

On peut distinguer deux types de caméra infrarouge [69] : les caméras matricielles et les caméras à balayage plus anciennes.

16. « la scène thermique est la partie de l'espace-objet observable au moyen de l'appareillage de thermographie infrarouge » [65, p.26]

Caméra à balayage

Historiquement, il s'agit des premières caméras infrarouges. Leur particularité est de ne posséder qu'un seul capteur. La caméra infrarouge « monocapteur » à balayage consiste à ajouter un mécanisme optique permettant de balayer la scène thermique, pixel après pixel et ligne après ligne [65]. Le détecteur infrarouge doit ainsi balayer au minimum $n = 500000$ pixels par seconde¹⁷. Seuls les détecteurs quantiques¹⁸ ([67, 71] et [65, p.90]) ont un temps de réponse compatible avec ces contraintes. Cependant, c'est aussi toute la chaîne de mesure qui doit supporter la cadence de fonctionnement, notamment les amplificateurs, convertisseurs AN et système de stockage. Ces détecteurs infrarouges doivent être refroidis à des températures très basses sans quoi des bruits intrinsèques à la matière [65, p.119] les rendent complètement inexploitable.

Caméra matricielle

Les caméras matricielles [69] sont des caméras constituées d'une matrice contenant des dizaines de milliers de capteurs ([73, p.47]). Contrairement à une caméra à balayage, chaque capteur ne « s'occupe » que d'un pixel de l'image. La fréquence de fonctionnement de ces derniers n'est donc plus du tout du même ordre de grandeur que pour la caméra à balayage. Le nombre d'images par seconde n'est plus limité par le détecteur mais par le système d'acquisition.

Cependant, bien que les matrices soient réalisées de manière industrielle, chaque capteur se comporte différemment. Leur tension de base (« d'offset ») et leur gain varie d'un pixel à l'autre, si bien que pour qu'un corps à température uniforme produise une image thermique uniforme, il faut donc lui appliquer une correction (Fig.2.10) de non-uniformité (NUC) aux capteurs.

4.2 De l'échantillon à l'optique de la caméra

Du fait de l'agitation thermique et des transitions entre niveaux d'énergie qu'elle provoque, un matériau émet de l'énergie sous forme de rayonnement. Il est d'autant plus énergétique que l'agitation est forte. Le spectre fréquentiel de ce rayonnement émis par un corps noir est décrit par la loi de Planck [66, p.21]. La luminance monochromatique est donnée par (voir Tab.2.3 p112) :

$$L(\lambda) = \frac{2 h c_\lambda^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{h c_\lambda}{k \lambda T}\right) - 1} \quad \text{en } [W m^{-2} sr^{-1} m^{-1}] \quad (2.42)$$

17. La caméra AGEMA 880SW permet d'obtenir 25 trames par seconde composées de 70 lignes et de 280 pixels d'où $n = 25 * 70 * 280$ pixels balayés par seconde, sans compter les temps morts nécessaires pour passer d'une ligne à l'autre et d'une trame à l'autre.

18. Il existe deux types de détecteurs. (1) Les détecteurs photoconductifs qui voient leur conductivité électrique changer lorsqu'un rayonnement incident augmente le nombre de photons dans la bande de conduction. (2) Les détecteurs photovoltaïques qui génèrent une différence de potentiel lorsqu'ils sont soumis à un rayonnement incident.

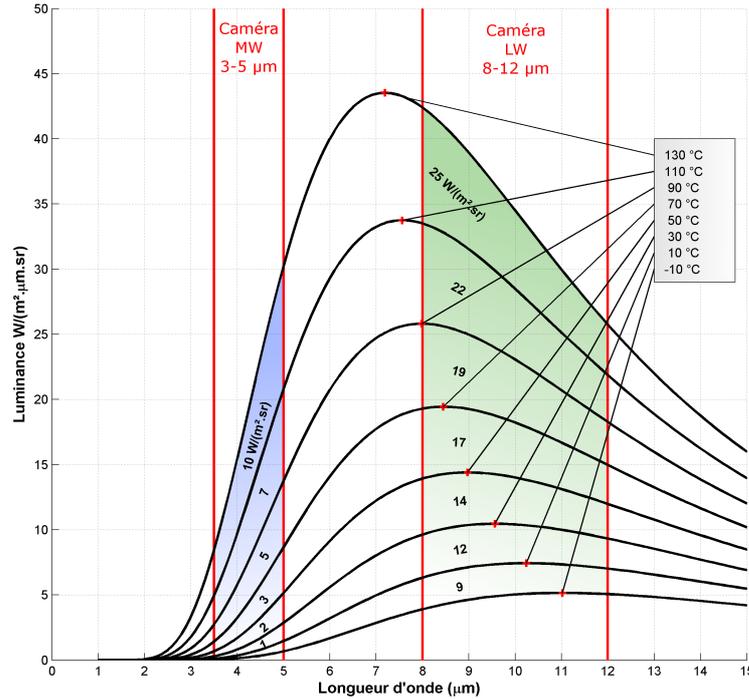


Figure 2.8 – Loi de Planck et gamme de travail des caméras infrarouges.

La figure Fig.2.8 montre l’allure du spectre d’émission pour des températures de -10°C à 130°C . Chaque courbe noire correspond à une température différente. A mesure que la température du corps augmente, le maximum (croix rouge) de la luminance se déplace vers les petites longueurs d’onde¹⁹. A température ambiante de 30°C , le maximum est atteint pour à une longueur d’onde d’environ $10\ \mu\text{m}$.

Par ailleurs, deux gammes de longueurs d’ondes sont mises en évidence sur la figure : $3,5 - 5\ \mu\text{m}$ et $8 - 12\ \mu\text{m}$. Il existe en effet différents modèles de caméra. Certaines, qualifiées de « middle-wavelength » (MW), travaillent dans la gamme²⁰ $3,5 - 5\ \mu\text{m}$, tandis que d’autres, les modèles « long-wavelength » (LW), utilisent la gamme $8 - 12\ \mu\text{m}$. Comme le montre la figure Fig.2.8, la puissance rayonnée dans la gamme LW vaut $L_{8-12\mu\text{m}} = 12\ \text{W m}^{-2}, \text{sr}^{-1}$ pour un corps à 30°C , et vaut seulement $L_{3,5-5\mu\text{m}} = 1\ \text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1}$ dans la gamme MW. Les niveaux de flux sont plus importants dans la gamme LW, mais la variation de flux est plus grande dans la gamme MW : entre $T = 30^{\circ}\text{C}$ et $T = 130^{\circ}\text{C}$, le flux émis est multiplié par 10 (1 à $10\ \text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1}$), alors que dans la gamme LW, il n’a augmenté que d’un facteur 2 (12 à $25\ \text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1}$).

Une représentation des différents processus physiques (Fig.2.9) à l’origine du flux radiatif

19. La loi de déplacement de Wien décrit ce déplacement : $\lambda_{max} T = 2898\ \mu\text{m K}$

20. Les gammes données ici ne le sont qu’à titre indicatif, certains capteurs vont en dessous de $3,5\ \mu\text{m}$ et certains dépassent $5\ \mu\text{m}$

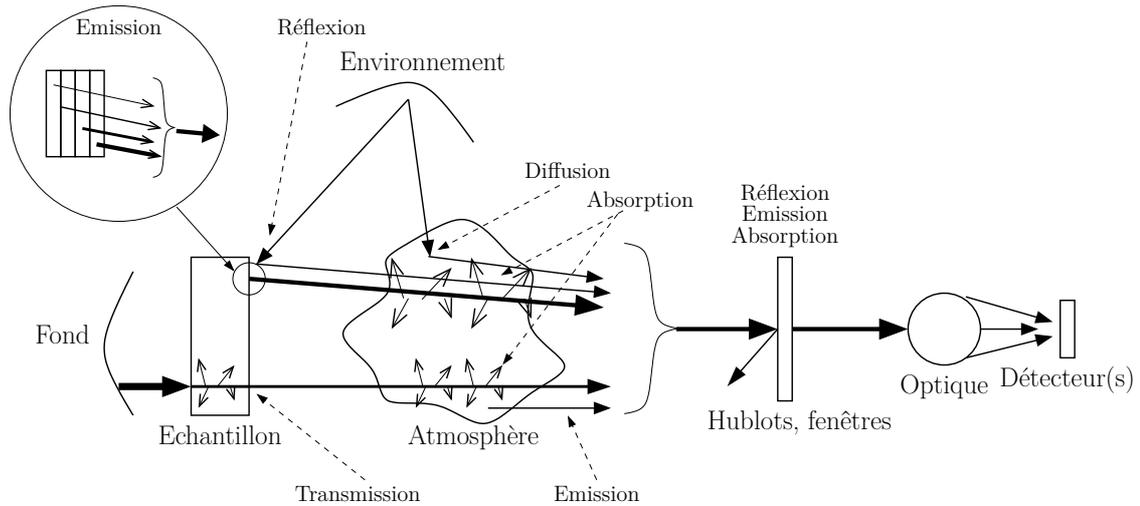


Figure 2.9 – Phénomènes à l'origine du rayonnement reçu par le détecteur infrarouge.

reçu par le (les) détecteur(s) de la caméra est présentée sur la figure Fig.2.9. On distingue alors les processus suivants :

- La surface dont on souhaite déterminer la température émet un rayonnement semblable à la loi de Planck. Bien que l'émission de rayonnement soit un processus volumique (voir [65, p.31] et [66, p.19]), on considère que pour les corps opaques, cette émission se fait sur une épaisseur suffisamment faible pour que le caractère volumique puisse être négligé. Ainsi, la thermographie ne permet pas d'estimer la température de surface d'un corps mais uniquement une moyenne pondérée de cette température sur une certaine épaisseur.
- Au rayonnement émis par le corps, s'ajoute celui qui lui est « passé à travers » (la part transmise) émis par l'environnement (le fond), et celui émis par l'environnement mais réfléchi par le corps en question.
- Ces trois contributions, émission - réflexion - transmission, passent ensuite à travers l'atmosphère [66, p.73], où ils vont subir plusieurs perturbations : absorption, diffusion, émission propre de l'atmosphère.
- Le rayonnement traverse alors éventuellement des hublots à travers lesquels il peut être en partie réfléchi, absorbé, diffusé ou renforcé par l'émission du milieu qu'il traverse. Ces hublots sont généralement réalisés avec des matériaux transparents²¹ (voir [67, p.71] et [66, p.117]) dans la gamme de longueur d'onde utile. Des traitements de surface supplémentaires permettent d'atteindre des coefficients de transmission voisins de 99 %.

21. Notamment le Saphir (transparent jusqu'à $5 \mu m$), la Fluorine (jusqu'à $8 \mu m$) et le ZnSe (autour de $10 \mu m$).

4.3 De l'optique au capteur

Lorsque les photons atteignent l'optique de la caméra, il leur reste une des parties les plus perturbatrices à parcourir. Les lentilles et miroirs sont susceptibles d'altérer l'image de la scène thermique. On peut par exemple citer les défauts de l'optique :

Les aberrations chromatiques : Les photons émis par un point donné de l'échantillon, ne suivent pas la même trajectoire et se retrouvent dispersés sur le détecteur [66, p.157].

Les aberrations géométriques : Les aberrations géométriques [66, p.159] apparaissent lorsque l'on s'éloigne des conditions de l'approximation de Gauss, c'est à dire quand l'observation ne se fait plus seulement au voisinage de l'axe optique.

La diffraction : La diffraction est due au caractère ondulatoire de la lumière. La diffraction vient du fait que l'objectif ne peut pas capturer tout le rayonnement émis par un point de l'échantillon. Ce rayonnement forme une onde sphérique [66, p.196], qui se fait « fenêtrée » lorsqu'elle passe dans l'objectif de la caméra de manière analogue à ce qu'il se passe lorsqu'on utilise une fenêtre temporelle pour sélectionner les données dans un intervalle de temps particulier.

Le vignettage : Le vignettage est l'assombrissement qui apparaît progressivement à mesure que l'on se rapproche des bords de l'image. Une partie du rayonnement est bloquée par l'optique si bien que les détecteurs situés sur les bords de l'image thermique reçoivent un flux plus faible. Avec l'AGEMA, c'est probablement la cause majeure de non-uniformité. Le vignettage devient évident dès que l'on utilise des bagues allongées²² destinées à augmenter le grossissement.

4.4 Le capteur

Le paragraphe précédent a permis de déterminer le champ de flux (de luminance, d'intensité) qui parvient jusqu'au(x) détecteur(s) de la caméra infrarouge. Ce paragraphe présente une modélisation simplifiée du capteur permettant de décrire la perturbation générée par les détecteurs sur une image thermique.

Pour simplifier, on suppose dorénavant que la caméra est de type matriciel. Cette hypothèse permet de faire abstraction du temps de réponse du capteur ($\approx 1 \mu s$). Il devient en effet négligeable devant le temps d'intégration²³ (≈ 100 à $1000 \mu s$). De plus, on suppose l'optique parfaite et on néglige tout phénomène optique perturbateur (diffraction, ...). On simplifie également la

22. Une bague allongée est un tube plastique que l'on place sur l'objectif de la caméra. Ce dispositif ne contient pas de système optique (c'est un tube creux), mais permet de diminuer la distance de mise au point minimum d'un objectif. En contrepartie, l'énergie incidente sur les capteurs est réduite, d'autant plus que la bague allongée est grande.

23. C'est le temps laissé au capteur pour intégrer (compter) le flux incident (les photons incidents). Plus la température est faible, plus le temps d'intégration est important pour compenser la baisse du flux incident.

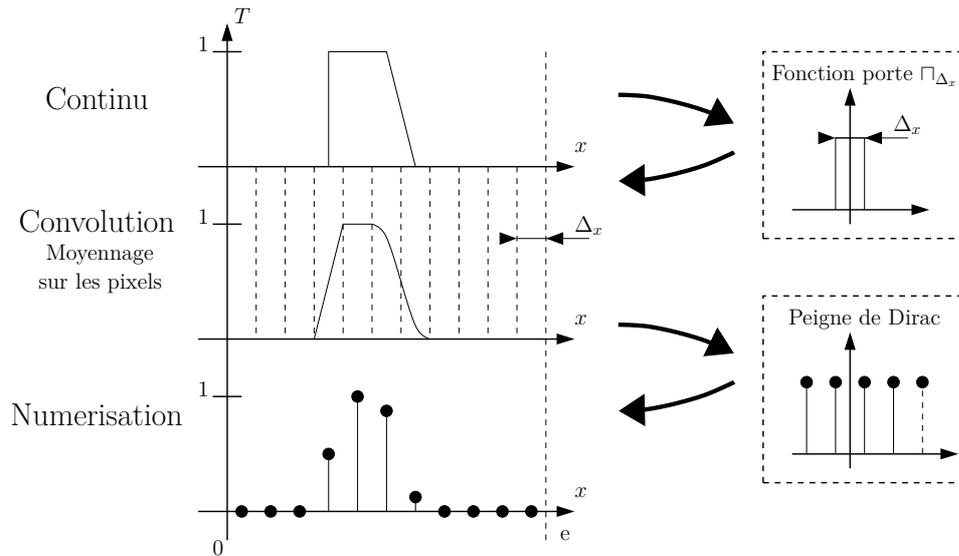


Figure 2.10 – Effet du détecteur infrarouge sur le champ de flux $\phi(x)$ incident sur les capteurs. La fonction continue (en haut) modélise le champ de flux réel. La convolution par une porte reproduit l’effet « moyenneur » du capteur tandis que le peigne de Dirac sélectionne seulement la valeur du centre des pixels. Les pixels sont symbolisés par les lignes verticales en pointillés.

géométrie des détecteurs [73, p.43] de la matrice en supposant (i) qu’ils sont jointifs, (ii) qu’ils sont parfaitement carrés et (iii) que toute leur surface active a le même comportement. Considérons maintenant un champ de flux incident $\phi(x)$ monodimensionnel (une ligne horizontale) paramétré par la position x sur l’échantillon observé.

Comme le détecteur a une taille non nulle, la tension en sortie dépend de la moyenne du flux atteignant sa surface. C’est un des phénomènes à l’origine du comportement en filtre passe-bas (en espace) de la caméra. Cette limite est une borne inférieure à la résolution de la caméra et rend indétectable certains détails trop fins de la scène thermique [65, p.162]. Ce comportement peut être modélisé par la convolution de l’image thermique par une porte Π_{Δ_x} de largeur Δ_x où Δ_x est la largeur des détecteurs infrarouges de la matrice (Fig.2.10). A l’issue de la convolution, on obtient toujours un champ continu. Pour modéliser la discrétisation due aux pixels, on multiplie le champ obtenu par un peigne de Dirac. L’espace entre chaque Dirac vaut également Δ_x .

Soit $\phi^0(x)$ une fonction continue décrivant le champ de luminance incident sur la matrice de détecteurs. De manière à se placer dans le cadre des fonctions paires, $\phi^0(x)$ est constituée du champ de luminance théorique ainsi que de sa symétrie par rapport à l’axe des ordonnées. On considère également la fonction périodique $\phi(x)$, définie comme étant la juxtaposition infinie

Chapitre 2. La méthode flash 3D

de $\phi^0(x)$. Soit $P = 2l_x$ la période de $\phi(x)$, elle peut s'écrire [74, p.147] :

$$\phi(x) = \phi^0(x) * \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nP) \quad (2.43)$$

$$\widehat{\phi}(f) = \widehat{\phi^0} \widehat{\text{III}_{nP}} \quad (2.44)$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} \widehat{\phi^0}(f) &= \int_{-P/2}^{P/2} \phi^0(x) e^{-2i\pi f x} dx = \int_{-P/2}^{P/2} \phi^0(x) \cos(-2i\pi f x) dx \\ \widehat{\text{III}_{nP}}(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} \text{III}_{nP}(x) e^{-2i\pi f x} dx = \frac{1}{P} \text{III}_{n/P}(f) = \frac{1}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(f - \frac{n}{P}) \end{cases}$$

Quant à la fonction porte, elle est définie par :

$$\square_{\Delta_x}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_x} & \text{si } -\Delta_x/2 \leq x \leq \Delta_x/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\text{avec } \widehat{\square_{\Delta_x}} = \int_{-\Delta_x/2}^{\Delta_x/2} \frac{1}{\Delta_x} e^{-2i\pi f x} dx = \text{sinc}(2\pi f \frac{\Delta_x}{2})$$

Le signal ϕ_{out} en sortie du capteur est alors théoriquement le résultat de la convolution de $\phi(x)$ par $\square_{\Delta_x}(x)$ et de la multiplication par un peigne de Dirac III_{x_i} correspondant à la position du centre des détecteurs :

$$\phi_{out}(x) = (\phi * \square_{\Delta_x}) \times \text{III}_{x_i}(x) \quad (2.45)$$

$$\text{avec } \text{III}_{x_i}(x) = \Delta_x \sum_{i=-\infty}^{\infty} \delta(x - x_i)$$

On peut à présent calculer la transformée spatiale du champ numérique à partir du signal de sortie $\phi_{out}(x)$. En supposant que la loi d'étalonnage puisse être linéarisée, on peut alors montrer que (Annexe 7 p317) :

$$\theta_m^* = \frac{1}{l_x} \int_{x=0}^{l_x} \phi_{out}(x) X_m(x) dx = \theta_m \text{sinc}\left(\pi m \frac{\Delta_x}{2l_x}\right) \quad (2.46)$$

Ce résultat montre que les harmoniques expérimentales obtenues à partir des données de la caméra ne correspondent pas exactement aux harmoniques simulées par le modèle (Eq.2.36 p95). En effet, le détecteur joue le rôle de filtre passe-bas en atténuant les harmoniques, et ce d'autant plus que leurs fréquences sont élevées. En généralisant au cas bidimensionnel, on a finalement :

$$\theta_{m,n}^*(z, t) = \frac{1}{l_x l_y} \int_{x=0}^{l_x} \phi_{out}(x) X_m(x) Y_n(y) dx dy = \theta_{m,n}(z, t) \text{sinc}\left(\frac{\pi m}{2N_x}\right) \text{sinc}\left(\frac{\pi n}{2N_y}\right) \quad (2.47)$$

Avec $\theta_{m,n}(z, t)$ l'expression des harmoniques (Eq.2.36 p95). On voit déjà que plus le nombre N_x et N_y de pixels est grand, plus l'atténuation est faible pour une même fréquence. La figure

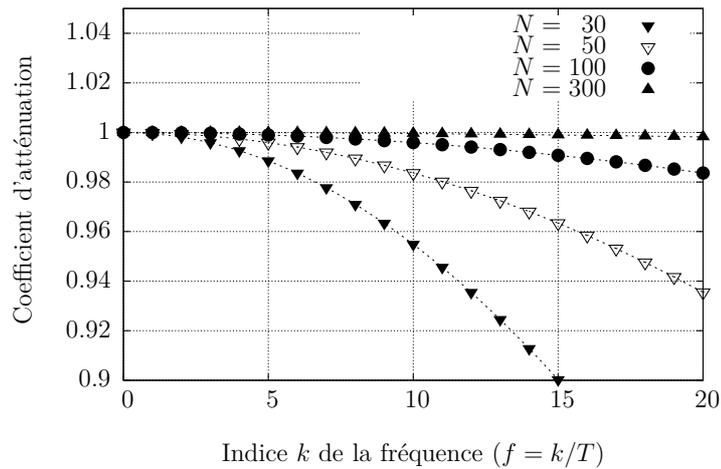


Figure 2.11 – Atténuation des harmoniques de la scène thermique due au détecteur en fonction de l'indice k de la fréquence et pour différentes résolutions.

Fig.2.11 présente la valeur du sinus cardinal en fonction de l'indice k de la fréquence et pour différentes résolutions de caméra infrarouge. La figure correspond à l'effet d'une seule direction mais permet sans difficulté d'obtenir l'atténuation en prenant en compte les deux directions x et y . Elle montre ainsi qu'avec une caméra possédant 300 pixels (sur une ligne ou une colonne), l'effet de l'atténuation est complètement négligeable. Sachant que les indices des harmoniques exploitées sont généralement inférieurs²⁴ à 16, le détecteur n'atténue donc pas les harmoniques de la scène thermique.

Le dernier paragraphe de cette section (§4.5 p108) montre qu'en réalité, la caméra AGEMA 880SW, qui a été majoritairement utilisée dans cette thèse, atténue les harmoniques de façon équivalente à une caméra idéale de résolution 28×28 pixels.

Remarque : les coefficients d'atténuation

Dans ce qui précède, les coefficients d'atténuation sont interprétés comme étant l'effet du détecteur sur les harmoniques calculées par le modèle, c'est à dire les transformées du champ de température. Or l'effet filtre passe-bas du détecteur ne s'applique pas sur le champ de température mais sur le champ de flux. C'est seulement ensuite que la conversion en température est possible à partir d'une loi d'étalonnage. Cette simplification est valable uniquement si on suppose que la variation de température est proportionnelle au flux, ce qui peut se justifier (§5.4.6 p140). Il pourrait toutefois être utile de quantifier l'erreur générée par cette approximation.

Remarque : cas de la caméra à balayage

Ce qui vient d'être développé pour une caméra matricielle reste valable en première approximation pour une

24. En réalité, les harmoniques exploitées correspondent à des indices généralement inférieurs à 8. Mais l'image exploitée par l'inversion est souvent découpée pour ne sélectionner que la partie intéressante des images thermiques (Fig.3.7 p169). Ainsi, il n'est pas rare que l'on réduise ainsi par 2 les côtés de l'image. L'harmonique d'indice 8 sur l'image réduite correspond à l'harmonique d'indice 16 sur l'image complète.

caméra à balayage. Pour être plus précis, il faudrait prendre en compte le déplacement du capteur ainsi que son temps de réponse qui est du même ordre que le temps laissé au détecteur pour mesurer le flux incident. Par ailleurs, ce temps de réponse a tendance à produire un effet de trainée, c'est à dire un déphasage des harmoniques du champ incident, alors qu'une caméra matricielle, a priori, n'en introduit pas.

4.5 La résolution de mesure d'une caméra

La taille des détecteurs infrarouges d'une caméra infrarouge fixe une borne inférieure à la résolution que l'on peut espérer. Cependant, l'effet du capteur est complètement négligeable devant les perturbations dues à l'optique de la caméra et à la nature ondulatoire de la lumière. Elles déforment la scène thermique bien plus que ne le font les détecteurs. De façon à quantifier l'ensemble des phénomènes évoqués plus haut et de déterminer l'impact de ces derniers sur les harmoniques de la scène thermique, et notamment sur les harmoniques $\theta_{m,n}$, on peut déterminer la FRF (« Fonction de Réponse à une Fente »). La FRF permet ensuite d'estimer une résolution de mesure de la caméra qu'on pourrait qualifier de résolution « équivalente » ou « effective ».

Pour cela, on peut utiliser une fente dont on diminue la largeur progressivement. La fente est placée devant un corps chaud pour pouvoir la distinguer du fond. A chaque fois que l'on modifie la largeur de la fente, on enregistre le champ de niveau numérique fourni par la caméra (Fig.2.12). Sur cette figure, les niveaux numériques ont été normalisés (référence à 0 et maximum à 1).

On constate que la transition entre le niveau 0 et 1 ne se fait pas brusquement mais selon une droite. La pente de cette droite dépend de la qualité de l'optique de la caméra que l'on caractérise par la taille des pixels équivalents²⁵. En première approximation, la taille des pixels équivalents correspond « à la largeur de la montée » c'est à dire au nombre de pixels qu'il faut pour passer du niveau 0 au niveau 1. En l'occurrence, le nombre est ici d'environ 10. La taille des pixels équivalents est donc 10 fois la taille des pixels de la matrice. Autrement dit, au niveau de la mesure tout se passe comme si on avait une résolution 10 fois plus faible que la résolution de l'image. Pour l'AGEMA 880SW on passe de 280×280 pixels à 28×28 pixels.

La fente 3 montre ce qui arrive lorsque la fente est trop petite pour que l'optique parvienne à retranscrire correctement l'intensité de la scène thermique. La quantité d'énergie qui atteint le(s) détecteur(s) est correcte mais le maximum du profil n'est plus correctement mesuré.

Une approche plus quantitative et plus précise pour déterminer la taille des pixels équivalents consiste à déterminer la fonction de transfert spatial de la caméra. Pour cela, on peut calculer la transformée de Fourier 1D d'un profil horizontal (si la fente est verticale) du champ

25. Il s'agit de la notion d'IFOV pour « instantaneous field of view » [65, p.163].

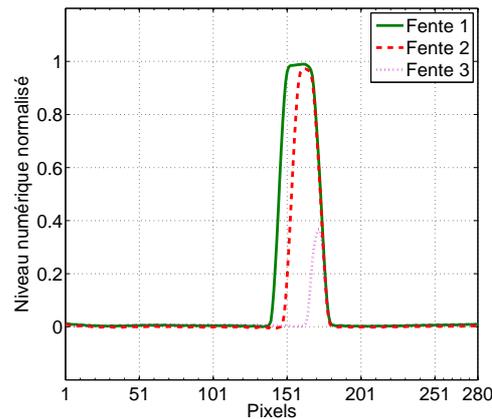


Figure 2.12 – Réponse normalisée de la caméra AGEMA 880SW à des fentes de tailles différentes.

de niveau numérique (Fig.2.13.a). On distingue sur cette figure la valeur absolue du spectre fréquentiel théorique qui est un sinus cardinal (la fente est une fonction porte). L'effet filtre passe-bas apparait nettement puisque l'on constate qu'à partir de l'indice 15, l'amplitude du spectre expérimental est très nettement inférieure à celle du spectre théorique, puis tend rapidement vers 0. En calculant le rapport des amplitudes de ces deux spectres, on peut déterminer le gain de la fonction de transfert de la caméra (Fig.2.13.b). Certains indices ne sont pas définis car l'amplitude du spectre théorique est parfois nulle.

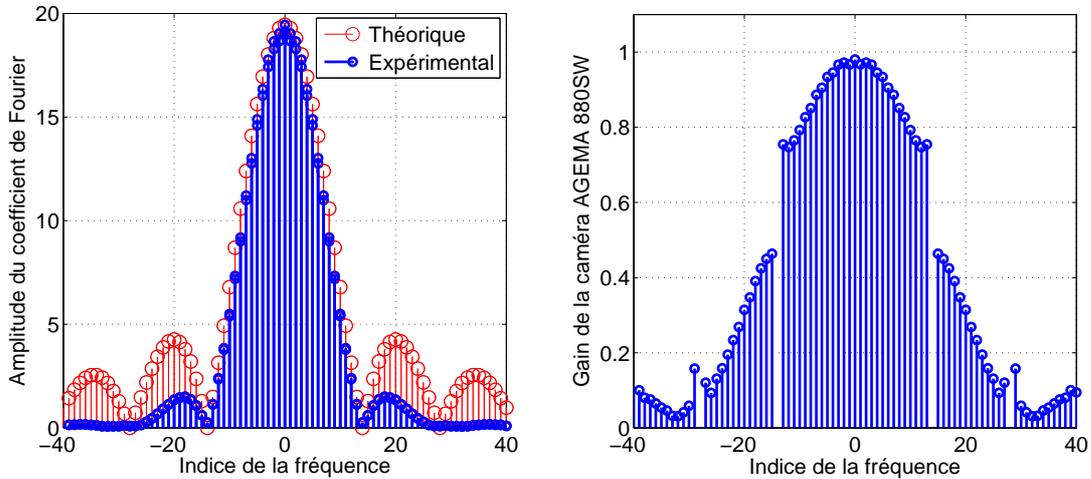
En utilisant plusieurs tailles de fente et en superposant les réponses (Fig.2.14), on peut obtenir la réponse complète en utilisant la médiane comme estimateur robuste de l'amplitude pour chaque indice k (courbe rouge). On détermine ensuite la fonction de transfert $FT_{\text{detect. eq.}}$ d'un détecteur équivalent qui correspond le mieux (courbe verte) à la réponse expérimentale :

$$FT_{\text{detect. eq.}}(f = k/280) = \text{sinc} \left(2\pi f \frac{\Delta_{eq}}{2} \right) = \text{sinc} \left(2\pi \frac{k}{280} \frac{10}{2} \right) \quad (2.48)$$

Avec k l'indice de la fréquence. Δ_{eq} correspond au nombre de pixels du détecteur équivalent. On retrouve ainsi le résultat précédent. La caméra AGEMA 880SW a donc une résolution de mesure de 28×28 pixels. L'atténuation des harmoniques inférieures à l'indice 16 n'est donc peut être pas négligeable (Fig.2.11 p107).

Remarque

Ce piètre résultat de la caméra AGEMA 880SW peut être mis sur le compte de l'usure ou/et sur une erreur de manipulation. Il est tout à fait possible que la mise au point ne soit pas optimale. En effet, elle est contrôlée par un système de déplacement motorisé (Fig.2.25 p151.a) qui ne permet pas un réglage précis. La scène thermique pourrait donc se retrouver filtrée de façon excessive. Cependant, il n'y a pas de raison que la mise au point soit plus mauvaise que lors d'une méthode flash.



(a) Spectre fréquentiel théorique et expérimental

(b) Gain de la fonction de transfert de l'optique

Figure 2.13 – Comparaison théorie-expérience des spectres fréquentiels obtenus avec l'AGEMA 880SW. La figure (a) présente le spectre théorique de la fonction porte par rapport au spectre calculé à partir des sorties de la caméra. La figure (b) correspond au gain de la fonction de transfert de l'optique, obtenu en faisant le rapport du spectre expérimental par le spectre théorique.

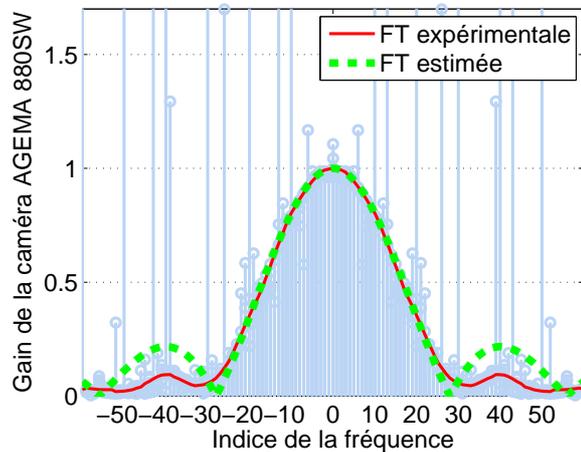


Figure 2.14 – Fonction de transfert de la caméra AGEMA 880SW. .

4.6 Les lois d'étalonnage

Lorsqu'on utilise la thermographie infrarouge pour mesurer des températures (Fig.2.7), un modèle thermographique doit être utilisé. Il s'agit d'une modélisation de la situation de mesure. Celui que l'on utilise pour l'estimation des diffusivités thermique est décrit dans [65,

p.309] et s'intitule : « *Mesure sur un corps opaque d'émissivité ϵ_0 à courte distance, dans un environnement à température T_{amb}* ». Il est défini de la manière suivante :

$$V_m(T_{obj}) = \underbrace{\epsilon_{obj} V(T_{obj})}_{\text{Emis par l'objet}} + \underbrace{(1 - \epsilon_{obj}) V(T_{amb})}_{\text{Emis par l'environnement et réfléchi sur l'objet}} \quad [DL] \quad (2.49)$$

Avec :

$$\begin{cases} V_m(T_{obj}) & \text{Niveau numérique fourni par la caméra pour } T_{obj} \text{ fixée.} \\ V(T_{obj}) & \text{Niveau numérique correspondant à un corps noir à température } T_{obj}. \\ V(T_{amb}) & \text{Niveau numérique correspondant à un corps noir à température } T_{amb}. \\ \epsilon_{obj} & \text{Emissivité inconnue de l'objet} \end{cases}$$

La fonction $V(T) : T \rightarrow DL$ (niveau numérique) est la loi d'étalonnage de la caméra infrarouge. Elle correspond au niveau numérique que l'on mesurerait si on regardait un corps noir à la température T . Cette fonction ne dépend²⁶ que de la température et non des matériaux puisqu'ils sont supposés être des corps noirs.

La loi d'étalonnage est obtenue en plaçant un corps noir à une distance donnée de la caméra. On relève alors les niveaux numériques enregistrés en fonction de la température du corps noir. Le flux reçu (en niveaux numériques) par les détecteurs pourrait être calculé en théorie avec l'expression suivante [65, p.102] :

$$V(T) = \int_{\lambda=3,5\mu m}^{5\mu m} L_{\lambda(T)} \text{OPT}(\lambda) \text{RSR}(\lambda) G \, d\lambda \quad (2.50)$$

Avec

$$\begin{cases} L_{\lambda(T)} & \text{La luminance du corps noir} \\ \text{OPT}(\lambda) & \text{Le rendement de l'optique} \\ \text{RSR}(\lambda) & \text{Le rendement du détecteur} \\ G & \text{Le gain de l'électronique} \end{cases}$$

Comme les grandeurs qui apparaissent dans l'expression sont pour la plupart inconnues, on suppose que $V(T)$ est une forme similaire à la loi de Planck²⁷ (Eq.2.42 p101) [65, p.104]. Cela revient à supposer que les diverses fonctions de la relation (Eq.2.50) sont indépendantes de λ . On compte sur les trois degrés de liberté pour compenser les erreurs générées par cette simplification :

$$L(T) = \frac{R_{cal}}{e^{B_{cal}/T} + F_{cal}} \quad (2.51)$$

Le tableau (Tab.2.3) présente un jeu de valeurs dans le cas où la caméra AGEMA est placée

26. Elle dépend également de la distance caméra-objet. En approchant la caméra du corps noir, on augmente l'angle solide ce qui a pour effet d'augmenter le rayonnement absorbé par les détecteurs.

27. L'AGEMA 880SW utilise la forme définie par la relation (Eq.2.51) mais d'autres caméras calculent simplement une courbe par interpolation des points ($^{\circ}C$; DL) obtenus avec le corps noir. Une telle approche n'est cependant pas pratique pour les développements analytiques.

Paramètres	Valeurs	Description
h	$6,62617 \times 10^{-34} \text{ J.s}$	Constante de Planck
c_λ	$299,7 \times 10^6 \text{ m/s}$	Vitesse de la lumière dans l'air
k	$1,38066 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	Constante de Boltzmann
Coefficients de calibration à 0,80 m		
R_{cal}	494585 W.m^{-2}	Constante de calibration
B_{cal}	$3,003 \times 10^3 \text{ K}$	Constante de calibration
F_{cal}	42	Constante de calibration

Tableau 2.3 – Valeur des paramètres intervenant dans la loi de Planck et exemple de jeu de constantes de calibration pour la caméra AGEMA880 avec l'objectif 12, sans filtre et à une distance $d = 0,80 \text{ m}$ du corps noir.

à une distance de $0,80 \text{ m}$ du corps noir. Lorsque les températures considérées sont faibles, l'exponentielle au dénominateur est très supérieure à F d'où l'expression simplifiée suivante (et sa fonction réciproque) :

$$V(T) = R_{cal} e^{-B_{cal}/T} \quad [DL] \quad (2.52)$$

$$T(DL) = -\frac{B_{cal}}{\ln\left(\frac{V}{R_{cal}}\right)} \quad (2.53)$$

4.7 Approximations de la loi d'étalonnage

Pour terminer cette section sur la thermographie infrarouge, on étudie ici la possibilité d'utiliser une approximation de la loi d'étalonnage. L'enjeu est de savoir si on peut se contenter d'une approximation linéaire de celle-ci et dans quelles conditions.

Considérons maintenant un corps noir à température uniforme T_0 . Le niveau numérique mesuré par la caméra est $V_0 = V(T_0)$. Si la surface observée par la caméra voit sa température augmenter de façon uniforme, le flux radiatif augmente de ΔV , la température correspondante vaut donc :

$$T_{(V_0+\Delta V)} = T_{(V_0)} + \frac{\partial T}{\partial V} \Delta V + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial V^2} \Delta V^2 + o(\Delta V^2) \quad (2.54)$$

$$\text{Avec } \begin{cases} \frac{\partial T}{\partial V} = -\frac{B}{V_0 \ln^2\left(\frac{V_0}{R}\right)} = \frac{T_0^2 e^{B/T_0}}{RB} \\ \frac{\partial^2 T}{\partial V^2} = -B \frac{2+\ln\left(\frac{V_0}{R}\right)}{V_0^2 \ln^3\left(\frac{V_0}{R}\right)} = -\frac{1}{(RB)^2} \left(\frac{B}{T} - 2\right) T^3 e^{2B/T} \end{cases} \quad (2.55)$$

Si on tronque le développement au premier ordre, on obtient immédiatement :

$$\Delta T = T_{(V_0+\Delta V)} - T_{(V_0)} = \frac{\partial T}{\partial V} \Delta V \quad (2.56)$$

On peut alors exprimer les harmoniques du champ de température $\theta_{m,n}$ en fonction des harmo-

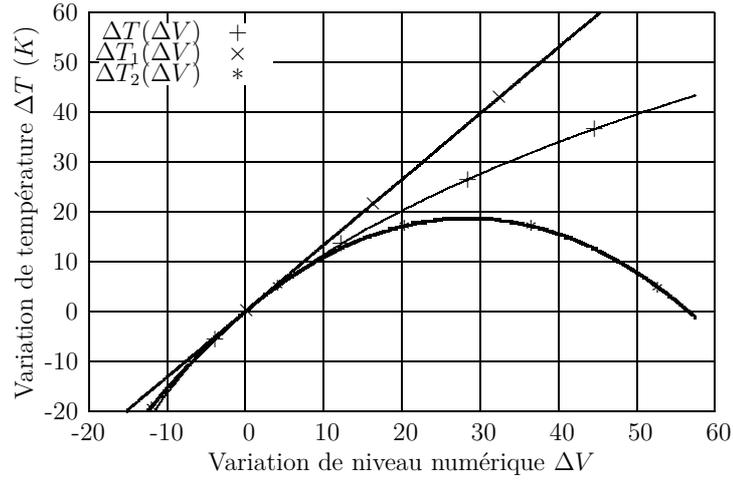


Figure 2.15 – Comparaison entre la courbe d'étalonnage et sa linéarisation température autour d'une température de référence $T_0 = 300 \text{ K}$.

riques du champ de flux $\mathcal{T}\{\Delta V\}_{m,n}$:

$$\theta_{m,n} = \frac{\partial T}{\partial V} \mathcal{T}\{\Delta V\}_{m,n} \quad (2.57)$$

Grâce à ce développement au premier ordre, les sorties du modèle correspondent maintenant aux harmoniques du champ de flux :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\{\Delta V\} &= \frac{\partial V}{\partial T} \theta_{m,n} \\ &= E'_{m,n} \left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k(z)}}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right] e^{-[\tau_x(m\pi)^2 + \tau_y(n\pi)^2] t} \end{aligned} \quad (2.58)$$

Avec le nouveau paramètre (voir Eq.2.31) : $E'_{m,n} = \frac{\partial V}{\partial T} T_{lim} R_{m,n}$.

De façon à visualiser graphiquement les différents ordres d'approximation, on reporte sur un graphique (Fig.2.15), la courbe de calibration obtenue avec l'expression théorique (Eq.2.51), l'approximation à l'ordre 1 (Eq.2.56) ainsi que l'approximation à l'ordre 2. On en conclut que la linéarisation de la loi d'étalonnage n'est valable que pour de faibles variations de température. Graphiquement, on commence à distinguer l'écart avec la courbe théorique dès que $\Delta T > 5 \text{ }^\circ\text{C}$.

Notre objectif est d'estimer des diffusivités thermiques et non de mesurer des températures. Il est donc inutile d'accorder trop d'importance à la qualité de la courbe d'étalonnage. Avec l'hypothèse de linéarité-flux température, on vient de montrer que l'on peut complètement faire abstraction de l'étalonnage de la caméra. Cette hypothèse peut générer un biais très significatif avec les méthodes flash en face-avant (voir §5.4.6 p140) si l'exploitation des mesures n'est pas faite correctement alors qu'en face arrière, l'effet de la linéarisation est plus réduit. Si la

linéarisation n'est pas envisageable, il suffit d'utiliser une loi d'étalonnage proportionnelle à la loi réelle (§5.4.7 p141). Les non-linéarités de la loi de Planck sont ainsi prises en compte et aucun biais n'est engendré sur les paramètres.

5 Etat de l'art du traitement numérique

La méthode flash 3D est basée sur l'utilisation d'une solution analytique instationnaire tridimensionnelle de l'équation de la chaleur dans une géométrie cartésienne (Eq.2.30 p92). La solution correspond à la réponse d'un matériau homogène anisotrope à une excitation thermique localisée et impulsionnelle. La notion d'harmonique a été présentée (§3.3 p94) ainsi que l'intérêt de les utiliser pour estimer les diffusivités thermiques de l'échantillon. Les harmoniques d'un champ de température à un instant donné, sont les composantes de ce champ dans la base de fonctions cosinus $B_{m,n}(x, y)$ (Eq.2.35 p94). Elles sont obtenues en projetant $T(x, y, z, t)$ sur cette base $B_{m,n}(x, y)$.

L'expression des harmoniques (Eq.2.36 p95) fait intervenir plusieurs paramètres inconnus à estimer : les paramètres thermophysiques τ_x, τ_y, τ_z et le nombre de Biot H ainsi que les coefficients $E_{m,n}$ de l'excitation thermique :

$$\beta = [\tau_x, \tau_y, \tau_z, H, E_{m_i, n_i}, \dots]^T \quad (2.59)$$

Les quatre estimateurs présentés par la suite procèdent de différentes façons pour estimer le vecteur des paramètres β . Les trois premiers utilisent uniquement l'harmonique $\theta_{0,0}(t)$ (le champ moyen) pour estimer τ_z et H , puis estiment séparément τ_x et τ_y . Le dernier, l'estimateur ED, estime tous les paramètres simultanément. Ces estimateurs sont ensuite comparés pour déterminer le « meilleur », c'est à dire celui qui présente la plus faible variance. Quant au biais, moyennant parfois quelques précautions, il est généralement marginal.

5.1 Estimation par rapport des harmoniques

Certaines méthodes destinées à estimer simultanément les diffusivités d'un matériau isotrope ou anisotrope, supposent que l'excitation est uniforme en espace [25] faute d'information précise sur la distribution spatiale de l'excitation. Cette hypothèse d'uniformité de l'excitation est en effet pratique pour pouvoir obtenir des solutions analytiques mais la question est de savoir quel est le biais sur la solution lorsque cette hypothèse n'est pas vérifiée [23, 75]. La question est d'autant plus centrale que l'utilisation des lasers s'est généralisée et avec ces appareils, la répartition spatiale de la puissance est tout sauf uniforme [76, 77], en l'absence de dispositif de correction. Cela a poussé certains auteurs à caractériser la distribution spatiale du laser

sur un matériau de référence puis d'utiliser ces résultats pour estimer les propriétés d'un autre matériau [78]. Cependant, le problème de l'uniformité disparaît dès que l'on utilise une caméra infrarouge puisque les modèles analytiques montrent qu'en travaillant sur le champ moyen, on fait abstraction de la forme spatiale de l'excitation²⁸. Pour la diffusivité dans l'épaisseur, le problème de l'excitation est donc réglé si on dispose de l'appareil de mesure adapté.

Lorsque l'objectif est d'estimer les diffusivités thermiques dans le plan d'un matériau, l'approche proposée par Philippi [27] permet de s'affranchir de la forme spatiale de l'excitation thermique. Un autre dispositif, proposé par Remy [30], permet de s'affranchir en plus de la forme temporelle. Toutefois le dispositif expérimental est un peu différent de la méthode flash.

5.1.1 Principe de l'estimation par rapport des harmoniques

La méthode proposée dans [27] repose sur une idée qui consiste à diviser la valeur de l'harmonique $\theta_{m,n}(z, t_1)$ à un instant t_1 , par la valeur de la même harmonique à un autre instant $t_2 > t_1$. Ainsi, le premier terme $E_{m,n}$ de l'expression des harmoniques $\theta_{m,n}(t)$ (Eq.2.36) disparaît :

$$\frac{\theta_{m,n}(z, t_2)}{\theta_{m,n}(z, t_1)} = \frac{\sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t_2}}{\sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t_1}} \exp\left(-\tau_x m^2 \pi^2 (t_2 - t_1) - \tau_y n^2 \pi^2 (t_2 - t_1)\right) \quad (2.60)$$

L'excitation thermique, introduite dans le paramètre $E_{m,n}$, n'apparaît plus dans l'expression. En prenant le logarithme de cette expression, on obtient l'expression des observables $Y_{m,n}(z, t)$:

$$Y_{m,n}(z, t_1, t_2) = \ln\left(\left|\frac{\theta_{m,n}(z, t_2)}{\theta_{m,n}(z, t_1)}\right|\right) = C_{(H,z,t_1,t_2)} - \left[\tau_x m^2 + \tau_y n^2\right] \pi^2 (t_2 - t_1) \quad (2.61)$$

La solution analytique nous a permis de trouver quelle transformation appliquer sur les mesures pour faire disparaître la dépendance à l'excitation thermique et ainsi du même coup, pour obtenir une méthode simple permettant d'extraire les diffusivités thermiques. En effet, l'estimation de τ_x et τ_y est directe puisque le modèle inverse est linéaire : la dérivée des observables par rapport τ_x , τ_y et $C_{m,n}$ ne dépend pas de ces paramètres.

5.1.2 Matrice de variance-covariance des observables

La matrice de variance-covariance des observables est un peu complexe car les observables $Y_{m,n}^*(z, t_1, t_2)$ sont potentiellement corrélés. Remarquons tout d'abord que des observables issus

²⁸. L'expression des harmoniques montre en effet que $\theta_{0,0}$ correspond à la réponse d'un mur monodimensionnel excité par la moyenne spatiale de l'excitation thermique.

d'harmoniques différentes ne sont jamais corrélés²⁹, ainsi :

$$\text{cov}(Y_{m,n}^*(z,t_1,t_2), Y_{p,q}^*(z,t_1,t_2)) = 0 \quad \text{si } m \neq p \text{ ou } n \neq q \quad (2.62)$$

Lorsque $(m, n) = (p, q)$, les observables sont corrélés s'ils partagent un instant en commun. En développant les logarithmes au premier ordre, on obtient :

$$\begin{aligned} \text{cov}(Y^*(t_1, t_2), Y^*(t_3, t_4)) &= \text{E} \left[\left(Y_{m,n}^*(z,t_1,t_2) - \text{E} \left[Y_{m,n}^*(z,t_1,t_2) \right] \right) \left(Y_{m,n}^*(z,t_3,t_4) - \text{E} \left[Y_{m,n}^*(z,t_3,t_4) \right] \right) \right] \\ &= \frac{\text{cov}(\theta_{m,n}^*(t_2), \theta_{m,n}^*(t_4))}{\theta_{m,n}(t_2) \theta_{m,n}(t_4)} + \frac{\text{cov}(\theta_{m,n}^*(t_1), \theta_{m,n}^*(t_3))}{\theta_{m,n}(t_1) \theta_{m,n}(t_3)} \\ &\quad - \frac{\text{cov}(\theta_{m,n}^*(t_1), \theta_{m,n}^*(t_4))}{\theta_{m,n}(t_1) \theta_{m,n}(t_4)} - \frac{\text{cov}(\theta_{m,n}^*(t_2), \theta_{m,n}^*(t_3))}{\theta_{m,n}(t_2) \theta_{m,n}(t_3)} \end{aligned} \quad (2.63)$$

A partir de l'expression de la variance des harmoniques (Eq.2.37 p96), on obtient la variance de $Y_{m,n}(z,t_1,t_2)$ en posant $t_3 = t_1$ et $t_4 = t_2$ dans l'expression précédente :

$$\text{var}(Y_{m,n}^*(t_1, t_2)) = \frac{1}{4} \frac{\sigma_m^2}{N_x N_Y} (1 + \delta(m)) (1 + \delta(n)) \left[\frac{1}{\theta_{m,n}(t_2)^2} + \frac{1}{\theta_{m,n}(t_1)^2} \right] \quad (2.64)$$

Dans le cas particulier où $t_2 = t_3$ (les deux intervalles de temps ont un instant en commun), on obtient :

$$\text{cov}(Y_{m,n}^*(t_1, t_2), Y_{m,n}^*(t_3, t_4)) = \frac{1}{4} \frac{\sigma_m^2}{N_x N_Y} (1 + \delta(m)) (1 + \delta(n)) \frac{1}{\theta_{m,n}(t_2) \theta_{m,n}(t_3)} \quad (2.65)$$

Du fait de l'opération appliquée sur les harmoniques, les nouveaux observables n'ont plus une variance constante au cours du temps. On distingue deux régimes d'évolution en fonction du type de méthode flash utilisée :

Méthode flash face-avant : Les harmoniques $\theta_{m,n}(z, t)$ ne font que décroître vers 0 donc la variance des observables $Y_{m,n}(t_1, t_2)$ ne fait qu'augmenter.

Méthode flash face-arrière : Les harmoniques $\theta_{m,n}(z, t)$ passent par un maximum puis décroissent vers 0. La variance des observables est initialement non définie puisque les harmoniques sont nulles. Elle décroît à mesure que les harmoniques augmentent puis augmente à nouveau avant de ne plus être définie.

Remarque

Pour obtenir les relations ci-dessus, plusieurs opérations ont été nécessaires :

1. Utiliser la décomposition habituelles des harmoniques avec leur valeur exacte et leur erreur aléatoire :

$$\theta_{m,n} = \overline{\theta_{m,n}} + e_{m,n}$$

29. Si les pixels de la caméra infrarouge ne sont pas corrélés, on a montré que les harmoniques ne le sont pas non plus. Par conséquent, les observables ici ne le sont pas non plus s'ils viennent d'harmoniques différentes.

2. Les estimateurs de la covariance (Eq.2.63 et Eq.2.65), de la variance (Eq.2.64) font intervenir les harmoniques $\theta_{m,n}(z,t)$. Lorsque l'on développe le calcul, ce sont les termes $\overline{\theta_{m,n}}(z,t)$ qui apparaissent. Comme ces derniers sont évidemment inconnus, on obtient une approximation de la matrice de variance-covariance en utilisant les harmoniques expérimentales $\theta_{m,n}^*(z,t)$ à la place.

5.1.3 Estimateur proposé par Philippi et al.

Comme on peut librement choisir les harmoniques (§3.3.4 p99) du champ de température que l'on va exploiter, Philippi et al. [27] proposent de ne considérer que les M harmoniques $(m,n) = (1-0), (2-0), \dots, (M-0)$ pour estimer le paramètre τ_x . Par ailleurs, il est montré que le terme $C_{(H,z,t_1,t_2)}$ (Eq.2.61) pourrait être remplacé par l'approximation ci-dessous à partir du moment où la température s'est équilibrée dans l'épaisseur :

$$C_{(H,z,t_1,t_2)} \approx -\frac{2}{\rho C l_z}(t_2 - t_1) \quad (2.66)$$

Les observables valent alors :

$$Y_{m,0}(z, t_1, t_2) = -\frac{2}{\rho C l_z}(t_2 - t_1) - \tau_x m^2 \pi^2 (t_2 - t_1) \quad (2.67)$$

Toute une méthodologie est présentée pour déterminer la valeur optimale de $\Delta t = t_2 - t_1$. A partir de cette valeur optimale et d'une harmonique $(m, 0)$, on construit un ensemble de doublets d'instantanés, par exemple $(t_1, t_{20}) - (t_2, t_{21}) - (t_3, t_{22}) \dots$. Chaque doublet permet d'estimer le paramètre τ_x et donc a_x avec l'expression suivante :

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\Delta t \alpha_m^2} \left[Y_{0,0}^*(z, t_1, t_2) - Y_{m,0}^*(z, t_1, t_2) \right] \quad (2.68)$$

Notez l'étoile * en exposant qui indique que cette quantité est calculée à partir des harmoniques expérimentales. Les estimations de \hat{a}_x pour chaque doublet d'instantanés peuvent ensuite être utilisées pour réduire l'écart-type de l'estimation en utilisant une moyenne pondérée. Cela est possible car les estimations de \hat{a}_x sont indépendantes (si les doublets d'instantanés ne se chevauchent pas et si une seule harmonique (m, n) est utilisée).

Cependant, la méthode proposée a été appliquée sur un matériau et une géométrie d'échantillon très différente de la notre. Philippi traite un alliage d'aluminium ($\lambda \approx 200 \text{ W m}^{-1} \text{ °C}^{-1}$) d'environ $1,5 \text{ mm}$ d'épaisseur alors que nous traitons un isolant ($\lambda \approx 1 \text{ W m}^{-1} \text{ °C}^{-1}$) de 5 mm d'épaisseur. Dans ces conditions, le temps caractéristique de diffusion dans l'épaisseur est tel que les hypothèses utilisées ne sont jamais vérifiées. L'approche ci-dessus n'est donc pas envisageable mais on s'en inspire pour définir un nouvel estimateur.

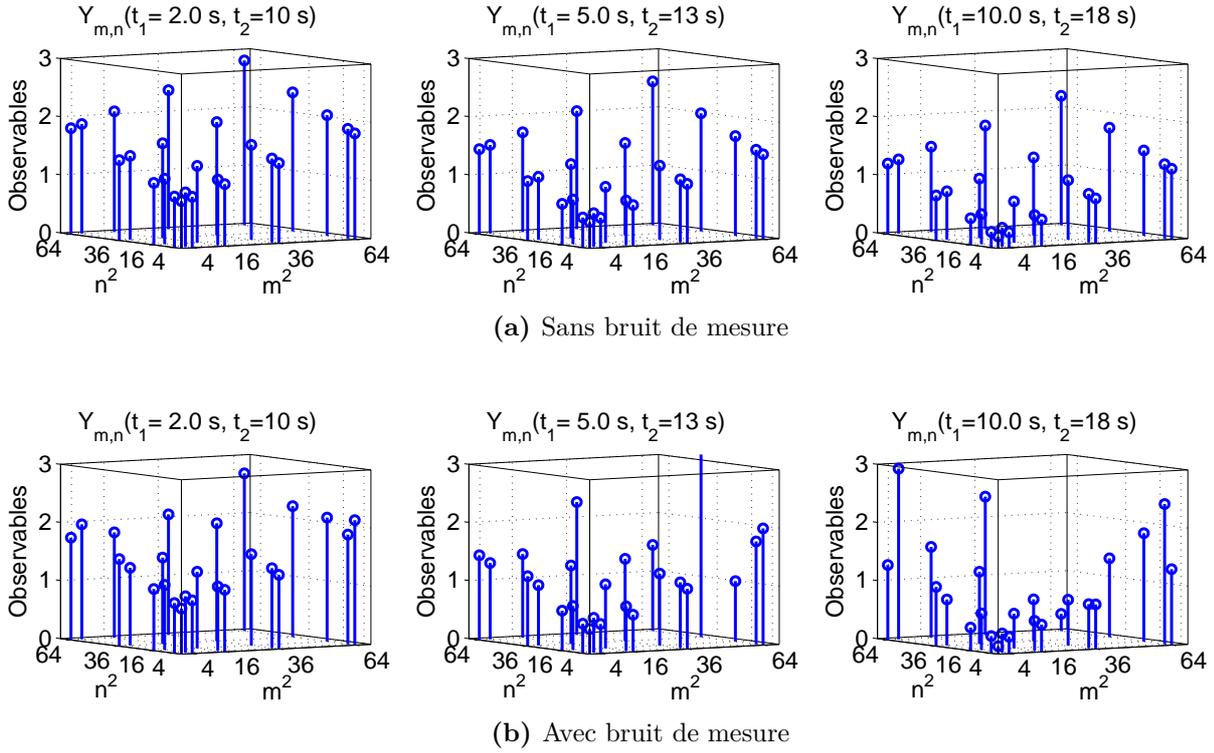


Figure 2.16 – Exemple d’observables simulées pour l’estimateur ERH pour trois doublets (t_1^i, t_2^i) différents. Les observables sont calculés à partir d’harmoniques non bruitées (a) puis bruitées (b).

5.1.4 L’estimateur dit « ERH »

L’estimateur proposé ici, appelé estimateur ERH (pour « Estimateur par Rapport des Harmoniques »), s’inspire donc en grande partie de l’estimateur précédent. Ce dernier est modifié de façon à traiter toutes les harmoniques de l’image et à pouvoir être utilisé sur des matériaux isolants. L’idée est de repartir de l’expression initiale (Eq.2.61) :

$$Y_{m,n}(t_1, t_2) = C(t_1, t_2) - \left[\tau_x m^2 + \tau_y n^2 \right] \pi^2 (t_2 - t_1)$$

Au lieu de remplacer terme $C(t_1, t_2)$ par une constante, il va être estimé. Cela est possible car il ne dépend pas des entiers m et n . Pour t_1 et t_2 fixés, on peut donc tracer un plan en calculant $Y_{m,n}(z, t_1, t_2)$ pour différentes valeurs de m^2 et n^2 . Les coefficients de ce plan permettent d’estimer τ_x et τ_y . Toutefois, pour améliorer la précision de l’estimation, on utilise plusieurs doublets d’instantants indépendants. La différence avec l’estimateur introduit par Philippi et al. [27] vient surtout du fait que l’on exploite toutes les harmoniques possibles pour estimer les valeurs de τ_x et τ_y . De plus, il n’est plus nécessaire d’utiliser une moyenne pondérée pour agréger toutes les estimations, car tous les doublets t_1 et t_2 sont traités simultanément.

La figure (Fig.2.16) montre les observables pour trois doublets d’instantants (t_1^i, t_2^i) (avec $\Delta t =$

$t_2^i - t_1^i = 8 s$) différents et pour les 25 premières harmoniques paires $((m, n) \in \{0, 2, 4, 6, 8\} \times \{0, 2, 4, 6, 8\})$. Dans un premier temps, les harmoniques $\theta_{m,n}(t)$ (Fig.2.6 p97) nécessaires au calcul des observables ne sont pas bruitées ce qui permet de bien distinguer le plan. Si maintenant, on ajoute un bruit aux harmoniques, on peut toujours distinguer les 64 observables pour le doublet $(t_1 = 2 s, t_2 = 10 s)$ mais ce n'est plus possible pour le 3^{ème} doublet $(t_1 = 10 s, t_2 = 18 s)$ où les plus hautes fréquences sont clairement aberrantes. Cependant, comme les observables sont pondérés par leur écart-type, ils ne perturbent pas l'estimation.

Pour ne pas trop complexifier l'estimateur, l'écart $\Delta t = t_2 - t_1$ est gardé constant et égal à une valeur inconnue pour le moment. Admettons que l'on dispose de $m = 200$ champs de température et que l'écart Δt corresponde à 20 pas de temps, on peut donc considérer les n_Δ doublets Δ_i indépendants suivants :

$$\underbrace{(t_0, t_{20})}_{\Delta_1=(t_1^1, t_2^1)} - (t_1, t_{21}) - (t_2, t_{22}) - \dots - \underbrace{(t_{19}, t_{39})}_{\Delta_{20}} - \underbrace{(t_{40}, t_{60})}_{\Delta_{21}} - (t_{41}, t_{61}) - \dots - \dots - \underbrace{(t_{179}, t_{199})}_{\Delta_{100}=(t_1^{100}, t_2^{100})}$$

Sur cet exemple, le nombre de paramètres inconnus est $n_\beta = 102$:

$$\beta = [C(t_1^1, t_2^1), C(t_1^2, t_2^2), \dots, C(t_1^{100}, t_2^{100}), \tau_x, \tau_y]^T \quad (2.69)$$

Une particularité de cet estimateur est d'être linéaire par rapport à ces paramètres β . En effet, il peut s'écrire :

$$Y = \begin{bmatrix} Y_{0,0}(t_1^1, t_2^1) \\ Y_{2,0}(t_1^1, t_2^1) \\ Y_{4,0}(t_1^1, t_2^1) \\ Y_{0,2}(t_1^1, t_2^1) \\ Y_{2,2}(t_1^1, t_2^1) \\ Y_{4,2}(t_1^1, t_2^1) \\ \vdots \\ Y_{m,n}(t_1^i, t_2^i) \\ \vdots \\ Y_{0,0}(t_1^{n_\Delta}, t_2^{n_\Delta}) \\ Y_{2,0}(t_1^{n_\Delta}, t_2^{n_\Delta}) \\ Y_{4,0}(t_1^{n_\Delta}, t_2^{n_\Delta}) \\ Y_{0,2}(t_1^{n_\Delta}, t_2^{n_\Delta}) \\ Y_{2,2}(t_1^{n_\Delta}, t_2^{n_\Delta}) \\ Y_{4,2}(t_1^{n_\Delta}, t_2^{n_\Delta}) \end{bmatrix} = X \beta \quad \text{avec} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & -(2\pi)^2 \Delta_1 & 0 \\ 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & -(4\pi)^2 \Delta_1 & 0 \\ 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & -(2\pi)^2 \Delta_1 \\ 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & -(2\pi)^2 \Delta_1 & -(2\pi)^2 \Delta_1 \\ 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & -(4\pi)^2 \Delta_1 & -(2\pi)^2 \Delta_1 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots & \\ 0 & \dots & (C_i = 1) & \dots & 0 & -(m\pi)^2 \Delta_i & -(n\pi)^2 \Delta_i \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots & \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & -(2\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & -(4\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & 0 & -(2\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & -(2\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} & -(2\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 1 & -(4\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} & -(2\pi)^2 \Delta_{n_\Delta} \end{bmatrix} \quad (2.70)$$

Le terme ($C_i = 1$) dans la matrice X signifie que le coefficient de la $i^{\text{ème}}$ colonne vaut 1. L'expression ci-dessus n'est qu'un exemple avec $m \in \{0, 2, 4\}$ et $n \in \{0, 2\}$.

La matrice de variance-covariance $\text{cov}(Y)$ associée aux observables Y est diagonale car on s'est arrangé pour que tous les doublets $\Delta_i = t_2^i - t_1^i$ ne se chevauchent pas. A partir de l'expression (Eq.2.64), on a :

$$\left(\text{cov}(Y^*)\right)_{i,i} = \frac{1}{4} \frac{\sigma_m^2}{N_x N_Y} (1 + \delta(m_i)) (1 + \delta(n_i)) \left[\frac{1}{\theta_{m_i, n_i}^* (t_2^i)^2} + \frac{1}{\theta_{m_i, n_i}^* (t_1^i)^2} \right] \quad (2.71)$$

Avec m_i et n_i les indices de l'harmonique correspondant au $i^{\text{ème}}$ observable (la $i^{\text{ème}}$ ligne de Y). De même pour les instants t_2^i et t_1^i . L'expression ci-dessus a été obtenue par un développement limité du logarithme au premier ordre ce qui engendre un biais dans l'estimateur. Mais ce dernier est négligeable si le rapport signal/bruit est supérieur à 10 (voir §4.3 p307).

Remarque sur le choix des observables :

Pour cet estimateur, les observables ne sont pas tous valides. Comme spécifié dans [27], il faut en effet que le rapport signal sur bruit des harmoniques soit supérieur à 10. Les observables $Y_{m,n}(t_2^i, t_1^i)$ font intervenir deux harmoniques. L'observable n'est valable que si le rapport signal sur bruit des deux harmoniques est supérieur à 10. Dès lors, le nombre d'harmoniques exploitables pour un doublet (t_2^i, t_1^i) fixé peut ne pas être constant.

Remarque sur la linéarité des deux estimateurs précédents :

Avec ces deux estimateurs, la matrice de variance-covariance fait apparaître les harmoniques (expérimentales ou simulées) si bien que ces estimateurs ne sont pas des estimateurs linéaires.

5.1.5 Optimisation de l'estimateur ERH

L'estimateur ERH fait intervenir le paramètre Δt qui correspond à l'écart temporel $t_2^i - t_1^i$ entre chaque paire d'images i . Ce paramètre doit être spécifié pour utiliser l'estimateur. Augmenter ce paramètre augmente les coefficients de sensibilités (Eq.2.70) mais réduit le nombre de doublet d'instantants indépendants³⁰. La valeur de ce paramètre est choisie de manière à minimiser l'écart-type théorique des paramètres τ_x et τ_y . D'une certaine manière, on anticipe ici sur le chapitre 3 qui traite de la *conception optimale d'expérience*, puisque l'on fait ici de la *conception optimale d'estimateur*.

Le paradoxe avec ce problème d'optimisation vient du fait que la matrice de variance-covariance des observables dépend des harmoniques, c'est à dire des mesures expérimentales.

³⁰. Avec 300 instants, et $\Delta t = 30$ pas de temps, le nombre n_Δ de doublets est de $n_\Delta = 150$, avec $\Delta t = 60$, on a $n_\Delta = 120$ et avec $\Delta t = 100$, on a $n_\Delta = 100$

Utiliser des harmoniques simulées est tout à fait possible, mais cela nécessite quand même de connaître les paramètres $E_{m,n}$ de l'excitation, le nombre de Biot H et les paramètres recherchés τ_x, τ_y, τ_z . On n'a donc pas d'autre choix que d'utiliser des valeurs que l'on juge les plus vraisemblables. Par ailleurs, contrairement à la conception optimale d'expérience, il n'est pas difficile, à l'issue de l'inversion, de réajuster l'estimateur (le paramètre Δt) à la lumière des estimations puisqu'il ne s'agit que d'un paramètre numérique.

La méthode pour déterminer Δt consiste à résoudre un problème de minimisation. Ce dernier est suffisamment simple pour se permettre de déterminer la solution en testant toutes les valeurs possibles. On conserve alors celle pour laquelle les écarts-types de τ_x et τ_y sont les plus faibles. Ils sont obtenus en prenant les deux derniers coefficients diagonaux de la matrice de variance-covariance de $\hat{\beta}$:

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \left[X^T W X \right]^{-1}$$

5.1.6 Synthèse sur l'estimateur « ERH »

L'estimateur ERH permet d'estimer les paramètres τ_x et τ_y à partir des mesures obtenues avec une méthode flash face avant ou face arrière. Le principe de cet estimateur repose sur une transformation des mesures de manière à simplifier la résolution du problème. Cette astuce est suggérée par la solution analytique impulsionnelle et consiste à construire de nouveaux observables. Grâce à cette transformation, le problème inverse est linéaire ce qui permet d'obtenir la solution de manière explicite, sans utilisation d'un algorithme d'optimisation. Cependant, avec cette transformation, la variance des observables n'est plus indépendante du temps et dépend maintenant des mesures elles-mêmes. Ainsi, l'estimateur n'est plus un estimateur linéaire.

Par ailleurs, cet estimateur fait apparaître un paramètre externe Δt que l'utilisateur doit spécifier. Une méthode est proposée pour définir la valeur de ce paramètre. Elle consiste à utiliser une estimation de la solution pour pouvoir calculer la matrice de covariance puis ensuite déterminer Δt de manière à minimiser l'écart-type théorique des estimations.

Enfin, si le matériau est anisotrope, un autre algorithme est nécessaire pour estimer τ_z (§2.6 p78). L'estimateur ERH n'estime en effet que τ_x et τ_y .

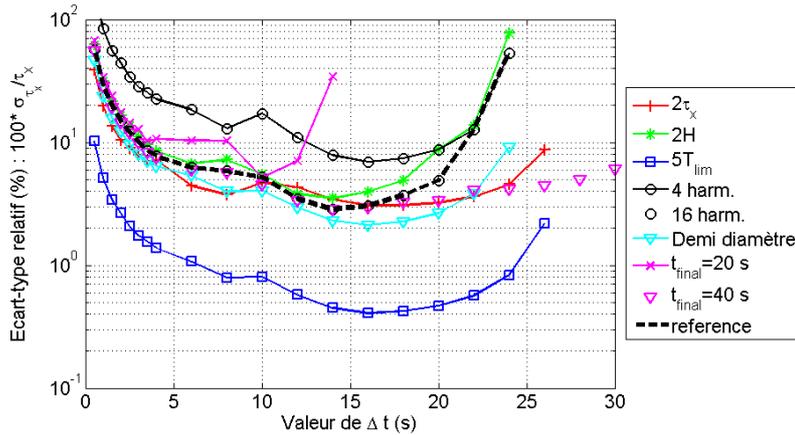
Exemple : Détermination de la valeur optimale de Δt

Pour cet exemple, on considère le cas particulier où $\tau_x = \tau_y$. De cette façon, le problème d'optimisation n'est pas multiobjectif : le critère d'optimalité porte uniquement sur l'écart-type théorique de τ_x . Par ailleurs, le matériau est supposé isolant ($\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) (Tab.A.1). L'estimateur ERH est paramétré ici pour exploiter les fréquences $m = \{0, 2, 4\} \times n = \{0, 2, 4\}$. Pour chaque doublet $\Delta_i = (t_2^i, t_1^i)$, la valeur de l'harmonique pour ces 9 fréquences est exploitée. On suppose que l'excitation est de type cubique et qu'elle est centrée sur l'échantillon. La diamètre du spot correspond à un quart de la longueur de l'échantillon. La puissance du laser est supposée telle qu'il dépose 1 J sur l'échantillon (une puissance de 100 W pendant 10 ms).

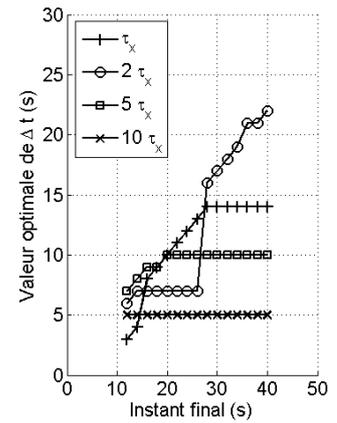
Dans le cas d'une méthode flash face-arrière, la figure (Fig.2.17.a) montre l'évolution de l'écart-type relatif théorique de τ_x . La courbe noire en pointillés correspond à la situation de référence dont les paramètres viennent d'être spécifiés. Le minimum apparaît pour $\Delta t = 14 \text{ s}$ (140 pas de temps). On a tout intérêt à ajuster correctement ce paramètre étant donnée son influence. On remarque en effet que l'écart-type est multiplié par 2 si on prend $\Delta t = 10 \text{ s}$. Les autres courbes montrent l'évolution de Δt après la modification d'un paramètre. Par exemple, la courbe « 16 harm. », obtenue avec les 16 premières harmoniques paires ($m = n = \{0 \ 2 \ 4 \ 6\}$), est graphiquement confondue avec la référence, ce qui signifie que les harmoniques supplémentaires n'ont qu'un impact très faible. Il est possible que ces dernières ne « vivent » pas assez longtemps pour traverser le matériau. Quant à T_{lim} , multiplier ce paramètre par 5 permet de gagner un facteur 6.

Seul l'instant final t_f semble avoir une influence significative sur la position du minimum. Même le fait de doubler la conductivité (courbe rouge) n'a qu'un effet marginal. Pour analyser la dépendance de Δt à t_f , la même étude a été menée en faisant varier t_f (Fig.2.17.b). Sans modifier τ_x , on constate curieusement que la valeur de Δt optimale dépend à peu près linéairement de t_f avec un coefficient directeur d'environ $0,5 \text{ s}^{-1}$ jusqu'à $t_f = 30 \text{ s}$. Ensuite, la valeur optimale est indépendante de t_f . Avec un matériau deux fois plus diffusif (τ_y et τ_z sont également multipliés par 2), l'évolution de Δt est assez singulière : elle reste constante jusqu'à $t_f = 26 \text{ s}$ puis passe brutalement à des valeurs supérieures à 16 s pour $t_f \geq 27 \text{ s}$. Cette discontinuité est due à la manière de construire les doublets (t_1^i, t_2^i) . Concernant $5\tau_x$ et $10\tau_x$ le Δt optimum reste constant d'autant plus tôt que la diffusivité du matériau est grande.

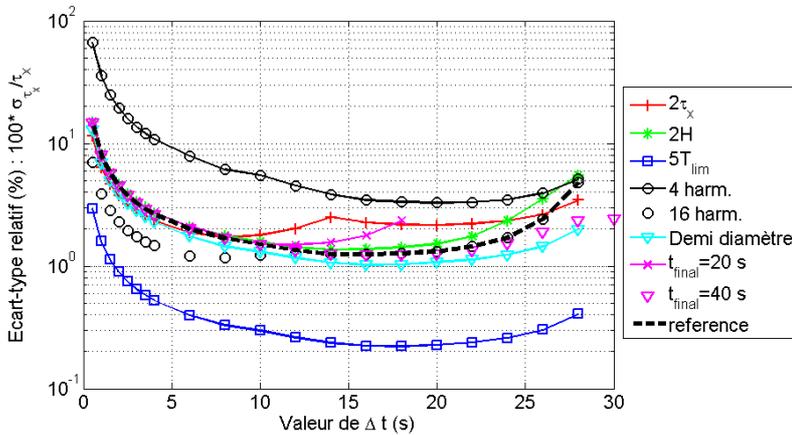
Avec une méthode flash face-avant, la figure (Fig.2.17.c) montre que là aussi, la valeur optimale de Δt ne dépend pas de manière significative des paramètres sauf vis à vis de l'instant final t_f . De plus, l'influence de Δt sur l'écart-type est globalement plus faible qu'en face arrière. Une valeur de Δt entre 15 et 25 s reste satisfaisante pour toutes les courbes. Quant à l'évolution de Δt avec l'instant final d'acquisition, l'allure ressemble à celle de la figure (Fig.2.17.d).



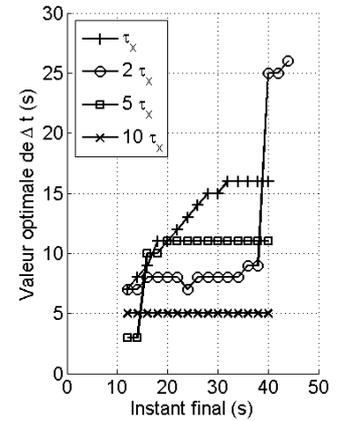
(a) Sensibilité de Δt aux paramètres (face arrière)



(b) Δt en fonction de l'instant final (face arrière)



(c) Sensibilité de Δt aux paramètres (face avant)



(d) Δt en fonction de l'instant final (face avant)

Figure 2.17 – Erreur relative sur τ_x en fonction de Δt et des paramètres de l'expérience (à gauche) avec une méthode flash. Evolution de Δt en fonction de l'instant final t_f de l'acquisition (à droite).

5.2 Estimation par normalisation des harmoniques (ENH)

Un autre estimateur des paramètres τ_x et τ_y est proposé notamment par Krapez [28] et un peu plus tard par Vavilov [79] et Bison [55]. Le principe consiste toujours à exploiter le rapport entre deux harmoniques, mais ces deux harmoniques ont maintenant des fréquences différentes. Krapez utilise un masque devant l'excitation thermique pour générer plusieurs excitations locales. Cela augmente l'amplitude de certaines harmoniques et améliore le rapport signal/bruit. Toutefois, de nombreux masques (circulaires, carrés, réseaux) ont été essayés [79] et d'après leurs conclusions, la forme spatiale de l'excitation n'est pas déterminante, contrairement au caractère impulsionnel en temps. Quant à Bison, il utilise cet estimateur aux temps courts sur des matériaux bicouches pour évaluer le vieillissement de protections thermiques.

5.2.1 Principe de la normalisation des harmoniques

Dans les articles cités ci-dessus, les observables sont obtenus en divisant les harmoniques (m, n) par une autre harmonique au même instant. Cette harmonique, dite « de référence » $(0, 0)$, est le champ moyen. Ainsi, le terme central « solution du problème 1D » (Eq.2.36 p95) disparaît. Les observables sont maintenant définis par :

$$Y_{m,n}(t) = \ln \left(\frac{|\theta_{m,n}(z,t)|}{|\theta_{0,0}(z,t)|} \right) = \ln \left(\frac{|E_{m,n}|}{|E_{0,0}|} \right) - \left(\tau_x m^2 + \tau_y n^2 \right) \pi^2 t \quad (2.72)$$

L'harmonique $(0, 0)$ est qualifiée de « référence » car toutes les harmoniques (m, n) que l'on souhaite exploiter sont divisées par cette unique harmonique. Par rapport aux estimateurs utilisés dans les articles cités ci-dessus, deux améliorations sont proposées ici :

- Au lieu de d'estimer τ_x par une régression linéaire sur le temps avec une seule harmonique, toutes les harmoniques dont l'exploitation est possible sont utilisées simultanément.
- Par ailleurs, on montre dans la suite qu'utiliser l'harmonique $(0, 0)$ comme référence n'est pas nécessairement le meilleur choix.

En exploitant toutes les harmoniques et en utilisant comme référence l'harmonique $\theta_{p,q}(t)$, les observables sont :

$$Y_{m,n(p,q,t)} = \ln \left(\frac{|\theta_{m,n}(z,t)|}{|\theta_{p,q}(z,t)|} \right) = \ln \left(\frac{|E_{m,n}|}{|E_{p,q}|} \right) - \underbrace{\left(\tau_x(m^2 - p^2) + \tau_y(n^2 - q^2) \right)}_{C_{m,n}} \pi^2 t \quad (2.73)$$

Les paramètres $C_{m,n}$ correspondent au rapport des harmoniques de l'excitation. Ils sont inconnus et doivent être estimés parallèlement à τ_x et τ_y . Les paramètres inconnus sont :

$$\beta = [\tau_x, \tau_y, C_{m_1, n_1}, C_{m_2, n_2}, C_{m_3, n_3}, \dots]^T \quad (2.74)$$

Sur l'expression des observables (Eq.2.73), on constate que pour une harmonique (m, n) fixée, les observables dépendent linéairement du temps. En calculant le coefficient directeur $A_{m,n}$ de cette droite avec tous les observables correspondant³¹ à l'harmonique $\theta_{m,n}(t)$, on obtient le coefficient directeur suivant :

$$A_{m,n} = - \left(\tau_x(m^2 - p^2) + \tau_y(n^2 - q^2) \right) \pi^2$$

Si on choisit une harmonique tel que $n = q$, alors on obtient le paramètre τ_x au coefficient π^2 près. Plutôt que d'estimer le paramètre $A_{m,n}$ pour chaque harmonique puis d'en calculer

31. Les observables correspondant à une harmonique $\theta_{m,n}(t)$ sont les observables dont l'harmonique du numérateur est $\theta_{m,n}(t)$. L'harmonique du dénominateur, la référence, est commune à tous les observables.

l'estimateur. Mais ce dernier est négligeable si le rapport signal/bruit est supérieur à 10 (voir Annexe 4.3 p307).

Comme pour l'estimateur précédent, tous les observables ne sont pas exploitables. Ils ne le sont qu'à la condition que les rapports signal sur bruit de l'harmonique (du numérateur) et de la référence (au dénominateur) de l'observable soient supérieurs à environ 10, sans quoi on s'expose au mieux à des biais et plus probablement à des problèmes numériques lorsque le logarithme est évalué pour des valeurs négatives. Ainsi, l'exemple de la matrice X (Eq.2.75) peut induire en erreur puisqu'il suggère que le nombre d'observables exploitables à un instant donné est indépendant du temps.

A partir de (Eq.2.76), on obtient la variance des observables en prenant $(u, v) = (m, n)$:

$$\text{var}(Y_{m,n}(t_k)) = \frac{\text{var}(\theta_{m,n})}{\theta_{m,n}^2} + \frac{\text{var}(\theta_{p,q})}{\theta_{p,q}^2} \quad (2.77)$$

Puis la covariance entre deux observables issus d'harmoniques différentes avec $(u, v) \neq (m, n)$

$$\text{cov}(Y_{m,n}(t_k), Y_{u,v}(t_k)) = \frac{\text{var}(\theta_{p,q})}{\theta_{p,q}^2} \quad (2.78)$$

Terminons en constatant que deux observables ($\theta_{m,n}(t_i)$ et $\theta_{u,v}(t_j)$) correspondant à deux instants t_i et t_j différents sont décorrélés :

$$\text{cov}(Y_{m,n}(t_i), Y_{u,v}(t_j)) = 0 \quad \forall (m, n) \quad \text{et} \quad \forall (u, v) \quad (2.79)$$

Ainsi, en regroupant dans le vecteur Y les observables par l'instant de mesure t_k , la matrice de variance-covariance $\text{cov}(Y)$ est diagonale par bloc :

$$\text{cov}(Y) = \begin{pmatrix} A(t_1) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A(t_2) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & & 0 & A(t_n) \end{pmatrix} \quad (2.80)$$

Avec $A(t_k)$ une matrice carrée dont la dimension est égale au nombre n_k d'observables exploi-

tables à l'instant t_k . La matrice $A(t_k)$ s'écrit³³ :

$$\begin{aligned}
 A(t_k) &= \begin{pmatrix} \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_1}{\theta_1(t_k)}\right)^2 & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 & \cdots & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 \\ & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_2}{\theta_2(t_k)}\right)^2 & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 & \cdots & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ \text{sym} & & & & \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{n_k}}{\theta_{n_k}(t_k)}\right)^2 \end{pmatrix} \\
 &= \left(\frac{\sigma_{p,q}}{\theta_{p,q}(t_k)}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 + \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_{p,q}} \frac{\theta_{p,q}(t_k)}{\theta_1(t_k)}\right)^2 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ & 1 + \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_{p,q}} \frac{\theta_{p,q}(t_k)}{\theta_2(t_k)}\right)^2 & 1 & \cdots & 1 \\ & & \ddots & & \vdots \\ \text{sym} & & & & 1 + \left(\frac{\sigma_{n_k}}{\sigma_{p,q}} \frac{\theta_{p,q}(t_k)}{\theta_{n_k}(t_k)}\right)^2 \end{pmatrix} \quad (2.81)
 \end{aligned}$$

Avec :

$$\left(\frac{\sigma_i}{\sigma_{p,q}}\right)^2 = \frac{(1 + \delta(m_i))(1 + \delta(n_i))}{(1 + \delta(p))(1 + \delta(q))} \quad \text{et} \quad \frac{\theta_r(t_k)}{\theta_i(t_k)} = \frac{R_{p,q}}{R_{m_i,n_i}} \exp\left(\left[\tau_x(m_i^2 - p^2) + \tau_y(n_i^2 - q^2)\right]\pi^2 t_k\right) \quad (2.82)$$

Les notations sont sensiblement les mêmes que pour l'estimateur de la section précédente. m_i et n_i sont les indices des harmoniques correspondant au $i^{\text{ème}}$ observable. σ_i correspond à l'écart-type (Eq.2.37 p96) de l'harmonique θ_i dont les indices de la fréquence sont (m_i, n_i) . Quant à $R_{p,q}$ et R_{m_i,n_i} , il s'agit des coefficients de la matrice de forme (§2.23 p89).

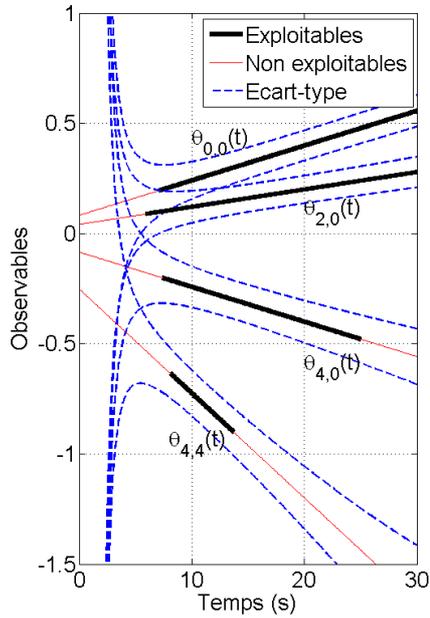
5.2.3 Exemple d'observables

Pour clarifier les idées, la figure (Fig.2.18) présente l'allure des observables pour la méthode flash face-arrière (a et b) et face-avant (c et d). Les observables ont été calculés avec l'expression (Eq.2.73) à partir d'harmoniques simulées. Dans un premier temps, aucun bruit n'est ajouté à celles-ci, si bien que les observables évoluent de manière parfaitement linéaire sur tout l'horizon temporel (lignes rouges). Remarquons également que les observables en face arrière et en face avant sont rigoureusement égaux comme leur expression le montre (la variable z n'intervient pas).

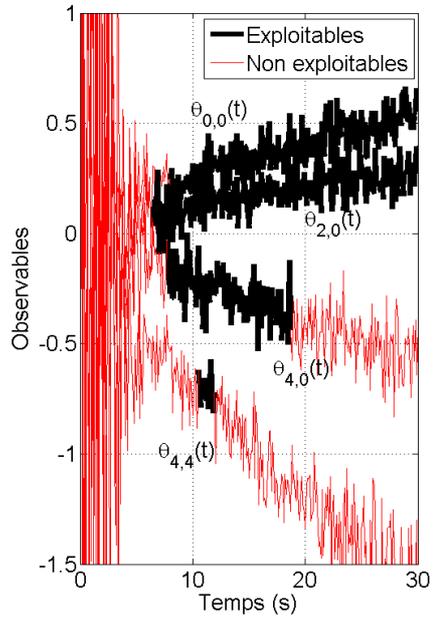
Les observables évoluent de manière linéaire avec un coefficient directeur positif ou négatif suivant l'harmonique. En l'occurrence, l'harmonique de référence utilisée ici est l'harmonique (2, 2). Le matériau étant ici isotrope, le coefficient directeur $A_{m,n}$ des observables $Y_{m,n}(t)$ s'écrit :

$$A_{m,n} = -\tau_x \left((m^2 - p^2) + (n^2 - q^2) \right) \pi^2 \quad (2.83)$$

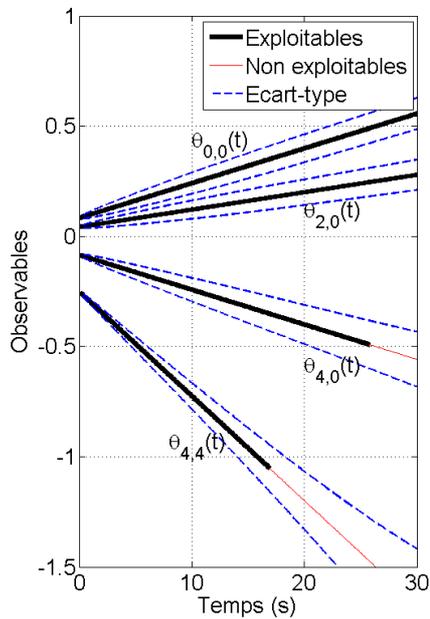
33. La matrice de variance-covariance a généralement besoin d'être inversée, on peut obtenir ici une expression analytique de la matrice inverse (§5.1 p310)



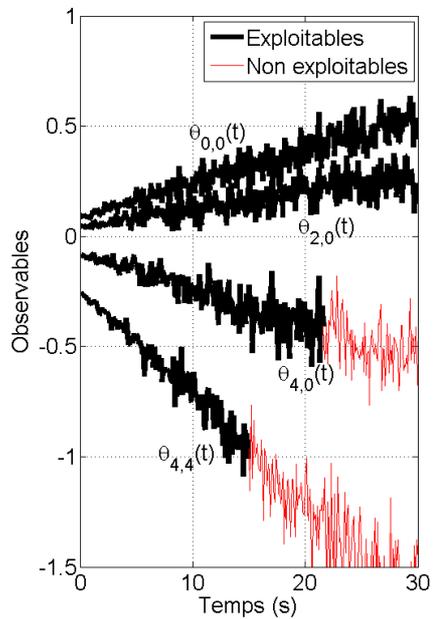
(a) Face arrière : Sans bruit de mesure



(b) Face arrière : Avec bruit de mesure



(c) Face avant : Sans bruit de mesure



(d) Face avant : Avec bruit de mesure

Figure 2.18 – Exemple d’observables simulés pour l’estimateur ENH pour quatre harmoniques différentes : $\theta_{0,0}$, $\theta_{2,0}$, $\theta_{0,2}$ et $\theta_{4,4}$. La référence est $\theta_{2,2}$. Les observables sont calculés à partir d’harmoniques non bruitées (a et c) puis bruitées (b et d).

L'observable $Y_{m,n}(t)$ a une pente négative si sa fréquence est plus élevée que celle de la référence, c'est à dire si $m^2 + n^2 > p^2 + q^2$ et une pente est positive dans le cas contraire. Quant à leur écart-type, les harmoniques sont initialement nulles en face arrière (Fig.2.6 p97) si bien que le logarithme de leur rapport est très perturbé (voire non défini) ce qui est visible sur l'évolution de l'écart-type des observables aux temps courts. Le comportement de l'écart-type en face avant est très différent. Il tend initialement vers 0 en $t = 0$ puisque l'amplitude des harmoniques tend vers l'infini en $t = 0^+$ (Eq.2.77), alors que l'écart-type des harmoniques, lui est constant (Eq.2.37 p96) dans le temps.

La figure utilise deux styles différents de lignes pour distinguer les harmoniques exploitables de celles qui ont un rapport signal/bruit inférieur à 10. Les observables exploitables sont représentés en traits noirs épais et ceux à rejeter sont en traits rouges fins. Là encore, les choses sont assez différentes entre la face avant et la face arrière. Les mesures exploitables sont en effet beaucoup plus nombreuses en face avant qu'en face arrière, alors que les observables ont la même valeur. Les harmoniques sont non seulement plus nombreuses mais leur rapport signal sur bruit est aussi plus élevé, donc les observables sont exploitables plus longtemps.

5.2.4 Choix de l'harmonique de référence

L'estimateur ERH précédent fait intervenir un paramètre additionnel Δt . C'est aussi le cas de l'estimateur ENH puisqu'il faut choisir l'harmonique de référence $\theta_{p,q}$. Plusieurs aspects interviennent dans le choix de cette harmonique (aspects numériques et expérimentaux).

Aspects numériques :

Toutes les harmoniques n'ont pas le même écart-type. L'harmonique moyenne $(0,0)$ a un écart-type 2 fois supérieur aux harmoniques $\theta_{m,n}$ avec $(m > 0, n > 0)$. Il paraît alors raisonnable d'utiliser une harmonique avec un faible écart-type puisque tous les observables en dépendent. De plus, comme le montre l'expression (Eq.2.78), cela réduit la covariance entre les observables. Cependant, la variance et la covariance dépendent également de l'amplitude de l'harmonique, or c'est l'harmonique $(0,0)$ qui a l'amplitude maximale. Non seulement, le terme d'évanescence vaut 1 mais le coefficient $E_{0,0}$ est supérieur à tous les autres :

$$E_{0,0} = T_{lim} \underbrace{R_{0,0}}_{=1} \geq |E_{m,n}| = T_{lim} |R_{m,n}| \quad (2.84)$$

Toutes les harmoniques n'ont pas le même rapport signal/bruit et l'expression (Eq.2.81) suggère de prendre l'harmonique avec le meilleur rapport signal/bruit pour réduire la variance des observables. Une étude numérique suggère le résultat suivant :

Les écarts-types théoriques des estimations sont identiques pour deux harmoniques de référence si ces deux harmoniques ont le même domaine temporel de validité³⁴

Par exemple, imaginons que nous prenions l'harmonique $\theta_{0,4}(t)$ comme référence. La figure (Fig.2.6.a et b) montre que 86 % des mesures de cette harmonique sont exploitables en face avant et seulement 59 % en face arrière. Or si elle est prise comme référence, toutes les autres harmoniques devront s'aligner sur l'horizon temporel de validité de celle-ci. De nombreux instants des autres harmoniques se trouvent donc rejetées à cause de la référence.

Aspects expérimentaux :

Parmi les basses fréquences, privilégiées par les aspects numériques, utiliser $\theta_{2,2}$ présente un avantage d'ordre expérimental. Pour le comprendre, il suffit de remarquer que par exemple, l'harmonique $\theta_{2,0}$ est invariante à une évolution du champ moyen. En d'autres termes, si l'environnement radiatif de l'expérience est modifié et conduit à une augmentation du champ moyen, cette harmonique n'est pas perturbée. Elle le devient si la perturbation n'est pas uniforme en x . Quant à l'harmonique $(2, 2)$, elle n'est sensible qu'à une perturbation non uniforme en x et en y . Alors que [28, 55, 79] utilise $\theta_{0,0}$ comme référence, on préfère ici utiliser $\theta_{2,2}$ pour les raisons évoquées ici.

Il n'existe sans doute pas de règle générale pour choisir la référence puisque la forme de l'excitation et les caractéristiques techniques des appareils utilisés interviennent. Il est possible que dans les situations rencontrées dans [28, 55, 79], la caméra infrarouge ne présente pas d'instabilités temporelles excessives. En l'occurrence, la caméra AGEMA n'excelle pas en la matière. Les instationnarités de l'AGEMA et leur effet sur l'écart-type sont évoqués en annexe (Annexe 5.2 p311). On y aborde également l'intérêt éventuel d'utiliser un filtre numérique pour estimer l'écart-type des harmoniques.

5.2.5 Synthèse

A l'instar de l'estimateur ERH, l'estimateur ENH présenté ici consiste à appliquer une opération numérique aux mesures de manière à transformer le problème inverse non-linéaire en un problème inverse linéaire par rapport aux paramètres τ_x , τ_y et $C_{m,n}$. Le nombre de paramètres $C_{m,n}$ varie approximativement entre 4 et 16, suivant les harmoniques exploitées. Ces paramètres prennent en compte indirectement la forme spatiale de l'excitation thermique.

Les observables sont calculés à partir des harmoniques en divisant celles-ci par une harmonique de référence, choisie par l'utilisateur. On a constaté numériquement, que sous certaines conditions, l'harmonique de référence ne modifie pas les écarts-types théoriques. Cependant,

34. Rapport signal/bruit supérieur à 10.

l'expérience montre que les harmoniques dont un indice est nul sont plus sujets au bruit que les harmoniques (m, n) avec $m, n > 0$. Il semblerait qu'un bon compromis soit d'utiliser $\theta_{2,2}$, qui est l'harmonique de plus basse fréquence et qui est la moins sensible aux perturbations de l'environnement.

Cet estimateur s'applique aussi bien en face arrière qu'en face avant. Toutefois, comme les harmoniques sont davantage filtrées en face arrière, cet estimateur est idéal pour la méthode flash en face-avant. Pour estimer τ_z , il faut utiliser un modèle non-linéaire (§2.6 p78) car l'estimateur ne permet d'estimer que τ_x et τ_y .

5.3 Estimation par traitement direct et séparation des harmoniques (EDSH)

Le terme « traitement direct » signifie qu'aucune transformation n'est appliquée aux champs de température. Les harmoniques sont exploitées directement avec leur expression (Eq.2.36 p95) et l'estimation s'appuie sur un algorithme de minimisation non-linéaire. Cette approche est celle adoptée par Souhar [29].

5.3.1 Principes

Cet estimateur, appelée ici « estimateur EDSH » (pour Estimateur Direct par Séparation des Harmoniques), comprend deux étapes :

1. Les paramètres τ_z et H sont estimés dans un premier temps avec $\theta_{0,0}(t)$, ce qui est possible puisque les paramètres ne sont pas corrélés.
2. On utilise ensuite ces estimations avec les harmoniques $(m, 0)$ pour estimer une valeur de τ_x pour chaque valeur de m , puis avec les harmoniques $(0, n)$ pour estimer une valeur de τ_y pour chaque valeur de n .

Toutes ces estimations $\tau_x^{(i)}$ et $\tau_y^{(j)}$ sont ensuite réunies par un calcul de moyenne où chaque estimation est pondérée par sa variance :

$$\tau_x = \frac{\sum_{i=1}^M \frac{\tau_x^{(i)}}{\sigma_x^2}}{\sum_{i=1}^M \frac{1}{\sigma_x^2}} \quad (2.85)$$

Cette expression peut être obtenue en appliquant l'estimateur MLE au problème suivant : les observables Y_i^* sont ici les estimations $\tau_x^{(i)}$ et le vecteur des paramètres inconnus est $\beta = [\tau_x]^T$:

$$Y^* = \begin{bmatrix} \tau_x^{(1)} & \tau_x^{(2)} & \dots & \tau_x^{(M)} \end{bmatrix}^T = X \beta \quad \text{avec} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}^T \quad (2.86)$$

En supposant que les observables $\tau_x^{(i)}$ sont indépendants et suivent une loi normale, on aboutit à l'expression (Eq.2.85) proposée dans [29].

5.3.2 Influence des covariances sur les écarts-types des estimations

L'expression (Eq.2.86) suppose les estimations $\tau_x^{(i)}$ indépendantes ce qui est une approximation. Les $\tau_x^{(i)}$ sont en effet corrélés puisque les paramètres τ_z et H sont en réalité des variables aléatoires dont les variations se répercutent sur toutes les estimations $\tau_x^{(i)}$. On montre ici qu'en prenant leur covariance en compte, on augmente leur écart-type théorique de manière sensible.

Soit $\gamma = [\tau_z, H]^T$ les paramètres estimés avec l'harmonique $\theta_{0,0}$. Ils sont ensuite utilisés avec chaque harmonique $(m, 0)$ pour estimer $\tau_x^{(i)}$ et $E_{m_i,0}$. γ peut alors être vu comme des paramètres supposés connus puisqu'ils sont maintenant fixes. Par ailleurs, on peut déterminer l'effet du bruit de mesure $e_Y = Y^* - E[Y]$ sur les estimations de $\tau_x^{(i)}$ et $E_{m_i,0}$ en linéarisant le modèle autour de l'espérance $\dot{\beta}$:

$$e_{\dot{\beta}}^{(i)} = \beta^{(i)} - \dot{\beta} = \begin{bmatrix} e_{\tau_x^{(i)}} \\ e_{E_{m_i,0}} \end{bmatrix} = \left[\overbrace{X_i^T W_i X_i}^{F_i} \right]^{-1} X_i^T W_i e_Y \quad \text{avec} \quad X_i = \frac{\partial \theta_{m_i,0}(\dot{\beta})}{\partial \beta} \quad (2.87)$$

$X_i = X_i(\dot{\beta})$ est la matrice des sensibilités de l'harmonique d'indice $(m_i, 0)$, évaluée à la solution exacte $\dot{\beta}$. F_i est la matrice d'information et W_i la matrice de variance-covariance des observables de l'harmonique $\theta_{m_i,0}^*(t)$. Le seul paramètre qui nous intéresse étant $\tau_x^{(i)}$, on introduit la matrice de sélection $S = [1, 0]$ qui permet d'isoler l'erreur $e_{\tau_x^{(i)}}$ sur le paramètre $\tau_x^{(i)}$ de l'erreur $e_{E_{m_i,0}}$ sur le paramètre $E_{m_i,0}$ qui lui est associé. On peut alors exprimer l'erreur aléatoire sur $\tau_x^{(i)}$:

$$e_{\tau_x^{(i)}} = \tau_x^{(i)} - E[\tau_x^{(i)}] = S F_i^{-1} X_i^T W_i e_Y \quad (2.88)$$

Soit $e_{m_i,0}$ l'erreur aléatoire sur $\theta_{m_i,0}$, l'harmonique à partir de laquelle est estimé $\tau_x^{(i)}$. En ajoutant la perturbation due aux paramètres supposés connus γ , on a :

$$e_{\tau_x^{(i)}} = \tau_x^{(i)} - E[\tau_x^{(i)}] = S F_i^{-1} X_i^T W_i \left(e_{m_i,0}^* - X_{\gamma,i} e_{\gamma} \right) \quad (2.89)$$

La covariance des observables $\tau_x^{(i)}$ et $\tau_x^{(j)}$ (avec $i \neq j$) est donnée par l'expression suivante :

$$\text{cov}(\tau_x^{(i)}, \tau_x^{(j)}) = S F_i^{-1} X_i^T W_i X_{\gamma,i} \text{cov}(e_{\gamma}) X_{\gamma,j}^T W_j X_j F_j^{-1} S^T \quad (2.90)$$

Quant à $\text{cov}(e_{\gamma})$, il s'agit de la matrice de variance-covariance obtenue en estimant les paramètres τ_z et H avec l'harmonique $\theta_{0,0}$.

Exemple : comparaison des écarts-types avec et sans les corrélations

En se limitant à 4 harmoniques paires $(m, 0)$ avec $m \in \{2, 4, 6, 8\}$, calculons la matrice de corrélation en face avant et en face arrière à partir de l'expression ci-dessus de la covariance. Les paramètres utilisés sont spécifiés dans le tableau (Tab.A.1 p276) :

$$\text{corr}(\tau_x) = \underbrace{\begin{bmatrix} \tau_x^{(1)} & \tau_x^{(2)} & \tau_x^{(3)} & \tau_x^{(4)} \\ 1 & 0,43 & 0,23 & 0,12 \\ & 1 & 0,24 & 0,14 \\ & & 1 & 0,14 \\ \text{sym} & & & 1 \end{bmatrix}}_{\text{Face avant}} \quad \text{et} \quad \underbrace{\begin{bmatrix} \tau_x^{(1)} & \tau_x^{(2)} & \tau_x^{(3)} & \tau_x^{(4)} \\ 1 & 0,43 & 0,21 & 0,71 \\ & 1 & 0,20 & 0,83 \\ & & 1 & 0,70 \\ \text{sym} & & & 1 \end{bmatrix}}_{\text{Face arrière}}$$

Ces deux matrices montrent que les observables $\tau_x^{(i)}$ sont plus corrélés en face arrière. En face avant, le fait d'augmenter la largeur du mur tend à diminuer ces corrélations. Avec un matériau conducteur (Voir Tab.A.1 p276), les résultats ne sont pas présentés, mais les corrélations sont beaucoup plus faibles. On peut expliquer cela en remarquant qu'avec un matériau conducteur, seuls les premiers instants sont sensibles à τ_z .

Si on prend en compte les covariances pour calculer l'estimation finale τ_x , l'écart-type théorique σ_{τ_x} est augmenté de 36 % pour un matériau isolant excité en face avant et de 31 % s'il est excité en face arrière (Tab.2.4). Pour un matériau conducteur, l'augmentation est respectivement de 28 % et 21 %. Elle est plus élevée alors que les corrélations sont plus faibles.

5.3.3 Synthèse

L'estimateur EDSH est plus simple d'utilisation que les estimateurs ERH et ENH puisqu'il n'y a aucun paramètre additionnel à définir excepté les harmoniques à exploiter mais cela est commun à tous les estimateurs. Par ailleurs, le fait d'exploiter les harmoniques une par une pour en extraire à chaque fois une estimation différente de τ_x et τ_y est intéressante puisque cela permet de déceler les harmoniques aberrantes pour éventuellement les rejeter. En effet, il semblerait que malgré l'utilisation de caméras thermiques modernes, on ne puisse éviter l'examen attentif des mesures [29].

σ_{τ_x}	Sans covariance	Avec covariance
Isolant face-avant	1, 15.10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹ (0, 58 %)	1, 58.10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹ (0, 79 %)
Isolant face-arrière	3, 72.10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹ (1, 86 %)	4, 88.10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹ (2, 44 %)
Conducteur face-avant	1, 91.10 ⁻⁵ m ² s ⁻¹ (0, 95 %)	2, 43.10 ⁻⁵ m ² s ⁻¹ (1, 22 %)
Conducteur face-arrière	2, 72.10 ⁻⁵ m ² s ⁻¹ (1, 36 %)	3, 30.10 ⁻⁵ m ² s ⁻¹ (1, 65 %)

Tableau 2.4 – Influence de la prise en compte des covariances sur l'écart-type de τ_x . Les valeurs entres parenthèses correspondent à l'écart-type relatif σ_{τ_x}/τ_x .

5.4 Estimation directe et simultanée de tous les paramètres (ED)

L'estimateur ED a des similarités avec l'estimateur EDSH. L'amélioration consiste en quelques modifications qui vont permettre de diminuer l'écart-type théorique. Tout d'abord, tous les paramètres β sont estimés simultanément, en une seule étape :

$$\beta = [\tau_x, \tau_y, \tau_z, H, E_{m,n}, \dots]^T \quad (2.91)$$

Pour cela, on applique l'estimateur MLE directement aux harmoniques $\theta_{m,n}(t)$ (Eq.2.36 p95) sans transformation intermédiaire, comme c'était le cas pour les estimateurs ERH et ENH. La seconde modification porte sur les harmoniques exploitées. Au lieu de se contenter des harmoniques $(m, 0)$ et $(0, n)$, on les exploite toutes. On montre toutefois qu'il n'est pas nécessaire de chercher à utiliser les hautes fréquences ($m, n \geq 8$) car l'information additionnelle apportée par ces harmoniques est négligeable. Du fait du type d'excitation thermique utilisé, les coefficients $E_{m,n}$ sont plus faibles aux hautes fréquences³⁵ et la décroissance de ces harmoniques est plus rapide.

5.4.1 L'estimateur MLE sur les harmoniques

Soit $y_h(\tau_z, H, z, t)$ la solution du problème monodimensionnel de conduction instationnaire dans un mur d'épaisseur finie avec pertes latérales. Les harmoniques sont alors données par l'expression suivante (Eq.2.36 p95) rappelée ci-dessous :

$$\theta_{m,n}(z, t) = E_{m,n} \underbrace{\left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right]}_{y_h(\tau_z, H, z, t)} e^{-\left(\tau_x m^2 + \tau_y n^2\right) \pi^2 t}$$

La méthode adoptée ici pour estimer les paramètres β est d'utiliser directement cette expression. Soit n_H le nombre d'harmoniques exploitées et (m_i, n_i) les indices de l'harmonique i avec $i \in [1; n_H]$. En rassemblant les harmoniques correspondant au même instant t_k , on peut écrire

35. On pourrait utiliser un spot laser plus petit pour s'approcher d'une impulsion localisée, mais on risque alors de détériorer le matériau très localement.

les sorties du modèle Y de la façon suivante :

$$Y = \begin{bmatrix} \theta_{m_1, n_1}(t_1) \\ \theta_{m_2, n_2}(t_1) \\ \theta_{m_3, n_3}(t_1) \\ \vdots \\ \theta_{m_H, n_H}(t_1) \\ \vdots \\ \theta_{m_i, n_i}(t_k) \\ \vdots \\ \theta_{m_H, n_H}(t_{n_t}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_h(\tau_z, H, t_1) \times E_{m_1, n_1} \exp\left(-(\tau_x m_1^2 + \tau_y n_1^2) t_1\right) \\ y_h(\tau_z, H, t_1) \times E_{m_2, n_2} \exp\left(-(\tau_x m_2^2 + \tau_y n_2^2) t_1\right) \\ y_h(\tau_z, H, t_1) \times E_{m_3, n_3} \exp\left(-(\tau_x m_3^2 + \tau_y n_3^2) t_1\right) \\ \vdots \\ y_h(\tau_z, H, t_1) \times E_{m_H, n_H} \exp\left(-(\tau_x m_H^2 + \tau_y n_H^2) t_1\right) \\ \vdots \\ y_h(\tau_z, H, t_k) \times E_{m_i, n_i} \exp\left(-(\tau_x m_i^2 + \tau_y n_i^2) t_k\right) \\ \vdots \\ y_h(\tau_z, H, t_{n_t}) \times E_{m_H, n_H} \exp\left(-(\tau_x m_H^2 t + \tau_y n_H^2) t_{n_t}\right) \end{bmatrix} \quad (2.92)$$

Les n_H premières lignes de Y sont des observables calculés à l'instant t_1 , les n_H suivantes à l'instant t_2 , etc. Pour alléger l'écriture, le paramètre z n'est plus affiché.

5.4.2 La matrice de variance-covariance des observables

La matrice de variance-covariance $\text{cov}(Y^*)$ des observables est diagonale car tous les observables sont indépendants. Ses coefficients diagonaux sont donnés par l'expression (Eq.2.37 p96).

5.4.3 Concentration de l'information dans les basses fréquences

Un des intérêts de travailler dans la base de Fourier est de modifier la représentation des champs de température et de concentrer l'information des diffusivités thermiques dans les basses fréquences des images thermiques. Le problème qui se pose pour l'estimation, est de définir le nombre d'harmoniques à exploiter. Cette question se pose pour tous les estimateurs précédents.

Pour évaluer le nombre d'harmoniques, on peut définir une mesure de l'information contenue par chacune d'elles. Une définition et une interprétation de l'information³⁶ a été proposée par Fisher [82] mais dans le cas multidimensionnel, l'information se présente sous la forme d'une matrice, dite de « Fisher » $F = X^T W X$. Aussi, on utilise ici la trace pour agréger l'information dans un scalaire tout en conservant la propriété d'additivité qui signifie que l'information obtenue avec deux harmoniques et la somme de l'information de chacune d'elles : la trace d'une somme de matrices est en effet la somme des traces. Cependant, il faut veiller à ce que les coefficients diagonaux de F aient la même unité pour pouvoir être sommés, aussi on utilise la matrice des sensibilités réduites S pour définir F et non la matrice des sensibilités X .

36. Voir aussi la divergence de Kullback-Leibler [80, 81] et l'information de Shannon

La figure Fig.2.19 montre l'évolution de la trace de la matrice d'information³⁷ réduite et adimensionnée, définie par :

$$\text{trace}(F_{m,n}) = \frac{\sigma_m^2}{T_{lim}^2} \frac{1}{N_x N_y} \text{trace}(S_{m,n}^T W_{m,n} S_{m,n}) \quad (2.93)$$

$$\text{Avec} \quad S_{m,n} = X_{m,n} \text{diag}(\beta) \quad \text{et} \quad \beta = [\tau_x, \tau_y, \tau_z, H, E_{m,n}]^T$$

La matrice $X_{m,n} = \frac{\partial \theta_{m,n}(t)}{\partial \beta}$ est composée des lignes de la matrice des sensibilités X qui correspondent à la fréquence (m, n) . Quant à $W_{m,n}$, il s'agit de la matrice de variance-covariance des observables correspondants.

Ces deux figures montrent que l'évolution de la trace est assez différente en face arrière et en face avant. Tout d'abord, la valeur numérique de la trace est naturellement beaucoup plus élevée en face avant, puisque les harmoniques ont une amplitude plus importante. Par ailleurs, la décroissance de la trace se fait moins rapidement en face avant qu'en face arrière, ce qui signifie que les sensibilités des « hautes » fréquences aux paramètres ont une amplitude supérieure en face avant. On constate enfin sur ces deux exemples, que l'harmonique la « plus informative » est l'harmonique $\theta_{2,2}$ ce qui n'est pas étonnant puisqu'elle porte de l'information sur l'ensemble des paramètres contrairement à $\theta_{0,0}$ par exemple, qui a une sensibilité nulle à τ_x et τ_y .

Pour déterminer le nombre d'harmoniques à utiliser pour l'estimation, on étudie l'évolution de la trace et du nombre de conditionnement (§5.1.3 p54) de la matrice d'information en fonction du nombre d'harmoniques utilisées (Fig.2.20). Ainsi, en prenant les $n_H = 9$ premières harmoniques paires $((m, n) \in \{0, 2, 4\} \times \{0, 2, 4\})$, la trace de la matrice d'information vaut 2.10^4 en face avant et 2.10^3 en face arrière³⁸. Ces valeurs peuvent aussi être retrouvées en sommant les différentes « barres » de la figure (Fig.2.19). Avec les 25 premières, la trace vaut respectivement 3.10^4 et $2,5.10^3$. L'évolution de la trace ne fournit qu'une information qualitative mais permet d'apprécier la convergence relativement rapide de celle-ci avec le nombre d'harmoniques.

Concernant le nombre de conditionnement, il diminue rapidement dans un premier temps, avant de croître très légèrement pour finalement « exploser » pour $n_H = 64$. Ce comportement est probablement lié au fait que les harmoniques correspondantes sont de hautes fréquences et leur paramètre $E_{m,n}$ ne peut pas être estimé correctement avec la fréquence d'acquisition utilisée. Mais cela n'a aucune conséquence sur les propriétés thermophysiques τ_x (ou τ_y) et τ_z : l'écart-type relatif décroît de façon monotone.

37. La matrice d'information a été définie au chapitre 1 (Remarque. p20) et est un peu plus générale que la matrice de Fisher.

38. Les paramètres de l'expérience numérique sont rappelés dans la légende de la figure (Fig.2.19)

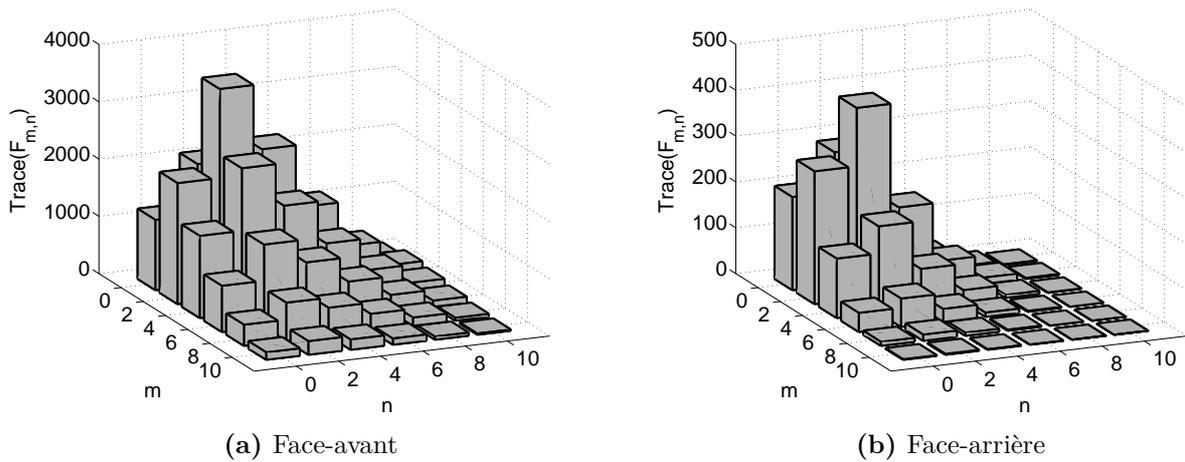


Figure 2.19 – Evolution de la trace de la matrice d'information pour les 25 premières harmoniques paires dans le cas d'une méthode flash face-avant et face-arrière. Les paramètres utilisés pour générer ces graphiques sont ceux spécifiés dans la tableau Tab.A.1 p276. Pour rappel, il s'agit d'une excitation impulsionnelle de forme cubique et de diamètre $l_x/4$ qui dépose une énergie d'1 J sur l'échantillon isolant de dimension $l_x = l_y = 5cm$.

L'évolution des écarts-types théoriques montre aussi qu'il serait dommage d'exploiter uniquement le champ moyen pour estimer τ_z . On constate en effet, que l'estimation s'améliore de façon significative avec 4 et 9 harmoniques. Cependant, l'incertitude sur τ_z en face avant, reste supérieure à ce que l'on peut obtenir avec une méthode flash arrière. Quant à τ_x , l'effet filtre passe-bas du matériau atténue fortement les harmoniques si bien que l'information disponible en face arrière ne permet pas d'estimer τ_x et τ_y aussi bien qu'en face avant.

En conclusion, avec le matériau isolant (Tab.A.1 p276), utiliser les 16 premières harmoniques paires est recommandé. Le gain apporté par les harmoniques supérieures est marginal. L'étude menée ici est purement numérique et les écarts-types théoriques obtenus sont souvent surestimés. Il ne faudrait pas croire que l'on puisse estimer τ_x avec un écart-type de 0,37% en face avant (ou beaucoup moins avec un écart-type σ_m plus faible et avec une meilleure caméra) en utilisant les 64 premières harmoniques puisque le bruit de mesure n'est pas la seule source d'incertitude.

5.4.4 Correction de synchronisation et d'offset

Lors de la présentation du modèle monodimensionnel avec pertes latérales (§2.6.3 p81), on a montré l'intérêt d'introduire t_0 et C dans les paramètres inconnus β (respectivement l'erreur de synchronisation et l'erreur d'offset). Les mêmes modifications peuvent être effectuées sur le modèle tridimensionnel. Cela nécessite ici d'introduire un paramètre C par harmonique, noté $C_{m,n}$, puisque chacune d'elle peut potentiellement être biaisée malgré la soustraction de fond

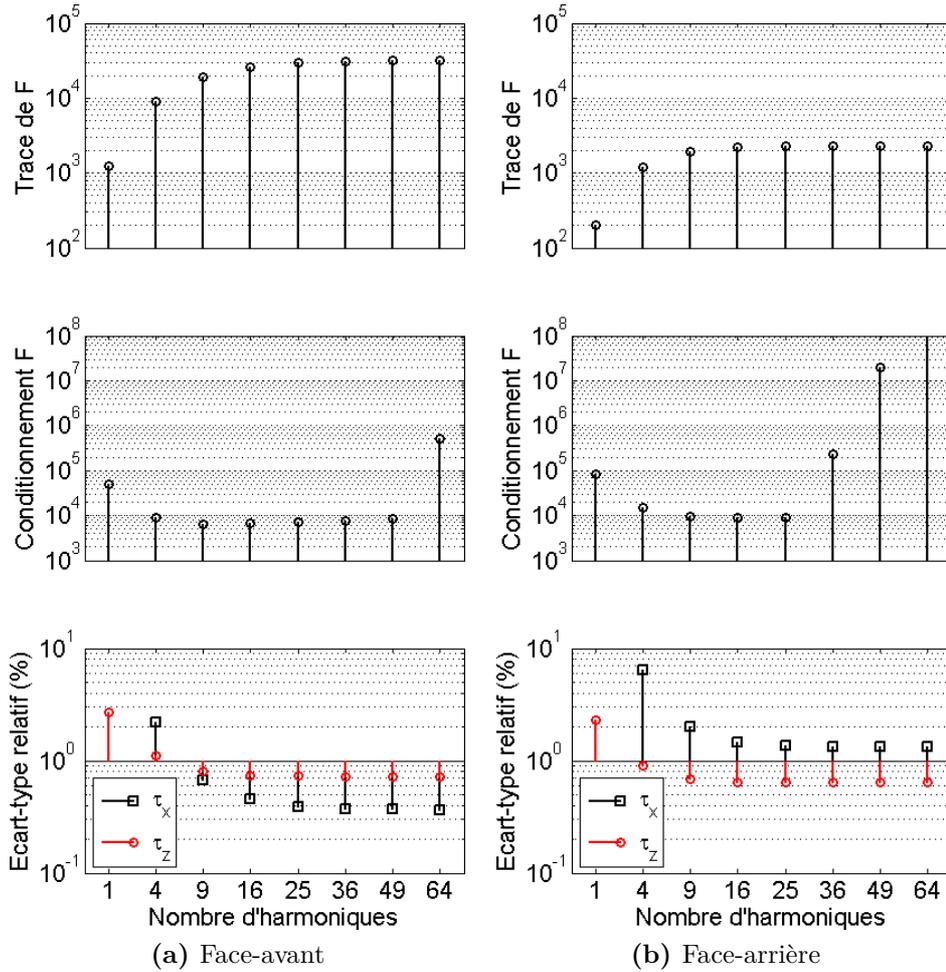


Figure 2.20 – Evolution de la trace, du conditionnement et de l'écart-type sur τ_x et τ_y en fonction du nombre d'harmoniques exploitées.

systematique que l'on réalise en pratique. Le modèle utilisé est donc le suivant :

$$\theta_{m,n}(z, t) = C_{m,n} + E_{m,n} y_h(\tau_z, H, z, t, t_0) e^{-\left(\tau_x m^2 + \tau_y n^2\right) \pi^2 (t-t_0)} \quad (2.94)$$

L'information a priori que l'on se donne sur les paramètres $C_{m,n}$ et t_0 est :

$$t_0 = 0 \text{ s} \quad \text{avec} \quad \sigma = 0,1 \text{ s} \quad \text{et} \quad C_{m,n} = 0^\circ\text{C} \quad \text{avec} \quad \sigma_{C_{m,n}} = \sigma_{m,n} [^\circ\text{C}]$$

Le tableau (Tab.2.5) présente les écarts-types théoriques obtenus avec ce modèle avec une méthode flash face-avant et face-arrière, ainsi qu'avec l'utilisation, ou non, de l'information a priori. Les paramètres de cette expérience numérique sont identiques à ceux de la section précédente (voir légende Fig.2.19). Les estimations sont réalisées avec l'estimateur MAP (§2.6 p28) puisque l'estimateur MLE ne permet pas d'intégrer de l'information a priori. La première colonne « Modèle initial » correspond au modèle précédent sans correction. τ_x et τ_y sont visiblement mieux estimés en face avant, mais τ_z l'est sensiblement mieux en face arrière. On retrouve

ainsi le même résultat que dans le cas monodimensionnel (Tab.2.2 p83).

En estimant le paramètre de synchronisation t_0 et l'offset $C_{m,n}$, cette tendance s'inverse comme le montrent les deux dernières colonnes du tableau. τ_z est mieux estimé en face avant, mais τ_x et τ_y le sont moins bien. L'augmentation est significative pour τ_z en face arrière puisque son écart-type est plus que doublé (de 0,64 % à 1,73 %). Dans le cas monodimensionnel, cette augmentation de l'écart-type en face arrière est due au paramètre t_0 (Tab.2.2 p83). Quant à τ_x et τ_y , leur écart-type est multiplié par 4 en face avant, et le fait d'intégrer l'information a priori n'apporte rien.

Paramètre		Modèle initial		Avec $t_0, C_{m,n}$		Avec $t_0, C_{m,n}$ + a priori	
		Face avant	Face arrière	Face avant	Face arrière	Face avant	Face arrière
σ_{τ_x}	%	0,45	1,44	1,87	1,65	1,79	1,63
σ_{τ_y}	%	0,45	1,44	1,87	1,65	1,79	1,63
σ_{τ_z}	%	0,74	0,64	0,96	2,13	0,95	1,73
σ_H	%	4,85	19,0	16,5	30,5	15,6	26,8
σ_{t_0}	s			$3,10 \cdot 10^{-4}$	$6,29 \cdot 10^{-2}$	$3,10 \cdot 10^{-4}$	$6,29 \cdot 10^{-2}$

Tableau 2.5 – Ecart-types théoriques des estimations avec correction de synchronisation t_0 et correction d'offset $C_{m,n}$.

5.4.5 Correction de la dérive temporelle

On peut aussi intégrer un terme de correction de dérive temporelle linéaire. Par exemple, on remarque sur la figure (Fig.3.8 p171) l'existence d'une légère dérive de l'harmonique $\theta_{1,0}$ et dans une moindre mesure de l'harmonique $\theta_{0,0}$ (du fait de l'échelle). On peut intégrer cette dérive au modèle sous la forme d'un coefficient $D_{m,n}$:

$$\theta_{m,n}(z, t) = C_{m,n} + D_{m,n} t + E_{m,n} y_h(\tau_z, H, z, t, t_0) e^{-\left(\tau_x m^2 + \tau_y n^2\right) \pi^2 (t-t_0)} \quad (2.95)$$

En supposant que la dérive $D_{m,n} t$ n'excède pas $10 \sigma_{m,n}$ pour $t = 30 s$, l'information a priori sur $D_{m,n}$ peut s'écrire :

$$D_{m,n} = 0 \text{ } ^\circ\text{C s}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{D_{m,n}} = \frac{5}{30} \sigma_{m,n} \text{ [} ^\circ\text{C s}^{-1}\text{]} \quad (2.96)$$

Le fait d'ajouter d'autres paramètres à estimer augmente les écarts-types des estimations (Tab.2.6). σ_{τ_x} a été multiplié par plus de 10 en face avant et par 3 en face arrière. Quant à σ_{τ_z} , il a augmenté d'un facteur 4 en face avant et d'un facteur 7 en face arrière. L'intérêt d'utiliser l'information a priori apparaît clairement puisque cela permet de réduire par 2 les écarts-types en face avant. Cependant, par rapport au cas initial, les écarts-types restent significativement différents. En face arrière, le gain apporté par l'information a priori est beaucoup

plus faible. L'écart-type sur τ_x vaut 4,50 %, ce qui est 3 fois plus que le modèle initial. Cependant, le modèle avec correction de dérive est peut être plus proche de la réalité que le modèle initial qui surestime généralement la qualité de l'estimation.

Paramètre		Modèle initial		Avec $D_{m,n}$		Avec $D_{m,n}$ + a priori	
		F. avant	F. arrière	F. avant	F. arrière	F. avant	F. arrière
σ_{τ_x}	%	0,45	1,44	6,03	4,72	3,80	4,50
σ_{τ_y}	%	0,45	1,44	6,03	4,72	3,80	4,50
σ_{τ_z}	%	0,74	0,64	2,99	4,51	2,69	2,91
σ_H	%	4,85	19,0	44,3	202	31,6	139
σ_{t_0}	s			$4,35 \cdot 10^{-4}$	$1,09 \cdot 10^{-1}$	$3,96 \cdot 10^{-4}$	$6,99 \cdot 10^{-2}$

Tableau 2.6 – Ecarts-types théoriques des estimations avec correction de synchronisation t_0 , correction d'offset $C_{m,n}$ et correction de dérive temporelle $D_{m,n}$. La colonne centrale « Avec $D_{m,n}$ » n'utilise aucune information a priori, que ce soit sur t_0 , $C_{m,n}$ ou $D_{m,n}$.

Remarque sur la dérive

Pour être plus précis sur l'écart-type $\sigma_{D_{m,n}}$, il faudrait étudier la dérive de la caméra sur des relevés expérimentaux, harmonique par harmonique, en mesurant statistiquement la dérive sur une longue période de temps puis de l'analyser avec des fenêtres temporelles similaires à la durée de l'expérience. En pratique, il peut exister une dérive significative des basses fréquences, mais les fréquences (m,n) avec m et n supérieurs à 2 sont généralement assez stables.

5.4.6 Quelle courbe de calibration ?

Pour convertir les niveaux numériques de l'image thermique en champ de température, il faut impérativement une loi d'étalonnage (§4.6 p110). Cependant, on peut parfois linéariser la loi d'étalonnage $T(V)$ autour de la température ambiante T_0 (Fig.2.15 p113). La relation « niveau numérique-température » est dans ce cas une relation linéaire (Eq.2.56 p112) :

$$\Delta T(x, y) = \frac{\partial T}{\partial V}(T_0) \Delta V(x, y) \quad (2.97)$$

Cette simplification permet de faire complètement abstraction de la loi d'étalonnage puisque le coefficient de proportionnalité $\frac{\partial T}{\partial V}(T_0)$ est estimé indirectement avec les paramètres $E_{m,n}$. Elle s'avère donc intéressante si le biais qu'elle engendre reste acceptable. Le biais, pour des conditions expérimentales caractérisées ici par T_{lim} et l'instant final de mesure t_f , est obtenu en appliquant l'estimateur ED sur un champ de luminance calculé en appliquant une loi d'étalonnage (Eq.2.52 p112) sur un champ de température simulée. La figure (Fig.2.21) montre le biais d'estimation pour les deux paramètres τ_x et τ_z dans le cas d'une méthode flash face-avant et face-arrière sur le matériau isolant (Tab.A.1 p276).

En face avant (Fig.2.21.a et b), le biais sur τ_x s'approche de 0 lorsque l'on diminue T_{lim} . Moins d'énergie signifie des températures plus faibles et donc une approximation linéaire plus fidèle à la réalité. Cependant, ce n'est pas le cas pour τ_z puisque même avec de faibles valeurs de T_{lim} , le biais reste de l'ordre de 50 % ce qui est significatif. La cause de ce phénomène est le poids des observables aux temps courts. L'amplitude des harmoniques est en effet relativement importante aux temps courts si bien que l'algorithme adapte τ_z pour « coller » à ces observables. L'écart quadratique augmente en effet rapidement avec des résidus importants aux temps courts. La parade est de rejeter par exemple les 40 premiers instants et commencer l'exploitation unique pour des instants $t > 4 s$. Dans ces conditions le biais sur τ_z n'est plus que 3,6 %. Le prix à payer est un doublement de l'écart-type théorique (σ_{τ_x} passe de 0,45 % à 0,83 %).

En face arrière (Fig.2.21.c et d), l'hypothèse de linéarité a un impact plus faible. Le biais pour les deux paramètres reste inférieur à 2 % dans la majorité des cas. Il semblerait ainsi que l'hypothèse soit raisonnable en face arrière. A titre indicatif, avec la forme de l'excitation thermique utilisée et les matériaux utilisés, la température maximale en face arrière est atteinte pour $t = 11 s$ et vaut $0,7^\circ C$ pour $T_{lim} = 1^\circ C$. Pour $T_{lim} = 5^\circ C$, la température en face arrière n'atteint donc que $3,5^\circ C$ ce qui semble compatible avec la linéarisation (voir Fig.2.15 p113). En face avant, la température décroît de façon monotone avec t et vaut par exemple $30^\circ C$ pour $t = 0,1 s$, $8,6^\circ C$ pour $t = 1 s$ et $1,24^\circ C$ pour $t = 10 s$.

5.4.7 Correction de la courbe de calibration

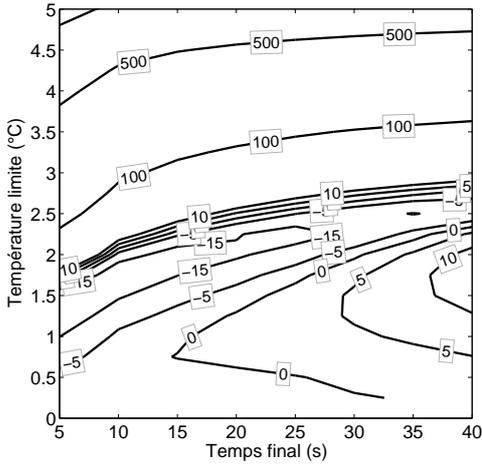
L'hypothèse de linéarité « niveau numérique-température » n'est pas possible en face avant à moins de rejeter les premières secondes d'acquisition ce qui dégrade la qualité de l'estimation. Toutefois, le fait qu'une loi d'étalonnage linéaire soit parfois valable signifie que les paramètres R_{cal} et B_{cal} de la loi d'étalonnage (Eq.2.52 p112) n'ont qu'un effet très marginal sur l'estimation. En effet, il est probable qu'utiliser des approximations de R_{cal} et B_{cal} , même grossières, soient toujours mieux qu'une loi d'étalonnage linéaire.

Soit $\beta_{cal} = [R_{cal} \ B_{cal}]^T$ les paramètres de la loi d'étalonnage. L'expression des observables est ici un peu plus complexe puisque l'on peut considérer qu'il y a deux modèles imbriqués :

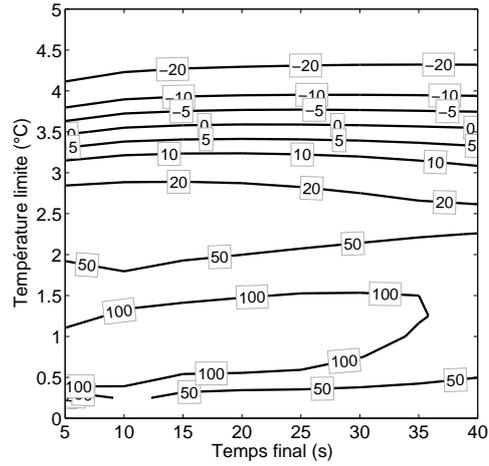
- un premier utilisé pour calculer les harmoniques et qui fait intervenir les paramètres de calibration β_{cal} .
- un second pour la caractérisation thermophysique

Soit V les champs de niveau numérique fournis par la caméra infrarouge. Les observables Y^* , ici les harmoniques $\theta_{m,n}(t)$, dépendent de V et des paramètres de calibration β_{cal} :

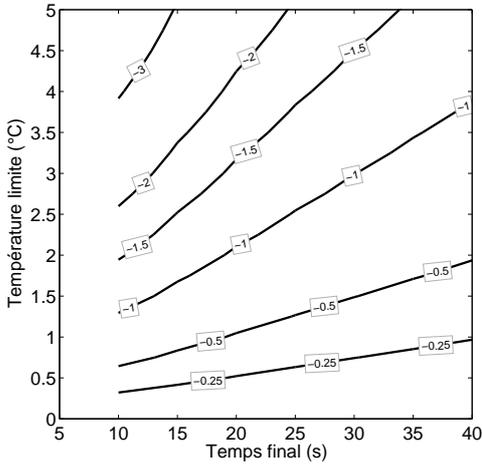
$$Y^* = Y^*(V, \beta_{cal}) \tag{2.98}$$



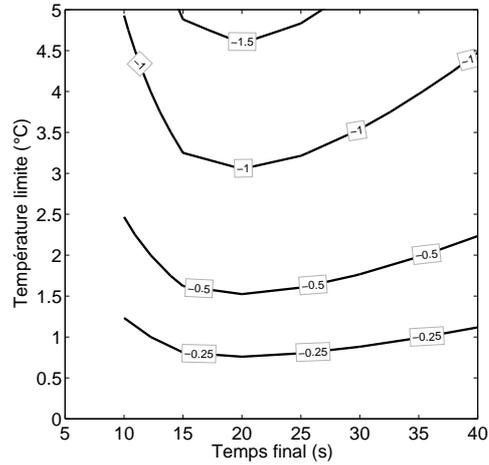
(a) Face avant : Biais sur τ_x



(b) Face avant : Biais sur τ_z



(c) Face arrière : Biais sur τ_x



(d) Face arrière : Biais sur τ_z

Figure 2.21 – Biais sur τ_x et τ_z générés par l'approximation linéaire de la loi d'étalonnage en fonction de T_{lim} et de l'instant final t_f de l'expérience. Ces résultats ont été obtenus sur l'échantillon isolant (Tab.A.1 p276).

D'une certaine manière, l'expression ci-dessus permet de calculer les observables Y^* « côté expérience ». Les sorties Y « côté modèle » sont données par l'expression des harmoniques (Eq.2.36 p95). En cherchant à égaliser les deux, on obtient finalement :

$$Y^*(V, \beta_{cal}) = Y \left(\underbrace{\tau_x, \tau_y, \tau_z, H, E_{m,n} \dots}_{\beta} [C_{m,n} \dots, D_{m,n} \dots] \right) \quad (2.99)$$

Les crochets indiquent ici des paramètres optionnels qui peuvent apparaître suivant les perturbations que l'on souhaite prendre en compte.

Pour le moment, les paramètres β_{cal} sont supposés connus et ne sont donc pas estimés

simultanément aux autres paramètres β . On peut alors s'intéresser au biais sur les estimations $\hat{\beta}$ généré par une erreur $\delta\beta_{cal}$ sur β_{cal} . Ce biais dépend de l'estimateur utilisé. Dans le cas de l'estimateur ED, observables et harmoniques sont équivalents. En linéarisant le modèle autour de la solution, on peut exprimer le biais $\delta\hat{\beta}$ de la façon suivante (Eq.1.83 p47) :

$$\delta\hat{\beta} = \hat{\beta}(\beta_{cal} + \delta\beta_{cal}) - \hat{\beta}(\beta_{cal}) = \left[X_{\beta}^T W X_{\beta} \right]^{-1} X_{\beta}^T W X_{cal} \delta\beta_{cal} \quad (2.100)$$

Avec X_{cal} , la matrice des sensibilités des observables Y^* aux paramètres β_{cal} . Il s'agit de la sensibilité des observables et non des sorties du modèle ce qui explique l'absence d'un signe moins dans l'expression ci-dessus : pour la résolution du problème, une perturbation sur les observables Y^* est équivalente à une perturbation opposée sur les sorties Y . La matrice X_{cal} s'exprime en dérivant l'expression de $\theta_{m,n}^*(t)$. On peut calculer les harmoniques $\theta_{m,n}(t)$ avec des opérations matricielles d'au moins deux manières :

$$\Theta_1 = \begin{bmatrix} \theta_{m_1, n_1} & \cdots & \theta_{m_1, n_N} \\ \vdots & \theta_{m_i, n_j} & \vdots \\ \theta_{m_M, n_1} & \cdots & \theta_{m_M, n_N} \end{bmatrix} = \frac{1}{N_x N_y} A T B \quad (2.101)$$

$$\Theta_2 = \left[\theta_{m_1, n_1} \quad \theta_{m_2, n_1} \quad \theta_{m_3, n_1} \quad \cdots \quad \theta_{m_M, n_N} \right]^T = \Pi T \quad (2.102)$$

Ces deux expressions du calcul de $\theta_{m,n}(t)$ sont détaillées en annexe (Annexe 3.3.3 p295). La plus pratique est ici « la première formulation ». En la dérivant par rapport à R et B , on a :

$$\frac{\partial \theta}{\partial R}(t) = \frac{1}{N_x N_y} A \frac{\partial \Delta T}{\partial R}(t) B = \frac{1}{N_x N_y} A \left[\frac{\Delta T + 2T_0}{R B} \otimes \Delta T \right] B \quad (2.103)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial B}(t) = \frac{1}{N_x N_y} A \frac{\partial \Delta T}{\partial B}(t) B = \frac{1}{N_x N_y} A \left[\frac{\Delta T(t)}{B_{cal}} \right] B \quad (2.104)$$

$$\text{Avec} \begin{cases} \Delta T(t) &= -\frac{B}{\ln\left(\frac{V(t)}{R}\right)} + \frac{B}{\ln\left(\frac{V_0}{R}\right)} \\ \frac{\partial \Delta T}{\partial R} &= -\frac{B}{\ln\left(\frac{V(t)}{R}\right)^2 R} + \frac{B}{\ln\left(\frac{V_0}{R}\right)^2 R} = -\frac{\Delta T \otimes (\Delta T + 2T_0)}{R B} \\ \frac{\partial \Delta T}{\partial B} &= -\frac{1}{\ln\left(\frac{V(t)}{R}\right)} + \frac{1}{\ln\left(\frac{V_0}{R}\right)} = \frac{\Delta T}{B} \end{cases}$$

Les matrices A et B permettent de calculer la transformée en cosinus des champs de température. N_x et N_y correspondent au nombre de pixels de l'image thermique. $\Delta T(t)$ correspond au champ de température à l'instant t et est ici vu comme une matrice de dimension $N_x \times N_y$. $V(t)$ et V_0 sont aussi des matrices et correspondent au champ de niveau numérique. V_0 est le champ initial obtenu en moyennant des images avant l'excitation thermique. On utilise ici le même formalisme que celui employé dans le logiciel Matlab : une fonction scalaire appliquée à une matrice consiste à appliquer cette fonction à chaque coefficient de la matrice. Par ailleurs,

Chapitre 2. La méthode flash 3D

la notation ΔT est utilisée à la place de simplement T pour insister sur le fait qu'il s'agit d'une température relative.

On peut aussi écrire le biais de façon normalisée en utilisant les matrices des sensibilités réduites S_β et S_{cal} . On obtient ainsi le biais b_β sur $\hat{\beta}$ en % généré par un écart b_{cal} en % également sur β_{cal} :

$$b_\beta = \underbrace{\left[S_\beta^T W S_\beta \right]^{-1} S_\beta^T W S_{cal}}_Z b_{cal} \quad (2.105)$$

Pour le matériau isolant (Tab.A.1 p276) et avec une méthode flash face-avant, la matrice Z vaut :

$$Z = \begin{bmatrix} 0,00041 & 0 \\ 0,00041 & 0 \\ -0,02147 & 0 \\ -0,20334 & 0 \\ -0,2116 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ -0,2127 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} (\tau_x) \\ (\tau_y) \\ (\tau_z) \\ (H) \\ (E_{0,0}) \\ \vdots \\ (E_{6,6}) \end{matrix} \quad (2.106)$$

La première colonne de Z correspond au paramètre R_{cal} et la seconde au paramètre B_{cal} . La deuxième colonne se distingue avec ses quatre coefficients nuls suivis de 1. Cela signifie que le paramètre B_{cal} n'a aucune influence sur les paramètres τ_x , τ_y , τ_z et H . Par contre, une augmentation de B_{cal} se répercute intégralement sur les paramètres $E_{m,n}$. En effet, le champ de température ΔT est proportionnel au paramètre B_{cal} (Eq.5.4.7), donc l'augmentation de B_{cal} est compensée par une augmentation identique des paramètres $E_{m,n}$. Concernant le paramètre R_{cal} , le biais qu'il génère sur les paramètres τ_x et τ_y est très faible. Une variation de 100 % de R_{cal} biaise l'estimation de τ_x de seulement 0,04 % mais génère une variation de 2 % sur τ_z , soit 50 fois plus que sur τ_x .

Plutôt que de considérer les paramètres β_{cal} comme des paramètres supposés connus et constants pendant l'estimation, on peut laisser l'estimateur les ajuster. Les écarts-types théoriques peuvent être alors calculés en linéarisant le modèle autour de la solution $\dot{\beta}$ et $\dot{\beta}_{cal}$ s'écrit :

$$Y(\beta, \beta_{cal}) = Y(\dot{\beta}) + X_\beta (\beta - \dot{\beta}) - X_{cal} (\beta_{cal} - \dot{\beta}_{cal}) \quad (2.107)$$

Avec $\beta_{tot} = [\beta_{cal}; \beta]$ le vecteur de paramètres obtenu en réunissant les deux vecteurs β et β_{cal} , et X_{tot} la matrice des sensibilités associées. La matrice de variance-covariance $\text{cov}(\beta_{tot})$ s'écrit :

$$\text{cov}(\beta_{tot}) = \left[X_{tot}^T W X_{tot} + Q_{tot} \right]^{-1} \quad (2.108)$$

Pour éviter de garder un paramètre redondant, B_{cal} est ôté de β_{tot} . Quant au paramètre R_{cal} , on introduit l'information a priori suivante à son sujet :

$$R_{cal} = 5.10^5 DL \quad \text{avec} \quad \sigma_{R_{cal}} = 5.10^4 \quad (10\%) \quad (2.109)$$

Les écarts-types théoriques pour cette extension du modèle sont donnés dans le tableau (Tab.2.7). Par rapport au modèle « complet » (avec toutes les corrections précédentes), l'augmentation des écarts-types avec l'estimation supplémentaire de R_{cal} n'est pas perceptible si on utilise l'information a priori sur R_{cal} . L'information sur R_{cal} , disponible dans les observables, est visiblement faible puisque les écarts-types a priori et a posteriori sont identiques (10%). Si on ne prend pas en compte l'information a priori (colonne « Avec β_{cal} »), l'estimation est numériquement possible en face avant mais la dispersion de R_{cal} est importante. En face arrière, le niveau de température est probablement trop faible pour décorréler R_{cal} des autres paramètres. Soit $X_{tot} = U \Omega V^T$ la décomposition SVD de X_{tot} , la dernière ligne de V^T montre que R_{cal} se retrouve corrélé avec H et $E_{m,n}$, ainsi qu'avec certains paramètres $D_{m,n}$ de la dérive temporelle.

A défaut de pouvoir inverser la matrice d'information, on peut calculer sa pseudo-inverse avec une troncature SVD (§5.3.2 p63). On retrouve ainsi les écarts-types corrects des paramètres thermophysiques, mais l'écart-type sur $\sigma_{R_{cal}}$ est fantaisiste. Il correspond à la dispersion de ce paramètre avec « l'estimateur MAP régularisé par troncature SVD » et non véritablement à la connaissance que l'on a sur ce paramètre³⁹.

Paramètre		Modèle complet		Avec β_{cal}		Avec β_{cal} + a priori	
Face		avant	arrière	avant	arrière (SVD)	avant	arrière
σ_{τ_x}	%	3,74	4,32	4,07	(4,32)	3,74	4,32
σ_{τ_y}	%	3,74	4,32	4,07	(4,32)	3,74	4,32
σ_{τ_z}	%	2,60	2,41	2,63	(2,41)	2,60	2,41
σ_H	%	31,0	99,9	52,9	(99,9)	31,0	99,9
σ_{t_0}	s	$3,91.10^{-4}$	$6,68.10^{-2}$	$1,91.10^{-3}$	$(6,68.10^{-2})$	$3,99.10^{-4}$	$6,68.10^{-2}$
$\sigma_{R_{cal}}$	%			238	$(1,16.10^{-2})$	10	10

Tableau 2.7 – Ecart-types théoriques des estimations avec toutes les corrections des sections précédentes (synchronisation, offset, dérive) ainsi que la correction de la loi de calibration. Le terme « modèle complet » correspond au dernier modèle du tableau (Tab.2.6 p140) où toutes les corrections et leur information a priori sont prises en compte. La colonne « Avec β_{cal} » correspond à la prise en compte du paramètre R_{cal} dans l'estimation mais sans fournir d'information a priori sur R_{cal} . L'information a priori pour la synchronisation, offset et dérive est utilisée. Concernant la dernière colonne, toutes les corrections et toute l'information a priori sont présentes.

En conclusion, le fait d'intégrer au problème d'estimation les paramètres de calibration β_{cal} de la caméra infrarouge ne dégrade pas la variance de de l'estimateur.

39. Voir la distinction entre les matrices de covariance $\text{cov}(\hat{\beta}|Y^*)$ (Eq.1.55 p31) et $\text{cov}(\hat{\beta})$ (Eq.1.56 p32)

5.4.8 Intérêts et inconvénients

L'estimateur ED s'appuie directement sur l'expression des harmoniques pour estimer en une seule étape tous les paramètres thermophysiques. La forme spatiale de l'excitation caractérisée par les paramètres $E_{m,n}$ est également estimée dans le processus. Dans le cas du matériau isolant, on a montré que les 16 premières harmoniques paires sont suffisantes pour estimer les différents paramètres en face avant. Quant à la face arrière, les 9 premières harmoniques paires sont suffisantes. Seules les harmoniques paires présentent un intérêt car les harmoniques impaires sont nulles si on a fait en sorte que l'excitation soit centrée par rapport au champ de la caméra. On a aussi montré que pour améliorer la qualité de l'estimation, il est essentiel d'utiliser les harmoniques (m, n) avec $m, n > 0$ et notamment l'harmonique $\theta_{2,2}$ qui contient le plus d'information au sens de la trace de la matrice d'information.

Quatre extensions au modèle ont été proposées dans les deux dernières parties. La première propose de prendre en compte l'erreur de synchronisation entre l'excitation thermique et la caméra infrarouge. La seconde permet de corriger la non-uniformité spatiale résiduelle qui peut exister malgré une compensation par soustraction de fond. La troisième permet au modèle de simuler la dérive temporelle de la mesure. Quant à la dernière, elle intègre la loi d'étalonnage de la caméra dans le problème d'estimation.

Toutes ces extensions consistent à estimer davantage de paramètres⁴⁰ mais la plupart d'entre eux ont des sensibilités relativement bien découplées des paramètres thermophysiques. Par conséquent, ils ne détériorent pas trop le conditionnement du problème, d'autant moins si on utilise l'information a priori disponible sur ces paramètres avec l'estimateur MAP. En ajoutant ces corrections, l'écart-type de τ_x et τ_y a été multiplié par 7 en face avant, 3 en face arrière et l'écart-type de τ_z a été multiplié par 3 en face avant, 4 en face arrière. Les écarts-types sont donc moins optimistes que le modèle théorique de base, mais cette estimation des écarts-types est probablement plus proche des situations que l'on rencontre en pratique.

5.5 Comparaison des méthodes de traitement

Afin de comparer les estimateurs et apprécier leurs différences, les écarts-types théoriques sur chaque paramètre sont calculés en fonction du type de méthode flash (avant ou arrière) dans le cas du matériau isolant (Tab.A.1 p276).

Pour que la comparaison soit équitable, le paramètre de synchronisation t_0 est ajouté aux

40. Avec 16 harmoniques, le problème d'estimation initial présente $n_\beta = 16 + 5$ paramètres à estimer. Avec toutes les corrections, n_β vaut $55 = 18$ paramètres $E_{m,n} + 18$ paramètres $C_{m,n} + 18$ paramètres $D_{m,n} + \tau_x + \tau_y + \tau_z + H + t_0$.

estimateurs EDSH et ED pour l'estimation de τ_x et τ_y puisque les estimateurs ERH et ENH ne sont pas sensibles à ce paramètre. Toutefois, pour ces deux estimateurs, l'estimation de τ_z se fait avec $\theta_{0,0}$, ce qui fait donc intervenir le paramètre t_0 . Son écart-type a priori σ_{t_0} vaut 0,1 s. Quant aux corrections d'offset, aux corrections de dérive et aux corrections de loi d'étalonnage, elles ne peuvent pas être intégrées directement aux estimateurs ERH et ENH. Elles sont donc négligées. Enfin, seuls les écarts-types des paramètres τ_x et τ_z sont présentés : τ_y est égal à τ_x et les autres paramètres ne nous intéressent pas. Concernant l'estimateur EDSH, le paramètre t_0 est estimé lors de la première étape avec τ_z , H et $E_{0,0}$.

Les résultats de la comparaison sont présentés dans le tableau (Tab.2.8). Pour les 3 premiers estimateurs, les écarts-types de τ_z sont identiques puisqu'ils sont estimés de la même façon : avec l'harmonique moyenne $\theta_{0,0}$. Il s'agit des mêmes résultats que ceux obtenus avec la méthode flash 1D classique (Tab.2.2 p83). Sans surprise, l'estimateur ED est le plus performant des estimateurs et notamment en face avant, où on constate un facteur 3 avec les écarts-types de certains estimateurs. L'estimateur ENH en face avant montre de bonnes performances⁴¹ pour τ_x .

Estimateur		Face avant			Face arrière		
		τ_x	τ_z	Nb. param.	τ_x	τ_z	Nb. param.
Matériau isolant							
ERH	%	1, 2	3, 4	$(152 + 4)^{(1)}$	2, 9	2, 4	$(122 + 4)^{(2)}$
ENH	%	0, 57	3, 4	$(17 + 4)^{(3)}$	2, 7	2, 4	$(10 + 4)^{(4)}$
EDSH	%	1, 2	3, 4	$(9 + 4)^{(5)}$	2, 7	2, 4	$(9 + 4)^{(6)}$
ED	%	0, 45	0, 89	$(21)^{(7)}$	1, 4	1, 7	$(21)^{(8)}$

(1) : 152 paramètres = 150 paramètres $C(H, z, t_1, t_2)$ (chaque doublet d'instant) + τ_x et τ_y . Avec $\Delta t = 8$ s. Pour τ_z , 4 paramètres sont estimés : $[\tau_z, E_{0,0}, H, t_0]^T$.

(2) : 122 paramètres = 120 doublet d'instant + τ_x et τ_y . Avec $\Delta t = 14$ s. Idem pour τ_z .

(3) : 17 paramètres = 15 paramètres $C_{m,n} + \tau_x$ et τ_y . Idem pour τ_z .

(4) : 10 paramètres = 8 paramètres $C_{m,n} + \tau_x$ et τ_y . Idem pour τ_z .

(5) : 9 paramètres = 3 paramètres $[\tau_x^{(i)}, E_{m_i, n_i}, t_0]^T$ pour les harmoniques (2, 0) – (4, 0) – (6, 0). Idem pour τ_z .

(6) : Idem.

(7) : 21 paramètres = 16 paramètres $E_{m,n} + [\tau_x, \tau_y, \tau_z, H, t_0]^T$.

(8) : Idem.

Tableau 2.8 – Comparaison des estimateurs présentés dans ce chapitre pour la méthode flash 3D avec correction de synchronisation t_0 . Les écarts-types théoriques en % sont donnés pour les deux paramètres τ_x et τ_y pour une méthode flash face-avant et face-arrière. A titre indicatif, le nombre de paramètres (le nombre de colonnes de la matrice des sensibilités X_β) est également présenté. La notation $(a + b)$ signifie que deux étapes sont nécessaires, une pour estimer τ_z puis une autre pour τ_x .

41. C'est cet estimateur qui a été utilisé durant cette thèse pour la caractérisation des paramètres τ_x et τ_y aussi bien en face avant qu'en face arrière. On aurait sans doute intérêt à le remplacer par l'estimateur ED qui est meilleur dans tous les cas et qui permet d'inclure davantage de correction (offset, dérive, loi d'étalonnage).

6 Dispositif expérimental et application

6.1 L'excitation thermique - le laser CO₂

L'excitation localisée que l'on doit réaliser pour exciter le matériau est assurée par un laser CO₂ [83]. Ce type d'appareil a été choisi en raison de la souplesse d'utilisation qu'il permet lors des essais. Le laser permet en effet de contrôler la puissance et la forme temporelle du faisceau. Le laser utilisé (Fig.2.22.a) est un laser continu, modulable en puissance et en temps. Il est composé essentiellement de deux parties :

La tête laser : Il s'agit du boîtier de droite sur la figure (Fig.2.22.a). D'après Brassard [83], on trouve à l'intérieur une enceinte contenant un mélange de gaz CO_2 , He et N_2 excité de manière électrique par le générateur radiofréquence.

Le générateur RF : Le générateur radiofréquence correspond au boîtier de gauche. Il est relié à la tête laser par un unique câble dans lequel passe le champ électrique venant exciter le gaz.

A cause du rendement relativement médiocre de l'ensemble, une grande partie de l'énergie finit sous forme de chaleur qu'il faut évacuer de la tête laser et du générateur RF. Le refroidissement est assuré par une boucle fermée d'eau glycolée (Fig.2.22.c). Le circuit est lui même refroidi par un cryothermostat (Fig.2.22.b) capable d'extraire une puissance de $2 kW$.

Le terme « continu » n'est pas tout à fait adapté, car ce modèle de laser émet en réalité une série d'impulsions à $24 kHz$. La durée de chaque impulsion dépend du « duty cycle » (en %), c'est à dire le rapport entre la durée minimale des impulsions ($0 \mu s$) et la durée maximale ($40 \mu s$), qui correspond à la période des impulsions. En toute rigueur, ce laser n'est donc pas continu mais émet des impulsions à puissance maximale. Cependant, étant donné le temps de réponse de l'échantillon, tout se passe comme si la puissance moyenne était appliquée de façon continue. En jouant sur le duty-cycle, on peut émettre un faisceau de puissance comprise entre 5 et $130 W$. La commande du duty-cycle se fait en tension. Cependant, la loi *tension-duty cycle* n'est pas linéaire. Un étalonnage a donc été effectué. Quant au contrôle temporel de l'émission, il est réalisé à l'aide de signaux TTL qui viennent moduler l'émission du générateur RF.

Au lieu d'agir directement sur le générateur RF, Coherent propose un contrôleur (Fig.2.22.d) qui offre deux modes de fonctionnement. Le premier est complètement manuel et est assez rudimentaire. Il permet à l'utilisateur de modifier le duty-cycle avec un bouton rotatif. Le deuxième mode de fonctionnement consiste à relier ce boîtier à un ordinateur. Une interface LabView a été développée pour contrôler l'émission du laser (Fig.2.23.a) et assurer la synchronisation avec la caméra infrarouge.

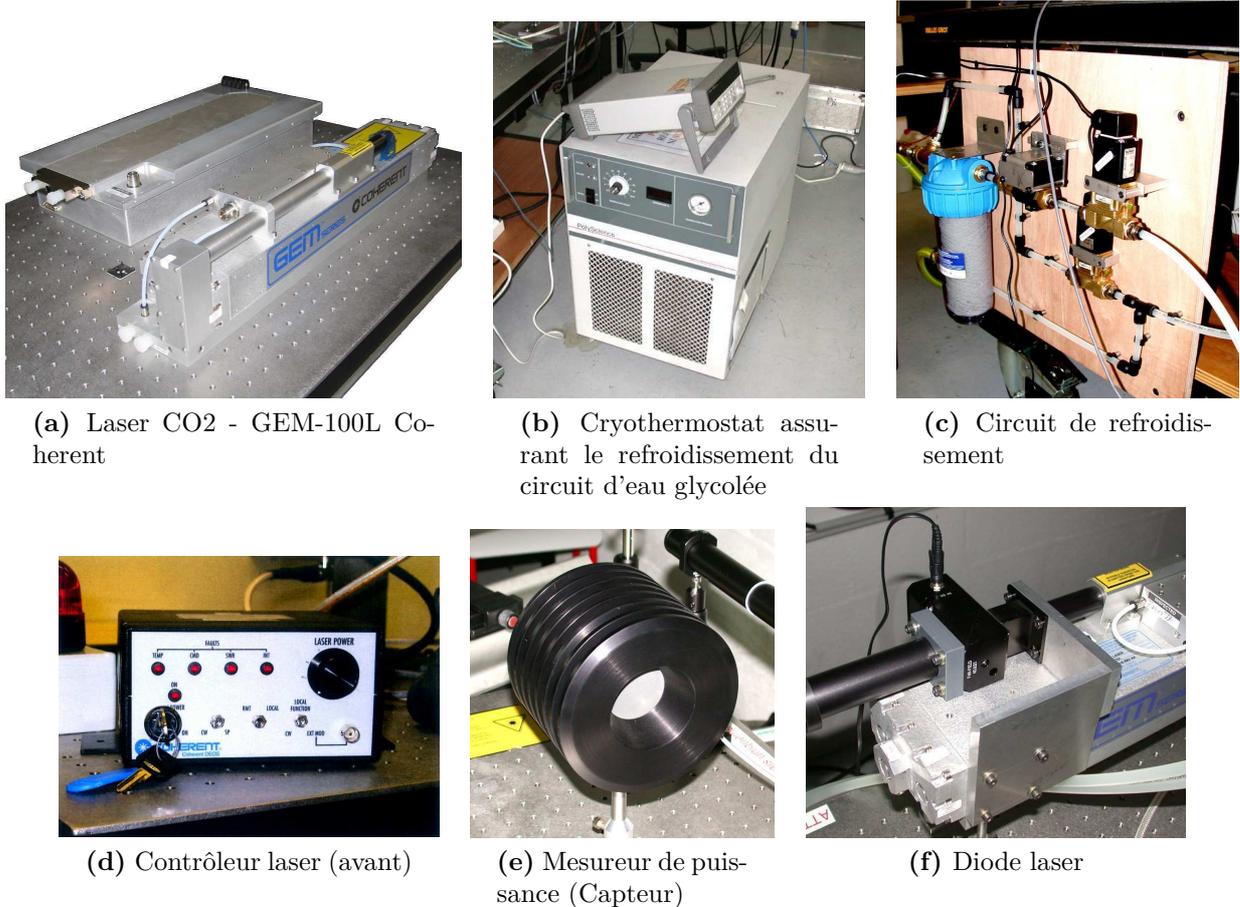


Figure 2.22 – Différentes parties du dispositif expérimental assurant l'excitation thermique de l'échantillon

Par ailleurs, les lasers CO_2 émettent dans l'infrarouge ($\lambda = 10,6 \mu m$). On utilise ainsi une diode laser (Fig.2.22.f) pour le positionnement de l'échantillon ainsi qu'un mesureur de puissance (Fig.2.22.e) permettant d'effectuer des tirs « à vide » pour tester le fonctionnement du laser. L'appareil est en effet conçu pour supporter le faisceau à pleine puissance et en continu.

6.2 Le capteur - la caméra infrarouge

La caméra infrarouge utilisée dans cette thèse est une AGEMA THERMOVISION 880SW (Fig.2.25.a). Ce modèle a été développé dans les années 90 ce qui en fait une caméra relativement ancienne⁴².

Cette caméra est une caméra monocapteur (InSb) à balayage et fonctionne dans la gamme $3 - 5 \mu m$. Elle est refroidie par azote liquide à $77 K$ ($-195,8^\circ C$) contrairement aux caméras plus récentes refroidies par un moteur Stirling ou par cellules Peltier. L'inconvénient de l'azote, c'est l'autonomie limitée de la caméra. Le réservoir d'azote doit être rempli toutes les $15 min$

42. Cela en fait une caméra pas très convoitée au laboratoire et donc très disponible.

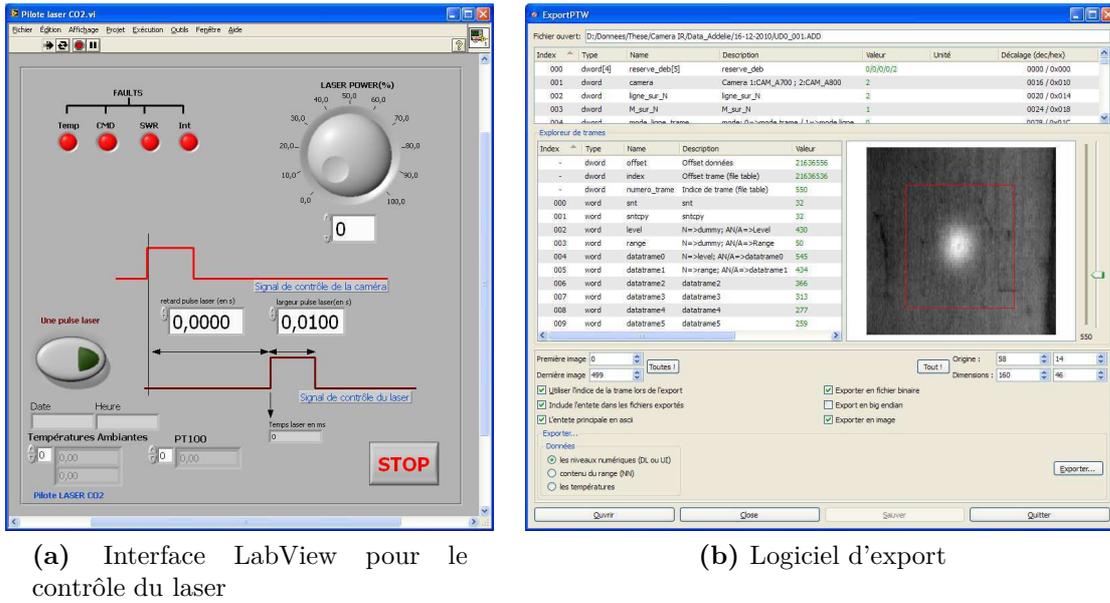


Figure 2.23 – Interface de contrôle du laser et logiciel d'export. L'interface LabView pour le contrôle du laser CO_2 a été développée par André Piteau du service technique. Le logiciel d'export a été développé en C++/Qt par moi-même pour recadrer et exporter les images thermiques à partir des fichiers (*.add) du logiciel Addelie de la caméra AGEMA et des fichiers (*.ptw) du logiciel Altair d'une caméra CEDIP.

environ. Ce système de refroidissement pose aussi des problèmes dès que l'on souhaite incliner fortement la caméra.

La caméra est contrôlée par l'intermédiaire du logiciel Addelie qui dialogue avec le contrôleur de la caméra (Fig.2.25.b) avec une carte d'acquisition. La carte d'acquisition est également connectée à l'ordinateur de contrôle du laser de manière à synchroniser l'acquisition des mesures avec l'excitation thermique.

Les caméras à balayage ont un fonctionnement un peu plus compliqué que les caméras matricielles. Un système mécanique permet de déplacer le champ visible par le détecteur infrarouge dans le sens horizontal puis vertical. La scène thermique est donc balayée ligne par ligne. Chaque ligne contient 140 ou 280 pixels suivant le mode utilisé et l'ensemble des lignes forment une trame. Une trame contient 70 ou 280 lignes suivant la configuration. La fréquence d'acquisition des trames est respectivement de 25 Hz et de $6,25\text{ Hz}$. La caméra propose ainsi de nombreux modes de fonctionnement. On peut travailler uniquement sur des trames (ou uniquement des lignes) ou sur des images. Les images sont composées de 280×280 pixels et sont recueillies à $6,25\text{ Hz}$. En apparence, une image est donc identique à une trame 280×280 . Une image est en réalité composée de 4 trames légèrement décalées les unes des autres. Générer une image en entrelaçant 4 trames génère parfois des artefacts dès que les phénomènes à mesurer évoluent rapidement. Ces problèmes apparaissent dans la fraction de seconde (Fig.2.24) qui suit l'impulsion laser. Les images correspondantes sont donc rejetées.

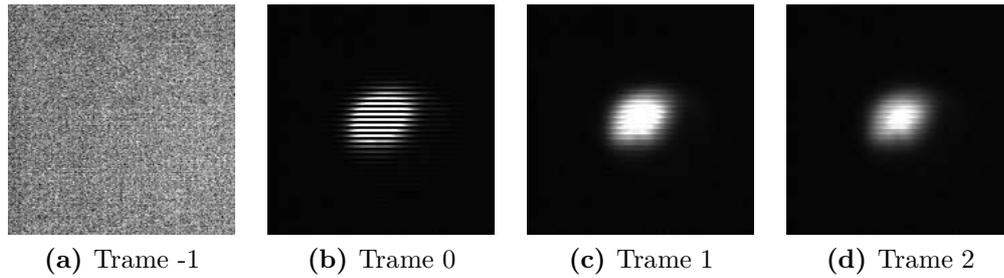


Figure 2.24 – Images aberrantes dans les instants qui suivent l’impulsion laser.

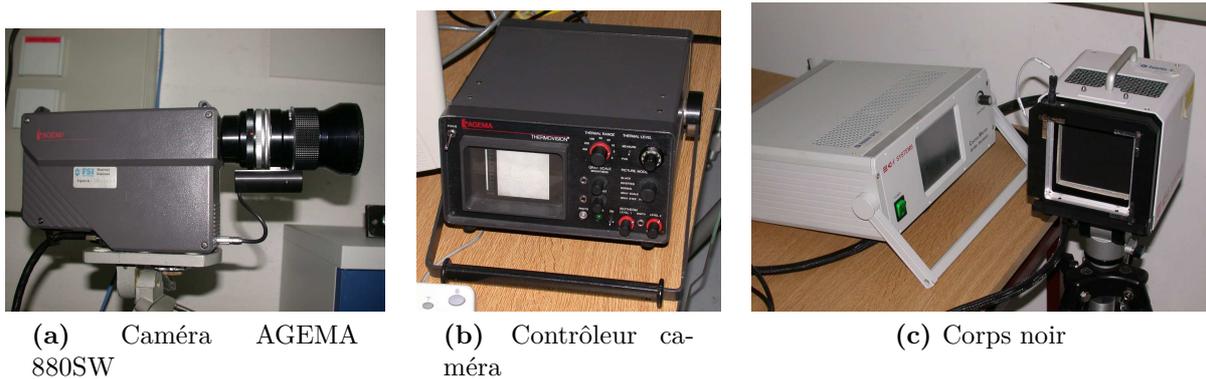


Figure 2.25 – Différentes parties du dispositif expérimental assurant l’acquisition des données

La mise au point est réalisée avec un système motorisé (Fig.2.25.a) qui s’avère ne pas être très pratique pour des réglages fins. Par ailleurs, des bagues allonges permettent d’allonger l’objectif pour augmenter le grandissement. On peut ainsi approcher la caméra de l’échantillon et obtenir une meilleure résolution spatiale de mesure. Un millimètre sur l’échantillon correspond en moyenne à 5 pixels sur l’image thermique.

7 Conclusion

La méthode flash est aujourd’hui une technique très répandue pour estimer la diffusivité thermique de matériaux isotropes. Des évolutions ont étendu son champ d’application aux matériaux anisotropes, aux matériaux multicouches et aux matériaux semi-transparents.

La méthode flash 3D, apparue dans les années 2000, a été présentée dans la troisième partie de ce second chapitre. Le principe est de déposer de l’énergie localement sur la surface de l’échantillon pour provoquer des transferts de chaleur tridimensionnels. On peut ensuite, avec un estimateur, estimer la diffusivité thermique dans les trois directions principales du tenseur des diffusivités d’un matériau anisotrope. Une des particularités de cette méthode est de ne pas exploiter directement les mesures de température mais les harmoniques des champs de température en face avant ou face arrière. Ces harmoniques correspondent aux coefficients de la transformée de Fourier en cosinus des images thermiques.

Un des appareils permettant la mesure de ces champs de température est la thermographie infrarouge. On a insisté sur deux sources potentielles d'incertitude. La première vient du caractère de filtre passe-bas de la caméra. Les hautes fréquences des images thermiques ne sont pas correctement retransmises ce qui fausse la mesure des harmoniques. On a montré que dans le cas de la caméra AGEMA 880SW, tout se passe comme si la résolution était de 28×28 pixels alors que la résolution de l'image fournie par le logiciel d'acquisition est de 280×280 pixels.

Par ailleurs, la mesure de températures absolues avec une caméra infrarouge est difficile. Les spécifications des constructeurs (généralement $2^\circ C$ ou 2%) supposent que le modèle thermographique utilisé par les logiciels d'acquisition est adapté à la scène thermique observée et que les paramètres associés sont correctement spécifiés par l'utilisateur. La mesure d'une variation de température est plus simple puisqu'on supprime l'erreur absolue sur la température. En première approximation, il ne reste alors plus que l'erreur de proportionnalité de la loi d'étalonnage. Si on cherche seulement une grandeur proportionnelle à la température, cette dernière erreur disparaît également. Or c'est ce type de grandeur qu'exploite la méthode flash 3D, si bien que la thermographie infrarouge s'avère bien adaptée. On a effet mis en évidence, dans la cinquième section, que la connaissance fine des paramètres de la loi d'étalonnage n'est pas nécessaire. Des valeurs approximatives suffisent tant que les élévations de température ne sont pas trop importantes. Il est aussi possible et préférable de laisser l'estimateur ajuster les paramètres d'étalonnage.

La cinquième section a présenté quatre estimateurs inspirés pour certains de la littérature. Le premier estimateur, inspiré des travaux de Philippi [27], consiste à calculer le logarithme du rapport d'une même harmonique à deux instants différents. On aboutit à un problème inverse linéaire par rapport aux paramètres τ_x et τ_y . Toutefois, par sa définition, cet estimateur fait intervenir un paramètre Δt que l'utilisateur doit spécifier au mieux. Quant au paramètre τ_z , il est estimé à partir du champ moyen uniquement.

De manière à diminuer la variance de cet estimateur, une des améliorations proposées ici consiste à utiliser toutes les harmoniques dont le rapport signal/bruit est suffisant et pas seulement les harmoniques $(m, 0)$ et $(0, n)$. Par ailleurs, l'estimateur ERH est applicable à des géométries d'échantillons qui n'étaient pas envisageables avec l'estimateur de Philippi, puisqu'elles en invalident certaines hypothèses.

Le second estimateur, appelé ENH, et inspiré notamment des travaux de Krapez [28], se base sur le rapport de deux harmoniques différentes au même instant. Le problème inverse correspondant est également linéaire et permet d'estimer τ_x et τ_y . Comme pour l'estimateur ERH, τ_z est estimé uniquement avec le champ moyen. L'utilisateur doit ici aussi spécifier un paramètre supplémentaire qui est l'harmonique, dite de « référence ». A partir d'une étude nu-

mérique et des retours d'expérience, on a suggéré que la meilleure harmonique pour cela était l'harmonique $\theta_{2,2}$.

L'estimateur EDSH [29], est qualifié de « direct », car il s'appuie directement sur l'expression analytique des harmoniques et n'applique pas d'opération sur celles-ci. L'estimateur procède en deux étapes. Il utilise le champ moyen pour estimer τ_z et H puis réinjecte ces estimations dans les harmoniques $(m, 0)$ avec $m > 0$ pour obtenir des estimations de τ_x . Ces estimations sont ensuite moyennées pour en extraire la valeur finale. Le processus est répété pour τ_y avec les harmoniques $(0, n)$.

Le dernier estimateur développé dans ce travail et appelé estimateur ED, estime tous les paramètres en une seule étape et directement à partir des harmoniques, sans transformation de celles-ci. L'intérêt principal de ces deux derniers estimateurs, EDSH et ED, réside dans le fait qu'aucun paramètre supplémentaire ne doit être spécifié par l'utilisateur. La seule chose à définir, mais qui est commun à tous les estimateurs, est l'ensemble des harmoniques que l'on souhaite exploiter. On a montré qu'un bon compromis était d'utiliser les 16 premières harmoniques paires. On a par ailleurs montré que les estimateurs ED et EDSH permettent d'introduire facilement des paramètres correctifs sur les harmoniques, comme la correction d'offset, la correction de dérive linéaire et la correction de la loi d'étalonnage en intégrant des paramètres supplémentaires dans le problème d'estimation. Le fait d'intégrer toutes les corrections multiplie par 2 ou 3 le nombre de paramètres inconnus ce qui a pour effet, dans notre cas, d'augmenter les écarts-types théoriques d'un facteur 8. L'écart-type est ainsi plus conservatif que les écarts-types théoriques, souvent optimistes, obtenus avec les modèles de base, qui ne prennent en compte aucune correction.

Ces estimateurs sont ensuite comparés en calculant leur variance théorique pour une méthode flash 3D face avant et face arrière sur un matériau isolant. Seuls les paramètres τ_x , τ_y , τ_z sont recherchés mais d'autres paramètres annexes sont inconnus et doivent également être estimés. Ainsi, le nombre de paramètres inconnus dépend de l'estimateur. L'estimateur ERH dépasse la centaine de paramètres tandis que les autres sont autour de la vingtaine. Si on intègre des corrections, on atteint alors 30 à 50 paramètres. Au niveau des performances de chaque estimateur, mis à part l'estimateur ED, tous présentent des variances théoriques très similaires. L'estimateur ENH se démarque en face-avant où il semble particulièrement efficace mais reste toutefois inférieur à l'estimateur ED, qui surpasse les autres dans toutes les situations étudiées.

Quant à la dernière partie, elle est consacrée au dispositif expérimental réalisé au laboratoire. On y évoque le laser CO2 et son interface de contrôle ainsi que la caméra infrarouge AGEMA et les programmes associés.

Références bibliographiques

- [1] S. BORIES, A. MOJTABI, M. PRAT, AND M. QUINTARD. *Transferts de chaleur dans les milieux poreux - conduction, convection, rayonnement*. Techniques de l'Ingénieur **BE8250** (2009).
- [2] M. THOMAS. *Propriétés thermiques de matériaux composites : caractérisation expérimentale et approche microstructurale*. Thèse de Doctorat, Ecole polytechnique de l'Université de Nantes (2008).
- [3] J.C. KRAPEZ. *Mesure de l'effusivité thermique - introduction*. Techniques de l'Ingénieur **R2957** (2006).
- [4] Y. JANNOT, A. DEGIOVANNI, AND G. PAYET. *Thermal conductivity measurement of insulating materials with a three layers device*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **52**, 1105–1111 (2009).
- [5] M. MONDE, M. KOSAKA, AND Y. MITSUTAKE. *Simple measurement of thermal diffusivity and thermal conductivity using inverse solution for one dimensional heat conduction*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **53**, 5343–5349 (2010).
- [6] A. DEGIOVANNI. *Conductivité et diffusivité thermique des solides*. Techniques de l'Ingénieur **R2850** (1994).
- [7] O. BURHEIM, P.J.S. VIE, J.G. PHAROAH, AND S. KJELSTRUP. *Ex situ measurements of through-plane thermal conductivities in a polymer electrolyte fuel cell*. J. of Power Sources **195**, 249–256 (2010).
- [8] C.S. SANJAYA, T-H. WEE, AND T. TAMILSELVAN. *Regression analysis estimation of thermal conductivity using guarded-hot-plate apparatus*. Applied Thermal Engineering **31**, 1566–1575 (2011).
- [9] F. DE PONTE AND S. KLARFELD. *Conductivité thermique des isolants*. Techniques de l'Ingénieur **R2930** (2003).
- [10] C. GOBBÉ, S. ISERNA, AND B. LADEVIE. *Hot strip method : application to thermal characterisation of orthotropic media*. Int. J. of Thermal Sciences **43**, 951–958 (2004).

Références bibliographiques

- [11] N. DAOUAS, A. FGURI, AND M-S RADHOUANI. *Solution of a coupled inverse heat conduction-radiation problem for the study of radiation effects on the transient hot wire measurements*. Experimental Thermal and Fluid Science **32**, 1766–1778 (2008).
- [12] E. YAMASUE, M. SUSU, H. FUKUYAMA, AND K. NAGATA. *Thermal conductivities of silicon and germanium in solid and liquid states measured by non-stationary hot wire method with silica coated probe*. J. of Crystal Growth **234**, 121–131 (2002).
- [13] N. ZAMEL, E. LITOVSKY, X. LI, AND J. KLEIMAN. *Measurement of the through-plane thermal conductivity of carbon paper diffusion media for the temperature range from -50 to $+120$ °c*. Int. J. of Hydrogen Energy **1** (2011).
- [14] Y. HE. *Rapid thermal conductivity measurement with a hot disk sensor*. Thermochemica Acta **436**, 122–129 (2005).
- [15] A.S. BRAHIM DJELLOUL. *Radiométrie photothermique sous excitation aléatoire : application à la mesure de propriétés thermophysiques*. Thèse de Doctorat, Ecole polytechnique de l'Université de Nantes (2008).
- [16] A. MUSCIO, P.G. BISON, S. MARINETTI, AND E. GRINZATO. *Thermal diffusivity measurement in slabs using harmonic and one-dimensional propagation of thermal waves*. Int. J. Thermal Sciences **43**, 453–463 (2004).
- [17] F. CERNUSCHI, A. FIGARI, AND L. FABBRI. *Thermal wave interferometry for measuring the thermal diffusivity of thin slabs*. J. Materials Science **25**, 5891–5897 (2000).
- [18] P.G. BISON, S. MARINETTI, A. MAZZOLDI, E. GRINZATO, AND C. BRESSAN. *Cross-comparison of thermal diffusivity measurements by thermal methods*. infrared Physics and Technology **43**, 127–132 (2002).
- [19] M. RIDES, J. MORIKAWA, L. HALLDAHL, B. HAY, H. LOBO, A. DAWSON, AND C. ALLEN. *Intercomparison of thermal conductivity and thermal diffusivity methods for plastics*. Polymer testing **28**, 480–489 (2009).
- [20] M. DIOT. *Capacités thermiques*. Techniques de l'Ingénieur **R2970** (1993).
- [21] J. GRENET AND B. LEGENDRE. *Analyse calorimétrique différentielle à balayage (dsc)*. Techniques de l'Ingénieur **P1205** (2010).
- [22] W. J. PARKER, W. J. JENKINS, C. P. BUTLER, AND G. L. ABBOTT. *Flash method of determining thermal diffusivity - heat capacity and thermal conductivity*. J. Appl. Phys **32**, 1679–1684 (1961).
- [23] T. BABA, M. KOBAYASHI, A. ONO, HONG J.H., AND SOLIYANTI M.M. *Experimental investigation of the nonuniform heating effect in laser flash thermal diffusivity measurements*. Thermochemica Acta **218**, 329–339 (1993).
- [24] S. GRAHAM, D.L. MCDOWELL, AND R. B. DINWIDDIE. *Multidimensional flash diffusivity measurements of orthotropic materials*. Int. J. Thermopysics **20**(2), 691–707 (1999).

- [25] J. BENACKA, L. VOZAR, AND I. STUBNA. *Design of experiment of thermal diffusivity measurements of composite material with orthogonal anisotropy*. Int. J. Thermophys **29**, 2088–2101 (2008).
- [26] D. DEMANGE, P. BEAUCHÊNE, M. BEJET, AND R. CASULLERAS. *Mesure simultanée de la diffusivité thermique selon les deux directions principales d'un matériau*. Revue Générale de Thermique **36**, 755–770 (1997).
- [27] I. PHILIPPI, J.C. BATSALE, D. MAILLET, AND A. DEGIOVANNI. *Measurement of thermal diffusivities through processing of infrared images*. Rev. Sci. Instrum. **66**(1), 182–192 (1995).
- [28] J.C. KRAPEZ, L. SPAGNOLO, M. FRIESS, H-P MAIER, AND G. NEUER. *Measurement of in-plane diffusivity in non-homogeneous slabs by applying flash thermography*. Int. J. of Thermal Sciences **43**, 967–977 (2004).
- [29] Y. SOUHAR, B. REMY, AND A. DEGIOVANNI. High temperature facility under vacuum for the thermal characterization of anisotropic materials. In *Proceedings of the Int. Heat Transfer Conference - IHTC14*, Washington, DC, USA August 8-13 (2010).
- [30] B. RÉMY, A. DEGIOVANNI, AND MAILLET D. *Measurement of the in-plane thermal diffusivity of materials by infrared thermography*. Int. J. of Thermophysics **26**(2), 493–505 (2005).
- [31] M. DALBIN AND S. THOMIN. *A method of measurement of the multilayer woven ceramic matrix composite panel in-plane thermal diffusivity*. J. of the European Ceramic Society **18**, 59–63 (1998).
- [32] J.M. LASKAR, S. BAGAVATHIAPPAN, M. SARDAR, T. JAYAKUMAR, J. PHILIP, AND B. RAJ. *Measurement of thermal diffusivity of solids using infrared thermography*. Materials Letters **62**, 2740–2742 (2008).
- [33] L. VOZAR, G. LABUDOVA, AND W. HONENAUER. *The laser flash method with repeated pulses - optimal experimental design analysis*. Int. J. Thermophys **23**(5), 1157–1170 (2002).
- [34] GEMBAROVIC J. AND R.E. TAYLOR. *A method for thermal diffusivity determination of thermal insulators*. Int. J. Thermophys **28**, 2164–2175 (2007).
- [35] B. HAY, J-R FLITZ, J. HAMEURY, AND L. RONGIONE. *Uncertainty assessment of thermal diffusivity measurements by flash method - application to five homogeneous materials*. Revue Française de Métrologie **14** (2008).
- [36] L. VOZAR AND W. HONENAUER. *Uncertainty of thermal diffusivity measurements using the laser flash method*. Int. J. Thermophys **26**(6), 1899–1915 (2005).
- [37] M. AKOSHIMA AND T. BABA. *Study on a thermal diffusivity standard for laser flash method measurements*. Int. J. Thermophys **27**(4), 1189–1203 (2006).
- [38] D. MAILLET, S. ANDRÉ, AND A. DEGIOVANNI. *Les erreurs sur la diffusivité thermique mesurée par méthode flash : confrontation théorie-expérience*. J. Phys III France **3**, 883–909 (1993).

Références bibliographiques

- [39] M. LACHI AND A. DEGIOVANNI. *Influence de l'erreur de mesure de température de surface par thermocouples de contact sur la détermination de la diffusivité thermique par méthode flash*. J. Phys III France **2**, 2247–2265 (1992).
- [40] TH. LECHNER AND E. HAHNE. *Finite pulse time effects in flash diffusivity measurements*. Thermochemica Acta **218**, 341–350 (1993).
- [41] A.P.F. ALBERS, T.A.G. RESTIVO, L. PAGANO, AND J.B. BALDO. *Effect of testing conditions on the laser flash thermal diffusivity measurements of ceramics*. Thermochemica Acta **370**, 111–118 (2001).
- [42] D. MAILLET, S. ANDRÉ, J-C BATSALÉ, A. DEGIOVANNI, AND MOYNE C. *Thermal quadrupoles - Solving the heat equation through integral transforms*. Wiley (2000).
- [43] K-H LIM, S-K KIM, AND M-K CHUNG. *Improvement of the thermal diffusivity measurement of thin samples by the flash method*. Thermochemica Acta **494**, 71–79 (2009).
- [44] B. HAY, S. BARRÉ, J-R FLITZ, M. JURION, D. ROCHAIS, AND P. SOLLET. *New apparatus for thermal diffusivity and specific heat measurements at very high temperature*. Int. J. Thermophys. **27**(6) (2006).
- [45] W.N. DOS SANTOS, P. MUMMERY, AND A. WALLWORK. *Thermal diffusivity of polymers by the laser flash technique*. Polymer testing **24**, 628–634 (2005).
- [46] P. MATTEIS, E. CAMPAGNOLI, D. FIRRAO, AND G. RUSCICA. *Thermal diffusivity measurements of metastable austenite during continuous cooling*. Int. J. Thermal Sciences **47**, 695–708 (2008).
- [47] T. BABA AND A. CEZAILLIYAN. *Thermal diffusivity of poco axm-5q, graphite in the range 1500 to 2500k measured by a laser pulse technique*. Int. J. Thermophys. **15**(2), 343–364 (1994).
- [48] S. ANDRÉ AND A. DEGIOVANNI. *A theoretical study of the transient coupled conduction and radiation heat transfer in glass : phonic diffusivity measurements by the flash technique*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **38**(18), 3401–3412 (1995).
- [49] A. DEGIOVANNI, B. REMY, AND S. ANDRE. *Transient radiation conductive heat transfer problems : the quadrupole method*. J. of Thermal Science **11**(4), 359–371 (2002).
- [50] M. LAZARD, S. ANDRÉ, AND D. MAILLET. *Transient coupled radiative-conductive heat transfer in a gray planar medium with anisotropic scattering*. J. of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **69**, 23–33 (2001).
- [51] T. KABAYABAYA, YU. F., AND X. ZHANG. *Thermal diffusivity measurement of glass at high temperature by using flash method*. J. of Thermal Science **13**(1), 91–96 (2003).
- [52] M. LAZARD, S. ANDRÉ, AND D. MAILLET. *Diffusivity measurement of semi-transparent media : model of the coupled transient heat transfer and experiments on glass, silica glass and zinc selenide*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **47**, 477–487 (2004).

- [53] L. CHEN, A.M. LIMARGA, AND D.R. CLARKE. *A new data reduction method for pulse diffusivity measurements on coated samples*. Computational Materials Science **50**, 77–82 (2010).
- [54] P. BISON, F. CERNUSCHI, E. GRINZATO, S. MARINETTI, AND D. ROBBA. *Ageing evaluation of thermal barrier coatings by thermal diffusivity*. Infrared Physics & Technology **49**, 286–291 (2007).
- [55] P. BISON, F. CERNUSCHI, AND E. GRINZATO. *In-depth and in-plane thermal diffusivity measurements of thermal barrier coatings by ir camera : Evaluation of ageing*. Int. J. of Thermophysics **29**(6), 2149–2161 (2008).
- [56] S.C. NAGPURE, R. DINWIDDIE, S.S. BABU, G. RIZZONI, B. BHUSHAN, AND T. FRECH. *Thermal diffusivity study of aged li-ion batteries using flash method*. J. of Power Sources **195**, 872–876 (2010).
- [57] L. GUILLAUMAT, J.C. BATSALE, AND MOURAND D. *Real time infrared image processing for the detection of delamination in composite plates*. Composites : Part A **35**, 939–944 (2004).
- [58] O. FUDYM, J.C. BATSALE, AND J.L. BATTAGLIA. *Thermophysical properties mapping in semi-infinite longitudinally cracked plates by temperature image processing*. Inverse Problems in Science and Engineering **15**(2), 163–176 (2007).
- [59] A. DEGIOVANNI, J.C. BATSALE, AND D. MAILLET. *Mesure de la diffusivité longitudinale de matériaux anisotropes*. Revue générale de thermique **35**, 141–147 (1996).
- [60] M-A THERMITUS AND M. LAURENT. *New logarithmic technique in the flash method*. Int. J. Heat Mass Transfer **40**(17), 4183–4190 (1997).
- [61] H. MASSARD, O. FUDYM, H.R.B. ORLANDE, AND J.C. BATSALE. *Nodal predictive error model and bayesian approach for thermal diffusivity and heat source mapping*. Comptes Rendus Mécanique **338**, 434–449 (2010).
- [62] H. R.B. ORLANDE, O. FUDYM, D. MAILLET, AND R. M. COTTA. *Thermal measurements and inverse techniques*. CRC Press Taylor & Francis Group (2011).
- [63] I. PHILIPPI. *Mesure sans contact de diffusivité thermique de plaques minces en mouvement uniforme*. Thèse de Doctorat, Institut national polytechnique de Lorraine (1994).
- [64] M.N. ÖZISIK. *Heat conduction - Second edition*. Wiley-Interscience (1993).
- [65] D. PAJANI. *Mesure par thermographie infrarouge*. Add Editeur (1989).
- [66] D. PAJANI. *La thermographie infrarouge - Principes, Technologies, Applications*. Lavoisier (1989).
- [67] A. DAUGUET. *La détection des radiations infrarouges*. Dunod Paris (1964).
- [68] D. PAJANI. *Thermographie - principes et mesure*. Techniques de l'Ingénieur **R2740** (2001).
- [69] L. AUDAIRE AND D. PAJANI. *Thermographie - technologies et applications*. Techniques de l'Ingénieur **R2741** (2001).

Références bibliographiques

- [70] S. MATTEÏ. *Rayonnement thermique des matériaux opaques*. Techniques de l'Ingénieur **B8210** (2005).
- [71] G. GAUSSORGUES. *Détecteurs infrarouges*. Techniques de l'Ingénieur **E4060** (1996).
- [72] J-P GOURE AND G. BRUN. *Bruit dans les mesures optiques*. Techniques de l'Ingénieur **R358** (1997).
- [73] W. MINKINA AND S. DUDZIK. *Infrared thermography - Errors and Uncertainties*. Lavoisier (2009).
- [74] M. KUNT. *Distributions et transformation de Fourier*. McGraw - Hill (1978).
- [75] T. YAMANE, S. KATAYAMA, AND M. TODOKI. *Experimental investigation of nonuniform heating and heat loss from a specimen for the measurement of thermal diffusivity by the laser pulse heating method*. Int. J. of Thermophysics **18**(1), 269–290 (1997).
- [76] A. CEZAIRLIYAN, T. BABA, AND R. TAYLOR. *A high temperature laser pulse thermal diffusivity apparatus*. Int. J. of Thermophysics **15**(2), 317–341 (1994).
- [77] L. PAWLOWSKI, P. FAUCHAIS, AND C. MARTIN. *Analysis of boundary conditions and transient signal treatment in diffusivity measurements by laser pulse method*. Revue Phys. Appl. **20**, 1–11 (1985).
- [78] V. PLANA. *Caractérisation par méthode inverse et modélisation des propriétés thermophysiques orthotropes des matériaux composites*. Thèse de Doctorat, L'Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace (2003).
- [79] V. VAVILOV, D. BURLEIGH, AND V. SHIRYAEV. *Ir thermographic evaluation of thermal diffusivity anisotropy : comaparative analys of some algorithms*. QIRT **4**(2), 187–200 (2007).
- [80] S. KULLBACK AND R.A. LEIBLER. *On information and sufficiency*. Annal of Mathematical Statistics **22**(1), 79–86 (1951).
- [81] K.P. BURNHAM AND D.R. ANDERSON. *Kullback-leibler information as a basis for strong inference in ecological studies*. Wildlife Research **28**, 111–119 (2001).
- [82] R. A. FISHER. *Theory of statistical estimation*. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society **22** (1925).
- [83] G. BRASSART, J-L MEYZONNETTE, AND J-P POCHOLLE. *Sources laser*. Techniques de l'Ingénieur **E4020** (1996).

Chapitre 3

Estimation de conditions limites thermiques

Ce troisième chapitre est dédié à l'estimation de conditions limites, stationnaires et instationnaires, à température ambiante et à haute température, par méthodes inverses.

Le premier exemple concerne le remplissage rapide des bouteilles d'hydrogène à haute pression. L'étude a été réalisée en partenariat avec Air Liquide et en particulier avec le Centre de Recherche Claude Delorme (CRCD), ainsi qu'avec EADS Composites Aquitaine (CAQ). Une instrumentation interne à la paroi nous permet de « remonter » aux transferts thermiques entre le gaz et la paroi. La condition limite est instationnaire mais uniforme en espace.

Le deuxième exemple concerne un dispositif expérimental du département Physique et Mécanique des matériaux (PMM) de l'institut P³, dédié à l'étude de l'endommagement de matériaux composites. Il s'agit de caractériser la résistance des matériaux composites à une flamme oxygène/acétylène de 3000 °C. Pour simuler numériquement le phénomène d'ablation du matériau, une caractérisation des transferts thermiques flamme-paroi est nécessaire.

1 Généralités

Pour déterminer l'évolution spatiale et temporelle de la température dans un domaine en conduction thermique, on utilise l'équation de la chaleur :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\bar{\lambda} \nabla T) \quad (3.1)$$

Cette équation ne suffit pas pour déterminer la température en tout point et à tout instant. Il faut définir les conditions limites (temporelles et spatiales) aux bords du domaine. Elles décrivent les transferts de chaleur entre la surface du domaine et son environnement. Trois types de conditions limites sont utilisées fréquemment :

- Conditions limites de température imposée
- Conditions limites de densité de flux imposée
- Conditions limites de type mixte

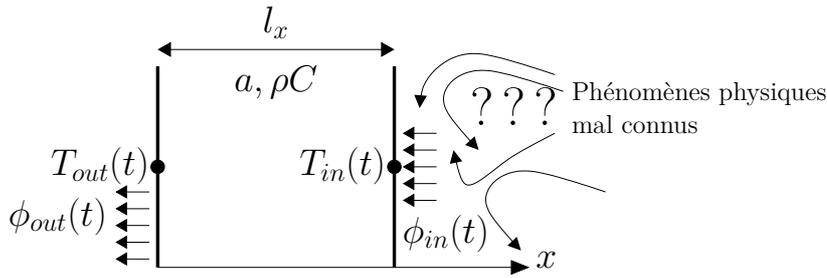


Figure 3.1 – Estimation des transferts thermiques à la surface d’un mur monodimensionnel

La problématique est ici différente. On ne cherche pas à calculer la température dans un domaine, mais à identifier les causes qui ont provoqué une augmentation de la température dans ce domaine. Dans les deux exemples traités dans ce chapitre, on connaît l’origine de l’excitation thermique : un gaz chaud pour la première application et une flamme oxyacétylène pour la seconde. Dans ces deux situations, on ne maîtrise pas suffisamment les phénomènes physiques à l’origine des transferts de chaleur pour pouvoir les modéliser. D’ailleurs, l’objectif n’est pas de déterminer ces phénomènes, mais d’identifier ce que « voit » le matériau, c’est à dire de déterminer quelle est la densité de flux de chaleur qu’il reçoit du fait des phénomènes physiques qui ont lieu à sa surface.

La problématique est illustrée avec un mur monodimensionnel sur la figure (Fig.3.1) : on souhaite déterminer la température de surface $T_{in}(t)$ sur la face de droite du mur connaissant la température $T_{out}(t)$ et la densité de flux $\phi_{out}(t)$ sur la face de gauche. Les autres paramètres, comme les propriétés thermophysiques du matériau ou les dimensions du mur, sont supposés connus.

Pour déterminer $T_{in}(t)$, on peut aussi estimer tout d’abord $\phi_{in}(t)$ puis calculer ensuite $T_{in}(t)$ en exécutant le modèle direct avec la condition limite de flux imposé $\phi_{in}(t)$ à droite et la condition limite appropriée ($\phi_{out}(t)$ ou $T_{out}(t)$) à gauche. Estimer $T_{in}(t)$ ou $\phi_{in}(t)$ consiste ici à estimer une fonction inconnue instationnaire. On montrera cependant que $T_{in}(t)$ est plus simple à estimer.

Chercher une condition limite sous la forme d’un flux imposé ou d’une température imposée est le cas le plus général ici, puisque pour tout phénomène physique, le flux de chaleur $\phi_{in}(t)$ absorbé par le matériau (ou sa température de surface $T_{in}(t)$) est une fonction du temps :

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=l_x} = \phi_{in}(t) \quad \text{ou} \quad T(x=l_x, t) = T_{in}(t) \quad (3.2)$$

Il existe aussi une autre approche qui consiste à essayer de modéliser les transferts de chaleur entre la surface de droite du mur et son environnement. On peut par exemple faire intervenir

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

des lois d'échanges de type convectif et/ou de type radiatif. Ces modèles font apparaître des paramètres supplémentaires comme par exemple le coefficient d'échange h , l'émissivité ϵ dans le cas d'une surface grise ou une température de référence T_∞ . On aurait ainsi :

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=l_x} = h(T_{(x=l_x)} - T_\infty) + \epsilon \sigma (T_{(x=l_x)}^4 - T_\infty^4) \quad (3.3)$$

En cherchant la densité de flux absorbé par le matériau sous cette forme, on restreint l'ensemble des solutions car celle-ci ne permet pas de représenter tous les phénomènes physiques possibles. Cependant, sous cette forme, le problème inverse est plus simple puisqu'il se réduit à un problème d'estimation de paramètres (h, ϵ dans (Eq.3.3)).

Dans la situation précédente, c'est une fonction inconnue $\phi_{in}(t)$ ou $T_{in}(t)$ qu'il faut identifier. Pour pouvoir être estimées, ces fonctions doivent au préalable être paramétrées pour passer d'un espace de dimension infini à une représentation dans un espace fini. Dans les exemples traités par la suite, la fonction inconnue $f(x, y, t)$ est supposée pouvoir se mettre sous la forme :

$$\phi_{in}(x, y, t) \quad \text{ou} \quad T_{in}(x, y, t) = f(x, y, t) = \sum_{i,j,k} \beta_{i,j,k} X_i(x) Y_j(y) Z_k(t) \quad (3.4)$$

L'estimation de la fonction inconnue $f(x, y, t)$ consiste maintenant à estimer les paramètres $\beta_{i,j,k}$. Le problème d'estimation de condition limite est maintenant un problème d'estimation de paramètres sur lequel on peut appliquer tous les outils présentés au chapitre 1.

2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

Ce problème d'estimation de condition limite intervient dans le cadre du projet OSEO H2E et plus particulièrement dans un des sous-programmes destiné à l'étude des transferts thermiques dans les parois des bouteilles d'hydrogène haute pression lors de leur remplissage. L'autonomie des systèmes fonctionnant avec de l'hydrogène comme conteneur d'énergie dépend directement de la masse d'hydrogène disponible. Ce gaz a la particularité d'avoir une densité d'énergie massique élevée, environ 120 MJ kg^{-1} , comparé à l'essence qui est d'environ 40 MJ kg^{-1} . Malheureusement, la masse volumique de ce gaz est très faible dans les conditions ambiantes : $\rho_{H_2} = 0,085 \text{ kg.m}^{-3}$. Ainsi, pour disposer d' 1 kg d'hydrogène, on peut utiliser :

- un réservoir de 12000 L dans des conditions ambiantes ($\approx 20^\circ\text{C}, 1 \text{ bar}$)
- un réservoir de 130 L à 100 bar et 20°C
- un réservoir de 50 L à 300 bar et 20°C
- un réservoir de 25 L à 700 bar et 20°C
- un réservoir de 14 L à 1 bar et -253°C

Une des approches dont il est question dans H2E est le stockage de l'hydrogène à température ambiante et sous une pression de 700 *bar*. Le stockage cryogénique sous phase liquide permet de gagner en volume, mais avec un coût énergétique supplémentaire pour la liquéfaction. Il existe également d'autres formes de stockage comme par exemple les réservoirs solides [1].

Le remplissage d'une bouteille à haute pression est réalisé en général avec un réservoir d'hydrogène où règne une pression supérieure à la pression souhaitée dans la bouteille. Le remplissage consiste alors à ouvrir la vanne qui relie le réservoir à la bouteille. En pratique, on utilise aussi plusieurs réservoirs [2] à des pressions différentes, et auxquels la bouteille va être successivement connectée.

La physique du remplissage est relativement complexe puisqu'elle fait intervenir des différentiels de pression suffisamment importants pour générer des blocages soniques dans les canalisations ainsi que potentiellement un jet supersonique à l'entrée de la bouteille. L'écoulement dans la bouteille est ainsi probablement très turbulent, tridimensionnel et compressible.

2.1 Modélisation du remplissage d'une bouteille

De manière à appréhender un peu mieux la physique du remplissage sans faire appel à des simulations numériques complexes, un modèle 0D a été développé (Annexe 10 p328) sur le même principe que celui proposé par Dicken [3]. Il permet de déterminer l'évolution de la température et de la pression moyenne dans la bouteille en fonction du temps, pour différents gaz et différents modèles de ces gaz. Les résultats présentés dans la suite sont relatifs à l'azote. Pour des questions pratiques, les essais de remplissage¹ sont réalisés avec de l'azote. Les résultats sont comparables mais les masses de gaz mises en jeu sont très différentes. A 300 *bar* et à $T = 300\text{ K}$, la masse volumique de l'azote est de $\rho_{N_2} = 295\text{ kg m}^{-3}$, et celle de l'hydrogène 10 fois moins : $\rho_{H_2} = 20\text{ kg m}^{-3}$.

Le modèle 0D (Annexe 10 p328) est constitué (Fig.3.2) d'un réservoir supposé suffisamment grand pour que l'état du gaz reste constant lors du remplissage de la bouteille, initialement à la pression atmosphérique et à la température ambiante. La paroi de la bouteille est constituée de deux matériaux : un matériau polymère qui assure l'étanchéité de la bouteille et un matériau composite qui assure la tenue mécanique. Des coefficients d'échanges interne et externe modélisent les transferts thermiques entre le gaz et la paroi interne de la bouteille, ainsi qu'entre la paroi externe et l'environnement. La température de référence dans la bouteille est prise égale à la température moyenne du gaz.

1. Une partie des essais de remplissage a été réalisée au Centre de Recherche Claude Delorme (CRCD) de Air Liquide à Jouy-en-Josas 78350.

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

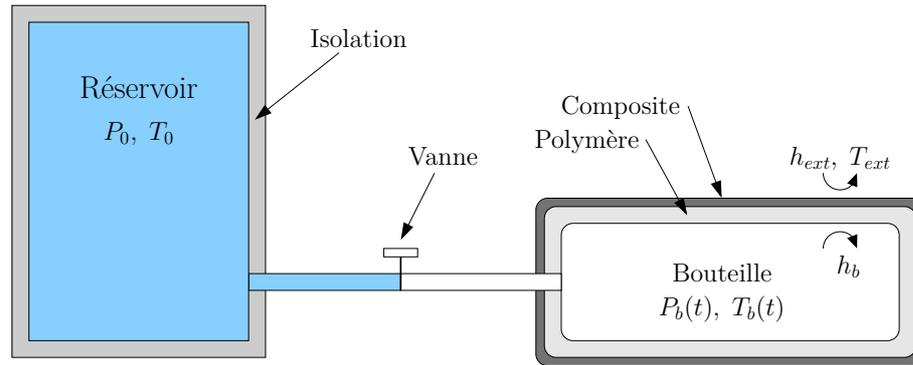


Figure 3.2 – Modélisation 0D du remplissage d'une bouteille

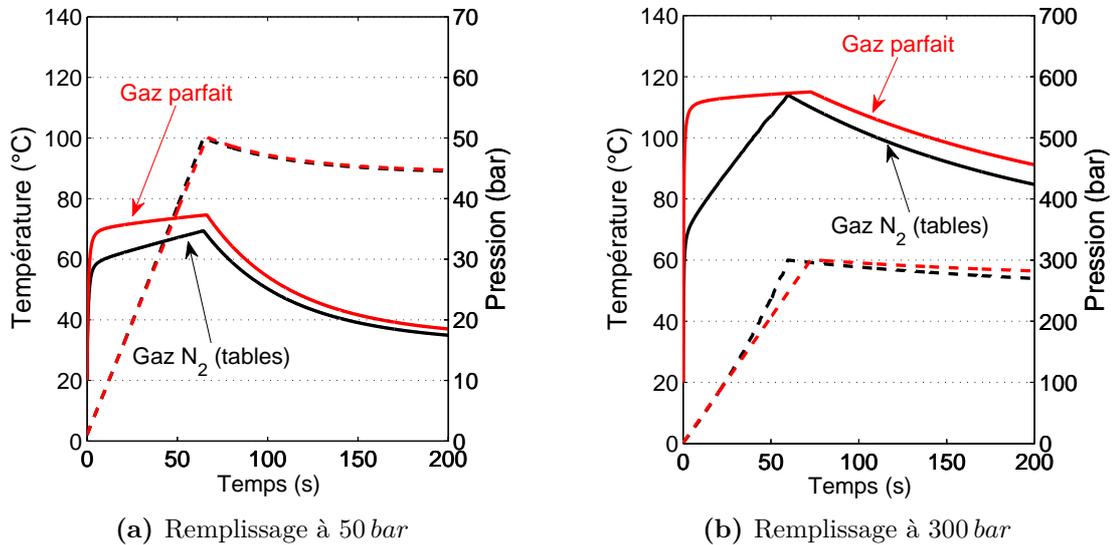


Figure 3.3 – Simulation numérique du remplissage d'une bouteille d'azote à 50 bar et à 300 bar : évolution de la température relative et de la pression dans la bouteille en fonction du temps.

Deux exemples sont considérés ici : la pression finale de consigne est respectivement de 50 bar et de 300 bar. A l'instant $t = 0$, la vanne est ouverte et le contenu du réservoir se déverse dans la bouteille. Dès que la pression dans la bouteille atteint la consigne, la vanne est instantanément fermée. L'évolution de la « température moyenne » $T_b(t)$ et de la pression $P_b(t)$ du gaz dans la bouteille en fonction du temps sont présentées sur la figure (Fig.3.3). La pression dans le réservoir pour ces deux pressions consignes vaut respectivement 100 et 500 bar. Les débits massiques, en blocage sonique, sont respectivement d'environ 40 g/s et 200 g/s. La masse finale d'azote contenu dans la bouteille est respectivement de 2,5 kg et 12 kg.

Dans le cas d'un remplissage à 50 bar, on remarque que la pression augmente de façon linéaire jusqu'à la consigne. La vanne est alors fermée (à $t \approx 60$ s) et la pression cesse d'augmenter. Quant à la température, elle augmente très rapidement dans les premières secondes

Chapitre 3. Estimation de conditions limites thermiques

avant d'atteindre un régime linéaire jusqu'à la fermeture de la vanne. L'hypothèse de gaz parfait semble surestimer légèrement les températures par rapport aux résultats obtenus avec des tables thermodynamiques de l'azote. Les deux modélisations sont toutefois en accord sur l'évolution de la pression. Une fois le remplissage terminé, les pertes thermiques dans la paroi de la bouteille font baisser la température et la pression. La pression finale n'est donc plus la pression de consigne de 50 *bar* mais la pression au repos, qui est ici d'environ 45 *bar*.

Concernant le remplissage à 300 *bar*, le fait de travailler à des conditions plus extrêmes génère des écarts plus importants entre le gaz parfait et le gaz « réel » (tables). On distingue nettement une évolution différente de la pression à partir de 200 *bar*. A propos de la température, les deux évolutions sont aussi assez différentes. Alors que le gaz parfait atteint la température maximale de 115 ° dès les premières secondes, la température obtenue avec les tables augmente « instantanément » de 70 ° avant de croître linéairement jusqu'à 115 °C. Par ailleurs, à 300 *bar*, la durée du remplissage n'est plus la même suivant le modèle de gaz utilisé. Cette durée dépend notamment :

- du débit massique de gaz au niveau de la vanne, qui dépend de la section de passage la plus étroite et des conditions de Laval (qui permettent de savoir si l'écoulement est subsonique ou supersonique²). Ces conditions de Laval dépendent de l'état du gaz dans le réservoir.
- de la modélisation du gaz. S'il s'agit d'un gaz parfait, d'un autre modèle analytique ou de tables thermodynamiques.
- des conditions limites thermiques de la bouteille et des canalisations. Ici, la détente entre le réservoir et la vanne est supposée isentropique.

2.2 Problématique et objectifs

La dynamique du fluide dans la bouteille étant trop complexe pour pouvoir être modélisée de façon précise, il est difficile d'utiliser une simulation directe pour estimer le flux de chaleur transféré à la paroi par le gaz. On souhaite néanmoins déterminer ce flux de chaleur pour calculer la température des matériaux de la paroi pendant le remplissage et ainsi déterminer les conditions dans lesquelles doivent être réalisés les essais de fatigue thermomécanique³. L'existence de gradients de température est un facteur supplémentaire d'altération des matériaux.

Contrairement à la dynamique du fluide, la thermique dans la paroi est relativement bien maîtrisée. Ainsi, en utilisant conjointement un modèle des transferts thermiques dans la paroi

2. Ce n'est pas particulièrement visible sur la figure (Fig.3.3.b) mais l'écoulement est en blocage sonique pendant les 40 premières secondes. Le débit massique est donc constant.

3. Une partie de ces tests sont réalisés au département Physique et Mécanique des Matériaux de l'institut P' avec la thèse de B. Gentilleau.

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

et des mesures de température à l'intérieur de celle-ci, on peut caractériser les transferts thermiques entre le gaz et la paroi lors du remplissage (Fig.3.4). Il s'agit d'un type de problème inverse classique [4] où la fonction inconnue est la température de surface $T_{in}(t)$ ou la densité de flux de chaleur $\phi_{in}(t)$.

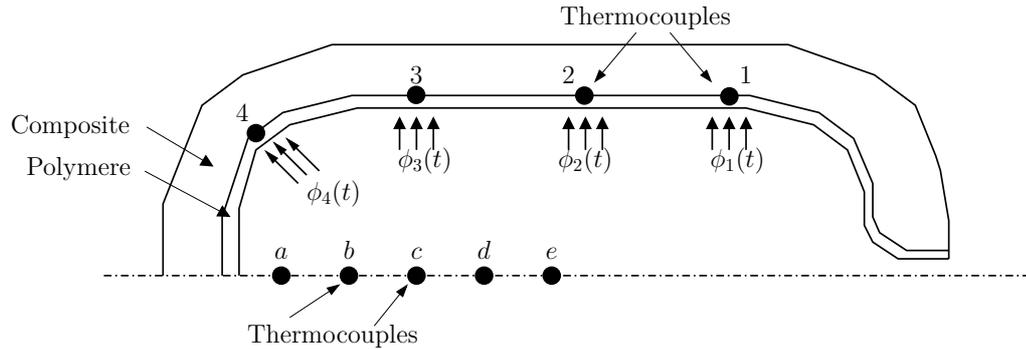


Figure 3.4 – Schéma de la bouteille d'hydrogène.

La bouteille est à géométrie cylindrique (r, θ, z) avec z l'axe de la bouteille et r son rayon. La température du gaz dans la bouteille lors du remplissage n'est pas uniforme ce qui est probablement aussi le cas de la température de paroi. Cependant, on suppose que la température de paroi varie lentement avec la position considérée sur la paroi interne. Ainsi, localement, les flux de chaleur radiaux sont très supérieurs aux flux suivant θ et z . On fait donc l'hypothèse que les transferts sont localement monodimensionnels en r . Par ailleurs, la géométrie de la bouteille est telle que le rapport de l'épaisseur et du diamètre est faible, ce qui rend l'approximation de géométrie cartésienne raisonnable. Par la suite, la variable d'espace r est remplacée par x .

Les thermocouples 1 à 4 dans la paroi (Fig.3.4) sont utilisés pour estimer les densités de flux $\phi_1(t)$ à $\phi_4(t)$ ou de manière à peu près équivalente, les températures $(T_{in,1}(t)$ à $T_{in,4}(t))$ de la surface interne du polymère en contact avec le gaz. Pour que cette estimation soit possible, il faut aussi définir la condition limite externe. L'épaisseur de composite étant significative, on pourra supposer que la bouteille est isolée. Quant aux thermocouples (a) à (e) placés dans le gaz, ils sont utilisés dans la suite pour calculer une température de référence du gaz.

Cependant, avant d'introduire le modèle des transferts thermiques associé à ce problème inverse, il est nécessaire de caractériser les deux matériaux de la bouteille. L'incertitude sur $\phi_i(t)$ ou $T_{in,i}(t)$ est en effet très liée à l'incertitude sur les paramètres thermophysiques.

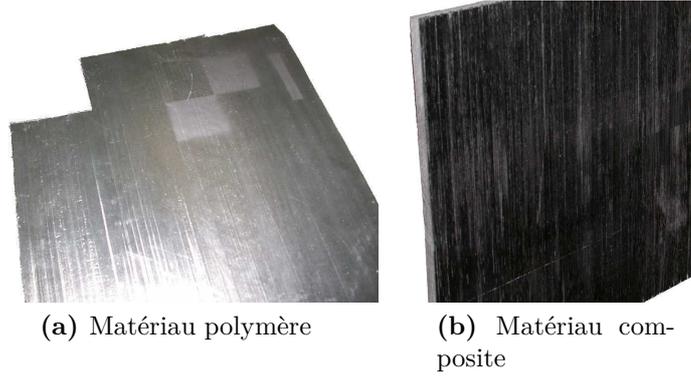


Figure 3.5 – Echantillons à caractériser. Les deux zones rectangulaires visibles sur chaque échantillon correspondent à la peinture noire utilisée pour évaluer l'émissivité du matériau (Annexe 6 p315).

2.3 Caractérisation des matériaux

Les deux sections suivantes présentent les diffusivités thermiques estimées pour le matériau polymère et un matériau composite. Les capacités thermiques massiques sont estimées séparément par DSC (« Differential Scanning Calorimetry »). La masse volumique est obtenue après une mesure de la masse et du volume des échantillons utilisés.

2.3.1 Diffusivité thermique du polymère

La paroi des bouteilles d'hydrogène est constituée d'un matériau polymère (Fig.3.5.a) qui assure l'étanchéité. Il s'agit d'un matériau isolant homogène et isotrope. Les dimensions latérales de l'échantillon dont on dispose, sont d'environ $20 \times 30 \text{ cm}^2$ et son épaisseur moyenne de $l_z = 2,4 \text{ mm}$. L'approche classique pour ce type de matériau est d'utiliser une méthode flash 1D. La difficulté ici est la mauvaise qualité de surface de l'échantillon. En effet, la méthode flash 1D ne permet pas d'estimer a_z directement mais uniquement le paramètre $\tau_z = a_z/l_z^2$. L'écart-type de l'épaisseur l_z a été ici évalué avec une vingtaine de mesures effectuées avec un palmer. L'écart-type obtenu vaut environ $\sigma_{l_z} = 0,2 \text{ mm}$. Par conséquent, même si τ_z est parfaitement estimé, la diffusivité a_z ne peut pas être estimée plus précisément que ne l'est l'épaisseur l_z :

$$\tau_z = \frac{a_z}{l_z^2} \implies \frac{\sigma_{a_z}^2}{a_z^2} = \frac{\sigma_{\tau_z}^2}{\tau_z^2} + 4 \frac{\sigma_{l_z}^2}{l_z^2} \implies \frac{\sigma_{a_z}}{a_z} > 2 \frac{\sigma_{l_z}}{l_z} = 8 \% \quad (3.5)$$

La méthode flash 3D, présentée au chapitre 2 (§3 p86), a été développée à l'origine pour les matériaux anisotropes. Cette méthode ne permet pas d'estimer directement les diffusivités thermiques a_x , a_y et a_z mais uniquement les grandeurs suivantes (en $[s^{-1}]$) :

$$\tau_x = \frac{a_x}{l_x^2} \quad \text{et} \quad \tau_y = \frac{a_y}{l_y^2} \quad \text{et} \quad \tau_z = \frac{a_z}{l_z^2}$$

Les paramètres l_x , l_y et l_z sont respectivement les deux dimensions latérales et l'épaisseur

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

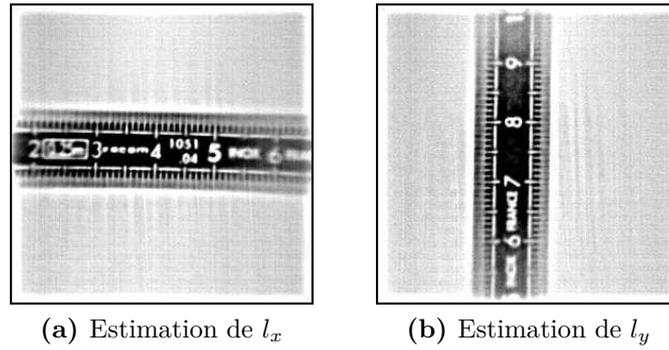


Figure 3.6 – Estimation des dimensions l_x et l_y du champ de la caméra à partir de l'image thermique d'un régleur. Les deux images sont obtenues après par moyennage et rehaussement des contours.

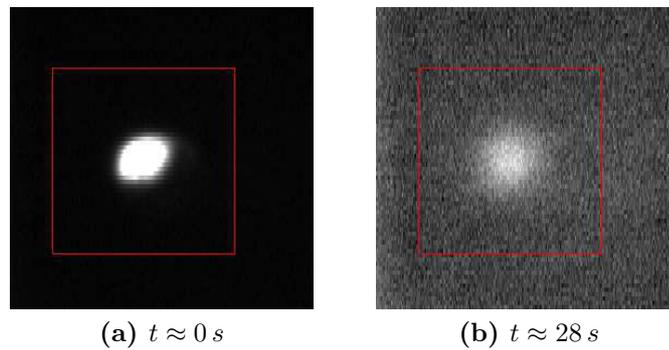


Figure 3.7 – Recadrage et export des mesures obtenues avec la caméra AGEMA dans un format lisible par les algorithmes d'estimation. La cadre rouge correspond à la partie de l'image qui sera exportée puis traitée.

de l'échantillon. La méthode flash 3D offre ici une alternative intéressante puisque l'incertitude sur l_z est découplée des paramètres τ_x et τ_y . Ces derniers font intervenir les dimensions l_x et l_y du champ caméra qui sont plus facilement et plus précisément estimées (Fig.3.6), en plaçant par exemple un régleur sur l'échantillon, d'abord horizontalement puis verticalement. On obtient alors le nombre de pixels par millimètre d_x et d_y . L'évaluation d'un écart-type (conservatif) ne pose pas de difficulté :

$$\begin{aligned} d_x &= 5,45 \text{ px mm}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{d_x} = 0,04 \text{ px mm}^{-1} \\ d_y &= 5,40 \text{ px mm}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{d_y} = 0,03 \text{ px mm}^{-1} \end{aligned}$$

Une fois que les mesures ont été réalisées par la caméra infrarouge, la première étape est d'extraire les données à partir du fichier généré par le logiciel d'acquisition. L'extraction consiste tout d'abord à sélectionner la partie des images thermiques à exploiter (Fig.3.7). Les dimensions l_x et l_y de cette partie sont calculées à partir du nombre de pixels dans la largeur N_x et la hauteur N_y et de d_x et d_y déterminés précédemment avec le régleur (Fig.3.6).

L'estimation des paramètres τ_x , τ_y et τ_z ne se fait pas directement avec les champs spatio-

Chapitre 3. Estimation de conditions limites thermiques

temporels de température. La particularité de la méthode flash 3D est de travailler sur les transformées de Fourier de ces champs. Les coefficients de Fourier correspondants sont appelés harmoniques (§3.3 p94).

On calcule alors les harmoniques à partir des champs de température pour sélectionner les harmoniques visiblement de bonne qualité et rejeter celles qui sont clairement aberrantes (par rapport à leur évolution théorique donnée par l'expression Eq.2.36 p95). La figure (Fig.3.8) montre l'évolution des 9 premières harmoniques avant et après l'impulsion laser en face avant. Les écarts-types $\sigma_{m,n}$ de chacune d'elles ont été estimés à partir des harmoniques calculées avec 20 s d'acquisition précédant le tir laser. Cela représente $20 \times 6,25 \text{ Hz} = 125$ images. L'écart-type de chaque harmonique permet ensuite de calculer le seuil d'exploitabilité pour chacune d'elle. Le seuil est ici pris égal à $\kappa = 30$ fois l'écart-type $\sigma_{m,n}$ (il est symbolisé par les lignes rouges en pointillés).

Il apparaît que les harmoniques de fréquence impaire (m ou n impaire) sont sensiblement nulles et ne sont ainsi pas prises en compte par le programme. Lors du recadrage (Fig.3.7), on s'est effectivement « arrangé » pour que l'excitation soit centrée pour concentrer l'information sur les harmoniques paires. La figure (Fig.3.8) ne présente que les 4 premières harmoniques paires mais dans le cas présent, on sélectionne les 25 premières harmoniques paires. L'estimation de τ_x et τ_z est réalisée avec l'estimateur ENH (pour « Estimation par normalisation des harmoniques »). Cet estimateur a été développé au chapitre 2 (§5.2 p123). Une de ses particularités est d'exploiter des harmoniques seulement après les avoir normalisées (d'où son nom) par une harmonique de référence. Le choix de cette référence revient à l'utilisateur. Quelques critères ont été proposés pour choisir la meilleure harmonique de référence (§5.2.4 p129). En l'occurrence, on utilise l'harmonique $\theta_{2,2}(t)$.

On calcule alors les observables (Eq.2.73 p124) pour chaque harmonique utilisée, puis on détermine la solution $\hat{\beta}$. Le nombre de paramètres à estimer est a priori de 26 : les 24 paramètres $C_{m,n}$ (25 harmoniques moins la référence $C_{2,2}$) ainsi que τ_x et τ_y . Seuls ces deux derniers paramètres nous intéressent, mais par construction, l'estimateur ENH ne peut éviter l'estimation des 24 paramètres $C_{m,n}$ supplémentaires, relatifs à la forme du spot laser. Cependant, il se peut que parmi ces 24 paramètres $C_{m,n}$, il y en ait qui correspondent à une fréquence (m, n) pour laquelle toutes les harmoniques sont en dessous du seuil d'exploitabilité (ici $30 \sigma_{m,n}$). Auquel cas, le paramètre $C_{m,n}$ en question est supprimé.

La figure (Fig.3.9) est composée de deux figures. La première présente l'évolution des observables $Y_{m,n}^*(t)$ pour chaque fréquence exploitable. Pour rappel, ces observables sont calculés

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

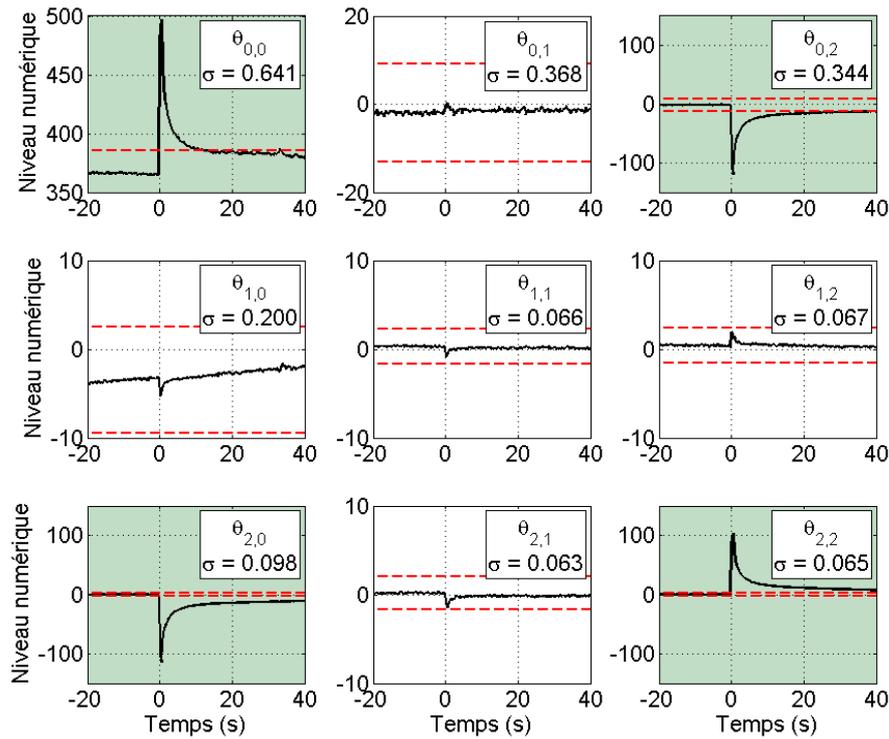


Figure 3.8 – Sélection des harmoniques à utiliser pour l'estimation. Les harmoniques avec un fond vert sont exploitées, les autres sont ignorées. Cependant, d'autres harmoniques de plus hautes fréquences sont également exploitées. Les lignes rouges en pointillés correspondent au seuil d'exploitabilité (ici 30 fois l'écart-type $\sigma_{m,n}$ de chaque harmonique).

à partir des harmoniques $\theta_{m,n}(t)$ des champs de température (Eq.2.73 p124) :

$$Y_{m,n}^*(t) = \ln \left(\frac{\theta_{m,n}^*(t)}{\theta_{2,2}^*(t)} \right)$$

Les observables sont ici au nombre de 3624. C'est la dimension du vecteur Y^* (Eq.2.75 p125). On dispose en effet de 24 harmoniques et de 151 mesures par harmonique (151 images thermiques) d'où $24 \times 151 = 3624$. Cependant, tous ces observables ne sont pas valides. En l'occurrence, l'algorithme en rejette 2185 soit 60% et rend ainsi invalide les 3 fréquences (0; 8), (8; 6) et (8; 8). La figure (Fig.3.9.a) ne présente en effet que 21 courbes. On dispose finalement de 1439 observables pour estimer 23 paramètres. Avec l'estimateur ENH, le problème inverse est linéaire si bien que la solution est explicite (Tab.3.1). On en déduit ensuite la valeur de a_x et a_y :

$$\begin{aligned} a_x &= 0,156 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{a_x} = 0,003 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{soit} \quad 1,5\% \\ a_y &= 0,163 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{a_y} = 0,002 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{soit} \quad 1,2\% \end{aligned}$$

Avec $l_x = N_x/d_x = 168/5,45 = 30,8 \text{ mm}$ avec $\sigma_{l_x} = 0,2 \text{ mm}$ et $l_y = N_y/d_y = 172/5,40 = 31,9 \text{ mm}$ avec $\sigma_{l_x} = 0,2 \text{ mm}$.

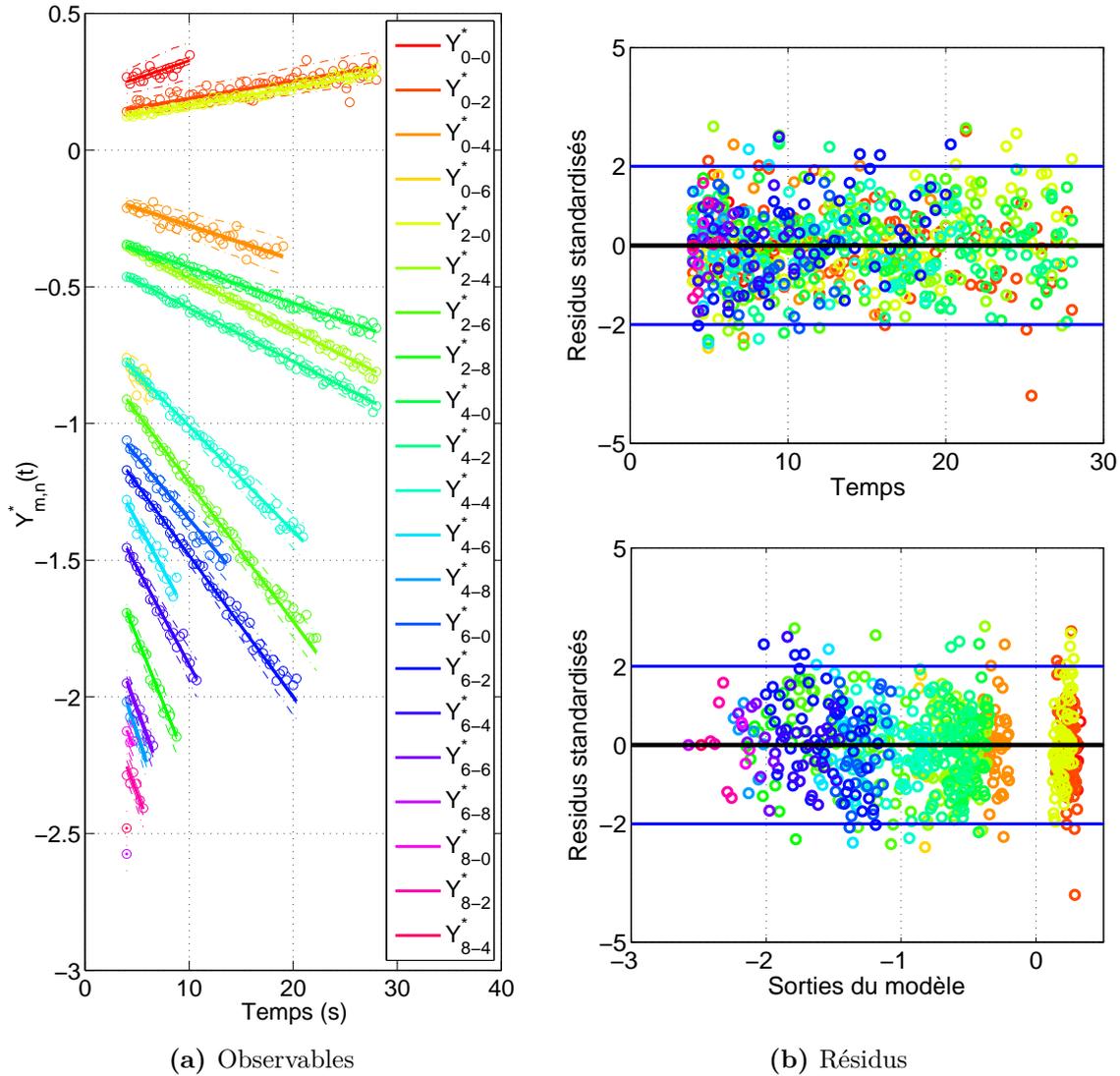


Figure 3.9 – Observables et résidus obtenus avec l’estimateur ENH sur un matériau polymère en fonction du temps. La figure (a) montre l’évolution des observables associés à chaque harmonique exploitée. La figure (b) présente les résidus standardisés (chaque résidu est divisé par son propre écart-type) en fonction du temps ou en fonction des sorties du modèle.

Paramètres	Solution	Ecart-type	Ecart-type (%)
$\tau_x [s^{-1}]$	$164,6 \times 10^{-6}$	$0,6 \times 10^{-6}$	0,38
$\tau_y [s^{-1}]$	$161,1 \times 10^{-6}$	$0,6 \times 10^{-6}$	0,35
$C_{0,0}$	0,204	0,005	2,24
$C_{2,0}$	0,1014	0,0007	1,34
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$C_{8,4}$	-2,00	0,02	1,11

Tableau 3.1 – Solution au problème d’estimation du matériau polymère

On retrouve la même valeur à 2 écarts-types près ce qui est rassurant puisque le matériau est sensé être isotrope. Toutefois cet écart entre les deux valeurs a_x et a_y est récurrent et son

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

caractère systématique suggère l'existence d'un biais dans la chaîne de traitement. La caméra n'y est probablement pour rien ici puisqu'en utilisant une caméra matricielle⁴, le même type d'écart apparaît. Si on ne constatait pas le même phénomène avec une caméra matricielle, on aurait pu suspecter le balayage de la caméra AGEMA. Du fait de cette technologie, les pixels de l'image ne correspondent pas au même instant ce qui peut déformer significativement les images thermiques (principalement aux temps courts). La cause de ce biais entre a_x et a_y est donc ailleurs. Il s'agit peut-être de variations de l'épaisseur de l'échantillon qui provoqueraient des non-uniformités en face avant.

La figure (Fig.3.9.b) présente les résidus standardisés en fonction du temps et en fonction des sorties du modèle. On ne distingue pas de signature particulière excepté pour certaines harmoniques, notamment la bleue, où une légère tendance est visible.

A partir des valeurs a_x et a_y , on peut calculer la diffusivité a du matériau en utilisant une moyenne pondérée. On obtient alors $a = 0,161 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ avec $\sigma_a = 0,002 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$. Une simple moyenne pondérée est possible car on peut montrer que la corrélation entre a_x et a_y est faible : $\text{corr}(a_x, a_y) = 0,01$. L'intervalle de confiance⁵ à 95 % calculé avec l'écart-type σ_a correspond à 3 % de la valeur de a .

Il est possible de tester la robustesse du résultat en modifiant par exemple l'harmonique de référence, l'horizon temporel utilisé ou le seuil de rejet κ (Tab.3.2). On constate sur ces résultats, que le choix de l'harmonique a très peu d'influence sur les valeurs a_x et a_y tant que l'on n'utilise pas les extrêmes, à savoir $\theta_{0,0}$ ou des « hautes » fréquences. De même, utiliser un autre seuil d'exploitabilité (κ de 20 ou 30) modifie le nombre d'observables utilisés, mais n'a pas une influence significative sur le résultat. Quant à la dernière ligne du tableau, les harmoniques utilisées sont moins nombreuses $(m, n) \in \{(0; 2), (0; 4), (2; 0), (2; 2), (2; 4), (4; 0), (4; 2), (4; 4)\}$. Ce changement provoque une légère augmentation des estimations, mais celle-ci est compatible avec l'écart-type. Globalement, on obtient donc des variations de l'ordre de l'écart-type.

On peut comparer la valeur de a obtenue avec les données de la littérature pour le polyamide et vérifier que la valeur n'est pas aberrante. Une première référence⁶ permet de calculer un intervalle de valeurs : $a \in [0,096; 0,170] [\text{mm}^2 \text{ s}^{-1}]$. Santos [5] fournit comme valeur $a = 0,147 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$.

4. Caméra Cedip Titanium SC7200MW - 320×256 pixels

5. Ou plutôt de « dispersion » car on ne maîtrise pas le biais.

6. Sur <http://www.matweb.com/search/DataSheet.aspx?bassnum=02500&group=General&ckck=1> (07-10-2011), on trouve $\lambda \in [0,200; 0,290] [\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}]$, $C \in [1,67; 1,70] [\text{J g}^{-1} \text{ K}^{-1}]$ et $\rho \in [1020; 1230] [\text{kg m}^{-3}]$

Référence + seuil	Solutions		Commentaires
$\theta_{p,q}$ et κ	$a_x [mm^2 s^{-1}]$	$a_y [mm^2 s^{-1}]$	
$\theta_{0,0}$ et $\kappa = 30$	0,1578	0,1640	Résidus signés Exploitation 1439/3624
$\theta_{2,0}$ et $\kappa = 30$	0,1564	0,1634	
$\theta_{2,2}$ et $\kappa = 30$	0,1564	0,1634	
$\theta_{4,2}$ et $\kappa = 30$	0,1564	0,1634	
$\theta_{4,4}$ et $\kappa = 30$	0,1558	0,1624	
$\theta_{6,6}$ et $\kappa = 30$	0,1578	0,1612	
$\theta_{0,0}$ et $\kappa = 20$	0,1554	0,1623	Résidus signés
$\theta_{2,2}$ et $\kappa = 20$	0,1554	0,1623	Exploitation 1940/3624
$\theta_{2,2}$ et $\kappa = 30$	0,1585	0,1660	Moins d'H. / Exploitation 955/1057

Tableau 3.2 – Variabilité de la solution en modifiant les paramètres d’entrée de l’algorithme. L’harmonique $\theta_{p,q}$ correspond à l’harmonique de référence utilisée par l’estimateur ENH. Le seuil correspond au rapport signal/bruit minimal pour qu’une harmonique soit déclarée exploitable. « Exploitation » précise le nombre d’observables utilisés par rapport au nombre d’observables disponibles.

2.3.2 Diffusivités thermiques du matériau composite

Le matériau composite dont on présente ici la caractérisation n’est pas exactement celui utilisé dans les bouteilles. L’échantillon est ici unidirectionnel (Fig.3.5.b) : toutes les fibres de carbone sont orientées dans la même direction ce qui a pour effet de générer une forte anisotropie thermique. On peut constater cela par la déformation très sensible des champs de température en ellipse (Fig.3.10). Dans le cas de la bouteille, les fibres sont croisées, ce qui a pour effet de réduire l’anisotropie thermique dans le plan de l’échantillon.

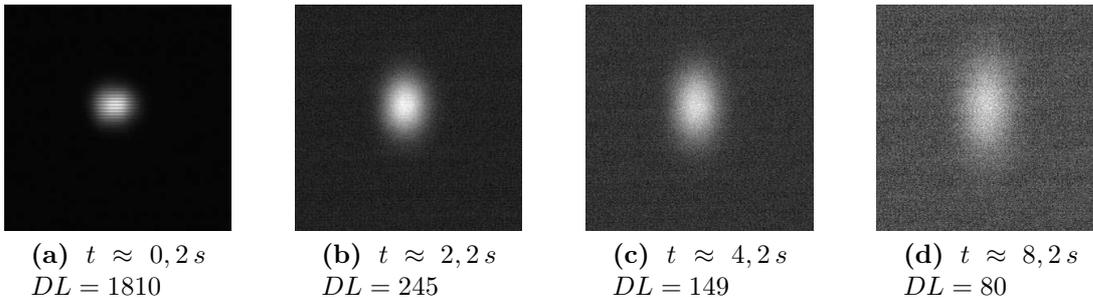


Figure 3.10 – Déformation du champ de niveau numérique du fait de la forte anisotropie du matériau composite.

La procédure pour estimer les diffusivités thermiques du matériau composite est rigoureusement identique à celle utilisée pour le polymère. L’estimateur utilisé ici est encore l’estimateur ENH. La figure (Fig.3.11) présente la diffusivité a_x (ligne continue) et a_y (ligne en pointillés) du composite, c’est à dire les deux diffusivités thermique dans le plan de l’échantillon. Les écarts-types sur les résultats correspondent aux courbes bleues. L’abscisse correspond à l’instant de la première image thermique exploitée, noté t_d . Par exemple, si on dispose de 30 s d’acquisition, une valeur t_d de 7 s signifie qu’on exploite uniquement les 23 dernières secondes de données. On

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

peut ainsi évaluer le biais généré par l'hypothèse de linéarité « niveau numérique-température » (§5.4.6 p140). Cette hypothèse est ici nécessaire puisque ces résultats ont été obtenus avec la caméra infrarouge AGEMA qui n'a pas été calibrée. Par ailleurs, les harmoniques utilisées ici sont $(m, n) \in \{(2; 2), (2; 4), (2; 6), (4; 2), (4; 4), (4; 6), (6; 2), (6; 4), (6; 6)\}$.

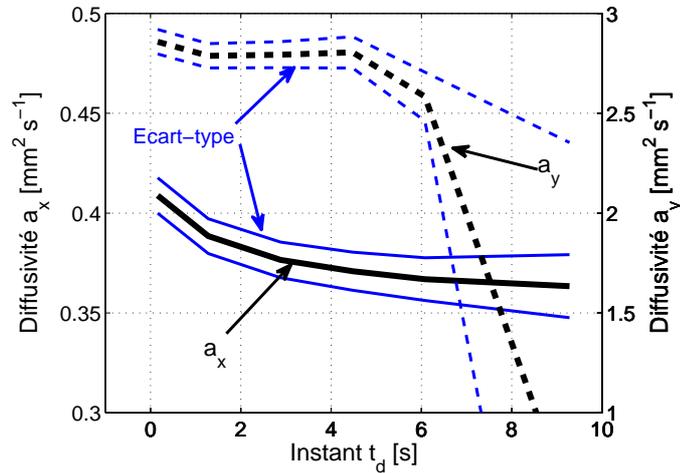


Figure 3.11 – Diffusivités thermiques du composite dans le plan en fonction des images exploitées et estimés par une méthode flash face avant avec l'estimateur ENH. La variable t_d correspond à l'instant de la première image exploitée. En d'autres termes, toutes les images qui précèdent l'instant t_d sont rejetées.

On constate tout d'abord que la diffusivité thermique a_x évolue de manière non négligeable selon que l'on exploite, ou non, les images des premières secondes. On a en effet $a_x = 0,41 mm^2 s^{-1}$ pour $t_d \approx 0 s$ avec un écart-type $\sigma_{a_x} = 0,01, mm^2 s^{-1}$, et $a_x \approx 0,36 mm^2 s^{-1}$ pour $t_d \approx 10 s$. Quant à la variation de a_y , elle est plus faible aux temps courts. Sa valeur vaut environ $a_y = 2,80 mm^2 s^{-1}$ avec un écart-type $\sigma_{a_y} = 0,07 mm^2 s^{-1}$.

Par ailleurs, les harmoniques exploitées ont été choisies telles que m et n soient non nuls. Les autres présentent en effet des dérives aux temps longs qui rendent difficile l'estimation des diffusivités. L'estimateur ENH est mal adapté à l'étude des dérives sur les harmoniques puisqu'il ne travaille que sur le rapport de celles-ci. Les dérives sont probablement dues à des fluctuations dans l'environnement radiatif. L'échantillon composite possède en effet une émissivité plus faible que celle du polymère ce qui augmente la sensibilité des résultats à l'environnement. Quelques précautions supplémentaires, au niveau du dispositif et/ou du traitement numérique, seraient nécessaires pour améliorer la précision des résultats.

Finalement, la figure (Fig.3.11) suggère que rejeter les 4 premières secondes d'acquisition ($t_d = 4 s$) est un bon compromis. Au delà, les harmoniques suivant y ont disparu et ne permettent plus d'estimer a_y correctement. Pour des valeurs plus faibles de t_d , le biais sur a_x est trop important. On a donc :

$$\begin{aligned} a_x &= 0,37 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{a_x} = 0,01 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{soit} \quad 2,7 \% \\ a_y &= 2,80 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{a_y} = 0,07 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{soit} \quad 2,5 \% \end{aligned}$$

Enfin, la diffusivité dans l'épaisseur a_z n'a pas été estimée avec une excitation impulsionnelle à cause de l'épaisseur trop importante de l'échantillon ($l_z \approx 1 \text{ cm}$). Aussi, une excitation de type échelon a été utilisée. Ce type d'excitation permet d'apporter plus d'énergie au matériau sans pour autant le dégrader. Avec une puissance de 5 W pendant 30 s , on apporte $Q = 150 \text{ J}$, alors qu'une excitation impulsionnelle de 10 ms avec une puissance de 100 W n'apporte que $Q = 1 \text{ J}$. A partir des mesures par thermographie en face arrière, on obtient la diffusivité avec le champ moyen et en utilisant le modèle évoqué au chapitre 2 (§3.2.5 p92). La diffusivité obtenue vaut :

$$a_z = 0,36 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1} \quad \text{avec} \quad \sigma_{a_z} = 0,04 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$$

2.4 Transfert thermique dans les parois

On peut maintenant utiliser les propriétés thermophysiques pour définir un modèle de transfert dans les parois de la bouteille, en vue d'estimer les transferts thermiques gaz-paroi lors du remplissage.

2.4.1 Modèle direct

En supposant que les transferts thermiques gaz-paroi ne présentent pas de variation spatiale importante, on peut représenter la paroi comme un mur monodimensionnel (Fig.3.12). On retrouve sur cette figure les deux matériaux : polymère et composite, caractérisés par les propriétés thermophysiques ρC_p et a_p pour le liner polymère et ρC_c , a_c pour le composite. Par ailleurs, les épaisseurs relatives des deux matériaux sur la figure correspondent approximativement à la paroi réelle. Les valeurs des différents paramètres utilisées dans la suite sont précisées dans le tableau (Tab.3.3). Les températures $T_{in}(t)$ et $T_{out}(t)$ sont les températures de paroi interne et externe. Les transferts thermiques avec l'environnement, à température relative T_{ext} , sont pris en compte avec un coefficient h_{ext} . Quant à $T_p(t)$, il s'agit de la température à l'interface polymère-composite. Le caractère isolant du polymère et du composite suivant x , nous permet de négliger la résistance de contact entre les deux matériaux. Enfin, l'axe x ici correspond à l'axe z pour le problème d'estimation de paramètres. La diffusivité thermique a_c du composite est donc égale à la diffusivité notée précédemment a_z .

En supposant les propriétés thermophysiques des matériaux indépendantes de la température, et en notant T la température relative par rapport à la température initiale, l'équation

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

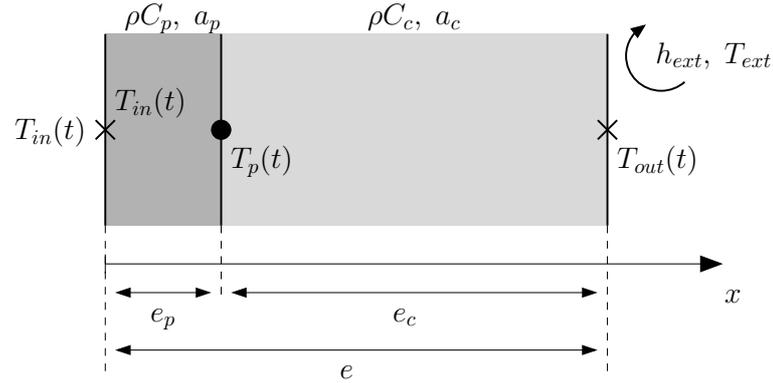


Figure 3.12 – Modélisation des transferts dans la paroi des bouteilles. Les observables sont fournis par le thermocouple (cercle noir) placé à l'interface des deux matériaux.

Paramètres	Valeurs	Unités
ρC_p	2×10^6	$J m^{-3} \text{ } ^\circ C^{-1}$
a_p	0,16	$mm^2 s^{-1}$
λ_p	0,32	$W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$
ρC_c	$1,2 \times 10^6$	$J m^{-3} \text{ } ^\circ C^{-1}$
$a_c (= a_z)$	0,36	$mm^2 s^{-1}$
λ_c	0,43	$W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$

Paramètres	Valeurs	Unités
e_p	0,4	cm
e_c	4	cm
h_{ext}	10	$W m^{-2} K^{-1}$
T_{ext}	0	$^\circ C$
T_{init}	0	$^\circ C$

Tableau 3.3 – Valeurs des paramètres du modèle de transfert thermique dans les parois des bouteilles d'hydrogène

de la chaleur dans chaque solide est linéaire et le système d'équations s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_p \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 \leq x \leq e_p \quad (\text{Dans le polymère}) \quad (3.6a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_c \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 \leq x \leq e_c \quad (\text{Dans le composite}) \quad (3.6b)$$

$$\lambda_p \frac{\partial T}{\partial x}(x=e_p^-) = \lambda_c \frac{\partial T}{\partial x}(x=e_p^+) \quad (\text{Condition à l'interface}) \quad (3.6c)$$

$$T(x=0,t) = T_{in}(t) \quad \text{pour } x = 0 \quad (3.6d)$$

$$-\lambda_c \frac{\partial T}{\partial x} = h_{ext}(T - T_{ext}) \quad \text{pour } x = e = e_c + e_p \quad (3.6e)$$

$$T = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (3.6f)$$

Exemple : Linéarité du système

Le système, décrit par les équations ci-dessus, est linéaire par rapport à $T_{in}(t)$ si $T_{ext} = 0$. Pour le montrer, on considère deux solutions $T_1(x, t)$ et $T_2(x, t)$ obtenues lorsque l'on impose respectivement la température $T_{in}^{(1)}(t)$ et $T_{in}^{(2)}(t)$. En sommant les deux systèmes d'équations, on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(T_1 + T_2)}{\partial t} &= a_p \frac{\partial^2(T_1 + T_2)}{\partial x^2} && \text{pour } 0 \leq x \leq e_p \\ \frac{\partial(T_1 + T_2)}{\partial t} &= a_c \frac{\partial^2(T_1 + T_2)}{\partial x^2} && \text{pour } 0 \leq x \leq e_c \\ \lambda_p \frac{\partial T_1 + T_2}{\partial x} (x=e_p^-) &= \lambda_c \frac{\partial T_1 + T_2}{\partial x} (x=e_p^+) \\ T_1(x=0,t) + T_2(x=0,t) &= T_{in}^{(1)}(t) + T_{in}^{(2)}(t) && \text{pour } x = 0 \\ -\lambda_c \frac{\partial(T_1 + T_2)}{\partial x} &= h_{ext} (T_1 + T_2 - 2T_{ext}) && \text{pour } x = e \\ T &= 0 && \text{pour } t = 0 \end{aligned}$$

Ainsi la superposition $(T_1 + T_2)_{(x,t)}$ est encore une solution seulement si $T_{ext} = 0$, c'est à dire si la température extérieure est égale à la température initiale du matériau.

Remarque sur la condition limite de température imposée

Par rapport au modèle 0D de la figure (Fig.3.2), la condition limite sur la paroi interne de la bouteille a été remplacée ici par une condition limite de flux imposé, plus générale qu'un simple coefficient d'échange (§1 p161). La définition du coefficient d'échange et de la température de référence du fluide pose quelques difficultés et l'utilisation d'un tel modèle n'est pas nécessairement pertinent ici.

Avec les hypothèses utilisées ici (linéaire et monodimensionnel), on peut utiliser le formalisme des quadripôles [6] pour déterminer la solution de ce système dans l'espace de Laplace. Il s'agit d'une extension de l'analogie électrique (valable en stationnaire) aux transferts instationnaires. L'application de la transformée de Laplace à l'équation de la chaleur en monodimensionnel permet d'appréhender les transferts thermiques de façon similaire à ce que l'on peut faire en automatique, c'est à dire en manipulant les entrées/sorties du système. C'est une des caractéristiques de l'équation de la chaleur que de pouvoir utiliser ce formalisme. Un mur d'épaisseur e (Fig.3.13), est alors vu comme un système à 2 entrées et 2 sorties. Soit $\theta_{in}(p)$ et $\theta_{out}(p)$ les températures à gauche et à droite de l'échantillon et $\phi_{in}(p)$ et $\phi_{out}(p)$ les densités de flux, on peut écrire :

$$\begin{bmatrix} \theta_{in} \\ \phi_{in} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_{out} \\ \phi_{out} \end{bmatrix} \tag{3.7}$$

Avec $\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cosh(\sqrt{\gamma}) & \frac{e}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sinh(\sqrt{\gamma}) \\ \frac{\lambda}{e} \sqrt{\gamma} \sinh(\sqrt{\gamma}) & \cosh(\sqrt{\gamma}) \end{bmatrix}$ et $\gamma = \frac{pe^2}{a}$ et $a = \frac{\lambda}{\rho C}$

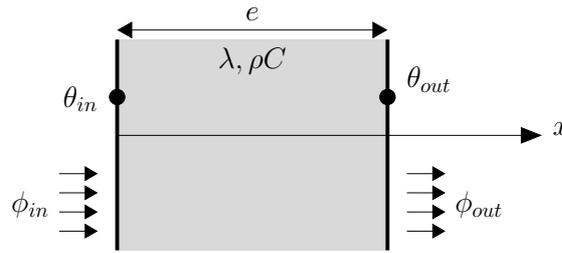


Figure 3.13 – Mur monodimensionnel caractérisé par ses entrées $[\theta_{in}, \phi_{in}]^T$ et ses sorties $[\theta_{out}, \phi_{out}]^T$.

Un des intérêts de la méthode des quadripôles est d'obtenir la matrice de transfert d'un ensemble de systèmes placés en série, en multipliant les matrices de chaque système. On obtient ainsi dans le cas de la paroi de la bouteille (voir aussi [6, p.19]) :

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} \theta_{in} \\ \phi_{in} \end{bmatrix} &= \overbrace{\begin{bmatrix} A_p & B_p \\ C_p & D_p \end{bmatrix}}^{\text{Polymère}} \overbrace{\begin{bmatrix} A_c & B_c \\ C_c & D_c \end{bmatrix}}^{\text{Composite}} \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{h} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}^{\text{Convection}} \begin{bmatrix} \theta_{ext} \\ \phi_{ext} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{h} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_{ext} \\ \phi_{ext} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$\text{Avec} \quad \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_p A_c + B_p C_c & A_p B_c + B_p D_c \\ C_p A_c + D_p C_c & C_p B_c + D_p D_c \end{bmatrix}$$

Le problème direct consiste à exprimer les observables $\theta_p(p)$ (la température à l'interface polymère-composite) en fonction de l'inconnue $\theta_{in}(p)$. Pour cela, on exprime $[\theta_p, \phi_p]^T$ en fonction de $[\theta_{ext}, \phi_{ext}]^T$

$$\begin{bmatrix} \theta_p \\ \phi_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_c & B_c \\ C_c & D_c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{h} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_{ext} \\ \phi_{ext} \end{bmatrix} \tag{3.9}$$

Sachant que $\theta_{ext} = 0$, on obtient à partir de (Eq.3.9) et (Eq.3.8), une relation entre θ_{in} et θ_p :

$$\theta_p = \frac{(A_c + B_c h)}{(A + B h)} \theta_{in} = H_{(p)} \theta_{in} \tag{3.10}$$

Connaissant θ_{in} , on a ainsi l'expression « analytique » de θ_p .

2.4.2 Filtrage passe-bas de la paroi

L'estimation de la température θ_{in} à partir de θ_p est un problème mal-posé et « d'autant plus » lorsque le polymère est thermiquement épais. Pour le constater, on peut calculer le gain $G(f)$ de la fonction de transfert en fonction de la fréquence en posant $p = 2i\pi f$ (Fig.3.14) :

$$G(f) = \left| \frac{\theta_p(2i\pi f)}{\theta_{in}(2i\pi f)} \right| = |H(2i\pi f)| \tag{3.11}$$

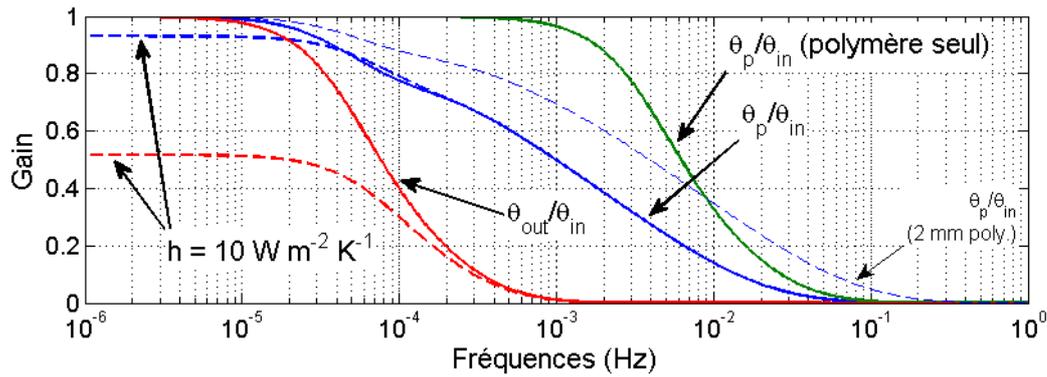


Figure 3.14 – Gain de la fonction de transfert de la paroi de la bouteille. Les lignes continues correspondent à $h = 0 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ (paroi isolée de l’environnement). La ligne fine en pointillés bleus est présentée à titre indicatif. Elle correspond à la fonction de transfert θ_p/θ_{in} avec une épaisseur de polymère de 2 mm au lieu de 4 mm .

Parmi les lignes continues, celle qui nous intéresse plus particulièrement est celle du milieu (en bleue) et notée θ_p/θ_{in} . Il s’agit du gain $G(f)$ entre la température interne θ_{in} et à la température à l’interface θ_p . Elle vaut 1 pour les basses fréquence et 0 pour les hautes fréquences, ce qui correspond au comportement d’un filtre passe-bas. Du fait des 4 mm de polymère, les fréquences supérieures à $f = 10^{-1} \text{ Hz}$ sont bloquées. Par ailleurs, le gain de $G(f)$ est naturellement supérieur au gain de θ_{out}/θ_{in} puisque celle-ci intègre en plus les 4 cm de composite. On constate ainsi que l’atténuation des fréquences est beaucoup plus forte. Le gain est sensiblement nul pour $f = 10^{-3} \text{ Hz}$ alors qu’il vaut encore 0,5 pour la température θ_p .

A titre de comparaison, la figure présente aussi le gain que l’on aurait si le composite n’était pas présent, c’est à dire si la paroi était uniquement composée du polymère (la courbe verte appelée « θ_p/θ_{in} - polymère seul). Elle montre que la présence du composite atténue davantage les amplitudes de θ_p . Le composite joue le rôle d’amortisseur de la température $T_p(t)$ ce qui dégrade l’estimation de T_{in} .

Les courbes en trait continu correspondent au cas où la paroi est supposée isolée de son environnement ($h = 0 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$). Les courbes en pointillés correspondent au cas où $h = 10 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$. On remarque que le coefficient d’échange influence uniquement les basses fréquences des différentes fonctions. Par exemple, le gain de $\approx 0,5$ de la fonction de transfert θ_{out}/θ_{in} lorsque $f \rightarrow 0$, signifie que l’amplitude des oscillations de basse fréquence est divisée par un facteur 2. Cette figure montre également qu’il n’est pas nécessaire, pour nous ici, de considérer le coefficient d’échange h , puisque les fréquences auxquelles on va travailler sont supérieures à $f = 10^{-4} \text{ Hz}$. Le remplissage est relativement rapide ($\approx 1 \text{ min}$) et l’épaisseur de composite vaut 4 cm , si bien que l’influence de h est négligeable.

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

Enfin, le gain $G(f)$ lorsque l'épaisseur de polymère est seulement de 2 mm est également présenté (ligne en pointillés bleus). Cela repousse légèrement les fréquences accessibles à environ $f > 0,2\text{ Hz}$, mais ne change pas le caractère mal-posé du problème. En pratique, l'épaisseur du polymère n'est pas constante mais présente une dispersion relativement importante ($2\text{ mm} \leq e_p \leq 6\text{ mm}$).

2.4.3 Contenu fréquentiel du gaz dans la bouteille

La paroi de la bouteille filtre les variations de la température de la surface interne empêchant ainsi partiellement son estimation. Cependant, l'effet filtre n'est pas nécessairement problématique, et notamment si la variation de la température de paroi ne présente pas de telles fréquences.

La figure (Fig.3.15) montre l'évolution de la température moyenne adimensionnée (en pointillés) au centre de la bouteille lors d'un essai de remplissage réalisé au CRC⁷. La pression de consigne vaut 80 bar . La pression du réservoir vaut 145 bar . La durée du remplissage est de 50 s et le débit massique est d'environ 150 g/s . La température a été obtenue avec une moyenne spatiale des 5 thermocouples (a) à (e) (Fig.3.4) et d'une moyenne temporelle pour baisser la fréquence d'échantillonnage à 5 Hz (initialement à 25 Hz). La durée du remplissage est de 60 s . Par ailleurs, la transformée de Fourier est présentée sur la figure (b) après avoir appliqué un fenêtrage de Hanning.

On retrouve sur ces mesures le même comportement que celui obtenu avec le modèle 0D (Fig.3.3), à savoir une augmentation rapide dès les premières secondes puis une relative stagnation et enfin un refroidissement lent du gaz. L'allure ne correspond ni exactement au modèle de gaz parfait, ni aux résultats obtenus avec les tables thermodynamiques de l'azote. Cela vient sans doute en partie du fait que les conditions à l'entrée de la bouteille du modèle 0D ne correspondent pas à la situation réelle. Dans le dispositif réel, la chaîne de remplissage est en effet plus complexe que la modélisation qui en est faite.

Quant au spectre fréquentiel, on distingue une chute relativement brutale de l'amplitude (d'une petite décade) entre $f = 0,2\text{ Hz}$ et $f = 0,3\text{ Hz}$. Cela correspond approximativement à la fréquence limite accessible « derrière » 2 mm de polymère.

2.4.4 Synthèse

L'analyse des deux sections précédentes montre que le problème est mal-posé. On peut en effet superposer à θ_{in} n'importe quel signal sinusoïdal de fréquence suffisamment haute, sans

7. Centre de Recherche Claude Delorme - Air Liquide

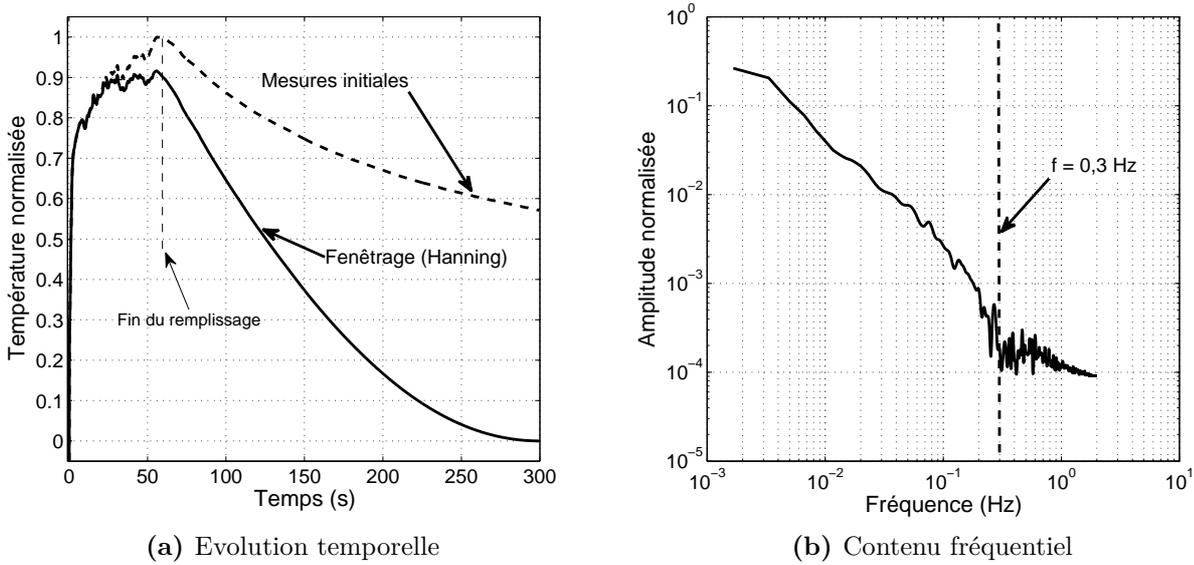


Figure 3.15 – Evolution de la température moyenne au centre de la bouteille en fonction du temps (suite à l’ouverture de la vanne entre la bouteille et le réservoir) et son contenu fréquentiel après un fenêtrage de Hanning.

que cela ait une influence sur θ_p . Il existe ainsi une infinité de solutions au problème. Sa résolution nécessite donc une méthode de régularisation. 3 approches d’estimation sont présentées par la suite. Elles se distinguent par le type de paramétrisation et par la façon d’introduire des contraintes sur la forme de la solution.

Remarque sur l’utilisation de la caméra infrarouge

Il a été question à un moment d’utiliser la thermographie infrarouge sur la paroi externe pour estimer la température θ_{in} . Cela est possible sur certains types de bouteille qui présentent des parois de faible épaisseur thermique (bouteille en acier, ou en composite de faible épaisseur), mais n’est pas envisageable ici. La paroi a une période de coupure à -3 dB de 7 h (et de 100 s à -20 dB) et un temps caractéristique de diffusion de 1 h.

2.5 Estimation dans la base de sinus

L’approche proposée ici s’appuie directement sur l’expression analytique de θ_p (Eq.3.10). Cette relation est utilisée pour déterminer la fonction θ_{in} de façon à ce que θ_p « colle » aux observables (au sens de l’estimateur). Pour régulariser ce problème, on introduit de l’information externe au niveau du choix de la base de fonctions utilisée pour représenter θ_{in} et au niveau des valeurs des composantes dans cette base.

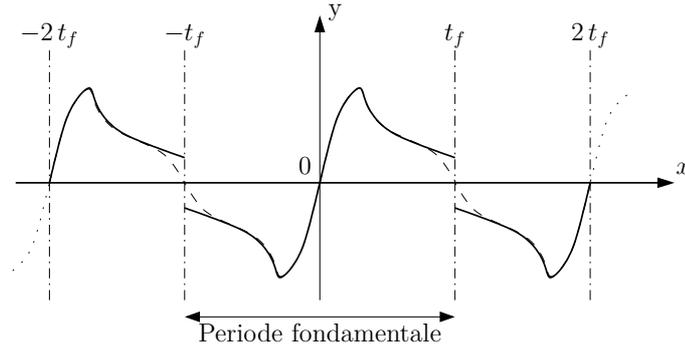


Figure 3.16 – Prolongement de T_{in} en une fonction impaire et effet de la troncature des fréquences.

2.5.1 Choix de la base de fonctions

En supposant que la bouteille est initialement au repos, la température initiale de la paroi interne vaut T_{ext} (que l'on suppose nulle en travaillant uniquement avec des températures relatives). Sachant que $T_{in}(t)$ est une fonction nulle en $t = 0$, elle peut s'exprimer dans une base de fonctions sinus. En effet, on peut prolonger cette fonction en une fonction périodique impaire et continue (Fig.3.16). Le paramètre t_f correspond à l'horizon temporel sur lequel on souhaite estimer T_{in} . Le problème étant monodimensionnel, les fonctions $X_i(x)$ et $Y_j(y)$ (Eq.3.4 p163) sont nulles pour $i, j > 0$. Ainsi, T_{in} et sa transformée θ_{in} s'écrivent :

$$T_{in}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \beta_k Z_k(t) \quad \text{avec} \quad Z_k(t) = \sin(2\pi f_k t) \quad \text{et} \quad f_k = \frac{k}{2t_f} \quad (3.12)$$

$$\theta_{in}(p) = \sum_{k=1}^{\infty} \beta_k Z_k(p) \quad \text{avec} \quad Z_k(p) = \frac{\omega_k}{p^2 + \omega_k^2} \quad \text{et} \quad \omega_k = \frac{\pi k}{t_f} \quad (3.13)$$

On prend dans la suite $t_f = 5 \text{ min}$ ce qui permet de reproduire la montée en température pendant le remplissage ainsi qu'une partie du refroidissement.

2.5.2 Troncature de la base de fonctions

Comme il n'est pas envisageable d'estimer une infinité de paramètres β_k , on tronque la base de fonctions Z_k , c'est à dire la série à un ordre suffisamment élevé pour ne pas perturber l'estimation. L'évolution de la température du gaz dans la bouteille a suggéré que la fréquence limite vaut environ $f_{max} = 0,2 \text{ Hz}$, ce qui correspond à l'indice $k_{max} = 2t_f f_{max} = 120$ d'après la théorie de Shannon. Il s'agit en effet d'une borne supérieure des fréquences possibles : la paroi étant un système thermique linéaire, on ne peut pas retrouver dans le matériau des fréquences supérieures à celles de l'excitation.

Remarque sur le paramètre t_f

Le paramètre t_f ne correspond pas nécessairement à la dernière mesure. Avec la base de sinus, la fonction T_{in} vaut 0 en $t = 0$ mais aussi en $t = t_f$ ce qui génère une petite aberration comme on le remarque sur la figure

(Fig.3.16) avec la courbe en pointillés.

2.5.3 Régularisation de la solution

L'estimation des 120 paramètres β_k n'est possible que si toutes les harmoniques ont des sensibilités suffisantes. Comme ce n'est pas nécessairement le cas, il est préférable de régulariser davantage la solution en forçant l'amplitude des fréquences à 0 si l'information contenue dans les observables n'est pas suffisante. Pour introduire cette contrainte, on peut utiliser l'estimateur MAP mais il n'est pas aisé de définir l'écart-type sur chaque paramètre β_k . On préfère ici utiliser une régularisation de type Tikhonov [7].

Lorsqu'une fonction est \mathbb{C}^k , les coefficients de la série de Fourier d'indice n tendent vers 0 plus vite que $1/n^k$ à partir d'un certain rang. On s'inspire de ce résultat pour définir une contrainte à partir d'un seul paramètre C qui pénalise davantage les hautes fréquences que les basses. Le terme de pondération caractéristique de la régularisation de Tikhonov est ajouter à la fonctionnelle de l'estimateur MLE :

$$J(\beta) = (Y^* - Y(\beta))^T W (Y^* - Y(\beta)) + \beta^T Q \beta \quad \text{et} \quad (3.14)$$

Avec $Q_{i,i} = \frac{i^2}{C}$ qui pénalise davantage les hautes fréquences.

2.5.4 Expression des sorties du modèle

Les observables Y^* correspondent aux mesures de température fournies par un thermocouple dans la paroi. Le modèle direct est exprimé dans l'espace de Laplace si bien qu'il faut calculer la transformée inverse de Laplace de θ_{in} pour déterminer les sorties $Y(\beta)$ du modèle. Il existe plusieurs algorithmes pour cela. On peut citer notamment l'algorithme de Stehfest [6, 8], de Zakian [9], par transformée de Fourier [10, 11] ou de De Hoog [11, 12]. Les trois premiers algorithmes montrent des performances très différentes suivant le type de fonction considérée. On souhaite inverser des fonctions périodiques, ce que les algorithmes de Stehfest et de Zakian semblent avoir des difficultés à réaliser, contrairement à l'algorithme par transformée de Fourier. Cependant, ce dernier présente des oscillations parfois très importantes aux temps courts si bien qu'en pratique, on combine à la fois les algorithmes de Zakian et par transformée de Fourier.

Avec ces trois algorithmes (Stehfest, Zakian, Fourier), on peut exprimer la température à l'interface $T_p(t)$ en fonction de sa transformée $\theta_p(p)$ de la façon suivante :

$$T_p(t) = A(t) \sum_{m=0}^{N_{inv}} \text{Re} \left(K_m \theta_p(a_m(t)) \right) \quad (3.15)$$

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

Avec $A(t)$ une quantité qui dépend éventuellement du temps, K_m un coefficient complexe, $a_m(t)$ un coefficient complexe qui dépend éventuellement du temps et N_{inv} le nombre de termes nécessaires au calcul de la transformée inverse. Les valeurs de ces paramètres dépendent de l'algorithme utilisé.

On connaît une relation entre $\theta_p(p)$ et $\theta_{in}(p)$ (Eq.3.10). En l'injectant dans (Eq.3.15), ainsi que (Eq.3.13), on a :

$$\begin{aligned}
 T_p(t) &= A(t) \sum_{m=0}^{N_{inv}} \operatorname{Re} \left(K_m \underbrace{\theta_p(a_m(t))}_{=H(a_m(t))\theta_{in}(a_m(t))} \right) \\
 &= A(t) \sum_{m=0}^{N_{inv}} \operatorname{Re} \left(K_m H(a_m(t)) \left[\sum_{k=1}^{k_{max}} \beta_k Z_k(a_m(t)) \right] \right) \\
 &= \sum_{k=1}^{k_{max}} \beta_k \left[A(t) \sum_{m=0}^{N_{inv}} \operatorname{Re} \left(K_m H(a_m(t)) Z_k(a_m(t)) \right) \right] \tag{3.16}
 \end{aligned}$$

La température à l'interface $T_p(t)$ à un instant t dépend ainsi linéairement des paramètres β . La sortie du modèle $Y(\beta)$ peut donc s'écrire :

$$Y(\beta) = X \beta \tag{3.17}$$

$$\text{Avec } X_{i,j} = A(t_i) \sum_{m=0}^{N_{inv}} \operatorname{Re} \left(K_m H(a_m(t_i)) Z_j(a_m(t_i)) \right)$$

Chaque colonne de la matrice des sensibilités X contient la réponse du système à l'interface à l'excitation sinusoïdale à la fréquence $f_k = k/(2t_f)$.

2.5.5 Résolution du problème inverse

Le problème inverse est linéaire, la solution est explicite et donnée par l'expression (Eq.1.74 p38) avec $\tilde{\beta} = 0$. Les résultats présentés ici (Fig.3.17) sont issus du même essai de remplissage que pour l'analyse fréquentielle de la température dans le gaz (§2.4.3 p181). Les 4 figures (a) à d) correspondent aux 4 thermocouples de la figure (Fig.3.4). A partir des 5 premières minutes de mesure (soit environ 580 mesures de température à 2 Hz) après le début du remplissage, on estime la température $T_{in,k}(t)$ correspondant à la température de la paroi interne « en vis à vis » du thermocouple k . Par ailleurs, le titre de chaque sous figure mentionne l'épaisseur de polymère⁸ e_p car celle-ci n'est pas uniforme du fait du processus de fabrication.

Les mesures de température sont symbolisées avec des cercles rouges (seules 10% des me-

8. La cartographie des épaisseurs du polymère de la bouteille instrumentée a été réalisée avec une technique de tomographie par l'intermédiaire des fabricants de la bouteille, EADS Composite Aquitaine.

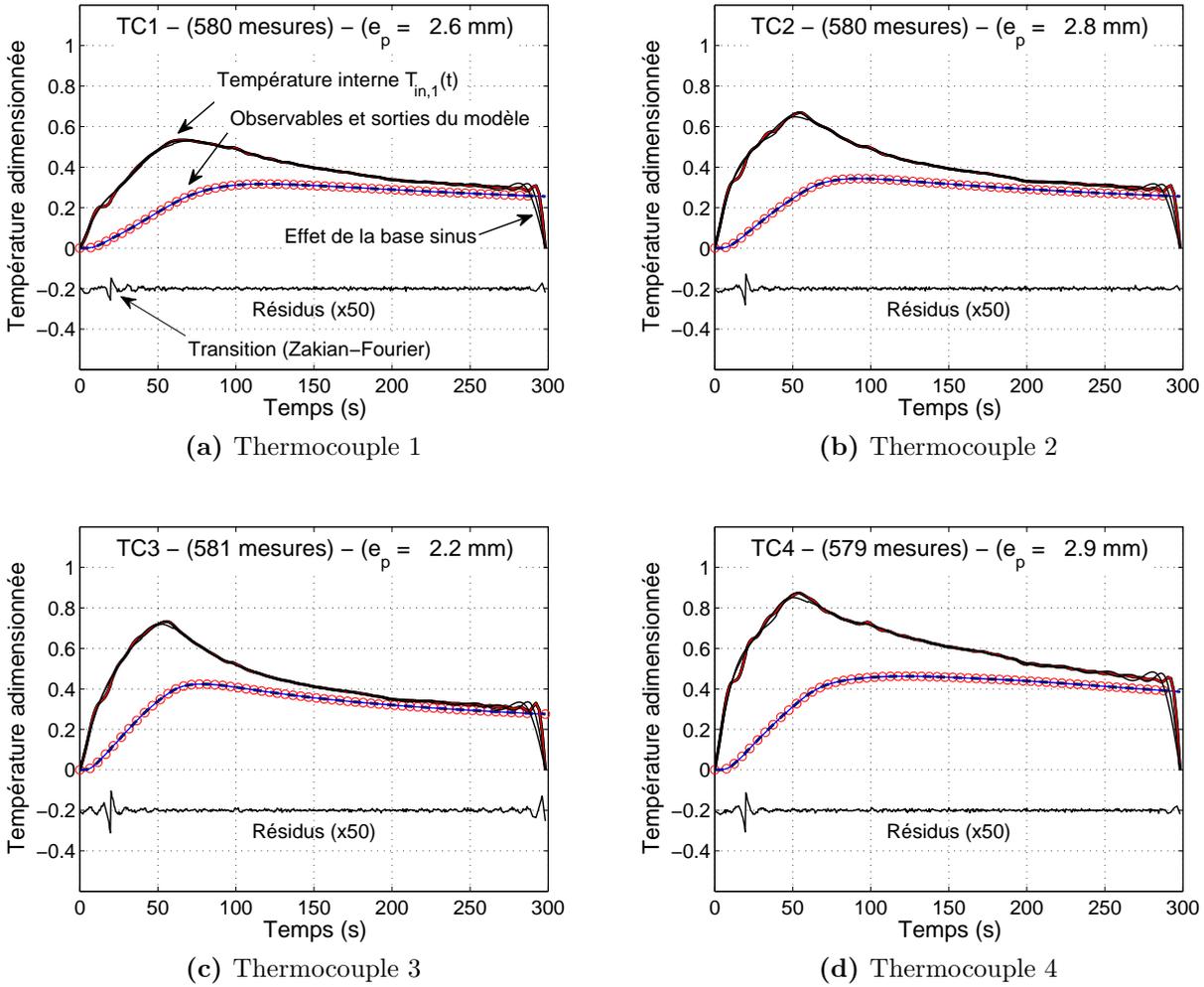


Figure 3.17 – Estimation de la température de paroi interne à partir des mesures de température dans la paroi fournies par les 4 thermocouples 1, 2, 3 et 4 de la figure (Fig.3.4). La température de référence n'est pas identique à celle utilisée pour le gaz au centre de la bouteille (Fig.3.15).

sures sont affichées). Les sorties du modèle sont superposées aux mesures et représentées avec une ligne discontinue noire. Quant aux estimations $T_{in,k}(t)$, elles correspondent aux courbes continues noires. Les résidus sont décalés de 0,2 vers le bas et multipliés par 50 pour des questions de lisibilité. Les écarts-types de l'estimation de $T_{in,k}(t)$ ne sont pas présentés car ils sont dans l'épaisseur du trait. Ils sont calculés avec l'expression suivante (Eq.1.56 p32) :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \left[X_{\beta} W X_{\beta} + Q \right]^{-1} X_{\beta}^T W X_{\beta} \left[X_{\beta} W X_{\beta} + Q \right]^{-1}$$

On constate que la température de paroi interne augmente vers le fond de la bouteille ce qui suggère que le flux de chaleur transmis du gaz à la paroi y est plus important. L'augmentation de température au niveau du thermocouple 4 peut être due à l'épaisseur du polymère qui est légèrement plus élevée. L'estimation de ϕ_{in} permettra de trancher.

3.2 Application au remplissage des bouteilles d'hydrogène haute pression

Plusieurs courbes T_{in} sont superposées sur la figure (Fig.3.17) . Elles correspondent aux estimations obtenues en modifiant les paramètres de l'algorithme d'estimation. On fait notamment varier le nombre d'harmoniques k_{max} entre 20 et 60. Cette valeur est très inférieure à la valeur limite de 120 estimée précédemment, mais ajouter des harmoniques ne modifie pas significativement l'estimation. On fait également varier le type et la valeur des contraintes. Avec ces modifications, on décèle une variabilité très supérieure à l'écart-type de la solution, mais qui ne modifie pas l'interprétation que l'on peut faire des résultats et les conclusions qu'on en tire.

Quant aux résidus, ils font apparaître une petite oscillation de faible amplitude excepté lors de la transition entre l'algorithme de transformée inverse de Zakian et de Fourier. Ces oscillations pourraient sans doute être réduites en paramétrant mieux ces deux algorithmes d'inversion ou en utilisant un autre algorithme plus performant. Quant aux oscillations à proximité de $t = t_f$, elles sont dues à la paramétrisation de la fonction sur une base de sinus. On pourrait les faire disparaître en rejetant les derniers observables ou en augmentant légèrement t_f .

2.5.6 Estimation de la densité de flux

En complément de la température $T_{in}(t)$, on peut également estimer la densité de flux $\phi_{in}(t)$. Une première approche peut être d'exprimer ϕ_{in} en fonction de θ_{in} à partir de l'expression (Eq.3.8) :

$$\phi_{in} = \frac{C + D h}{A + B h} \theta_{in} \quad (3.18)$$

Il est cependant aussi simple de reprendre l'algorithme d'estimation de $T_{in}(t)$ en changeant la fonction de transfert $H(p)$ par $P(p)$ définie comme le rapport de θ_p et ϕ_{in} :

$$\theta_p(p) = \underbrace{\frac{A_c + B_c h}{C + D h}}_{P(p)} \phi_{in} = P \phi_{in} \quad (3.19)$$

La figure (Fig.3.18) montre les densités de flux de chaleur $\phi_{in,k}(t)$ au niveau des thermocouples 1 à 4 (Fig.3.4) estimées avec plusieurs configurations de l'algorithme. Comme pour la température, les écarts-types d'estimation sont dans l'épaisseur du trait. Les densités de flux sont de l'ordre de 1 kW.m^{-2} . Comme pour les températures $T_{in,k}(t)$, la densité de flux augmente à mesure qu'on se rapproche du fond de la bouteille. L'augmentation est sensible puisqu'en valeur, la densité de flux est multipliée par 2. Cela confirme le résultat pressenti sur l'évolution de température.

Le flux de chaleur transmis résulte de l'effet combiné de la température locale du fluide ainsi

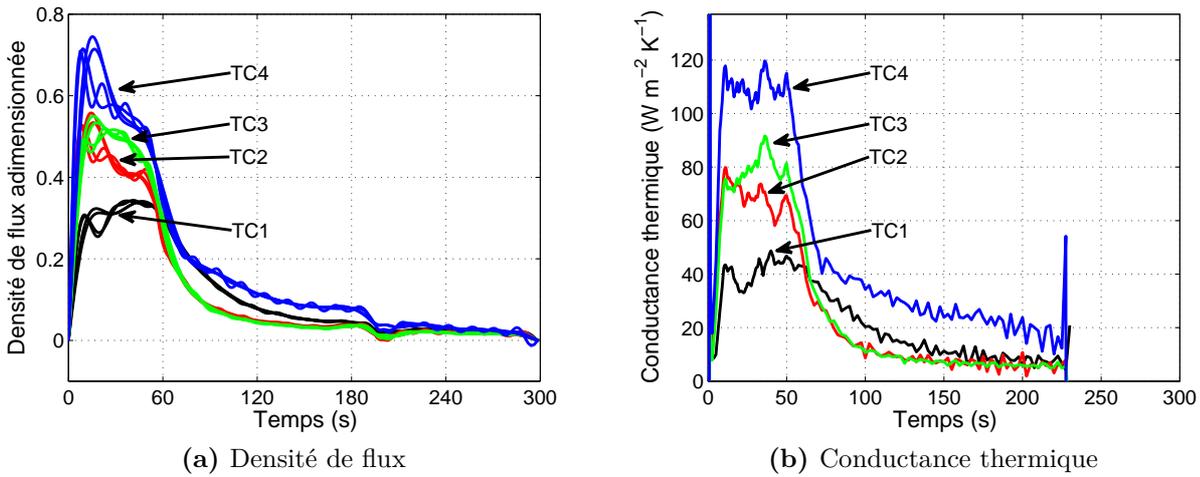


Figure 3.18 – Densité de flux de chaleur estimée au niveau des 4 thermocouples et conductance thermique.

que du coefficient d'échange local. Ces deux quantités étant inconnues, il est difficile d'affirmer laquelle de ces deux contributions est la cause de cette augmentation de température vers le fond. On peut mentionner un possible effet piston qui augmenterait la température du gaz en fond de bouteille.

L'estimation de ϕ_{in} est plus difficile que celle de T_{in} car la température est déjà une grandeur filtrée par la paroi, et ce d'autant plus que l'effusivité thermique du polymère est grande. On le constate aussi à partir des estimations qui présentent une variabilité plus importante aux paramètres de l'algorithme et à la présence ou non de contrainte. Du point de vue thermomécanique, la densité de chaleur n'a pas vraiment d'importance, mais elle peut être utile pour définir des coefficients d'échange fluide-paroi (ou conductance fluide-paroi) (Fig.3.18.b). La conductance thermique est évaluée en prenant comme température de référence la température moyenne du gaz au centre de la bouteille :

$$G_k(t) = \frac{\phi_{in,k}}{T_{in,k} - T_{fluide}} \quad (3.20)$$

Avec cette définition, la conductance thermique est 3 fois plus élevée vers le fond de la bouteille. On distingue également deux parties correspondant à la phase de remplissage et à la phase de relaxation. La transition entre ces deux régimes est très nette sur les thermocouples 2, 3 et 4. Elle est plus progressive au niveau du thermocouple 1, sur la partie avant de la bouteille. Enfin, avec la température de référence utilisée, il semblerait que la conductance converge vers une valeur d'environ $h = 5 \text{ W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$, et ce, peu importe la position dans la bouteille.

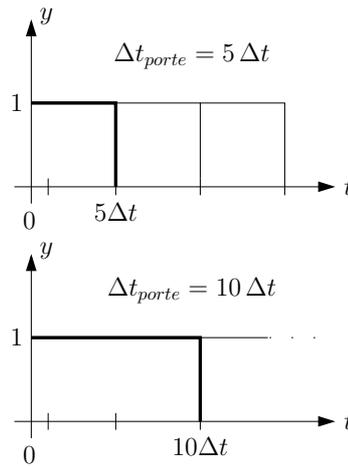


Figure 3.19 – Fonctions de base de type porte pour l'estimation de température et de densité de flux de chaleur

2.6 Estimation globale - Fonctions portes

Au lieu de paramétrer la fonction inconnue avec une base de sinus, on peut aussi utiliser une base de fonctions portes (Fig.3.19), beaucoup plus utilisée en pratique. Avec une base de sinus, l'utilisateur doit spécifier le nombre de fréquences à utiliser. Ici, c'est la largeur de la fonction porte que l'on doit fixer. On a montré précédemment que les plus hautes fréquences accessibles sont de l'ordre de $f = 0,1 \text{ Hz}$. Si on souhaite pouvoir reproduire ces fréquences, il faut impérativement que la largeur des portes soit inférieure à 5 s . C'est le cas de la figure (a) qui utilise une largeur de porte de $\Delta t_{\text{porte}} = 2,5 \text{ s}$ (A titre indicatif, la période de mesure est de $0,5 \text{ s}$). On a alors 92 paramètres à estimer.

Le système est linéaire par rapport à l'excitation T_{in} . On obtient ainsi la réponse du système $T_p(t)$ en superposant la réponse du système à chaque fonction de la base. Or toutes ces fonctions sont identiques et simplement translatées dans le temps. Si de plus, la largeur des fonctions portes utilisées est un multiple de la période de mesure, alors la réponse du système est identique pour tous les paramètres β_i . Il suffit de déterminer la réponse $y_{\Delta}(t)$ à un créneau en $t = 0$ de longueur Δt_{porte} . La sensibilité au paramètre β_i est simplement la sensibilité à β_1 translatée dans le temps :

$$X_{\beta_i}(t) = X_{\beta_1}(t - (i - 1) \Delta t_{\text{porte}}) \quad (3.21)$$

Par ailleurs, la réponse du système à un créneau peut être obtenue à partir de la réponse à un échelon.

La figure (Fig.3.20) présente l'évolution de :

- la température moyenne du gaz au centre de la bouteille (pointillés bleus)
- la température estimée $T_{in}(t)$ correspondant au thermocouple 1 (barres rouges)

- la température estimée avec la base de sinus (en noir)
- la température reproduite par le modèle (pointillés noirs)
- les mesures fournies par le thermocouple 1 (cercles rouges)
- des résidus studentisés (§4.5.2 p50) avec leur échelle propre en ordonnée

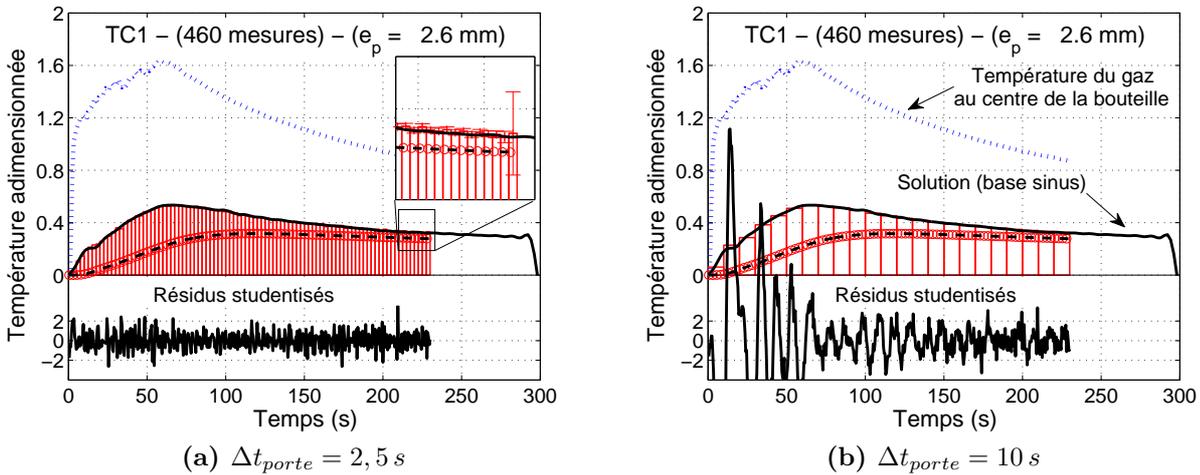


Figure 3.20 – Estimation de T_{in} sur une base de fonctions portes par approche globale, avec les mesures du thermocouples 1. La courbe en pointillés bleus est la température moyenne du gaz calculée avec les 5 thermocouples au centre de la bouteille.

Deux largeurs de porte sont considérées. La réponse du système à ces portes est obtenue à partir de la réponse à un échelon, elle-même obtenue en calculant la transformée de Laplace inverse de l'expression (Eq.3.10) avec l'algorithme de De Hoog et avec $\theta_{in}(p) = 1/p$.

La figure (Fig.3.20.a) utilise des portes de largeurs $\Delta t_{porte} = 2,5$ s. On constate ici graphiquement que l'estimation de $T_{in}(t)$ concorde bien avec l'estimation précédente. Malgré la largeur relativement réduite des portes, l'intervalle de confiance à 95 % est là aussi dans l'épaisseur des lignes, comme le montre le « zoom » sur une partie du graphique. Seul le dernier paramètre du vecteur β montre une dispersion importante car ce paramètre ne peut pas s'appuyer sur les mesures suivantes, là où sa sensibilité est plus grande. Quant aux résidus, on ne distingue pas de biais ou de corrélation significative.

La seconde figure (Fig.3.20.b) montre des résultats similaires. Toutefois, on distingue sur les résidus l'effet de la largeur des portes utilisées. Les résidus sont maintenant corrélés sur tout l'horizon temporel puisqu'ils conservent le même signe plusieurs pas de temps successifs. La corrélation est particulièrement importante aux temps courts, là où les variations de température sont rapides. On le distingue nettement la dispersion des résidus très supérieure à la théorie et ainsi complètement improbable.

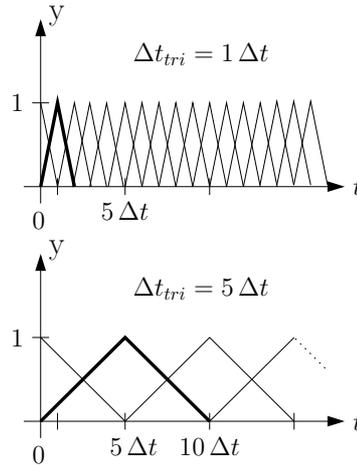


Figure 3.21 – Fonctions de base de type triangle pour l'estimation de température et de densité de flux de chaleur

Remarque sur l'estimation séquentielle

Il existe au moins deux approches pour estimer $\beta_{i,j,k}$. La première, dite « méthode globale », est celle qui est utilisée ici. Elle consiste à acquérir tous les observables Y^* puis à estimer les paramètres $\beta_{i,j,k}$ avec un estimateur. Une autre méthode, dite « méthode séquentielle » traite les observables dès qu'ils sont disponibles. Les méthodes séquentielles, notamment la méthode des pas de temps futurs de Beck [13] (dite aussi méthode de spécification de fonction), peuvent parfois être utilisées pour effectuer une estimation de condition limite en « temps réel ». De plus, c'est ce type de méthode qui a été utilisée en premier historiquement dans le cas linéaire monodimensionnel car elle requiert moins de calcul que la méthode globale (voir notamment la méthode de Stolz [13, p.115]). Cependant, les méthodes séquentielles sont nécessairement moins efficaces (en termes d'écart-types des estimations) que les méthodes globales.

2.7 Estimation globale - Fonctions triangulaires

On peut remplacer les fonctions portes par des fonctions triangulaires [14] (Fig.3.21). Avec ces fonctions, la fonction $T_{in}(t)$ est linéaire par morceaux au lieu d'être constante par morceaux. La figure (Fig.3.22) montre qu'avec ce type de fonction et sur ce problème particulier, on reproduit mieux les observations avec le même nombre de paramètres, puisque les résidus présentent des variations plus faibles aux temps courts et sont visiblement moins corrélés aux temps longs qu'avec le même nombre de fonctions portes. Par ailleurs, on peut doubler la valeur Δt_{tri} (demi base des triangles) sans pour autant déformer considérablement la solution (Fig.3.22.b).

Remarque sur la sensibilité aux différents paramètres

La sensibilité des paramètres β_k correspond à la réponse du système à une excitation triangulaire. Elle peut s'obtenir avec la réponse à une rampe. En effet, soit $y_{rp}(t)$ la réponse du système (la température à l'interface polymère-composite) à une rampe unitaire, la réponse $y_{tri}(t)$ à une fonction triangle, de demi-largeur Δt_{tri} , peut

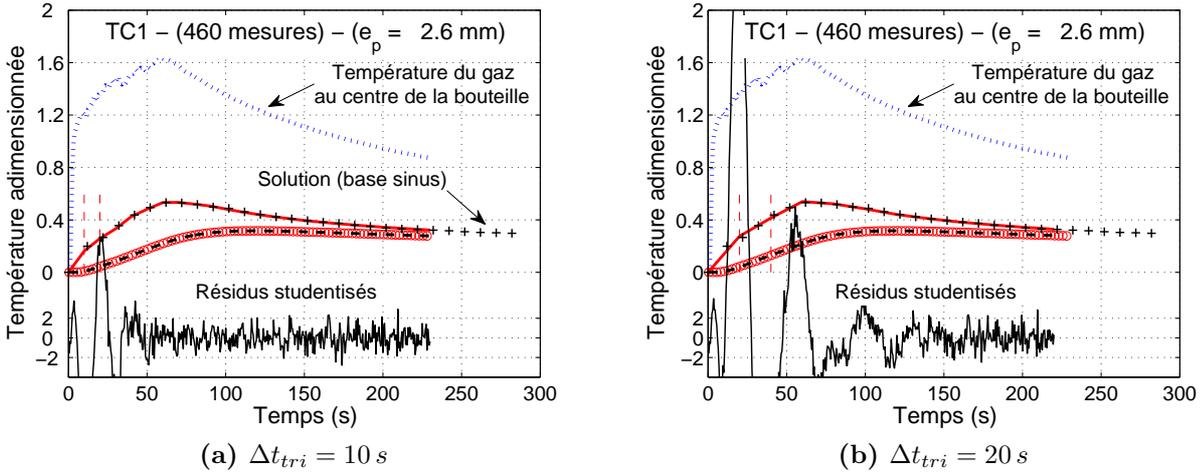


Figure 3.22 – Estimation de T_{in} sur une base de fonctions triangulaires par approche globale, avec les mesures du thermocouples 1. La courbe en pointillés bleus est la température moyenne du gaz calculée avec les 5 thermocouples au centre de la bouteille. Les lignes verticales en pointillés rouges indiquent les ruptures de pente de T_{in}

s'écrire :

$$y_{tri}(t) = y_{rp}(t) - 2y_{rp}(t - \Delta t_{tri}) + y_{rp}(t - 2\Delta t_{tri}) \quad (3.22)$$

La première fonction de la base est particulière. Il s'agit d'un demi triangle dont le calcul fait aussi appel à la réponse du système à un échelon. Cependant, comme on impose ici que la fonction inconnue soit nulle à l'origine, le coefficient correspondant à cette fonction est nul. Mais il est nécessaire de l'utiliser lorsque le flux initial est non nul sans quoi on peut générer des oscillations dans la solution.

2.8 Synthèse

Les trois paramétrisations précédentes donnent des résultats similaires. La première décompose la fonction inconnue $T_{in}(t)$ sur une base de sinus ce qui facilite la prise en compte d'une contrainte sur les fréquences. Introduire ce type de contrainte avec une paramétrisation basée sur des fonctions portes ou triangulaires, est aussi possible en utilisant par exemple une régularisation de Tikhonov [7] :

$$J(\beta) = (Y^* - Y_{(\beta)})^T W (Y^* - Y_{(\beta)}) + (A\beta)^T D (A\beta) \quad (3.23)$$

Avec cette définition, la matrice A est utilisée pour calculer la transformée en sinus de la fonction T_{in} paramétrée par β . La matrice diagonale D contient sur sa diagonale les « écarts-types » de régularisation forçant les hautes fréquences vers 0.

En posant le problème de cette façon, on obtiendrait probablement des résultats très similaires à ceux obtenus avec la base de sinus. Il est aussi possible que les résultats soient meilleurs

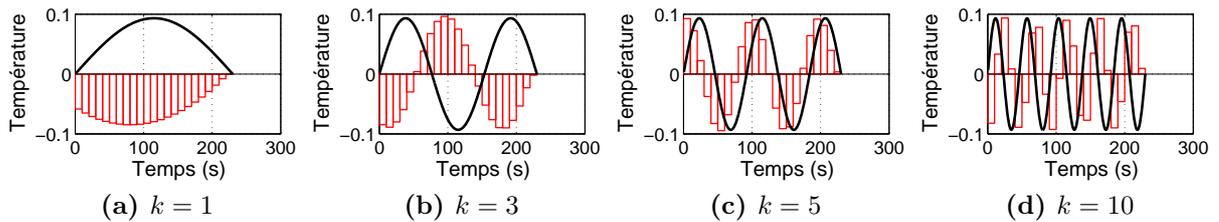


Figure 3.23 – Comparaison entre la base des sinus avec $t_f = 230$ s et la base SVD

car la transformée de Laplace inverse des sinus peut poser des difficultés.

Il existe également une autre base intéressante. Il s'agit de celle obtenue par la décomposition SVD de la matrice de sensibilité du problème :

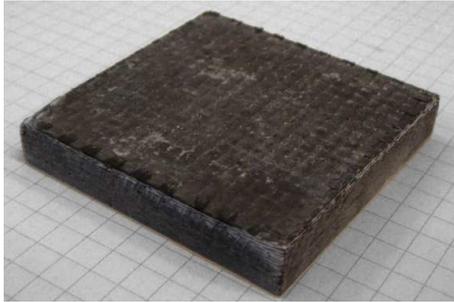
$$X = U \Omega V^T \quad (3.24)$$

La figure (Fig.3.23) présente 4 des 23 lignes de la matrice V (23 correspond au nombre de paramètres β_i à estimer lorsque la largeur des portes Δt_{porte} est égale à 10 s). Il est assez frappant de constater la ressemblance de la base SVD avec la base de sinus. Le déphasage semble lié au temps de diffusion dans le polymère puisque le déphasage est réduit avec une épaisseur plus faible de polymère.

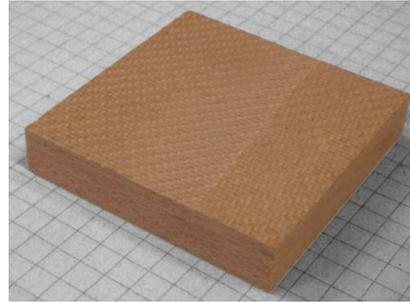
3 Application à la torche oxyacétylène

Cette deuxième application des méthodes inverses en thermique, s'inscrit dans le cadre d'un échange avec le département PMM de l'institut P' et en particulier avec J. Beaudet [15], qui effectue une thèse sur la caractérisation des protections thermiques impactées par un jet chaud supersonique. Il s'agit notamment d'étudier l'endommagement de matériaux composites (Fig.3.24) soumis à une torche oxygène/acétylène (Fig.3.25), (type torche de soudure) dont la température avoisine $3000^\circ C$. La distance entre la buse et l'échantillon est de quelques centimètres et la durée de l'expérience va d'une dizaine de secondes à une minute.

Lorsqu'il est soumis à la flamme, le matériau monte rapidement en température ce qui va dégrader progressivement les différents constituants élémentaires du matériau composite. On assiste au changement d'état (vaporisation, liquéfaction) des constituants ainsi qu'à l'érosion mécanique due à la flamme. L'effet cumulé de ces deux phénomènes est appelé « l'ablation ».

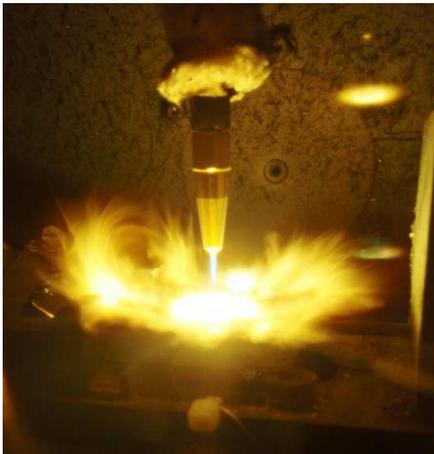


(a) Fibres de carbone/matrice polyester



(b) Fibres de silice/matrice phénolique

Figure 3.24 – Exemple de matériaux composites tissés



(a)



(b)

Figure 3.25 – Exemples d'échantillons soumis à la torche oxyacétylène

3.1 Problématique et objectifs

La simulation numérique du phénomène d'ablation sur ces échantillons nécessite de spécifier une condition limite sur la face de l'échantillon soumise à la flamme. Pour estimer cette condition limite, on a besoin d'une modélisation des transferts thermiques entre la flamme et la paroi. Le problème inverse consiste alors à identifier les différents paramètres que cette condition limite fait apparaître. Il n'est pas envisageable d'effectuer cette caractérisation pendant l'essai d'endommagement puisque les phénomènes physiques mis en jeu sont complexes : changement d'état, formation d'un cratère au centre de l'échantillon et éventuellement d'un bourrelet au bord de celui-ci (Fig.3.26).

La caractérisation ne peut pas se faire aux temps courts sur les échantillons composites car ces derniers sont des isolants ($\lambda \approx 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) dans l'épaisseur. Les mesures de température en face arrière sont alors trop retardées et filtrées pour permettre d'estimer correctement la condition limite supérieure aux temps courts. Le temps caractéristique de diffusion est de $t_c = 200 \text{ s}$. Quant à la température en face avant, elle atteint rapidement (quelques secondes)



Figure 3.26 – Exemple de matériau dégradé après exposition à la torche oxyacétylène. Il s’agit d’un matériau composite constitué de fibres de carbure de silicium (SiC) et d’une matrice vitrocéramique à pré-curseur géopolymère [16]. On constate la formation d’un cratère et d’un bourrelet constitué d’un matériau amorphe issu d’une vitrification du matériau du fait des hautes températures. Lorsque l’on s’éloigne de la flamme, les fibres de carbure de silicium sont mises à nues du fait de la vaporisation de l’éventuelle couche de protection et de la matrice.

1500 °C sous la flamme ce qui entraîne la dégradation du matériau.

Pour éviter ces phénomènes complexes, les transferts thermiques flamme-paroi sont caractérisés aux temps « courts » en se limitant à des expositions de 5 s. Par ailleurs, les échantillons en composite sont remplacés par un échantillon test en acier (316L(N)-IG) (Fig.3.27.a). Ses dimensions latérales sont similaires à celles des échantillons composites. Son épaisseur est de 5 mm ce qui lui confère un temps caractéristique de diffusion dans l’épaisseur de $t_c = 5$ s. La conductivité et la capacité thermique de l’acier en question sont connues jusqu’à 1400 °C. L’acier a une effusivité thermique ($\approx 10^4 J^\circ C^{-1} m^{-2} s^{1/2}$) environ 10 fois plus élevée que celle des composites utilisés ici, ce qui limite la montée en température en face avant des échantillons d’acier.

Cet échantillon est instrumenté en face arrière avec 5 thermocouples (Fig.3.28.a). Les mesures de température obtenues sont présentées sur la figure (Fig.3.28.b). La durée relativement brève de l’excitation permet de limiter la température au niveau du thermocouple TC3 (au centre de la face arrière) à 800 °C. On constate aussi que malgré les efforts pour centrer la flamme sur l’échantillon, les températures relevées par les thermocouples TC2 et TC4 ne se superposent pas. C’est aussi le cas, dans une moindre mesure, pour les thermocouples TC5 et TC1. En d’autres termes, les positions spécifiées dans le modèle ne sont pas les bonnes et devront être corrigées lors de l’estimation.

Le problème posé par l’utilisation d’un échantillon en acier au comportement thermique très différent des matériaux composites est la représentativité des résultats obtenus. La condition limite estimée avec un matériau en acier est-elle transposable à un matériau composite, plutôt isolant ? Si on suppose que la part du flux émis par la flamme et absorbé par l’échantillon ne

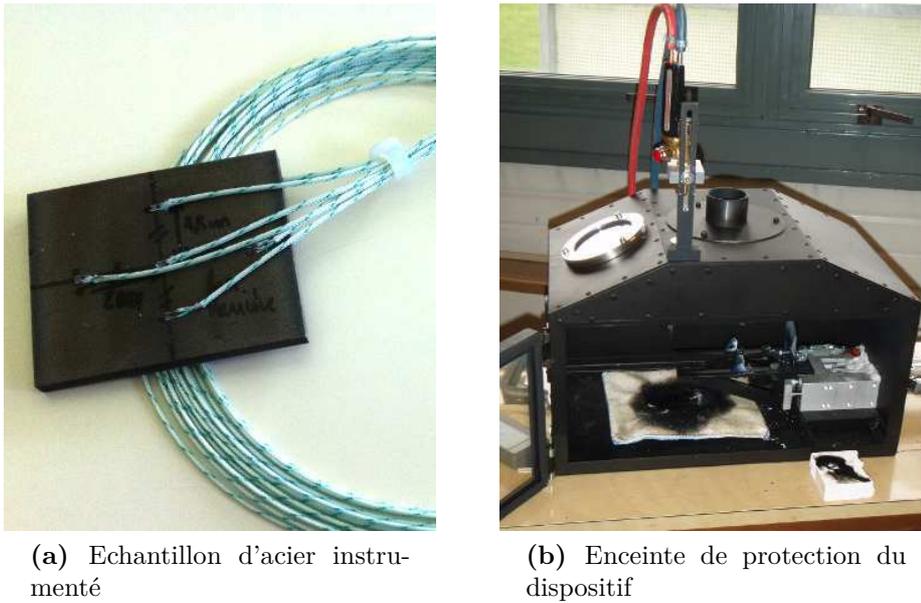


Figure 3.27 – Echantillon instrumenté et enceinte du dispositif. Les propriétés thermophysiques de l'acier sont connues jusqu'à 1400 °C.

dépend pas trop de sa température de surface, alors le flux estimé avec l'échantillon test devrait être une bonne représentation du flux absorbé par les matériaux composites. Si on suppose ensuite que cette répartition de flux n'est pas trop déformée par la dégradation du matériau et la formation d'un cratère, alors celle-ci peut être supposée constante lors des simulations d'endommagement.

3.2 La modélisation des transferts thermiques

L'estimation de la répartition de la densité de flux $\phi_{in}(x, y)$ passe tout d'abord par la modélisation des transferts thermiques flamme-échantillon. Deux « types » de modèles ont été considérés (Fig.3.29). Ils partagent certaines caractéristiques communes :

- Les échanges avec l'environnement sont purement radiatifs et évalués avec la loi de Stefan-Boltzman. On suppose que l'échantillon est un corps noir.
- On fait abstraction des supports de l'échantillon.
- On néglige le régime transitoire correspondant à la mise en place de l'échantillon sous la flamme. La flamme est initialement active, et c'est un piston qui vient placer l'échantillon (le temps nécessaire est inférieur à 1 s).
- Les propriétés thermophysiques de l'acier sont dépendantes de la température.

Dans la première modélisation (Fig.3.29.a), le transfert flamme-échantillon est supposé constant dans le temps. Il est introduit sous la forme d'une densité de flux imposé $\phi(x, y)$

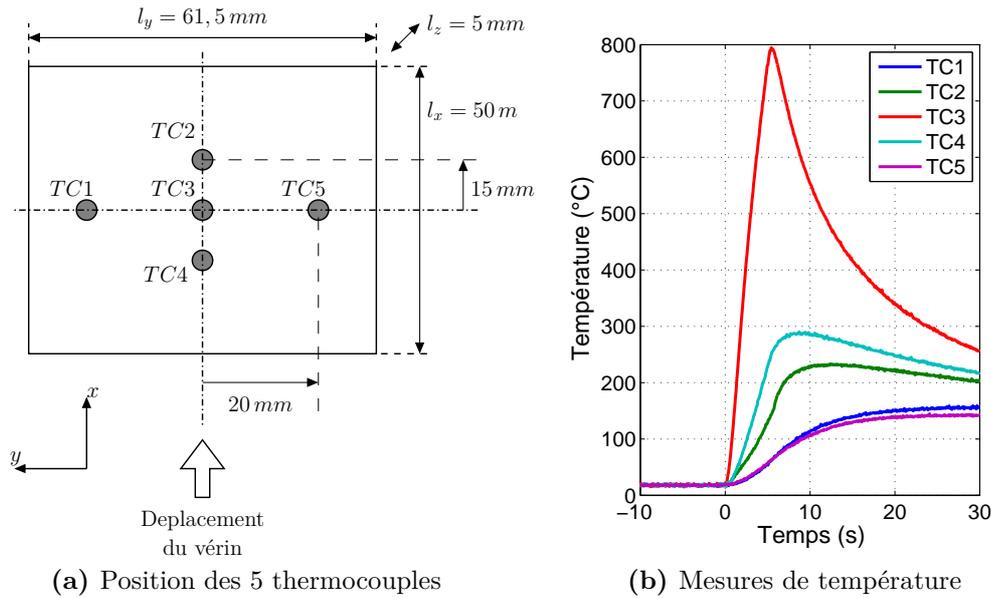


Figure 3.28 – Position des 5 thermocouples de la face arrière de l'échantillon test et mesures de température obtenues. L'écart-type du bruit de mesure est calculé à partir des mesures de température qui précèdent l'exposition à la torche. On trouve $\sigma_m = 0,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$.

sur la surface supérieure de l'échantillon. On a alors la condition limite suivante :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \phi(x,y) \quad \text{avec} \quad z = l_z \quad (3.25)$$

Dans la seconde modélisation (Fig.3.29.b), on distingue deux composantes dans le transfert flamme-échantillon : la composante radiative et la composante convective. La première modélise le transfert radiatif entre la surface et la flamme à température T_f . On introduit pour cela un facteur de forme $C(x,y)$ qui prend en compte le fait que les transferts radiatifs dépendent de la position sur l'échantillon. La seconde composante essaie de prendre en compte l'effet de l'écoulement du gaz chaud sur l'échantillon. Un coefficient d'échange $h(x,y)$ et la température du gaz T_g sont introduits. La condition limite sur la face supérieure s'écrit ainsi :

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \underbrace{\sigma (T^4 - T_{amb}^4)}_{\text{Pertes avec l'environnement}} + \underbrace{C(x,y) \sigma (T^4 - T_f^4)}_{\text{Echange avec la flamme}} + \underbrace{h(x,y) (T - T_g)}_{\text{Echange convectif avec le gaz}} \quad \text{avec} \quad z = l_z \quad (3.26)$$

Le paramètre T_f , que l'on appelle température de flamme, ne correspond pas nécessairement à la température de flamme de la combustion oxygène/acétylène. Il s'agit plutôt ici d'une température équivalente de la torche qui intervient dans la loi de Stefan-Boltzman et qui sera « calée » par l'algorithme de minimisation.

Dans la première modélisation, une seule fonction inconnue doit être estimée et le flux de chaleur absorbé par le matériau est constant. Tandis que dans la seconde, il faut estimer à la

Chapitre 3. Estimation de conditions limites thermiques

fois $h(x, y)$ et $C(x, y)$. L'intérêt de ce modèle est de prendre en compte la nature du matériau. En effet, les échanges avec la flamme font intervenir la température de surface du matériau. Plus la température de surface est élevée, et plus les échanges thermiques entre l'échantillon et la flamme sont faibles. Cette particularité permet peut être au second modèle de s'adapter plus facilement à d'autres conditions expérimentales.

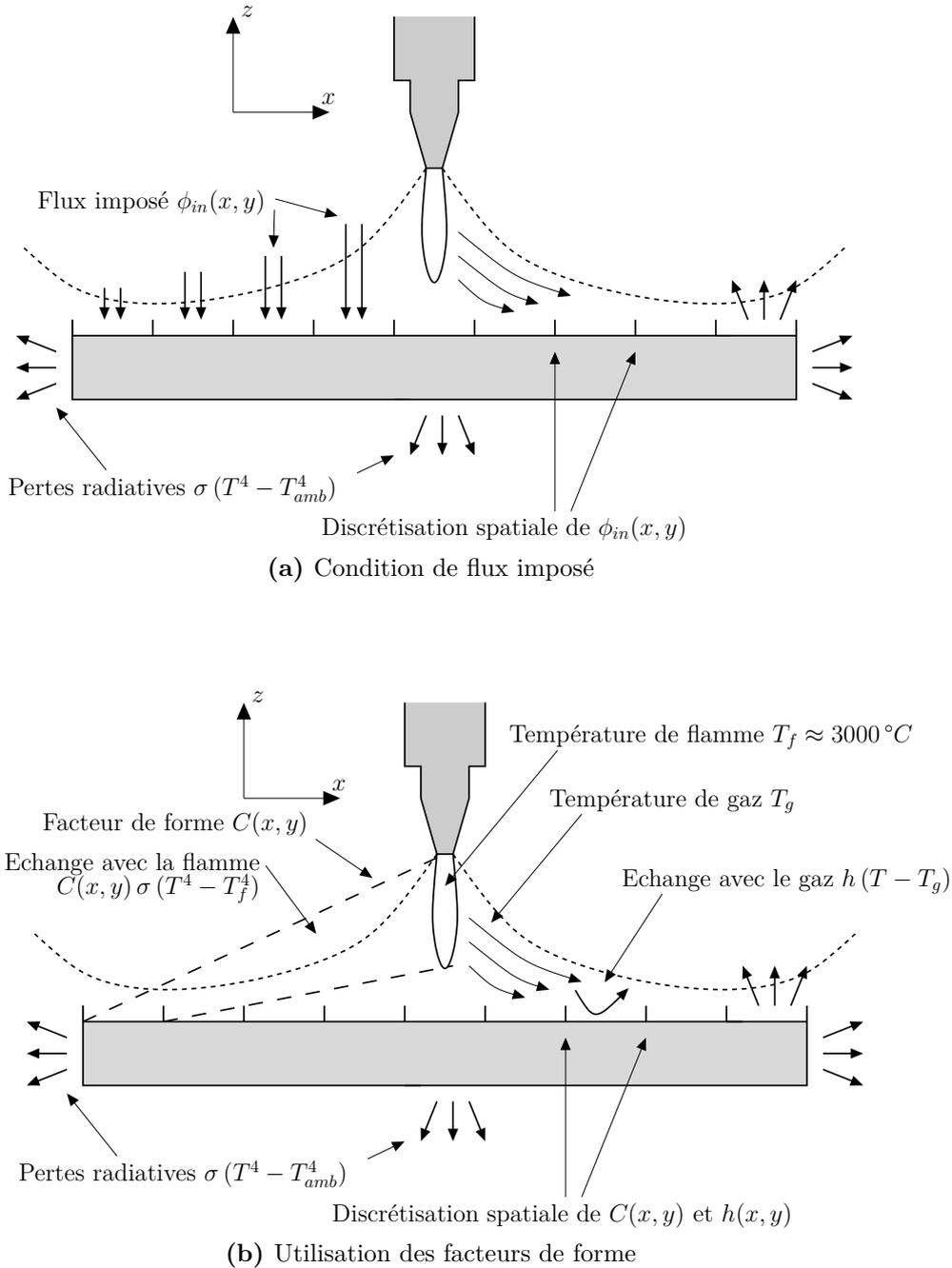


Figure 3.29 – Schéma de l'échantillon avec ses conditions limites pour les deux modélisations des transferts thermiques avec la flamme.

Avec les hypothèses précédentes, l'équation de la chaleur et les conditions limites sont non-linéaires. Le système d'équation à résoudre est le suivant :

$$\rho C(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.27a)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \pm \sigma (T^4 - T_{amb}^4) \quad \text{pour } x = 0 \quad \text{et} \quad x = l_x \quad (3.27b)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial y} = \pm \sigma (T^4 - T_{amb}^4) \quad \text{pour } y = 0 \quad \text{et} \quad x = l_y \quad (3.27c)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = -\sigma (T^4 - T_{amb}^4) \quad \text{pour } z = 0 \quad (3.27d)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \text{Selon le modèle} \quad \text{pour } z = l_z \quad (3.27e)$$

$$T = T_0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (3.27f)$$

Remarque sur l'implémentation du modèle

Le modèle direct nécessaire à l'inversion a été développé sous MatLab. La méthode des volumes finis a été mise en oeuvre pour résoudre numériquement ce problème non-linéaire. On a utilisé un maillage régulier tridimensionnel ainsi qu'un schéma temporel implicite. On utilise un maillage d'environ $N_x \times N_y \times N_z = 20 \times 20 \times 5$ mailles. Avec un pas de temps de résolution de $\Delta t = 0,1$ s, le temps de calcul du modèle direct pour 30 s de simulation et sur un ordinateur de bureau est d'environ 10 s.

3.3 Modèle avec condition de flux imposé - Base de fonctions gaussiennes

Dans le cadre du premier modèle, la fonction inconnue est la densité de flux $\phi_{in}(x, y)$ supposée constante dans le temps. L'estimation de cette fonction passe tout d'abord par sa paramétrisation. Deux bases de fonctions sont considérées. La première, traitée ici, décompose $\phi_{in}(x, y)$ suivant une somme de fonctions gaussiennes :

$$f(x, y) = f(r, \theta) = f(r) = \sum_i^{n_\eta} \eta_i G_i(r) \quad \text{avec} \quad G_i(r) = \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{r^2}{\sigma_i^2}\right) \quad (3.28)$$

Cette paramétrisation inclut en elle-même une régularisation. On fournit en effet de l'information externe à l'algorithme en lui imposant d'utiliser un type de fonction particulier qui prend en compte la symétrie de révolution du problème. En pratique, il semble qu'une seule gaussienne soit suffisante. En effet, lorsqu'on autorise l'algorithme de minimisation à utiliser plusieurs gaussiennes ($n_\eta > 1$), les gaussiennes obtenues à l'issue de la minimisation ont le même écart-type. Le vecteur des paramètres inconnus β s'écrit finalement :

$$\beta = [\eta_1, \sigma_1]^T \quad (3.29)$$

3.3.1 Analyse des sensibilités

Le problème inverse est non linéaire par rapport aux paramètres inconnus. L'analyse des sensibilités ne peut donc être effectuée que localement c'est à dire pour une valeur estimée $\tilde{\beta}$ des paramètres inconnus. Cette valeur est obtenue en résolvant le problème inverse avec l'estimateur MLE. La fonction objectif associée est minimisée sous contraintes avec un algorithme de type gradient (« fmincon » sur Matlab) :

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \eta_1 = 6,7 \times 10^6 \text{ W m}^{-2} \\ \sigma_1 = 6,9 \text{ mm} \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

Etant donné le caractère surdéterminé du problème (environ 4000 mesures pour 2 paramètres) et la nature assez différente des deux paramètres à estimer, l'inversion ne pose pas de difficultés particulières. Les observables et les sorties du modèle sont présentés sur la figure (Fig.3.30). La figure (a) montre que le modèle parvient à reproduire correctement l'évolution générale de chaque thermocouple ce qui conforte l'hypothèse de densité de flux constante dans le temps. La montée en température est particulièrement bien reproduite au centre de l'échantillon ainsi qu'au niveau des thermocouples *TC1* et *TC5*. Quant aux thermocouples *TC2* et *TC4*, les mesures ne se superposent pas à cause vraisemblablement d'une erreur de centrage de la flamme. Aussi, les positions des thermocouples ont été corrigées dans le modèle pour prendre en compte ce défaut. Par ailleurs, le thermocouple *TC2* semble poser plus de problèmes. Il s'agit du thermocouple exposé le premier à la flamme lors de la phase de déplacement de l'échantillon. Or la mise en place n'étant pas instantanée, le régime transitoire correspondant n'est pas pris en compte par le modèle. Par ailleurs, il se peut aussi qu'un défaut de synchronisation soit à l'origine de ces biais résiduels. La figure (b) présente l'allure de la solution $\phi_{in}(x, y)$. La densité de flux sur les bords de l'échantillon est environ 1000 fois plus faible qu'au centre et vaut environ 10 kW m^{-2} .

On peut à présent calculer la matrice des sensibilités réduites S (dim. $\approx 4000 \times 2$) calculées avec $\beta = \hat{\beta}$, le déterminant et le conditionnement de $S^T S$ ainsi que l'écart-type théorique :

$$\begin{aligned} \det(S^T S) &= 4,0.10^{14} \quad [^\circ\text{C}^2] \\ \text{cond}(S^T S) &= 34 \\ \text{corr}(\eta_1, \sigma_1) &= 0,92 \\ \sigma_{\eta_1} &= 0,05 \% \\ \sigma_{\sigma_1} &= 0,03 \% \end{aligned}$$

Ces différents critères montrent que le problème inverse est ici bien posé. Le conditionnement est raisonnable et l'écart-type théorique sur les paramètres est faible. Les valeurs correspondent

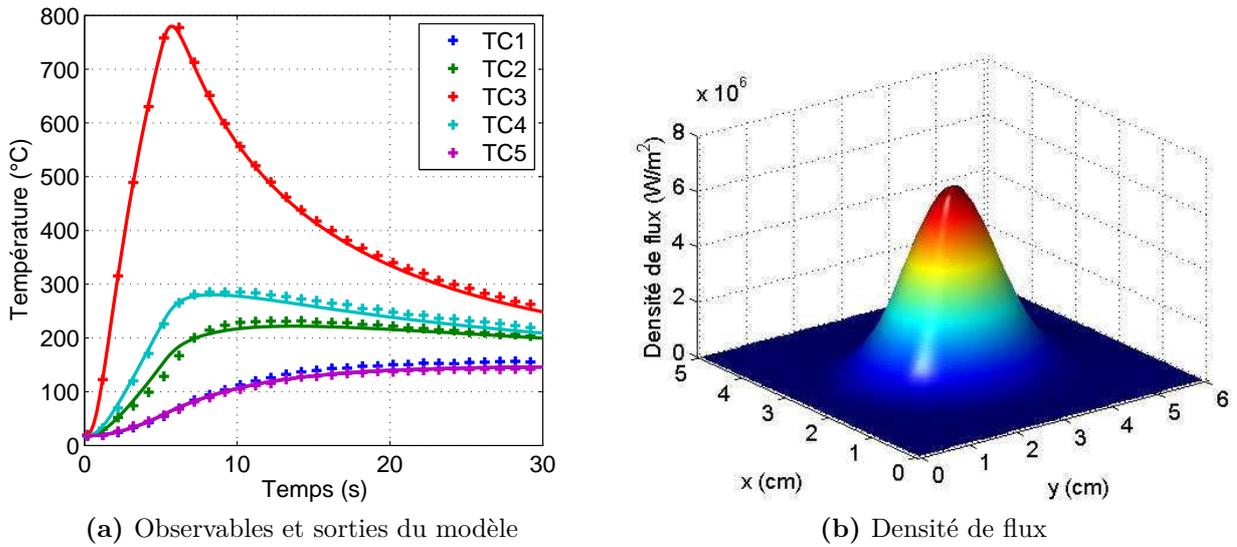


Figure 3.30 – Observables, sorties du modèle et densité de flux obtenus pour un modèle avec condition de flux imposé paramétrée sur une base de fonctions gaussiennes.

seulement à la dispersion due au bruit de mesure. Lorsque l'on modifie certains paramètres supposés connus, comme l'origine des temps ou la position d'un thermocouple, les variations générées sur la solution $\hat{\beta}$ sont très supérieures aux écarts-types théoriques ci-dessus.

Remarque sur la densité de puissance de la torche oxyacétylène

La densité de puissance sur la face supérieure au centre de l'échantillon est ici de $6,7 \text{ MW m}^{-2}$. A titre indicatif, la densité de puissance au centre du faisceau du laser CO_2 100 W utilisé pour l'estimation de paramètres thermophysiques est d'environ 10 MW.m^{-2} .

3.4 Modèle avec condition de flux imposé - Base de fonctions rectangulaires

Cette paramétrisation consiste à utiliser un maillage régulier de la surface de l'échantillon. Sur chacune de ces mailles, la fonction $\phi_{in}(x, y)$ est constante :

$$\phi_{in}(x, y) = \sum_{i,j} \eta_{i,j} X_i(x) Y_j(y) \tag{3.31}$$

$$\text{Avec } X_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [(i-1)\Delta_x; i\Delta_x] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Quant à $Y_j(y)$, elle est définie de la même façon que $X_i(x)$. Quant au vecteur β des paramètres inconnus, il contient les paramètres $\eta_{i,j}$ de l'expression ci-dessus.

3.4.1 Analyse des sensibilités - Cas linéaire

La taille du maillage à utiliser est un compromis entre la résolution spatiale de la fonction inconnue et la faisabilité de l'inversion. Sans contraintes supplémentaires sur la forme de la fonction, le problème est mal posé. Pour le montrer, on calcule la matrice des sensibilités X_β . La figure (Fig.3.31) présente l'évolution des valeurs singulières normalisées (par la première valeur singulière) de la matrice X_β pour plusieurs niveaux de raffinement. Le calcul a été réalisé avec un modèle linéaire. Les propriétés thermophysiques sont indépendantes de la température ($\lambda = 20 \text{ W m}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$) et les échanges avec l'environnement sont linéarisés ($h = 10 \text{ W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$). Dans chaque situation, les valeurs singulières décroissent avec un rythme relativement constant.

Pour les courbes continues (rouge et noir), il existe un indice au delà duquel les valeurs singulières sont nulles (à la précision numérique près). On en conclut qu'il existe certaines combinaisons linéaires des paramètres β_i qui n'ont aucun effet sur les températures au niveau des thermocouples. Du fait de la symétrie que l'on a utilisée pour positionner les thermocouples, certains modes ne sont pas accessibles. Il s'agit des 4 derniers modes (Fig.3.32.(e), (f), (g), (h)). On aperçoit sur ces figures que les contributions des différentes barres se compensent au niveau de chaque thermocouple.

La figure (Fig.3.32) montre également les 4 premiers modes. Ils sont associés aux plus grandes valeurs singulières et sont ceux qui sont estimés le plus précisément. En effet, le problème inverse étant linéaire, on a :

$$Y_{(\beta)} = X \beta = U \Omega \underbrace{V^T \beta}_{=\xi} \implies Y_{(\xi)} = U \Omega \xi \quad (3.32)$$

ξ est le vecteur des composantes de la densité de flux dans la base SVD. Avec l'estimateur MLE, la matrice de variance-covariance de ξ s'écrit :

$$\text{cov}(\xi) = \sigma_m^2 \left[(U \Omega)^T U \Omega \right]^{-1} = \sigma_m^2 \left[\Omega^T \Omega \right]^{-1} \implies \sigma_{\xi_i} = \frac{\sigma_m}{\omega_i} \quad (3.33)$$

Avec σ_{ξ_i} l'écart-type théorique d'estimation de ξ_i et ω_i la $i^{\text{ème}}$ valeur singulière. Ainsi, plus la valeur singulière est grande, plus la composante du mode correspondant est estimée précisément.

Les courbes rouge et noire en pointillés sur la figure (Fig.3.31) montrent aussi l'évolution des valeurs singulières après avoir déplacé le thermocouple central de 5 mm en x et y . La symétrie des thermocouples est ainsi rompue et on fait disparaître les valeurs singulières nulles. En ce qui concerne les deux autres courbes (verte et magenta), on a imposé aux paramètres β de former une densité de flux symétrique par rapport à l'axe vertical central. Il existe plusieurs façons

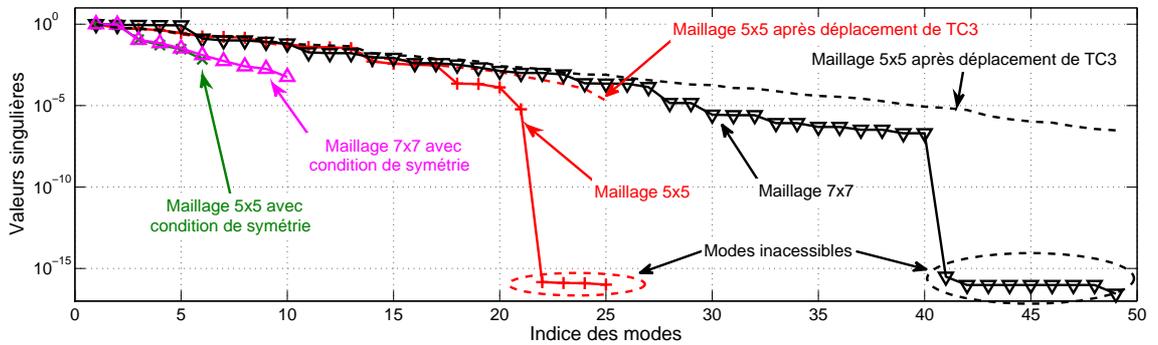


Figure 3.31 – Evolution des valeurs singulières normalisées de la matrice des sensibilités réduites avec une condition limite de flux imposé paramétrée par des fonctions portes. Les valeurs singulières ont été obtenues avec un modèle linéaire analytique.

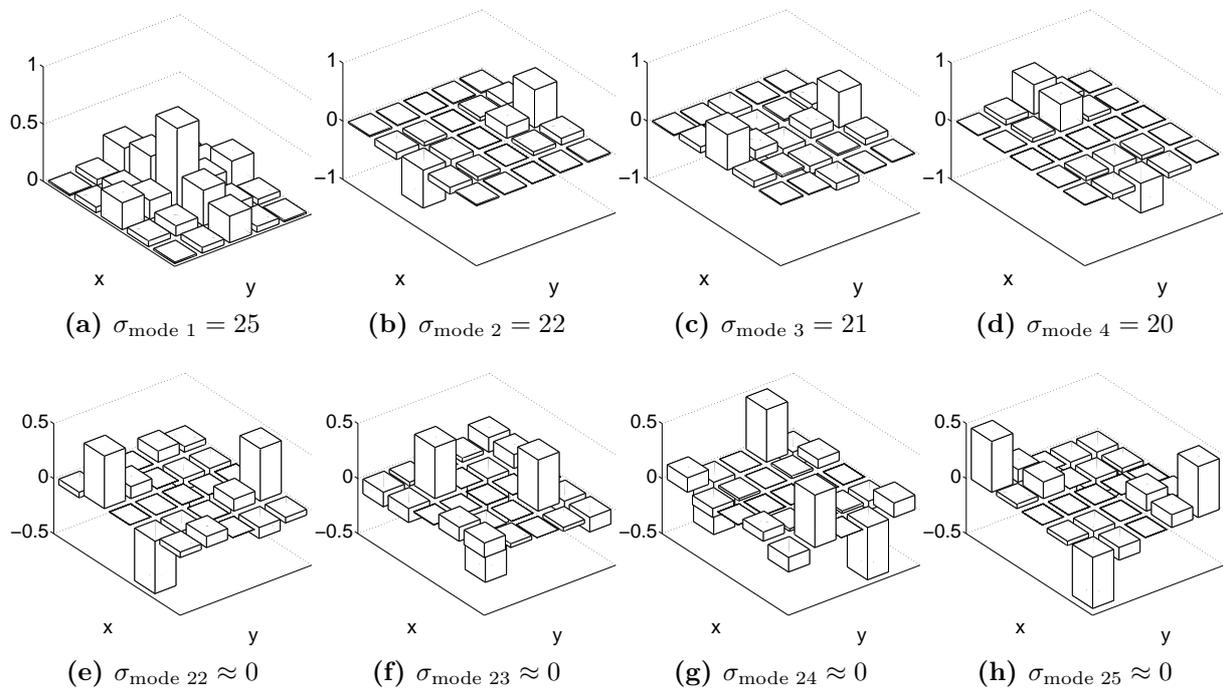


Figure 3.32 – Les 4 premiers et derniers modes SVD de la matrice des sensibilités avec leur valeur singulière respective.

d'intégrer cette contrainte. Celle qui est utilisée ici consiste à donner la même valeur à tous les paramètres β_i situés à la même distance du centre de l'échantillon. Le nombre n_β de paramètres à estimer est ainsi fortement réduit et on montre qu'il est inférieur ou égal à $(n_x + 1)(n_x + 3)/8$ (égal pour $n_x \in \{5, 7, 9\}$). Cependant, le problème de minimisation s'avère difficile à résoudre avec la fonction « fmincon » de Matlab si bien qu'aucun résultat n'est présenté ici.

3.4.2 Analyse des sensibilités - Cas non-linéaire

L'étude des sensibilités effectuée dans le cas linéaire n'est plus valable pour le cas non-linéaire. Par ailleurs, le modèle linéaire est analytique et n'utilise pas exactement le même maillage que le modèle non-linéaire. Avec ce dernier, on trouve sur les bords de l'échantillon, des demis, des quarts et des huitièmes de maille. Le maillage utilisé pour discrétiser $\phi_{in}(x, y)$ n'est donc plus régulier.

Pour effectuer l'étude des sensibilités, le vecteur $\tilde{\beta}$ est calculé à partir de la solution $\phi_{in}(x, y)$ obtenue précédemment en la supposant gaussienne (Fig.3.33). La figure (Fig.3.34) présente l'évolution des valeurs singulières de la matrice X_β pour plusieurs paramétrisations. Même si le maillage n'est pas tout à fait identique, il existe toujours, dans le cas linéaire, des modes associés à des valeurs singulières nulles. En intégrant les non-linéarités des propriétés thermophysiques ou des conditions limites, ces modes particuliers tendent à disparaître. C'est notamment le cas pour la discrétisation 7×7 où ils ne se distinguent plus.

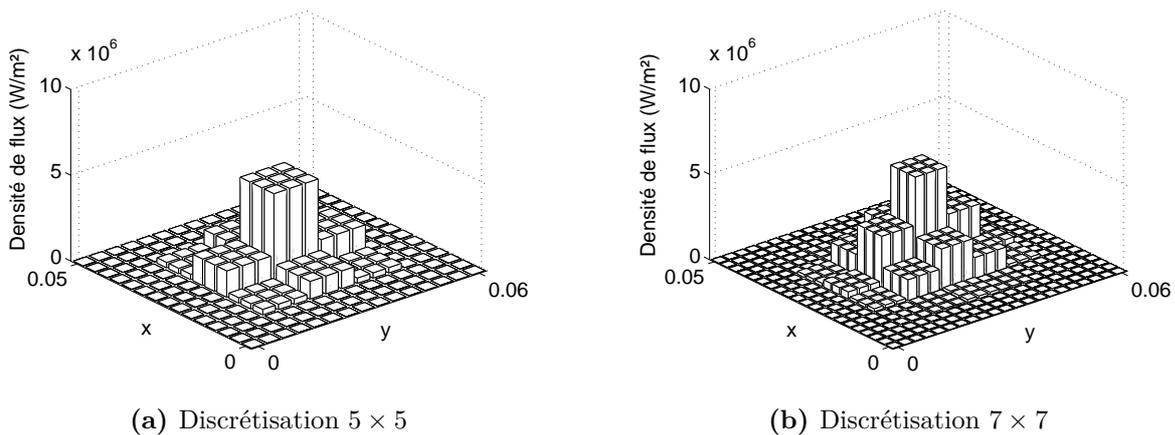


Figure 3.33 – Densité de flux utilisée pour le calcul des sensibilités aux paramètres de chaque maille pour différentes discrétisations et dans le cas du modèle non-linéaire. L'amplitude de chaque barre est calculée en intégrant la gaussienne sur chaque maille.

En conservant les k_t modes des plus grandes valeurs singulières, on obtient une base optimale au sens de la SVD, dans laquelle on peut effectuer l'estimation. Pour déterminer le nombre de modes à utiliser, on peut s'appuyer sur le fait que le conditionnement du problème d'estimation

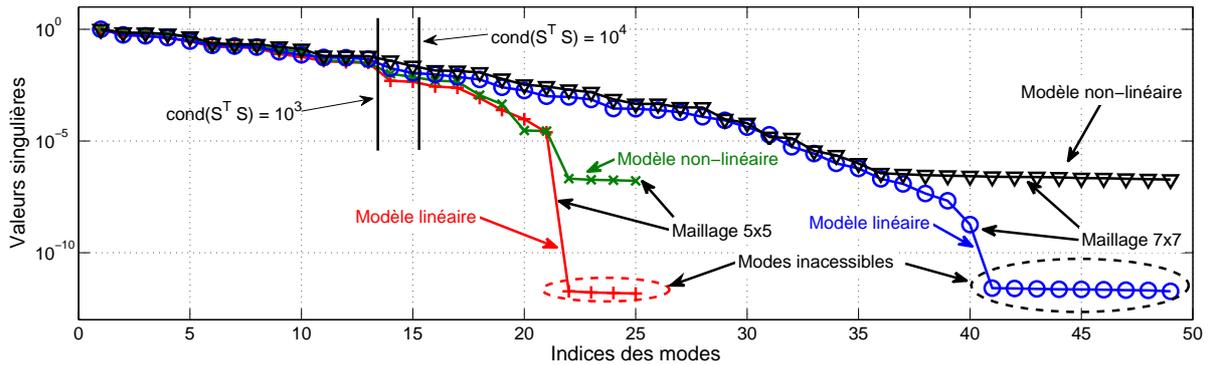


Figure 3.34 – Evolution des valeurs singulières normalisées de la matrice des sensibilités réduites avec une condition limite de flux imposé paramétrée avec des fonctions portes. Les valeurs singulières égales à environ 10^{-12} , valaient 10^{-16} avant d’être normalisées par la première valeur singulière.

des composantes ξ dans la base SVD peut être obtenu graphiquement sur la figure (Fig.3.34). Si on considère le modèle linéaire, ou linéarisé (Eq.3.32), le conditionnement est égal au rapport des carrés de la plus grande et de la plus petite valeur singulière de Ω :

$$\text{cond}\left((U \Omega)^T U \Omega\right) = \text{cond}(\Omega^T \Omega) = \frac{\omega_1^2}{\omega_{k_t}^2} \quad (3.34)$$

Avec k_t l’indice de troncature de la base. Le conditionnement de $S^T S$ est donc égal à l’inverse de l’ordonnée au carré. Les indices correspondant à un conditionnement d’environ 10^3 et 10^4 sont indiqués sur la figure (Fig.3.34). Cela suggère qu’au delà de 15 modes, l’estimation devient rapidement difficile.

3.4.3 Résultats

On dispose de deux types de paramétrisations exploitables :

- Fonction gaussienne
- Base issue de la décomposition en valeurs singulières

Les différentes solutions $\phi_{in}(x, y)$ obtenues avec ces paramétrisations sont présentées sur la figure (Fig.3.35). Pour calculer ces courbes d’isovaleurs, $\phi_{in}(x, y)$ a d’abord été projeté sur un maillage identique à celui utilisé pour la résolution numérique ($21 \times 21 \times 5$ noeuds). La valeur RMS associée à chaque situation, correspond à « l’écart-type » entre les sorties du modèle et les observables. C’est une mesure globale de l’écart expérience-modèle.

La figure (Fig.3.35.a) montre la densité de flux $\phi_{in}(x, y)$ obtenue en supposant celle-ci gaussienne. La figure (b) est la solution obtenue en utilisant les 5 premiers modes de la base SVD calculée avec une discrétisation de 7×7 mailles. La figure (c) est similaire mais avec les 5 premiers modes d’une base SVD calculée avec une discrétisation de 21×21 mailles.

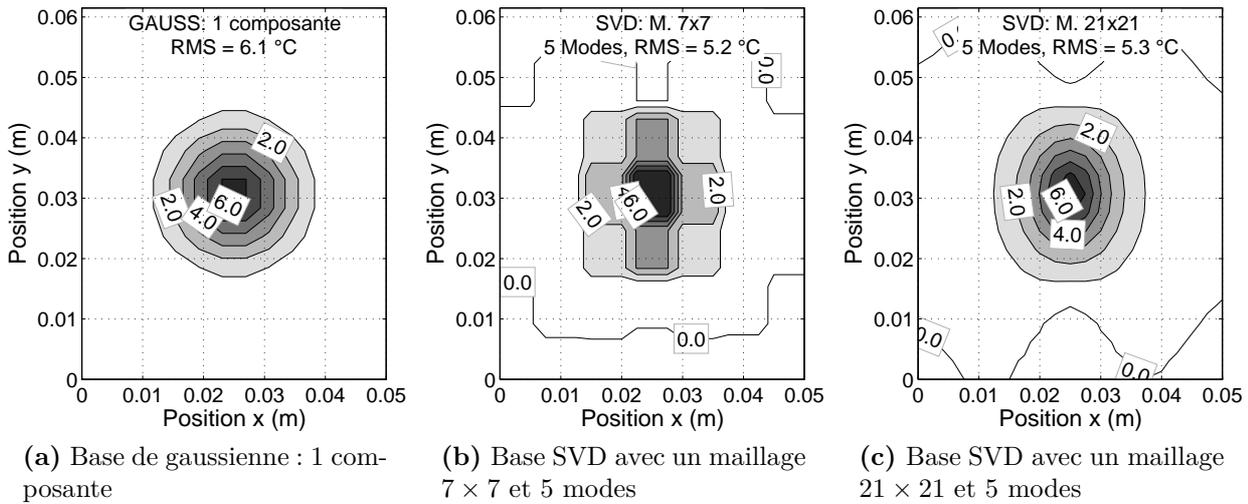


Figure 3.35 – Densité de flux de chaleur absorbé (en $MW m^{-2}$) par la surface supérieure de l'échantillon en fonction de la paramétrisation.

Les trois solutions ont sensiblement la même valeur du RMS ce qui signifie qu'ils sont tous capables de reproduire les observables avec la même qualité. Cependant, la figure (b) n'est pas satisfaisante pour des simulations d'ablations car elle aura tendance à générer un cratère présentant une forme géométrique qui n'est pas souhaitable puisqu'elle ne correspond pas aux observations. Enfin la gaussienne est intéressante car on dispose d'une expression analytique simple, qui rend son intégration dans un maillage plus aisée.

3.5 Modèle avec facteur de forme

Le modèle précédent supposait que la densité de flux de chaleur absorbé par la paroi supérieure de l'échantillon est constante dans le temps. Dans le modèle présenté maintenant, la composante radiative est prise en compte avec le facteur de forme $C(x, y)$ et la composante convective (plus incertaine) est caractérisée par un coefficient d'échange non uniforme $h(x, y)$ et une température de gaz T_g .

3.5.1 Sensibilités et réduction du modèle

Afin de pouvoir vérifier la faisabilité de l'inversion à travers une étude des sensibilités, il nous faut déterminer une approximation de la solution. Comme dans la section précédente, on

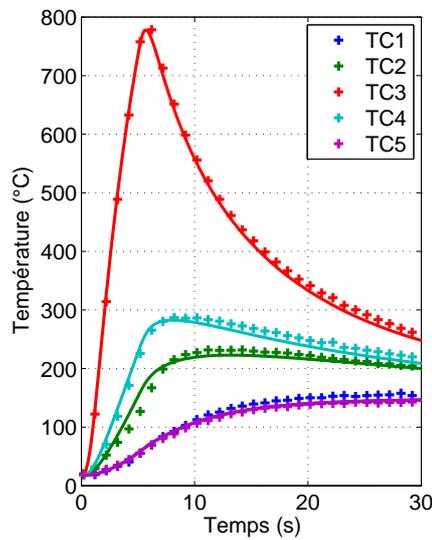
décompose $C(x, y)$ et $h(x, y)$ sur une base de fonctions gaussiennes :

$$C(x, y) = A_C \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x^2 + y^2)^2}{\sigma_C^2}\right) \quad (3.35)$$

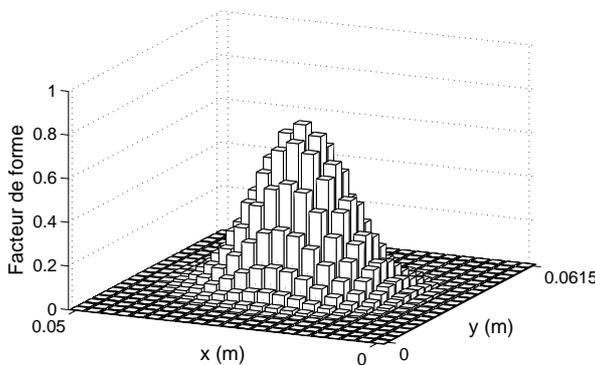
$$h(x, y) = A_h \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x^2 + y^2)^2}{\sigma_h^2}\right) \quad (3.36)$$

Le vecteur des paramètres β s'écrit alors :

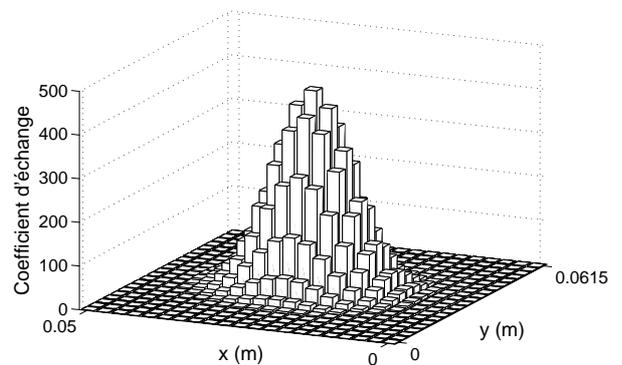
$$\beta = [T_g, T_f, A_C, \sigma_C, A_h, \sigma_h]^T \quad (3.37)$$



(a) Observables et sorties du modèle



(b) Facteur de forme $C(x, y)$



(c) Coefficient d'échange $h(x, y)$

Figure 3.36 – Solutions obtenues pour une condition limite modélisée avec une composante radiative et convective

Chapitre 3. Estimation de conditions limites thermiques

Les résultats de l'estimation sont présentés sur la figure (Fig.3.36). On constate que ce modèle de transfert de chaleur est capable de reproduire correctement les observables (Fig.3.36.a). Même si on constate l'existence d'un biais, les sorties du modèle concordent de manière satisfaisante. Concernant le facteur de forme $C(x, y)$ (Fig.3.36.b), la solution est visiblement correcte puisqu'elle prend bien ses valeurs dans $[0; 1]$. Une contrainte a été introduite en ce sens, mais l'algorithme aurait pu se bloquer sur une des bornes de l'intervalle. La température de flamme associée aux échanges radiatifs est estimée à $T_f = 3410 K$ soit $T_f = 3130 ^\circ C$ ce qui est relativement cohérent avec la température de flamme de la combustion oxygène/acétylène de $3500 ^\circ$.

Quant au coefficient d'échange, sa valeur maximale est de $455 W m^{-2} K^{-1}$ et la température de référence du gaz est estimée à $T_g = 2280 K$. Avant de conclure sur cette distribution du coefficient d'échange, on peut calculer l'écart-type des différentes composantes pour vérifier qu'elles ne sont pas trop sensibles au bruit de mesure, et ainsi vérifier qu'elles sont pertinentes. On peut commencer par calculer le déterminant et le conditionnement de la matrice des sensibilités réduites à l'aide de $\hat{\beta}$:

$$\text{cond}(S^T S) = 1,04 \times 10^9 \quad \text{et} \quad \det(S^T S) = 5,6 \times 10^{20} \text{ } ^\circ C^2$$

Le déterminant ne présente pas d'anomalie évidente. Le conditionnement quant à lui est trop grand pour que l'estimation se fasse dans de bonnes conditions. On le constate en calculant les écarts-types théoriques des différents paramètres :

$$\begin{array}{ll} \sigma_{T_g} = 62 \% & \sigma_{T_f} = 17 \% \\ \sigma_{A_C} = 66 \% & \sigma_{\sigma_C} = 0,5 \% \\ \sigma_{A_H} = 30 \% & \sigma_{\sigma_H} = 8,7 \% \end{array}$$

Ainsi, l'écart-type relatif vaut plus de 60% pour certains paramètres. Les seules quantités estimées avec précision sont les écarts-types des deux gaussiennes qui caractérisent l'étendue de l'excitation thermique. La décomposition SVD de la matrice des sensibilités réduites $S = U \Omega V^T$ donne plus d'information :

$$V^T = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} T_g & T_f & A_C & \sigma_C & A_h & \sigma_h \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccccc} -0,03 & \mathbf{-0,91} & \mathbf{-0,22} & \mathbf{-0,36} & -0,02 & -0,04 \\ -0,03 & \mathbf{-0,35} & -0,08 & \mathbf{0,93} & -0,01 & 0,07 \\ -0,16 & 0,01 & -0,02 & -0,08 & -0,14 & \mathbf{0,97} \\ -0,07 & 0,11 & -0,33 & 0,01 & \mathbf{-0,92} & -0,16 \\ \mathbf{-0,77} & -0,11 & \mathbf{0,59} & -0,01 & -0,14 & -0,13 \\ \mathbf{0,61} & -0,19 & \mathbf{0,69} & 0,00 & \mathbf{-0,33} & 0,07 \end{array} \right] \end{array} \quad \text{et} \quad \text{diag}(\Omega) = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} 22006,20 \\ 2932,28 \\ 23,13 \\ 16,63 \\ 1,39 \\ 0,68 \end{array} \right] \end{array}$$

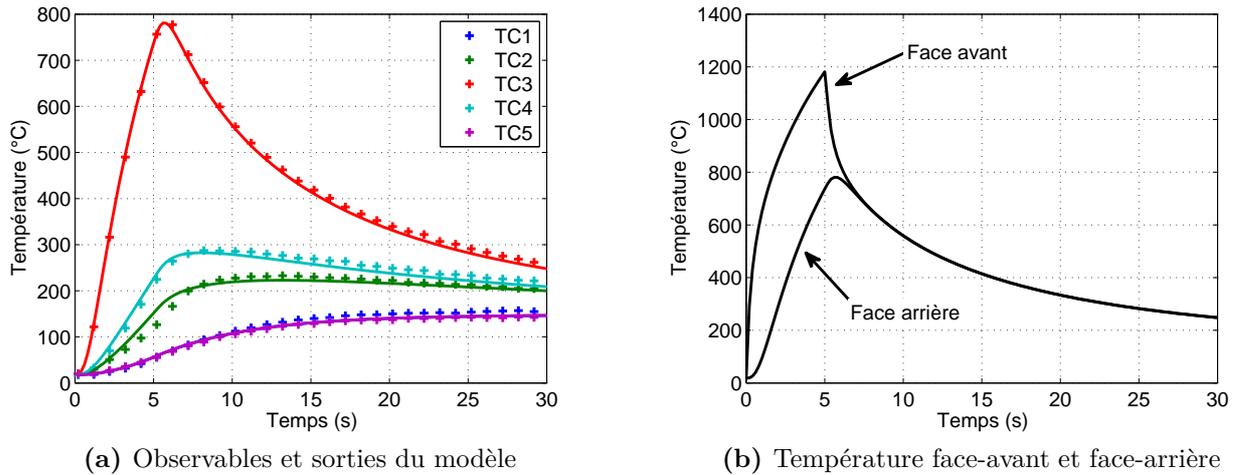


Figure 3.37 – Solution obtenue pour une condition limite avec uniquement la composante radiative. Pour des questions de lisibilité, seul un observable sur 5 est présenté.

Chaque ligne de V^T est associée à la valeur singulière de $\text{diag}(\Omega)$ qui est sur la même ligne. On remarque que la décroissance des valeurs singulières est rapide. Un facteur 10 entre les deux premières, puis un facteur 100 entre les deux suivantes. On fait le choix ici de supprimer les 4 dernières valeurs singulières puisque les combinaisons de paramètres correspondantes n’ont visiblement qu’un effet marginal comparées aux deux premières. Par ailleurs, ces deux premières lignes font intervenir de manière prépondérante les paramètres T_f , A_C et σ_C . Ainsi, plutôt que d’estimer les deux premières composantes dans la base SVD, on enlève du modèle les 3 autres paramètres relatifs à la composante convective. Ceci traduit l’effet radiatif prépondérant observé dans ce système.

Le problème éventuel avec cette solution peut venir du caractère non-linéaire du problème. Avec les 6 paramètres inconnus, ce dernier est mal-conditionné et il est possible que la décomposition SVD ait été faite avec une matrice S calculée avec des paramètres $\tilde{\beta}$ aberrants. Cependant, si les non-linéarités sont modérées, on ne devrait pas avoir de surprise. L’objectif ici n’est pas d’estimer des paramètres, mais de trouver un modèle avec le nombre minimum de paramètres permettant tout de même de bien reproduire la physique du problème (modèle minimal).

Remarque :

La composante radiative fait intervenir 3 paramètres. Or d’après la décomposition SVD, seuls les 2 premiers modes sont significatifs. Cela signifie qu’il existe une corrélation entre les 3 paramètres radiatifs.

3.5.2 Résultats

Avec seulement la composante radiative, le modèle parvient toujours à reproduire les observables (Fig.3.37). Cette figure présente la température en face avant estimée par le modèle. Il semblerait donc que la température du matériau en face avant n'excède pas les 1200°C , ce qui reste inférieur à la température maximale pour laquelle l'échantillon a été caractérisé. Par ailleurs, le nombre de Biot étant très faible, le gradient thermique dans l'épaisseur du matériau se résorbe rapidement avec l'arrêt de l'excitation thermique. La température est alors uniforme dans l'échantillon. Quant à la solution $\hat{\beta}$, elle vaut :

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} T_f \\ A_C \\ \sigma_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3460 \\ 0,77 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad \sigma_\beta = \begin{bmatrix} 2,2\% \\ 9,1\% \\ 0,03\% \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

L'écart-type relatif reste relativement important sur A_c . Cela est probablement dû à l'anti-corrélation entre A_C et T_f , on montre en effet qu'elle est très proche de -1 . Cela signifie qu'une augmentation de T_f peut être compensée par une diminution de A_C . La matrice V^T de la décomposition SVD de S_β permet également de voir cela :

$$V^T = \begin{bmatrix} -0,91 & -0,34 & -0,24 \\ -0,23 & -0,08 & 0,97 \\ -\mathbf{0,35} & \mathbf{0,94} & 0,00 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \text{diag}(\Omega) = \begin{bmatrix} 24540 \\ 3230 \\ \mathbf{6,4} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

Ainsi, une réduction de $k \times 35\%$ de T_f peut être compensée par une augmentation de $k \times 94\%$ de A_c (avec k petit pour que la linéarisation du modèle soit valable). Pour diminuer davantage l'écart-type de l'estimation, on pourrait enlever la corrélation entre T_f et A_c qui est associée à la valeur singulière $\sigma_3 = 6,4$.

On peut aussi paramétrer la composante radiative $C(x, y)$ dans la base SVD obtenue en calculant la décomposition SVD de la matrice des sensibilités X_β en prenant comme valeur $\tilde{\beta}$ la solution obtenue avec une paramétrisation gaussienne. La discrétisation utilisée pour $C(x, y)$ comprend ici 21×21 mailles. En comptant également T_f , le vecteur β comprend 442 paramètres à estimer.

Cependant, on choisit ici de séparer le paramètre T_f des paramètres issus de la discrétisation de $C(x, y)$. La décomposition SVD est effectuée uniquement sur les 441 colonnes de X relatives à $C(x, y)$. Quelques modes obtenus à partir de la matrice V sont présentés sur la figure (Fig.3.38). On distingue clairement sur les premiers modes la position des 5 thermocouples, au niveau desquels certains de ces modes sont maximaux ou minimaux.

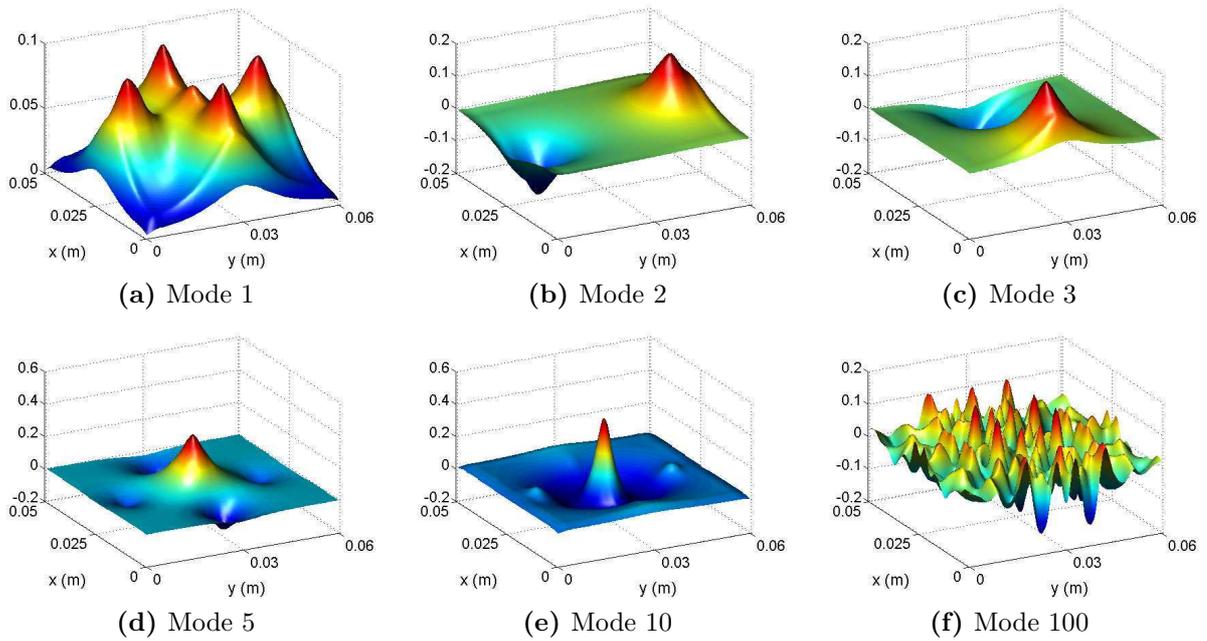


Figure 3.38 – Les premiers modes (de V) de la base SVD de la fonction des facteurs de forme $C(x, y)$.

Avec la base SVD, la régularisation consiste à conserver uniquement les modes principaux. Cependant, en paramétrant $C(x, y)$ avec un nombre trop réduit de modes, le modèle est incapable de reproduire les mesures. C'est le cas ici en prenant seulement 5 modes. On constate (Fig.3.39.a) que les résidus sont relativement importants au niveau de chaque thermocouple et en particulier au niveau des thermocouples 1 et 5 où la température commence par décroître vers 0°C avant de remonter. L'estimateur a privilégié les zones où la température est élevée même si pour cela, la fonction $C(x, y)$ doit être négative par endroit.

En augmentant le nombre de modes, le nombre de degrés de liberté augmente, si bien que les observables sont mieux reproduits. La valeur RMS est ici de $2,6^\circ\text{C}$ alors qu'elle était de $17,2^\circ\text{C}$ précédemment. L'écart modèle-expérience est plus faible, mais le caractère mal-conditionné du problème apparaît davantage ici sur la température de flamme T_f qui devient anormalement élevée. La cause de cela est probablement la corrélation importante qui existe entre T_f et l'amplitude de la fonction $C(x, y)$.

3.5.3 Synthèse

Les deux modèles donnent des résultats similaires. Une des explications possibles est la température de la flamme qui est relativement élevée. De ce fait, la température du matériau n'a qu'un effet marginal dans la loi de Stefan-Boltzmann. On peut calculer la variation du flux radiatif pendant l'expérience avec l'estimation de la température de flamme et de la température en face avant (Fig.3.37). Au centre de l'échantillon, le flux radiatif est minimal lorsque la

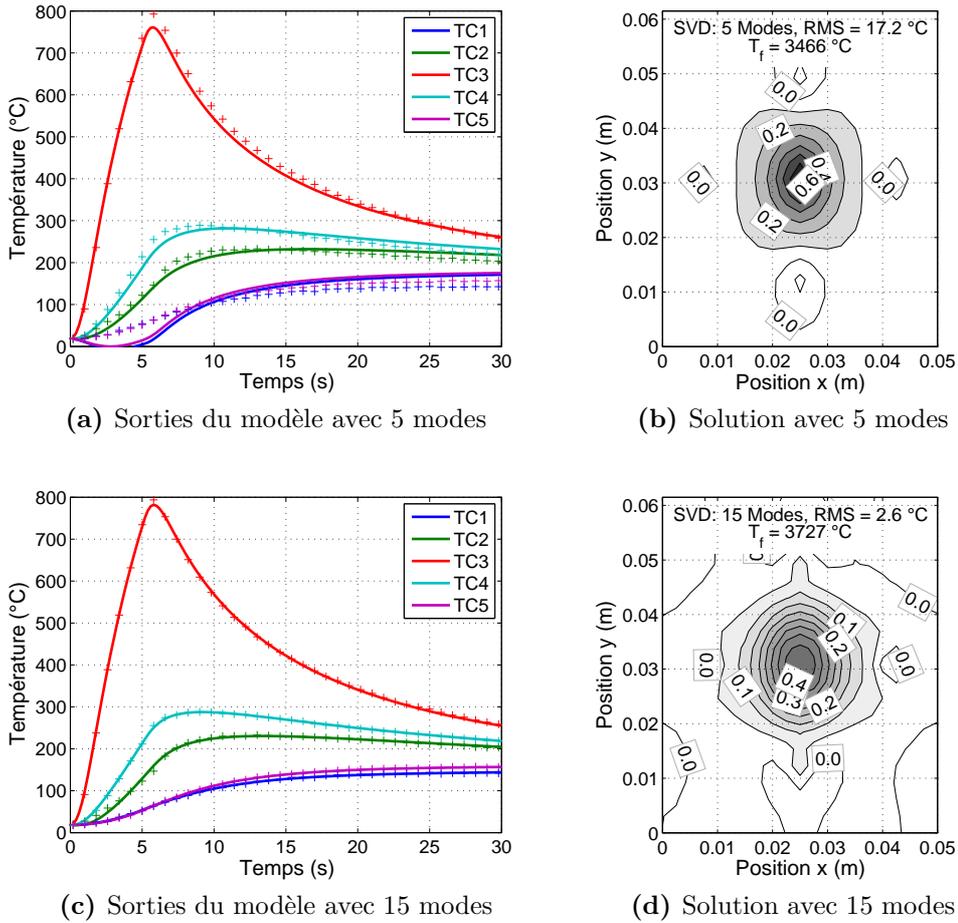


Figure 3.39 – Sorties du modèle et solution obtenue en utilisant 5 et 15 modes de la base SVD pour paramétrer $C(x, y)$. Les sorties du modèle correspondent aux lignes continues. 20 % des observables sont également présentés. Ils correspondent aux croix.

température de surface est maximale. Soit $T(t)$ la température au centre de la face supérieure de l'échantillon, on peut ainsi majorer la variation en calculant la quantité suivante :

$$r = \frac{\sigma(T_{(t=0s)}^4 - T_f^4)}{\sigma(T_{(t=5s)}^4 - T_f^4)} = \frac{\sigma(T_{amb}^4 - T_f^4)}{\sigma(T_{(t=5s)}^4 - T_f^4)} < 1,032 \quad (3.40)$$

Avec $T_{amb} = 291 K$ la température de l'environnement, qui est aussi la température initiale de l'échantillon, et avec $T_{(t=5s)} = 1450 K$, la température maximale (estimée) de l'échantillon au moment où la torche est stoppée.

Le fait que le flux radiatif ne varie que de 3 % explique pourquoi une condition limite de flux imposé donne d'aussi bons résultats que la condition limite prenant en compte les échanges radiatifs. Par ailleurs, la condition limite modélisant les échanges radiatifs présente une corrélation trop forte entre T_f et l'amplitude de $C(x, y)$ pour les estimer précisément. Pour obtenir un résultat exploitable et transposable à un autre gaz, il peut être utile de fixer la valeur de T_f

à partir de la température de flamme théorique.

Les estimations réalisées montrent un accord satisfaisant entre les observables et les sorties du modèle, mais les résidus ne sont pas nuls en moyenne. Pour améliorer la qualité de l'estimation, il faudrait synchroniser plus précisément les thermocouples. Ces derniers sont en effet connectés à deux boîtiers d'acquisition reliés au port USB de l'ordinateur. Une synchronisation a dû être effectuée car un décalage de plusieurs secondes entre les différentes courbes de température était observé. Il est possible de corriger numériquement ces erreurs en introduisant un paramètre supplémentaire de synchronisation pour chaque thermocouple, mais cela n'a pas été effectué ici.

Il serait aussi utile de laisser l'estimateur libre de modifier légèrement la position des thermocouples pour corriger une erreur de positionnement et le caractère non ponctuel de ces derniers. Pour les estimations précédentes, les positions ont été corrigées légèrement (d'environ 1 mm) mais l'estimateur ferait probablement mieux. Le déplacement des thermocouples a aussi permis de corriger en partie le défaut de centrage de la flamme. Ce type de correction n'est pas idéal car les positions relatives des thermocouples par rapport à l'échantillon ne correspondent plus à l'expérience. Il serait préférable d'introduire dans les paramètres la position de la flamme. On pourrait aussi prendre en compte la vitesse de déplacement du piston et vérifier que ce phénomène transitoire n'a pas d'influence.

Enfin au niveau du dispositif, il faudrait réfléchir à l'utilisation de la thermographie infrarouge qui permettrait de disposer de beaucoup plus d'information sur la répartition spatiale de la densité de flux.

4 Conclusion

Dans ce chapitre, deux exemples de problème inverse d'estimation de conditions limites ont été présentés.

Le premier exemple concerne l'étude des transferts thermiques dans les bouteilles d'hydrogène haute pression lors de leur remplissage. Dans le cadre du projet H2E, nous devons, entre autres, évaluer la température des parois internes de façon à pouvoir fournir des données d'entrée pour les études de fatigue thermomécanique. Comme il n'était pas possible de placer des capteurs directement sur la paroi interne de la bouteille, ces derniers ont été placés à l'interface polymère-composite.

La caractérisation expérimentale des transferts de chaleur est ici privilégiée par rapport à la simulation numérique étant donnée la physique relativement complexe mise en jeu lors

d'un remplissage. De manière à mieux apprécier l'échauffement du gaz, un modèle 0D a été développé permettant notamment d'utiliser plusieurs modèles de gaz. Ces modèles peuvent être analytiques ou numériques, à travers l'utilisation de tables des propriétés thermodynamiques.

En supposant que le flux de chaleur dans la paroi est essentiellement radial, l'estimation spatio-temporelle des températures de paroi interne est réalisée avec un modèle de transfert linéaire monodimensionnel instationnaire dans des matériaux bicouches. Sa résolution est effectuée avec les quadripôles thermiques. L'estimation des diffusivités thermiques des matériaux apparaissant dans ce modèle a été présentée. Les conductivités thermiques sont calculées après avoir estimé la capacité thermique volumique des matériaux par DSC.

Par ailleurs, une étude du contenu fréquentiel de la température du fluide lors du remplissage ainsi que le calcul de la fonction de transfert de la paroi ont montré que le problème d'estimation de la température de paroi interne est mal-posé. La proportion des fréquences inaccessibles par les thermocouples est toutefois relativement limitée ce qui permet d'obtenir des solutions a priori vraisemblables.

La condition limite peut être de type température imposée ou flux imposé. On montre qu'il est plus simple d'estimer une condition limite de température imposée car celle-ci possède moins de hautes fréquences. Parmi les différentes bases de fonctions utilisées ici, la base de Fourier présente l'avantage de pouvoir introduire facilement des contraintes sur les différentes fréquences.

La deuxième application s'inscrit dans le cadre d'un échange avec le département Physique et Mécanique des Matériaux de l'institut P'. Il s'agit de caractériser la résistance de différents matériaux composites à une flamme oxygène/acétylène. Bien que l'approche soit essentiellement expérimentale étant donnée la complexité des phénomènes mis en jeu, leur besoin, à terme, est de simuler numériquement la dégradation du matériau ce qui requiert la connaissance des conditions limites thermiques. En particulier, la connaissance du transfert de chaleur entre la flamme et l'échantillon est essentielle.

Un échantillon test a été réalisé sur lequel 5 thermocouples ont été positionnés sur la face opposée à celle de l'excitation. En limitant à 5 s la durée d'exposition à la flamme, on évite d'endommager le matériau. Les mesures obtenues pendant ces 5 premières secondes et pendant la relaxation nous permettent de caractériser le flux absorbé par le matériau. Deux modèles sont présentés pour réaliser cette caractérisation. Dans le premier, la densité de flux de chaleur est constante dans le temps. Dans le second, les transferts s'appuient sur l'utilisation de la loi de Stefan-Boltzman et d'un facteur de forme variable dans l'espace. Un terme convectif est également ajouté mais on montre que ce dernier peut être négligé devant les échanges radiatifs.

L'analyse des sensibilités est réalisée par décomposition SVD de la matrice des sensibilités. On montre que certains modes ne peuvent pas être estimés étant donné le positionnement sy-

métrique des thermocouples sur l'échantillon. Une phase de conception optimale (voir chapitre 4) en amont aurait probablement permis d'améliorer la qualité des estimations en déterminant la position optimale des thermocouples.

Les fonctions inconnues, qui dépendent de la position, sont paramétrées de plusieurs façons : avec des fonctions gaussiennes ou avec une base SVD. Les résultats, obtenus avec les deux modèles et les différentes paramétrisations, sont très similaires. La SVD s'avère ici être un outil relativement pratique pour déterminer une base de fonctions adaptée au problème ou du moins, à la métrologie. Elle donne en effet les modes, les combinaisons de paramètres, qui seront le mieux estimés étant donné le type et la position des capteurs utilisés.

On a aussi évoqué la possibilité de paramétrer les fonctions inconnues en s'appuyant sur le maillage du modèle. L'estimation n'est alors possible qu'en utilisant des contraintes supplémentaires sur la forme de la solution. Il s'agit par exemple d'une condition de symétrie et/ou d'une régularisation de type Tikhonov, mais cela n'a pas été présenté ici.

Références bibliographiques

- [1] S. JORGENSEN. *Hydrogen storage tanks for vehicles : Recent progress and current status.* Current opinion in solid state and materials science **15**, 39–43 (2011).
- [2] S. MAUS, J. HAPKE, C. NA RANONG, E. WÜCHNER, G. FRIEDLMEIER, AND D. WENGER. *Filling procedure for vehicles with compressed hydrogen tanks.* Int. J. of Hydrogen Energy **33**, 4612–4621 (2008).
- [3] C.J.B. DICKEN AND W. MÉRIDA. *Measured effects of filling time and initial mass on the temperature distribution within a hydrogen cylinder during refuelling.* J. of Power Sources **165**, 324–336 (2007).
- [4] P. WIKSTRÖM, W. BLASIAK, AND F. BERNTSSON. *Estimation of the transient surface temperature and heat flux of steel slab using an inverse method.* Applied Thermal Engineering **27**, 2463–2472 (2007).
- [5] W.N. DOS SANTOS, P. MUMMERY, AND A. WALLWORK. *Thermal diffusivity of polymers by the laser flash technique.* Polymer testing **24**, 628–634 (2005).
- [6] D. MAILLET, S. ANDRÉ, J-C. BATSALÉ, A. DEGIOVANNI, AND C. MOYNE. *Thermal quadrupoles - Solving the heat equation through integral transforms.* Wiley (2000).
- [7] R. C. ASTER, B. BORCHERS, AND C. H. THURBER. *Parameter estimation and inverse problems.* Elsevier Academic press (2005).
- [8] H. STEHFEST. *Algorithm 368 - numerical inversion of laplace transforms.* Communication of the ACM **13**(1) (1970).
- [9] D.J. HALSTED AND D.E. BROWN. *Zakian's technique for inverting laplace transforms.* The Chemical Engineering Journal **3**, 312–313 (1972).
- [10] H. DUBNER AND J. ABATE. *Zakian's technique for inverting laplace transforms.* Journal of the Association for Computing Machinery **15**(1), 115–123 (1968).
- [11] A.M. COHEN. *Methods of Laplace transform inversion.* Springer (2007).
- [12] K. BOUPHA, J.M. JACOBS, AND K. HATFIELD. *Mld groundwater software : Laplace transforms and the de hoog algorithm to solve contaminant transport equations.* Computers & Geosciences **30**, 445–453 (2004).

Références bibliographiques

- [13] J.V. BECK, B. BLACKWELL, AND C. (JR) R. ST. CLAIR. *Inverse heat conduction - Ill-posed problems*. Wiley-Interscience (1985).
- [14] J. WANG AND N. ZABARAS. *A bayesian inference approach to the inverse heat conduction problem*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **47**, 3927–3941 (2004).
- [15] J. BEAUDET. *Caractérisation à très hautes températures de protections thermiques sous impact normal d'un jet chaud supersonique : influence du couplage aérothermique et des propriétés matériaux sur la tenue à l'ablation*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique (2011).
- [16] J. BEAUDET, J. CORMIER, A. DRAGON, M. ROLLIN, AND G. BENOIT. *Ablation properties of c fibers and sic fibers reinforced glass ceramic matrix composites upon oxyacetylene torch exposure*. Materials Science and Applications à paraître (2011).

Chapitre 4

Conception optimale d'expérience

Dans les chapitres précédents, il a été question d'estimateurs. L'estimateur est « une fonction », concrètement une méthode, qui permet, à partir des signaux délivrés par les capteurs, d'estimer des paramètres inconnus. Pour un même problème, il existe plusieurs estimateurs mais tous ne se valent pas. Certains sont capables d'estimer les paramètres inconnus avec une plus faible dispersion.

L'estimateur définit comment passer des observables aux estimations. La conception optimale d'expérience précise quels sont les observables les plus pertinents à utiliser, pour estimer les paramètres inconnus avec les plus faibles écarts-types possibles. Il s'agit d'un problème d'optimisation où les grandeurs à déterminer sont des paramètres structurels de l'expérience.

Ce chapitre est structuré de la façon suivante :

- Présentation du système étudié et du modèle analytique correspondant
- Objectifs de la conception optimale, de la conception robuste et présentation des critères d'optimalité
- Introduction des métaheuristiques utilisées pour résoudre le problème d'optimisation correspondant au problème de conception optimale
- Mise en oeuvre et comparaison des métaheuristiques

1 Système étudié

1.1 Le dispositif

Le système étudié est un dispositif, proposé par Sawaf dans [1] et destiné à estimer la conductivité dans les deux directions principales du tenseur des conductivités d'un matériau orthotrope, ainsi que sa capacité thermique volumique. L'étude menée ici est purement numérique. Le système se compose d'un échantillon rectangulaire de dimension l_x et l_y soumis à une densité de flux de chaleur $\phi_0 = 25 \text{ kW m}^{-2}$ sur la paroi inférieure et la paroi de gauche (Fig.4.1). Les autres parois sont supposées parfaitement isolées.

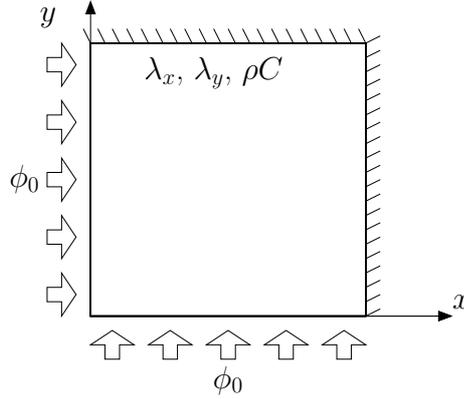


Figure 4.1 – Schéma du système

On suppose le matériau homogénéisé et les propriétés thermophysiques indépendantes de la température. L'équation de la chaleur s'écrit alors :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (4.1)$$

Les conditions initiales et aux limites s'écrivent :

$$-\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} = \phi_0 \quad \text{pour } x = 0 \quad (4.2a)$$

$$-\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = l_x \quad (4.2b)$$

$$-\lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} = \phi_0 \quad \text{pour } y = 0 \quad (4.2c)$$

$$-\lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad \text{pour } y = l_y \quad (4.2d)$$

$$T = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (4.2e)$$

1.2 Solution du modèle

La réponse du système est linéaire par rapport à l'excitation ϕ_0 . La solution $T(x, y, t)$ du système peut se voir comme la superposition de deux problèmes bidimensionnels $\theta_x(x, y, t)$ et $\theta_y(x, y, t)$ avec comme conditions limites respectives :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\lambda_x \frac{\partial \theta_x}{\partial x} = \phi_0 & (x = 0) \\ -\lambda_x \frac{\partial \theta_x}{\partial x} = 0 & (x = l_x) \\ -\lambda_y \frac{\partial \theta_x}{\partial y} = 0 & (y = 0) \\ -\lambda_y \frac{\partial \theta_x}{\partial y} = 0 & (y = l_y) \\ \theta_x = 0 & (t = 0) \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{ll} -\lambda_x \frac{\partial \theta_y}{\partial x} = 0 & (x = 0) \\ -\lambda_x \frac{\partial \theta_y}{\partial x} = 0 & (x = l_x) \\ -\lambda_y \frac{\partial \theta_y}{\partial y} = \phi_0 & (y = 0) \\ -\lambda_y \frac{\partial \theta_y}{\partial y} = 0 & (y = l_y) \\ \theta_y = 0 & (t = 0) \end{array} \right.$$

En sommant ces deux systèmes, on obtient bien le système d'équations du problème (Eq.4.2). Par ailleurs, du fait des conditions aux limites, $\theta_x(x, y, t)$ ne dépend pas de y , et $\theta_y(x, y, t)$ ne dépend pas de x . La solution s'écrit ainsi :

$$T(x, y, t) = \theta_x(x, t) + \theta_y(y, t)$$

$\theta_x(x, t)$ correspond à la température dans un mur monodimensionnel soumis à une densité de flux de chaleur sur une face et isolé sur l'autre face. Pour obtenir l'expression analytique, on utilise la solution $\theta_x^\infty(x, t)$ dans un mur semi-infini soumis à un flux ϕ_0 . Elle est donnée par l'expression [2, p.60] (voir aussi Annexe A.2 p288) :

$$\theta_x^\infty(x, t) = \frac{2\phi_0}{b_x} \sqrt{t} \left[\frac{e^{-z^2}}{\sqrt{\pi}} - z \operatorname{erfc}(z) \right] \quad \text{avec} \quad z = \frac{x}{\sqrt{4a_x t}} \quad (4.3)$$

A partir de cette expression, la méthode des images permet d'exprimer la solution pour un mur fini. Le principe de la méthode est le suivant (Fig.4.2) :

- La solution dans un mur semi-infini est égale à la solution dans un mur fini tant que le front de température n'a pas atteint la surface opposée. Le flux de chaleur traversant cette face est nul et la condition limite d'isolation en $x = l_x$ est vérifiée. Cependant, pour des instants t supérieurs, la condition n'est plus vérifiée (Fig.4.2.a).
- On superpose alors la solution symétrique par rapport à $x = l_x$ (Fig.4.2.b) ce qui a pour effet d'annuler le flux de chaleur en $x = l_x$ et de prolonger la durée de validité de $\theta_x(x, t)$. Cependant, cela a aussi pour effet de modifier la condition limite en $x = 0$. Le flux imposé n'est plus rigoureusement égal à ϕ_0 et sera significativement différent aux temps longs.
- Aussi, on vient corriger cette condition limite en appliquant un flux (de manière virtuelle) en $x = -2l_x$ pour annuler l'effet en $x = 0$ de la densité de flux imposée en $x = 2l_x$ (Fig.4.2.c).

La condition limite d'isolation n'est maintenant plus respectée. Il faut donc à nouveau superposer une autre solution. En itérant le processus, on obtient la solution $\theta_x(x, t)$ sous forme d'une série :

$$\theta_x(x, t) = \theta_x^\infty(x, t) + \sum_{i=0}^{\infty} \left[\theta_x^\infty(2i l_x - x, t) + \theta_x^\infty(2i l_x + x, t) \right] \quad (4.4)$$

L'intérêt de la solution obtenue par la méthode des images (Eq.4.4), est de converger très rapidement aux temps courts contrairement à l'expression que l'on obtient en résolvant le système par séparation des variables, qui elle, converge très rapidement aux temps longs [2, p.207] :

$$\theta_x(x, t) = \frac{\phi_0}{l_x \rho C} t + \frac{2\phi_0}{l_x \lambda_x} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\cos(\mu_i x)}{\mu_i^2} \left(1 - e^{-a_x \mu_i^2 t} \right) \quad \text{avec} \quad \mu_i = \frac{i \pi}{l_x} \quad (4.5)$$

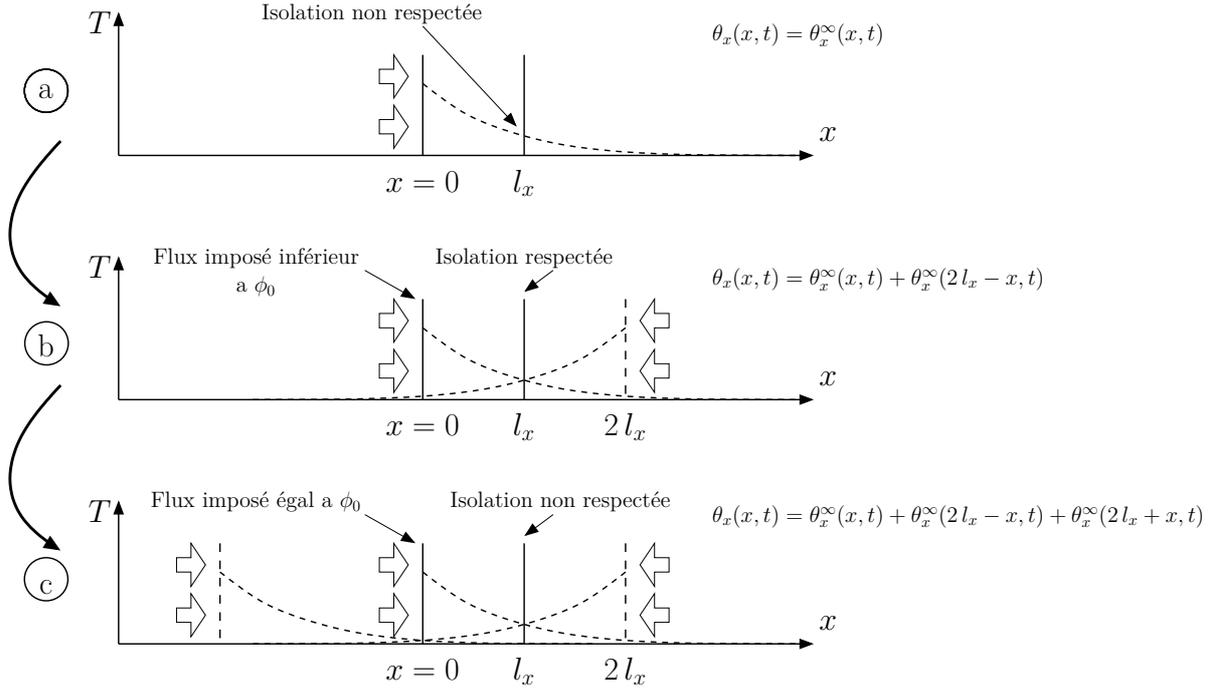


Figure 4.2 – Principe de la méthode des images. On superpose une infinité de solutions obtenues pour un mur semi-infini de manière à obtenir les conditions limites du mur fini.

Par ailleurs, la dérivée de la solution (Eq.4.4) est parfaitement définie en $x = 0$ et $x = l_x$ alors qu'elle est nulle avec l'expression (Eq.4.5). On peut aussi majorer l'erreur $e_M(x, t)$ générée avec l'expression (Eq.4.4) lorsqu'on tronque la série à l'indice $i = M$:

$$\begin{aligned}
 e_M(x, t) &= \left| \sum_{i=M}^{\infty} \theta_x^{\infty}(2i l_x - x, t) + \theta_x^{\infty}(2i l_x + x, t) \right| & (4.6) \\
 &< 2 \sum_{i=M}^{\infty} \theta_x^{\infty}(2(i-1) l_x, t) \\
 &< \frac{4 \phi_0}{b_x} \sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{i=M}^{\infty} \exp\left(-\frac{(i-1)^2}{\text{Fo}_x}\right) \quad \text{avec} \quad \text{Fo}_x = \frac{a_x t}{l_x^2}
 \end{aligned}$$

En minorant le contenu de l'exponentielle, on peut simplifier l'expression :

$$\begin{aligned}
 e_M(x, t) &< \frac{4 \phi_0}{b_x} \sqrt{\frac{t}{\pi}} \sum_{i=M}^{\infty} \exp\left(-\frac{M(i-1)}{\text{Fo}_x}\right) \\
 &< \frac{4 \phi_0}{b_x} \sqrt{\frac{t}{\pi}} \exp\left(\frac{M}{\text{Fo}_x}\right) \frac{\exp\left(-\frac{M^2}{\text{Fo}_x}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{M}{\text{Fo}_x}\right)} \\
 &< \frac{2 \phi_0}{b_x} \sqrt{\frac{t}{\pi}} \frac{\exp\left(-\frac{M(M-1)}{\text{Fo}_x}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{M}{\text{Fo}_x}\right)}
 \end{aligned}$$

Dans la suite, l'expression (Eq.4.4) est utilisée avec des matériaux relativement isolants

Paramètres	Valeurs	Unités
ρC (exact)	$1,7 \cdot 10^6$	$J m^{-3} \text{ } ^\circ C^{-1}$
λ_x (exact)	0,6	$W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$
λ_y (exact)	4,7	$W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$
$\widetilde{\rho C}$	$1,6 \cdot 10^6$	$J m^{-3} \text{ } ^\circ C^{-1}$
$\widetilde{\lambda}_x$	0,5	$W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$
$\widetilde{\lambda}_y$	5,0	$W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$
l_x, l_y	5	cm
ϕ_0	$25 \cdot 10^3$	W
σ_{ϕ_0}	50	$W m^{-2}$
σ_m	0,1	$^\circ C$
$\sigma_{x,TC}, \sigma_{y,TC}$	0,5	mm

Tableau 4.1 – Valeurs des paramètres du modèle

($\lambda < 5 W m^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$) et à des instants $t < 60 s$, si bien que seuls les trois premiers termes suffisent. On a en effet $e_2(t = 60 s) < 1,0 \cdot 10^{-23} \text{ } ^\circ C$ suivant x et $e_2(t = 60 s) < 1,6 \cdot 10^{-1} \text{ } ^\circ C$ suivant y . L'écart entre ces deux valeurs est du à l'anisotropie relativement forte ($\lambda_y \approx 10 \lambda_x$). Ces évaluations ont été réalisées avec les valeurs exactes des paramètres inconnus (Tab.4.1). La solution du modèle est donc finalement :

$$T(x, y, t) = \theta_x^\infty(x, t) + \theta_x^\infty(2l_x - x, t) + \theta_x^\infty(2l_x + x, t) + \theta_y^\infty(y, t) + \theta_y^\infty(2l_y - y, t) + \theta_y^\infty(2l_y + y, t) \quad (4.7)$$

Les champs de température à 3 instants distincts sont présentés dans la figure (Fig.4.3)

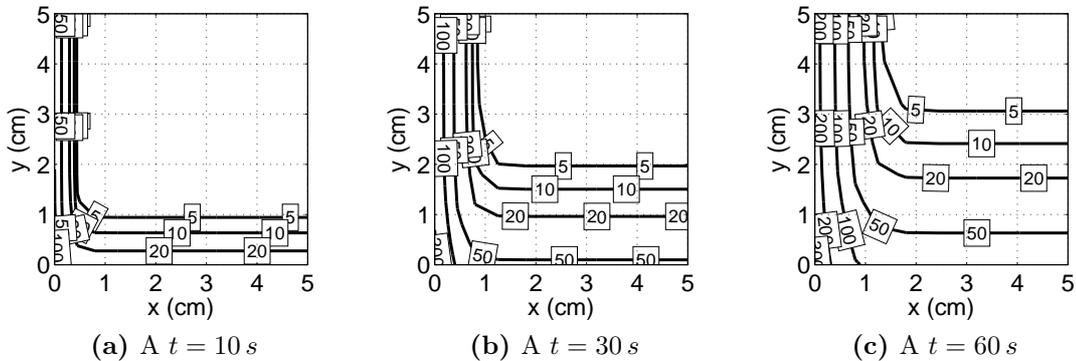


Figure 4.3 – Champs de température dans l'échantillon.

1.3 La solution du problème inverse

Le vecteur β des paramètres inconnus s'écrit :

$$\beta = [\lambda_x, \lambda_y, \rho C]^T$$

Pour estimer ces paramètres, on dispose de 3 thermocouples que l'on place sur l'échantillon. Leurs positions respectives sont notées (x_{TCi}, y_{TCi}) avec $i \in \{1, 2, 3\}$. Le pas de temps de la mesure est de 1 s. La durée totale de l'expérience étant $t_f = 60$ s, on dispose de 180 observables.

La méthode utilisée pour identifier les paramètres β est le maximum de vraisemblance (MLE) (§2.5 p25). En supposant que les mesures de température sont indépendantes et entachées d'un bruit de mesure de même écart-type σ_m , la solution $\hat{\beta}$ doit être alors obtenue en minimisant la fonctionnelle suivante :

$$J(\beta) = (Y^* - Y_{(\beta)})^T (Y^* - Y_{(\beta)}) \quad (4.8)$$

1.4 Influence des paramètres supposés connus

L'estimateur MLE permet d'obtenir la solution $\hat{\beta}$ à partir du vecteur des observables Y^* en minimisant la fonction objectif (Eq.4.8). A part les paramètres β , tous les autres paramètres sont constants et supposés parfaitement connus. La matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ caractérise la dispersion de l'estimateur due au seul bruit de mesure :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = [X_{\beta}^T W X_{\beta}]^{-1} = \sigma_m^2 [X_{\beta}^T X_{\beta}]^{-1} \quad (4.9)$$

Le fait que les paramètres supposés connus puissent être erronés n'est pas pris en compte. Pour remédier à cela, il est possible d'utiliser plusieurs approches. Il s'agit par exemple de la méthode MAP (§2.6 p28) qui considère les paramètres supposés connus comme des paramètres inconnus et qui seront également estimés lors de l'inversion. L'information a priori évite alors que le problème ne devienne mal-conditionné.

1.4.1 Le maximum de vraisemblance étendue

Une autre solution est proposée par Fadale [3, 4] intitulé « Extended Maximum Likelihood Estimator » (EMLE). Le principe de cet estimateur est de pondérer les observables en fonction de leur sensibilité aux paramètres supposés connus. Prenons par exemple le cas d'une expérience avec un coefficient d'échange h , généralement pas très bien connu. Ce coefficient n'influence pas tous les observables de la même façon. Les observables les plus sensibles aux erreurs sur h , seront pondérés par un petit coefficient pour qu'ils exercent moins d'influence sur l'estimation.

Le principe de cette méthode est de considérer toute l'expérience comme la réalisation d'une variable aléatoire. Par exemple, on considère alors les dimensions de l'échantillon comme des variables aléatoires. Il en est de même pour la position des capteurs, etc. Pour obtenir expérimentalement une dispersion de ces paramètres, il faudrait réaliser plusieurs fois le dispositif expérimental intégralement puis mesurer tous ces paramètres.

Supposons que le modèle $Y(\beta, \gamma)$ corresponde parfaitement à l'expérience et qu'il n'y ait pas de bruit de mesure. On a alors une concordance parfaite entre les sorties du modèle et les observables. Cependant, le bruit de mesure et les paramètres supposés connus γ sont aléatoires. Une linéarisation du modèle autour de la solution $(\hat{\beta}, \hat{\gamma})$ permet de calculer la matrice de variance-covariance de Y^* :

$$Y^* = Y(\hat{\beta}, \hat{\gamma}) + X_\beta(\beta - \hat{\beta}) + X_\gamma(\gamma - \hat{\gamma}) + e_m \quad (4.10)$$

En supposant que β , γ et e sont indépendants, la matrice de variance-covariance des observables s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{cov}(Y^*) &= \underbrace{\text{cov}(e_m)}_{\text{Bruit de mesure}} + \underbrace{X_\gamma \text{cov}(e_\gamma) X_\gamma^T}_{\text{Paramètres supposés connus}} \\ &= W^{-1} + X_\gamma Q^{-1} X_\gamma^T \end{aligned} \quad (4.11)$$

Cette matrice de variance-covariance correspond au « bruit de mesure équivalent » (« equivalent experimental noise » [4]). Il prend en compte le bruit de mesure et les paramètres supposés connus. Les observables sensibles à certains paramètres γ auront ainsi un bruit équivalent élevé. Alors qu'avec l'estimateur MLE ou MAP, cette matrice reste généralement assez simple, la matrice $\text{cov}(Y^*)$ est maintenant une matrice pleine. La solution $\hat{\beta}$ est ensuite obtenue en maximisant la vraisemblance, ou de manière équivalente en minimisant la quantité suivante :

$$J(\beta) = (Y^* - Y)^T W_{\text{emle}} (Y^* - Y) \quad \text{avec} \quad W_{\text{emle}} = \text{cov}(Y^*)^{-1} \quad (4.12)$$

La résolution de ce problème de minimisation est un peu plus complexe dans le cas non-linéaire que dans ceux rencontrés précédemment, puisque la matrice W dépend maintenant de X_γ donc potentiellement de β . L'expression de la dérivée¹ de J est donnée dans [3, 4]. Quant à la matrice de variance-covariance de $\hat{\beta}$, on l'obtient une fois de plus par linéarisation du modèle autour de

1. La dérivée n'est pas nécessaire si on utilise une méthode d'ordre 0 pour minimiser cette fonction objectif. Contrairement aux méthodes de type gradient, qui sont des méthodes d'ordre 1 et plus, les méthodes d'ordre 0 (voir §3.3 p38 et §3 p238) n'utilisent que la valeur de la fonctionnelle pour déterminer le minimum d'une fonction, et non les dérivées. Cependant, pour des problèmes d'estimation avec peu de paramètres à déterminer, ces algorithmes sont moins performants.

la solution :

$$\text{cov}(\hat{\beta}) = \left[X_{\beta}^T W_{\text{emle}} X_{\beta} \right]^{-1} \quad (4.13)$$

Un exemple de cet estimateur est traité en annexe (Annexe 11 p352).

1.4.2 Les paramètres supposés connus et le maximum de vraisemblance

Bien que la méthode du Maximum de Vraisemblance Etendue (EMLE) puisse être utilisée ici pour estimer les conductivités thermiques λ_x et λ_y , ainsi que la capacité thermique volumique ρC (Fig.4.1), nous utilisons ici une approche basée sur la méthode classique du Maximum de Vraisemblance (MLE). La matrice de variance-covariance associée au vecteur solution $\hat{\beta}$ est alors donnée par la relation (Eq.4.9). Par définition, celle-ci ne prend en compte que le bruit de mesure. Pour prendre en compte l'incertitude sur les paramètres supposés connus, on peut linéariser le modèle autour des paramètres exacts $\dot{\beta}$ et $\dot{\gamma}$ (Eq.4.10), puis l'injecter dans l'expression analytique de la solution (Eq.1.29 p20) qui prévaut dans le cas d'un modèle linéaire. On a ainsi :

$$\hat{\beta} = \left[X_{\beta}^T W X_{\beta} \right]^{-1} X_{\beta}^T W \left(Y^* - Y(\dot{\beta}, \dot{\gamma}) + X_{\beta} \dot{\beta} - X_{\gamma}(\gamma - \dot{\gamma}) \right) \quad (4.14)$$

Le terme $X_{\gamma}(\gamma - \dot{\gamma})$ correspond à la perturbation due à une erreur sur les paramètres supposés connus. Les matrices de sensibilité X_{β} et X_{γ} sont calculées pour $\dot{\beta}$ et $\dot{\gamma}$ et ne sont pas aléatoires. La matrice de variance-covariance de $\hat{\beta}$ est ainsi :

$$\text{cov}_{\text{ext}}(\hat{\beta}) = \left[X_{\beta}^T W X_{\beta} \right]^{-1} X_{\beta}^T W \left[\underbrace{\text{cov}(Y^*)}_{=W^{-1}} + X_{\gamma} \text{cov}(\gamma) X_{\gamma}^T \right] W X_{\beta} \left[X_{\beta}^T W X_{\beta} \right]^{-1} \quad (4.15)$$

En pratique, il n'est pas nécessaire de considérer l'effet de tous les paramètres supposés connus γ du modèle. Pour cette étude numérique, on se restreint à :

la densité de flux ϕ_0 : Pour prendre en compte une éventuelle erreur sur ϕ_0 , on considère ce paramètre comme une variable aléatoire d'écart-type $\sigma_{\phi_0} = 50 \text{ W/m}^2$ et de moyenne ϕ_0 .

la position des thermocouples : Les positions (x_{TCi}, y_{TCi}) ne sont jamais complètement maîtrisées. On modélise cette incertitude avec une loi normale d'écart-type $\sigma_p = \sigma_{xTCi} = \sigma_{yTCi} = 0,5 \text{ mm}$.

D'autres erreurs, comme l'erreur de synchronisation entre l'excitation thermique et la mesure, les défauts d'isolation en $x = l_x$ et $y = l_y$ sont négligés. Les erreurs dues aux non-linéarités des propriétés thermophysiques ou au caractère intrusif des capteurs sont aussi négligés.

2 Conception optimale d'expérience

2.1 Le problème d'optimisation

Un dispositif expérimental dédié à l'estimation d'un ou plusieurs paramètres thermophysiques fait intervenir plusieurs paramètres que l'utilisateur doit fixer. Il s'agit par exemple de la puissance et du type d'excitation thermique, de la position des capteurs ou de la taille de l'échantillon. Après une éventuelle discrétisation et/ou paramétrisation, ces degrés de liberté sur le dispositif constituent les « paramètres ajustables » de l'expérience, notés π . Dans le système présenté dans la section précédente, les paramètres ajustables sont les positions des thermocouples :

$$\pi = [x_{TC1}, x_{TC2}, x_{TC3}, y_{TC1}, y_{TC2}, y_{TC3}]^T \quad (4.16)$$

La conception optimale d'expérience consiste ici à répondre à la question suivante : où doit-on placer les 3 thermocouples de manière à ce que le problème d'estimation de paramètres fournisse les paramètres thermophysiques $\hat{\beta}$ avec la meilleure précision possible ?

2.2 Le paradoxe de la conception optimale d'expérience

Que ce soit avec l'estimateur MLE ou le MAP, les écarts-types des paramètres thermophysiques $\hat{\beta}$ sont obtenus à partir de la matrice des sensibilités X_β . Celle-ci dépend du vecteur β car le problème est ici non-linéaire. Or on ne connaît pas la valeur de ces paramètres, donc on ne peut pas calculer cette matrice. On ne peut que calculer des approximations avec des valeurs $\tilde{\beta}$ que l'utilisateur juge vraisemblables. Si les non-linéarités du problème sont faibles, le fait de calculer $\text{cov}(\hat{\beta})$ avec $\hat{\beta}$ ou $\tilde{\beta}$ n'a alors qu'un effet marginal.

L'estimateur utilisé est également déterminant. D'un estimateur à l'autre, on n'obtient pas la même matrice $\text{cov}(\hat{\beta})$. Le dispositif optimal dépend finalement de la valeur vraisemblable $\tilde{\beta}$ de la solution, de l'estimateur utilisé, et du critère d'optimalité utilisé.

2.3 Les critères d'optimalité standards

Avec les critères d'optimalité classiques, déterminer le meilleur dispositif, c'est déterminer les paramètres ajustables π de façon à obtenir la meilleure matrice d'information ou la meilleure matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$. Comme il n'est pas possible de comparer directement deux matrices, on utilise un critère d'optimalité qui permet d'associer une valeur scalaire à une matrice. Le meilleur dispositif est alors celui qui possède la meilleure valeur du critère. Il existe plusieurs critères d'optimalité [5]. La majorité sont construits à partir de la matrice d'information ou de la matrice de variance-covariance.

2.3.1 Critère « D-optimality »

Le critère d'optimalité le plus utilisé est probablement le critère D [6, 7]. Il consiste à déterminer la valeur des paramètres ajustables π de manière à maximiser le déterminant de la matrice d'information réduite $S^T W S$, avec S la matrice des sensibilités réduites (§5.2.1 p55), qui est par construction positif :

$$D = \det(S^T W S) \geq 0 \quad (4.17)$$

Le déterminant de $S^T W S$ est aussi l'inverse du déterminant de $[S^T W S]^{-1}$ qui est proportionnel au carré du volume de l'hyperellipsoïde de confiance [5, 8, 9]. En augmentant le critère D, on diminue le volume V de cet hyperellipsoïde :

$$V \propto \sqrt{\prod \frac{1}{\lambda_i}} = \frac{1}{\sqrt{D}}$$

En d'autres termes, cela tend à réduire l'influence du bruit de mesure. L'inconvénient de ce critère, comme toute mesure globale, est de masquer des disparités assez importantes entre les écarts-types relatifs σ_{β_i}/β_i . Le déterminant, c'est à dire le produit des valeurs propres peut augmenter, mais ça n'implique pas que toutes les valeurs propres augmentent.

Des applications de ce critère peuvent être trouvées dans [7, 10, 11].

2.3.2 Critère « E-optimality »

Le critère E est basé sur les valeurs propres λ de $S^T W S$. Il consiste à maximiser la plus petite valeur propre :

$$E = \lambda_{min} \quad (4.18)$$

Les valeurs propres maximales et minimales λ_{max} et λ_{min} sont respectivement inversement proportionnelles au carré du demi-petit axe et du demi-grand axe de l'hyperellipsoïde de confiance. Ainsi, en maximisant le critère E, on réduit l'écart entre λ_{max} et λ_{min} , ce qui a pour tendance de transformer l'hyperellipsoïde en hypersphère, tout en réduisant son volume.

2.3.3 Critère « E'-optimality »

Le critère E modifié (« modified E-optimality »), noté ici E', est défini à partir du nombre de conditionnement de la matrice symétrique $S^T W S$:

$$E' = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}} \quad (4.19)$$

En minimisant ce critère, on cherche à transformer l'hyperellipsoïde en hypersphère, ce qui tend à décorrélérer les paramètres. Cependant, un faible nombre de conditionnement n'implique

pas que les valeurs propres soient les plus grandes possibles. Autrement dit, minimiser E' ne réduit pas nécessairement les écarts-types des estimations. Par ailleurs, d'après Franceschini [5], ce critère n'est pas continu mathématiquement, ce qui peut être problématique avec des algorithmes d'optimisation de type gradient. Des exemples d'utilisation de ce critère sont donnés par Nahor [6, 12] ou par Mzali [7].

2.3.4 Critère « A-optimality »

Il existe deux définitions non équivalentes de ce critère. La première consiste à maximiser la trace de la matrice d'information :

$$A_1 = \text{trace}(\underbrace{S^T W S}_{\text{cov}(\hat{\beta})^{-1}}) = \sum_{i=1}^{n_\beta} \lambda_i \quad (4.20)$$

La trace est invariante par changement de base. Elle est ainsi égale à la somme des valeurs propres λ . Augmenter la trace tend à augmenter certaines valeurs propres et donc à réduire la longueur des axes de l'hyperellipsoïde. Ce critère n'est plus utilisé car il ne prend pas en compte les corrélations entre les paramètres et peut conduire à des résultats aberrants (§2.6 p232).

Il est aussi possible de minimiser la trace de la matrice de variance-covariance $\text{cov}(\hat{\beta})$ qui s'écrit avec l'estimateur MLE :

$$A_2 = \text{trace}(\underbrace{[S^T W S]^{-1}}_{\text{cov}(\hat{\beta})}) = \sum_{i=1}^{n_\beta} \frac{\sigma_{\beta_i}^2}{\beta_i^2} \quad (4.21)$$

En minimisant ce critère, on minimise la somme des variances relatives des paramètres. Des exemples d'utilisation de ce critère sont donnés par Nahor [6].

2.3.5 Synthèses des critères

La plupart des critères vont dans le même sens. En augmentant les valeurs propres, on réduit d'une manière ou d'une autre le volume ou les axes de l'hyperellipsoïde de confiance. Mais ces critères ne sont pas équivalents : maximiser la trace (critère A_1) ou le déterminant (critère D) n'aboutit à la même solution. De même, maximiser A_1 n'est pas équivalent à minimiser A_2 .

Il peut être intéressant d'utiliser plusieurs critères simultanément pour compenser les inconvénients des uns et des autres, par exemple les critères D et E' [7]. La difficulté est alors de résoudre un problème d'optimisation multiobjectif. D'autres critères sont aussi possibles. Par exemple, pour améliorer l'estimation de la diffusivité thermique avec une méthode flash, Vozar [13] utilise le déterminant de $S^T S$ qu'il divise par le déterminant d'une sous partie de cette même matrice.

Remarque : Matrice des sensibilités et des sensibilités réduites

Les critères d'optimalité présentés se basent tous sur la matrice des sensibilités réduites (§5.2.1 p55). Cependant, si on utilise la définition classique des sensibilités réduites, on peut rencontrer des problèmes lorsque certains paramètres sont nuls. Il n'y a pas, à ma connaissance, de solution, si ce n'est d'utiliser une autre définition. Cependant, certains critères sont dépendants de la paramétrisation utilisée. A ce propos, la solution obtenue avec le critère D a l'avantage d'être invariant à un changement de paramétrisation linéaire.

2.4 Le critère F

Lorsque les critères d'optimalité présentés précédemment sont utilisés conjointement avec l'estimateur du maximum de vraisemblance, ils ne prennent pas en compte les paramètres supposés connus γ du problème inverse alors que ces derniers peuvent devenir la source principale des incertitudes. De façon à conserver l'estimateur MLE, le critère d'optimalité proposé ici consiste à utiliser l'expression « étendue » de la matrice de variance-covariance $cov_{ext}(\hat{\beta})$ (Eq.4.15).

Avec $\sigma_{\beta_i}^2$ le $i^{\text{ème}}$ coefficient diagonal de $cov_{ext}(\hat{\beta})$, on définit le critère $F_{\tilde{\beta}}$ à partir de la somme quadratique des variances relatives :

$$F_{\tilde{\beta}}(\pi) = \sum_{i=1}^{n_{\beta}} \left(\frac{\sigma_{\beta_i}}{\beta_i} \right)^2 \tag{4.22}$$

La notation $F_{\tilde{\beta}}(\pi)$ signifie que les paramètres ajustables² à déterminer sont les paramètres π . Mais l'expression dépend aussi de $\tilde{\beta}$ qui est fixé au préalable par l'utilisateur. Par ailleurs, le critère dépend aussi des paramètres supposés connus γ et également de l'incertitude estimée sur ces paramètres. Cependant, il n'est pas nécessairement utile de considérer que tous les paramètres γ sont sujets à une erreur puisque certains d'entre eux peuvent n'avoir aucune influence. Aussi, on ne prend en compte ici que l'incertitude sur le flux ϕ_0 et sur la position des capteurs x_{TC} et y_{TC} . L'utilisateur doit donc fournir une estimation de l'incertitude sur ces paramètres, c'est à dire la valeur de σ_{ϕ_0} et σ_{xTC} (Tab.4.1 p223).

Lorsque les paramètres supposés connus γ le sont parfaitement, le critère $F_{\tilde{\beta}}$ se réduit à la trace de la matrice de variance-covariance réduite $S^T W S$, c'est à dire au critère A_2 . Par ailleurs, le critère F permet de se focaliser davantage sur certains paramètres. La somme de 1 à n_{β}

2. Les paramètres « ajustables » sont des paramètres constitutifs du dispositif expérimental que l'expérimentateur peut librement modifier. Il s'agit par exemple de la position d'un capteur, des dimensions d'un échantillon. Mais tous les paramètres ne sont pas ajustables. Citons par exemple un coefficient d'échange, les paramètres d'étalonnage d'un capteur...

pourrait être effectuée uniquement sur les paramètres qui nous intéressent.

2.5 La conception optimale et la conception robuste

La solution au problème de conception optimale dépend tout d'abord du choix du critère d'optimalité : les paramètres ajustables optimums $\hat{\pi}$ dépendent de la façon de traiter les données. Cependant, elle dépend également des paramètres thermophysiques $\hat{\beta}$ qui sont inconnus. Une première approche consiste à itérer :

1. Une première conception optimale du dispositif est réalisée avec une estimation grossière de la solution.
2. On résout le problème d'estimation de paramètres ce qui fournit la solution $\hat{\beta}$.
3. Une seconde conception optimale est réalisée avec cette solution.
4. Le problème d'estimation est à nouveau résolu.

Une seconde approche, utilisée ici, consiste à résoudre le problème de conception optimale en considérant qu'il existe une incertitude sur le paramètre $\tilde{\beta}$. Optimiser une fonction objectif avec une incertitude sur certains paramètres s'appelle « l'optimisation robuste » [14]. On distingue plusieurs types d'incertitudes. Dans notre cas, il s'agit d'une incertitude intitulée « changing environmental and operating conditions » (dite de type A dans [14]).

Beyer propose trois façons d'intégrer une incertitude dans le problème d'optimisation : « deterministic type », « probabilistic type », « possibilistic type ». L'approche utilisée ici est de type déterministe : on spécifie un intervalle de variation sur chaque paramètre incertain, qui, on l'espère, inclut la solution $\hat{\beta}$. Au lieu d'utiliser une seule valeur $\tilde{\beta}$ pour réaliser la conception de l'expérience, on considère un ensemble H de scénarios possibles $\hat{\beta}$:

$$H = [\beta_1^{min} \quad \beta_1^{max}] \times \dots \times [\beta_{n_\beta}^{min} \quad \beta_{n_\beta}^{max}] \quad (4.23)$$

Un dispositif robuste est donc un dispositif qui reste « presque » optimal pour tous les matériaux ayant des propriétés thermophysiques $\beta \in H$, contrairement à un dispositif optimal uniquement pour les paramètres $\tilde{\beta}$. On formalise cette condition en définissant le critère FR_H (« R » pour « robuste ») :

$$FR_H(\pi) = \max_{\beta \in H} (F_\beta(\pi)) \quad (4.24)$$

Pour un dispositif donné, le critère robuste FR_H est ainsi égal à la pire des valeurs du critère $F_{\tilde{\beta}}$ lorsque l'on considère toutes les solutions possibles $\hat{\beta}$ de H . Cette façon de procéder est appelée « the worst case approach » [14] : parmi un ensemble de scénarios possibles, on se veut prudent en considérant le pire de tous.

Chapitre 4. Conception optimale d'expérience

Tel qu'il est défini, l'évaluation de $FR_H(\pi)$ (déterminer la valeur maximale du critère $F_{\tilde{\beta}}$ pour $\beta \in H$) est relativement complexe. On simplifie le problème en évaluant le critère uniquement au centre des faces de l'hypercube H , ainsi qu'au centre de l'hypercube lui-même (qui correspond à $\tilde{\beta}$). L'évaluation de $FR_H(\pi)$ nécessite donc d'évaluer $1 + 2n_\beta$ fois le critère $F_{\tilde{\beta}}$. Le critère robuste $FR_H(\pi)$ s'écrit en effet :

$$FR_H(\pi) = \max \left[F_{\tilde{\beta}}(\pi), F_{\beta_1}(\pi), F_{\beta_2}(\pi), \dots, F_{\beta_{2n_\beta}}(\pi) \right] \quad (4.25)$$

$$\text{Avec } \begin{cases} \beta_1 &= [\tilde{\beta} - \delta\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_{n_\beta}]^T \\ \beta_2 &= [\tilde{\beta} + \delta\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \dots, \tilde{\beta}_{n_\beta}]^T \\ \vdots & \\ \beta_{2n_\beta} &= [\tilde{\beta}_1, \dots, \tilde{\beta}_{n_\beta-1}, \tilde{\beta}_{n_\beta} + \delta\tilde{\beta}_{n_\beta}]^T \end{cases}$$

Avec n_β le nombre de paramètres thermophysiques à estimer après la conception optimale d'expérience. Quant à $\delta\tilde{\beta}_i$, il s'agit des demis-côtés de l'hypercube H .

Dans la suite de ce chapitre, l'approche standard de la conception optimale et l'approche robuste sont comparées. Concernant l'approche standard, la solution $\hat{\pi}$ correspond aux positions des thermocouples qui minimisent le critère $F_{\tilde{\beta}}(\pi)$ (Eq.4.22) qui prend en compte l'incertitude sur l'excitation thermique ϕ_0 et l'incertitude de positionnement des thermocouples. $\tilde{\beta}$ n'est pas pris égal à $\dot{\beta}$, puisqu'il est inconnu, mais à une valeur relativement proche (Tab.4.1) :

$$\tilde{\beta} = \begin{bmatrix} \tilde{\lambda}_x \\ \tilde{\lambda}_y \\ \widetilde{\rho C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0, 5 \\ 5, 0 \\ 1, 6.10^6 \end{bmatrix} \quad \text{alors que} \quad \dot{\beta} = \begin{bmatrix} \dot{\lambda}_x \\ \dot{\lambda}_y \\ \dot{\rho C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0, 6 \\ 4, 7 \\ 1, 7.10^6 \end{bmatrix}$$

Quant à la conception robuste, l'ensemble H des scénarios possibles est défini par :

$$\hat{\lambda}_x \in [0, 3 \quad 0, 7] \quad \text{et} \quad \hat{\lambda}_y \in [3, 0 \quad 7, 0] \quad \text{et} \quad \widehat{\rho C} \in [1, 4.10^6 \quad 1, 8.10^6]$$

2.6 Cas du système monodimensionnel

Avant d'aborder le système complet dont l'espace des paramètres ajustables est de dimension 6, on présente ici le cas simplifié d'un mur monodimensionnel soumis à une densité de flux constante ϕ_0 sur sa face de gauche et isolé sur sa face de droite (Fig.4.4). L'objectif est de déterminer la position y du thermocouple $TC1$, qui permettra d'estimer λ_y et ρC le mieux possible, sachant que l'on dispose d'une mesure toutes les secondes pendant 1 min . Pour clarifier les idées, rappelons les différents vecteurs de paramètres et leur définition dans ce cas particulier :

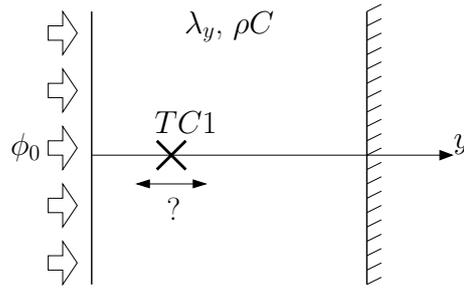


Figure 4.4 – Schéma du système simplifié

Paramètres inconnus β à estimer : $\beta = [\lambda_x \ \lambda_y \ \rho C]^T$

Paramètres supposés connus γ du système : $\gamma = [\phi_0 \ y_{TC1} \ l_y]$

Paramètres ajustables π du système : $\pi = y_{TC1}$

Rappelons également, que seules les incertitudes sur ϕ_0 et y_{TC1} sont prises en compte dans le calcul du critère d'optimalité $F_{\tilde{\beta}}$. La matrice $\text{cov}(\gamma)$ est donc de dimension 2×2 .

La figure (Fig.4.5.a) présente l'évolution de 7 critères d'optimalité ($F_{\tilde{\beta}}$, FR_H , E , E' , D , A_1 , A_2) en fonction de la position du capteur $TC1$. L'objectif est de comparer les solutions obtenues avec tel ou tel critère. Certains critères d'optimalité doivent être maximisés, d'autres minimisés. La position optimale du capteur pour chaque critère est repérée par une ligne verticale en pointillés. On constate par exemple que le critère D (symbole ∇) est maximal pour $y = 0,5 \text{ cm}$. Cela correspond à la position optimale du capteur associée à ce critère. Cependant, le critère E' (\circ) est minimal en $y = 0,8 \text{ cm}$. Avec la trace A_2 (Δ), la position optimale coïncide avec celle du critère D . Quant aux critères $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H , les minimums sont significativement différents de ceux obtenus avec les critères standards. D'après le critère robuste FR_H , le capteur doit être placé en $y = 2 \text{ mm}$ et d'après le critère $F_{\tilde{\beta}}$, en $y = 2,1 \text{ mm}$.

Remarque sur le critère A_1

La figure (Fig.4.5.a) semble montrer que le critère A_1 décroît de façon monotone. La solution optimale est ainsi en $y = 0$, ce qui est sans doute la position où la norme des vecteurs de sensibilités est maximale. C'est aussi la position où ces paramètres sont corrélés ce qui empêche leur estimation. Comme le font remarquer certains auteurs (voir [5]), ce critère d'optimalité ne doit pas être employé puisqu'il peut conduire, comme ici, à des résultats aberrants car il ne prend pas en compte les corrélations entre les paramètres. Cependant, cela ne concerne pas le critère A_2 .

La figure (Fig.4.5.b) montre l'évolution de l'écart-type relatif théorique des paramètres λ_y et ρC en fonction de la position du capteur $TC1$ et suivant 3 scénarios :

1. Les lignes notées « Bruit de mesure seulement » correspondent aux écarts-types théoriques de λ_y et ρC calculés avec l'expression (Eq.4.15) en considérant que la position du ther-

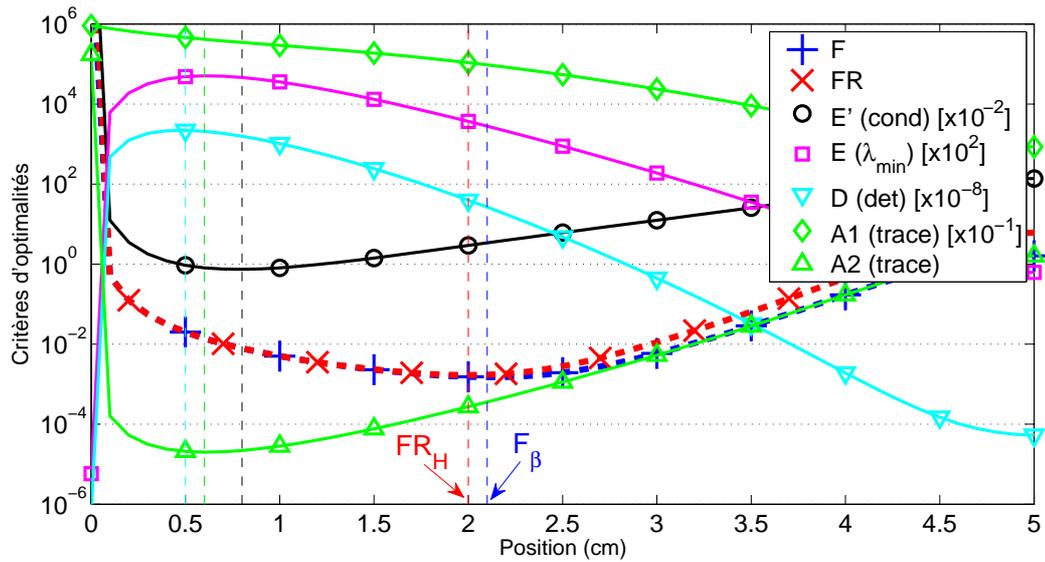
mocouple est parfaitement maîtrisée ($\sigma_{y_{TC1}} = 0$). Ces deux courbes tendent vers l'infini en $y = 0$ car on peut montrer qu'il n'est pas possible d'estimer λ_y et ρC simultanément avec seulement des mesures en face avant (sur la paroi $y = 0$) : plus on se rapproche, plus ces paramètres sont corrélés. Si on éloigne le capteur de manière excessive, le rapport température sur bruit diminue ce qui provoque une augmentation des écarts-types théoriques. Il existe entre ces deux extrêmes un compromis. Cependant, on ne peut pas à la fois minimiser les écarts-types de λ_y et ρC (les minimums ne sont pas à la même position).

2. Les courbes notées « Erreur de positionnement seulement » correspondent aux écarts-types théoriques sur λ_y et ρC calculés avec l'expression (Eq.4.15) en faisant abstraction du bruit de mesure, c'est à dire avec $\sigma_m = 0^\circ C$. Lorsque le capteur est loin de la paroi $y = 0$, les gradients de température sont plus faibles si bien que l'écart de température généré par une erreur de positionnement diminue. C'est le contraire lorsque le capteur est proche de la paroi $y = 0$.
3. Quant aux lignes épaisses, elles correspondent à l'écart-type théorique obtenue avec l'expression (Eq.4.15) qui prend en compte à la fois le bruit de mesure et l'erreur de positionnement du capteur. Ces lignes sont ici la somme des courbes précédentes. Les écarts-types relatifs augmentent si le capteur est trop proche de la paroi soumise au flux de chaleur ou s'il en est trop éloigné. Pour $y < 2,2\text{ mm}$, l'incertitude sur la position du capteur domine puisqu'elle devient plus importante que l'effet du bruit de mesure. Inversement, pour $y > 2,6\text{ mm}$, c'est le bruit de mesure qui domine les écarts-types des deux paramètres.

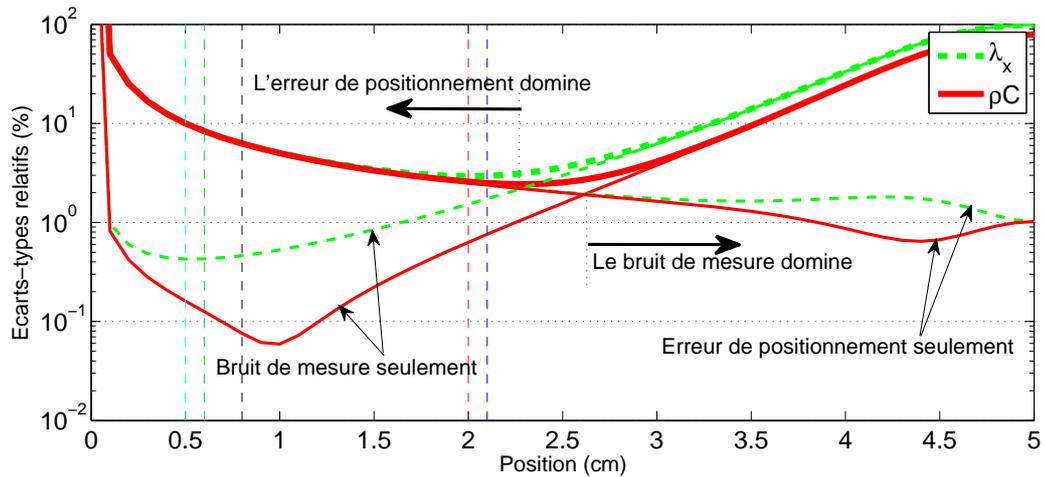
En comparant les critères d'optimalité standards avec les écarts-types, on s'aperçoit que les minimums et maximums coïncident à peu près avec les minimums des écarts-types. Cependant, le critère A_2 , D et E' accordent trop d'importance au paramètre ρC car son écart-type relatif est plus important que celui de λ_y . Aussi, le critère E' semble être préférable ici puisque la solution qu'il propose est plus proche du minimum de σ_{λ_y} sans pour autant trop dégrader $\sigma_{\rho C}$.

Quant aux critères étendus $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H , leurs solutions sont cohérentes avec les écarts-types théoriques obtenus en prenant en compte le bruit de mesure et l'erreur de positionnement. La position y du critère FR_H est inférieure à celle de $F_{\tilde{\beta}}$, car le critère robuste intègre la possibilité que λ_y puisse prendre des valeurs entre 3 et $7\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$. Rappelons que la solution proposée par le critère $F_{\tilde{\beta}}$ n'est optimale que pour $\tilde{\beta}$, c'est à dire avec $\tilde{\lambda}_y = 5\text{ W m}^{-1}\text{ }^\circ\text{C}^{-1}$.

On visualise sur cet exemple le compromis qui existe entre le bruit de mesure et l'erreur de positionnement. La position optimale du capteur dépend à la fois des perturbations que l'on prend en compte et du critère d'optimalité. Emery [15] présente un problème similaire,



(a) Différents critères d'optimalité en fonction de la position du capteur



(b) Evolution de l'écart-type théorique sur λ_y et ρC en fonction de la position du capteur et suivant que l'on considère l'effet du bruit de mesure seulement, l'erreur de positionnement uniquement ou les deux combinés.

Figure 4.5 – Evolution des critères d'optimalité et des écarts-types théoriques en fonction de la position du capteur.

où il utilise l'information de Fisher pour positionner un capteur dans une paroi afin d'estimer la conductivité d'un matériau avec un coefficient d'échange comme paramètre perturbateur. Il montre comment la solution optimale dépend du critère utilisé, et notamment s'il prend ou non en compte le coefficient d'échange (estimateur EMLE ou MLE).

Remarque :

Les expressions « Bruit de mesure seulement » et « Erreur de positionnement seulement » peuvent être un peu trompeuses car l'incertitude sur ϕ_0 est toujours prise en compte. C'est notamment pour cela que l'écart-type

relatif aux paramètres λ_y et ρC ne tendent pas vers 0 lorsque y_{TC1} tend 5 cm (Fig.4.5) dans le cas « Erreur de positionnement seulement ».

2.7 Cas du système complet

Dans l'exemple monodimensionnel, l'espace des dispositifs possibles $\pi = [y_{TC1}]^T$ est de dimension 1 et permet donc une résolution graphique. Pour le système complet, l'espace est de dimension 6 et la méthode de résolution doit évoluer en conséquence. Sur la figure (Fig.4.6), quelques solutions $\hat{\pi}$ obtenues avec différents critères d'optimalité sont présentées. Les figures (b) et (c) se basent respectivement sur le critère D et le critère E' tandis que (a) présente la configuration choisie par Sawaf et al [1]. Ces critères ne prennent pas en compte l'erreur de positionnement si bien que l'algorithme n'hésite pas à s'approcher de la paroi $x = 0$ où il existe de forts gradients de température. Quant aux critères $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H qui prennent en compte l'erreur de position, on constate qu'aucun des thermocouples n'est placé à moins de 4 mm du bord gauche.

Les données associées à ces solutions sont présentées dans la tableau (Tab.4.2). Les 5 solutions de la figure (Fig.4.6) correspondent aux 5 dernières colonnes. Le titre des colonnes correspond au critère retenu pour déterminer la solution $\hat{\pi}$. Les 7 premières lignes correspondent aux critères d'optimalité que l'on peut évaluer même si un seul est utilisé pour chaque colonne. Par ailleurs, la deuxième colonne précise si le critère doit être maximisé ou minimisé. Les valeurs numériques soulignées rappellent le critère utilisé pour trouver la solution. Il s'agit de la valeur finale du critère obtenue par l'algorithme de minimisation. Les cercles noirs pleins font ressortir les meilleures valeurs de chaque critère alors que les cercles vides correspondent à la seconde meilleure valeur. On constate que les valeurs soulignées sont aussi les meilleures puisque c'est le rôle de l'algorithme de déterminer $\hat{\pi}$ pour minimiser/maximiser le critère en question.

Ce tableau montre que la solution obtenue avec le critère D obtient les meilleures valeurs des critères D , A_1 , A_2 et les secondes meilleures valeurs pour E et E' . Pour ces deux critères, et notamment E' , c'est naturellement la solution obtenue avec le critère E' qui conduit à la plus petite valeur de E' .

Concernant les critères $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H , l'utilisation de FR_H dégrade naturellement $F_{\tilde{\beta}}$ mais on a l'assurance que pour toute solution $\hat{\beta} \in H$, le critère $F_{\tilde{\beta}}$ évalué en $\hat{\beta}$ est inférieur à FR_H . De plus, en prenant la racine carrée de ces critères, on obtient une quantité comparable à un écart-type. En divisant par 2 ces critères, on divise « globalement » par deux les écarts-types des paramètres $\hat{\beta}$. Ainsi, la valeur $FR_H = 0,25$ évaluée avec la solution donnée par $F_{\tilde{\beta}}$ (avant dernière colonne) signifie qu'il existe une valeur $\tilde{\beta} \in H$ qui génère un doublement des écarts-

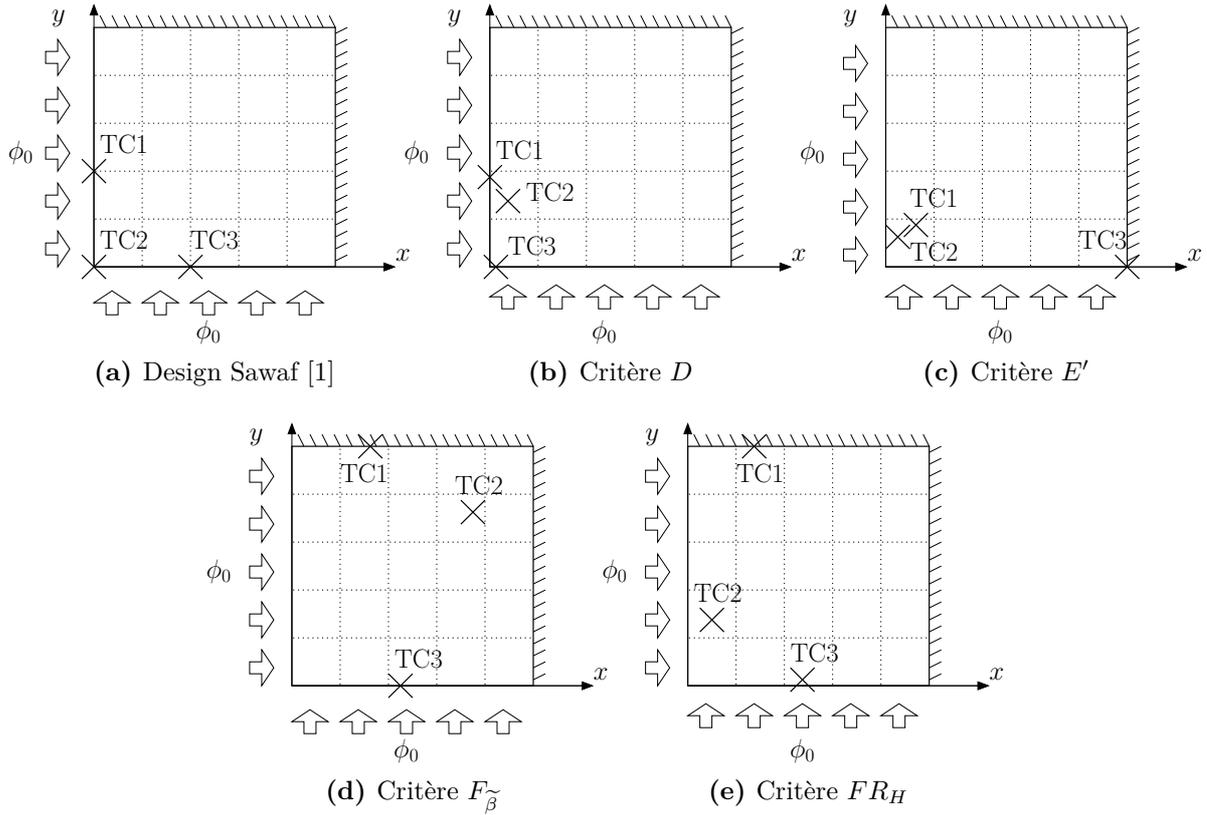


Figure 4.6 – Solutions obtenues après minimisation des critères D , E' , $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H . La minimisation est réalisée avec un algorithme de type gradient initialisé avec le design (a).

types (de 0,11 à 0,25).

Les 6 dernières lignes du tableau sont les écarts-types théoriques des trois paramètres λ_x , λ_y , ρC obtenus avec la matrice de variance-covariance standard (Eq.4.9) et avec la matrice étendue (Eq.4.15). Les valeurs obtenues avec la matrice étendue sont repérées par l'exposant ext . On constate que les solutions basées sur les critères D et E' améliorent considérablement ces valeurs comparées au dispositif de Sawaf. Par exemple, on passe de $\sigma_{\rho C} = 0,12\%$ à $\sigma_{\rho C} = 0,013\%$ avec un dispositif optimisé avec le critère D . A l'inverse, les écarts-types correspondant au dispositif $F_{\tilde{\beta}}$ sont moins bons. Concernant les écarts-types étendus σ_{\bullet}^{ext} , l'optimisation avec les critères D et E' permet de gagner un facteur 5 à 10, mais un facteur 10 à 30 est obtenu si les critères $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H sont utilisés.

Les algorithmes d'optimisation de recherche locale (§3.3 p38), comme le Simplex ou les algorithmes de type gradient, sont sensibles à l'initialisation. La figure (Fig.4.7) montre l'évolution du critère $F_{\tilde{\beta}}$ avec un algorithme de type gradient, en fonction du nombre d'évaluations du critère $F_{\tilde{\beta}}$. La ligne épaisse rouge est celle obtenue lorsque l'algorithme est initialisé avec la solution de Sawaf. Dans les autres cas, l'algorithme a été initialisé aléatoirement.

On s'aperçoit ainsi que la solution obtenue précédemment n'est pas la meilleure possible.

		Design				
Critères	Objectif	Sawaf [1]	D	E'	F_{β}^{\sim}	FR_H
D	↑	$4, 6.10^{20}$	● $1, 5.10^{22}$	○ $1, 3.10^{21}$	$4, 9.10^{15}$	$1, 5.10^{19}$
E	↑	$2, 3.10^5$	○ $3, 6.10^6$	● $3, 7.10^6$	$5, 3.10^3$	$1, 3.10^5$
E'	↓	$1, 0.10^3$	○ $5, 9.10^1$	● $2, 5.10^1$	$1, 7.10^3$	○ $2, 8.10^2$
A_1	↑	● $2, 4.10^8$	● $2, 4.10^8$	$9, 9.10^7$	$9, 2.10^6$	$1, 3.10^5$
A_2	↓	$4, 5.10^{-6}$	● $3, 3.10^{-7}$	○ $5, 4.10^{-7}$	$1, 9.10^{-4}$	$8, 0.10^{-6}$
$\sqrt{F_{\beta}^{\sim}}$	↓	2, 4	0, 76	0, 33	● <u>0, 11</u>	○ 0, 18
$\sqrt{FR_H}$	↓	4, 0	1, 1	0, 39	○ 0, 25	● <u>0, 19</u>
$\sigma_{\rho C}$		0, 12 %	○ 0, 013 %	● 0, 012 %	0, 27 %	0, 051 %
σ_{λ_x}		0, 39 %	● 0, 021 %	○ 0, 052 %	1, 4 %	0, 27 %
σ_{λ_y}		0, 10 %	○ 0, 052 %	● 0, 050 %	0, 27 %	0, 085 %
$\sigma_{\rho C}^{ext}$		130 %	9, 6 %	10 %	● 3, 8, %	○ 9, 3 %
$\sigma_{\lambda_x}^{ext}$		146 %	27 %	27 %	○ 9, 2 %	● 3, 8 %
$\sigma_{\lambda_y}^{ext}$		144 %	71 %	○ 15 %	● 5, 3 %	○ 15 %

Tableau 4.2 – Critères d'optimalité pour le dispositif proposé par Sawaf [1] et ceux obtenus avec les critères D , E' , F_{β}^{\sim} et FR_H . Le cercle plein ● correspond à la meilleure valeur de la ligne. Quant au cercle ○, il s'agit de la 2^{ème} meilleure valeur.

Avec la meilleure solution de cette figure, on a $F_{\beta}^{\sim} = 0, 083$ et les écarts-types théoriques étendus sont entre 4, 3 et 5, 5 % alors que précédemment, certains dépassent 9 %. Ce phénomène signifie que le critère F_{β}^{\sim} possède des minimums locaux dans lesquels un algorithme de recherche local peut converger prématurément sans pouvoir en sortir.

Par ailleurs, il est probable qu'en utilisant d'autres initialisations, on puisse trouver de meilleures solutions. Pour éviter d'être face à cette incertitude, il est possible d'utiliser d'autres algorithmes d'optimisation capables d'éviter, dans une certaine mesure, les minimums locaux. On peut ainsi espérer que la probabilité de trouver la meilleure solution soit plus élevée avec ces algorithmes qu'avec des méthodes de type gradient. Ces algorithmes font l'objet de la section suivante.

3 Les métaheuristiques

On rencontre le terme « métaheuristique » régulièrement dans la littérature mais il semble difficile d'en donner une définition stricte. On désigne généralement sous ce terme un ensemble d'algorithmes d'optimisation apparus depuis les années 1980 dont l'objectif est de fournir des solutions aux problèmes d'optimisation complexes pour lesquels on ne connaît pas d'autre méthode performante.

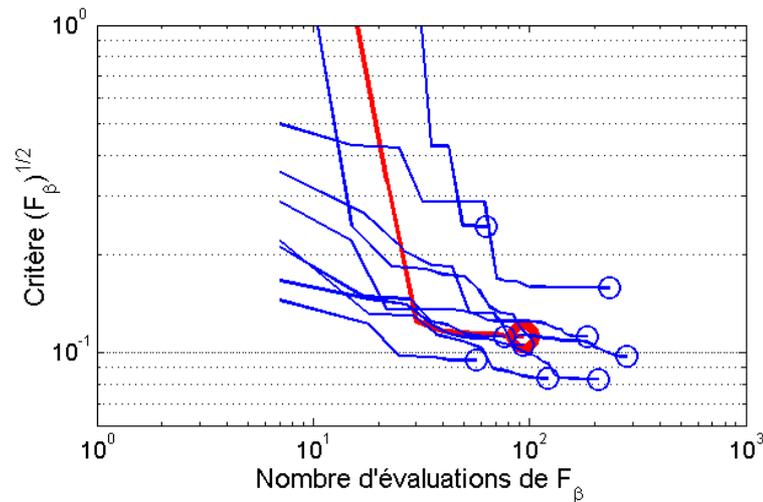


Figure 4.7 – Algorithme de gradient avec initialisation aléatoire.

3.1 Les heuristiques

La définition d'une heuristique dépend du domaine considéré. En optimisation, une heuristique désigne une astuce, une méthode, basée sur l'expérience et le bon sens pour faciliter la recherche de la solution d'un problème d'optimisation. Les heuristiques sont particulièrement utiles lorsqu'une recherche exhaustive de toutes les solutions est impossible. Cependant, l'utilisation d'une heuristique n'est généralement accompagnée d'aucune garantie. Une heuristique ne fait qu'accroître nos chances de trouver la solution, mais la solution qu'elle fournit peut être mauvaise. Trois d'exemples d'heuristiques sont proposés.

Ranger des objets dans une boîte : Un problème relativement récurrent est celui qui consiste à ranger des objets dans une boîte (ou dans un coffre de voiture). Il existe une heuristique, qu'on utilise sans le savoir, qui dit de *commencer par ranger les objets les plus gros puis seulement les objets les plus petits*

L'heuristique gloutonne (« greedy heuristic ») : Cette heuristique est la base de l'algorithme glouton qui est une méthode d'optimisation de recherche locale. Face à un choix entre plusieurs directions de recherche de la solution, cette heuristique suggère de *choisir la solution qui maximise le bénéfice immédiat*. C'est également l'idée de base des algorithmes de plus grande pente³ qui suivent la direction où la fonction à optimiser évolue le plus rapidement vers l'objectif.

Où chercher la meilleure solution ? Il s'agit d'une heuristique implicitement utilisée dans la plupart des algorithmes d'optimisation et notamment des métaheuristiques. Supposons que l'on dispose de deux candidats⁴ A et B d'un problème d'optimisation. Sachant que

3. Il s'agit d'un cas particulier des algorithmes de type gradient. Ils n'utilisent que le gradient de la fonction objectif pour déterminer la direction de recherche de la solution.

4. Un candidat est une solution potentielle du problème d'optimisation. Dans notre cas, il s'agit de la variable π , c'est à dire un vecteur spécifiant la position de chaque thermocouple.

A est meilleur que B, l'heuristique suggère de commencer par *chercher la solution à proximité de A, c'est à dire de la meilleure solution trouvée jusqu'à maintenant.*

3.2 Généralités sur les métaheuristiques

Etymologiquement, les métaheuristiques sont des abstractions des heuristiques. Il s'agit d'algorithmes basés sur des heuristiques et qui s'appuient sur 3 principes fondamentaux (Fig.4.8) [16, 17] et [18, chap.1]

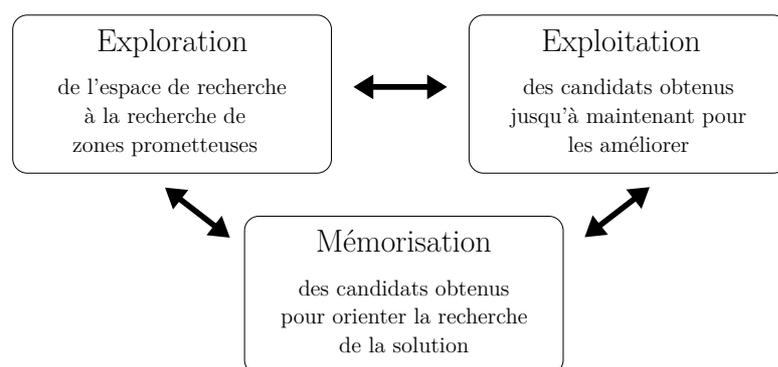


Figure 4.8 – 3 principes des métaheuristiques

Contrairement aux algorithmes de recherche locale (§3.3 p38), les métaheuristiques disposent de mécanismes d'*exploration* qui cherchent, dans l'espace des solutions, des zones prometteuses où pourrait se trouver la solution. Cependant, l'algorithme ne doit pas seulement *explorer* l'espace, mais aussi *exploiter* les candidats obtenus pour tenter de les améliorer. *Exploitation* et *exploration* ne sont possibles qu'avec un mécanisme de *mémorisation* qui permet de conserver certaines informations passées. Osman [19] donne ainsi une définition :

A metaheuristic is formally defined as an iterative generation process which guides a subordinate heuristic by combining intelligently different concepts for exploring and exploiting the search space, learning strategies are used to structure information in order to find efficiently near-optimal solutions.

Une métaheuristique n'a plus pour objectif de déterminer absolument la solution d'un problème d'optimisation, mais seulement une solution satisfaisante. En problème inverse, les problèmes d'optimisation que l'on rencontre sont généralement à variables continues, et on peut s'appuyer sur la connaissance, même partielle, de la forme de sa fonction objectif [18, chap.1] pour conclure quant à la difficulté du problème.

La plupart des métaheuristiques ont en commun un certain nombre de propriétés. On peut par exemple citer les qualificatifs suivants :

Approximatif : Les métaheuristiques ne sont pas conçues pour trouver la meilleure solution mais uniquement des solutions satisfaisantes.

D'ordre 0 : Seules des évaluations de la fonction objectif sont utilisées, ses dérivées ne sont généralement pas nécessaires.

Global : L'emploi de mécanismes d'exploration permet aux métaheuristiques d'être moins sensibles aux minimums locaux.

Stochastique : Des événements aléatoires, par l'intermédiaire de générateurs de nombres aléatoires, peuvent intervenir dans le processus d'exploration et d'exploitation.

Mono-objectif : La plupart des métaheuristiques sont dédiées à l'optimisation d'une seule fonction objectif.

Itératives : La procédure d'optimisation est généralement itérative.

A base de population : Les algorithmes de recherche locale améliorent de manière itérative généralement un seul candidat⁵. La plupart des métaheuristiques manipulent simultanément plusieurs candidats formant ainsi une population de candidats. Cela les rend souvent adaptées aux calculs parallèles car chaque candidat peut être évalué de manière autonome.

Inspirées des mécanismes naturels [18] : Beaucoup d'entre elles sont inspirées des mécanismes observés dans la nature, aussi bien en génétique, en biologie, en éthologie, en physique, en sciences sociales,...

Parmi les métaheuristiques relativement connues⁶, on peut citer l'ensemble des algorithmes évolutionnaires : les algorithmes génétiques (GA) [16, 20], l'évolution différentielle (DE) [18], les stratégies d'évolution (ES) [21], etc. Il existe aussi les algorithmes basés sur l'intelligence de groupe [22] avec : les colonies de fourmis (ACO pour « Ant Colony Optimization ») [16, 23], l'optimisation par essaims particulaires (OEP ou PSO pour « Particle Swarm Optimization ») [24] ou l'algorithme des abeilles [25].

Ces métaheuristiques ont donné lieu à de nombreux « benchmarks ». Des fonctions tests comme Rosenbrock, Rastrigin, Griewank [26], sont utilisées pour évaluer les performances des algorithmes [26–28].

Remarque : « *No Free Lunch Theorem* »

Il est probable que les 3 métaheuristiques précédentes présentent de meilleures performances sur certains problèmes d'optimisation. Cependant, toute comparaison des algorithmes, sous la forme : « l'algorithme A est meilleur que l'algorithme B » n'est valable que pour un problème donné avec un jeu de paramètres d'entrée

5. Un candidat est une solution possible du problème d'optimisation.

6. Voir notamment « Global Optimization Algorithms - Theory and application » de T. Weise, version du 20/05/2008, disponible gratuitement en ligne pour un bref aperçu de plusieurs métaheuristiques :

particulier des algorithmes. A ce propos, il existe un théorème intitulé « no free lunch theorem », de Wolpert et Macready [29], qui stipule que tous les algorithmes d'optimisation sont aussi performants lorsque l'on considère tous les problèmes possibles. En effet, pour chaque algorithme, on peut imaginer construire un problème particulier qu'il sera incapable de résoudre.

3.3 Optimisation par Essaims Particulaires (PSO)

L'algorithme d'optimisation par Essaims Particulaires (PSO) a été développé en 1995 par Eberhart et Kennedy. Il s'agit d'une méthode à base de population, inspirée du comportement animal, approximative, stochastique, d'ordre 0 et globale [18, 24, 30–35]. Cet algorithme s'appuie sur une métaphore de l'interaction sociale. Elle s'inspire notamment sur la façon dont des individus communiquent, partagent leurs informations, pour réaliser un objectif. Il s'agit par exemple des bancs de poissons ou d'un groupe d'oiseaux. L'idée de cet algorithme est de faire collaborer des individus, appelés particules, à travers quelques mécanismes simples. Une intelligence collective [22] émerge alors de l'interaction de ces particules élémentaires (non-sophistiquées), indépendantes et auto-organisées.

Le PSO est un algorithme itératif : chaque particule se déplace dans l'espace de recherche F , itération après itération, et sans qu'un mécanisme central coordonne son déplacement. A l'itération k , chaque particule, indexée i , est définie par une position représentée par un vecteur P_i^k , une vitesse v_i^k et une mémoire \widehat{P}_i^k . La position P_i^k dans F correspond à un candidat. A partir de cette position, la particule échange avec ses voisines la meilleure position \widehat{P}_i^k (sa mémoire) qu'elle ait visitée et est informée de la meilleure position \widehat{N}_i^k de toutes ses voisines. Avec ces informations, sa vitesse v_i^k et sa position P_i^k sont remises à jour avec la loi suivante :

$$\begin{aligned}
 v_i^{k+1} &= \underbrace{\omega v_i^k}_{\text{Inertie}} + \underbrace{c_1 \text{aléa}_1 \otimes (\widehat{N}_i^k - P_i^k)}_{\text{Composante sociale}} + \underbrace{c_2 \text{aléa}_2 \otimes (\widehat{P}_i^k - P_i^k)}_{\text{Composante cognitive}} \\
 P_i^{k+1} &= P_i^k + v_i^{k+1}
 \end{aligned}$$

Avec

- ω l'inertie des particules
- c_1, c_2 coefficients permettant de pondérer les composantes cognitives et sociales
- aléa_i vecteurs aléatoires uniformes dans $[0; 1]$
- \otimes le produit composante par composante sur les vecteurs

Plusieurs paramètres interviennent dans cet algorithme. L'utilisateur doit les définir avant de pouvoir utiliser l'algorithme :

La taille N de l'essaim : La particularité du PSO est d'utiliser une taille de population relativement indépendante de la dimension de l'espace de recherche. Ainsi, il est courant de prendre $N = 20$ ou $N = 30$ particules.

L'inertie et les coefficients d'accélération : Ces coefficients ne doivent pas être choisis au hasard. Certaines études théoriques et expérimentales [24] suggèrent certains jeux de valeurs. On utilise ici généralement $(\omega; c_1; c_2) = (0,7; 1,4; 1,4)$. En modifiant ces valeurs, on modifie la capacité d'*exploration* et d'*exploitation* de l'essaim.

Le type de voisinage : Dans la version de base du PSO, dite canonique, le voisinage est composé de toutes les particules. Ainsi \widehat{N}_i^k est la meilleure position de l'histoire de l'essaim. D'autres types de voisinage sont présentés et comparés dans la suite.

Un exemple de minimisation, avec la fonction test Rastrigin en dimension 2, est proposé en annexe (Annexe 8 p319) : il montre notamment la position des particules en fonction des itérations. Le PSO est un algorithme relativement récent et est l'objet de nombreuses études. La version présentée et utilisée ici est la version canonique, mais de nombreuses variantes existent à différents niveaux de l'algorithme [35, 36].

3.4 Stratégies d'Evolution (ES)

Les Stratégies d'Evolution (ES pour « Evolution Strategies ») constituent une méthode d'optimisation développée dans les années 1970 par Rechenberg et Schwefel. Il s'agit d'une méthode qui partage un certain nombre de caractéristiques communes avec le PSO : elle est à base de population, inspirée de mécanismes biologiques (en particulier génétiques), approximative, stochastique, d'ordre 0 et globale [21]. Cependant, cet algorithme est considéré comme un algorithme évolutionnaire (ou évolutionniste), au même titre que les Algorithmes Génétiques (GA) et l'Evolution différentielle (DE pour « Differential Evolution »), du fait qu'il utilise des mécanismes inspirés de la théorie de l'évolution.

En particulier, les individus sont en compétition à travers des *opérateurs de sélection* qui vont privilégier les meilleurs. Les individus sont appelés à se reproduire pour générer des enfants, et ce par l'intermédiaire d'un *opérateur de croisement*. Ils sont aussi soumis aux mutations génétiques⁷ qui sont réalisées par des *opérateurs de mutation*. Enfin, des *opérateurs de remplacement* définissent comment les enfants sont intégrés à la population courante, constituée des parents.

On retrouve ces différents opérateurs dans tous les algorithmes évolutionnaires, mais ils peuvent intervenir et avoir des formes différentes. Par ailleurs, chaque algorithme possède son vocabulaire. On ne parle plus de particules, mais d'individus (ou de chromosomes) pour désigner un candidat. Un individu est caractérisé par ses gènes (son vecteur de paramètres) qui permettent de calculer la fonction objectif (ici le critère d'optimalité). Enfin, on parle indistinctement d'itération ou de génération.

7. Les gènes sont ici les paramètres $\pi = [\pi_1, \dots, \pi_N]^T$

PSEUDO-CODE pour $(\lambda/\rho + \mu)$ -ES

```

Début
  Initialisation de la population d'individu  $P_i$  avec  $1 \leq i \leq \mu$ 
  Répéter
    Pour chaque enfant ( $1 \leq i \leq \lambda$ )
      Sélection des  $\rho$  parents (opérateur de selection)
      Génération d'un mutant (opérateur de croisement)
      Mutation du mutant pour former un enfant (opérateur de mutation)
    Fin
    Remplacement de la population avec  $\mu$  meilleurs individus
      parents et enfants réunis (opérateur de remplacement)
  Jusqu'au critère de convergence
Fin
  
```

Figure 4.9 – Pseudo code des Stratégies d'Evolution $(\lambda/\rho + \mu)$ -ES

Les Stratégies d'Evolution disposent d'une syntaxe pour définir la variante utilisée. Elle prend par exemple la forme suivante :

$$(\mu / \rho + \lambda) - ES$$

La lettre μ correspond à la taille de la population.

La lettre ρ est le nombre d'individus (de parents) nécessaires pour réaliser un croisement et générer un enfant.

La lettre λ est le nombre d'enfants générés à chaque génération.

Le symbole $+$ désigne le type d'*opérateur de remplacement*. $+$ signifie que la génération d'individus suivante est composée des μ meilleurs individus des parents et enfants réunis. La taille de la population reste ainsi constante. Il existe l'opérateur « , » où seuls les μ meilleurs enfants remplacent intégralement la population précédente.

Un pseudo code de l'algorithme est proposée (Fig.4.9). Les individus de la population sont initialisés aléatoirement. Si on dispose de bornes sur chaque paramètre π_i , on peut utiliser un générateur aléatoire uniforme. Commence ensuite la boucle principale de l'algorithme qui se termine lorsque le critère de convergence est validé. Faute d'information sur la solution, on utilise fréquemment un critère basé sur le nombre de générations.

Une génération consiste à créer une population de λ enfants, générés chacun à partir de ρ parents sélectionnés par l'*opérateur de selection*. L'opérateur de croisement permet ensuite de

générer un individu, appelé mutant (ou recombinant), en croisant les paramètres (ou gènes) des parents. La méthode de croisement est définie par l'*opérateur de croisement*. Le mutant ne devient un enfant qu'après la mutation de ses gènes. L'*opérateur de mutation* utilisé dans la version canonique de l'ES consiste à ajouter à chaque paramètre de l'individu une quantité aléatoire obtenue à partir d'une loi normale de moyenne nulle et d'écart-type σ . Ce paramètre σ est propre à chaque individu. Plus σ est grand, et plus la mutation est importante. La valeur à donner à ce paramètre de mutation est une question importante des Stratégies d'Evolution et fait intervenir le concept d'auto-adaptation. L'idée est de laisser l'algorithme déterminer la valeur optimale de ce paramètre. Une des approches possibles [21] est de modifier ce paramètre à chaque génération et laisser l'opérateur de sélection et l'opérateur de remplacement éliminer les individus avec un coefficient de mutation non adapté. Une fois que les λ enfants sont formés, on applique l'*opérateur de remplacement* pour former la nouvelle génération et le processus est répété.

3.5 La Recherche Aléatoire (RSA)

La Recherche aléatoire [37] (RSA pour « Random Search Algorithm ») est un algorithme approximatif, stochastique, d'ordre 0 et global. Il consiste à évaluer la fonction objectif avec des candidats déterminés aléatoirement. La meilleure solution obtenue est conservée. Par ailleurs, comme il n'y a aucune raison de privilégier certaines zones de l'espace de recherche, des générateurs aléatoires uniformes sont utilisés pour générer des candidats.

Cet algorithme est un des algorithmes les plus élémentaires que l'on puisse définir avec la recherche exhaustive des solutions. Du fait de l'absence de mécanisme particulier, il ne requiert de la part de l'utilisateur aucun paramètre à définir, autre que l'espace de recherche. C'est un algorithme entièrement porté vers l'exploration. Il n'intègre aucune heuristique d'exploitation. L'exploration se fait par ailleurs sans prendre en compte les explorations précédentes.

Cet algorithme peut servir de référence de performance. On s'attend en effet à ce que des algorithmes d'optimisation plus évolués soient plus performants que le RSA sur un problème donné.

4 Mise en oeuvre des métaheuristiques

Les 3 métaheuristiques précédentes (PSO, ES et RSA) sont maintenant appliquées au problème de conception optimale d'expérience. L'objectif est de déterminer si la position des 3 thermocouples, que ces algorithmes préconisent, est meilleure que celle obtenue avec la traditionnelle descente de gradient.

4.1 Comparer des métaheuristiques

Classer des algorithmes en fonction de leur performance sur un problème donné, requiert un critère objectif. Sachant que ces algorithmes sont stochastiques par nature, on ne peut pas se baser uniquement sur une exécution pour évaluer leur efficacité et il est préférable d'utiliser une approche statistique.

Contrairement aux algorithmes de recherche locale, il n'est pas aisé de définir un critère de convergence pour les algorithmes stochastiques. On ne peut généralement pas savoir si une meilleure solution sera obtenue si on laisse l'algorithme continuer sa recherche. Aussi, il est courant d'arrêter l'algorithme après un certain nombre d'évaluations n du critère d'optimalité.

4.1.1 Utilisation des quantiles

Les algorithmes étant stochastiques, la solution obtenue pour un nombre limite n d'évaluations du critère, est une variable aléatoire dont la densité de probabilité (PDF) est notée $D_n(y)$, avec y la valeur du critère. Pour une valeur n donnée, un algorithme est évalué à partir des quantiles de $D_n(y)$. On utilise notamment le 95^{ème} centile qui spécifie la valeur de la fonction objectif en dessous de laquelle on sera dans 95 % des cas.

On peut définir la distribution de probabilité cumulée (CDF) $C_n(y)$ à partir de la densité de probabilité $D_n(y)$. La probabilité qu'un algorithme A fournisse une solution dont le critère z est inférieur à une valeur donnée y , est :

$$p_{A,n}(z < y) = \int_{-\infty}^y D_{A,n}(u) du = C_{A,n}(y) \quad (4.26)$$

Le 95^{ème} centile, noté $\alpha_{A,0,95}$, s'obtient ensuite en calculant l'inverse de la CDF :

$$\alpha_{A,0,95}(n) = C_{A,n}^{-1}(p = 0,95) \quad (4.27)$$

Il est possible d'utiliser ensuite $\alpha_{0,95}$ pour comparer deux algorithmes A et B. A est dit meilleur que B si $\alpha_{A,0,95}$ est inférieur à $\alpha_{B,0,95}$.

4.1.2 Comparaison relative

Une autre approche est proposée par Clerc [38] et consiste à calculer la probabilité qu'un algorithme A donne de meilleures solutions qu'un algorithme B. Soit y_A et y_B les solutions fournies respectivement par les algorithmes A et B, la probabilité que y_A soit inférieure à y_B est :

$$p_n(y_A < y_B) = \int_{-\infty}^{\infty} C_{A,n}(u) D_{B,n}(u) du \quad (4.28)$$

L'intérêt de ce calcul est qu'il ne fait pas intervenir de seuil arbitraire, comme le 95^{ème} centile. Cependant, le résultat obtenu ne donne aucune information sur la qualité des solutions, mais seulement sur les performances relatives d'un algorithme par rapport à un autre.

4.2 L'algorithme RSA : la référence des performances

Dans le cas de l'algorithme de recherche aléatoire (RSA), il est relativement simple de déterminer numériquement la densité de probabilité (PDF) $D_n(y)$ en fonction du nombre d'évaluations n de la fonction objectif. Il suffit en effet de connaître la distribution $D_1(y)$ pour pouvoir la calculer pour tout n . La fonction $D_1(y)$ caractérise la distribution du critère $J_{\tilde{\beta}}$ obtenue en plaçant au hasard les 3 thermocouples sur l'échantillon. Pour déterminer cette fonction, on génère aléatoirement 10^6 vecteurs π décrivant chacun la position des 3 thermocouples. On évalue ensuite le critère $F_{\tilde{\beta}}$ pour chacun de ces vecteurs. On en déduit la PDF $D_1(y)$ et CDF $C_1(y)$ avec une méthode d'estimation par noyau (Annexe 9 p322). La figure (Fig.4.10.a) montre la PDF ainsi obtenue. Comme la valeur du critère $F_{\tilde{\beta}}$ est assez étendue, on caractérise non pas $F_{\tilde{\beta}}(\pi)$ mais son logarithme en base 10. On constate ainsi sur la PDF qu'en plaçant les thermocouples au hasard, on a 95 % de chances d'obtenir une valeur $F_{\tilde{\beta}}(\pi)$ comprise entre $10^{-0,82} = 0,15$ et 10^4 . Or comme la figure (Fig.4.7 p239) le présente, on cherche à obtenir des valeurs inférieures à 0,1.

Pour déterminer combien il faut effectuer de tirages aléatoires pour qu'on ait l'assurance à 95 % qu'il y ait parmi ces tirages une solution dont le critère est inférieur à 0,1, on étudie l'évolution du 95^{ème} centile $\alpha_{0,95}$ en fonction du nombre de tirages n (Fig.4.10.b). Ces centiles montrent que si on effectue $n = 10$ tirages aléatoires et que l'on conserve le meilleur, on a 95 % de chance que cette valeur soit inférieure à $10^{0,35} = 2,2$, ce qui est encore insuffisant. Il faut effectuer environ $n = 3000$ tirages pour obtenir une solution inférieure à 0,1 avec 95 % de chance.

Pour tracer la figure (Fig.4.10.b), la CDF $C_n(y)$ a tout d'abord été calculée en fonction de $C_1(y)$. La CDF $C_n(y)$ est associée à l'expérience statistique suivante : *On génère aléatoirement n vecteurs positions $\pi_i = [x_{TC1,i}, y_{TC1,i}, x_{TC2,i}, y_{TC2,i}, x_{TC3,i}, y_{TC3,i}]$ de façon indépendante, et on conserve la meilleure solution $\widehat{F}_{\tilde{\beta}} = \min(F_{\tilde{\beta}}(\pi_i))$.* On a alors :

$$\begin{aligned} C_n(y) &= p \left\{ \min \left(\widehat{F}_{\tilde{\beta}}(\pi_i) \right) < y \right\} = p \left\{ F_{\tilde{\beta}}(\pi_1) \text{ OU } \dots \text{ OU } F_{\tilde{\beta}}(\pi_n) < y \right\} \\ &= 1 - p \left\{ F_{\tilde{\beta}}(\pi_1) \text{ ET } \dots \text{ ET } F_{\tilde{\beta}}(\pi_n) > y \right\} \\ &= 1 - \prod_{i=1}^n p \left\{ F_{\tilde{\beta}}(\pi_i) > y \right\} = 1 - \prod_{i=1}^n \left(1 - p \left\{ F_{\tilde{\beta}}(\pi_i) < y \right\} \right) \quad (\text{indépendance des } \pi_i) \end{aligned}$$

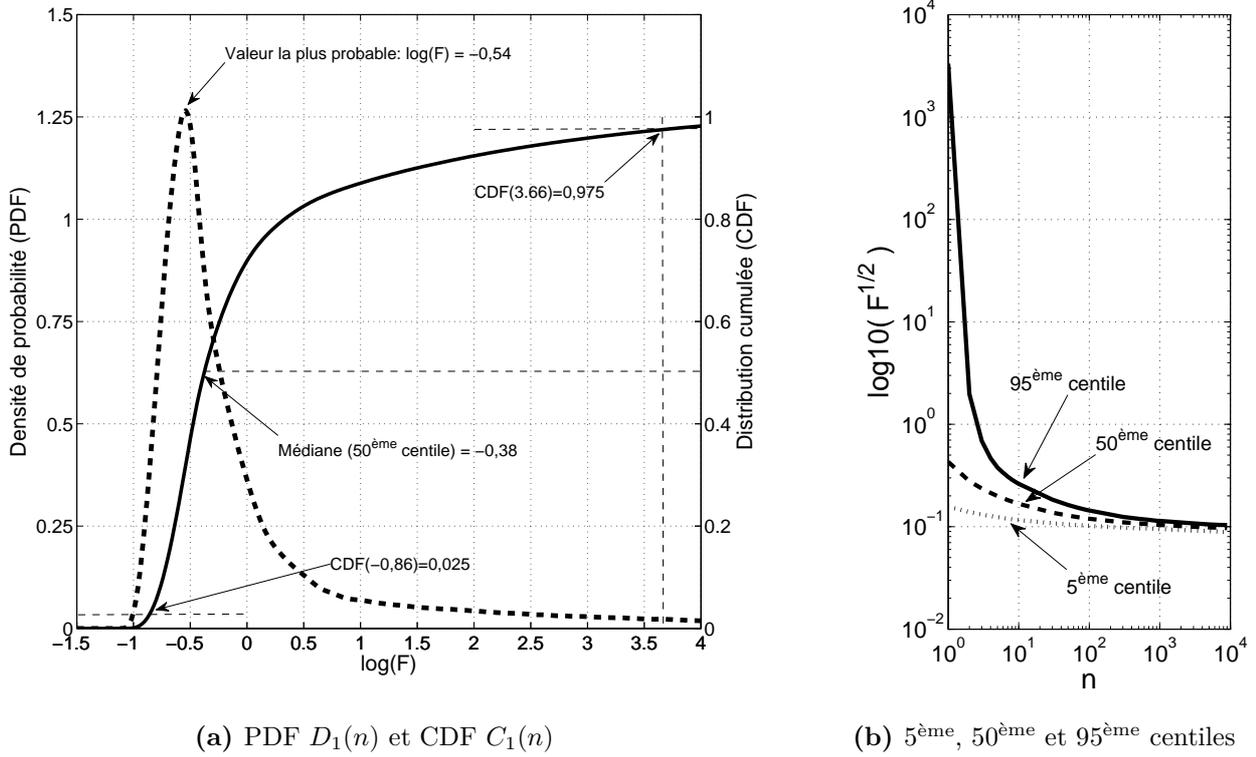


Figure 4.10 – Densité de probabilité et distribution cumulée du RSA pour $n = 1$ en fonction du logarithme en base 10 du critère d'optimalité $F_{\hat{\beta}}$ et pour $n \in [1; 10000]$ (b).

D'où le résultat recherché :

$$C_n(y) = 1 - (1 - C_1(y))^n \quad (4.29)$$

$$D_n(y) = n D_1(y) (1 - C_1(y))^{n-1} \quad (4.30)$$

Les centiles sont ensuite donnés par l'expression (Eq.4.27).

4.3 Distribution des méthodes de gradient

Les algorithmes de recherche locale de type gradient sont des algorithmes déterministes. Pour une même initialisation, l'algorithme fournit systématiquement la même solution. On suppose ici qu'on ne dispose d'aucune information a priori sur la position optimale des thermocouples. En utilisant une initialisation aléatoire de l'algorithme, il devient stochastique. On peut lui associer une distribution cumulée $C_n(y)$ qui caractérise la dispersion des solutions obtenues lorsqu'on autorise l'algorithme à effectuer n évaluations du critère $F_{\hat{\beta}}$.

En théorie, la CDF obtenue est une fonction discontinue puisque l'algorithme s'arrête lorsqu'il a convergé dans un minimum local. Or ce nombre de minimums est fini si bien que toutes les solutions sont concentrées en quelques points. En pratique, il demeure une petite perturba-

tion numérique.

La figure (Fig.4.11) présente les résultats obtenus à partir de 200 exécutions d'un algorithme de type gradient, noté ici GRAD. Pour chacune de ces 200 exécutions, l'initialisation de l'algorithme GRAD est déterminée aléatoirement. L'implémentation utilisée est celle proposée par Matlab avec la fonction « fmincon ». Dans notre cas, cet algorithme se rapproche de l'algorithme de Gauss-Newton avec la possibilité de définir des bornes sur chaque variable. La figure montre l'évolution de quelques centiles en fonction de n . Par rapport aux centiles du RSA, on constate une plus grande dispersion des résultats avec le GRAD. Il est à la fois capable d'atteindre des solutions complètement improbables avec le RSA, mais si on se réfère au 95^{ème} centile, il est préférable d'utiliser le RSA plutôt que le GRAD.

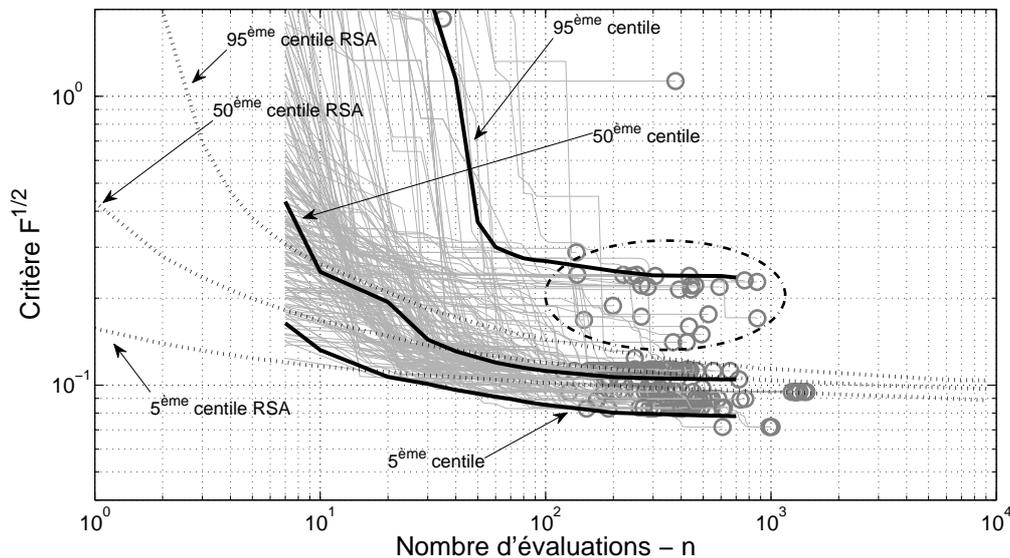


Figure 4.11 – Centiles obtenus avec un algorithme de type gradient.

Une alternative possible est d'hybrider les algorithmes. On pourrait utiliser le RSA dans un premier temps pour « dégrossir » le problème, localiser les zones prometteuses et rejeter les autres, puis appliquer le GRAD pour affiner la recherche. Ainsi, on évite au GRAD de converger vers des minimums locaux sous optimaux, repérés par une ellipse sur la figure (Fig.4.11). Par ailleurs, en agrégeant une heuristique d'exploration (le RSA) et une heuristique d'exploitation (le GRAD), on peut considérer avoir défini une métaheuristique.

4.4 Distribution du PSO

La même méthode que celle utilisée pour le GRAD est appliquée avec le PSO. Toutefois, pour le PSO, l'utilisateur doit spécifier les paramètres d'entrée de l'algorithme. Plusieurs jeux

Chapitre 4. Conception optimale d'expérience

de paramètres sont utilisés et comparés. Pour simplifier leur définition, on utilise la syntaxe suivante, inspirée par celle de l'ES :

$$(N - V - \omega ; c) - PSO$$

Avec :

N → la taille de la population, le nombre de particules

V → le type de voisinage qui prend comme valeur :

- « T » pour désigner *Toutes les particules*
- « C[z] » pour désigner un *voisinage circulaire* avec z le nombre de voisin. Ce type de voisinage est construit en fonction des indices des particules. Par exemple, avec un voisinage de taille 5, la particule 10 a pour voisines les particules 8, 9, 10, 11, 12.
- « A[z] » pour un *voisinage aléatoire* constitué d'un nombre z de particules. Les voisines de chaque particule sont ici déterminées aléatoirement à chaque itération.

ω → l'inertie des particules

c → les coefficients d'accélération c_1 et c_2 que l'on prend égaux.

200 exécutions sont réalisées pour chaque variante à partir desquelles on estime les 5^{ème}, 50^{ème} et 95^{ème} centiles en fonction de n . Chacune de ces exécutions consiste à initialiser l'essaim en plaçant aléatoirement les particules dans l'espace de recherche. On les laisse ensuite évoluer pendant 250 itérations. Sachant que pour le PSO, une itération implique l'évaluation du critère pour l'ensemble des N particules. Avec un essaim de $N = 20$ particules, 250 itérations correspondent à $n = 5000$ évaluations du critère F_{β} . Toutes les valeurs de n ne sont donc pas définies puisqu'il n'est pas possible, par exemple, de stopper l'algorithme après 17 évaluations de F_{β} . Il faut nécessairement que n soit un multiple du nombre de particules N .

La figure (Fig.4.12) présente différents résultats obtenus avec le PSO en faisant varier les paramètres d'entrée. Les 3 premières figures (a,b,c) utilisent un voisinage constitué de toutes les particules de l'essaim : (* - T - *; *). On fait alors varier l'inertie ω des particules de 0,5 à 0,9. Les 3 figures suivantes (d,e,f) utilisent un voisinage circulaire, contenant respectivement 3, 7 et 11 particules. Quant aux 3 dernières (g,h,i), un voisinage aléatoire est utilisé, contenant également 3, 7 et 11 particules. Les lignes en pointillés correspondent aux centiles de l'algorithme RSA.

L'utilisation d'un voisinage contenant toutes les particules a visiblement deux effets sur la vitesse de convergence de l'algorithme. Le premier est d'accélérer cette convergence. Les centiles du PSO s'écartent rapidement (pour $n > 90$) des centiles du RSA, et ce pour les trois jeux

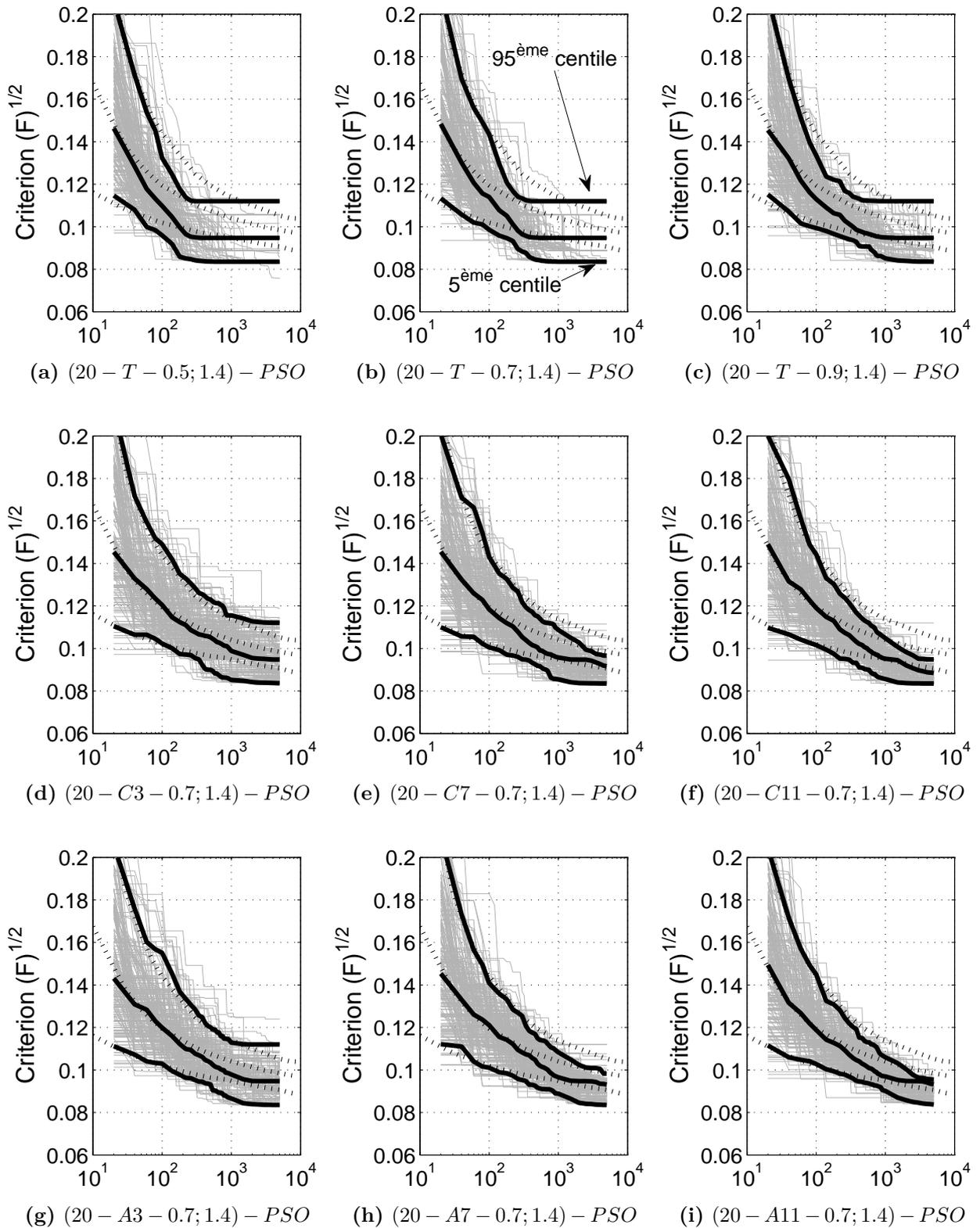


Figure 4.12 – Distribution des solutions fournies par le PSO en fonction du nombre d'évaluations n du critère F_{β} et pour différents paramètres d'entrée de l'algorithme. Les centiles du RSA sont rappelés à titre de comparaison.

de paramètres des figures (a,b et c). Cela signifie qu'en moyenne, le PSO donne de meilleures solutions que le RSA. Toutefois, ce type de voisinage provoque une convergence rapide mais aussi une convergence prématurée. Sur la figure (a), pour $n > 300$, on constate que le PSO n'évolue plus. Les particules ont toutes convergé, mais dans la grande majorité des cas, il s'agit d'un minimum local. Pour les figures (b et c), le même phénomène apparaît, mais un peu plus tardivement car le fait d'augmenter l'inertie ω contribue à « agiter » davantage les particules si bien qu'elles convergent moins vite. Pour $n > 2000$, il est préférable d'utiliser le RSA plutôt que le PSO car le 95^{ème} centile du RSA est inférieur à celui du PSO.

Avec un voisinage circulaire, les figures (d), (e) et (f) montrent que le PSO converge moins vite qu'avec le voisinage précédent. Les centiles du PSO et RSA ne se distinguent véritablement que pour $n > 200$ et seulement pour les paramètres des figures (e) et (f). Pour la figure (d), le 95^{ème} centile du PSO est supérieur à celui du RSA pour tout n . Bien que le 5^{ème} soit lui inférieur, on cherche à avoir l'assurance que le PSO sera plus performant que le RSA, donc le 5^{ème} centile n'a pas vraiment d'importance. Par ailleurs, la figure (f) montre l'effet bénéfique apporté par l'augmentation de la taille du voisinage. Avec 11 voisins ($* - C11 - *; *$), le 95^{ème} centile du PSO passe en dessous du 50^{ème} centile du RSA pour $n > 1000$.

Avec un voisinage aléatoire, les résultats sont sensiblement identiques à ceux obtenus avec le voisinage circulaire. Il semblerait qu'il faille un voisinage d'au moins 7 particules pour éviter une convergence prématurée [39].

En conclusion, le PSO apparaît être plus performant que le RSA dans la grande majorité des cas. C'est le 1^{er} type de voisinage avec toutes les particules qui présente les moins bons résultats car il génère une convergence prématurée des particules. C'est ce qui pousse certains auteurs à réinitialiser les particules lorsque leur vitesse de déplacement est trop faible. Dans les autres cas, le gain est relativement minime puisque dans le meilleur des cas, on gagne 10 % sur le 95^{ème} centile par rapport au RSA mais le PSO est un algorithme simple à implémenter si bien qu'il serait dommage de s'en passer sur ce problème.

4.5 Distribution de l'ES

Les résultats obtenus par les Stratégies d'Evolution (ES) sont présentés dans la figure (Fig.4.13). Les 3 premières figures (a,b,c) utilisent une valeur initiale différente du coefficient de mutation σ (valeur en parenthèse). Ce coefficient est adapté automatiquement par l'algorithme mais doit cependant être initialisé. Les trois figures suivantes (d,e,f) sont obtenues en faisant varier le nombre d'enfants λ générés à chaque génération et les trois dernières figures correspondent à une valeur de ρ différente. Notons également que la configuration

$(\mu/\rho + \lambda) - \sigma - ES = (20/2 + 20) - (l_x/8) - ES$ apparaît 3 fois de manière à faciliter la comparaison des résultats ligne par ligne. Les grandeurs soulignées correspondent au paramètre qui est modifié sur chaque ligne.

On constate tout d'abord, qu'excepté la figure (e), toutes les autres configurations apportent un gain appréciable par rapport au RSA. Pour $n > 1000$, le 95^{ème} centile de l'ES est inférieur au 50^{ème} centile du RSA et rejoint parfois le 5^{ème} centile (g),(h), et (i). Ainsi, les valeurs qu'on aurait 5% de chance d'atteindre avec le RSA, le sont avec une quasi-certitude avec l'ES.

En modifiant la valeur initiale du coefficient de mutation (a), (b) et (c), les performances de l'algorithme ne semblent pas être modifiées. La configuration de la figure (b) semble être meilleure mais ce n'est peut être pas significatif.

En augmentant le nombre λ d'enfants générés à chaque génération, il semble qu'on améliore sensiblement la convergence de l'algorithme avec $\lambda = 20$ (f). Avec $\lambda = 5$ (d) et $\lambda = 10$ (e), le 95^{ème} centile de l'ES est inférieur au 50^{ème} centile du RSA pour $n \in [500; 1000]$. Avec $\lambda = 20$, le gain est sensible puisque le 50^{ème} et 95^{ème} centile sont graphiquement superposés.

Quant au paramètre ρ , le fait de modifier le nombre de parents (g),(h) et (i) n'a visiblement pas d'influence sur ce problème d'optimisation. Les résultats restent satisfaisants avec les 3 valeurs de ρ utilisées.

On peut également s'intéresser aux résultats obtenus en utilisant l'opérateur de remplacement « , » plutôt que « + ». L'opérateur « , » consiste à remplacer la population par les μ meilleurs enfants ce qui implique que le nombre d'enfants λ soit supérieur à la taille de la population μ . Les résultats sont présentés sur la figure (Fig.4.14). On constate ainsi qu'avec un nombre d'enfant $\lambda = 30$ faiblement supérieur au nombre de parents $\mu = 20$ (a), le RSA s'avère significativement plus performant. La dispersion de l'ES est plus grande et les 50^{ème} et 95^{ème} centile sont supérieurs à ceux du RSA. Les résultats s'améliorent avec $\lambda = 50$.

Avec cet opérateur de remplacement, l'ancienne génération est remplacée même si les enfants sont moins performants. Ainsi, l'évolution de la meilleure solution n'est pas monotone, mais peut le devenir en ajoutant un système de mémorisation dans l'algorithme. On obtient alors les centiles représentés en lignes continues fines, appelées « Elitiste » sur la figure (Fig.4.14.b). L'algorithme est alors moins bon qu'une recherche aléatoire, excepté pour $n \in [1000; 4000]$ où les centiles montrent une légère amélioration.

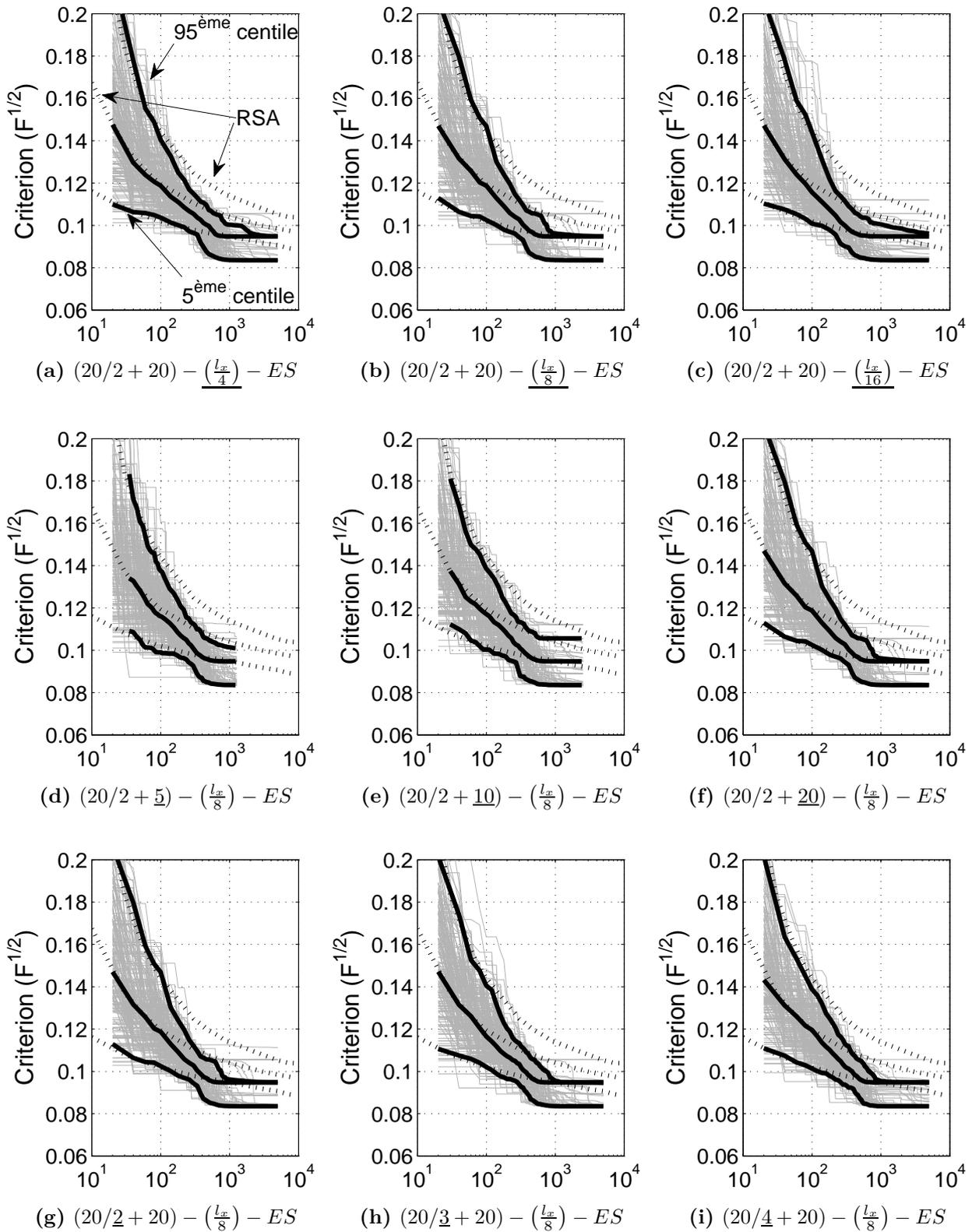


Figure 4.13 – Distribution des solutions fournies par l'ES en fonction du nombre d'évaluations n du critère $F_{\tilde{\beta}}$ et pour différents paramètres d'entrée de l'algorithme. Les centiles du RSA sont rappelés à titre de comparaison.

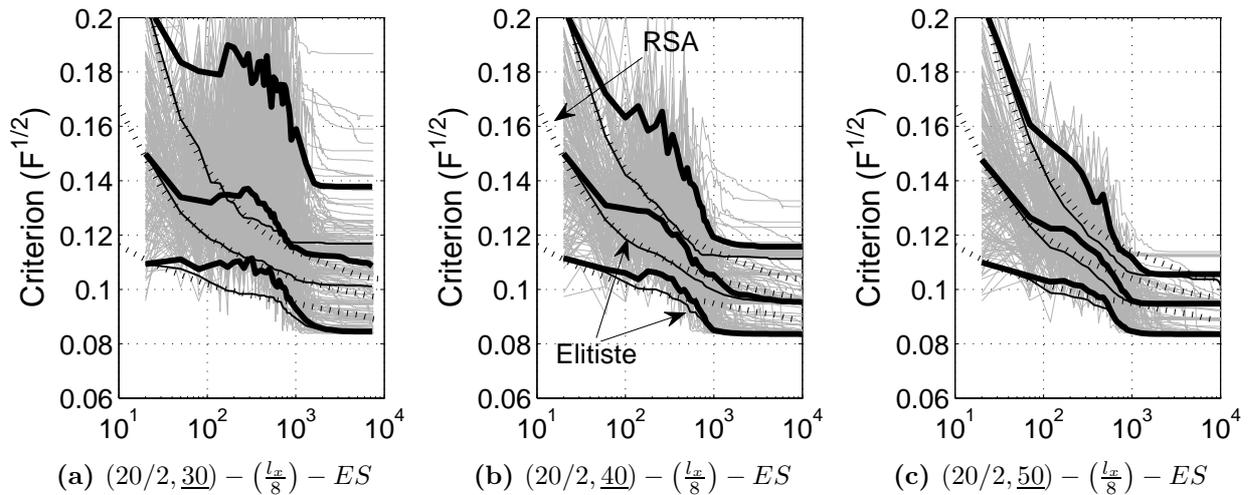


Figure 4.14 – Distribution des solutions fournies par l’ES en fonction du nombre d’évaluations n du critère F_{β}^{\sim} avec l’opérateur de remplacement « , » .

4.6 Comparaison des résultats

A partir des résultats obtenus avec le PSO (Fig.4.12) et l’ES (Fig.4.13), il semble que l’ES donne de meilleurs résultats sur ce problème de conception optimale d’expérience, si on se base sur le 95^{ème} centile des distributions. Par ailleurs, il apparaît que 1000 évaluations du critère d’optimalité F_{β}^{\sim} sont nécessaires pour qu’en moyenne, l’algorithme converge. Avec l’algorithme de type gradient, noté précédemment GRAD, on constate qu’il faut environ $n = 200$ évaluations pour converger (Fig.4.11), soit 5 fois moins. Cependant, la probabilité de converger dans un mauvais minimum est plus forte. Pour éviter cela, on peut relancer plusieurs fois le GRAD avec des initialisations aléatoires. On peut ainsi montrer, à partir de la distribution cumulée $C_n(y)$, qu’il suffit ici d’exécuter 2 fois l’algorithme GRAD (soit 2×200 évaluations du critère F_{β}^{\sim}) pour que le 95^{ème} centile de l’expérience correspondante⁸ soit égal au 50^{ème} centile obtenu avec une seule exécution de GRAD. Cela correspond approximativement à la performance du PSO et de l’ES, mais avec deux fois moins d’évaluations.

Afin de faciliter la comparaison entre le PSO, l’ES et le GRAD, on met en oeuvre la méthode proposée par Clerc (§4.1.2 p246). Elle permet, par exemple, de calculer la probabilité que le PSO donne de meilleurs résultats que le RSA pour des paramètres d’entrée donnés et pour une valeur de n donnée. Cette méthode requiert les fonctions $D_n(y)$ et $C_n(y)$ pour chaque algorithme et pour différentes valeurs de n ce que l’on peut estimer en appliquant la méthode du noyau sur les données brutes des figures (Fig.4.12 et Fig.4.13). Par exemple, la figure (Fig.4.15)

8. L’expérience statistique qui consiste à garder la meilleure des deux solutions obtenues en exécutant 2 fois l’algorithme GRAD avec une initialisation aléatoire, et en utilisant comme critère d’arrêt, un nombre d’évaluations $n = 200$ du critère F_{β}^{\sim} .

Chapitre 4. Conception optimale d'expérience

montre les PDF du PSO et du RSA pour $n = \{20; 100; 1000\}$.

La sous-figure (a) montre la densité de probabilité de la solution obtenue après la première itération, c'est à dire $n = 20$, si la taille de l'essaim est de 20. Or la première itération correspond à l'initialisation : les particules sont placées aléatoirement (suivant des lois uniformes) dans l'espace de recherche, ce qui est équivalent à effectuer 20 tirages aléatoires. Les PDF du PSO et RSA doivent donc être égales en moyenne pour $n = 20$, ce que la figure montre bien.

Pour $n = 100$, le PSO apparaît déjà comme étant légèrement plus performant que le RSA. Sa densité de probabilité est davantage décalée vers la gauche, ce qui signifie qu'il donne en moyenne de meilleures solutions. Pour $n = 1000$ ce décalage est plus prononcé mais on observe que certaines exécutions ont convergé dans de mauvais minimums. Parallèlement à ce décalage vers la gauche, les densités de probabilité augmentent en valeur à mesure que la dispersion des solutions diminue.

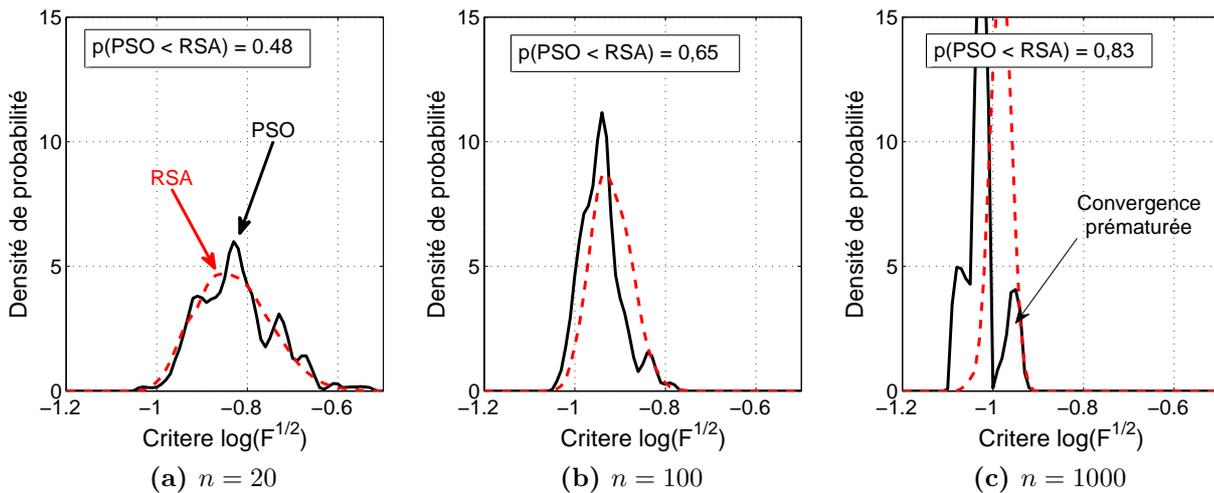


Figure 4.15 – Densités de probabilité du PSO et RSA pour $n = \{20; 100; 1000\}$ ce qui correspond respectivement à l'itération 1, 5 et 50 du PSO. Dans chaque cas, la probabilité d'obtenir une valeur plus faible avec le PSO qu'avec le RSA est indiquée.

Plutôt que de comparer uniquement le PSO et RSA, on peut comparer tous les algorithmes entre eux. Les résultats sont présentés dans le tableau (Tab.4.3). Il donne la probabilité que l'algorithme de la première colonne donne de meilleurs résultats que l'algorithme indiqué sur la première ligne pour trois valeurs de n . L'incertitude sur les valeurs de ce tableau a été estimée à environ $\pm 0,05$, en faisant notamment varier la largeur du noyau utilisée pour estimer la densité de probabilité $D_n(y)$ et la distribution cumulée $C_n(y)$.

Ces deux tableaux ont des coefficients diagonaux voisins de 0,5 et théoriquement égaux à 0,5. Soit deux solutions z et y issues d'un même algorithme, la valeur de 1/2 signifie que dans

4.4 Mise en oeuvre des métaheuristiques

vs	RSA	PSO	ES	GRAD	vs	RSA	PSO	ES	GRAD
RSA	0,50	0,49	0,48	0,34	RSA	0,50	0,13	0,05	0,53
PSO	0,51	0,50	0,49	0,35	PSO	○ 0,87	0,50	0,36	0,68
ES	○ 0,52	0,51	0,50	0,36	ES	● 0,95	0,64	0,49	0,73
GRAD	● 0,63	0,63	0,62	0,47	GRAD	0,45	0,31	0,25	0,49

(a) $n = 100 \iff 5^{\text{ème}}$ itération PSO,ES

(b) $n = 1000 \iff 50^{\text{ème}}$ itération PSO,ES

vs	RSA	PSO	ES	GRAD
RSA	0,50	0,05	0,09	
PSO	● 0,95	0,51	0,65	
ES	○ 0,91	0,37	0,51	
GRAD				

(c) $n = 4000 \iff 200^{\text{ème}}$ itération PSO,ES

Tableau 4.3 – Comparaison des algorithmes RSA, PSO, ES, GRAD. Les variantes des algorithmes utilisées sont les meilleures trouvées précédemment, à savoir la variante $(20 - C11 - 0.7; 1.4)$ pour le PSO, et $(20/4 + 20) - l_x/8$ pour l'ES.

50 % des cas, $z < y$: un algorithme n'est ni meilleur, ni moins performant que lui même. Par ailleurs, ces tableaux présentent une « sorte » d'antisymétrie. Soit M la matrice associée à ces tableaux, on a l'égalité suivante :

$$M^T = 1 - M$$

Par exemple : $p(PSO < RSA) = 1 - p(RSA < PSO)$ à l'incertitude près.

Pour $n = 100$, le meilleur algorithme est manifestement l'algorithme GRAD qui donne de meilleurs résultats que RSA dans 63 % des cas. La probabilité est sensiblement la même par rapport au PSO et ES. Quant au RSA, PSO et ES, ils présentent tous des probabilités de 50 % entre eux.

Pour $n = 1000$, l'ES est en première place avec une probabilité de 95 % par rapport au RSA et 64 % par rapport au PSO. Concernant le GRAD, il s'avère être moins bon que le RSA. Toutefois, ces résultats sont à relativiser car cet algorithme requiert moins de 1000 évaluations du critère pour converger.

Pour $n = 4000$, soit la 200^{ème} itération du PSO et ES, ces deux algorithmes montrent des performances comparables par rapport au RSA. Cependant, entre eux, la comparaison est immédiate. Le PSO est meilleur que l'ES dans 65 % des cas, ce qui est l'inverse de ce que l'on obtient pour $n = 1000$, où c'est l'ES qui est meilleur que le PSO dans 64 % des cas.

En conclusion, on constate que sur ce problème de conception optimale, qui n'est pas particulièrement complexe, il n'est pas aisé de dire quel est le meilleur algorithme. Il apparaît cependant que l'ES et le PSO, s'ils sont bien paramétrés, donnent des résultats satisfaisants mais qui n'ont rien d'extraordinaires comparés au RSA. Par ailleurs, en introduisant un mé-

canisme de redémarrage du GRAD lorsqu'il converge, il se pourrait que ce dernier donne de meilleurs résultats que le PSO, ES et RSA.

4.7 Le « meilleur » dispositif expérimental

Les mesures de performance précédentes ont été réalisées avec le critère $F_{\tilde{\beta}}$ et non avec le critère robuste FR_H . Tout d'abord, $F_{\tilde{\beta}}$ est plus simple à calculer ce qui facilite les études paramétriques et ce critère est aussi dérivable par rapport aux positions des thermocouples, ce que n'est pas le critère FR_H . On peut donc appliquer l'algorithme GRAD sans risque.

La figure (Fig.4.16) montre les positions des thermocouples obtenues avec le PSO. Les solutions du critère $F_{\tilde{\beta}}$ (Fig.4.16.a) sont extraites des centaines d'exécutions réalisées précédemment pour le calcul des centiles. La figure présente 3 solutions, symbolisées par des croix, des cercles et des carrés, ainsi que la valeur du critère correspondante. Pour certaines solutions, deux thermocouples sont placés au même endroit (symbolisé par $\times 2$) ce qui n'est physiquement pas satisfaisant. C'est le cas des deux meilleures solutions (croix et cercle). Cela est possible puisqu'aucune contrainte à ce sujet n'a été intégrée à l'algorithme. Placer deux thermocouples au même endroit revient à utiliser seulement 2 thermocouples dont 1 avec un écart-type réduit d'un facteur $\sqrt{2}$ (si les observables sont statistiquement indépendants).

Du fait de la prise en compte des erreurs de position, aucune solution ne fait intervenir de thermocouple sur les bords gauche et inférieur. Les solutions obtenues avec le critère $F_{\tilde{\beta}}$ n'ont visiblement pas été conservées en utilisant FR_H (Fig.4.16.b). Les deux solutions robustes présentées ont un critère légèrement supérieur mais sont théoriquement préférables puisque moins sensibles à la valeur $\tilde{\beta}$ utilisée pour concevoir l'expérience.

On retient de cet exemple, que les solutions optimales du dispositif ne sont pas particulièrement intuitives. Pourtant, si le critère d'optimalité utilisé est pertinent, on a tout intérêt, en pratique, à placer les thermocouples en s'appuyant sur les résultats de la conception optimale.

5 Synthèse

L'objectif de ce chapitre était d'illustrer l'apport de la conception optimale d'expérience sur l'estimation de paramètres. La conception optimale d'expérience est un outil permettant à l'utilisateur d'améliorer un dispositif expérimental en vue de l'estimation de paramètres. Un tel dispositif n'est généralement pas complètement figé : il existe des paramètres, dit « ajustables » que l'utilisateur peut modifier. En utilisant une modélisation de ce dispositif et après avoir choisi un estimateur, on peut calculer l'écart-type théorique des estimations. La conception op-

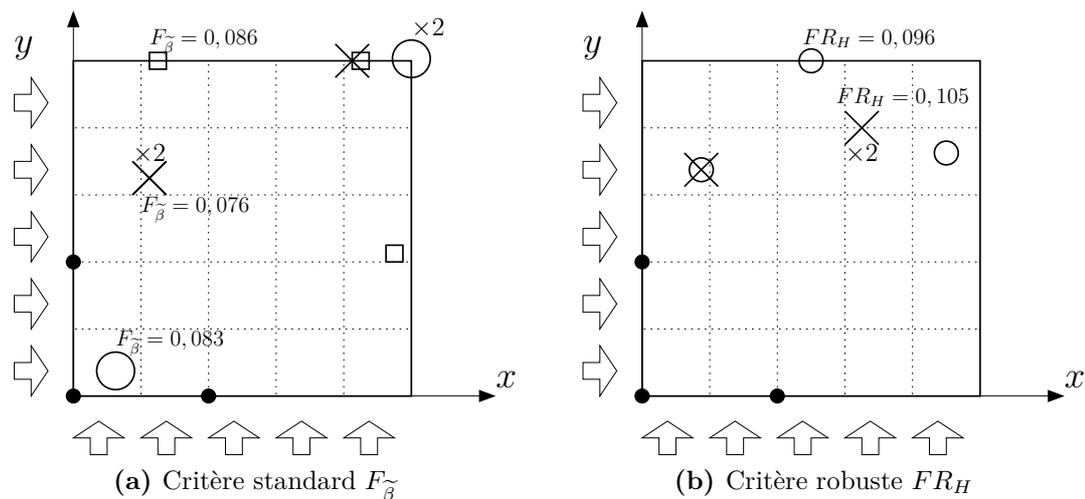


Figure 4.16 – Positions des thermocouples obtenues avec les critères $F_{\tilde{\beta}}$ et FR_H . Plusieurs solutions sont présentées pour les deux critères et le dispositif de Sawaf [1] est rappelé (points noirs).

timale d'expérience consiste donc à déterminer la valeur des paramètres ajustables de manière à minimiser l'écart-type des estimations. Cependant, calculer ces écarts-types requiert les paramètres inconnus $\hat{\beta}$ que l'on ne connaîtra qu'après la résolution du problème d'estimation de paramètres. La conception optimale se base sur une valeur fournie par l'utilisateur et qu'il juge a priori vraisemblable. Une extension de la conception optimale, appelée « conception robuste d'expérience » a été proposée. Son objectif est de rendre le dispositif optimal moins sensible à cette valeur en prenant en compte dès la phase d'optimisation une incertitude sur cette celle-ci.

L'étude menée ici, purement numérique, est basée sur un dispositif, proposé par Sawaf [1]. Ce dispositif est destiné à estimer les conductivités et la capacité thermique d'un matériau orthotrope à partir des mesures fournies par 3 thermocouples.

Pour pouvoir déterminer le dispositif optimal, il faut disposer d'un moyen de comparer les possibilités de manière objective. Cela fait appel à des critères d'optimalité qui associent une valeur scalaire (une note) à un dispositif. Ces critères sont habituellement définis à partir de la matrice d'information ou de la matrice de covariance théorique des estimations. La solution, c'est à dire le dispositif optimal, est obtenue en optimisant ce critère si bien que la solution dépend du choix de ce dernier. On a ainsi montré sur un dispositif simplifié (monodimensionnel) que pour 7 critères d'optimalité différents, on obtient 7 solutions différentes.

Parmi les paramètres ajustables du dispositif traité dans ce chapitre, on s'est restreint à la position de 3 thermocouples. Cela correspond à 6 paramètres ajustables puisqu'ils sont chacun repérés par leur abscisse et leur ordonnée. On a montré en particulier que faire abstraction de l'erreur de positionnement des thermocouples conduit à sous-estimer significativement l'écart-

type des estimations. Or la plupart des critères habituels d'optimalité ne prennent en compte que le bruit de mesure, si bien que le dispositif optimal obtenu peut ne pas être satisfaisant. En définissant un autre critère d'optimalité, qui prend en compte cette erreur de positionnement, on modifie significativement la solution. L'algorithme place en effet les thermocouples plus loin des bords, là où les gradients de température sont plus faibles et donc là où une erreur de positionnement a moins d'influence.

A l'instar des problèmes d'estimation de paramètres, le problème de conception optimale (ou robuste) d'expérience fait appel à des algorithmes d'optimisation. Or on a constaté ici que le problème de conception optimale était beaucoup plus complexe que celui correspondant à l'estimation de paramètres. L'espace des solutions est plus vaste (6 paramètres ajustables, soit un espace de dimension 6) et le critère d'optimalité présente visiblement de nombreux minimums locaux qui rendent a priori plus difficile l'utilisation des algorithmes de recherche locale.

D'autres algorithmes, appelés métaheuristiques, ont été ainsi introduits dans la troisième partie de ce chapitre et notamment l'Optimisation par Essaims Particulaires (PSO), les Stratégies d'Evolution (ES) ainsi que la recherche aléatoire (RSA). Ces algorithmes ont été développés à l'origine pour résoudre des problèmes d'optimisation complexes pour lesquels les méthodes classiques se révélaient inadaptées.

Les algorithmes présentés ici sont dits stochastiques, car ils font appel à des mécanismes aléatoires pour notamment explorer l'espace des solutions. La solution obtenue avec ces algorithmes est ainsi également aléatoire ce qui rend la comparaison des algorithmes plus difficile. Par ailleurs, ces algorithmes font intervenir des paramètres d'entrée que l'utilisateur doit fixer. On s'est donc tout d'abord intéressé à l'influence de ces paramètres sur les performances de l'algorithme en calculant les centiles des distributions des solutions pour différents nombres d'évaluations du critère d'optimalité. On a ainsi isolé certains paramètres d'entrée qui améliorent substantiellement les performances du PSO et de l'ES pour ce problème de conception optimale particulier.

Les paramètres d'entrée correspondant à ces meilleures performances ont été utilisés pour comparer les quatre algorithmes PSO, ES, RSA et un algorithme de type gradient, appelé GRAD. On a utilisé pour cela la méthode proposée par Clerc [24] qui consiste à calculer la probabilité qu'un algorithme A donne de meilleurs résultats qu'un algorithme B. On a montré notamment que le meilleur algorithme dépend du nombre d'évaluations n du critère. Il s'agit du critère d'arrêt souvent utilisé avec les métaheuristiques car on ne sait pas si l'algorithme a convergé.

Enfin, le PSO a été appliqué au dispositif traité ici pour déterminer la position optimale des 3 thermocouples. Cela a permis de réduire les critères d'optimalité $\sqrt{F_{\tilde{\beta}}}$ et $\sqrt{FR_H}$ d'un facteur 20 à 40 par rapport au dispositif initial. Sachant qu'ils sont proportionnels à la moyenne des écart-types relatifs, cela signifie qu'on a considérablement diminué l'incertitude d'estimation des deux conductivités thermiques λ_x et λ_y et de la capacité thermique volumique ρC . L'algorithme de type gradient a donné lui aussi des résultats similaires.

Références bibliographiques

- [1] B. SAWAF, N. OZISIK, AND Y. JARNY. *An inverse analysis to estimate linearly temperature dependent thermal conductivity components and heat capacity of an orthotropic medium*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **38**, 3005–3010 (1995).
- [2] M. N. OZISIK. *Heat conduction - Second edition*. Wiley-Interscience (1993).
- [3] T. D. FADALE, A. NENAROKOMOV, AND A. F. EMERY. *Uncertainties in parameter estimation : the inverse problem*. Int. J. Heat Mass Transfer **38**(3) (1995).
- [4] T. D. FADALE, A. NENAROKOMOV, AND A. F. EMERY. *Uncertainties in parameter estimation : the optimal experiment design*. Int. J. Heat Mass Transfer **43** (2000).
- [5] G. FRANCESCHINI AND S. MACCHIETTO. *Model-based design of experiments for parameter precision : State of the art*. Chemical Engineering Science **63**, 4846–4872 (2008).
- [6] H.B. NAHOR, N. SCHEERLINCK, R. VERNIEST, J. DE BAERDEMAEKER, AND B.M. NICOLAÏ. *Optimal experimental design for the parameter estimation of conduction heated foods*. Journal of Food Engineering **48**, 109–119 (2001).
- [7] F. MZALI, L. SASSI, A. JEMNI, S. BENNASRALLAH, AND D. PETIT. Simultaneous identification of thermophysical properties of orthotropic solids. In *4th Int. Conference on Inverse Problems in Engineering - Rio de Janeiro, Brazil* (2002).
- [8] M. NECATI ÖZISIK AND H. R. B. ORLANDE. *Inverse heat transfer*. Taylor et Francis, Inc (2000).
- [9] R. C. ASTER, B. BORCHERS, AND C. H. THURBER. *Parameter estimation and inverse problems*. Elsevier Academic press (2005).
- [10] P.E. CRITTENDEN AND K.D. COLE. *Design of experiments for thermal characterization of metallic foam*. J. of thermophysics and heat transfer **19**(3) (2005).
- [11] K.J. DOWDING AND B.F. BLACKWELL. Design of experiments to estimate temperature dependent thermal properties. In *3rd Int. Conference on Inverse Problems in Engineering - Port Ludlow, WA, USA* (1999).

Références bibliographiques

- [12] H.B. NAHOR, N. SCHEERLINCK, J.F. VAN IMPE, AND B.M. NICOLAÏ. *Optimization of the temperature sensor position in a hot wire probe set up for estimation of the thermal properties of foods using optimal experimental design*. Journal of Food Engineering **57**, 103–110 (2003).
- [13] L. VOZAR, G. LABUDOVA, AND W. HOHENAUER. *The laser flash method with repeated pulses optimal experimental design analysis*. Int. J. of Thermophysics **23**(5) (2002).
- [14] HANS-GEORG. BEYER AND BERNHARD SENDHOFF. *Robust optimization - a comprehensive survey*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. **196**, 3190–3218 (2007).
- [15] A.F. EMERY, V. A. NENAROKOMIV, AND T.D. FADALE. *Uncertainties in parameter estimation : the optimal experiment design*. Int. J. of Heat and Mass Transfer **43**, 3331–3339 (2000).
- [16] J. DRÉO, A. PÉTROWSKI, P. SIARRY, AND TAILLARD E. *Métaheuristiques pour l'optimisation difficile*. Eyrolles (2003).
- [17] C. BLUM AND A. ROLI. *Metaheuristics in combinatorial optimization : Overview and conceptual comparison*. J. ACM Computing Surveys (CSUR) **35**(3) (2003).
- [18] T. WEISE, M. ZAPF, R. CHIONG, AND A.J. NEBRO. *Studies in Computational Intelligence, Volume 193 - Nature Inspired Algorithms for Optimisation*. Springer (2009).
- [19] I.H. OSMAN AND G. LAPORTE. *Metaheuristics : A bibliography*. Annals of Operations Research **63**, 513–623 (1996).
- [20] J-M RENDERS. *Algorithmes génétiques et réseaux de neurones*. Hermes (1995).
- [21] H-G BEYER AND H-P SCHWEFEL. *Evolution strategies - a comprehensive introduction*. Natural Computing **1**, 3–52 (2002).
- [22] J. KENNEDY, R.C. EBERHART, AND Y. SHI. *Swarm Intelligence*. Morgan Kaufmann (2001).
- [23] C. BLUM. *Ant colony optimization : Introduction and recent trends*. Physics of Life Reviews **2**, 353–373 (2005).
- [24] M. CLERC. *Particle Swarm Optimization*. Wiley-ISTE (2006).
- [25] D. KARABOGA AND B. BASTURK. *On the performance of artificial bee colony (abc) algorithm*. Applied Soft Computing **8**, 687–697 (2008).
- [26] D. KARABOGA AND B. AKAY. *A comparative study of artificial bee colony algorithm*. Applied Mathematics and Computation **214**, 108–132 (2009).
- [27] E. ELBELTAGI, T. HEGAZY, AND D. GRIERSON. *Comparison among five evolutionary-based optimization algorithms*. Advanced Engineering Informatics **19**, 45–53 (2005).
- [28] M.A. PANDURO, C.A. BRIZUELA, L.I. BALDERAS, AND D. A. ACOSTA. *A comparison of genetic algorithms, particle swarm optimization and the differential evolution method for the design of scannable circular antenna arrays*. Progress In Electromagnetics Research B **13**, 171–186 (2009).

- [29] D.H. WOLPERT AND W.G. MACREADY. *No free lunch theorems for optimization*. Ieee Transactions on Evolutionary Computation **1**(1), 67–82 (1997).
- [30] T. HENDTLASS. *The particle swarm algorithm*. Studies in Computational Intelligence **115**, 1029–1062 (2008).
- [31] A. BANKS. *A review of particle swarm optimization. part 1 : background and development*. Natural Computing **6**(4), 467–484 (2007).
- [32] A. BANKS. *A review of particle swarm optimization. part 2 : hybridisation, combinatorial, multicriteria and constrained optimization, and indicative applications*. Natural Computing **7**(1), 109–124 (2008).
- [33] F. VAN DEN BERGH. *An Analysis of Particle Swarm Optimizers*. Thèse de Doctorat, Faculty of Natrual and Agricultural Science, University of Pretoria (2001).
- [34] I.C. TRELEA. *The particle swarm optimization algorithm : convergence analysis and parameter selection*. Information Processing Letters **85**, 317–325 (2003).
- [35] K.E. PARSOPOULOS AND M.N. VRAHATIS. *Recent approaches to global optimization problems through particle swarm optimization*. Natural Computing **1**, 235–306 (2002).
- [36] M.A. MONTES DE OCA, T. STÜTZLE, M. BIRATTARI, AND M. DORIGO. *A comparison of particle swarm moptimization algorithms based on run-length distributions*. Lecture Notes in Computer Science **4150**, 1–12 (2006).
- [37] J.C. SPALL. *Introduction to Stochastic Search and Optimization*. Wiley-Interscience (2003).
- [38] M. CLERC. Comparing two stochastic algorithms on a benchmark set. Disponible sur le site de l’auteur : clerc.maurice.free.fr/Maths/compare_algo/compare_algos.pdf, (2006).
- [39] A. ABRAHAM AND H. LIU. *Turbulent particle swarm optimization using fuzzy parameter tuning*. Foundations of Computational Intelligence - Springer **3** (2009).

Conclusion générale et perspectives

Ce rapport rassemble des travaux relatifs à l'estimation de paramètres thermophysiques, à l'estimation de conditions limites stationnaires et instationnaires pour des problèmes linéaires et non-linéaires, ainsi qu'à la conception optimale d'expérience.

Estimation de paramètres thermophysiques

L'estimation de paramètres thermophysiques, et en particulier, des diffusivités thermiques d'un matériau anisotrope dans les directions principales du tenseur des conductivités thermiques, a été effectuée avec la méthode flash 3D. En appliquant localement de l'énergie au moyen d'un laser CO_2 , on peut suivre l'évolution spatio-temporelle de la température en face avant ou face arrière avec une caméra infrarouge. La particularité de cette méthode est de ne pas exploiter directement les mesures de température mais de construire des observables à partir des coefficients de la transformée de Fourier des champs de température. L'intérêt de cette transformation vient du fait que l'on dispose de la solution analytique du modèle et donc également de l'expression analytique de l'évolution temporelle des coefficients de sa transformée de Fourier.

Le rôle de l'estimateur est ensuite d'extraire de l'information à partir de ces observables de façon à estimer les paramètres inconnus recherchés. Sous le terme d'estimateur, on inclut simultanément la définition des observables (et donc du modèle associé) ainsi que la méthode d'estimation qui traite ces observables. Concernant la méthode flash 3D, les estimateurs, ERH (« Estimation par Rapport des Harmoniques ») et EDSH (« Estimation par traitement Direct et Séparation des Harmoniques »), disponibles dans la littérature, ont été utilisés et améliorés de façon à réduire les écarts-types des estimations. Deux nouveaux estimateurs, ENH (« Estimation par Normalisation des Harmoniques ») et ED (« Estimation Directe »), qui réduisent davantage les écarts-types des estimations, ont également été proposés.

L'estimateur ENH exploite des observables calculés en normalisant les harmoniques du champ de température par une harmonique de référence. Avec cette transformation des har-

moniques, le problème inverse d'estimation des deux diffusivités thermiques dans le plan de l'échantillon est linéaire. L'estimateur s'avère particulièrement performant avec la méthode flash face-avant : les écarts-types théoriques sont plus faibles qu'avec les estimateurs ERH et EDSH. Cela signifie que l'estimateur parvient à extraire une plus grande partie de l'information présente dans les observables.

L'estimateur ED n'applique pas de transformation aux harmoniques. Il utilise directement l'expression analytique de l'évolution temporelle des harmoniques. Cette expression fait intervenir les trois diffusivités thermiques. Pour les estimer, on utilise un algorithme d'optimisation non-linéaire. Par rapport à la méthode d'estimation du Maximum de Vraisemblance (MLE), on a montré comment la méthode d'estimation Bayésienne du Maximum a Posteriori (MAP), permet d'inclure des paramètres supposés connus dans le vecteur des paramètres inconnus de manière à corriger certaines sources de biais. Il s'agit par exemple des erreurs de synchronisation, des erreurs d'offset ou des erreurs dues à la dérive temporelle de la caméra infrarouge.

L'importance de l'estimateur en estimation de paramètres a été illustrée dès le premier chapitre dans le cas d'une estimation de droite. La façon d'exploiter les mesures modifie la qualité des estimations. Le second chapitre a suggéré qu'il fallait éviter d'appliquer des transformations « non réversibles » sur les mesures puisque cela a pour effet de détruire une partie de l'information et ainsi d'augmenter les écarts-types d'estimation. Il est sans doute préférable d'introduire des paramètres supplémentaires plutôt que de trouver des « astuces » qui les fassent disparaître.

Nous nous sommes également intéressés à l'impact de l'appareil de mesure, la caméra infrarouge, sur les harmoniques et les observables. Bien que la perturbation due aux caméras soit connue, il n'y avait pas, à notre connaissance, d'analyse dans la littérature sur cette question. Nous avons étudié deux aspects qui viennent s'ajouter à la liste des avantages que présentent la méthode flash 3D :

- le filtrage des champs de température du au caractère passe-bas de la caméra n'a qu'un effet marginal sur l'estimation, car cet effet filtre est indirectement estimé avec la forme de l'excitation thermique (du spot laser).
- la loi d'étalonnage de la caméra a très peu d'influence. On a montré qu'il est possible de la supposer linéaire tant que les variations de température sont relativement faibles. Cela implique de rejeter certaines images thermiques en face avant, mais en face arrière, les biais théoriques calculés restent inférieurs à quelques pourcents (avec les matériaux utilisés). Sans aller jusqu'à faire cette hypothèse de linéarité, nous avons aussi montré que la méthode d'estimation MAP permet d'inclure les paramètres de la loi d'étalonnage dans le vecteur des paramètres inconnus.

Au niveau des perspectives, il serait intéressant de revenir sur la thermographie infrarouge en comparant les fonctions de transfert de la caméra AGEMA 880SW utilisée majoritairement dans cette thèse, avec d'autres caméras, et notamment la caméra matricielle CEDIP Titanium SC7200MW du laboratoire. Le gain apporté par ce type de caméra est-il significatif? L'augmentation de la fréquence d'acquisition et la réduction du bruit de mesure n'ont probablement qu'un effet marginal sur l'estimation, mais qu'en est-il des dérives temporelles de la caméra? Cependant, les variations de l'environnement radiatif peuvent aussi être à l'origine de dérives. Il pourrait être nécessaire de développer un système permettant d'isoler la caméra et l'échantillon des perturbations extérieures, notamment lorsque le matériau n'est pas très émissif, comme c'est le cas ici avec les échantillons composites de carbone.

Quant aux estimateurs, seul l'estimateur ENH est actuellement opérationnel. Tous les autres estimateurs, évoqués au chapitre 2, ne sont que partiellement implémentés. C'est notamment le cas de l'estimateur ED, théoriquement le plus performant. Il ne permet pas actuellement de traiter des données expérimentales. Implémenter cet estimateur avec toutes les corrections proposées au chapitre 2, devrait permettre d'améliorer significativement la qualité des estimations et de réduire leurs sensibilités aux perturbations. Par ailleurs, l'estimateur ED peut aisément être adapté à des excitations thermiques de type échelon qui permettent d'apporter une plus grande quantité d'énergie à l'échantillon sans dégrader sa surface. Les sensibilités aux différents paramètres se trouvent alors améliorées. Si le laser CO_2 s'avère assez stable, il faudrait étudier si les diffusivités thermiques peuvent être estimées plus précisément avec ce type d'excitation.

Une des questions qui se posent lors de l'estimation des diffusivités thermiques d'un échantillon dans les conditions ambiantes, est l'influence des phénomènes convectifs. Une des approches existantes est de prendre en compte la conduction de la chaleur dans l'air à proximité des parois. Quel est le gain apporté par la prise en compte de ces phénomènes? Une enceinte à vide a été développée au laboratoire qui devrait permettre de mettre en évidence l'existence, ou non, d'une variation suivant que l'estimation est réalisée sous vide ou dans l'air. Si une variation est présente, avec quel type de matériau est-elle significative?

Le dispositif expérimental permet également de générer des excitations périodiques. Il pourrait ainsi être intéressant de comparer la performance de la méthode flash 3D avec les méthodes de type « thermal wave » qui mettent l'accent sur le déphasage et l'amplitude des « ondes » de température.

Une autre évolution du dispositif concerne les matériaux bicouches et plus particulièrement la caractérisation des revêtements protecteurs. Un modèle, identique à ceux que l'on trouve dans la littérature, a été développé. Il doit encore être implémenté puis testé sur des échan-

tillons.

Enfin, le dispositif expérimental pourrait aussi être amélioré en vue de l'estimation des diffusivités à haute température. Le système développé s'appuie actuellement sur un cryothermostat et un échangeur à eau en cuivre, ce qui ne permet pas de dépasser la centaine de degrés. De plus, le dispositif n'est applicable que pour des matériaux isotropes car l'estimation de la diffusivité thermique dans l'épaisseur n'est plus possible dès lors que l'échantillon est placé sur l'échangeur. Quelques articles sont apparus récemment dans la littérature à propos de l'estimation des diffusivités thermiques pendant la relaxation d'un échantillon que l'on a préalablement chauffé, par exemple avec le laser lui-même. Des développements dans ce sens semblent prometteurs. Il nécessite de faire évoluer le dispositif ainsi que de déterminer le modèle adapté.

Estimation de conditions limites thermiques

L'estimation de conditions limites thermiques a été illustrée sur deux applications : la bouteille d'hydrogène et la torche oxyacétylène. Dans ces deux situations, on parvient à estimer des grandeurs inaccessibles à la mesure directe, par l'intermédiaire de mesures indirectes et d'un modèle. Bien que la littérature soit relativement abondante sur ce sujet, chaque application est particulière et demande souvent un traitement particulier, notamment au niveau de la régularisation.

Du côté applicatif, on souligne l'intérêt de l'estimation de conditions limites dans des conditions extrêmes, comme ici sous forte pression ou à haute température. Ces situations sont de plus en plus rencontrées, aussi bien dans le monde académique (tenue et durabilité des matériaux à hautes températures) que dans le monde industriel (contrôle de procédé, développement de normes de sécurité...).

Concernant la première application (remplissage de bouteilles d'hydrogène), un modèle 0D du remplissage des bouteilles haute pression a tout d'abord été développé (Annexe 10 p328) pour essayer de mieux cerner les facteurs influençant la température du gaz lors du remplissage. Les résultats obtenus pour les différents modèles de gaz (gaz parfait, gaz de Van der Waals, gaz réel) sont cohérents. Toutefois, une phase de validation plus complète s'impose pour s'assurer que son implémentation est correcte et que les hypothèses sur lesquelles le modèle 0D s'appuie sont pertinentes.

De plus, il pourrait être nécessaire d'étudier plus en détails les chaînes de remplissage réelles pour ajouter au modèle des dispositifs supplémentaires. Il s'agit par exemple de la présence de plusieurs réservoirs à des pressions différentes (remplissage étagé).

On peut aussi s'appuyer sur le modèle 0D pour faire de la commande optimale. L'objectif

serait alors de déterminer quelle loi de remplissage utiliser pour maximiser la masse de gaz finale dans la bouteille tout en minimisant le temps de remplissage et en respectant certaines contraintes (température, diamètre minimal et maximal de la section d'entrée...).

A propos des transferts thermiques dans la paroi des bouteilles, on est parvenu à estimer la température de surface interne en fonction du temps et de l'espace, à partir de mesures de température fournies par des thermocouples placés à l'interface polymère-composite. Moyennant certaines hypothèses, l'utilisation d'un modèle direct monodimensionnel dans des matériaux bicouches suffit pour cela. Une étude fréquentielle de la température dans le fluide et une étude du gain de la fonction de transfert de la paroi ont montré que le problème est mal-posé et nécessite une régularisation. L'approche proposée consiste à paramétrer la température de surface sur une base de fonctions sinus. Par ailleurs, comme le modèle direct est exprimé dans l'espace de Laplace, des algorithmes de transformée inverse ont été utilisés. Cependant, en exploitant le caractère linéaire de cette transformation et le fait que le problème inverse est lui-même linéaire, on a pu exprimer les sorties du modèle par l'intermédiaire de la matrice des sensibilités qui intègre en elle-même l'opération de transformée inverse. L'utilisation d'une base de fonctions sinus s'avère ici adaptée pour intégrer des contraintes sur le contenu fréquentiel de la solution. Cela permet de régulariser le problème inverse en forçant l'amplitude des hautes fréquences vers 0.

L'estimation de la condition limite sur la paroi interne s'est portée tout d'abord sur la température car l'évolution temporelle de celle-ci est plus simple à estimer que la densité de flux. En effet, la température de paroi est déjà une grandeur filtrée par le caractère effusif du matériau, si bien qu'elle possède moins de hautes fréquences. Aussi, l'estimation de la densité de flux s'est révélée être plus sensible aux paramètres utilisés dans l'algorithme d'inversion. Enfin, la connaissance de ces deux paramètres nous a permis d'estimer une conductance, à différentes positions dans la bouteille, après avoir au préalable défini une température de référence.

La conductance, ou tout autre forme de modèle, pourrait permettre d'estimer la température dans le gaz à partir, par exemple, de mesures de température dans la paroi. Cela permettrait, hypothétiquement, de développer des bouteilles intelligentes qui réguleraient automatiquement la vitesse de remplissage pour limiter les gradients thermiques dans leur paroi.

Pour la deuxième application (torche oxyacétylène), l'objectif est d'estimer les transferts thermiques entre une flamme oxyacétylène placée à quelques centimètres d'un matériau composite. Cela pose certaines difficultés supplémentaires par rapport à la bouteille d'hydrogène. Les hautes températures requièrent d'une part, de connaître et d'intégrer au modèle la variation des propriétés thermophysiques avec la température, et d'autre part, de prendre compte

des transferts radiatifs qui sont ici prédominants : un modèle non-linéaire adapté a donc été développé.

Du fait de leur caractère isolant, les échantillons de composite dont on cherche à caractériser la résistance, ne permettent pas d'estimer correctement la condition limite de la face exposée à la flamme. Aussi, un échantillon test en acier a été réalisé sur lequel 5 thermocouples ont été placés en face arrière. Deux modèles de transferts flamme-paroi ont été considérés. Le premier modélise les transferts avec une condition limite de flux imposé, alors que le second s'appuie sur une approximation des échanges radiatifs où la flamme est vue comme un corps noir. Ces deux modèles ont donné des résultats similaires. La température de surface de l'échantillon test a été estimée. Sa variation de 20°C à 1200°C ne suffit pas à faire varier le flux radiatif net entre la surface de l'échantillon et la flamme à environ 3000°C .

L'analyse des sensibilités par SVD, dont le principe a été présenté dans le premier chapitre, s'est révélée très pratique pour identifier les corrélations de paramètres à l'origine du caractère mal conditionné du problème inverse. Si la SVD est couramment utilisée pour faire de la troncature (régularisation, filtrage, modèle d'ordre faible...), à notre connaissance, cette application en analyse des sensibilités n'est pas encore très répandue dans notre discipline. Par ailleurs, la SVD a aussi été utilisée pour construire une base de fonctions permettant d'estimer les fonctions inconnues.

La question des estimateurs est moins centrale pour ce type de problème et notamment dans la seconde application (torche oxyacétylène), où l'objectif est d'abord d'obtenir un modèle qui reproduise les observations. On est loin de l'estimation de paramètres, où l'on souhaite que les résidus soient conformes à ce que prévoit le modèle. Les résultats obtenus sont corrects mais pourraient être améliorés en corrigeant certains défauts du dispositif et en modifiant la métrologie. L'utilisation de la thermographie infrarouge permet d'augmenter considérablement la quantité de données disponibles et ainsi estimer plus précisément la répartition spatiale de la puissance fournie par la torche.

Conception optimale d'expérience

La conception optimale d'expérience, abordée au chapitre 4, est un outil qui s'avère être une aide précieuse et efficace pour concevoir un dispositif expérimental destiné à l'estimation de paramètres thermophysiques pourvu que l'on dispose d'un critère d'optimalité pertinent. Un estimateur décrit comment traiter des observations. La conception optimale permet de déterminer quelles sont les meilleures observations à fournir à l'estimateur.

Elle porte sur l'optimisation des paramètres ajustables d'une expérience, à savoir les paramètres d'un dispositif que l'utilisateur peut modifier. Ces paramètres ont un impact sur l'écart-type des estimations, si bien qu'en optimisant ces paramètres, on minimise l'écart-type des estimations. Aussi, elle dépend de l'estimateur utilisé pour résoudre le problème.

Le paradoxe de la conception optimale est qu'elle nécessite la connaissance de la solution pour optimiser au mieux un dispositif donné. Dans le cas de l'estimation de paramètres, il faudrait connaître les paramètres en question ! Pour l'estimation de condition limite, il faudrait connaître les conditions limites ! Une extension à la conception optimale d'expérience, dite conception robuste d'expérience, tente de réduire l'influence de ce paradoxe. L'approche classique et l'approche robuste ont été appliquées sur un dispositif extrait de la littérature. Une extension à la méthode du maximum de vraisemblance a été proposée pour définir un critère d'optimalité qui prend en compte l'influence des paramètres supposés connus du modèle et en l'occurrence de l'incertitude sur la position des thermocouples. En modifiant la position des thermocouples, l'écart-type théorique a été diminué d'un facteur 20 à 40. Par ailleurs, le critère d'optimalité utilisé n'est probablement pas optimal. Utiliser d'autres approches, comme la méthode du maximum de vraisemblance étendue (EMLE) ou le Maximum a Posteriori (MAP), donneraient peut être de meilleurs résultats. Toutefois, cela ne modifie pas la démarche générale.

Des algorithmes d'optimisation stochastiques (en l'occurrence, on parle aussi de méta-heuristiques) ont été présentés et appliqués à la conception optimale d'expérience. Dans l'expérience numérique traitée, on a en effet montré que le critère d'optimalité présente de nombreux minimums locaux qui rendent les algorithmes de type gradient moins adaptés. Au contraire, les algorithmes d'optimisation par Essaims Particulaires (PSO) ou de type évolutionnaire, comme les Stratégies d'Evolution (ES) utilisent des mécanismes d'exploration de l'espace de recherche qui leur évitent, dans une certaine mesure, de converger prématurément dans un minimum local.

La conception optimale d'expérience n'a été utilisée que dans le cadre d'un dispositif destiné à l'estimation de paramètres thermophysiques, mais son champ d'application est plus vaste. Elle aurait par exemple été utile dans le cas de la torche oxyacétylène. En effet, les contraintes de temps ne nous ont pas permis de faire une étude plus approfondie de faisabilité de l'inversion, sans quoi on aurait vu que les positions des thermocouples sur l'échantillon test en acier n'étaient pas les bonnes.

Enfin, elle prend également tout son sens avec la méthode flash 3D. Où doit-on placer la caméra et à quelle distance de l'échantillon ? Quelle énergie faut-il déposer sur l'échantillon ? Quel type, quelle forme d'excitation (masque) utiliser ?

Annexe

1 Valeurs numériques génériques des paramètres

Paramètres	Valeurs
<i>Echantillon</i>	
Epaisseur de l'échantillon	$l_z = 3 \text{ mm}$
Longueur de l'échantillon	$l_x = 5 \text{ cm}$
Profondeur de l'échantillon	$l_y = 5 \text{ cm}$
Densité d'énergie déposée ⁱ	$Q = 10^4 \text{ Jm}^{-2}$
Coefficient d'échange	$h = 10 \text{ Wm}^{-2\circ\text{C}^{-1}}$
<i>Matériaux</i>	
Conductivité thermique (isolant)	$\lambda = 1 \text{ Wm}^{-1\circ\text{C}^{-1}}$
Capacité thermique (isolant)	$\rho C = 2.10^6 \text{ Jkg}^{-1\circ\text{C}^{-1}}$
Diffusivité thermique (isolant)	$a = 5 \times 10^{-7}$
Nombre de Biot en z	$H_z = 0,05$
Constante de temps en x	$\tau_x = 2.10^{-2} \text{ s}^{-1}$
Constante de temps en y	$\tau_y = 2.10^{-4} \text{ s}^{-1}$
Constante de temps en z	$\tau_z = 2.10^{-4} \text{ s}^{-1}$
Conductivité thermique (conducteur)	$\lambda = 10 \text{ Wm}^{-1\circ\text{C}^{-1}}$
Capacité thermique (conducteur)	$\rho C = 2.10^6 \text{ Jkg}^{-1\circ\text{C}^{-1}}$
Diffusivité thermique (conducteur)	$a = 5 \times 10^{-6}$
Nombre de Biot en z	$H_z = 0,005$
Constante de temps en x	$\tau_x = 2.10^{-1} \text{ s}^{-1}$
Constante de temps en y	$\tau_y = 2.10^{-3} \text{ s}^{-1}$
Constante de temps en z	$\tau_z = 2.10^{-3} \text{ s}^{-1}$
<i>Caméra infrarouge</i>	
Bruit de mesure	$\sigma_m = 0,1 \text{ }^\circ\text{C}$
Résolution caméra	$N_x \times N_y = 50 \times 50 \text{ pixels}$
Fréquence d'acquisition	10 Hz
Durée d'acquisition	30 s
Premier instant	$t_0 = 0,1 \text{ s}$
Instants de mesure	$[0.1 : 0.1 : 30.0]$ (notation Matlab)
<i>Excitation thermique - Type cubique (Fig.2.4)</i>	
Position du centre	$\frac{p_x}{l_x} = 0,5$ et $\frac{p_y}{l_y} = 0,5$
Diamètre du spot	$\frac{2s}{l_x} = 0,25$ et $\frac{2s}{l_y} = 0,25$

⁽ⁱ⁾ Cette valeur correspond approximativement à l'énergie déposée par le laser utilisé dans le dispositif expérimental, soit 1 Jcm^{-2} .

Tableau A.1 – Valeurs génériques des paramètres thermophysiques et expérimentaux pour la méthode flash. On fait référence à ce tableau à plusieurs reprises si bien que tous les paramètres ne sont pas toujours pertinents puisque certains pourraient ne pas être utilisés. Deux matériaux relativement différents, un isolant et un conducteur, sont parfois utilisés pour montrer l'effet d'une variation de diffusivité sur les évolutions de température. Ils correspondent approximativement aux matériaux que l'on manipule dans le cadre du projet H2E.

2 Solution analytique monodimensionnelle

Cette annexe développe certains calculs permettant d'obtenir la solution analytique de l'équation de la chaleur dans un mur monodimensionnel (Fig.A.1). La méthodologie utilisée ici pour résoudre ce type de problème est détaillée dans Ozisik [1].

L'échantillon considéré est d'épaisseur e . Il est constitué d'un matériau supposé homogène caractérisé par ses propriétés thermophysiques $(\rho C, \lambda)$. Celles-ci sont supposées indépendantes de la température. La température initiale est supposée nulle. Le matériau est excité sur sa face de gauche par un flux de chaleur $\phi(t)$. On suppose par ailleurs que la température extérieure T_{ext} est nulle (cela revient à travailler en température relative).

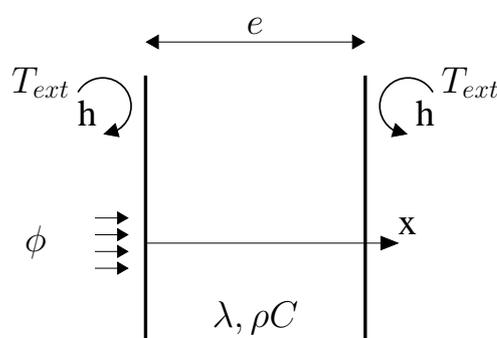


Figure A.1 – Mur monodimensionnel soumis à une densité de flux imposé et avec pertes latérales de chaleur.

2.1 Mur soumis à un échelon de densité de flux

On suppose ici que $\phi(t)$ est un échelon. Le système d'équations régissant les transferts dans le mur (1D) est donc le suivant :

$$\frac{\partial y}{\partial t} = a \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 < x < e \quad (\text{A.2.1a})$$

$$-\lambda \frac{\partial y}{\partial x} = -hy + \phi \cdot u(t) \quad \text{pour } x = 0 \quad (\text{A.2.1b})$$

$$-\lambda \frac{\partial y}{\partial x} = hy \quad \text{pour } x = e \quad (\text{A.2.1c})$$

$$y = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (\text{A.2.1d})$$

La résolution de ce système peut être obtenue en décomposant le problème initial en deux « sous » problèmes [1, p.84] : le problème stationnaire $y_s(x)$ et le problème homogène $y_h(x, t)$.

2.1.1 Le problème stationnaire

Soit $y_s(x)$ le champ de température stationnaire, solution du système suivant :

$$0 = a \frac{\partial^2 y_s}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 < x < e \quad (\text{A.2.2a})$$

$$-\lambda \frac{\partial y_s}{\partial x} = -h y_s + \phi \quad \text{pour } x = 0 \quad (\text{A.2.2b})$$

$$-\lambda \frac{\partial y_s}{\partial x} = h y_s \quad \text{pour } x = e \quad (\text{A.2.2c})$$

$$y_s = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (\text{A.2.2d})$$

La résolution ne pose aucune difficulté, y_s est une fonction linéaire de x et est donc de la forme $y_s = a.x + b$:

$$y_s(x) = \frac{\phi e}{\lambda(2+H)} \left(\frac{1}{H} + 1 - \frac{x}{e} \right) \quad \text{avec } H = \frac{he}{\lambda} \quad (\text{A.2.3})$$

2.1.2 Le problème homogène

Soit $y_h(x)$ le champ de température du problème homogène, solution du système :

$$\frac{\partial y_h}{\partial t} = a \frac{\partial^2 y_h}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 < x < e \quad (\text{A.2.4a})$$

$$-\lambda \frac{\partial y_h}{\partial x} = -h y_h \quad \text{pour } x = 0 \quad (\text{A.2.4b})$$

$$-\lambda \frac{\partial y_h}{\partial x} = h y_h \quad \text{pour } x = e \quad (\text{A.2.4c})$$

$$y_h(x) = -y_s(x) \quad \text{pour } t = 0 \quad (\text{A.2.4d})$$

Il s'agit d'un problème de relaxation où la condition initiale correspond à l'opposée de la solution stationnaire de manière à ce qu'en superposant le système d'équations de la solution stationnaire (Eq.A.2.2) et le système d'équations de la solution homogène (Eq.A.2.4), on retrouve le système d'équations de la solution recherchée (Eq.A.2.1).

La solution à ce problème de conduction instationnaire monodimensionnelle dans un milieu d'épaisseur finie peut être obtenue par la méthode de séparation des variables [1, p.44]. On suppose que le champ de température $y_h(x, t)$ peut s'écrire sous forme d'un produit de deux fonctions $f(x)$ et $g(t)$ qui dépendent respectivement de l'espace et du temps :

$$y_h(x, t) = f(x)g(t)$$

2 Solution analytique monodimensionnelle

En réinjectant cette forme de solution dans l'équation (Eq.A.2.4a), on peut séparer les termes qui dépendent du temps t (à gauche) et ceux qui dépendent de l'espace x (à droite) :

$$\frac{1}{a} \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \text{cte} = -\mu^2 \quad (\text{A.2.5})$$

Les termes dépendant du temps sont égaux aux termes dépendant de l'espace uniquement. Comme il n'y a pas de contrainte particulière sur $f(x)$ et $g(t)$, cela signifie que les deux termes sont égaux à une constante. Cette constante, noté $-\mu^2$ est négative pour assurer la stabilité de la solution $g(t)$. En effet, $g(t)$ est nécessairement nécessairement bornée pour $t \rightarrow \infty$. La solution pour $g(t)$ est donnée par :

$$g(t) = e^{-a\mu^2 t} \quad (\text{A.2.6})$$

La constante de proportionnalité est intégrée à la fonction $f(x)$. Sa solution s'écrit :

$$f(x) = A \cos(\mu x) + B \sin(\mu x) \quad (\text{A.2.7})$$

Avec A et B deux constantes. En utilisant les conditions limites (Eq.A.2.4b) et (Eq.A.2.4c), on a respectivement les deux contraintes suivantes sur f :

$$-\frac{\partial f}{\partial x}(x=0) + \frac{h}{\lambda} f(x=0) = \frac{hA}{\lambda} - B\mu = 0 \quad (\text{A.2.8})$$

$$-\frac{\partial f}{\partial x}(x=e) - \frac{h}{\lambda} f(x=e) = \frac{hA}{\lambda} \left[-\cos(\mu e) + \frac{\lambda\mu}{h} \sin \mu e \right] + B\mu \left[-\cos \mu e - \frac{h}{\lambda\mu} \sin \mu e \right] = 0 \quad (\text{A.2.9})$$

En réinjectant l'équation (Eq.A.2.8) dans (Eq.A.2.7), on obtient :

$$f(x) = B \frac{\mu\lambda}{h} \cos(\mu x) + B \sin(\mu x) \quad (\text{A.2.10})$$

Par ailleurs, comme A et B sont non nuls, μ doit satisfaire la contrainte (A.2.9) :

$$2Hu \cos(u) = \sin(u) (u^2 - H^2) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} u &= \mu e \\ H &= \frac{he}{\lambda} \end{cases} \quad (\text{A.2.11})$$

Cette équation admet une infinité de racines. Ces racines sont symétriques par rapport à 0. Par ailleurs, la méthode de la séparation des variables permet d'obtenir ici une base de fonctions de l'ensemble des solutions. Chaque fonction peut donc être multipliée par une constante quelconque. Ainsi, utiliser μ ou $-\mu$ ne modifie que le signe de $f(x)$, ce qui n'a pas d'influence. Seules les racines strictement positives u_k avec $k \geq 1$ sont donc prises en compte. Par ailleurs, en multipliant par he/λ et en prenant $B = 1$, on définit les fonctions $Z_k(x)$, associée aux solutions

u_k par :

$$Z_k(x) = u_k \cos(u_k x/e) + H \sin(u_k x/e) \quad (\text{A.2.12})$$

Ainsi, si une fonction $Z_k(x)$ se met sous la forme (Eq.A.2.12) alors la fonction $Z_k(x)g(t)$ est solution des trois premières équations du système (Eq.A.2.4). Plus généralement, la solution au problème est constituée de toutes les combinaisons linéaires des fonctions $Z_k(x)$. Finalement, la solution $y_h(x, t)$ s'écrit de la façon suivante :

$$y_h(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k Z_k(x) e^{-a u_k^2 t} \quad (\text{A.2.13})$$

Il ne reste que la condition initiale à satisfaire. Sauf quelques cas particuliers, la condition initiale $y_h(x, t = 0)$ ne peut pas s'exprimer avec uniquement une seule fonctions $Z_k(x)$. On peut montrer que les $Z_k(x)$ sont des fonctions orthogonales [2, p.358] formant une base de l'espace des solutions au problème. Ainsi, les coefficients c_k correspondent au composante de $y_h(x, t = 0)$ dans la base $Z_k(x)$ et que l'on obtient ici par projection (voir [3, p.111]). Cependant, pour simplifier cette étape, on considère la base $Z_k(x)$ normalisée par $\|Z_k\|$, ainsi :

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{\|Z_k\|} \langle y_h(x) | \frac{Z_k}{\|Z_k\|} \rangle \\ &= \frac{1}{\|Z_k\|^2} \int_0^e Z_k(\tau) y_h(\tau) d\tau \end{aligned}$$

Avec $k > 0$, on a :

$$\begin{aligned} \|Z_k\|^2 &= \int_0^e Z_k(\tau) Z_k(\tau) d\tau \\ &= \frac{e}{4u_k} \left[\sin(2u_k) (u_k^2 - H^2) - 2H u_k \cos(2u_k) \right. \\ &\quad \left. + 2u_k^3 + 2H^2 u_k + 2H u_k \right] \\ &= \frac{e}{2} [u_k^2 + H^2 + 2H] \end{aligned}$$

Remarque sur le développement :

On utilise ici les formules impliquant « la tangente de l'arc moitié » :

$$\sin(2u) = \frac{2 \tan(u)}{1 + \tan^2(u)} \quad \text{et} \quad \cos(2u) = \frac{1 - \tan^2(u)}{1 + \tan^2(u)}$$

Par ailleurs, en développant le produit scalaire entre $Z_k(x)$ et $y_h(x, t = 0)$, on a :

$$\langle y_h(x) | Z_k \rangle = -\frac{e^2 \phi}{u_k \lambda} \quad (\text{A.2.14})$$

La solution $y_h(x, t)$ du problème homogène est donc :

$$y_h(x, t) = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\phi e}{\lambda u_k u_k^2 + H^2 + 2H} \frac{Z_k(x)}{e^{-a/e^2 u_k^2 t}} \quad (\text{A.2.15})$$

2.1.3 Solution analytique

On obtient alors immédiatement la solution $y(x, t)$ du système (Eq.A.2.1) excité par à un échelon de densité de flux ϕ :

$$\begin{aligned} y(x, t) &= y_h(x, t) + y_s(x) \\ &= 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{u_k u_k^2 + H^2 + 2H} \frac{Z_k(x)}{e^{-\tau u_k^2 t}} \quad (\text{A.2.16}) \\ \text{avec } \begin{cases} \tau &= a/e^2 \\ T_{lim} &= \frac{V_{lim}}{\tau} = \frac{\phi}{\rho C e} \frac{1}{\tau} \end{cases} \end{aligned}$$

2.1.4 Coefficients de sensibilité

Les sensibilités aux différents paramètres dans le cas d'une excitation de type échelon sont :

$$\frac{\partial T}{\partial T_{lim}} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{u_k} \frac{Z_{u_k}(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} \left(1 - e^{-\tau u_k^2 t}\right) \quad (\text{A.2.17a})$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = 2T_{lim} \tau t \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k}(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau u_k^2 t} \quad (\text{A.2.17b})$$

$$\frac{\partial T}{\partial H} = 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial H} (A_k Z_{u_k}) \left(1 - e^{-\tau u_k^2 t}\right) + 2\tau t u_k \frac{\partial u_k}{\partial H} A_k Z_k e^{-\tau u_k^2 t} \quad (\text{A.2.17c})$$

$$\text{Avec : } A_k = \frac{1}{u_k} \frac{1}{u_k^2 + H^2 + 2H} \quad (\text{A.2.18a})$$

$$\frac{\partial A_k}{\partial H} = - \frac{\frac{\partial u_k}{\partial H} (u_k^2 + H^2 + 2H) + 2 u_k \left(\frac{\partial u_k}{\partial H} u_k + H + 1\right)}{u_k^2 (u_k^2 + H^2 + 2H)^2} \quad (\text{A.2.18b})$$

Les dérivées $\frac{\partial Z_{u_k}}{\partial H}$ et $\frac{\partial u_k}{\partial H}$ sont données par les expressions (Eq.A.2.21d) et (Eq.A.2.21e).

2.2 Mur soumis à une excitation impulsionnelle

2.2.1 Solution analytique

La réponse du système à une excitation impulsionnelle $\phi(t) = Q \delta(t)$ avec Q en Joules [J] peut être obtenue à partir de la réponse à un échelon. Pour obtenir cette réponse, on fait tendre vers

0 l'écart ϵ entre deux échelons. Ainsi :

$$\begin{aligned}
 T(x,t) &= y(x,t) \frac{Q}{\epsilon} - y(x,t-\epsilon) \frac{Q}{\epsilon} \\
 &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2Q}{\epsilon \lambda u_k} \frac{Z_k(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau u_k^2 t} \left(e^{a \mu_k^2 \epsilon} - 1 \right) \\
 &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2Q}{\rho C e} \frac{u_k Z_k(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau u_k^2 t} \quad \text{lorsque } \epsilon \rightarrow 0 \\
 &= 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau u_k^2 t} \quad \text{avec } \begin{cases} T_{lim} &= \frac{Q}{\rho C e} \\ \tau &= a/e^2 \end{cases} \quad (\text{A.2.19})
 \end{aligned}$$

2.2.2 Coefficients de sensibilité

Calculons à présent les sensibilités à ces trois paramètres.

$$\frac{\partial T}{\partial T_{lim}} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k}(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau u_k^2 t} \quad (\text{A.2.20a})$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -2T_{lim} t \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k}(x)}{u_k^2 + H^2 + 2H} u_k^2 e^{-\tau u_k^2 t} \quad (\text{A.2.20b})$$

$$\frac{\partial T}{\partial H} = 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{\partial A_k}{\partial H} Z_{u_k} + A_k \frac{\partial Z_k}{\partial H} - 2\tau t A_k Z_k u_k \frac{\partial u_k}{\partial H} \right] e^{-\tau u_k^2 t} \quad (\text{A.2.20c})$$

Avec :

$$A_k = \frac{u_k}{u_k^2 + H^2 + 2H} \quad (\text{A.2.21a})$$

$$\frac{\partial A_k}{\partial H} = \frac{\frac{\partial u_k}{\partial H} (u_k^2 + H^2 + 2H) - 2u_k (u_k \frac{\partial u_k}{\partial H} + H + 1)}{(u_k^2 + H^2 + 2H)^2} \quad (\text{A.2.21b})$$

$$Z_{u_k}(x) = u_k \cos(u_k \frac{x}{e}) + H \sin(u_k \frac{x}{e}) \quad (\text{A.2.21c})$$

$$\frac{\partial Z_{u_k}}{\partial H} = \frac{\partial u_k}{\partial H} \cos(u_k \frac{x}{e}) \left(1 + H \frac{x}{e} \right) + \sin(u_k \frac{x}{e}) \left(1 - u_k \frac{x}{e} \frac{\partial u_k}{\partial H} \right) \quad (\text{A.2.21d})$$

$$\left. \frac{\partial u_k}{\partial H} = \frac{\partial u_k}{\partial H} \right)_{\gamma_3 = \text{cte}} = -\frac{\partial \gamma_3}{\partial H} / \frac{\partial \gamma_3}{\partial u} \quad (\text{Voir Eq.A.2.22c})$$

$$= \frac{(2u_k H^2 + 2u_k^3) \cos^2(u_k)}{H^4 + u_k^4 - 2u_k^2 H^2 + 2H^3 \cos^2(u_k) + 2u_k^2 H \cos^2(u_k)} \quad (\text{A.2.21e})$$

2.3 Solution de l'équation transcendante

Pour rappel, il s'agit ici de déterminer les solutions de l'équation suivante (Eq.A.2.11) :

$$2Hu \cos(u) = \sin(u) (u^2 - H^2)$$

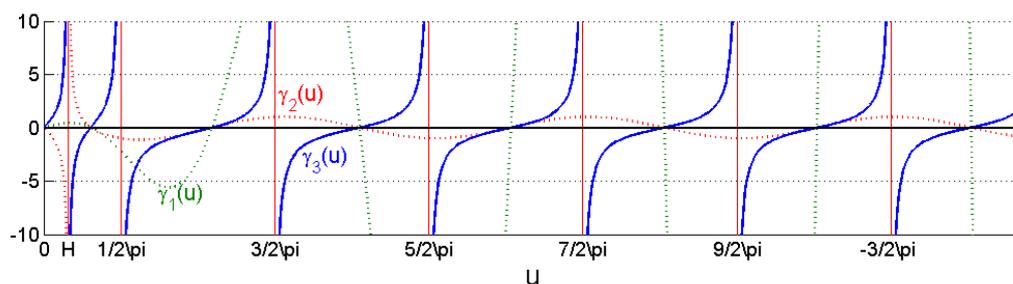


Figure A.2 – Tracé des fonctions $\gamma_i(u)$ pour $H = 0.5$. Les asymptotes verticales sont en rouge. On constate que $\gamma_3(u)$ est strictement croissante et coupe une fois l’axe des abscisses entre deux asymptotes.

Lorsque $H = 0$, les solutions sont immédiates : $u_k = k\pi$. Sinon, on peut définir les fonctions associées $\gamma_i(u)$. Il s’agit de fonctions dont les zéros sont les racines de l’équation précédente.

$$\gamma_1(u) = 2Hu \cos(u) - \sin(u) (u^2 - H^2) \quad (\text{A.2.22a})$$

$$\gamma_2(u) = \frac{2Hu}{u^2 - H^2} \cos(u) - \sin(u) \quad (\text{A.2.22b})$$

$$\gamma_3(u) = \tan(u) - \frac{2Hu}{u^2 - H^2} \quad (\text{A.2.22c})$$

Remarque : lorsque $u \rightarrow \infty$, les racines tendent vers $k\pi$.

Bien que les zéros de ces trois fonctions soient identiques. La complexité de l’algorithme dépend de la formulation utilisée. On utilise la méthode de Newton pour déterminer les zéros des fonctions. Il s’agit d’un algorithme itératif qu’il faut donc initialiser. De plus, il est absolument nécessaire de ne pas « rater » de zéros. La difficulté avec les fonctions $\gamma_1(u)$ et $\gamma_2(u)$ est d’initialiser l’algorithme de Newton correctement. La fonction $\gamma_3(u)$ semble particulièrement adaptée puisqu’elle est strictement croissante sur \mathfrak{R} :

$$\frac{d\gamma_3}{du}(u) = 1 + \tan^2(u) + \frac{2H(H^2 + u^2)}{(H^2 - u^2)^2} \quad (\text{A.2.23})$$

Par ailleurs, $\gamma_3(u)$ n’est pas définie pour $u = \frac{\pi}{2} + p\pi$ et $u = H$. Il est ainsi facile de déterminer les racines u_k puisqu’il y en a très exactement une seule entre chaque asymptote verticale (Fig.A.2). L’algorithme de Newton est appliqué sur chaque intervalle avec pour position initiale le milieu de celui-ci¹. L’algorithme de Newton est simple et très efficace dans ce cas. Les solutions sont obtenues avec une précision qui n’est limitée que par la précision machine. La figure (Fig.A.3) présente le script MatLab utilisé.

L’algorithme retourne deux tableaux. Comme son nom l’indique, le premier (« solutions ») contient les n premiers zéros de $\gamma_3(u)$ tandis que le second (« prec ») spécifie l’incertitude

1. Il s’agit de la solution lorsque $H \rightarrow 0$ ou quand $u \rightarrow \infty$

```

1 % Retourne les n premières racines (0 compris)
2 %
3 function [solutions prec] = solutions_un(n, H, epsilon)
4 assert((n >= 0) && (H >= 0), 'Precondition ');
5 assert(epsilon > 2*eps('double'), 'Precondition ');
6 solutions = [];          % Valeur du zéro
7 prec = [];              % Precision sur le zéro
8
9 if H ~= 0
10     f = @(x) tan(x) - 2*H*x./(x.^2 - H^2);
11     fp = @(x) 1 + tan(x).^2 + 2*H./(x.^2-H^2).^2 .* (x.^2+H^2); % df/dx
12 else
13     solutions = (0:1:n-1) * pi;
14     prec = eps('double ');
15     return;
16 end
17
18 % On place dans cette liste les n+2 points singuliers potentiels
19 sets = [ 0 pi/2 + (0:1:n)*pi];
20 if any(abs(H - sets) < epsilon)      % Si H est égal à une des valeurs singulières
21     solutions = H;
22     prec = epsilon;
23 else
24     sets = [sets H];
25 end
26 % On trie dans l'ordre croissant les points singuliers
27 sets = sort(sets);
28 % On se limite aux n premiers intervalles
29 sets = sets(1:n+1);
30
31 for i=0:n-1
32     % xmin et xmax correspondent à l'intervalle de recherche
33     % la racine de f(x).
34     xmin = sets(1+i);
35     xmax = sets(1+i+1);
36
37     x = 0.5*(xmin + xmax); % Initialisation au milieu de l'intervalle
38     v = f(x);
39
40     secure = 0;
41     while (abs(v) > epsilon) % Algorithme de Newton
42         t = x - v/fp(x);
43         t = min(t, xmax);
44         t = max(t, xmin);
45         x = x + 0.95*(t-x); % Un léger amortissement
46
47         v = f(x);
48         secure = secure + 1;
49         assert(secure ~= 1000, 'Unable to converge at iteration %d', i);
50     end
51
52     solutions = [solutions x];
53     prec = [prec epsilon/fp(x)];
54 end
55
56 [solutions sortIndex] = sort(solutions);
57 prec = prec(sortIndex);

```

Figure A.3 – Script MatLab qui retourne les n premières racines u_k avec $k \in [1; n]$ de $\gamma_3(u)$.

absolue sur chaque valeur. Celle-ci est évaluée à partir de la dérivée à la solution estimée. Plus la dérivée est grande en valeur absolue, meilleure est la précision. Cette information permet de

calculer l'erreur dT sur la solution $T(x, t)$ générée par les erreurs ϵ_k sur les zéros u_k :

$$\Delta T(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial T}{\partial u_k} \Delta u_k \quad (\text{A.2.24})$$

Pour simplifier le développement dans le cas d'une excitation impulsionnelle, introduisons $A_k(x, t)$ tel que :

$$T(x, t) = 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \underbrace{\frac{u_k}{u_k^2 + H^2 + 2H}}_{=A_k} Z_k(x) \underbrace{e^{-a/e^2 u_k^2 t}}_{=G_k} \quad (\text{A.2.25})$$

Majorons maintenant cette erreur :

$$\Delta T(x, t) < \sum_{k=1}^{\infty} \left| \frac{\partial T}{\partial u_k} \right| \Delta u_k = 2T_{lim} \sum_{k=1}^{\infty} \left| \frac{\partial A_k Z_k G_k}{\partial u_k} \right| \Delta u_k \quad (\text{A.2.26})$$

$$\begin{aligned} \text{Avec} \quad \left| \frac{\partial A_k Z_k G_k}{\partial u_k} \right|_{(x,t)} &= \left| A_k G_k \left[\frac{\partial Z_k}{\partial u_k} + Z_k \frac{\partial \ln(A_k)}{\partial u_k} \right] \left[1 + \frac{\partial \ln(G_k)}{\partial u_k} \right] \right| \\ &< A_k G_k \left[1 + 2(u_k + H) \left(1 + \frac{1}{u_k} \right) \right] \left[1 + 2 \frac{a t}{e^2} u_k \right] \\ &< \left[\frac{1}{u_k} + 2 \left(1 + \frac{H}{u_k} \right) \left(1 + \frac{1}{u_k} \right) \right] G_k \end{aligned}$$

2.4 Mur isolé soumis à un échelon

On suppose maintenant que le mur est isolé et soumis en face avant à une densité de flux de chaleur constante. Le système d'équations est :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 < x < e \quad (\text{A.2.27a})$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{\phi}{\lambda} \cdot u(t) \quad \text{pour } x = 0 \quad (\text{A.2.27b})$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = e \quad (\text{A.2.27c})$$

$$T = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (\text{A.2.27d})$$

L'expression de la solution à ce système est donnée par Özisik [1, p.207] :

$$y(x, t) = V_{lim} t + 2 \frac{V_{lim}}{\tau} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\cos(u_k x/e)}{u_k^2} \left(1 - e^{-\tau u_k^2 t} \right) \quad (\text{A.2.28})$$

$$\text{Avec } u_k = k\pi \quad \text{et} \quad V_{lim} = \frac{\phi}{\rho C e} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{a}{e^2}$$

Quant à son développement, une des possibilités est d'utiliser les transformées intégrales. La

transformée spatiale va nous permettre de supprimer les dérivées spatiales. Pour déterminer la base de fonctions adaptée au problème, on introduit $X(x)$ une fonction de l'espace. En multipliant la première équation du système (Eq.A.2.27a) par cette fonction, en intégrant sur le domaine spatial, puis en intégrant deux fois par partie, on obtient pour le terme de droite (la dérivée seconde en espace) :

$$\int_0^e X(x) a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dz = a \left[\frac{\partial T}{\partial x} X \right]_0^e - a \left[T \frac{\partial X}{\partial x} \right]_0^e + a \int_0^e T_{(p,x)} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} dz \quad (\text{A.2.29})$$

Parmi les 3 termes de l'équation, le premier est connu puisqu'il fait intervenir la dérivée de la température en $x = 0$ et $x = e$ (les conditions aux limites). Par contre, le deuxième terme est inconnu puisqu'il fait intervenir la température aux bords. Il serait donc appréciable que $\frac{\partial X}{\partial x}(x)$ soit nulle aux bords pour que ce terme disparaisse. Enfin, le dernier terme fait intervenir la dérivée seconde des fonctions $X(p)$. L'idéal serait donc que les fonctions $X(x)$ soient des fonctions propres de l'opérateur « dérivée seconde ». Dit autrement, il faudrait que la dérivée seconde de $X(x)$ soit égale à elle-même à un facteur près β . Ces deux conditions reviennent à chercher des fonctions solutions du système suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \beta X &= 0 & \text{pour } 0 < x < e \\ \frac{\partial X}{\partial x} &= 0 & \text{pour } x = 0 \text{ et } x = e \end{aligned}$$

Il s'avère que β est nécessairement positif puisque le système n'admet pas de solution autre que la fonction nulle si $\beta < 0$. On écrit donc le système de la façon suivante :

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \beta^2 X = 0 \quad \text{pour } 0 < x < e \quad (\text{A.2.30a})$$

$$\frac{\partial X}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = 0 \text{ et } x = e \quad (\text{A.2.30b})$$

Le problème ci-dessus est appelé « problème aux valeurs propres » [1, p.504] ou « problème aux limites » ou encore « Sturm-Liouville problem » [2, p.152]. Ce système admet un nombre dénombrable de solutions, notées $X_p(x)$, et appelées fonctions propres. Elles sont associées aux valeurs propres β_p [2, p.358]. A partir de l'équation (Eq.A.2.30a), on a :

$$X_p(x) = A \cos(\beta_p x) + B \sin(\beta_p x)$$

Puis avec les conditions limites (Eq.A.2.30b) :

$$X(x) = \cos(\beta_p x) \quad \text{avec } \beta_p = \frac{p\pi}{e}$$

Remarques :

1. La constante multiplicative A est quelconque. En effet, si $X_p(x)$ est un vecteur propre, alors $A \cos(\beta_p, x)$ en est un aussi. On peut donc prendre $A = 1$.
2. Les valeurs propres sont dénombrables ce qui permet le « retour » dans l'espace réel avec une série et non une intégrale.
3. Les fonctions $(X_p)_{0 \leq p < \infty}$ constituent une base orthogonale ([1, p.563], [3, p.139], [2, p.358]) ce qui permet de revenir simplement dans l'espace réel.

Maintenant que l'on a déterminé la base de fonctions de l'espace solution, on peut reprendre la résolution du système (Eq.A.2.27) et déterminer les composantes $\theta_p(t)$ de la solution dans cette base. En multipliant par $X_p(x)$ les 1^{ère} et 4^{ème} équations, on obtient le système suivant :

$$\frac{\partial \theta_p}{\partial t} + a\beta_p^2 \theta_p = \frac{a\phi}{\lambda} \quad (\text{A.2.31a})$$

$$\theta_p = 0 \quad \text{pour } t = 0 \quad (\text{A.2.31b})$$

Le système d'équation obtenu correspond ainsi à l'évolution temporelle des composantes de $T(x, t)$ dans la base $X_p(x)$. L'intérêt de cette base est que chaque composante évolue de manière indépendante alors que la base « classique », la température à une abscisse x_1 n'est pas indépendante de la température à une abscisse x_2 .

En déterminant la solution homogène puis la solution particulière du système (Eq.A.2.31) et en distinguant les cas $p = 0$ et $p > 0$, on obtient :

$$\theta_p(t) = \begin{cases} \frac{a\phi}{\lambda} t & \text{pour } p = 0 \\ \frac{\phi}{\lambda\beta_p^2} (1 - e^{-a\beta_p^2 t}) & \text{pour } p > 0 \end{cases} \quad (\text{A.2.32})$$

Comme la base X_p est orthogonale mais pas orthonormée, les solutions $\theta_p(t)$ ne correspondent aux composantes du champ de température solution dans la base X_p qu'à un facteur près. En faisant explicitement apparaître les vecteurs normalisés $X_p(x)/\|X_p\|$, on a :

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \sum_{p=0}^{\infty} \left\langle T \left| \frac{X_p}{\|X_p\|} \right. \right\rangle \frac{X_p(x)}{\|X_p\|} = \sum_{p=0}^{\infty} \theta_p(t) \frac{X_p(x)}{\|X_p\|^2} \\ T(x, t) &= \frac{a\phi}{e\lambda} t + 2 \frac{\phi}{\lambda e} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\cos(\beta_p x)}{\beta_p^2} (1 - e^{-a\beta_p^2 t}) \quad \text{avec } \beta_p = \frac{p\pi}{e} \end{aligned} \quad (\text{A.2.33})$$

Avec :

$$\| X_p \|^2 = \langle X_p | X_p \rangle = \int_0^e X_p(x) X_p(x) dx = \begin{cases} e & \text{si } p = 0 \\ e/2 & \text{sinon} \end{cases}$$

2.5 Mur isolé soumis à un dirac

On procède de manière identique à ce qu'il a été fait pour le cas du mur avec pertes. On superpose deux échelons d'amplitude opposée et on fait tendre le décalage temporel ϵ vers 0 :

$$\begin{aligned} T(x,t) &= \frac{Q}{\epsilon} (y(t) - y(t-\epsilon)) \\ &= \frac{Q}{\epsilon} \left(\frac{a}{e\lambda} \epsilon + \frac{2e}{\lambda} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos(u_k x/e)}{u_k^2} (e^{-\tau u_k^2 (t-\epsilon)} - e^{-\tau u_k^2 t}) \right) \\ &= T_{lim} \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos(u_k x/e) e^{-\tau u_k^2 t} \right) \end{aligned} \tag{A.2.34}$$

2.6 Mur semi-infini - Formulaire

Excitation	Expression analytique de la solution
Rampe de flux face avant	$T(x,p) = \frac{1}{b\sqrt{p}} \frac{\gamma}{p^2} \exp(-\sqrt{\frac{p}{a}}x)$ $T(x,t) = \frac{\gamma}{\lambda} \left[-\frac{x}{6} \frac{x^2}{a} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4at}} \right) \right) - x t \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{4at}} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp(-\frac{x^2}{4at}) \left(\frac{x^2}{a} \sqrt{t} + 4t^{3/2} \right) \right]$ $T(x=0,t) = \frac{4}{3} \frac{\gamma}{b\sqrt{\pi}} t^{3/2}$
Echelon de flux face avant	$T(x,p) = \frac{\phi}{bp\sqrt{p}} \exp(-\sqrt{\frac{p}{a}}x)$ $T(x,t) = \frac{2\phi}{\lambda} \left[\sqrt{\frac{at}{\pi}} e^{-x^2/(4at)} - \frac{x}{2} \operatorname{erfc}(x/\sqrt{4at}) \right]$ $T(x=0,t) = \frac{2\phi}{b\sqrt{\pi}} \sqrt{t}$
Dirac de flux face avant	$T(x,p) = \frac{Q}{b\sqrt{p}} \exp(-\sqrt{\frac{p}{a}}x)$ $T(x,t) = \frac{Q}{b\sqrt{\pi t}} \exp(-\frac{x^2}{4at})$
Echelon de flux face avant avec pertes	$T(x,p) = \frac{\phi}{b} \frac{\exp(-\sqrt{\frac{p}{a}}x)}{p(k+\sqrt{p})} \quad \text{avec } k = \frac{h}{b} [s^{-\frac{1}{2}}]$ $T(x=0,t) = \frac{\phi}{h} \left(1 - e^{k^2 t} \operatorname{erfc}(k\sqrt{t}) \right)$
Dirac de flux face avant avec pertes	$T(x,p) = \frac{Q}{b} \frac{\exp(-\sqrt{\frac{p}{a}}x)}{k+\sqrt{p}} \quad \text{avec } k = \frac{h}{b} [s^{-\frac{1}{2}}]$ $T(x=0,t) = \frac{Q}{b} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - k e^{k^2 t} \operatorname{erfc}(k\sqrt{t}) \right)$

Tableau A.2 – Quelques expressions analytiques de la solution pour un mur monodimensionnel semi-infini soumis à diverses excitations. Un formulaire des transformées de Laplace inverses est fourni par Maillet [2, p.338].

3 Solution analytique tridimensionnelle

3.1 Utilisation des transformations intégrales

La méthode flash 3D requiert la solution analytique d'un problème de conduction tridimensionnelle instationnaire dans un domaine à géométrie cartésienne de dimension $l_x \times l_y \times l_z$ (§3 p86). Une des méthodes pour résoudre le système (Eq.2.16 p87) est d'utiliser les transformées intégrales. L'objectif est de changer de base de fonctions, pour que le problème soit plus simple à résoudre. Les transformées intégrales permettent de supprimer les dérivées partielles et ainsi de transformer le système en simples équations algébriques. On développe le calcul pour la première équation du système, l'équation de la chaleur particularisée à notre situation :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + a_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + a_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (\text{A.3.35})$$

Commençons par la transformée en temps, on utilise la transformée de Laplace définie par :

$$\theta_{(x,y,z,p)} = \mathcal{L}\{T(x,y,z,t)\} = \int_0^\infty T(x,y,z,t) e^{-pt} dt$$

Appliquée à la première équation du système, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{\partial T}{\partial t} e^{-pt} dt &= \int_0^\infty \left(a_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + a_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + a_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) e^{-pt} dt \\ [Te^{-pt}]_0^\infty - \int_0^\infty -pTe^{-pt} dt &= a_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\infty Te^{-pt} dt + \dots \\ p\theta &= a_x \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + a_y \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + a_z \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (\text{A.3.36})$$

La transformée de Laplace a permis de supprimer la dérivée temporelle. Soit $X_n(x)$ et $Y_n(y)$ deux bases de fonctions, respectivement en x et y . Appliquons $X_m(x)$ sur la dérivée seconde en x de (Eq.A.3.36) et intégrons successivement deux fois par partie :

$$\begin{aligned} \int_0^{l_x} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} X_m(x) dx &= \left[\frac{\partial \theta}{\partial x} X_m \right]_0^{l_x} - \int_0^{l_x} \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{dX_m}{dx} dx \\ &= \int_0^{l_x} \theta \frac{d^2 X_m}{dx^2} dx + \left[\frac{\partial \theta}{\partial x} X_m \right]_0^{l_x} - \left[\theta \frac{dX_m}{dx} \right]_0^{l_x} \end{aligned}$$

Le choix des fonctions $X_m(x)$ est libre. Aussi, on peut choisir des fonctions telles que le terme de droite, qui fait intervenir la température (inconnue) au bord ($x = 0$ et $x = l_x$), soit nul. On souhaite également que la dérivée seconde de $X_m(x)$ soit égale à $X_m(x)$, à un facteur près α_m^2 qui ne peut être ici que positif. Dit autrement, il faut que $X_m(x)$ soit une fonction propre de l'opérateur dérivée seconde. Les solutions $X_m(x)$ doivent donc satisfaire le système

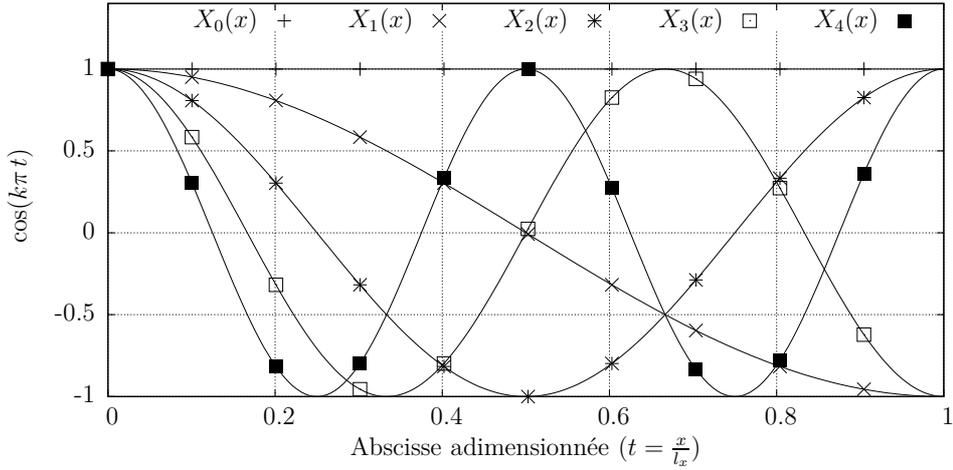


Figure A.4 – Les premières fonctions de la base $X_m = \cos(m \pi \frac{x}{l_x})$ ou $Y_n = \cos(n \pi \frac{y}{l_y})$.

suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \alpha_m^2 \theta &= 0 \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= 0 \quad \text{pour } x = 0 \text{ et } x = l_x \end{aligned}$$

Un système similaire s'applique aux fonctions $Y_n(y)$. Les solutions sont donc :

$$\begin{aligned} X_m(x) &= \cos(\alpha_m x) & \text{avec } \alpha_m &= \frac{m\pi}{l_x} \\ Y_n(y) &= \cos(\beta_n y) & \text{avec } \beta_n &= \frac{n\pi}{l_y} \end{aligned}$$

L'allure des fonctions $X_m(x)$ et $Y_n(y)$ est présentée sur la figure (Fig.A.4).

En appliquant la transformée de Laplace et la double transformée en espace au système (Eq.2.16 p87), on obtient le nouveau système suivant dont la solution correspond à l'évolution temporelle (en Laplace) des composantes de $T(x, y, z, t)$ dans la base $X_m(x)$ et $Y_n(y)$. Cependant, il s'agit des composantes à un facteur près car la base n'est pas orthonormée. Le système d'équations est :

$$\frac{\partial^2 \theta_{m,n}}{\partial z^2} - \gamma^2 \theta_{m,n} = 0 \quad \text{avec } \gamma^2 = \frac{p}{a_z} + \frac{a_x}{a_z} \alpha_m^2 + \frac{a_y}{a_z} \beta_n^2 \quad (\text{A.3.37a})$$

$$-\lambda_z \frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial z} = -h \theta_{m,n} + \Phi(\alpha_m, \beta_n, p) \quad \text{pour } z = 0 \quad (\text{A.3.37b})$$

$$-\lambda_z \frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial z} = h \theta_{m,n} \quad \text{pour } z = l_z \quad (\text{A.3.37c})$$

$\Phi(\alpha_m, \beta_n, p)$ est la transformée spatiale et temporelle de l'excitation thermique :

$$\Phi(\alpha_m, \beta_n, p) = \int_{x=0}^{l_x} \int_{y=0}^{l_y} \Phi(x, y, p) X_m(x) Y_n(y) dx dy \quad (\text{A.3.38})$$

La solution du système précédent est donnée dans le corps du manuscrit (Eq.2.18 p88) et (Eq.2.29 p91) lorsque l'on suppose l'excitation impulsionnelle. Pour revenir dans l'espace physique à partir des solutions $\theta_{m,n}(x, y, z, t)$, on projette le champ de température $T(x, y, z, t)$ dans la base $X_m(x) Y_n(y)$ normalisée. En notant $c_{m,n}$ les composantes, on a :

$$\begin{aligned} T(x, y, z, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_{m,n}(z, t) \frac{X_m(x)}{\|X_m\|} \frac{Y_n(y)}{\|Y_n\|} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \langle T(x, y, z, t) | \frac{X_m(x)}{\|X_m\|} \frac{Y_n(y)}{\|Y_n\|} \rangle \frac{X_m(x)}{\|X_m\|} \frac{Y_n(y)}{\|Y_n\|} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \theta(\alpha_m, \beta_n, z, t) \frac{X_m(x)}{\|X_m\|^2} \frac{Y_n(y)}{\|Y_n\|^2} \end{aligned} \quad (\text{A.3.39})$$

Avec :

$$\begin{cases} X_m(x) = \cos(m\pi x/l_x) & \text{et } m \geq 0 \\ Y_n(y) = \cos(n\pi y/l_y) & \text{et } n \geq 0 \\ \|X_m\|^2 = \begin{cases} l_x & \text{si } m = 0 \\ l_x/2 & \text{si } m > 0 \end{cases} & \text{et } \|Y_n\|^2 = \begin{cases} l_y & \text{si } n = 0 \\ l_y/2 & \text{si } n > 0 \end{cases} \end{cases}$$

3.2 Forme spatiale de l'excitation thermique

On suppose (§3.2.3 p89) que la fonction d'excitation $\Phi(x, y, z, t)$ peut se décomposer en un produit d'une fonction de l'espace $r(x, y)$ et d'une fonction du temps $u(t)$:

$$\underbrace{\Phi(x, y, t)}_{[W m^{-2}]} = \underbrace{Q}_{[J]} \underbrace{r(x, y)}_{[m^{-2}]} \underbrace{u(t)}_{[s^{-1}]} \iff \underbrace{\Phi(\alpha_m, \beta_n, p)}_{[J]} = \underbrace{Q}_{[J]} \underbrace{r(\alpha_m, \beta_n)}_{[-]} \underbrace{u(p)}_{[-]}$$

Q correspond à l'énergie totale cédée au matériau. La fonction de forme $r(x, y)$ définit comment est répartie spatialement cette énergie, alors que $u(t)$ définit sa répartition temporelle. On s'intéresse ici à quelques cas de fonctions de forme $r(x, y)$ (Fig.2.4 p90) :

1. Le flux uniforme
2. Le point
3. Le patch rectangulaire
4. Le spot cubique

3.2.1 Le flux uniforme

On suppose que l'énergie (ou la puissance) est déposée sur l'échantillon est répartie uniformément sur la surface de l'échantillon. La fonction de forme $r(x, y)$ est donc constante et égale à $1/l_x l_y$. Sa transformée spatiale vaut :

$$r(\alpha_m, \beta_n) = \int_{x=0}^{l_x} \int_{y=0}^{l_y} \frac{1}{l_x l_y} X_m(x) Y_n(y) dx dy = \delta(m) \delta(n) \quad (\text{A.3.40})$$

Avec $\delta(n)$ le symbole de kronecker.

3.2.2 Le point

Dans le cas du flux uniforme, on répartie l'énergie de façon uniforme. Ici, elle est localisée en un point (x_p, y_p) sur la surface de l'échantillon. La fonction de forme s'écrit :

$$r(x, y) = \delta(x - x_p) \delta(y - y_p) \quad (\text{A.3.41})$$

Avec $\delta(x)$ la fonction de Dirac. Quant à la transformée spatiale, elle vaut :

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha_m, \beta_n) &= \int_0^{l_x} \int_0^{l_y} \delta(x-x_p) \delta(y-y_p) \cos(\alpha_m x) \cos(\beta_n y) dy dx \\ &= \cos(\alpha_m x_p) \cos(\beta_n y_p) \end{aligned} \quad (\text{A.3.42})$$

3.2.3 Le patch rectangulaire

La fonction de forme $r(x, y)$ décrit une surface rectangulaire $[x_1; x_2] \times [y_1; y_2]$:

$$r(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{(x_2-x_1)(y_2-y_1)} & \text{pour } (x, y) \in [x_1; x_2] \times [y_1; y_2] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.3.43})$$

Quant à sa transformée, elle vaut :

$$\begin{aligned} r(\alpha_m, \beta_n) &= \iint r(x, y) X_m Y_n dy dx \\ &= \frac{1}{\alpha_m \beta_n} \frac{(\sin(\alpha_m x_1) - \sin(\alpha_m x_2)) (\sin(\beta_n y_1) - \sin(\beta_n y_2))}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \\ &= \cos\left(\frac{m\pi}{2} \frac{x_1 + x_2}{l_x}\right) \text{sinc}\left(\frac{m\pi}{2} \frac{x_2 - x_1}{l_x}\right) \\ &\quad \times \cos\left(\frac{n\pi}{2} \frac{y_1 + y_2}{l_y}\right) \text{sinc}\left(\frac{n\pi}{2} \frac{y_2 - y_1}{l_y}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.3.44})$$

3.2.4 Le spot cubique

Pour simuler un spot laser dont la forme s'apparente à celle d'une courbe gaussienne, on peut utiliser une approximation polynomiale qui est plus simple à utiliser et qui a l'avantage d'être nulle quand on est suffisamment loin du spot. De plus, la transformée spatiale de cette fonction peut être calculée de façon analytique. On suppose par ailleurs que le spot est à variable séparable :

$$r(x, y) = f(x) f(y) \tag{A.3.45}$$

On pourrait définir le spot par une fonction du type $s(x, y) = f(x^2 + y^2)$ mais cela complique le calcul de la transformée puisque les variables x et y ne seraient plus séparables. Soit s le rayon du spot cubique, la fonction $f(x)$ est définie par l'expression suivante :

$$f(x) = \frac{1}{s} \begin{cases} 1 - 3 \left(\frac{x}{s}\right)^2 - 2 \left(\frac{x}{s}\right)^3 & \text{pour } -s \leq x < 0 \\ 1 - 3 \left(\frac{x}{s}\right)^2 + 2 \left(\frac{x}{s}\right)^3 & \text{pour } 0 \leq x \leq s \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{A.3.46}$$

La fonction $f(y)$ est bien sur identique. Le terme $1/s$ permet de normaliser la fonction de façon à ce que l'intégrale de la fonction f sur le domaine $[0; l_x]$ soit égale à 1 :

$$\int_{x=0}^{l_x} f(x) dx = 1 \tag{A.3.47}$$

En supposant que le spot est entièrement inclus dans l'échantillon, on obtient la transformée du spot dans la base X_m et Y_n :

$$r(\alpha_m, \beta_n) = \begin{cases} 1 & \text{pour } m = 0 \\ -\frac{12}{m^2 \pi^2 (s/l_x)^2} \cos(m\pi \frac{p_x}{l_x}) \left[\text{sinc} \left(m \pi \frac{s}{l_x} \right) - \text{sinc} \left(\frac{m \pi s}{2 l_x} \right)^2 \right] \end{cases} \times \begin{cases} 1 & \text{pour } n = 0 \\ -\frac{12}{n^2 \pi^2 (s/l_y)^2} \cos(n\pi \frac{p_y}{l_y}) \left[\text{sinc} \left(n \pi \frac{s}{l_y} \right) - \text{sinc} \left(\frac{n \pi s}{2 l_y} \right)^2 \right] \end{cases} \tag{A.3.48}$$

3.3 Expression matricielle des harmoniques

3.3.1 Champ de température continu et discret

Soit $T(x, y)$ un champ de température avec $(x, y) \in [0; l_x] \times [0; l_y]$, la transformée $\theta(\alpha_m, \beta_n)$ de ce champ continu se calcule avec l'expression :

$$\theta_{m,n} = \frac{1}{l_x l_y} \int_0^{l_x} \int_0^{l_y} \cos(\alpha_m x) \cos(\beta_n y) T(x, y) dy dx \tag{A.3.49}$$

Remarque sur la notation $\theta_{m,n}$

Les pages précédentes utilisent aussi la notation $\theta_{m,n}$ pour désigner les composantes du champ de température $T(x, y, z, t)$ dans la base de fonction $X_m(x)$ et $Y_n(y)$. Ici, cette base est légèrement modifiée puisqu'on change sa norme de manière à ce que les composantes $\theta_{m,n}$ aient la dimension d'une température. Le terme $\theta_{m,n}$ est maintenant appelé « harmoniques ».

Les champs spatio-temporels de température (ou de niveau numérique) fournis par la caméra infrarouge (après conversion des niveaux numériques en température) sont des champs discrétisés. On présente ici deux formulations matricielles permettant de calculer les harmoniques du champ de température ou des niveaux numériques, avec chacune ses avantages et inconvénients.

Soit (x_i, y_j) la position du pixel avec $i \in [1; N_x]$ et $j \in [1; N_y]$. Soit $\Delta_x = l_x/N_x$ et $\Delta_y = l_y/N_y$ la taille des pixels suivant x et y . On suppose que l'origine se situe dans le bord inférieur gauche de l'image thermique :

$$\begin{pmatrix} x_i \\ y_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (i - \frac{1}{2})\Delta_x \\ (j - \frac{1}{2})\Delta_y \end{pmatrix} \quad (\text{A.3.50})$$

En première approximation, les harmoniques peuvent être calculées avec l'expression suivante :

$$\theta_{m,n} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \cos\left(m\pi \frac{x_i}{l_x}\right) \cos\left(n\pi \frac{y_j}{l_y}\right) T_{i,j} \quad (\text{A.3.51})$$

Remarque :

Il s'agit d'une approximation, car pour être plus précis, il faudrait prendre en compte l'atténuation des harmoniques à cause du caractère filtre passe-bas de la caméra (voir §4.4 p104). Si on voulait être encore plus précis, il faudrait prendre en compte le fait que la loi d'étalonnage (niveau numérique-température) est appliquée sur le champ de niveaux numériques déjà filtrés. Or comme la loi est non-linéaire, cela peut perturber sensiblement les harmoniques.

3.3.2 Orthogonalité de la base cosinus

On veut montrer que les fonctions $X_m(x) = \cos(m\pi x)$ sont orthogonales avec la discrétisation précédente (Eq.A.3.50). Ce résultat est utilisé dans les développements suivants :

$$\begin{aligned} \langle X_m | X_n \rangle &= \sum_{i=1}^N \cos\left(m\pi \frac{x_i}{l_x}\right) \cos\left(n\pi \frac{x_i}{l_x}\right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \cos\left((m+n)\pi \frac{i-1/2}{N}\right) + \cos\left((m-n)\pi \frac{i-1/2}{N}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.3.52})$$

Or, les deux termes de la somme sont nulles dans certaines conditions. Soit $S \in \mathbb{N}^*$, on a :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \cos\left(S\pi \frac{i-1/2}{N}\right) &= \operatorname{Re} \left(\sum_{i=1}^N e^{j\pi S \frac{i-1/2}{N}} \right) = \operatorname{Re} \left(e^{-j\frac{\pi}{2N}} e^{j\pi \frac{S}{N}} \frac{1 - e^{j\pi S}}{1 - e^{j\pi \frac{S}{N}}} \right) \\ &= \operatorname{Re} \left(j^S \frac{\sin(\pi \frac{S}{2})}{\sin(\pi \frac{S}{2N})} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{A.3.53}$$

La somme est nulle si $S > 0$. Appliqué au développement précédent, on a donc :

$$\langle X_m | X_n \rangle = \begin{cases} N & \text{si } m = n = 0 \\ N/2 & \text{si } m = n > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{A.3.54}$$

3.3.3 Première formulation

En pratique, le calcul des transformées est réalisé par l'intermédiaire de la matrice $\Theta(t)$ dans laquelle sont rangées les harmoniques à un instant donné :

$$\Theta = \begin{bmatrix} \theta_{m_0, n_0} & \cdots & \theta_{m_0, n_N} \\ \vdots & \theta_{m_i, n_j} & \vdots \\ \theta_{m_M, n_0} & \cdots & \theta_{m_M, n_N} \end{bmatrix} = \frac{1}{N_x N_y} A T B \tag{A.3.55}$$

$$\text{Avec } A = \left(\cos\left(m_i \phi \frac{x_j}{l_x}\right) \right)_{\substack{0 \leq i \leq M \\ 1 \leq j \leq N_x}} = \begin{bmatrix} \cos\left(m_0 \pi \frac{x_1}{l_x}\right) & \cdots & \cos\left(m_0 \pi \frac{x_{N_x}}{l_x}\right) \\ \vdots & & \vdots \\ \cos\left(m_M \pi \frac{x_1}{l_x}\right) & \cdots & \cos\left(m_M \pi \frac{x_{N_x}}{l_x}\right) \end{bmatrix}$$

$$T = \left(T_{i,j} \right)_{\substack{1 \leq i \leq N_x \\ 1 \leq j \leq N_y}}$$

$$B = \left(\cos\left(n_j \pi \frac{y_i}{l_y}\right) \right)_{\substack{0 \leq i \leq N \\ 1 \leq j \leq N_y}} = \begin{bmatrix} \cos\left(n_0 \pi \frac{y_0}{l_y}\right) & \cdots & \cos\left(n_N \pi \frac{y_0}{l_y}\right) \\ \vdots & & \vdots \\ \cos\left(n_0 \pi \frac{y_{N_y}}{l_y}\right) & \cdots & \cos\left(n_N \pi \frac{y_{N_y}}{l_y}\right) \end{bmatrix}$$

Remarque :

Dans l'expression (Eq.A.3.55), les coefficients sont notés θ_{m_i, n_j} et non $\theta_{i,j}$ car les indices des harmoniques ne se suivent pas nécessairement. La première ligne de la matrice peut tout à fait être $[\theta_{0,0} \ \theta_{0,1} \ \theta_{0,4}]$.

3.3.4 Deuxième formulation

Cette seconde formulation permet de calculer les harmoniques en une seule opération matricielle. Elle est notamment utilisée pour le calcul de la matrice de variance-covariance. Pour obtenir cette formulation, on range les termes de façon à faire apparaître un produit matriciel. Soit p le rang du rangement des $(M+1)(N+1)$ harmoniques dans le macrovecteur issu de la matrice Θ :

$$\begin{aligned}\theta_{m_p, n_p} &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \cos\left(m_p \pi \frac{x_i}{l_x}\right) \cos\left(n_p \pi \frac{y_j}{l_y}\right) T_{i,j} \\ &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k=1}^{N_x N_y} \cos\left(m_p \pi \frac{x_{i(k)}}{l_x}\right) \cos\left(n_p \pi \frac{y_{j(k)}}{l_y}\right) T_{i(k), j(k)}\end{aligned}\quad (\text{A.3.56})$$

Avec $i(k)$ et $j(k)$ des fonctions de « rangement ». Il est courant d'utiliser les fonctions suivantes :

$$i(k) = 1 + \left[(k-1) \bmod N_x \right] \quad (\text{A.3.57})$$

$$j(k) = 1 + \text{Ent}((k-1)/N_x) \quad (\text{A.3.58})$$

Avec $1 \leq k \leq N_x N_y$. Ces fonctions sont une autre façon de décrire l'opération qui consiste à reconstruire une matrice à partir d'un vecteur obtenu en plaçant les colonnes de cette matrice en dessous les unes des autres. Soit A une matrice, l'opération pour déplier une matrice (transformer une matrice en vecteur) sous Matlab est réalisée avec : « $A(:)$ ». En dépliant la matrice T des températures dans l'expression (Eq.A.3.56), on a :

$$\begin{aligned}\theta_{m_p, n_p} &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k=1}^{N_x N_y} \cos\left(m_p \pi \frac{x_{i(k)}}{l_x}\right) \cos\left(n_p \pi \frac{y_{j(k)}}{l_y}\right) T_k \\ \theta_{m_p, n_p} = \theta_p &= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{k=1}^{N_x N_y} \Pi_{p,k} T_k\end{aligned}\quad (\text{A.3.59})$$

On reconnaît alors le produit matrice-vecteur :

$$\Theta = \begin{bmatrix} \theta_{m_1, n_1} \\ \theta_{m_2, n_2} \\ \vdots \\ \theta_{m_M, n_N} \end{bmatrix} = \Pi T \quad (\text{A.3.60})$$

$$\text{Avec } \Pi_{p,k} = \frac{1}{N_x N_y} \cos\left(m_p \pi \frac{x_{i(k)}}{l_x}\right) \cos\left(n_p \pi \frac{y_{j(k)}}{l_y}\right) \quad \text{avec } \begin{cases} k \in [1; N_x N_y] \\ p \in [1; M N] \end{cases}$$

L'indice j décrit tous les pixels de l'image alors que i décrit toutes les harmoniques (m_i, n_i) que l'on souhaite calculer.

3.4 Calcul de l'écart-type des harmoniques

Lorsque l'on travaille avec des données expérimentales, on fait généralement l'hypothèse qu'elles sont entachées d'un bruit gaussien, additif, uniforme, de moyenne nulle et d'écart-type σ_p . La température fournie par chaque pixel de l'image se décompose ainsi en deux termes :

$$T(x_i, y_j, t_k) = \bar{T}(x_i, y_j, t_k) + e(x_i, y_j, t_k) \quad (\text{A.3.61})$$

Il peut être utile de savoir comment ce bruit se comporte lors du changement de base. Pour cela, on calcule la matrice de variance-covariance en utilisant la seconde formulation matricielle de la transformée :

$$\begin{aligned} \text{cov}(\Theta) &= \text{E}\left([\Theta - \text{E}(\Theta)] \cdot [\Theta - \text{E}(\Theta)]^T\right) \\ &= \Pi \text{cov}(e) \Pi^T \end{aligned} \quad (\text{A.3.62})$$

Si le bruit est supposé indépendant, on a $\text{cov}(e) = \sigma_p^2 \mathbf{I}$. Développons la matrice $\Pi \Pi^T$ et montrons qu'elle est diagonale (voir Eq.A.3.54) :

$$\begin{aligned} N_x^2 N_y^2 (\Pi \Pi^T)_{p,q} &= \sum_{k=1}^{N_x N_y} \Pi_{p,k} \Pi_{q,k} \\ &= \sum_{k=1}^{N_x N_y} \left[\cos(m_p \pi x_{i(k)}/l_x) \cos(n_p \pi y_{j(k)}/l_y) \right. \\ &\quad \left. \times \cos(m_q \pi x_{i(k)}/l_x) \cos(n_q \pi y_{j(k)}/l_y) \right] \\ &= \sum_{k=1}^{N_x N_y} \underbrace{\left[\cos(m_p \pi x_{i(k)}/l_x) \cos(m_q \pi x_{i(k)}/l_x) \right]}_{\begin{cases} 0 & \text{si } m_p \neq m_q \\ N_x & \text{si } m_p = m_q = 0 \\ N_x/2 & \text{sinon} \end{cases}} \\ &\quad \times \underbrace{\left[\cos(n_p \pi y_{j(k)}/l_y) \cos(n_q \pi y_{j(k)}/l_y) \right]}_{\begin{cases} 0 & \text{si } n_p \neq n_q \\ N_y & \text{si } n_p = n_q = 0 \\ N_y/2 & \text{sinon} \end{cases}} \end{aligned}$$

Finalement, tous les coefficients non diagonaux sont nuls, si tous les couples (m_i, n_i) sont distincts. La matrice de variance-covariance des harmoniques vaut alors :

$$\left\{ \text{cov}(\Theta) \right\}_{i,i} = \sigma_p^2 \left\{ \Pi \Pi^T \right\}_{i,i} = \sigma_p^2 \frac{1}{N_x N_y} \frac{1}{4} \left(1 + \delta_{(m_i)} \right) \left(1 + \delta_{(n_i)} \right) \quad (\text{A.3.63})$$

3.5 Modèle impulsif - Calcul des sensibilités

L'évolution temporelle des harmoniques est décrite par l'expression (Eq.2.36 p95) :

$$\theta_{m,n}(z, t) = E_{m,n} \underbrace{\left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_k(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right]}_{y(z,t)} e^{-\left(\tau_x (m\pi)^2 + \tau_y (n\pi)^2 \right) t}$$

Les sensibilités aux différents paramètres sont :

$$\frac{\partial \theta_{m,n}(t)}{\partial \tau_x} = -m^2 \pi^2 t y(z,t) E_{m,n} \exp \left(-(\tau_x m^2 + \tau_y n^2) \pi^2 t \right) \quad (\text{A.3.64a})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}(t)}{\partial \tau_y} = -n^2 \pi^2 t y(z,t) E_{m,n} \exp \left(-(\tau_x m^2 + \tau_y n^2) \pi^2 t \right) \quad (\text{A.3.64b})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}(t)}{\partial \tau_z} = \frac{\partial y}{\partial \tau_z} E_{m,n} \exp \left(-(\tau_x m^2 + \tau_y n^2) \pi^2 t \right) \quad (\text{A.3.64c})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}(t)}{\partial H} = \frac{\partial y}{\partial H} E_{m,n} \exp \left(-(\tau_x m^2 + \tau_y n^2) \pi^2 t \right) \quad (\text{A.3.64d})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}(t)}{\partial E_{p,q}} = \begin{cases} y(z,t) \exp \left(-(\tau_x m^2 + \tau_y n^2) \pi^2 t \right) & \text{si } (m, n) = (p, q) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.3.64e})$$

Voir Annexe 2.2.2 p282 pour l'expression des dérivées de $y(z, t)$ par rapport à τ_z et H .

3.6 Modèle échelon - Calcul des sensibilités

Lorsque l'on dispose d'une source d'énergie temporellement stable et avec un transitoire négligeable, on peut utiliser un modèle thermique où l'excitation n'est plus impulsionnelle mais de type échelon. L'évolution temporelle des harmoniques est obtenue en projetant le champ de température (Eq.2.32 p93) sur la base $B_{m,n}(x, y)$ (Eq.2.35 p94) :

$$\theta_{m,n}(z, t) = 2 P_{m,n} \sum_{k=1}^{\infty} A_k Z_k(z) \frac{1 - e^{-\Pi_k t}}{\Pi_k} \quad (\text{A.3.65})$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} \Pi_k &= \tau_x m^2 \pi^2 + \tau_y n^2 \pi^2 + \tau_z u_k^2 \\ A_k &= \frac{u_k}{u_k^2 + H^2 + 2H} \\ Z_k(z) &= u_k \cos(u_k \frac{z}{l_z}) + H \sin(u_k \frac{z}{l_z}) \end{cases}$$

$$\text{et} \quad P_{m,n} = \frac{P R_{m,n}}{\rho C l_x l_y l_z}, \quad \tau_x = \frac{a_x}{l_x^2}, \quad \tau_y = \frac{a_y}{l_y^2}, \quad \tau_z = \frac{a_z}{l_z^2}, \quad H = \frac{h l_z}{\lambda_z}$$

Contrairement au cas impulsionnel, les paramètres τ_x et τ_y ne sont pas découplés de l'évolution temporelle en z . De plus, les harmoniques ne sont pas vouées à disparaître à $t \rightarrow \infty$ mais tendent vers la constante $L_{m,n}$:

$$L_{m,n}(z) = 2 P_{m,n} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_k Z_k(z)}{\Pi_k}$$

Les coefficients de sensibilité sont obtenus en dérivant le modèle (Eq.A.3.65) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial \tau_x} &= \frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial \Pi_k} \frac{\partial \Pi_k}{\partial \tau_x} \\ &= -2 P_{m,n} m^2 \pi^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_k Z_k}{\Pi_k^2} \left[1 - (\Pi_k t + 1) e^{-\Pi_k t} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3.66a})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial \tau_y} = -2 P_{m,n} n^2 \pi^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_k Z_k}{\Pi_k^2} \left[1 - (\Pi_k t + 1) e^{-\Pi_k t} \right] \quad (\text{A.3.66b})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial \tau_z} = -2 P_{m,n} \sum_{k=1}^{\infty} u_k^2 \frac{A_k Z_k}{\Pi_k^2} \left[1 - (\Pi_k t + 1) e^{-\Pi_k t} \right] \quad (\text{A.3.66c})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial H} &= 2 P_{m,n} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial}{\partial H} (A_k Z_k) - 2 \frac{\tau_z u_k}{\Pi_k} \frac{\partial u_k}{\partial H} A_k Z_k \right) \left(\frac{1 - e^{-\Pi_k t}}{\Pi_k} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \tau_z t u_k \frac{\partial u_k}{\partial H} A_k Z_k \frac{e^{-\Pi_k t}}{\Pi_k} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3.66d})$$

$$\frac{\partial \theta_{m,n}}{\partial P_{p,q}} = \begin{cases} 2 \sum_{k=1}^{\infty} A_k Z_k(z) \frac{1 - e^{-\Pi_k t}}{\Pi_k} & \text{si } (m, n) = (p, q) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.3.66e})$$

Avec :

$$\frac{\partial A_k}{\partial H} = \frac{\frac{\partial u_k}{\partial H}(u_k^2 + H^2 + 2H) - 2u_k(u_k \frac{\partial u_k}{\partial H} + H + 1)}{(u_k^2 + H^2 + 2H)^2} \quad (\text{A.3.67a})$$

$$\frac{\partial Z_{u_k}}{\partial H} = \frac{\partial u_k}{\partial H} \cos(u_k \frac{z}{l_z}) \left(1 + H \frac{z}{l_z}\right) + \sin(u_k \frac{z}{l_z}) \left(1 - u_k \frac{z}{l_z} \frac{\partial u_k}{\partial H}\right) \quad (\text{A.3.67b})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u_k}{\partial H} = \frac{\partial u_k}{\partial H} \right)_{\gamma_3=\text{cte}} &= -\frac{\partial \gamma_3}{\partial H} / \frac{\partial \gamma_3}{\partial u} \\ &= \frac{(2u_k H^2 + 2u_k^3) \cos^2(u_k)}{H^4 + u_k^4 - 2u_k^2 H^2 + 2H^3 \cos^2(u_k) + 2u_k^2 H \cos^2(u_k)} \quad (\text{A.3.67c}) \end{aligned}$$

4 Méthode flash 3D - Quelques sources d'erreurs

Cette section aborde différents biais qui peuvent intervenir dans l'estimation. Certains d'entre eux n'existent qu'avec certains estimateurs particuliers.

4.1 Approximation impulsionnelle de l'excitation thermique

Pour simplifier les expressions analytiques, il est fréquent de modéliser une brève impulsion par un Dirac. Par exemple, dans les problèmes d'identification de paramètres abordés ici, l'excitation laser de 10 *ms* est considérée comme une excitation parfaitement impulsionnelle. Cette simplification est acceptable lorsque les échantillons sont thermiquement épais.

Pour évaluer l'erreur générée par cette simplification, on considère un mur semi-infini. Les réponses de ce mur à un Dirac et à un créneau (de durée t_c) sont notées respectivement $y_\delta(t)$ et $y_c(t)$:

$$y_\delta(t) = \frac{Q}{b\sqrt{\pi t}} \quad \text{pour } t > 0 \quad (\text{A.4.68})$$

$$y_c(t) = \frac{2Q}{bt_c\sqrt{\pi}}(\sqrt{t} - \sqrt{t - t_c}) \quad \text{pour } t \geq t_c \quad (\text{A.4.69})$$

Avec $b = \sqrt{\rho C \lambda}$ l'effusivité thermique du matériau. L'énergie transmise au matériau est ici identique pour les deux types d'excitation.

La question est de savoir à partir de quel instant, ou plus généralement à quelles conditions les deux modèles sont en accord à ϵ près. Il y a plusieurs façons de mesurer cet accord. La première est d'étudier la différence, ce qui est l'objet du premier paragraphe, la seconde est d'étudier leur rapport. C'est l'objet du second paragraphe.

4.1.1 Etude de la différence

L'étude de la différence des deux modèles permet notamment de savoir à partir de quel instant l'erreur de modèle est noyée dans le bruit de mesure. Soit $e_y(t)$ l'écart entre les deux modèles, on a :

$$\begin{aligned} e_y(t) &= |y_c(t) - y_\delta(t)| \\ &= \frac{Q}{b\sqrt{\pi t_c}} \left(2\sqrt{u} - 2\sqrt{u-1} - \frac{1}{\sqrt{u}} \right) \quad \text{avec } u = \frac{t}{t_c} \\ &= K f(u) \quad \text{avec } K = \frac{Q}{b\sqrt{\pi t_c}} \quad [^\circ\text{C}] \end{aligned} \quad (\text{A.4.70})$$

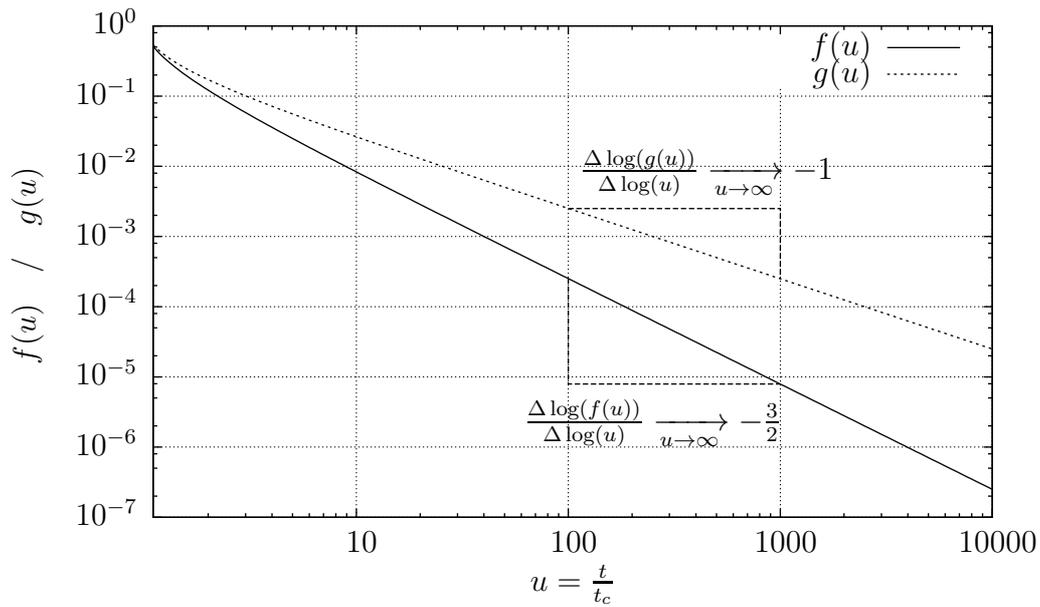


Figure A.5 – Evolution de l’erreur $f(u)$ et $g(u)$ en fonction de u sur la température en face avant lorsque l’on modélise une excitation par un dirac.

La figure Fig.A.5 représente l’évolution de $f(u)$ pour $u \in [1; 10^4]$, c’est à dire l’erreur $e_y(t)$ à un facteur près. L’erreur est maximale en $u = 1$ (elle vaut K) puis tend asymptotiquement vers la fonction (graphiquement pour $u > 10$) :

$$f(u) \sim \frac{1}{4u^{3/2}} + cte \tag{A.4.71}$$

En conclusion, pour diminuer l’erreur de modèle, on peut par exemple :

1. Réduire Q pour diminuer l’amplitude du signal ce qui n’est généralement pas très intéressant.
2. Utiliser un matériau plus diffusif. En identification de paramètres, le matériau est bien sur imposé!
3. Attendre plus longtemps avant de commencer les mesures.

Exemple :

Pour une excitation ² $Q = 10^4 \text{ J m}^{-2}$, pour un matériau d’effusivité $b = 1414 \text{ J K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ($\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\rho C = 2.10^6 \text{ J K}^{-1} \text{ m}^{-3}$) et pour une impulsion de durée $t_c = 10 \text{ ms}$, on obtient :

$$\begin{aligned} y_{\delta}(t_c) &= 39,9 \text{ } ^\circ\text{C} \\ y_c(t_c) &= 79,8 \text{ } ^\circ\text{C} \\ e_y(t) &= 39,9 f(u) \end{aligned}$$

2. Valeur obtenue dans le cas d’un laser 100 W avec un spot de diamètre $\varnothing = 1 \text{ cm}$.

Ainsi, pour que l'erreur e_y soit inférieure à $0,05^\circ C$, il faut que $f(u) < 10^{-3}$ ce qui correspond à $u > 40$, soit ici $t = 0,4 s$.

4.1.2 Etude du rapport

L'étude de l'écart relatif peut être intéressante puisque pour certains estimateurs présentés au chapitre 2, les observables sont calculés en faisant le rapport de deux harmoniques spatiales au même instant. Soit $\eta_y(t)$ le rapport des deux modèles :

$$\begin{aligned} \eta_y(t) &= \frac{y_c - y_\delta}{y_\delta} \\ &= 2u \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{u}} \right) - 1 \quad \text{avec } u = \frac{t}{t_c} \\ &= g(u) \end{aligned} \tag{A.4.72}$$

La fonction $g(u)$ est positive et strictement décroissante (Fig.A.5). Lorsque $u > 10$, la différence entre $g(u)$ et sa courbe asymptotique semble négligeable :

$$g(u) \sim \frac{1}{4u} \tag{A.4.73}$$

On constate par ailleurs que la différence relative $\eta_y(t)$ a la particularité de ne pas dépendre du matériau.

4.1.3 Synthèse

Les deux analyses précédentes donnent un ordre de grandeur de l'erreur sur la température au centre du spot laser. Elles montrent que l'erreur se résorbe relativement vite : l'erreur e_y est divisée par plus de 1000 si on atteint 40 fois la durée de l'impulsion, c'est à dire environ $0,4 s$. Dans le cas de la caméra infrarouge AGEMA 880SW, cela ne représente que 2 ou 3 images sur les 100 ou 200 images exploitées en général.

Pour aller plus loin, il faudrait prendre en compte la forme du spot et calculer le biais sur les harmoniques. On en déduirait alors le biais sur les estimations.

4.2 Influence des conditions limites

Cette section est dédiée à l'étude des biais générés par les conditions limites supposées du modèle. Pour rappel, le modèle analytique de base utilisé dans cette thèse suppose que les parois latérales sont isolées (Fig.2.3 p87) or aux temps longs, le front de température peut parfois

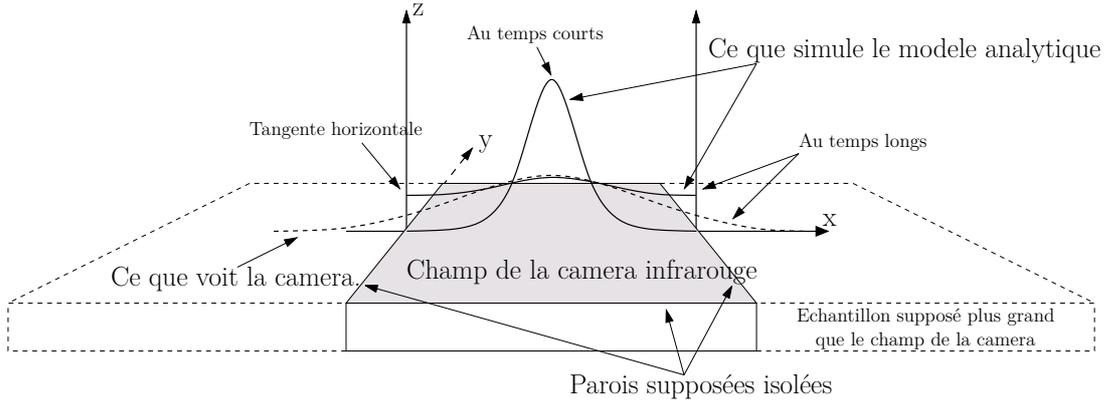


Figure A.6 – Principe de la méthode pour estimer les biais dus aux conditions limites.

atteindre les bords de l'échantillon, ce qui invalide l'hypothèse sur la condition limite.

La première hypothèse que l'on fait, c'est de supposer que l'échantillon est grand comparé au champ de de la caméra (surface grisée). L'hypothèse d'isolation est purement virtuelle, dans le sens où il n'existe aucun procédé, aucun système destiné à isoler le matériau.

Pour simplifier la rédaction, on se place dans une coupe du plan xz (Fig.A.6). Cette figure présente le principe utilisé ici pour estimer l'erreur due aux conditions limites : on utilise un modèle supplémentaire qui considère l'échantillon plus grand (voir infini) que le champ caméra. De ce fait, le biais éventuel, généré par l'hypothèse de parois isolées, apparaît plus tardivement. La figure présente un profil de température aux temps courts (non perturbé par les bords) et aux temps longs. Avec les conditions limites d'isolation, les tangentes sont horizontales sur les bords. Comme on a supposé l'échantillon plus grand que ce que voit la caméra, le champ de température simulé n'est plus correct aux temps longs. En réalité, les bords ne sont pas isolés donc le champ de température « bave » sur les bords. Or comme c'est cela que voit la caméra, le modèle ne modélise pas correctement l'expérience aux temps longs.

Soit $\theta_{m,n}(z, t)$ les harmoniques du modèle classique et $\theta_{m,n}^e(z, t)$ les harmoniques du modèle étendu (échantillon étendu en x). $\theta_{m,n}(z, t)$ est donnée par l'expression (Eq.2.36), rappelée ici :

$$\theta_{m,n}(z, t) = E_{m,n} \left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k}(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right] e^{-[\tau_x(m\pi)^2 + \tau_y(n\pi)^2] t} \quad (\text{A.4.74})$$

Quant à $\theta_{m,n}^e(z, t)$, elles sont données par l'expression suivante :

$$\theta_{m,n}^e(z, t) = E_{m,n}^e \left[2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{u_k Z_{u_k}(z)}{u_k^2 + H^2 + 2H} e^{-\tau_z u_k^2 t} \right] e^{-[\tau_x^e(m\pi)^2 + \tau_y^e(n\pi)^2] t} \quad (\text{A.4.75})$$

$$\text{Avec } \tau_x^e = \frac{a_x}{(3l_x)^2} = \frac{1}{9}\tau_x \quad \text{et} \quad \tau_y^e = \frac{a_y}{(3l_y)^2} = \frac{1}{9}\tau_y \quad \text{et} \quad E_{m,n}^e = \frac{Q R_{m,n}^e}{\rho C l_z 3l_x 3l_y}$$

Les champs de température $T(x, y, z, t)$ et $T^e(x, y, z, t)$, correspondant respectivement aux deux modèles, peuvent être calculés en reprenant par exemple l'expression (Eq.A.3.39 p291). En développant $\|X_m\|^2$ et $\|Y_n\|^2$, on a :

$$T_{(x,y,z,t)} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_m)(2 - \delta_n) \cos\left(m\pi \frac{x}{l_x}\right) \cos\left(n\pi \frac{y}{l_y}\right) \theta_{m,n}(z,t) \quad (\text{A.4.76})$$

$$T_{(x',y',z,t)}^e = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_m)(2 - \delta_n) \cos\left(m\pi \frac{x'}{3l_x}\right) \cos\left(n\pi \frac{y'}{3l_y}\right) \theta_{m,n}^e(z,t) \quad (\text{A.4.77})$$

Attention à $\theta_{m,n}(z, t)$ qui n'a pas exactement la même définition dans les deux relations précédentes et dans la relation (Eq.A.3.39 p291). Elles sont égales à un facteur $l_x l_y$ près.

Les deux modèles n'ont pas la même origine spatiale. Aussi, on distingue les variables d'espace en notant x' et y' celles du modèle étendu. Par ailleurs, les coefficients de forme $R_{m,n}$ et $R_{m,n}^e$ sont ici différents puisqu'en relatif, l'excitation thermique est 3 fois plus concentrée pour le modèle étendu. Ces coefficients de forme sont calculés avec l'expression (Eq.A.3.48 p293). Pour $m, n > 0$, on a :

$$\begin{aligned} R_{m,n} &= \frac{12}{(m\pi)^2 (s/l_x)^2} \cos\left(\frac{m\pi}{2}\right) \left[\text{sinc}\left(m\pi \frac{s}{l_x}\right) - \text{sinc}\left(\frac{m\pi}{2} \frac{s}{l_x}\right)^2 \right] \times \\ &\quad \frac{12}{(n\pi)^2 (s/l_y)^2} \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \left[\text{sinc}\left(n\pi \frac{s}{l_y}\right) - \text{sinc}\left(\frac{n\pi}{2} \frac{s}{l_y}\right)^2 \right] \\ R_{m,n}^e &= \frac{12}{(m\pi)^2 (s/(3l_x))^2} \cos\left(\frac{m\pi}{2}\right) \left[\text{sinc}\left(m\pi \frac{s}{3l_x}\right) - \text{sinc}\left(\frac{m\pi}{2} \frac{s}{3l_x}\right)^2 \right] \times \\ &\quad \frac{12}{(n\pi)^2 (s/(3l_y))^2} \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \left[\text{sinc}\left(n\pi \frac{s}{3l_y}\right) - \text{sinc}\left(\frac{n\pi}{2} \frac{s}{3l_y}\right)^2 \right] \end{aligned}$$

Les deux séries T et T^e convergent vers la même fonction aux temps courts puisqu'ils correspondent au même phénomène physique. Le calcul des harmoniques spatiales pour le modèle de base est immédiat :

$$\theta_{m,n}(t) = \frac{1}{l_x l_y} \int_{x=0}^{l_x} \int_{y=0}^{l_y} T_{(x,y,z,t)} X_m(x) Y_n(y) dx dy \quad (\text{A.4.78})$$

Avec le modèle étendue :

$$\theta_{m,n}^e(t) = \frac{1}{l_x l_y} \int_{x=0}^{l_x} \int_{y=0}^{l_y} T_{(x'(x),y'(y),z,t)}^e X_m(x) Y_n(y) dx dy \quad (\text{A.4.79})$$

En développant cette expression, on fait intervenir l'intégrale ci-dessous. Comme la base de

cosinus du modèle étendue $X'_m(x)$ n'est pas orthogonale à $X_m(x)$, le calcul doit prendre en compte toutes les fréquences en x , identifiées par leur indice i :

$$\begin{aligned} \frac{1}{l_x} \int_{x=0}^{x=l_x} X'_i(x'(x)) X_m(x) dx &= \frac{1}{l_x} \int_{x=0}^{x=l_x} \cos\left(i\pi \frac{x'(x)}{3l_x}\right) \cos\left(m\pi \frac{x}{l_x}\right) dx \\ &= \frac{1}{l_x} \int_{x=0}^{x=l_x} \cos\left(i\pi \frac{l_x+x}{3l_x}\right) \cos\left(m\pi \frac{x}{l_x}\right) dx \\ &= \int_{u=0}^{u=1} \cos\left(i\pi \frac{1+u}{3}\right) \cos(m\pi u) du \end{aligned}$$

Puis en développant :

$$\begin{aligned} \frac{1}{l_x} \int_{x=0}^{x=l_x} X'_i(x'(x)) X_m(x) dx &= \\ &\begin{cases} \frac{3}{2\pi} \left[\frac{\sin\left(\frac{3m+2i}{3}\pi\right)}{3m+i} + \frac{\sin\left(\frac{3m-2i}{3}\pi\right)}{3m-i} + \frac{2i \sin\left(\frac{i\pi}{3}\right)}{(3m)^2 - i^2} \right] & \text{si } i \neq 3m \\ \frac{3}{4} \text{sinc}(3m\pi) - \frac{1}{4} \text{sinc}(m\pi) + \frac{1}{2} \cos(m\pi) & \text{si } i = 3m \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.4.80})$$

Le résultat est identique dans la direction y .

Pour illustrer l'influence du modèle sur les harmoniques sans faire intervenir le terme dépendant de la variable z , on travaille uniquement sur la partie constante (sans unité) des harmoniques notée $\omega_{m,n}$ et sa version calculée par le modèle étendu $\omega_{m,n}^e$. Ainsi, les résultats suivant sont valables en face avant aussi bien qu'en face arrière. De plus, on suppose l'excitation uniforme dans la direction y et que le modèle n'est pas étendu en y pour uniquement travailler suivant x comme présenté à la figure (Fig.A.6) :

$$\omega_{m,0} = (2 - \delta_m) R_{m,0} e^{-\tau_x m^2 \pi^2 t} \quad (\text{A.4.81})$$

$$\omega_{m,0}^e = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2 - \delta_i}{3} R_{i,0} \left[\int_{u=0}^{u=1} \cos(m\pi u) \cos\left(i\pi \frac{1+u}{3}\right) du \right] e^{-\tau_x i^2 \pi^2 t} \quad (\text{A.4.82})$$

Le terme $1/3$ apparait à cause de la définition de $E_{m,n}^e$. On trouve en effet $3l_x$ à son dénominateur. Par ailleurs, ces deux fonctions $\omega_{m,n}$ et $\omega_{m,n}^e$ correspondent à un facteur près (qui dépend du temps) aux harmoniques du champ de température.

La figure (Fig.A.7) montre l'évolution des deux fonctions ci-dessus pour les fréquences $(m,n) = (0,0)$ et $(m,n) = (2,0)$, ainsi que pour 2 valeurs de conductivité thermique (donc deux valeurs de τ_x). L'excitation thermique est de type spot cubique. Son diamètre correspond à un quart de la longueur de l'échantillon l_x . Les autres paramètres sont ceux du tableau

(Tab.A.1 p276). L'écart relatif $e_{m,n}$ est calculé par rapport à $\omega_{m,n}$.

Les deux premières figures Fig.A.7) (a) et (b) correspondent approximativement à un tir laser sur un échantillon polymère. On constate ainsi que les conditions limites n'exercent éventuellement une influence que pour $t > 60 s$. On a alors des écarts sur l'amplitude des harmoniques qui atteignent ici quelques pourcents. Cependant, l'acquisition des données est généralement interrompue avant $t = 60 s$.

Avec un matériau un peu plus conducteur ($\lambda = 5 W m^{-1} K^{-1}$), les résultats sont significativement différents. On remarque sur la figure Fig.A.7) (c) que pour $t = 40 s$, l'écart entre les deux modèles atteint 10 %. Les fuites d'énergie au bord du champ caméra sont visibles pour $t > 20 s$. Quant à l'harmonique (2,0), l'erreur relative augmente très rapidement à cause de la convergence relativement rapide de $\omega_{m,n}$ et de $\omega_{m,n}^e$ vers 0. Là aussi, l'écart entre les deux modèles apparaît clairement pour $t > 20 s$. Or 20 s reste relativement long pour une méthode flash face-avant.

De façon générale, le biais des conditions limites n'a pas une influence significative dans les conditions testées ici. Dans le cas de matériaux de « grande » diffusivité, suffisamment d'information sera présente aux temps courts pour obtenir une estimation de qualité. A l'inverse, si les matériaux sont isolants, le front de température n'atteint les bords de l'échantillons qu'aux temps longs. Les difficultés apparaissent uniquement avec des matériaux conducteurs et des petits échantillons.

L'analyse menée ici ne donne que le biais sur les harmoniques. Pour achever l'analyse, il faut calculer le biais sur les estimations mais cela n'est pas présenté ici. Ce calcul se fait nécessairement au cas par cas, puisque de nombreux paramètres doivent être spécifiés au préalable.

4.3 Approximation au premier ordre du logarithme

Parmi les estimateurs présentés au chapitre 2, l'estimateur ERH et ENH exploitent des observables calculés en prenant le logarithme du rapport d'harmoniques. Le logarithme transforme alors l'estimation des diffusivités en un problème inverse linéaire pour lequel la solution est explicite. Cette section se focalise sur l'estimateur ENH (§5.2 p123), mais la même problématique apparaît avec l'estimateur ERH.

On décompose l'harmonique $\theta_{m,n}$ et l'harmonique de référence $\theta_{p,q}$ suivant leur composante

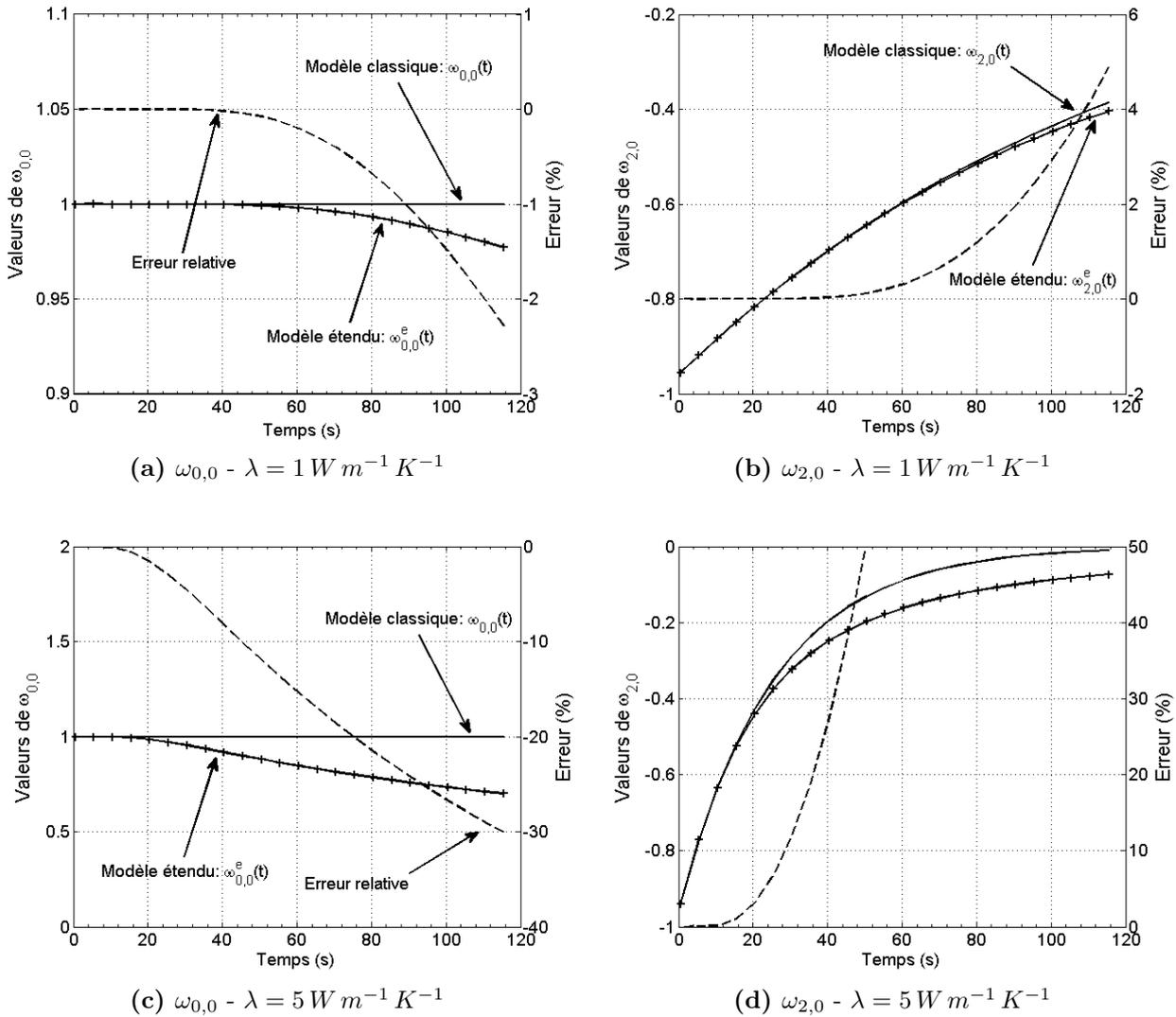


Figure A.7 – Evolution temporelle des fonctions $\omega_{m,n}(t)$ et $\omega_{m,n}^e(t)$ pour les 2 harmoniques (0,0) et (2,0). Les deux figures (a) et (b) correspondent au matériau isolant (Tab.A.1 p276). Pour les deux figures du bas (c) et (d), la conductivité thermique est multipliée par 5.

déterministe (leur espérance) et leur perturbation :

$$\begin{aligned} \theta_{m,n} &= \text{E}[\theta_{m,n}] + e_{m,n} = \overline{\theta_{m,n}} + e_{m,n} \\ \theta_{p,q} &= \text{E}[\theta_{p,q}] + e_{p,q} = \overline{\theta_{p,q}} + e_{p,q} \end{aligned}$$

Les sorties $Y_{m,n}$ à partir des harmoniques calculés par le modèle. Ces harmoniques ne sont pas perturbées par un bruit de mesure, si bien que les sorties correspondent au rapport des espérances des harmoniques. Vérifions donc que l'espérance des observables expérimentales $Y_{m,n}^*$

concordent avec les sorties du modèle :

$$\begin{aligned} E[Y_{m,n}^*] &= E\left[\ln\left(\frac{\overline{\theta_{m,n}} + e_{m,n}}{\overline{\theta_{p,q}} + e_{p,q}}\right)\right] \\ &= \ln\left(\frac{\overline{\theta_{m,n}}}{\overline{\theta_{p,q}}}\right) + E\left[\ln\left(1 + \frac{e_{m,n}}{\overline{\theta_{m,n}}}\right) - \ln\left(1 + \frac{e_{p,q}}{\overline{\theta_{p,q}}}\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{A.4.83})$$

A l'ordre 1, on retrouve bien le résultat attendu :

$$E[Y_{m,n}^*] = \ln\left(\frac{\overline{\theta_{m,n}}}{\overline{\theta_{p,q}}}\right) \quad (\text{A.4.84})$$

Cela signifie qu'avec un développement à l'ordre 1 du logarithme, l'espérance des observables (expérimentaux) est bien égale aux sorties du modèle (le modèle est supposé exact). En utilisant maintenant un développement à l'ordre 2 et 3 du logarithme, on a :

$$E[Y_{m,n}^*] = \ln\left(\frac{\overline{\theta_{m,n}}}{\overline{\theta_{p,q}}}\right) - \frac{1}{2} \frac{\sigma_{m,n}^2}{\overline{\theta_{m,n}}^2} + \frac{1}{2} \frac{\sigma_{p,q}^2}{\overline{\theta_{p,q}}^2} \quad (\text{A.4.85})$$

Le développement à l'ordre 2 montre que l'opération appliquée aux mesures génère un biais sur les observables. Ce biais augmente d'autant plus que l'harmonique de référence et l'harmonique exploitée diffèrent vis à vis de leur rapport signal sur bruit. Cependant, on peut vérifier numériquement que l'effet de ce biais est complètement négligeable dès que l'on veille à n'exploiter que des harmoniques avec un rapport signal sur bruit supérieur à 10.

Remarque sur le calcul de l'espérance

En réalité, le calcul de l'espérance ci-dessus nécessite un artifice pour pouvoir être justifié. Soit X une variable aléatoire gaussienne, on peut en effet remarquer qu'en toute rigueur, la quantité suivante n'admet pas de moyenne :

$$E[\ln(1 + X)] \quad (\text{A.4.86})$$

En effet, il y a une probabilité non nulle que $X < -1$. Il faut donc supposer que la densité de probabilité X est tronquée de manière à rendre impossible un tel événement.

5 Estimateur ENH

5.1 Inverse de la matrice de covariance

La section (§5.2 p123) présente l'estimateur ENH (pour « Estimation par normalisation des harmoniques ») qui permet d'estimer les diffusivités thermiques a_x et a_y en normalisant les harmoniques $\theta_{m,n}(t)$ par une harmonique de référence $\theta_{p,q}(t)$. Par construction des observables, la matrice de variance-covariance de ces derniers n'est pas diagonale, mais s'ils sont organisés correctement, la matrice devient diagonale par bloc. Chaque bloc fait intervenir une matrice pleine avec une forme un peu particulière (Eq.2.81 p127). Il s'avère que ce type de matrice (pleine de 1 sauf sur la diagonale) peut s'inverser de façon analytique.

En appliquant le pivot de Gauss ou l'ébauche de développement proposé par la suite, on montre que le déterminant d'une matrice M possédant des 1 partout et des termes diagonaux $1 + d_i$ ($d_i \neq 0$) avec $1 \leq i \leq n$ vaut :

$$\det(M) = \prod_{i=1}^n d_i \left(1 + \sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i} \right) \quad (\text{A.5.87})$$

Pour le montrer, on peut aussi décomposer M en introduisant la matrice C remplie de 1 et la matrice D diagonale avec pour coefficients diagonaux d_i . On a alors $M = C + D$:

$$M = \begin{bmatrix} 1 + d_1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ & 1 + d_2 & 1 & \dots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \\ \text{sym} & & & & 1 + d_n \end{bmatrix}$$

On développe alors le calcul du déterminant, en notant C_i et D_i les $i^{\text{ème}}$ colonnes des matrices C et D . Par commodité, on note $\det(X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_n)$ le déterminant de la matrice après avoir développé suivant la $i^{\text{ème}}$ colonne. Ainsi, dans $\det(C_n + D_n)$, C_n et D_n sont deux grandeurs scalaires :

$$\begin{aligned} \det(M) &= \det(C + D) = \det(D_1 + C_1, \dots, D_i + C_i) \\ &= d_1 \det(D_2 + C_2, \dots, D_i + C_i) + \det(C_1, \dots, D_i + C_i) \\ &= d_1 \left[d_2 \det(D_3 + C_3, \dots, D_i + C_i) + \det(C_2, D_3 + C_3, \dots, D_i + C_i) \right] \\ &\quad + \det(C_1, \dots, D_i + C_i) \\ &= \sum_{i=0}^{n-2} \underbrace{(d_1 \dots d_i)}_{=1 \text{ si } i=0} \det(C_{i+1}, D_{i+2} + C_{i+2}, \dots) + (d_1 \dots d_{n-1}) \det(C_n + D_n) \end{aligned}$$

Or le déterminant de la matrice définie par les colonnes $(C_{i+1}, D_{i+2} + C_{i+2}, \dots)$ est égal à $\prod_{k=i+2}^n d_k$. On le montre immédiatement en retranchant la première colonne (pleine de 1) à toutes les autres, puisque l'on fait apparaître une matrice par bloc. On poursuit donc le développement :

$$\begin{aligned} \det(M) &= \sum_{i=0}^{n-2} (d_1 \dots d_i) \prod_{k=i+2}^n d_k + (d_1 \dots d_{n-1}) + (d_1 \dots d_n) \\ &= \sum_{i=0}^n \left[\prod_{j=1}^i d_j \prod_{k=i+2}^n d_k \right] \quad \text{avec par convention } d_k = 1 \text{ si } k > n \\ &= \sum_{i=0}^n \frac{1}{d_{i+1}} \prod_{j=1}^n d_j = \left(\frac{1}{d_{n+1}} + \sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i} \right) \prod_{j=1}^n d_j = \det(D) \left(1 + \sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i} \right) \end{aligned}$$

Lorsqu'un des d_i est nul, il suffit de développer l'expression pour obtenir une expression valable pour tous les cas. L'intérêt de l'expression ci-dessus est d'être rapide à calculer. Lorsque le coefficient d_k est nul, l'expression se simplifie et donne :

$$\det(M) = \prod_{i \neq k}^n d_i \tag{A.5.88}$$

On peut ensuite obtenir l'expression analytique de l'inverse de M en utilisant l'expression analytique avec la comatrice. Soit p un vecteur colonne des inverses de d ($p_i = 1/d_i$) :

$$M^{-1} = \text{diag}(p) - \frac{1}{1 + \sum_i^n p_i} p p^T \tag{A.5.89}$$

On en déduit alors l'expression de la matrice $A^{-1}(t_k)$ de dimension $N(t_k) \times N(t_k)$, c'est à dire le nombre d'harmonique exploitée à l'instant t_k :

$$A^{-1}(t_k) = \left(\frac{\theta_r(t_k)}{\sigma_r} \right)^2 \left[\text{diag}(p) - \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^{N(t_k)} p_i} p p^T \right] \tag{A.5.90}$$

Avec $p_i = p_{i(t_k)} = \left(\frac{\sigma_r \theta_i(t_k)}{\sigma_i \theta_r(t_k)} \right)^2$ et $p = [p_1(t_k), \dots, p_{N(t_k)}(t_k)]^T$

5.2 Indépendance de la référence

L'estimateur ENH, de part sa construction, fait intervenir une harmonique dite de « référence ». Cette harmonique doit être spécifiée par l'utilisateur. La section traitant de cette question (§5.2.4 p129) a évoqué les critères de choix à prendre en compte : critères numériques et critères expérimentaux.

5.2.1 Aspects numériques

Un des résultats numériques énoncé affirme que l'harmonique de référence n'a pas d'influence sur les écarts-types théoriques tant que celle-ci n'invalide pas certains d'observables supplémentaires. Par exemple, si les harmoniques $\theta_{0,0}$, $\theta_{2,0}$ ou $\theta_{2,2}$ sont valides sur tout l'horizon temporel d'exploitation, alors l'écart-type ne dépend pas de la référence si elle est prise parmi ces harmoniques. Pourtant, toutes les harmoniques n'ont pas le même rapport signal/bruit. L'harmonique moyenne $(0, 0)$ à un écart-type 2 fois supérieur aux harmoniques $\theta_{m,n}$ avec $(m > 0, n > 0)$.

Par exemple, imaginons que l'harmonique $\theta_{4,4}(t)$ soit prise comme référence. Les figures Fig.2.6 (a) et (b) montrent que 56 % des mesures de cette harmonique sont exploitables en face avant et seulement 19 % en face arrière. Or si elle est prise comme référence, toutes les autres harmoniques devront s'aligner sur l'horizon temporel de validité de celle-ci. De nombreux instants des autres harmoniques se trouvent donc rejetés à cause de la référence.

L'harmonique $(0, 0)$ n'est pas systématiquement meilleure à ce propos. La figure Fig.2.6 (a) montre en effet, qu'en face arrière, l'harmonique moyenne n'a que 77 % de ses mesures qui sont exploitables alors que l'harmonique $(2, 0)$ atteint 81 %. Ce « paradoxe » est simplement du au fait que l'écart-type de l'harmonique $(2, 0)$ est plus faible (d'un facteur $\sqrt{2}$). Toutefois, la tendance s'inverse complètement avec un matériau conducteur puisque l'harmonique $(2, 0)$ disparaît alors beaucoup plus rapidement.

De façon à illustrer le résultat ci-dessus, on peut calculer l'écart-type théorique sur τ_x pour toutes les harmoniques de référence possibles (Tab.A.3). On se limite ici aux 16 premières harmoniques paires³. Les écarts-types sont également calculés en supposant que seules ces 16 premières harmoniques sont utilisées pour l'estimation. Le tableau montre aussi l'évolution du déterminant et du conditionnement de la matrice d'information réduite. Cependant, comme certains paramètres $C_{m,n}$ sont parfois nuls, les sensibilités réduites à ces paramètres ont été obtenues en multipliant leur sensibilité par leur intervalle de variation (ici 2) et non par la valeur de $C_{m,n}$. Par ailleurs, la matrice d'information a été normalisée. Le déterminant et le conditionnement sont définis par :

$$D = \det\left(\sigma_m^2 / (T_{lim}^2 N_x N_y) S^T W S\right) \quad (\text{A.5.91})$$

$$C = \text{cond}\left(\sigma_m^2 / (T_{lim}^2 N_x N_y) S^T W S\right) \quad (\text{A.5.92})$$

Ce tableau montre que pour les 4 premières harmoniques, le taux d'exploitation est constant

3. $(m, n) \in \{0, 2, 4, 6\} \times \{0, 2, 4, 6\}$.

égal à 64,60 %. Le taux d'exploitation correspond à la proportion des observables exploités pour l'inversion. L'écart-type de τ_x et le déterminant sont aussi constants. Ce résultat est assez étonnant puisqu'il suggère que l'harmonique de référence n'a pas d'influence. Choisir une harmonique de fréquence supérieure (par exemple (4, 2)) est possible et n'occasionne ici qu'une diminution infime de la qualité de l'estimation. Cependant, c'est probablement moins vrai en face arrière où ces fréquences ont un rapport signal/bruit moins bon. Avec des harmoniques de plus haute fréquence, le taux d'exploitation continue de baisser et génère ici une augmentation de 50 % sur l'écart-type de τ_x .

Prendre comme référence une harmonique supérieure ne présente donc pas particulièrement d'intérêt si ce n'est pour vérifier expérimentalement que l'estimation reste voisine de la solution trouvée avec $\theta_{2,2}$ et ne dépend pas du choix de la référence. Il se pourrait en effet que celle-ci présente des anomalies expérimentales qui viendraient biaiser l'estimation.

	$n = 0$	$n = 2$	$n = 4$
$m = 0$	Référence : $\theta_{0,0}(t)$ Exploitation : 64,60 % $\sigma_{\tau_x} = 0,573$ % $D = 2,1833.10^{57}$ $C = 1,6165.10^2$	<i>sym</i>	<i>sym</i>
$m = 2$	Référence : $\theta_{2,0}(t)$ Exploitation : 64,60 % $\sigma_{\tau_x} = 0,573$ % $D = 2,1833.10^{57}$ $C = 1,5552.10^2$	Référence : $\theta_{2,2}(t)$ Exploitation : 64,60 % $\sigma_{\tau_x} = 0,573$ % $D = 2,1833.10^{57}$ $C = 1,1185.10^2$	<i>sym</i>
$m = 4$	Référence : $\theta_{4,0}(t)$ Exploitation : 60,78 % $\sigma_{\tau_x} = 0,589$ % $D = 1,7884.10^{57}$ $C = 1,6087.10^2$	Référence : $\theta_{4,2}(t)$ Exploitation : 63,33 % $\sigma_{\tau_x} = 0,575$ % $D = 2,0685.10^{57}$ $C = 1,5248.10^2$	Référence : $\theta_{4,4}(t)$ Exploitation : 46,93 % $\sigma_{\tau_x} = 0,684$ % $D = 7,0869.10^{56}$ $C = 2,0169.10^2$
$m = 6$	Référence : $\theta_{6,0}(t)$ Exploitation : 36,13 % $\sigma_{\tau_x} = 0,791$ % $D = 2,7477.10^{56}$ $C = 2,5788.10^2$	Référence : $\theta_{6,2}(t)$ Exploitation : 40,36 % $\sigma_{\tau_x} = 0,737$ % $D = 4,2391.10^{56}$ $C = 2,2954.10^2$	Référence : $\theta_{6,4}(t)$ Exploitation : 32,67 % $\sigma_{\tau_x} = 0,847$ % $D = 1,8053.10^{56}$ $C = 2,8773.10^2$

Tableau A.3 – Ecart-type théorique des estimations en fonction de l'harmonique de référence. Le taux d'exploitation maximal de 100 % est atteint lorsque les 4500 mesures disponibles sont utilisées. Les paramètres D , C et T correspondent respectivement au déterminant, au conditionnement et à la trace de la matrice d'information réduite et normalisée.

5.2.2 Aspects expérimentaux

La figure (Fig.A.8) montre l'évolution des 4 premières harmoniques paires calculées directement à partir des niveaux numériques après correction de la non-uniformité spatiale par une

soustraction de fond. Aucune excitation n'est appliquée pendant les 10 premières secondes de manière à moyenner les images pour déterminer le champ de niveau numérique initiale qui sert à la soustraction de fond. Les écarts-types des harmoniques sont aussi déterminés à partir de ces images. L'écart-type, déterminé pour chaque harmonique, permet alors de déterminer la limite d'exploitabilité (courbe rouge en pointillés).

Il apparaît très nettement que l'harmonique moyenne $\theta_{0,0}$ est non seulement plus perturbée mais aussi plus bruitée que les autres. Il est donc difficilement envisageable de l'utiliser pour l'estimation, surtout quand on la compare à $\theta_{2,2}$, qui elle, ne présente visiblement aucune anomalie.

On remarque par ailleurs, que les écarts-types ne correspondent pas à ce que la théorie prévoit. En effet, il devrait y avoir un rapport $\sqrt{2}$ entre l'écart-type de $\theta_{0,0}$ et $\theta_{0,2}$, alors que le rapport est ici de 2. De même, alors que $\theta_{2,0}$ et $\theta_{0,2}$ devrait avoir le même écart-type, on a ici un facteur 5 entre les deux. On retrouve le rapport $\sqrt{2}$ uniquement entre les harmoniques $\theta_{2,0}$ et $\theta_{2,2}$: $0,070/0,048 = 1,5 \approx \sqrt{2} = 1,4$. Cet écart à la théorie a au moins deux origines :

- Les perturbations de la caméra ne sont pas prises en compte et il n'y a aucune raison qu'elles soient identiques pour toutes les harmoniques.
- Le modèle ne prend pas en compte la technologie de la caméra AGEMA qui fait que le comportement des pixels d'une ligne est assez différent de ceux d'une colonne.

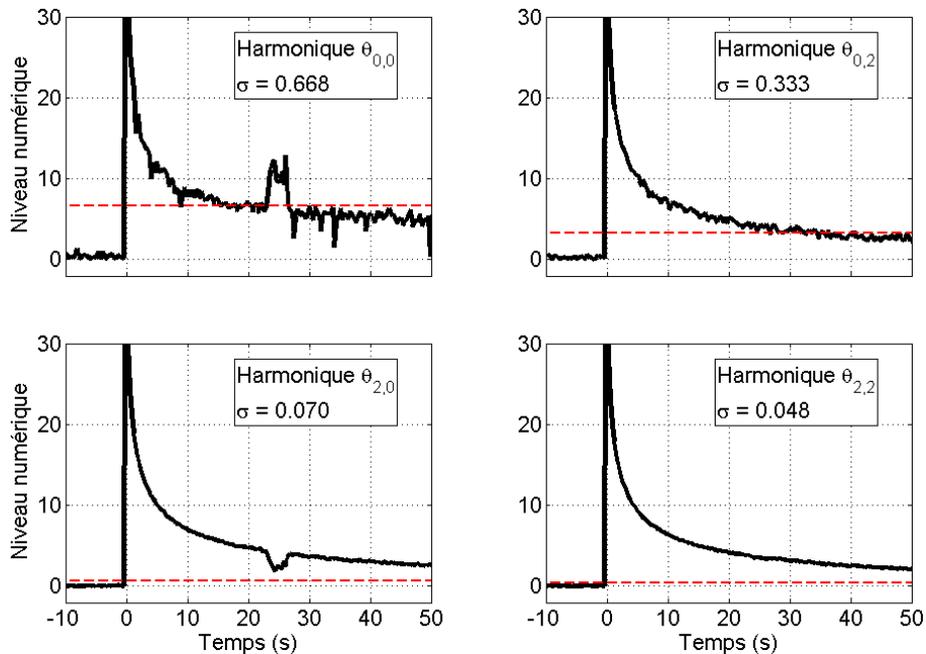


Figure A.8 – Exemple d'harmoniques expérimentales en face avant obtenues avec la caméra AGEMA 880SW et avec un échantillon d'Ertalon sur lequel on a appliqué un créneau de flux de 130 W pendant 10 ms . La courbe rouge en pointillés correspond au seuil d'exploitabilité ($10\sigma_{m,n}$) de l'harmonique.

6 Estimation de l'émissivité

Il existe plusieurs méthodes [4], de complexité et de précision variables, pour estimer l'émissivité thermique d'un corps supposé gris dans la gamme spectrale de la caméra infrarouge. Dans notre situation, on ne souhaite pas estimer précisément l'émissivité mais simplement d'en déterminer une approximation. L'objectif est de pouvoir apprécier si on est potentiellement très perturbé par des variations de l'environnement radiatif du dispositif expérimental. Cette valeur devra aussi nous permettre d'utiliser un modèle thermographique pour calculer une valeur approchée des températures. Le modèle thermographique que l'on utilise ici est décrit par Pajani [5, p.309] et s'intitule : « *Mesure sur un corps opaque d'émissivité ϵ_0 à courte distance, dans un environnement à température T_{amb}* ». L'environnement est également supposé être un corps noir. Le modèle est défini de la manière suivante :

$$V_m(T_{obj}) = \underbrace{\epsilon_{obj} V(T_{obj})}_{\text{Emis par l'objet}} + \underbrace{(1 - \epsilon_{obj}) V(T_{amb})}_{\text{Réfléchi sur l'objet}} \quad (\text{A.6.93})$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} V_m(T_{obj}) & \text{Niveau numérique fourni par la caméra pour } T_{obj} \text{ fixé.} \\ V(T_{obj}) & \text{Niveau numérique correspondant à un corps noir à } T_{obj} \text{ K.} \\ V(T_{amb}) & \text{Niveau numérique correspondant à un corps noir à } T_{amb} \text{ K.} \\ \epsilon_{obj} & \text{Emissivité inconnue de l'objet} \end{cases}$$

L'estimation de l'émissivité consiste à peindre une partie de l'échantillon avec la peinture noir, d'émissivité « connue » puis d'élever la température de l'échantillon. Pour cela, on place l'échantillon sur un échangeur en cuivre dont la température est contrôlée par un cryothermostat. La température n'a pas vraiment d'importance. En l'occurrence, la consigne utilisée ici est d'environ $T_c = 50^\circ\text{C}$ pour une température ambiante de $T_{amb} = 20^\circ\text{C}$. Du fait de la résistance thermique de l'échantillon, la température en surface est un peu plus faible⁴.

Avant de démarrer le cryothermostat, on enregistre le niveau numérique à température ambiante correspondant au matériau $V_m^{obj}(T_{amb})$ et à la peinture $V_m^p(T_{amb})$. Ces deux valeurs sont théoriquement identiques pour les deux matériaux puisqu'ils sont supposés être à la même température que l'environnement :

$$V_m^{obj}(T_{amb}) = \epsilon_{obj} V(T_{amb}) + (1 - \epsilon_{obj}) V(T_{amb}) = V(T_{amb}) \quad (\text{A.6.94})$$

$$V_m^p(T_{amb}) = \epsilon_p V(T_{amb}) + (1 - \epsilon_p) V(T_{amb}) = V(T_{amb}) \quad (\text{A.6.95})$$

On allume le cryothermostat et on patiente quelques temps pour que la température de l'échantillon s'approche de son régime permanent. On lit alors le niveau numérique correspon-

4. Le composite fait 1 cm d'épaisseur pour une conductivité dans l'épaisseur d'environ $\lambda_z = 0,5 \text{ W m}^{-1}\text{C}^{-1}$. La température de surface est ainsi voisine de 45°C . Quant au polymère, son épaisseur vaut $e = 3 \text{ mm}$ et la conductivité est identique au composite. La température de surface est donc d'environ 48°C .

dant à la peinture et au matériau nu dont la température est respectivement T_p et T_{obj} :

$$V_m^{obj}(T_{obj}) = \epsilon_{obj} V(T_{obj}) + (1 - \epsilon_{obj}) V(T_{amb}) \quad (\text{A.6.96})$$

$$V_m^p(T_p) = \epsilon_p V(T_p) + (1 - \epsilon_p) V(T_{amb}) \quad (\text{A.6.97})$$

A partir de ces deux expressions, on peut exprimer l'émissivité ϵ_{obj} et ϵ_p :

$$\epsilon_{obj} = \frac{V_m^{obj}(T_{obj}) - V(T_{amb})}{V(T_{obj}) - V(T_{amb})} \quad \text{et} \quad \epsilon_p = \frac{V_m^p(T_p) - V(T_{amb})}{V(T_p) - V(T_{amb})} \quad (\text{A.6.98})$$

En faisant le rapport de ces deux expressions :

$$\frac{\epsilon_{obj}}{\epsilon_p} = \frac{V_m^{obj}(T_{obj}) - V(T_{amb})}{V_m^p(T_p) - V(T_{amb})} \frac{V(T_p) - V(T_{amb})}{V(T_{obj}) - V(T_{amb})} \quad (\text{A.6.99})$$

Si on suppose que la température de surface T_p de la zone peinte et la température T_{obj} de la zone non peinte sont égales, alors la fraction de droite de l'expression ci-dessus vaut 1. On obtient alors une estimation de l'émissivité avec la relation suivante :

$$\epsilon_{obj} = \frac{V_m^{obj}(T_{obj}) - V(T_{amb})}{V_m^p(T_p) - V(T_{amb})} \epsilon_p = \frac{V_m^{obj}(T_{obj}) - V_m^{obj}(T_{amb})}{V_m^p(T_p) - V_m^p(T_{amb})} \epsilon_p \quad (\text{A.6.100})$$

Toutes les quantités qui apparaissent sont connues. On peut ainsi estimer ϵ_{obj} . Pour aller un peu plus loin, il faudrait évaluer l'erreur que l'on commet en supposant que $T_{obj} = T_p$.

La figure Fig.A.9 montre les deux situations de mesure. A droite, le matériau composite où l'on visualise bien les deux zones carrées, plus claires, qui correspondent à la peinture noire. L'émissivité du composite est donc très clairement plus faible que celle de la peinture, puisque le niveau numérique obtenu est plus faible (zone plus sombre). Quant au matériau polymère à gauche, on distingue à peine la zone peinte qui s'avère être ici plus sombre que le polymère lui-même. Cela signifie que l'émissivité du polymère est plus élevée que celle de la peinture.

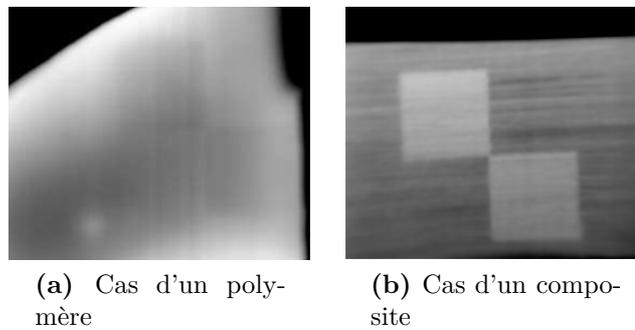


Figure A.9 – Estimation de l'émissivité par comparaison des niveaux numériques avec une peinture noire.

7 Filtrage des hautes fréquences par les caméras infrarouges

Une section du chapitre 2 est dédiée à l'effet de la caméra infrarouge sur les harmoniques de la scène thermique §4.4 p104. Dans le cas d'une caméra matricielle idéale, c'est à dire limitée uniquement par la taille des détecteurs infrarouges de sa matrice. On peut formaliser l'effet des détecteurs avec un produit de convolution par une porte, dont la largeur est la taille des détecteurs. Le caractère discret de la matrice fait intervenir ensuite une multiplication par un peigne de Dirac (Fig.2.10 p105). On aboutit alors au calcul suivant (Eq.2.45) :

$$\begin{aligned}\phi_{out}(x) &= (\phi * \Pi_{\Delta_x}) \times \text{III}_{x_i}(x) = \left(\phi^0(x) * \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nP) * \Pi_{\Delta_x} \right) \times \text{III}_{x_i}(x) \\ &= \mathcal{TF}^{-1} \left\{ \widehat{\phi^0} \widehat{\text{III}_{nP}} \widehat{\Pi_{\Delta_x}} \right\} \text{III}_{x_i}\end{aligned}\quad (\text{A.7.101})$$

Avec $\mathcal{TF}^{-1} \{ \bullet \}$ la transformée de Fourier inverse. Développons le terme à l'intérieur de cet opérateur :

$$\begin{aligned}\widehat{\phi^0} \widehat{\text{III}_{nP}} \widehat{\Pi_{\Delta_x}} &= \widehat{\phi^0}(f) \frac{1}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(f - \frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}(f) \\ &= \frac{1}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widehat{\phi^0}\left(\frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}\left(\frac{n}{P}\right) \delta\left(f - \frac{n}{P}\right)\end{aligned}\quad (\text{A.7.102})$$

En calculant la transformation de Fourier inverse de (Eq.A.7.102) puis en réinjectant dans (Eq.A.7.101), on obtient alors l'expression suivante pour $\phi_{out}(x)$:

$$\begin{aligned}\phi_{out}(x) &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widehat{\phi^0}\left(\frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}\left(\frac{n}{P}\right) \delta\left(f - \frac{n}{P}\right) e^{2i\pi f x} df \right] \text{III}_{x_i}(x) \\ &= \frac{1}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widehat{\phi^0}\left(\frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}\left(\frac{n}{P}\right) e^{2i\pi \frac{n}{P} x} \text{III}_{x_i}(x)\end{aligned}\quad (\text{A.7.103})$$

Appliquons maintenant la transformée en cosinus aux images thermiques suivant x :

$$\begin{aligned}\int_0^{l_x} \phi_{out}(x) \cos\left(k\pi \frac{x}{l_x}\right) dx &= \frac{1}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\widehat{\phi^0}\left(\frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}\left(\frac{n}{P}\right) \int_0^{l_x} e^{2i\pi \frac{n}{P} x} \text{III}_{x_i}(x) \cos\left(k\pi \frac{x}{l_x}\right) dx \right] \\ &= \frac{\Delta_x}{P} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\widehat{\phi^0}\left(\frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}\left(\frac{n}{P}\right) \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(\int_0^{l_x} e^{2i\pi \frac{n}{P} x} \cos\left(k\pi \frac{x}{l_x}\right) \delta(x - x_i) dx \right) \right] \\ &= \frac{\Delta_x}{2l_x} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\widehat{\phi^0}\left(\frac{n}{P}\right) \widehat{\Pi_{\Delta_x}}\left(\frac{n}{P}\right) \sum_{p=1}^{N_x} e^{2i\pi \frac{n}{P} x_p} \cos\left(k\pi \frac{x_p}{l_x}\right) \right]\end{aligned}$$

Puis finalement :

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2N_x} \widehat{\phi^0(0)} \widehat{\Gamma_{\Delta_x}(0)} \underbrace{\sum_{p=1}^{N_x} \cos\left(k\pi \frac{x_p}{l_x}\right)}_{\substack{= \begin{cases} 0 & \text{si } k > 0 \\ N_x & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{Eq.A.3.53 p295})}} \\
 &+ \frac{1}{N_x} \sum_{n=1}^{\infty} \widehat{\phi^0\left(\frac{n}{P}\right)} \widehat{\Gamma_{\Delta_x}\left(\frac{n}{P}\right)} \underbrace{\sum_{p=1}^{N_x} \cos\left(2\pi \frac{n}{P} x_p\right) \cos\left(k\pi \frac{x_p}{l_x}\right)}_{\substack{(\text{Eq.A.3.54 p295}) \rightarrow = \begin{cases} N_x/2 & \text{si } n = k > 0 \\ 0 & \text{si } n \neq k \end{cases}}} \\
 &= \frac{1}{2} \widehat{\phi^0\left(\frac{k}{P}\right)} \widehat{\Gamma_{\Delta_x}\left(\frac{k}{P}\right)} \tag{A.7.104}
 \end{aligned}$$

Avec l'expression de la transformée de la fonction porte (Eq.4.4) et celle de la transformée de ϕ^0 , on a :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \widehat{\phi^0\left(\frac{k}{P}\right)} \widehat{\Gamma_{\Delta_x}\left(\frac{k}{P}\right)} &= \frac{1}{2} \int_{-P/2}^{P/2} \phi^0(x) e^{2i\pi \frac{k}{2P} x} dx \cdot \text{sinc}\left(\pi \frac{k}{P} \Delta_x\right) \\
 &= \int_0^{l_x} \phi^0(x) \cos\left(k\pi \frac{x}{l_x}\right) dx \cdot \text{sinc}\left(\pi k \frac{\Delta_x}{2l_x}\right) \tag{A.7.105}
 \end{aligned}$$

Pour conclure, on a finalement :

$$\theta_k^* = \theta_k^0 \text{sinc}\left(\pi k \frac{\Delta_x}{2l_x}\right) \tag{A.7.106}$$

Avec θ_k^* l'harmonique calculée à partir des données fournies par une caméra idéale, et θ_k^0 l'harmonique « réelle » sans l'effet perturbateur de la caméra.

8 Les algorithmes PSO et ES appliqués à la fonction Rastrigin-2d

8.1 La fonction test Rastrigin

La fonction Rastrigin fait partie des fonctions tests souvent utilisées pour évaluer la performance des algorithmes d'optimisation, et en particulier des métaheuristiques, qui sont généralement stochastiques. Il s'agit d'une fonction à valeur scalaire (Fig.A.10) mais prenant ses valeurs dans un espace de dimension N :

$$J(\pi) = AN + \sum_{i=1}^N \pi_i^2 - A \cos(2\pi \beta_i) \quad (\text{A.8.107})$$

Avec ici, $\pi \in [-1, 5; 1, 5]^N$, $A = 2$ et $N = 2$. Le minimum de la fonction est atteint en $\pi = 0$ et vaut 0 pour tout A et N . Pour cet exemple, on travaille en dimension $N = 2$, ce qui permet de visualiser facilement la position des particules (pour le PSO) ou des individus (pour l'ES) en fonction des itérations.

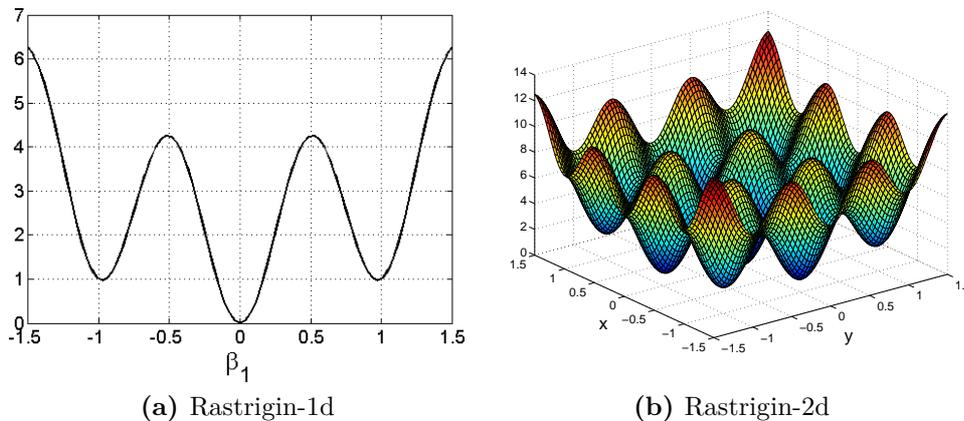


Figure A.10 – Fonction test Rastrigin en 1d et 2d

8.2 Application des Essaims Particulaires (PSO)

Le PSO (§3.3 p242) est appliqué à la fonction Rastrigin-2d ci-dessus (Fig.A.11) dans l'objectif de déterminer le minimum. La fonction est ici représentée avec des courbes d'isovaleurs. Elle montre l'évolution du vecteur position P_i^k des particules, indicés sur i , en fonction de l'itération k .

L'itération 1 correspond à l'initialisation de l'algorithme qui est habituellement réalisée en plaçant aléatoirement et uniformément les particules dans l'espace de recherche $F = [-1, 5; 1, 5]^2$.

La particule dans le coin supérieur droit est relativement proche d'un minimum local. Elle est ainsi la meilleure particule si bien que toutes les autres vont se précipiter vers elle.

Les quelques itérations suivantes montrent la convergence de ces particules vers ce minimum local. Cependant, les particules continuent d'explorer autour de ce minimum ce qui permet à l'une d'entre elles de trouver une zone plus prometteuse : le minimum au centre de la partie supérieure provoque le déplacement de l'essaim à l'itération $k = 10$.

Finalement, une particule parvient, par chance, à trouver le minimum global (au centre). Les 30 dernières itérations montrent la convergence de l'essaim et l'immobilisation progressive des particules.

Au niveau du déplacement des particules, le PSO se distingue des algorithmes évolutionnaires par le fait, que toutes les particules changent de position à chaque itération. Avec les algorithmes génétiques ou les stratégies d'évolutions, certains individus restent immobiles si ces derniers sont suffisamment performants pour ne pas être supprimés par la sélection.

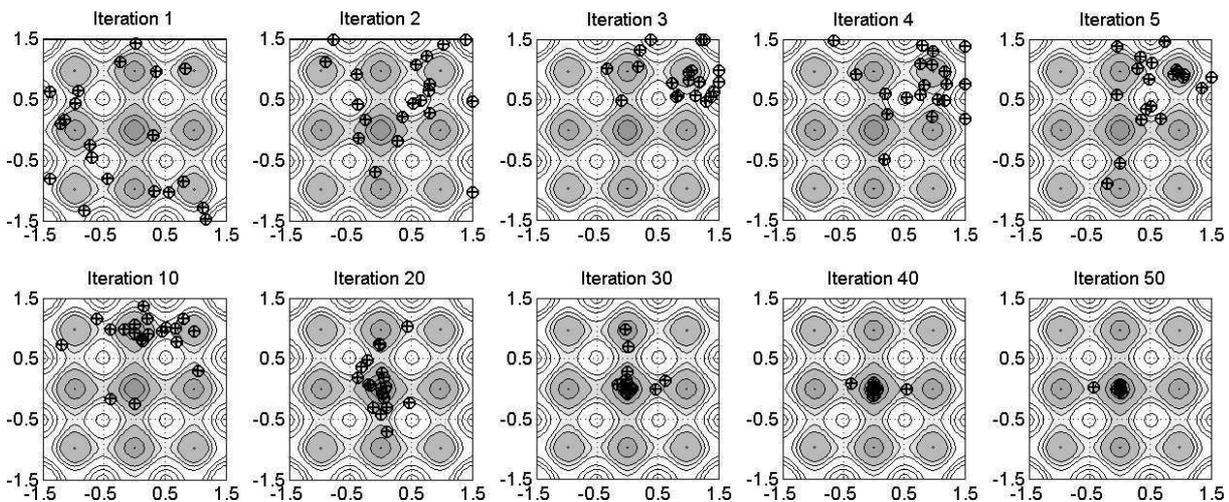


Figure A.11 – Minimisation de la fonction Rastrigin-2d avec le PSO

8.3 Application des Stratégies d'Evolution (ES)

On applique à présent l'ES (§3.4 p243) pour déterminer le minimum de la fonction Rastrigin-2d. La fonction est représentée avec des courbes d'isovaleurs (Fig.A.12). Cette figure montre l'évolution du vecteur position P_i^k des individus, indicés sur i , en fonction de l'itération k (on parle de génération pour les algorithmes évolutionnaires).

L'itération 1 montre l'état de la population après l'initialisation aléatoire. Visiblement, on est assez loin d'une répartition parfaitement uniforme des individus, d'où la nécessité parfois

d'utiliser des générateurs aléatoires plus performants. Dès la première itération, le minimum global est partiellement localisé, mais cela n'empêche pas de constater des différents de comportement entre le PSO et l'ES.

Contrairement aux résultats obtenus avec le PSO ci-dessus, on remarque ici que les individus sont moins enclins à suivre « aveuglément » le meilleur individu de la population. Il n'existe d'ailleurs pas de mécanisme permettant à toute la population de connaître ce meilleur individu. Cette absence d'un tel mécanisme permet à l'algorithme d'explorer davantage l'espace de recherche au détriment de la vitesse de convergence. Il est en effet intéressant de voir comment les individus se regroupent dans les minimums locaux de la fonction Rastrigin. Les individus dans ces minimums locaux sont progressivement supprimés par la sélection pour finalement converger et tous se retrouver dans le minimum global.

Cette différence de comportement avec le PSO vient du fait que pour le PSO, on a utilisé une topologie de voisinage particulière qui consiste à considérer que toutes les particules sont voisines. Si on change cette topologie, on change le comportement du PSO (§4.4 p249).

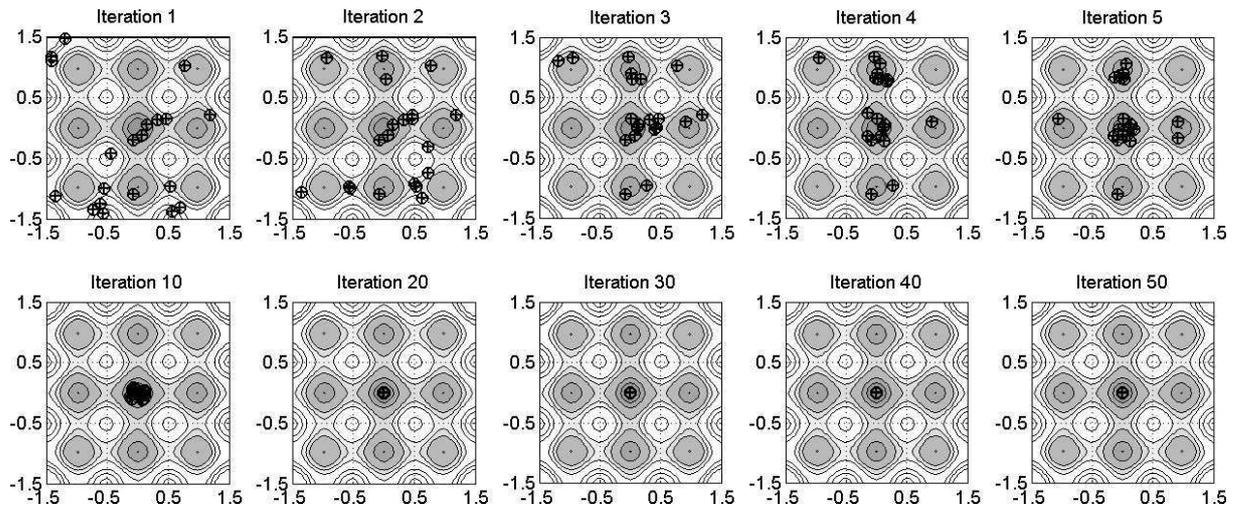


Figure A.12 – Minimisation de la fonction Rastrigin-2d avec l'ES

9 Estimation de densité de probabilité par les méthodes de noyau

Cette annexe est dédiée aux méthodes d'estimation de densité de probabilité d'un processus aléatoire à partir d'un ensemble de mesures expérimentales ou simulées. Cette problématique apparaît dans le chapitre 4 dès que l'on souhaite comparer de manière statistique la performance des algorithmes d'optimisation.

Plusieurs approches pour l'estimation de densité de probabilité (PDF) existent [6, p.1]. La première est qualifiée de « paramétrique » puisque l'on fait alors l'hypothèse que les données sont issues d'une famille particulière de distribution (uniforme, normale, exponentielle...). Cette approche n'est pas adaptée ici. On se focalise en effet sur les approches « non-paramétriques » (ou « libres de distribution ») qui fait l'objet du livre de Silverman [6]. L'intérêt de cette approche est de faire le minimum d'hypothèses sur fonction de densité de probabilité (PDF) f à estimer.

La méthode d'estimation de PDF présentée ici est la méthode d'estimation par noyau. Ce type de méthode prend tout son intérêt dans le cas de PDF à plusieurs variables. L'estimation d'une PDF à une variable, ce qui est le cas ici, n'est qu'un cas particulier.

9.1 Les origines - les histogrammes

La méthode d'estimation par noyau est l'extension naturelle de la méthode des histogrammes. Celle-ci consiste à compter le nombre d'observation qui « tombent » dans une classe (case, rectangle) donnée. Soit f la PDF, l'estimateur est alors [6, p.10] :

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{n} \frac{\text{Nombre d'observations dans la classe de } x}{\text{Largeur de la classe contenant } x} \quad (\text{A.9.108})$$

Cette méthode présente de nombreux inconvénients :

- Sensibilités à la taille des rectangles (des cases) et à l'origine (la position du premier rectangle) [6, p.9 et p.11].
- La PDF que l'on obtient est discontinue, non dérivable au niveau des transitions et de dérivée nulle ailleurs ce qui peut être pénalisant si on a besoin de calculer des dérivées de la PDF.

9.2 La version élémentaire

Un autre estimateur appelé « the naive estimator » [6, p.11] est semblable mais la classe n'a plus une position fixe. Elle est centrée sur x , c'est à dire là où on souhaite évaluer la PDF f :

$$\hat{f}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{2h} P(x - h < X < x + h) \quad (\text{A.9.109})$$

Comme on ne dispose pas d'un nombre infini d'observations, on ne peut pas faire tendre la largeur des rectangles h vers 0. Soit $X_i, i \in [1; n]$, un ensemble d'observations. Un estimateur de la PDF est donc :

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{2hn} \sum_{i=1}^n I_{[x-h; x+h]}(X_i) \quad (\text{A.9.110})$$

Avec $I_E(x) = 1$ si $x \in E$, 0 sinon. En utilisant la fonction $K(x)$ appropriée, on peut mettre la relation précédente sous la forme suivante :

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{h} K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) \quad (\text{A.9.111})$$

Cette forme est en fait celle correspondante aux estimateurs à noyau présentés maintenant.

9.3 Généralités

Pour les deux estimateurs précédents, $K(x)$ est une fonction rectangulaire discontinue. Le principe des estimateurs à noyau est d'utiliser des fonctions $K(x)$ plus régulières qui sont généralement elles-mêmes des PDF que l'on choisit souvent symétriques. L'estimée $\hat{f}(x)$ s'exprime alors comme une somme de ces fonctions $K(x)$. Elle hérite ainsi de certaines propriétés de $K(x)$. Par exemple, il est fréquent d'utiliser la loi normale comme noyau.

Le paramètre h dans Eq.A.9.111 est appelée « largeur de fenêtre » ou « paramètre de filtrage » (« smoothing parameter ») ou encore « bande passante ». Le terme utilisé dans la suite de cette section est « le paramètre h ».

Les méthodes de noyau sont intuitivement plus satisfaisantes que l'histogramme, puisqu'elle ne rejette pas totalement une observation qui serait un peu trop loin du point d'évaluation x . Malheureusement, la notion de « un peu trop loin » est problématique pour les estimateurs à noyau. C'est à l'utilisateur de définir cette échelle de distance (le paramètre h). Ce paramètre a souvent une influence significative sur la forme finale de la PDF.

Les résultats obtenus dans la suite sont valables uniquement d'un point de vue asymptotique. La plupart des développements peuvent être retrouvés dans la littérature [7] et nécessitent de

faire les hypothèses suivantes :

1. La PDF f est C^2 et de carré intégrable

2. Le paramètre h vérifie les propriétés suivantes :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} h = 0 \quad \text{et} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} nh = \infty$$

On suppose donc que le nombre d'observations augmente plus vite que le paramètre h diminue.

3. Le noyau $K(x)$ est une PDF symétrique, de moyenne nulle et de variance finie :

$$\int K(z) dz = 1 \quad , \quad \int z K(z) dz = 0 \quad , \quad \int z^2 K(z) dz < \infty$$

La première chose que l'on peut regarder est l'espérance de l'estimée :

$$\mathbb{E}(\hat{f}) = \mathbb{E} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{h} K \left(\frac{x - X_i}{h} \right) \right] = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n \mathbb{E} \left[K \left(\frac{x - X_i}{h} \right) \right]$$

Le théorème de transfert [8] permet de calculer l'espérance d'une fonction d'une variable aléatoire caractérisée par sa PDF $f(t)$:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\hat{f}) &= \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}} K \left(\frac{x - t}{h} \right) f(t) dt \\ &= K_h * f \quad \text{avec} \quad K_h(x) = \frac{1}{h} K(x/h) \end{aligned} \tag{A.9.112}$$

$$= \int_{\mathbb{R}} K(y) f(x + hy) dy \quad \text{en posant} \quad y = \frac{t - x}{h} \tag{A.9.113}$$

La relation (Eq.A.9.112) donne tout son sens aux appellations « paramètre de filtrage » ou « bande-passante » du paramètre h . Une grande valeur de h correspond à une fonction très étendue autour de sa moyenne. Le spectre fréquentiel converge alors rapidement vers 0 avec la fréquence. Le fait de convoluer dans l'espace réel revient à multiplier les spectres fréquentiels. Donc convoluer f par K revient à filtrer f d'autant plus fortement que h est grand.

On peut aussi déterminer la variance $\text{var}(\hat{f})$:

$$\begin{aligned}
 \text{var}(\hat{f}) &= \text{E} \left[(\hat{f} - \text{E}\{\hat{f}\})^2 \right] && \text{(A.9.114)} \\
 &= \text{E} [\hat{f}^2] - \text{E} [\hat{f}]^2 \\
 &= \text{E} \left[\frac{1}{n^2} \left(\sum_i K_h(x - X_i) \right)^2 \right] - (K_h * f)^2 \\
 &= \frac{1}{n^2} \sum_i \text{E} [K_h^2(x - X_i)] + \frac{1}{n^2} \text{E} \left[\sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} K_h(x - X_i) K_h(x - X_j) \right] - (K_h * f)^2
 \end{aligned}$$

En utilisant le fait que les observations X_i sont indépendantes deux à deux et que $K_h(x)$ est une fonction C^1 , on a⁵ [7] :

$$\begin{aligned}
 \text{var}(\hat{f}) &= \frac{1}{n^2} \sum_i \text{E} [K_h^2(x - X_i)] + \frac{1}{n^2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \text{E} [K_h(x - X_i)] \text{E} [K_h(x - X_j)] - (K_h * f)^2 \\
 &= \frac{1}{n} K_h^2 * f + \left(\frac{n(n-1)}{n^2} - 1 \right) (K_h * f)^2 \\
 &= \frac{1}{n} \left[K_h^2 * f - (K_h * f)^2 \right] && \text{(A.9.115)}
 \end{aligned}$$

Il existe plusieurs mesures pour évaluer la qualité d'une estimée. Une première mesure locale consiste à calculer l'erreur quadratique moyenne (MSE pour « mean square error ») en x :

$$\begin{aligned}
 \text{MSE}_x(\hat{f}) &= \text{E} [\hat{f}(x) - f(x)] \\
 &= \text{var} [\hat{f}] + (\text{E} [\hat{f}] - f)^2 \\
 &= \frac{1}{n} \left(K_h^2 * f - (K_h * f)^2 \right) + (K_h * f - f)^2 && \text{(A.9.116)}
 \end{aligned}$$

On voit clairement apparaître sur ces deux dernières expressions une composante aléatoire qui décroît avec le nombre d'observation n et un biais indépendant de n .

On peut aussi définir l'erreur quadratique intégrée (« mean integrated square error » ou MISE) ou l'erreur absolue intégrée (« mean integrated absolute error » ou MIAE) ([6, p.35] et [7]) :

$$\text{MISE}(\hat{f}) = \text{E} \left[\int_{\mathbb{R}} (\hat{f} - f)^2 dx \right] \tag{A.9.117}$$

$$\text{MIAE}(\hat{f}) = \text{E} \left[\int_{\mathbb{R}} |\hat{f} - f| dx \right] \tag{A.9.118}$$

5. Voir [http://fr.wikipedia.org/wiki/Ind%C3%A9pendance_\(probabilit%C3%A9s\)](http://fr.wikipedia.org/wiki/Ind%C3%A9pendance_(probabilit%C3%A9s)) - juin 2010

9.4 Approximations asymptotiques

La PDF f étant C^1 , on peut faire un développement de Taylor en x :

$$f(x + ht) = f(x) + ht f'(x) + \frac{1}{2}h^2 t^2 f''(x) + o(h^2) \quad (\text{A.9.119})$$

En réinjectant cette relation dans (Eq.A.9.113), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\hat{f}] &= \int_{\mathbb{R}} K(y) f(x + hy) dy \\ &= f(x) + \frac{1}{2}h^2 \text{var}[K] f''(x) + o(h^2) \end{aligned} \quad (\text{A.9.120})$$

Cette dernière relation montre bien l'importance du noyau et la valeur du paramètre h sur le biais de l'estimée. Cette relation est d'ailleurs utilisée dans la suite pour déterminer une valeur de h optimale. En réinjectant maintenant (Eq.A.9.119) dans (Eq.A.9.115) et en développant ensuite, on obtient :

$$\begin{aligned} \text{var}[\hat{f}] &= \frac{1}{n} \left[K_h^2 * f - (K_h * f)^2 \right] \\ &= \frac{1}{nh} f(x) \int_{\mathbb{R}} K(z)^2 dz + o\left(\frac{1}{nh}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.9.121})$$

Enfin, on peut obtenir une expression plus exploitable des mesures d'erreur :

$$\text{MSE}_x(\hat{f}) = \frac{1}{nh} f(x) \int_{\mathbb{R}} K(z)^2 dz + \frac{1}{4}h^4 \text{var}[K] f''^2(x) + o\left(\frac{1}{nh} + h^4\right) \quad (\text{A.9.122})$$

$$\text{MISE}(\hat{f}) = \frac{1}{nh} \int_{\mathbb{R}} K(z)^2 dz + \frac{1}{4}h^4 \text{var}[K] \int_{\mathbb{R}} f''^2(t) dt + o\left(\frac{1}{nh} + h^4\right) \quad (\text{A.9.123})$$

Ces deux expressions permettent de déterminer le paramètre h optimal. Pour cela, il suffit de déterminer le zéro de la dérivée de chaque expression par rapport à h [6, p.40] :

$$h_{\text{MSE}} = \left(\frac{\int K(z)^2 dz f(x)}{n \text{var}[K] \int_{\mathbb{R}} f''^2(z) dz} \right)^{1/5} \quad (\text{A.9.124})$$

$$h_{\text{MISE}} = \left(\frac{\int K(z)^2 dz}{n \text{var}[K] \int_{\mathbb{R}} f''^2(z) dz} \right)^{1/5} \quad (\text{A.9.125})$$

L'inconvénient majeur de ces expressions est qu'elles nécessitent de connaître la fonction f . Toutefois, lorsqu'elle est connue, on obtient la valeur MISE optimale en l'injectant dans l'expression (Eq.A.9.123) ([6, p.41] et [7]) :

$$\text{MISE}_{\hat{h}}(\hat{f}) = \frac{5}{4} \frac{1}{n^{4/5}} \left(\text{var}[K]^2 \left[\int K(z)^2 dz \right]^4 \int f''(z)^2 dz \right)^{1/5} \quad (\text{A.9.126})$$

Dans tous les cas, ces relations donnent des informations intéressantes. Elles montrent que h tend très lentement vers 0 avec le nombre d'observations. De plus, elles suggèrent que l'estimation de PDF est d'autant plus difficile que f'' est importante, c'est à dire lorsque la fonction varie rapidement. On constate aussi qu'on a tout intérêt à choisir un noyau dont l'intégrale du carré de la dérivée seconde est minimale. Ce problème d'optimisation peut être résolu analytiquement et conduit justement au noyau de Epanechnikov. Le noyau de Epanechnikov est donc optimal au sens de MISE.

9.5 Conclusion

D'autres méthodes d'estimation sont présentées dans l'ouvrage de Silverman. Par exemple, la méthode du plus proche voisin (« Nearest neighbour method » [6, p.19 et p.96]) est très similaire à la méthode de l'histogramme. Cependant, au lieu d'utiliser des tailles de classe prédéfinies à l'avance, leur taille est ici définie de façon à ce qu'elles contiennent les n voisins les plus proches. Bien que cette méthode ait l'avantage de limiter les problèmes de surfiltrage, l'estimée n'est pas une densité de probabilité puisque son intégrale tend vers l'infini (problème aux bords). On définit aussi la méthode généralisée des plus proches voisins en utilisant la forme des estimateurs à noyau [6, p.21].

La méthode à noyau variable (« Variable kernel method ») [6, p.21] ou plus généralement les méthodes à noyau adaptatif (« Adaptative kernel estimates ») [6, p.100] sont des méthodes à noyau où le paramètre de filtrage h dépend de la densité locale d'observation. Cela permet d'éviter dans une certaine mesure le surfiltrage.

Il existe une autre méthode d'estimation basée sur la décomposition en série orthogonale (« Orthogonal series estimators » [6, p.23]). Comme son nom l'indique, on décompose f sur une base de fonctions orthogonales dont on va déterminer les coefficients.

Une autre méthode dite de maximum de vraisemblance pénalisée (« Maximum penalized likelihood estimators ») [6, p.25 et p.100]. Elle consiste à évaluer la probabilité que la séquence d'observations apparaisse étant donné une PDF f . L'objectif est donc de déterminer f pour laquelle la probabilité d'apparition des observations est maximale. Cependant, Silverman montre qu'il n'existe pas de solution puisque en prenant des distributions de dirac, on peut maximiser la vraisemblance. La pénalisation présentée pénalise les variations de courbure de la PDF (intégrale quadratique de la dérivée seconde).

10 Modélisation 0D du remplissage d'une bouteille

Nomenclature

Variables et fonctions d'état du gaz

P	$[Pa]$	Pression
T	$[^{\circ}C]$	Température
v	$[m^3/kg]$	Volume massique
ρ	$[kg/m^3]$	Masse volumique
u	$[J/kg]$	Energie interne massique
h	$[J/kg]$	Enthalpie massique
s	$[J/(kg^{\circ}C)]$	Entropie massique

Les fonctions d'état en majuscule désignent les grandeurs absolues.

Grandeurs thermodynamiques

h_t	$[J/kg]$	Enthalpie totale massique
C_s	$[m/s]$	Célérité du son
C	$[m/s]$	Célérité du gaz
C_v	$[J/(kg^{\circ}C)]$	Capacité calorifique à volume constant
C_p	$[J/(kg^{\circ}C)]$	Capacité calorifique à pression constante
R	$[J/(^{\circ}Cmol)]$	Constante universelle des gaz parfait
r	$[J/(^{\circ}Ckg)]$	Constante spécifique du gaz
γ	—	Coefficient isentropique du gaz
ρ	$[kg/m^3]$	Masse volumique du matériau

Grandeurs du modèle

m	$[kg]$	Masse de gaz dans la bouteille
Q	$[W]$	Pertes par les parois de la bouteille
L_b	$[m]$	Longueur interne de la bouteille
D_b	$[m]$	Diamètre interne de la bouteille
V_b	$[m^3]$	Volume interne de la bouteille
S_b	$[m^2]$	La surface interne (\approx externe) de la bouteille
D_1	$[m]$	Diamètre de la canalisation
S_1	$[m^2]$	Section de la canalisation
P_C	$[Pa]$	Pression de commande
$G_{x \leftrightarrow y}$	$[W/(^{\circ}C.m^2)]$	Conductance entre le noeud x et y
e	$[m]$	Epaisseur de la couche du matériau de la paroi
Δt	$[s]$	Pas de résolution temporelle

Coefficients de Van der Waals

a	$[Pa.m^6/kg^2]$	La pression de cohésion
b	$[m^3/kg]$	Le covolume

Indices

0	Grandeurs dans le réservoir
1	Grandeurs au niveau de la section minimale de la canalisation
2	Grandeurs à l'entrée de la bouteille
b	Grandeurs dans la bouteille
<i>comp</i>	Grandeurs relatives au matériau composite
<i>lin</i>	Grandeurs relatives au liner
e	Grandeurs relatives à l'air extérieur
L	Valeurs dans les conditions de Laval (blocage sonique)

Le remplissage de bouteilles d'hydrogène fait intervenir des phénomènes physiques complexes. La simulation de ce type de remplissage nécessite de modéliser l'écoulement supersonique et la compression d'un gaz réel sur une large gamme de pression (0 à 700 bar) et de température (environ -50 à 120 °C). La simulation d'un tel écoulement en 3D avec un logiciel CFD n'est pas envisagée. On lui préfère un simple modèle 0D considérant ainsi que la température est homogène dans la bouteille. Ce type de modèle semble bien vérifié pour des géométries particulières de bouteille.

10.1 Modèle 0D

L'utilisation de ce type de modèle particulièrement simple permet d'apprécier l'effet des différents paramètres sur le remplissage des bouteilles. Un des éléments essentiels est le modèle décrivant l'évolution des variables d'état du gaz. Le plus connu est celui des gaz parfaits qui s'avère être une bonne approximation des gaz réels dans les conditions standards (à faible pression et température ambiante). Lorsque la pression augmente, les interactions entre les particules du gaz ne peuvent plus être négligées c'est pourquoi d'autres modèles de gaz ont été développés [9, p.232]. Pour des raisons de simplicité, on a utilisé ici le gaz de Van der Waals. Les développements analytiques restent relativement simples avec ce gaz. Cependant, le modèle permet aussi d'utiliser des tables thermodynamiques⁶ ce qui permet d'obtenir a priori des résultats pour réalistes.

⁶. Les données ont été extraites à partir du site : <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>

10.2 Description des modèles de gaz considérés

Cette partie présente les différents modèles de gaz considérés dans cette étude. On introduit notamment l'équation d'état et les expressions donnant l'énergie interne et l'entropie qui sont utilisées dans les parties suivantes.

10.2.1 Cas du gaz parfait

Fonction d'états :

La théorie du gaz parfait a été développée au 18^{ème}. L'équation d'état s'écrit :

$$P = \rho r T \quad [Pa] \quad (A.10.127)$$

La théorie des gaz parfaits néglige les interactions d'ordre électrostatique entre particules. L'indépendance de l'énergie interne à la pression est une conséquence de cette hypothèse :

$$u = C_V T \quad [J kg^{-1} K^{-1}] \quad (A.10.128)$$

Une expression de l'entropie peut être obtenue à partir de sa différentielle :

$$ds = \frac{C_V}{T} dT + \frac{P}{T} dV \quad [J kg^{-1} K^{-1}] \quad (A.10.129)$$

$$s = s_0 + C_V \ln T + r \ln V \quad (A.10.130)$$

L'expression de l'entropie permet alors de retrouver les équations de Laplace valable lorsque le gaz subit une transformation isentropique :

$$P v^\gamma = \text{constante} \quad (A.10.131)$$

$$T v^{\gamma-1} = \text{constante} \quad (A.10.132)$$

$$P^{1-\gamma} T^\gamma = \text{constante} \quad (A.10.133)$$

10.2.2 Cas du gaz de Van der Waals

Le modèle de gaz dit de « Van der Waals » a été proposé par Johannes Diderik van der Waals en 1873. Il est plus proche de l'observation que celle du gaz parfait et prend par ailleurs en compte la liquéfaction aux fortes pressions. Au niveau microscopique, ce modèle prend en compte le volume non nul des particules à travers le covolume b et introduit « la pression interne » $\frac{a}{v^2}$ qui modélise les forces d'interaction entre les particules [9, p.251].

Cependant, on trouve dans la littérature des mises en garde concernant l'utilisation de l'équation de Van der Waals. Cette loi serait très imprécise dans le domaine critique, dans le

domaine liquide et dans le domaine à masse volumique élevée.

Equation d'état :

L'équation d'état d'un gaz de Van der Waals est donnée par l'expression (Tab.A.10.134). Il s'agit d'une équation du 1^{er} degré en P et T , et du 3^{ème} en v . Le tableau A.5 fournit la valeur des coefficients a , b pour l'azote de l'hydrogène en fonctions des grandeurs critiques. Dans la suite, les coefficients calorifiques sont supposés indépendants de la température.

$$(v - b)\left(P + \frac{a}{v^2}\right) = rT \tag{A.10.134}$$

$$P = \frac{rT}{v - b} - \frac{a}{v^2}$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} v & [m^3/kg] & \text{le volume massique} \\ b & [m^3/kg] & \text{le covolume} \\ a & [Pa.m^6/kg^2] & \text{la pression de cohésion} \\ r & [J/(^{\circ}C.kg)] & \text{la constante spécifique du gaz} \end{cases}$$

Les deux coefficients a et b intervenant dans l'expression peuvent être calculés à partir des grandeurs critiques P_k et v_k [9, p.260], qui correspondent à la position du point critique dans un diagramme (P, v) (de Clapeyron) :

$$a = 3v_k^2 P_k$$

$$b = \frac{v_k}{3}$$

Le point critique correspond au maximum de la courbe de saturation. La température critique T_k de ce point est la température en dessous de laquelle une transformation isotherme peut aboutir à la liquéfaction du gaz. Les valeurs pour l'azote et l'hydrogène sont données dans le tableau (Tab.A.4).

Gaz	T_C [K]	P_C [Mpa]	ρ_C [kg/m ³]	a [Pa m ⁶ /kg ²]	b [m ³ /kg]
Azote (N_2)	126, 2	3, 396	313, 3	103, 8	$1, 06 \cdot 10^{-3}$
Hydrogène (H_2)	33, 15	1, 296	31, 26	3979	$10, 7 \cdot 10^{-3}$

Tableau A.4 – Grandeurs thermodynamiques critiques (température, pression, masse volumique) et valeurs des paramètres de l'équation d'état de Van der Waals.

Par ailleurs, pour calculer le volume massique $v(P, T)$, il faut résoudre un polynôme de degré 3 en utilisant par exemple la méthode de Cardan :

$$P v^3 - (bP + rT) v^2 + a v - ba = 0 \tag{A.10.135}$$

Fonctions d'états :

Pour la suite, il est nécessaire d'avoir une expression permettant de calculer l'énergie interne du gaz en fonction des variables d'états. On obtient dans le cas d'un gaz de Van der Waals [9, p.265] :

$$du = C_V dT + \frac{a}{v^2} dv \tag{A.10.136}$$

$$u = u_0 + C_V T - \frac{a}{v} \tag{A.10.137}$$

On peut aussi obtenir la fonction entropie :

$$ds = \frac{C_V}{T} dT + \frac{r}{v-b} dv \tag{A.10.138}$$

$$s = s_0 + C_V \ln T + r \ln(v-b) \tag{A.10.139}$$

De même que pour le gaz parfait, on peut obtenir une relation entre les variables d'état lorsque le gaz subit une modification isentropique :

$$T(v-b)^{\frac{r}{c_v}} = \text{constante} \tag{A.10.140}$$

$$\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v-b)^{\frac{r}{c_v}+1} = \text{constante} \tag{A.10.141}$$

10.2.3 Cas du gaz réel

Concernant le gaz réel, on ne dispose en général d'aucune expression analytique. Les propriétés du gaz telles que l'énergie interne, la masse volumique, la vitesse du son, etc... sont fournies par exemple dans des tables pression-température.

10.3 Modélisation du remplissage

La modélisation du remplissage par un modèle 0D a notamment été réalisée par Dicken [10]. Les auteurs ont utilisé l'équation d'état de « Redlick-Kwong » pour modéliser le gaz. En condition limite d'entrée, ils supposent connus l'enthalpie, le débit masse et la vitesse. Dans notre cas, ces informations d'entrées sont inconnues. Aussi, pour en faire abstraction, on inclut le réservoir du gaz en question dans la modélisation.

La figure (Fig.A.13) présente les différentes parties du modèle. Pour la suite, on fait les hypothèses suivantes :

1. Les propriétés P_0, T_0 du gaz dans le réservoir sont constantes.
2. Les parois du réservoir et des canalisations sont parfaitement isolées.

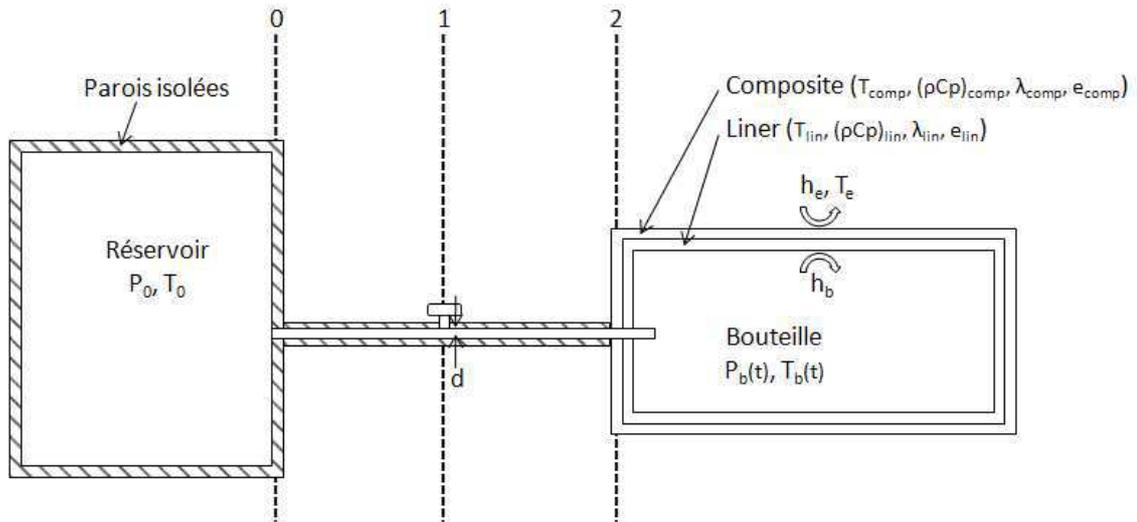


Figure A.13 – Représentation du modèle de la chaîne de remplissage

3. La température du liner et du composite est uniforme pour pouvoir utiliser une représentation nodale de la paroi.
4. L'énergie cinétique du gaz entrant dans la bouteille est convertie instantanément en chaleur.
5. La détente du gaz dans la canalisation est isentropique (0 à 1).
6. On suppose la transformation quasi-statique.
7. On suppose que la section de la canalisation est minimale au niveau de la vanne.
8. L'écoulement est monodimensionnel dans la canalisation et les effets de viscosité sont négligés entre 0 et 2.
9. Les surfaces interne et externe de la bouteille sont égales.

L'objectif du modèle est de fournir l'évolution de la température et de la pression dans la bouteille en fonction du temps. Au lieu de chercher directement la température, il est plus simple de déterminer l'énergie interne du gaz dans la bouteille. La température se déduit alors soit par une loi théorique, soit par les tables thermodynamiques du gaz. L'évolution de l'état du gaz et de la bouteille est donnée par le système d'équation suivant :

$$\dot{U}_b = \frac{dm_b u_b}{dt} = \dot{m}_2 h_{t2} - S_b G_{b \leftrightarrow lin} (T_b - T_{lin}) \quad (\text{A.10.142a})$$

$$\dot{m}_b = \dot{m}_1 (P_0, T_0, P_b, T_b, D_1) \quad (\text{A.10.142b})$$

$$h_{t2} = h_{t0} = h_0 \quad (\text{A.10.142c})$$

$$(\rho C_p)_{lin} \dot{T}_{lin} = S_b G_{b \leftrightarrow lin} (T_b - T_{lin}) - S_b G_{lin \leftrightarrow comp} (T_{lin} - T_{comp}) \quad (\text{A.10.142d})$$

$$(\rho C_p)_{comp} \dot{T}_{comp} = S_b G_{lin \leftrightarrow comp} (T_{lin} - T_{comp}) - S_b G_{comp \leftrightarrow e} (T_{comp} - T_e) \quad (\text{A.10.142e})$$

$$T_b = U_{PV}^{-1} (u_b, v_b = \frac{m_b}{V_b}) \quad (\text{A.10.142f})$$

Interprétation des équations :

- (Eq.A.10.142a) L'équation correspond au bilan d'énergie effectué sur la bouteille. L'enthalpie quantifie le travail des forces de pression ainsi que l'énergie interne massique du gaz entrant. Les pertes de chaleur avec la paroi interne font intervenir une conductance thermique $G_{b \leftrightarrow lin}$.
- (Eq.A.10.142b) Le débit massique de gaz au niveau de la vanne et au niveau de la bouteille dépend de l'état du gaz dans le réservoir et dans la bouteille à l'instant t ainsi que de la section de passage caractérisée par le diamètre D_1 . Le calcul de \dot{m}_1 fait l'objet de la section suivante.
- (Eq.A.10.142c) Cette équation traduit la conservation de l'enthalpie totale le long de la canalisation et des éventuels chocs.
- (Eq.A.10.142d) Transferts thermiques entre le gaz et le polymère.
- (Eq.A.10.142e) Transferts thermiques entre le polymère et le composite.
- (Eq.A.10.142f) Calcul de la température en fonction de l'énergie interne massique et du volume massique. La fonction $U^{-1}(v, u)$ est l'inverse de la fonction $U(v, T)$. Elle retourne la température du gaz en fonction de son volume massique v et de son énergie interne massique u . U^{-1} dépend de la modélisation du gaz que l'on utilise (Eq.A.10.128 et A.10.137).

10.3.1 Conditions de Laval - Débit massique de gaz

Pour déterminer le débit massique de gaz, il est impératif de connaître le régime de l'écoulement : subsonique, sonique ou supersonique. Lorsque la différence de pression entre le réservoir et la bouteille est suffisamment importante, le phénomène de blocage sonique apparaît. La vitesse du gaz est alors maximale et l'écoulement est indépendant des conditions qui règnent dans la bouteille. Les calculs sont développés en se plaçant dans le cas d'une tuyère constituée d'un convergent et d'un divergent [9, p.183]. On appelle « pression de Laval » P_L , la pression dans la bouteille pour laquelle l'écoulement est sonique au niveau de la vanne. Lorsque la pression de la bouteille est supérieure à la pression de Laval, l'écoulement est subsonique. La pression de Laval dépend uniquement de l'état thermodynamique amont du gaz (ici de P_0 et T_0). Par la suite, les grandeurs indicées « L » font référence à la valeur limite, de Laval.

Pour déterminer P_L , on suppose que l'écoulement est sonique. En 0, le gaz est défini par les deux variables d'états P_0 et T_0 . Entre 0 et 1, le gaz subit une détente; il change d'état thermodynamique. Cette transformation a la particularité d'être isentropique (par hypothèse). Pour exploiter cette propriété, il est plus pratique de représenter l'état du gaz en 0 en utilisant les deux variables d'états h_0 et s_0 . De plus, l'enthalpie totale se conserve, la vitesse du gaz en

1 est donc donnée par la relation suivante :

$$C_{1L}^2 = 2(h_0 - h_{1L}) \quad (\text{A.10.143})$$

Cette seule équation A.10.143 n'est pas suffisante pour déterminer l'état en 1. On a supposé l'écoulement sonique, donc la vitesse C_{1L} est égale à la vitesse du son C_s dont la définition est donnée par la relation A.10.145 :

$$C_{1L}^2 = C_s^2(h_1, s_1) \quad (\text{A.10.144})$$

$$C_s^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s \quad (\text{A.10.145})$$

Les relations précédentes sont indépendantes de la modélisation du gaz. Dans les parties suivantes, on particularise les relations pour trois types de gaz : le gaz parfait, le gaz de Van der Waals et le gaz réel.

Cas du gaz parfait :

Lorsqu'un gaz parfait subit une transformation isentropique, le produit Pv^γ est constant. En dérivant par rapport à v , on obtient alors l'expression de la vitesse du son :

$$C_s = \sqrt{\gamma r T} \quad (\text{A.10.146})$$

Si on suppose les coefficients calorifiques $C_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v$ et $C_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P$ indépendants de la température, on est alors amené à résoudre le système à quatre inconnus P_{1L} , T_{1L} , v_{1L} , C_{1L} composé des relations (Eq.A.10.128, Eq.A.10.131, Eq.A.10.147 et Eq.A.10.148) :

$$C_{1L}^2 = 2(h_0 - h_{1L}) \quad (\text{A.10.147})$$

$$C_{1L}^2 = \gamma r T_{1L} \quad (\text{A.10.148})$$

D'où on obtient les différentes grandeurs suivantes :

$$P_{1L} = P_L = P_0 \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (\text{A.10.149})$$

$$T_{1L} = T_0 \left(\frac{P_{1L}}{P_0} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} \quad (\text{A.10.150})$$

$$v_{1L} = \frac{r T_{1L}}{P_{1L}} \quad (\text{A.10.151})$$

$$C_{1L} = 2C_p T_0 \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} = 2C_p T_0 \left[1 - \left(\frac{P_L}{P_0} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} \right] \quad (\text{A.10.152})$$

Remarque :

Dans le cas d'un gaz parfait diatomique, on a $\gamma = 1.4$ et donc $P_L \approx 0,5 P_0$. Cela signifie que lorsque la pression de la bouteille est inférieure à la moitié de la pression du réservoir, l'écoulement est en blocage sonique et des ondes de choc peuvent apparaître.

Le débit massique de gaz est donné par l'expression :

$$\dot{m} = \rho_1 S C_1 = \begin{cases} 2\rho_1 S C_p T_0 \left[1 - \left(\frac{P_1}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] & \text{si } P_2 \geq P_L \\ 2\rho_{1L} S C_p T_0 \left[1 - \left(\frac{P_{1L}}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] & \text{si } P_2 < P_L \end{cases} \quad (\text{A.10.153})$$

Cas du gaz de Van der Waals :

Pour déterminer les conditions de Laval dans le cas d'un gaz de Van der Waals, on commence par déterminer l'expression de la vitesse du son. A partir de la définition (Eq.A.10.145) et en considérant une transformation isentropique, on obtient (§10.6.2 p350) :

$$C_s(T, v) = \sqrt{\left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{rT}{(1 - \rho b)^2} - 2\rho a} \quad (\text{A.10.154})$$

De même que précédemment, la conservation de l'enthalpie totale donne une expression de la vitesse du gaz au col.

$$C_{1L}^2 = 2(h_0 - h_{1L}) \quad (\text{A.10.155})$$

De plus, les conditions de Laval sont obtenues au blocage sonique, ce qui fournit la dernière équation nécessaire à la résolution :

$$C_{1L} = C_s \quad (\text{A.10.156})$$

Les relations (Eq.A.10.134), (Eq.A.10.140), (Eq.A.10.155 et (Eq.A.10.156) forment un système de 4 équations à 4 inconnus $P_{1L}, T_{1L}, v_{1L}, C_{1L}$. La solution à ce système n'est pas explicite. On est amené à construire la fonction $f(v)$ définie par :

$$f(v) = C_{1L}^2(P_0, T_0, v_0, v) - C_s^2(v_0, v) \quad (\text{A.10.157})$$

On cherche ensuite un zéro v_{1L} de la fonction dans $[0; v_0]$ en utilisant par exemple la méthode de Newton (§10.6.3 p351). Une fois la solution obtenue, on calcule ensuite P_{1L} et T_{1L} à l'aide

des relations (Eq.A.10.140) et (Eq.A.10.141) :

$$T_{1L} = T_0 \left(\frac{v_0 - b}{v_{1L} - b} \right)^{\frac{r}{c_v}} \quad (\text{A.10.158})$$

$$P_{1L} = \left(P_0 + \frac{a}{v_0^2} \right) \left(\frac{v_0 - b}{v_{1L} - b} \right)^{\frac{r}{c_v}} - \frac{a}{v_{1L}^2} \quad (\text{A.10.159})$$

$$C_{1L} = \sqrt{\left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{r T_{1L}}{(1 - \rho_{1L} b)^2} - 2 \rho_{1L} a} \quad (\text{A.10.160})$$

Finalement, on obtient l'expression du débit massique de gaz :

$$\dot{m} = \begin{cases} \rho_1 S C_1 & \text{si } P_2 \geq P_{1L} \\ \rho_{1L} S C_{1L} & \text{si } P_2 < P_{1L} \end{cases} \quad (\text{A.10.161})$$

Cas du gaz réel :

La détermination du débit massique de gaz dans le cas d'un gaz réel est plus simple puisqu'il n'y a pas de développement analytique possible. Il s'agit en fait de développer divers algorithmes permettant de manipuler des tables thermodynamiques. Pour la suite, on appelle X_{YZ} la table thermodynamique fournissant la grandeur X en fonction des variables d'états Y et Z .

La figure A.14 représente les différentes étapes permettant de déterminer les conditions de Laval en fonction des paramètres amonts P_0 , T_0 . Comme la détente est isentropique et que l'enthalpie donne accès à la vitesse au col, on passe dans le repère h , s en calculant h_0 , s_0 à partir des tables thermodynamiques du gaz.

Dans un deuxième temps, on génère les tables isentropiques $H_{PS_0}(P, s_0)$ et $CS_{PS_0}(P, s_0)$ à l'aide de la table S_{PT} , H_{PT} et CS_{PT} (Fig.A.15). Ces deux tables nous donnent ainsi l'évolution de l'enthalpie et la célérité du son en fonction de la pression au col. Enfin, on génère la table $C_{PS_0}(P, s_0)$ à l'aide de la table H_{PS} et avec la relation suivante :

$$C_{PS_0}(P, s_0) = \sqrt{2(h_0 - H_{PS_0}(P, s_0))} \quad (\text{A.10.162})$$

Cette table $C_{PS_0}(P, s_0)$ est la vitesse du gaz au niveau du col (la vanne) en fonction de la pression qui y règne. Cette table est dite « décroissante » sur la figure (Fig.A.14) car la vitesse au col diminue lorsque la pression augmente (la détente est moins forte). A l'inverse, on a ici la vitesse du son qui croit lorsque P augmente au niveau du col (à entropie constante). La dernière étape est de déterminer le point d'intersection (P_{1L}, C_{1L}) de ces deux tables C_{PS} et CS_{PS} (la première est décroissante, l'autre est croissante). Le point d'intersection donne P_L . Connaissant également l'entropie au niveau du col (s_0), on peut alors déterminer l'enthalpie

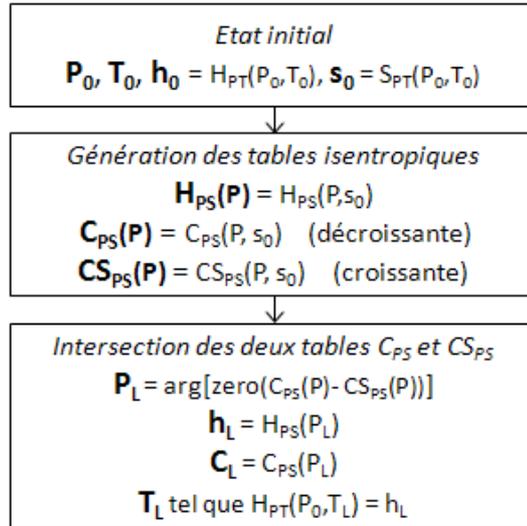


Figure A.14 – Détermination des conditions de Laval en fonction de l'état thermodynamique initial du gaz.

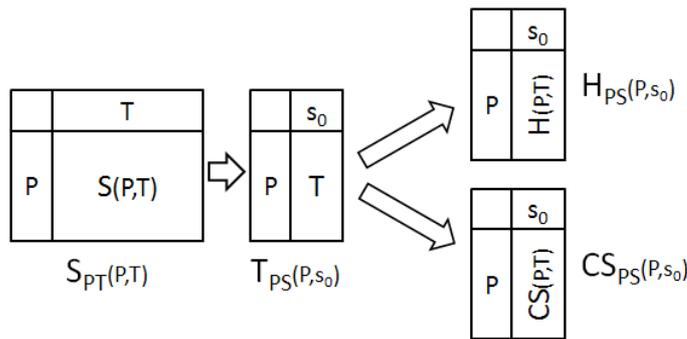


Figure A.15 – Génération des tables $H_{PS}(P, s_0)$ et $CS_{PS}(P, s_0)$. On génère la table temporaire T_{PS} en inversant S_{PT} . On remplace ensuite la variable « température » en allant chercher la grandeur voulue dans une table PT.

massique h_{1L} puis la température du gaz T_{1L} :

$$P_{1L} = \text{arg} [\text{zero} (C_{PS_0}(P) - CS_{PS_0}(P))] \tag{A.10.163}$$

$$C_{1L} = C_{PS_0}(P_L) \tag{A.10.164}$$

$$h_{1L} = H_{PS_0}(P_L) \tag{A.10.165}$$

$$T_{1L} = H_{PT}^{-1}(h_L, P_L) = \text{arg} [\text{zero} (H_{PT}(P_{1L}, T) - h_{1L})] \tag{A.10.166}$$

Enfin, on détermine la masse volumique ρ_L puis le débit massique :

$$\dot{m} = \begin{cases} \rho_1 S C_1 & \text{si } P_2 \geq P_{1L} \\ \rho_{1L} S C_{1L} & \text{si } P_2 < P_{1L} \end{cases} \tag{A.10.167}$$

10.3.2 Comparaison des conditions de Laval

Pour différents modèles de gaz :

Les différents modèles de gaz précédent ne sont pas équivalents. Chaque équation d'état possède son domaine de validité. On peut les comparer en calculant les conditions de Laval en fonction de la pression P_0 et la température T_0 pour chaque modèle et lorsque l'on fait varier l'état du gaz dans le réservoir.

On a représenté sur la figure (Fig.A.16) l'évolution de plusieurs grandeurs thermodynamiques en fonction de l'état du gaz dans le réservoir. La température est fixée à $T_0 = 27\text{ }^\circ\text{C}$ et la pression varie entre 0 et 100 *bar*. On peut alors faire plusieurs remarques :

1. Les courbes relatives aux simulations où on a utilisé des tables numériques présentent quelques imperfections lorsque la pression dans le réservoir est faible. Il s'agit sans doute d'un problème de précision de la table dans des domaines où les grandeurs varient rapidement. Il pourrait être utile d'utiliser des méthodes d'interpolation plus précises (remplacer l'interpolation linéaire par une interpolation de type spline par exemple). Toutefois, ces variations restent minimes.
2. Concernant l'évolution du rapport $\frac{P}{P_0}$, on vérifie bien que les trois modèles convergent à basse pression. L'hypothèse de gaz parfait est correcte uniquement lorsque la pression est faible.
3. Il est intéressant de remarquer que le rapport $\frac{P}{P_0}$ est sensiblement constant et voisin de 0.5. Le blocage sonique a donc lieu lorsque la pression de la bouteille est inférieure à la moitié de la pression du réservoir.
4. Bien que le modèle de Van der Waals apporte manifestement une amélioration par rapport au gaz parfait, il ne reproduit pas parfaitement le comportement du modèle utilisant les propriétés réelles du gaz, puisque la pression et la température de Laval sont supérieures aux prévisions des tables.
5. En ce qui concerne l'évolution de la température de Laval, l'évolution est linéaire pour des pressions inférieures à 100 *bar*.
6. A propos de la célérité du son, elle est indépendante de la pression pour le gaz parfait (si on considère γ constant). Dans le réservoir, le gaz de Van der Waals sous estime la célérité fournit par les tables mais la tendance est la même. Au niveau de la vanne, la température a diminué du fait de la détente. La vitesse du son est donc également plus faible.
7. Les trois modèles semblent converger vers la masse volumique du gaz parfait. La valeur de 0,634 correspondant au rapport ρ/ρ_0 avec ρ_0 la masse volumique dans le réservoir. Les trois courbes correspondent donc à l'écart avec la masse volumique obtenue avec le gaz

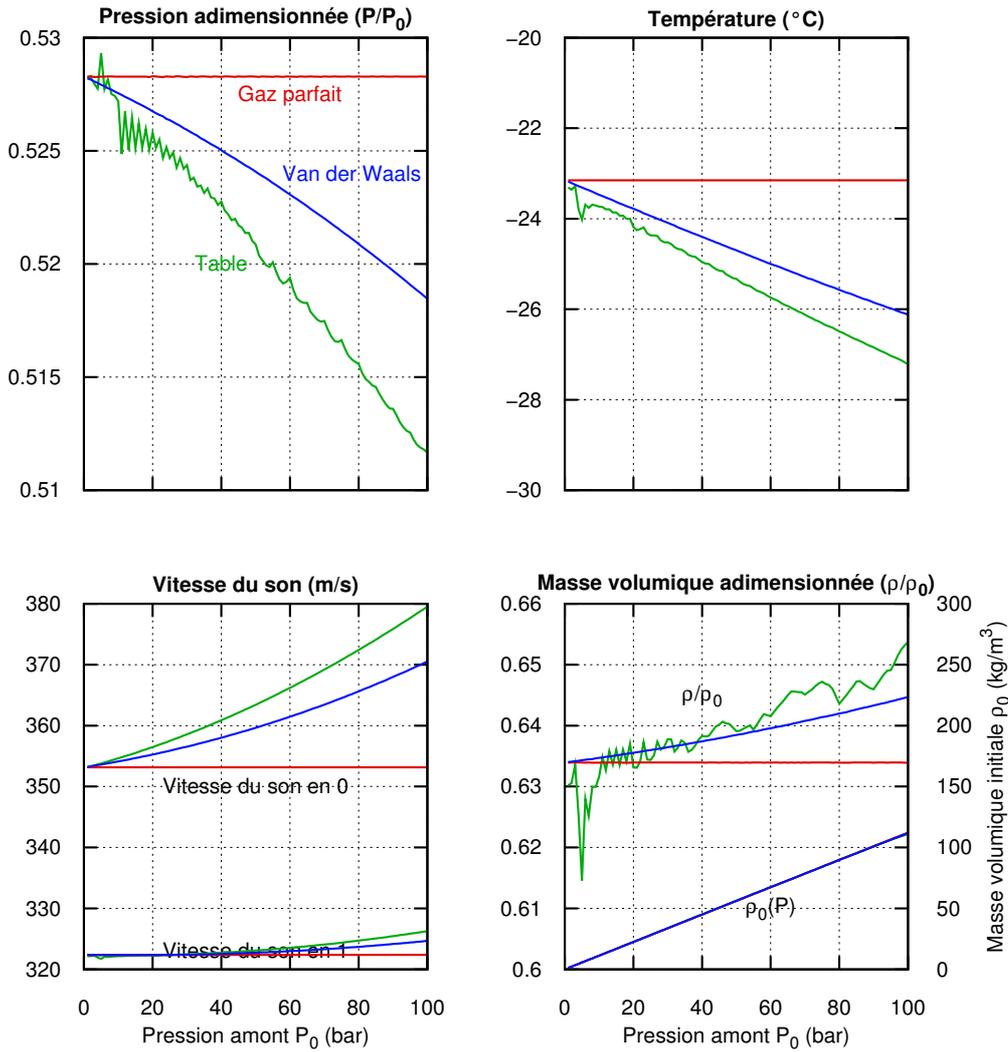


Figure A.16 – Evolution des conditions de Laval pour différents modèles en fonction de la pression du réservoir. La température du gaz est de $T_0 = 27 \text{ °C}$. Le gaz utilisé est de l'azote.

parfait dans le réservoir (courbe bleue $\rho_0(P)$). Les perturbations sur la courbe verte sont relativement importantes aux faibles pressions à cause d'un échantillonnage insuffisant des tables.

La figure (Fig.A.17) présente l'évolution des mêmes grandeurs précédentes mais avec des pressions allant jusqu'à 1000 bar. Globalement, on constate que le gaz de Van der Waals et les tables thermodynamiques sont en bon accord. On note notamment que les résultats concordent bien pour l'évolution de la masse volumique et la vitesse du son.

Comparaison azote/hydrogène :

Dans le cadre du projet H2E, plusieurs essais de remplissage ont été réalisés avec de l'azote. Il

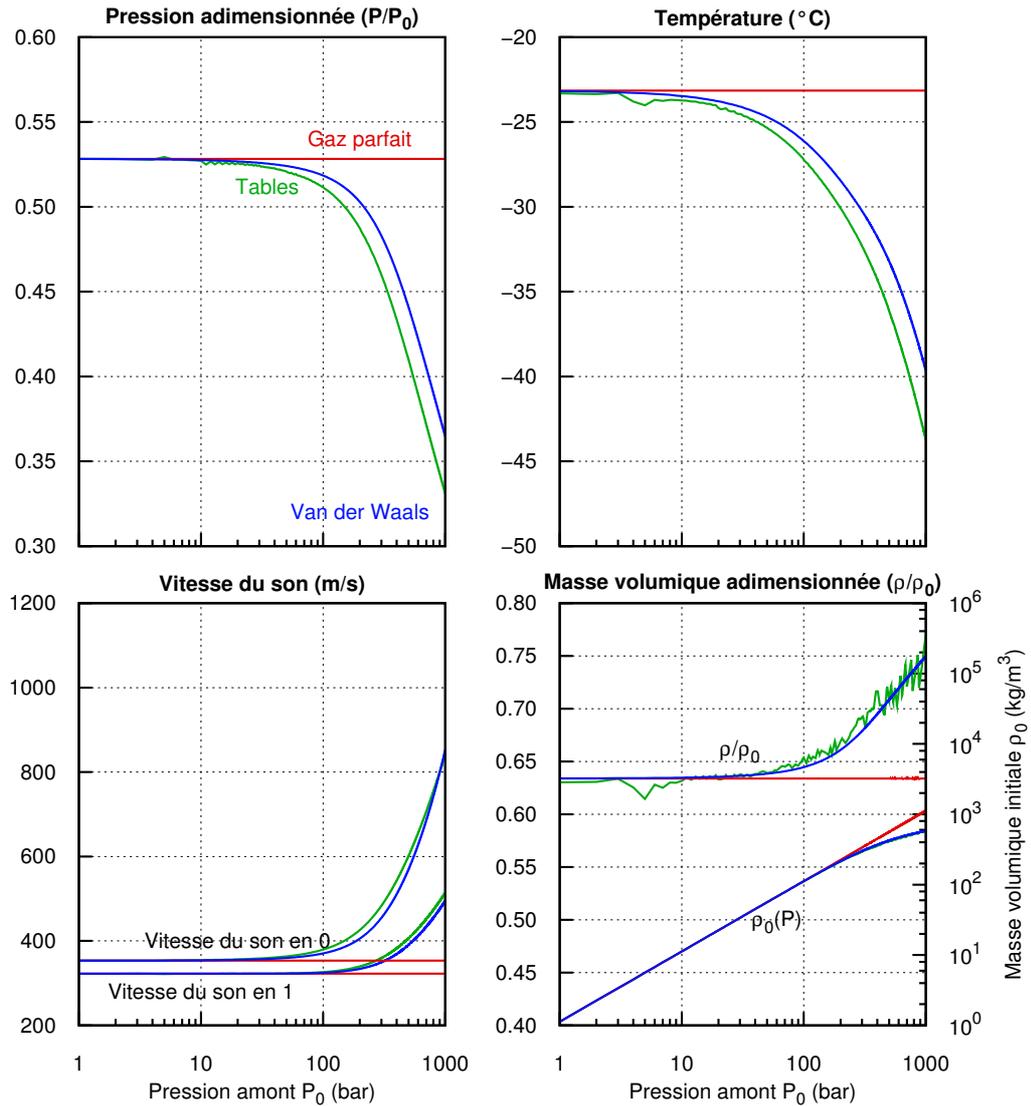


Figure A.17 – Evolution des conditions de Laval pour différents modèles en fonction de la pression du réservoir. La température du gaz γ est de $T_0 = 27^\circ\text{C}$.

est donc intéressant de comparer les conditions de Laval pour ces deux gaz (Fig.A.18), puisque ce sont les conditions de Laval qui vont déterminer l'évolution de la température et de la pression lors du remplissage.

L'azote et l'hydrogène ont visiblement un comportement assez différent pour des pressions supérieures à 100 *bar*. Au niveau de la vanne (du col), la pression de Laval s'écarte significativement des valeurs 0,5 dans le cas de l'azote ce qui signifie que l'écoulement sera plus rapidement subsonique qu'avec de l'hydrogène. La température montre également la même tendance : à 1000 *bar*, l'azote voit sa température diminuer de 70°C par rapport à sa température initiale de 27°C .

Concernant la vitesse du son, l'hydrogène se distingue avec une vitesse qui dépasse 1 *km/s*,

voir 2 km/s avec un réservoir sous une pression de 1000 bar . Pour la masse volumique, on constate un rapport de 10 entre l'azote et l'hydrogène : l'azote est 10 fois plus dense. De plus, le rapport ρ/ρ_0 montre que la variation de masse volumique entre le réservoir et le vanne se résorbe partiellement avec des pressions importantes.

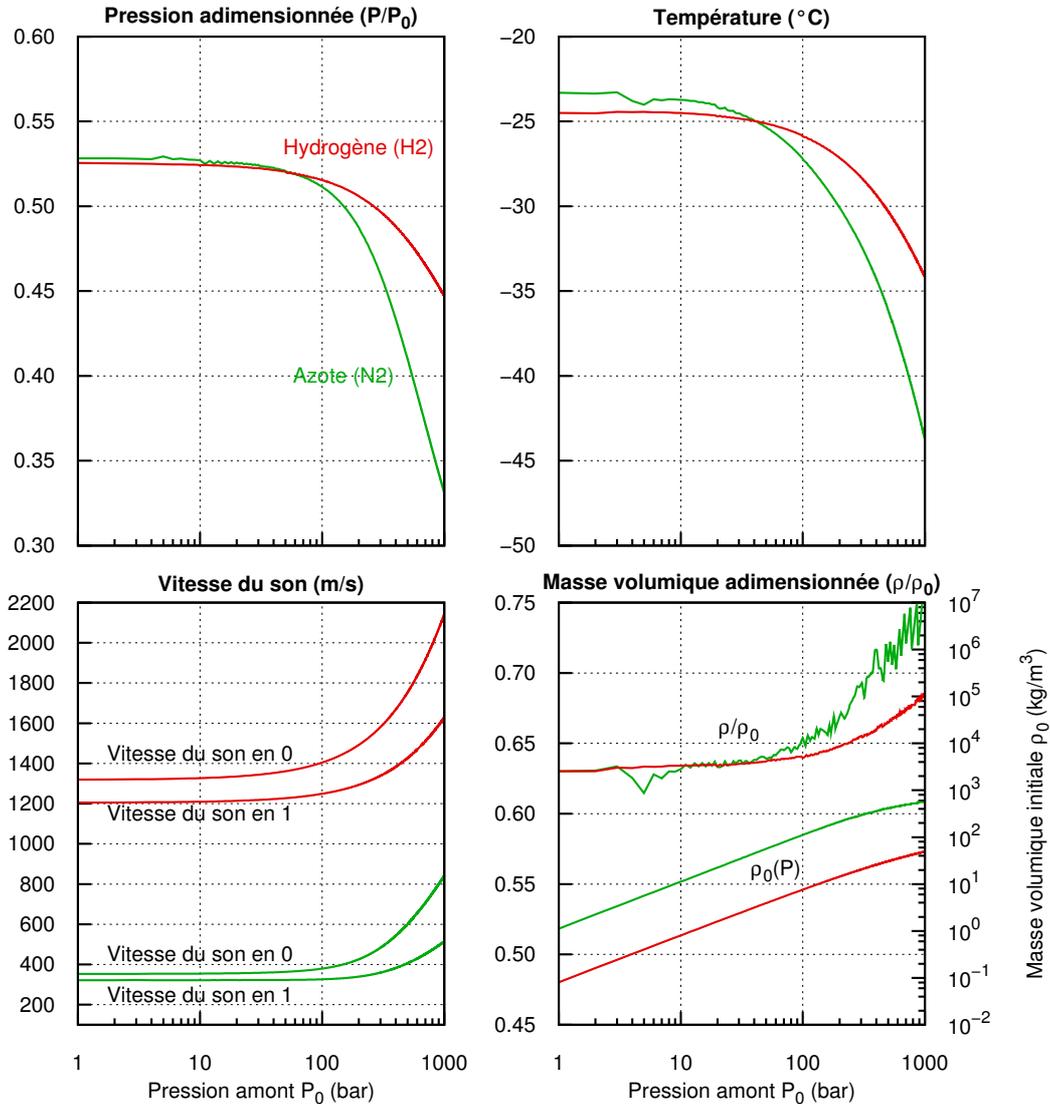


Figure A.18 – Comparaison des conditions de Laval pour l'azote (en vert) et l'hydrogène (en rouge) en fonction de la pression du réservoir. La température du gaz dans celui-ci est de $T_0 = 27^{\circ}\text{C}$.

L'évolution des différentes grandeurs pour l'hydrogène (Fig.A.18) présente significativement moins de bruit que pour l'azote. La table de l'hydrogène a en effet été construite plus finement. En conclusion, même si les tendances générales sont les mêmes, il s'avère difficile à ce stade de savoir si les deux gaz auront un comportement similaire pendant le remplissage.

10.3.3 Résolution numérique

Un schéma de principe de l'algorithme de résolution est présenté sur la figure (Fig.A.19). Le système d'équation (A.10.142) est résolu en utilisant un schéma d'Euler explicite.

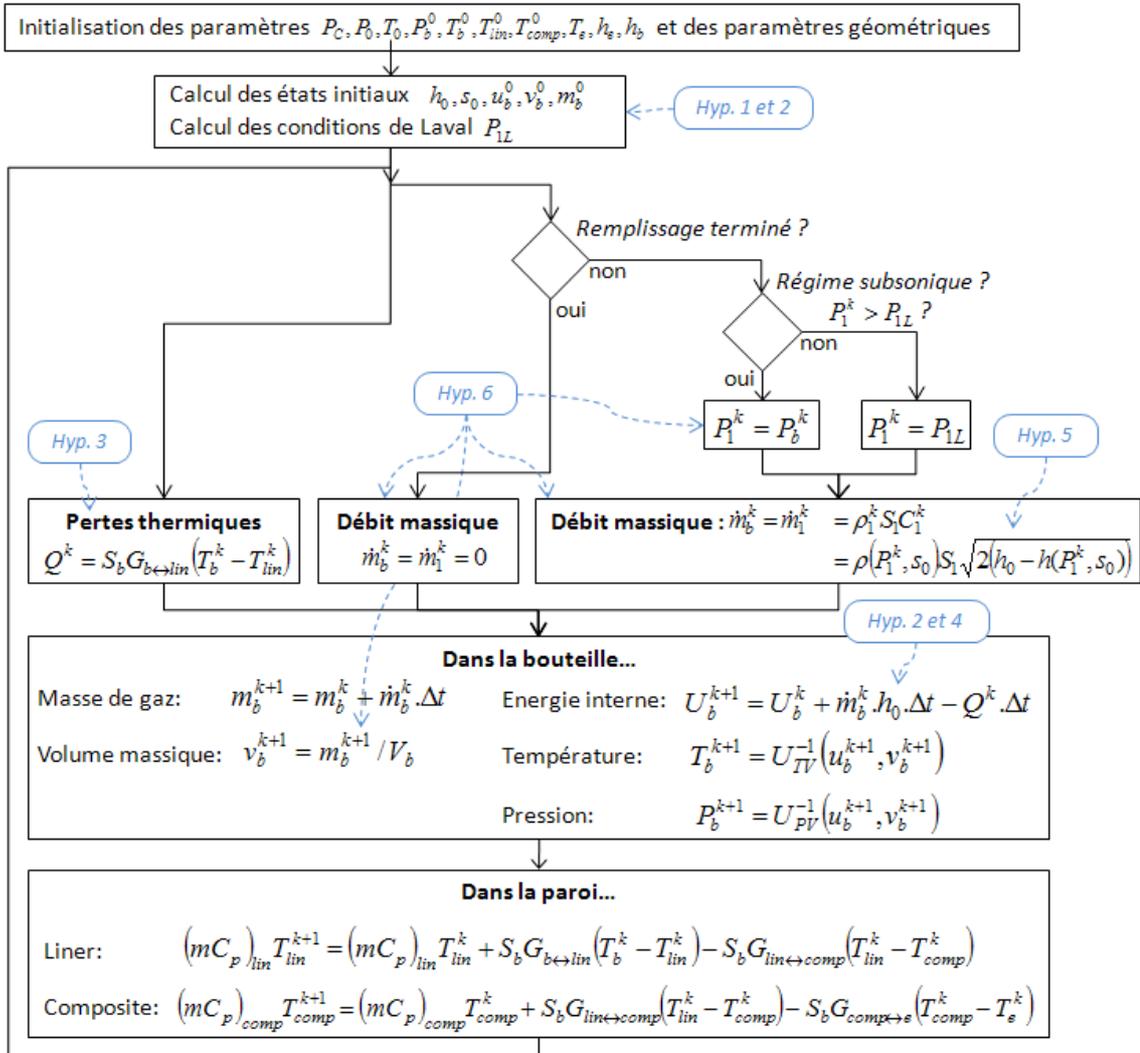


Figure A.19 – Schéma de principe de la simulation numérique.

La première étape consiste à calculer l'état du gaz en termes d'entropie et d'enthalpie dans le réservoir. On calcule alors les conditions de Laval (notamment P_{1L}) au niveau de la vanne en supposant la détente isentropique. Le processus itératif commence alors. A chaque itération, on détermine si la pression de la bouteille a atteint la pression de consigne. Si c'est le cas, le débit massique est nul. A l'inverse, on compare la pression de la bouteille P_b^k (à l'instant t_k) à la pression de Laval. Si P_b^k est supérieure, alors l'écoulement est subsonique et la pression à la fin de la détente (au niveau de la vanne) est égale à la pression de la bouteille. Sinon, l'écoulement est bloqué et la pression au niveau de la vanne est égale à la pression de Laval.

Une fois que l'on connaît la pression au niveau de la vanne, on peut déterminer l'enthalpie

du gaz (puisque l'on connaît aussi son entropie s_0). L'enthalpie, puis la variation d'enthalpie totale, permet ensuite de calculer la vitesse du gaz au niveau de la vanne, ce qui donne accès au débit massique.

L'avant dernière bloc « Dans la bouteille » met à jour la masse du gaz m_b^{k+1} (en $[kg]$) dans la bouteille, recalcule la masse volumique v_b^{k+1} (en $[m^3 kg^{-1}]$), l'énergie interne U_b^{k+1} (en $[J]$), la température T_b^{k+1} , nécessaire pour calculer les pertes avec la paroi (l'effet est probablement négligeable pendant le remplissage), et enfin, extrait la pression P_b^{k+1} (en $[Pa]$) en inversant la table U_{PV} .

Quant au dernier bloc, il prend en compte la conduction thermique dans la paroi, représentée par deux noeuds : un pour le liner et un pour le composite.

Trois simulations ont été effectuées pour deux pressions de remplissage différentes : 50 et 350. La comparaison des résultats avec ceux de la littérature est difficile puisque l'expérimentation fait intervenir des systèmes dont on a aucune spécification [10]. De plus, les conditions limites ne sont pas exactement celles utilisées ici. Enfin, il faudrait faire évoluer le modèle développé ici pour permettre d'effectuer un remplissage graduellement à partir de plusieurs réservoirs à des pressions différentes [11].

10.4 Résultats

10.4.1 Remplissage à 50 bar

Les valeurs numériques des paramètres géométriques, thermiques, thermodynamiques et celles spécifiques à la méthode de résolution sont fournies dans le tableau (Tab.A.5). Certains paramètres ont été fixés de façon plus ou moins arbitraire. Par exemple, la pression du réservoir de 70 *bar* ne s'appuie sur aucune spécification technique réelle. Par ailleurs, le coefficient d'échange interne entre le gaz et la paroi a été déterminé approximativement en se basant sur des résultats expérimentaux. Ce dernier intervient dans la conductance thermique $G_{b \leftrightarrow lin}$.

Les résultats de la simulation sont présentés sur la figure (Fig.A.20). Quatre types de gaz sont considérés : le gaz parfait, le gaz de Van der Waals, l'azote et l'hydrogène. Les paramètres intervenant dans les équations d'état du gaz parfait et de Van der Waals sont calculés à l'aide des propriétés de l'azote. Il n'est donc pas étonnant que ces trois modèles concordent relativement bien. Les résultats sont présentés avec 3 sous-figures. La première montre l'évolution de la température du gaz, la température au niveau de la vanne (« inlet gas temperature »), la température moyenne du liner, la température de surface du liner (estimée), la température moyenne du composite. Quelques remarques avec cette première figure :

1. La croissance de la température a lieu de manière très brutale dans les premières secondes.

10 Modélisation 0D du remplissage d'une bouteille

Paramètres géométriques	Valeur	Description
D_b	30 <i>cm</i>	Diamètre interne de la bouteille
L_b	70,7 <i>cm</i>	Longueur interne de la bouteille
V_b	50 <i>L</i>	Volume interne de la bouteille
S_b	0,808 <i>m</i> ²	Surface interne de la bouteille
D_1	2,5 <i>mm</i>	Diamètre minimale de la canalisation

Paramètres thermiques	Valeur	Description
$(\rho C_p)_{lin}$	1,8.10 ⁶ <i>J/(kg.m</i> ³ <i>)</i>	Capacité thermique volumique
λ_{lin}	0,4 <i>W/(m.°C)</i>	Conductivité thermique du liner
e_{lin}	5 <i>mm</i>	Épaisseur du liner
$(\rho C_p)_{comp}$	1,3.10 ⁶ <i>J/(kg.m</i> ³ <i>)</i>	Capacité thermique volumique
λ_{comp}	0,8 <i>W/(m.°C)</i>	Conductivité thermique du composite
e_{comp}	5 <i>mm</i>	Épaisseur du composite
h_e	5 <i>W/(m</i> ² <i>.°C)</i>	Coefficient d'échange externe
h_b	60 <i>W/(m</i> ² <i>.°C)</i>	Coefficient d'échange interne
$G_{b \leftrightarrow lin}$	35,9 <i>W/(m</i> ² <i>.°C)</i>	Conductance bouteille ↔ liner
$G_{lin \leftrightarrow comp}$	90,6 <i>W/(m</i> ² <i>.°C)</i>	Conductance liner ↔ composite
$G_{comp \leftrightarrow e}$	3,98 <i>W/(m</i> ² <i>.°C)</i>	Conductance composite ↔ extérieur
$(mC_p)_{lin}$	7136 <i>J/°C</i>	Capacité thermique du liner
$(mC_p)_{comp}$	5371 <i>J/°C</i>	Capacité thermique du composite

Paramètres thermodynamiques	Valeur	Description
P_C	50 <i>bar</i>	Pression souhaitée dans la bouteille
P_0	70 <i>bar</i>	Pression du réservoir
T_0	20 <i>°C</i>	Température du réservoir
T_e	20 <i>°C</i>	Température extérieure
P_b^0	1 <i>bar</i>	Pression initiale de la bouteille
T_b^0	20 <i>°C</i>	Température initiale de la bouteille
T_{lin}^0	20 <i>°C</i>	Température initiale du liner
T_{comp}^0	20 <i>°C</i>	Température initiale du composite
$\rho_b^0 (H_2)$	0,0827 <i>kg/m</i> ³	Masse volumique initiale
$m_b^0 (H_2)$	4,1.10 ⁻³ <i>kg</i>	Masse initiale de gaz
$\rho_b^0 (N_2)$	1,15 <i>kg/m</i> ³	Masse volumique initiale
$m_b^0 (N_2)$	57.10 ⁻³ <i>kg</i>	Masse initiale de gaz

Paramètres divers	Valeur	Description
Δt	0,1 <i>s</i>	Pas de temps de la résolution

Tableau A.5 – Valeurs numériques des paramètres géométriques, thermiques et thermodynamiques de la simulation de remplissage à 50 *bar*.

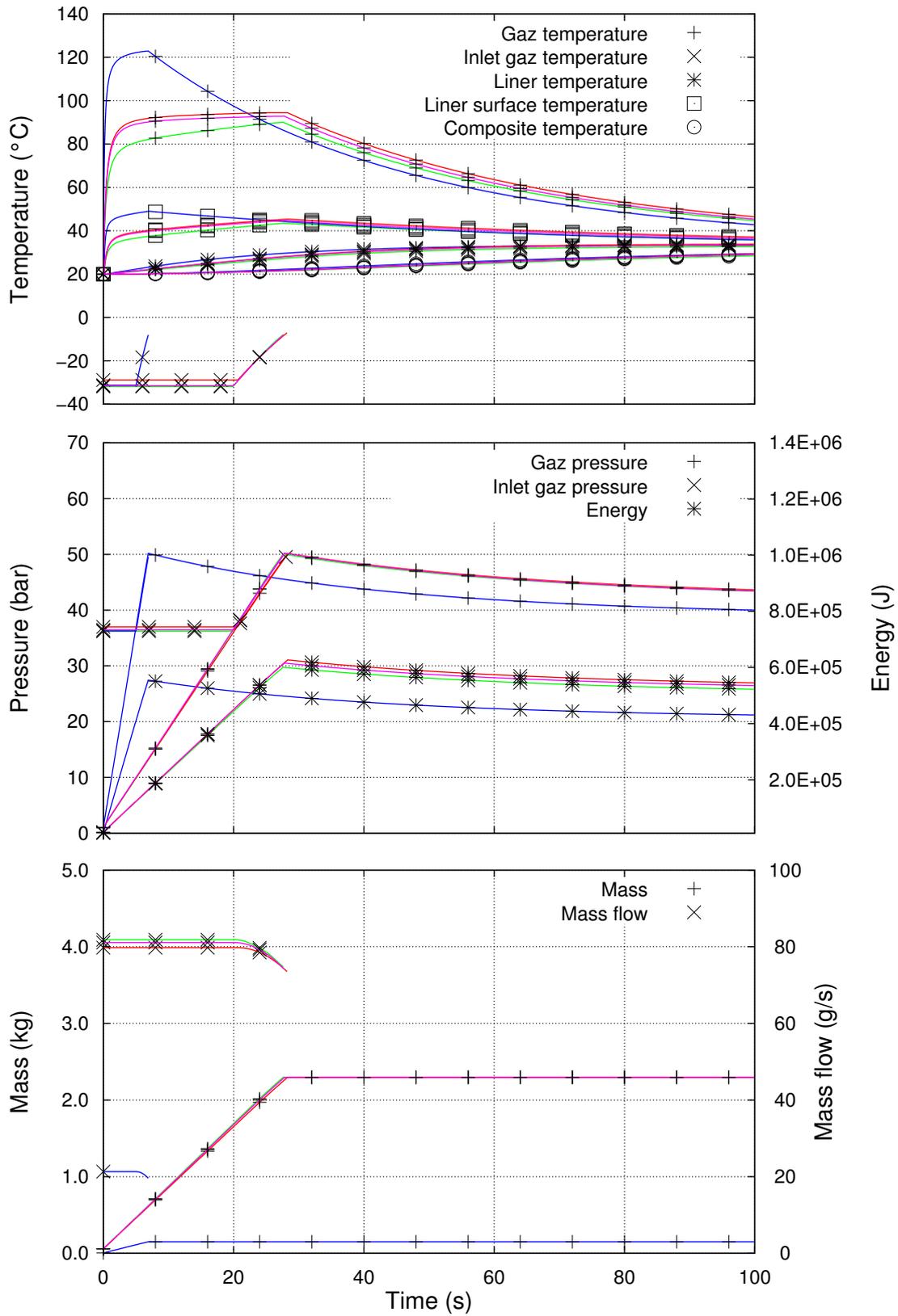


Figure A.20 – Résultats de la simulation de remplissage à 50 bar avec différents gaz. L'hydrogène en bleu, l'azote en vert, le gaz parfait en rouge et le gaz de Van der Waals en magenta.

2. Le remplissage de l'azote nécessite environ 30 s alors que le remplissage de l'hydrogène nécessite moins de 10 s.
3. Le gaz de Van der Waals ne semble pas apporter d'amélioration significative par rapport au gaz parfait dans cette gamme de pression.

La deuxième sous-figure montre l'évolution de la pression dans la bouteille, au niveau de la vanne (« inlet gaz pressure »), ainsi que la variation d'énergie interne du gaz dans la bouteille en fonction du temps. Quelques remarques :

1. Environ 70 % du temps de remplissage a lieu en régime sonique, ce que l'on constate en regardant l'évolution de la température, de la pression ou de la vitesse du gaz à l'entrée de la bouteille ou encore du débit massique de gaz.
2. Une fois la vanne d'entrée fermée, le gaz se refroidit doucement à cause des pertes dans la paroi, ce qui a pour effet de diminuer la pression dans la bouteille.

La dernière sous-figure montre l'évolution de la masse de gaz dans la bouteille ainsi que le débit massique. Le débit massique est constant tant que l'écoulement est en blocage sonique. Dès que la pression dans la bouteille devient supérieure à la pression de Laval, on remarque un déclin léger du débit massique. Si la vanne était laissée ouverte, ce débit tendrait vers 0 g/s à mesure que la pression dans la bouteille s'approcherait de la pression du réservoir. Par ailleurs, la faible masse volumique de l'hydrogène apparaît clairement ici. Il est difficile de stocker une masse importante d'hydrogène. La masse finale d'hydrogène est ici d'environ 0,15 kg. Enfin, la masse d'azote en fin de remplissage est de 2,3 kg alors que la masse maximale stockable à 50 bar et à 300 K est de $m_{max} = 2,8$ kg. Le taux de remplissage est donc de 82 %. Pour l'hydrogène, le taux de remplissage est de 76 %.

10.4.2 Remplissage à 350 bar

Les bouteilles d'hydrogène de 350 bar sont déjà couramment utilisées par de nombreux constructeurs automobiles pour leurs prototypes de véhicules à hydrogène. Pour un remplissage à cette pression, Air Liquide est à l'origine de la construction d'une station de remplissage utilisant des réservoirs de 410 bar [11]. Aussi, on utilise cette pression pour la simulation.

Les données numériques sont identiques à la simulation précédente. Seule la pression du réservoir et la pression de consigne changent (Tab.A.6). Les résultats de la simulation sont présentés sur la figure (Fig.A.21). Quelques remarques :

- Les températures ont augmenté en moyenne de 40 °C par rapport au remplissage à 50 bar.
- On constate que le fait de travailler à une pression plus élevée génère une erreur plus importante de la simulation utilisant un modèle de gaz parfait. Le gaz de Van der Waals

Paramètres thermodynamiques	Valeur	Description
P_C	350 <i>bar</i>	Pression souhaitée dans la bouteille
P_0	410 <i>bar</i>	Pression du réservoir
T_0	20 °C	Température du réservoir
T_e	20 °C	Température extérieure
P_b^0	1 <i>bar</i>	Pression initiale de la bouteille
T_b^0	20 °C	Température initiale de la bouteille
T_{lin}^0	20 °C	Température initiale du liner
T_{comp}^0	20 °C	Température initiale du composite

Tableau A.6 – Valeurs numériques des paramètres thermodynamiques pour une simulation de remplissage à 350 *bar*.

quant à lui surestime la température, mais anticipe bien la masse de gaz stockée dans la bouteille.

- Le taux de remplissage de l’hydrogène est de 73 %. Celui de l’azote est de 74 %.

10.5 Synthèse

Le modèle 0D présenté ici constitue une première étape de modélisation. De nombreuses améliorations peuvent être apportées. L’idéal serait de disposer d’information plus précise sur les chaînes de remplissage réelles. En général, celles-ci disposent de plusieurs réservoirs de pression croissante pour éviter d’utiliser un unique réservoir sous forte pression. Il faudrait aussi connaître quel est le type de la commande sur laquelle l’utilisateur peut agir. Ici, il s’agit de la section de passage de la vanne. On contrôle ainsi indirectement le débit massique et la vitesse de remplissage. Suivant la longueur des canalisations, il serait peut être nécessaire de prendre en compte les échanges thermiques fluide-canalisation si elles s’avèrent significatives. Au niveau de la bouteille, on pourrait utiliser un modèle de paroi plus réaliste avec un nombre de noeuds plus important. Quant à la résolution numérique, une première amélioration est d’améliorer la recherche dans les tables thermodynamiques pour réduire les phénomènes d’oscillation visibles sur certaines courbes. Utiliser un schéma temporel implicite permettrait par ailleurs de rendre les résultats moins sensibles au pas de temps utilisé.

Enfin, il reste un travail de validation à effectuer pour s’assurer que les hypothèses utilisées par le modèle sont raisonnables et que l’on parvient à reproduire correctement le phénomène de remplissage ou de vidange des bouteilles.

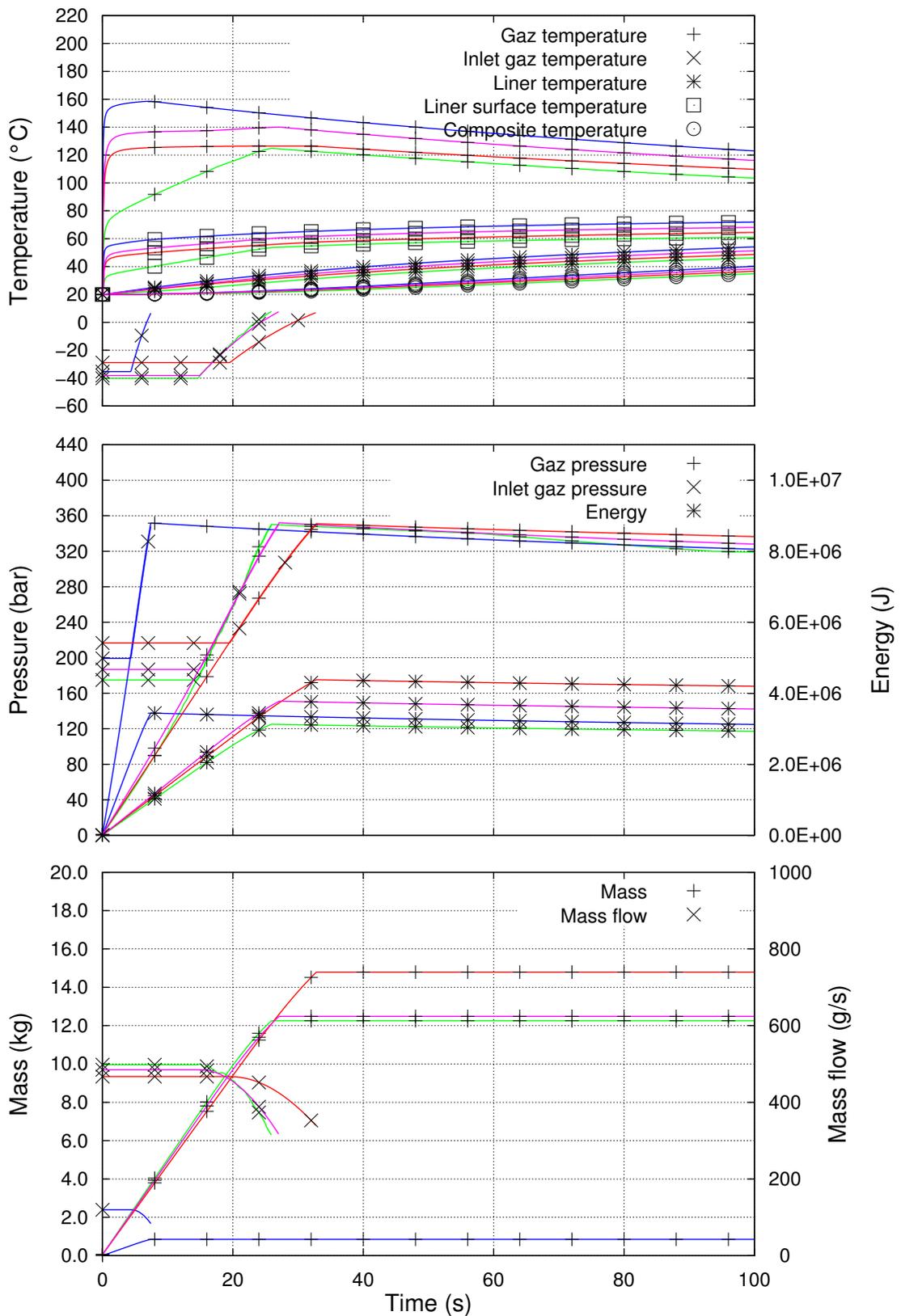


Figure A.21 – Résultats de la simulation de remplissage à 350 bar avec différents gaz. L'hydrogène en bleu, l'azote en vert, le gaz parfait en rouge et le gaz de Van der Waals en magenta.

10.6 Supplément

10.6.1 Loi de Laplace

Les relations A.10.168 et A.10.169 constituent le premier principe de la thermodynamique.

$$du = \delta Q + \delta W \quad (\text{A.10.168})$$

$$ds = \frac{\delta Q}{T} \quad (\text{A.10.169})$$

Dans le cas d'un gaz parfait et d'une transformation isentropique, on peut alors écrire les différentes relations :

$$\frac{dT}{T} = (1 - \gamma) \frac{dV}{V} \quad (\text{A.10.170})$$

$$\frac{dP}{P} = -\gamma \frac{dV}{V} \quad (\text{A.10.171})$$

On obtient finalement à partir de la relation A.10.171 une version de la loi de Laplace bien connue :

$$\frac{dP}{P} = -\gamma \frac{dV}{V} \Leftrightarrow V^\gamma dP + \gamma P V^{\gamma-1} dV = 0 \Leftrightarrow d(PV^\gamma) = 0 \quad (\text{A.10.172})$$

10.6.2 Vitesse du son dans un gaz de Van der Waals

La définition est de la vitesse du son est donnée par la relation A.10.145. Dans le cas d'un gaz de Van der Waals, la grandeur suivante est conservée sur une isentropique :

$$T(v - b)^{\frac{r}{C_v}} = \text{constante} \quad (\text{A.10.173})$$

En dérivant par le volume massique v , on obtient :

$$\begin{aligned} 0 &= (v - b)^{\frac{r}{C_v} + 1} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_s - \frac{2a}{v^3} \right] + \left(P + \frac{a}{v^2} \right) \left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) (v - b)^{\frac{r}{C_v}} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_s &= - \left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{rT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{v^3} \end{aligned}$$

Or :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{v} \\ \Rightarrow \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s &= -v^2 \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_s \end{aligned}$$

On obtient alors l'expression de la vitesse du son :

$$C_s = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s} = \sqrt{\left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{rT}{(1 - \rho b)^2} - 2\rho a} \quad (\text{A.10.174})$$

10.6.3 Calcul des conditions au col avec un gaz de Van der Waals

Pour déterminer l'état thermodynamique du gaz au niveau du col de la canalisation, on commence par exprimer la vitesse du gaz au col en fonction des conditions amonts P_0, T_0, v_0 et des conditions de Laval P_V, T_V, v_V et en utilisant la conservation de l'enthalpie totale :

$$\begin{aligned} C_{1L}^2 &= 2(h_0 - h_{1L}) = 2(U_0 + P_0 v_0 - U_{1L} - P_{1L} v_{1L}) \\ &= 2 \left[C_v(T_0 - T_{1L}) + a \left(\frac{1}{v_{1L}} - \frac{1}{v_0} \right) + (P_0 v_0 - P_{1L} v_{1L}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.10.175})$$

Les conditions de Laval sont celles atteintes au blocage sonique, la vitesse du gaz est donc égale à la vitesse du son :

$$C_{1L}^2 = \left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{rT}{(1 - \rho b)^2} - 2\rho a \quad (\text{A.10.176})$$

La résolution est immédiate en partant des relations (Eq.A.10.175) et (Eq.A.10.176) :

$$0 = 2 \left[C_v(T_0 - T_{1L}) + a \left(\frac{1}{v} - \frac{1}{v_0} \right) + P_0 v_0 - P_{1L} v_{1L} \right] - \left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{rT}{(1 - \frac{b}{v})^2} + \frac{2a}{v}$$

Comme la détente de 0 à 1 (Fig.A.13) est supposée isentropique, les relations (Eq.A.10.140) et A.10.141 nous permettent d'écrire :

$$T = T_0 \left(\frac{v_0 - b}{v - b} \right)^{\frac{r}{C_v}} \quad (\text{A.10.177})$$

$$P = \left(P_0 + \frac{a}{v_0^2} \right) \left(\frac{v_0 - b}{v - b} \right)^{\frac{r}{C_v} + 1} - \frac{a}{v^2} \quad (\text{A.10.178})$$

En substituant ces deux relations dans (Eq.10.6.3), on obtient finalement :

$$\begin{aligned} 0 = & 2C_v T_0 \left[1 - \left(\frac{v_0 - b}{v - b} \right)^{\frac{r}{C_v}} \right] + 2a \left(\frac{3}{v} - \frac{1}{v_0} \right) + 2P_0 v_0 - \\ & 2v \left(P_0 + \frac{a}{v_0^2} \right) \left(\frac{v_0 - b}{v - b} \right)^{\frac{r}{C_v} + 1} - v^2 \left(\frac{r}{C_v} + 1 \right) \frac{P_0 + \frac{a}{v_0^2}}{v_0 - b} \left(\frac{v_0 - b}{v - b} \right)^{\frac{r}{C_v} + 2} \end{aligned}$$

Comme il est a priori impossible de déterminer la solution v_{1L} directement, on définit la fonction $f(v)$ à partir de l'expression précédente. L'objectif est maintenant de déterminer un zéro de f dans l'intervalle $[0; v_0]$. L'unicité de cette solution n'a pas été mathématiquement démontré, étant donné la lourdeur de l'expression. Numériquement cependant, la courbe semble être monotone dans l'intervalle $[0 : v_0]$. Pour déterminer le zéro de f , on utilise la méthode itérative de Newton définie par :

$$v_{k+1} = v_k - \frac{f(v_k)}{f'(v_k)}$$

11 Régression de droite avec l'estimateur EMLE

Cette annexe présente une application de l'estimateur « extended maximum likelihood estimator » [12, 13], ou EMLE à un problème de régression droite.

Cet exemple permet de montrer que l'estimateur EMLE est plus performant que l'autre approche (§1.4.2 p226) qui consiste à simplement intégrer l'effet des paramètres supposés dans l'expression de la solution $\hat{\beta}$ donnée par l'estimateur MLE. Pour illustrer cela, on considère un problème de régression linéaire :

$$y = at + b \quad (\text{A.11.179})$$

Les paramètres inconnus à estimer sont $\beta = [a, b]^T$.

De façon à biaiser volontairement notre modèle, les observables sont générés avec un modèle quadratique en t :

$$Y_i^* = at + b + ct^2 + e_i \quad (\text{A.11.180})$$

Avec $a = 1$, $b = 2$, $c = 0,02$. On suppose que c et le bruit de mesure e_i suivent des lois normales $\mathcal{N}(\mu = 0,02, \sigma_c^2)$ et $e_i = \mathcal{N}(0, \sigma_m^2)$ avec $\sigma_m = 0,5$ ainsi que $\sigma_c = 0,02$.

Les observables suivent une loi quadratique en temps, mais le modèle utilisé pour la régression considère que $c = 0$. Le paramètre supposé connu c n'est donc pas correctement spécifié, ce qui génère une erreur de modèle. Les deux matrices de variance-covariance inverse W et W_{emle} sont :

$$W = \frac{1}{\sigma_m^2} \mathbf{I} \quad \implies (W)_{i,j} = \sigma_m^2 \delta_{i,j} \quad (\text{A.11.181})$$

$$\begin{aligned} W_{\text{emle}} &= \left[\sigma_m^2 + X_\gamma \text{cov}(\gamma) X_\gamma^T \right]^{-1} \\ &= \left[\sigma_m^2 + \sigma_c^2 X_\gamma X_\gamma^T \right]^{-1} \quad \implies (W_{\text{emle}})_{i,j} = \sigma_m^2 \delta_{i,j} + \sigma_c^2 t_i^2 t_j^2 \quad (\text{A.11.182}) \\ &\quad \text{avec } X_\gamma = [t_1^2, \dots, t_m^2]^T \quad \text{et } \text{cov}(\gamma) = \sigma_c^2 \end{aligned}$$

Contrairement à la matrice de variance-covariance classique, l'écart-type du bruit équivalent n'est pas constant mais augmente de manière quadratique. On peut maintenant exprimer les solutions $\hat{\beta}$ et $\hat{\beta}_{\text{emle}}$:

$$\hat{\beta} = \left[X^T W X \right]^{-1} X^T W Y^* \quad (\text{A.11.183})$$

$$\hat{\beta}_{\text{emle}} = \left[X^T W_{\text{emle}} X \right]^{-1} X^T W_{\text{emle}} Y^* \quad (\text{A.11.184})$$

Les figures (Fig.A.22.(a) et (b)) montrent l'effet du bruit équivalent sur le résultat de l'esti-

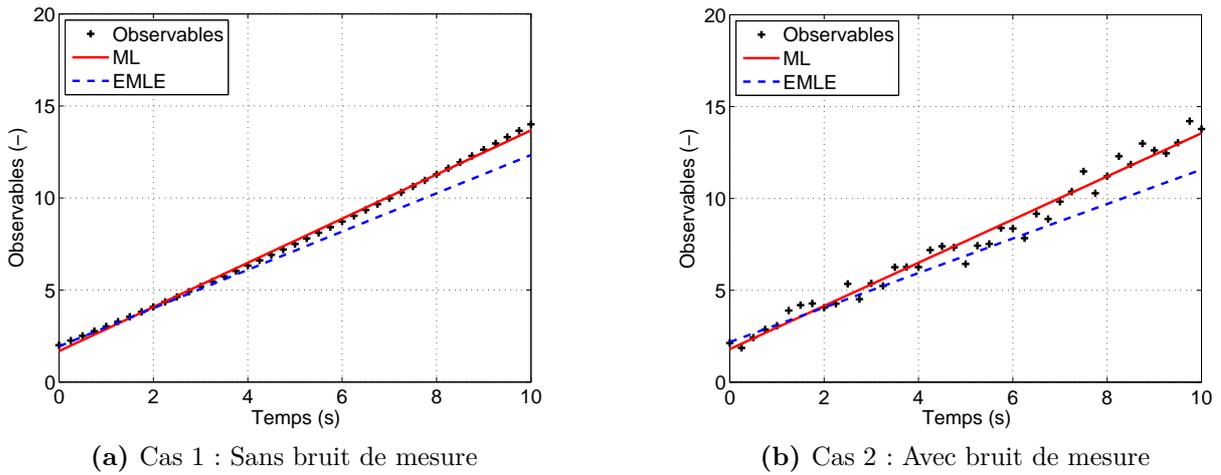


Figure A.22 – Comparaison des estimateurs MLE et EMLE avec $a = 1$, $b = 2$, $c = 0,02$, $\sigma_m = 0,5$ et $\sigma_c = 0,02$.

mation. D'un côté, l'estimateur MLE classique donne autant de poids aux observables correspondants aux temps courts qu'à ceux correspondants aux temps longs. A l'inverse, comme les observables des temps longs sont plus sensibles à la valeur de c , l'estimateur EMLE privilégie les données aux temps courts. Comme le montre le tableau ci-dessous, la solution fournie par l'estimateur MLE est plus biaisée que celle fournie par l'estimateur EMLE (les valeurs entre parenthèses correspondent aux valeurs exactes) :

Estimateur	Solutions		Ecart-type	
	$a (= 1)$	$b (= 2)$	σ_a	σ_b
MLE	1,20	1,68	0,20	0,36
EMLE	1,04	1,94	0,09	0,21

Ce tableau donne aussi les écarts-types théoriques des estimations. Les matrices de variance-covariance de $\hat{\beta}$ et $\hat{\beta}_{emle}$ sont données respectivement par les relations (Eq.4.15) et (Eq.4.13). Bien que le biais de l'estimateur MLE est plus important, l'écart-type qu'il annonce est suffisamment grand pour que la valeur exacte soit comprise dans l'intervalle de confiance à 95 %. De même pour l'estimateur EMLE, l'intervalle de confiance contient bien la valeur exacte. Par ailleurs, contrairement à l'estimateur MLE qui tente de minimiser les résidus, l'estimateur EMLE génère des résidus visuellement assez important aux temps longs, mais qui reste admissible avec l'écart-type du bruit équivalent.

En conclusion, lorsque certains paramètres supposés connus « le sont mal », l'estimateur EMLE peut fournir une solution moins biaisée et avec une variance plus faible que l'estimateur MLE.

Références bibliographiques

- [1] NECATI ÖZISIK. *Heat conduction - Second Edition*. Wiley-Interscience Publication (1993).
- [2] D. MAILLET, S. ANDRÉ, J-C. BATSALE, A. DEGIOVANNI, AND C. MOYNE. *Thermal quadrupoles - Solving the heat equation through integral transforms*. Wiley (2000).
- [3] E.A. GONZALEZ-VELASCO. *Fourier Analysis and Boundary Value Problems*. Academic Press (1995).
- [4] P. HERVÉ. *Mesure de l'émissivité thermique*. Techniques de l'Ingénieur **R2737** (2005).
- [5] D. PAJANI. *Mesure par thermographie infrarouge*. Add Editeur (1989).
- [6] B.W. SILVERMAN. *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*. Chapman and Hall/CRC (1986).
- [7] Z. OUYANG. Univariate kernel density estimation. Lien : <http://www.stat.duke.edu/~zo2/shared/research/readings/kernelsmoothing.pdf> (18-09-2011), (2005).
- [8] P. BRÉMAUD. *Introduction aux probabilités*. Springer-Verlag (1988).
- [9] L. BOREL AND D. FAVRAT. *Thermodynamique et énergétique - De l'énergie à l'exergie*. Presses polytechniques et universitaires romandes (2005).
- [10] C.J.B DICKEN AND W. MÉRIDA. *Measured effects of filling time and initial mass on the temperature distribution within a hydrogen cylinder during refuelling*. Journal of Power Sources **165**, 324–336 (2007).
- [11] S. PREGRASSAME, K. BARRAL, ALLIDIERES.L, T. CHARBONNEAU, AND Y. LACOMBE. Operation feedback of hydrogen filling station. In *Hydrogen and Fuel Celles - Conference and Trade Show*, Toronto September (2004).
- [12] T. D. FADALE, A. NENAROKOMOV, AND A. F. EMERY. *Uncertainties in parameter estimation : the inverse problem*. Int. J. Heat Mass Transfer **38**(3) (1995).
- [13] T. D. FADALE, A. NENAROKOMOV, AND A. F. EMERY. *Uncertainties in parameter estimation : the optimal experiment design*. Int. J. Heat Mass Transfer **43** (2000).

Estimation de paramètres et de conditions limites thermiques en conduction instationnaire pour des matériaux anisotropes. Apport des algorithmes stochastiques à la conception optimale d'expérience.

Cette étude porte sur deux types de problèmes inverses en thermique : l'estimation de propriétés thermophysiques de matériaux anisotropes et l'estimation de conditions limites.

Dans un premier temps, la méthode flash 3D permet d'estimer la diffusivité thermique dans les trois directions principales d'un matériau anisotrope. Pour cela, un dispositif expérimental spécifique a été développé. Il s'appuie essentiellement sur un laser CO_2 comme source de puissance thermique et sur la thermographie infrarouge comme instrument de mesure. En associant à l'expérimentation un modèle analytique des transferts thermiques dans l'échantillon, un estimateur permet d'obtenir les diffusivités thermiques recherchées. Au cours de ce travail, différents estimateurs ont été proposés et comparés à travers notamment leurs écarts types. Par ailleurs, il est proposé également une méthode de conception optimale d'expérience permettant de diminuer davantage ces écarts types.

Dans un deuxième temps, on s'intéresse à l'estimation de conditions aux limites thermiques d'un système faisant intervenir les matériaux dont on connaît les propriétés thermophysiques, à partir de mesures de température par thermocouples. La première application concerne la caractérisation des transferts thermiques instationnaires gaz-paroi pendant la phase de remplissage de bouteilles d'hydrogène haute pression. La seconde application porte sur l'estimation du flux de chaleur absorbé par des matériaux composites soumis à une flamme oxygène/acétylène.

Ces travaux font appel à différentes méthodes d'optimisation, aussi bien des algorithmes classiques de type gradient, que des algorithmes stochastiques. Ces derniers se sont révélés particulièrement adaptés à la conception optimale d'expériences.

Mots clés : Conduction thermique, méthodes inverses, méthodes Bayésiennes, méthode flash, matériaux anisotropes, thermographie infrarouge, SVD, métaheuristiques

Estimation of parameters and limit boundary conditions of unsteady thermal conduction problems with anisotropic materials. Contribution of stochastic algorithms to optimal experiment design.

This study deals with the resolution of two types of inverse heat transfer problem : estimation of thermophysical parameters and estimation of thermal boundary conditions.

A first part is devoted to the 3D-flash method which is used to estimate the three thermal diffusivities corresponding to the three principal directions of an anisotropic material. This work led to the realization of a experimental setup. The thermal excitation is provided by a CO_2 laser and the temperature fields are acquired using infrared thermography. The thermal diffusivities are estimated by combining an estimator, an experiment and an analytical modeling. Different estimators are proposed and compared, based on their standard deviations. Moreover, a procedure to perform experiment design is presented to further reduce these standard deviations.

In the second part, two studied cases consisting in estimating thermal boundary conditions are presented. Both underlying systems involve materials whose thermal properties are known. The thermal boundaries are estimated using temperature measurement provided by thermocouples. The first case deals with the evaluation of heat transfer between the gas and the inner-surface of a high pressure hydrogen tank. In the second case, the objective is to estimate the heat flux absorbed by a composite sample exposed to an oxygen-acetylene torch, in order to simulate the ablation phenomena under extreme conditions.

Optimization algorithms are essential in this work. Gradient-based methods are used for parameters estimation and thermal boundary estimation problems. Stochastic algorithms appear to be well adapted in the framework of experiment design problems.

Keywords : Conduction, inverse methods, Bayesian methods, flash method, anisotropic materials, infrared thermography, SVD, metaheuristics