



HAL
open science

Conception d'un détecteur de système mécatronique mobile intelligent pour observer des molécules en phase gazeuse en IR

Mohamed Chakchouk

► To cite this version:

Mohamed Chakchouk. Conception d'un détecteur de système mécatronique mobile intelligent pour observer des molécules en phase gazeuse en IR. Génie mécanique [physics.class-ph]. Normandie Université; Université de Sfax (Tunisie), 2024. Français. NNT : 2024NORMIR06 . tel-04741023

HAL Id: tel-04741023

<https://theses.hal.science/tel-04741023v1>

Submitted on 17 Oct 2024

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.



Normandie Université



THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité **MECANIQUE DES FLUIDES, ENERGETIQUE, THERMIQUE, COMBUSTION, ACOUSTIQUE**

Préparée au sein de l'**INSA Rouen Normandie**

En cotutelle internationale avec l'**Université de Sfax-Tunisie, TUNISIE**

Conception d'un détecteur de système mécatronique mobile intelligent pour observer des molécules en phase gazeuse en IR.

Présentée et soutenue par
MOHAMED CHAKCHOUK

Thèse soutenue le 12/04/2024
devant le jury composé de :

M. ABDELKHALAK EL HAMI	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - INSA Rouen Normandie	Directeur de thèse
M. MOHAMED HADDAR	PROFESSEUR - Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax / Tunisie	Co-directeur de thèse
M. ABDELGHANI SAOUAB	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - Université Le Havre Normandie	Président du jury
M. PIERRE RICHARD DAHOO	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - Université de Versailles	Membre
M. WAJIB GAFSI	MAÎTRE DE CONFÉRENCES - Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax	Membre
MME LAMIAE VERNIERES	MAITRE DE CONFERENCES DES UNIVERSITES HDR - INSA Rouen Normandie	Membre
M. MNAOUAR CHOUCANE	PROFESSEUR - Ecole Nationale d'Ingénieur de Monastir	Rapporteur
M. MOHAMED ICHCHOU	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS - Ecole Centrale de Lyon	Rapporteur

Thèse dirigée par **ABDELKHALAK EL HAMI** (LABORATOIRE DE MECANIQUE DE NORMANDIE) et **MOHAMED HADDAR** (Laboratoire de Recherche de Mécanique, Modélisation et Productique)



Remerciement

Le présent travail, qui s'inscrit dans le cadre d'une convention en cotutelle internationale de thèse, a été mené aux seins du Laboratoire de Mécanique de Normandie (LMN) de l'INSA de Rouen Normandie et du Laboratoire de Mécanique, Modélisation et Production (LA2MP) de l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax.

En tout premier lieu, je souhaite remercier mes directeurs de thèse, qui m'ont accordé leurs confiances en acceptant de diriger ma thèse. J'exprime ma profonde gratitude à Messieurs : **Prof. Abdelkhalak EL HAMI** pour son accueil, et sa disponibilité pendant mes séjours au Laboratoire de Mécanique de Normandie durant ma thèse, et pour son aide et ses précieux conseils.

Prof. Mohamed HADDAR pour sa grande disponibilité, sa rigueur scientifique, et pour son soutien permanent pendant mes séjours au Laboratoire de Mécanique, Modélisation et Production.

Mes sincères remerciements et ma profonde reconnaissance à monsieur **Pierre RICHARD DAHOO** professeur des Universités spécialiste de la modélisation et des spectroscopies, directeur de l'ISTY, l'école d'ingénieurs de l'UVSQ qui a co-encadré ce travail de recherche et qui a bien voulu m'aider pendant la durée de ma thèse.

Un grand merci à monsieur **Hichame MANNANE** pour ses conseils précieux qui ont grandement facilité mon travail.

Prof. Abdelghani SAOUAB de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma soutenance. **Prof. Mabrouk BEN TAHAR** et **M.jean-luc.REBIERE** d'avoir accepté la lourde tâche d'évaluer et de rapporter mes travaux.

Prof. Tahar. FAKHFAKH , **Prof Lamiae VERNIERES-HASSIMI** et **Prof Pierre Richard DAHOO** d'avoir accepté d'examiner ce mémoire.

Enfin, je tiens à remercier spécialement mes parents, mon épouse et mes amis qui m'ont encouragé pendant toute la période de mes travaux.

Résumé

Ce travail anticipe que, dans un monde technologique numérique en constante expansion, les percées technologiques dans l'analyse des données collectées par des dispositifs spectroscopiques permettront l'identification presque instantanée d'espèces connues observées in-situ dans un environnement spécifique, laissant l'analyse approfondie nécessaire aux espèces non observées. La méthode dérivée de la technologie RBDO (Reliability Based Design Optimisation) sera utilisée pour implémenter une procédure d'intelligence artificielle afin d'identifier les espèces observées à partir d'un capteur IR mobile. Afin d'analyser avec succès les données obtenues, il est nécessaire d'assigner de manière appropriée les espèces moléculaires à partir des données IR observées en utilisant les modèles théoriques appropriés. Ce travail se concentre sur l'observation à partir d'appareils mobiles équipés de capteurs, d'antennes et d'électronique appropriés pour capturer et envoyer des données brutes ou analysées à partir d'un environnement spectroscopique IR intéressant. Il est donc intéressant voir indispensable de se concentrer sur les outils théoriques basés sur la symétrie pour l'analyse spectroscopique des molécules, ce qui permet d'identifier les fenêtres IR à choisir pour l'observation dans la conception de l'appareil. Ensuite, en ajustant les paramètres théoriques spectroscopiques aux fréquences observées, le spectre d'une espèce moléculaire peut être reconstruit. Une déconvolution des spectres observés est nécessaire avant l'analyse en termes d'intensité, de largeur et de centre de raie caractérisant une forme de raie.

Une stratégie adéquate est donc nécessaire lors de la conception pour inclure l'analyse des données pendant la phase d'observation, qui peut bénéficier d'un algorithme d'intelligence artificielle pour tenir compte des différences dans la signature spectrale IR à cet égard, le pouvoir analytique des données de l'instrument peut être amélioré en utilisant la méthodologie d'optimisation de la conception basée sur la fiabilité (RBDO). Basée sur le comportement multiphysique de la propagation des incertitudes dans l'arbre hiérarchique du système, la RBDO utilise une modélisation probabiliste pour analyser l'écart par rapport à la sortie souhaitée comme paramètres de rétroaction pour optimiser la conception au départ. Le but de cette thèse est de traiter les paramètres de fenêtres d'observation IR, afin de traiter les questions de fiabilité au-delà de la conception mécatronique, pour inclure l'identification des espèces par l'analyse des données collectées.

Mot clés : RBDO (Reliability Based Design Optimisation) - Capteur IR mobile - Analyse spectroscopique - Optimisation de la conception - Modélisation probabiliste - Incertitudes de propagation .

Abstract

This work anticipates that, in an ever-expanding digital technology world, technological breakthroughs in the analysis of data collected by spectroscopic devices will allow the almost instantaneous identification of known species observed in-situ in a specific environment, leaving the necessary in-depth analysis of unobserved species. The method derived from RBDO (Reliability Based Design Optimization) technology will be used to implement an artificial intelligence procedure to identify observed species from a mobile IR sensor.

To successfully analyze the obtained data, it is necessary to appropriately assign molecular species from the observed IR data using appropriate theoretical models. This work focuses on the observation from mobile devices equipped with appropriate sensors, antennas, and electronics to capture and send raw or analyzed data from an interesting IR spectroscopic environment. It is therefore interesting if not essential to focus on symmetry-based theoretical tools for the spectroscopic analysis of molecules, which allows to identify the IR windows to be chosen for observation in the design of the device. Then, by fitting the theoretical spectroscopic parameters to the observed frequencies, the spectrum of a molecular species can be reconstructed. A deconvolution of the observed spectra is necessary before the analysis in terms of intensity, width and line center characterizing a line shape.

Therefore, an adequate strategy is needed in the design to include data analysis during the observation phase, which can benefit from an artificial intelligence algorithm to account for differences in the IR spectral signature. In this regard, the analytical power of the instrument data can be improved by using the reliability-based design optimization (RBDO) methodology. Based on the multi-physics behavior of uncertainty propagation in the hierarchical system tree, RBDO uses probabilistic modeling to analyze the deviation from the desired output as feedback parameters to optimize the design in the first place.

The goal of this thesis is to address IR observation window parameters to address reliability issues beyond mechatronic design to include species identification through analysis of collected data.

Key words: RBDO (Reliability Based Design Optimisation) - Mobile IR sensor - Spectroscopic analysis - Design optimisation - Probabilistic modelling - Propagation uncertainties.

Table des matières

Remerciement.....	i
Résumé	i
Abstract	i
Table des matières	i
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	viii
Introduction générale.....	1
CHAPITRE 1 : Étude bibliographique.....	6
3.1.3. Incertitude dans les mesures de température du gaz : 13	6
3.2.3. Incertitude dans le rendement du drone : 15	6
3.2.6. Incertitude dans les mesures de température du gaz : 18	6
1. Systèmes de détection de molécules gazeuses	7
1.1. Présentation générale des systèmes de détection de molécules gazeuses.....	7
1.2. Présentation des systèmes optique de détection de gaz :	8
1.2.1. Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR)	8
1.2.2..Spectroscopie.laser.à.diode.accordable.(TDLS)	10
2. Utilisation de drones pour détections des gaz	11
2.1. Modélisation de la détection de panache d'un système de détection de fuite de gaz naturel basé sur un drone	11
2.2 Une approche basée sur un drone pour la détection de fuites de gaz en utilisant l'analyse du flux optique	12
2.3. Détection de gaz dérivant près du sol par un drone en survol : Utilisation du flux d'air généré par deux quadricoptères connectés	12
3. Incertitude liée à la spectroscopie IR et au système de drone.	13
3.1. Incertitude relative à la spectroscopie IR :.....	13
3.1.1. Incertitude dans les valeurs de l'intensité :	13
3.1.2. Incertitudes dans les mesures de gaz par OP-FTIR : Impact des variables environnementales et de la modélisation":.....	14
3.1.3. Incertitude dans les mesures de température du gaz :	15
3.2. Incertitude liée au drone :	16
3.2.1. Incertitude dans la poussée du drone :.....	16
3.2.2. Incertitude dans la capacité de la batterie :	17
3.2.3. Incertitude dans le rendement du drone :	17

3.2.4. Incertitude dans la localisation et le positionnement du drone :	18
3.2.5. Incertitude dans le plan de vol :	19
4. Quantification des incertitudes	20
4.1. Classification des incertitudes.....	20
4.2. Gestion et dissémination des incertitudes	21
5. Approches basées sur la Possibilité	22
5.1. Techniques Probabilistes	22
5.2. Monte Carlo (MC)	23
5.3. Approche de perturbation	23
5.4. Fiabilité d'un système	23
5.5. Fonction de performance	24
5.6. Probabilité de défaillance.....	24
6. Méthodes de simulations	25
7. Méthodes d'approximation FORM/SORM	26
8. Couplage drone – capteur FTIR	27
9. Conclusion	28
CHAPITRE 2 : Etude et conception du système drone : optimisation du contrôleur de vol et du profil de mission.....	29
1. Introduction	30
2. Objectifs et attentes	30
3. Analyse fonctionnelle des différents compartiments du projet :	31
4. Analyse de risques pour le capteur embarqué :	34
5. Cahier de charge du capteur et du drone :	35
5.1. Présentation du système	35
5.1.1. Partie vecteur aérien	35
5.1.2. Partie station sol	36
5.1.3. Pièces de rechange, outillage et documentation.....	36
5.1.4. Moyens de conditionnement destiné au stockage et au transport	36
5.1.5. Fonctionnalité du système	36
5.1.6. Robustesse du système	37
5.1.7. Visualisation des informations	37
5.1.8 Enregistrement des données	37
5.2. Caractéristiques du système et de ses composants	37
5.2.1. La partie vectrice aérien	37

5.2.2. La charge utile	38
5.2.3. La partie station sol	39
5.2.4. Profile de mission du drone.....	40
5.2.5. Conception des drones	40
5.2.6. Justification des choix de conception.....	41
6. Modélisation du vol vertical d'un drone et conception de son pilote automatique.....	41
7. Optimisation du plan de vol :	45
7.1. Utilisation d'une heuristique pour résoudre le problème du voyageur de commerce	46
7.2. Résultats et conséquences	50
CHAPITRE 3 : Optimisation du système de propulsion, investigation de performance d'une nouvelle topologie utilisé pour application du drone	52
1. Introduction	53
2. Méthodologie proposée pour l'étude des caractéristiques de performance d'une hélice de conception modifiée : Simulation numérique et validation	55
3. Configuration numérique.....	55
4. domaine de résolution des équations de Navier stocks	55
4.1. Domaine d'écoulement.....	55
4.2. Génération de maillage	56
4.3. Conditions limites	58
5. Résultats et discussions	59
5.1. Les résultats statiques des performances	59
5.2. Analyse dynamique des performances.....	63
Conclusion	69
CHAPITRE 4 : Des outils théoriques pour une analyse en deux phases des spectres IR observés : application de la RBDO pour comprendre le spectre IR de la molécule CO ₂	71
1. Introduction :	72
2. Modèle et méthodes.....	74
2.1 Symétrie vibrationnelle et coordonnées normales	74
2.2 Groupe de symétrie et coordonnées de symétrie de la molécule CO ₂	77
3. Matrices F et G de Wilson.....	81
4. Résultats numériques	84
4.1. Isotopes ¹⁶ O ¹² C ¹⁶ O et ¹⁶ O ¹² C ¹⁸ O dans différents milieux	84
4.2. Calcul des constantes de force pour le CO ₂ , en phase gazeuse, les matrices de gaz rares et l'hydrate de clathrate I	85

5. Résultats et discussion	86
6. Conclusion	91
CHAPITRE 5 : Conception du banc d'essai simuler expérimentalement les conditions rencontrées par un capteur FTIR sur drone	92
1. Introduction	93
2. Matériels et méthodes	94
2.1. Le détecteur IR et la source lumineuse	94
2.2. La cellule à gaz	98
3. Résultats.....	100
4. Discussion.....	103
5. Conclusion	104
CHAPITRE 6 : Méthodologie IR-RBDO : Nouveaux aspects de la télédétection IR	105
1. Introduction	106
2. Optimisation des signaux.....	107
3. Formulation du problème et méthodologie	108
3.1. Énoncé du problème	108
3.2. Évaluation de l'Optimisation de Mesures Infrarouges par Comparaison à la Base de Données HITRAN : Une Alternative à l'Optimisation de Conception Déterministe : ...	110
3.3. Optimisation basée sur la fiabilité pour l'analyse de signal infrarouge (Reliability- Based Infrared Signal Analysis Optimization - RBISAO).....	111
4. Formalisation de l'Optimisation Basée sur la Fiabilité pour l'Analyse de Signal Infrarouge	111
4.1 Présentation générale de la méthode RBDO ;.....	111
4.2 Approche hybride (HM)	113
5. Méthode proposée.....	114
5.1. Énoncé du problème	114
5.2. Équations de base :.....	114
5.3. Approche stochastique : théorie de Monté Carlo ;.....	115
6. Optimisation fiabiliste basée sur la méthode HM de la mesure réalisée par un spectromètre FTIR monté sur un drone	116
6.1. Description de l'étude de cas :.....	116
6.2. Méthode probabiliste :	117
6.3. Mise en œuvre de la méthode RBDO	120
6.3.1 Mise en œuvre du méta modèle par Krigeage.....	121

6.3.2 Mesure FTIR amélioré par RBDO	122
Références	129

Liste des figures

Figure 1.1 : Interféromètre de Michelson.....	9
Figure 1.2 : Schéma des composants d'un spectromètre d'absorption à diode laser tenable....	11
Figure 1.3 : Détection de plume de méthane.....	11
Figure 1.4 : Détection de plume de méthane.....	12
Figure 1.5 : Système de détection téléporté avec effet du sol	13
Figure 1.6 : Incertitude relative de EKO	13
Figure 1.7 : Effet de la vitesse du vent	14
Figure 1.8 : Spectre de réflectance dans l'IR moyen	16
Figure 1.9 : Comparaison entre les incertitudes aléatoires et les incertitudes épistémiques....	21
Figure 1.10 : Méthode de quantifications des incertitudes.....	22
Figure 1.11 : Domaines de sûreté et de défaillance dans le cas de deux variables	24
Figure 1.12 : Simulations de Monte Carlo pour la probabilité de défaillance	25
Figure 1.13 : Transformation iso-probabiliste de l'espace physique vers l'espace normal standard	26
Figure 2.1 : Schéma descriptif de l'approche rbdo pour la conception du système.....	
Figure 2.2 : Plan de mission du drone	31
Figure 2.3 : Diagramme sadt du système	32
Figure 2.4 : Diagramme de pieuvre du drone de détection	32
Figure 2.5 : Diagramme de pieuvre du drone du dispositif capteur	33
Figure 2.6 : Diagramme de la pieuvre de la couche de traitement de données	33
Figure 2.7 : Présentation des différentes criticités	35
Figure 2.8 : Conception du drone avec capteur ftir.....	41
Figure 2.9 : Modélisation du contrôleur de vols du drone	43
Figure 2.10 : Simulation avec valeurs aléatoire des p, i, d.....	44
Figure 2.11 : Vitesse en fonction de l'altitude après un premier cycle d'optimisation	44
Figure 2.12 : Vitesse stabilisée après optimisation des valeurs de paramètres p, i, d	45
Figure 2.13 : cycle hamiltonien possible entre cinq points dans un plan 2d.....	46
Figure 2.14 : Organigramme de résolution du TSP problème.....	49
Figure 2.15 : Cycle aléatoire de longueur 9.707	50
Figure 2.16 : cycle aléatoire de longueur 7.064	50
Figure 3.1 : Domaines de flux.....	56
Figure 3.2 : Maillage génère	56
Figure 3.3 : Etat transitoire résiduel	60
Figure 3.4 : Etat de la convergence pour les résidus	60
Figure 3.5 : Convergence de la solution.....	61
Figure 3.6 : Coefficient de poussée statique pour 2500 rpm.....	61
Figure 3.7 : Comparaison des coefficients de poussée : cfd vs. données expérimentales.....	62
Figure 3.8 : Hélice conventionnelle et hélice à bouts	63
Figure 3.9 : Comparaison entre l'hélice à pointe courbe et l'hélice à pointe conventionnelle pour 4000 rpm : 1 - coefficient de poussée - 2 - durée du temps de vol - 3 - charge utile maximale	65
Figure 3.10 : Comparaison entre une hélice à bouts courbes et une hélice à bouts conventionnels pour 5000 tours/minute : 1 - coefficient de poussée - 2 - durée du vol - 3 - charge utile maximale.	65
Figure 3.11 : comparaison entre l'hélice à pointe courbe et l'hélice à pointe conventionnelle pour 6000 rpm : 1 - coefficient de poussée - 2 - durée du temps de vol - 3 - charge utile maximale.	65

Figure 4.1 : Coordonnées internes et cartésiennes de la molécule linéaire CO ₂	79
Figure 4.2 : Distribution des fréquences pour les modes ν_1 a) et ν_3 b) pour un ensemble de valeurs pondérées données par la fonction aléatoire utilisée pour la procédure MC avec 10000 étapes.....	89
Figure 5.1 : La région IR pour la détection du CO ₂	96
Figure 5.2 : Choix de la source lumineuse et du détecteur adéquats	96
Figure 5.3 : conception technique de la source lumineuse L15969	97
Figure 5.4 : Vue de face de la source IR L15969	97
Figure 5.5 : La procédure d'acquisition	97
Figure 5.6 : Détecteur IR monte sur la CART.....	97
Figure 5.7 : Détecteur IR monte sur la CART.....	98
Figure 5.8 : La bouteille de gaz.....	98
Figure 5.9 : Détails du banc d'essai	99
Figure 5.10 : Essai expérimental	100
Figure 5.11 : Le signal d'entrée	101
Figure 5.12 : Signal de sortie en mode de fonctionnement normal.....	101
Figure 5.13 : Signal de sortie dans des conditions de température modifiées	102
Figure 5.14 : Le signal de sortie dans un environnement vibratoire	103
Figure 6.1 : Mise en œuvre de l'optimisation de la mesure	107
Figure 6.2 : Minimisation d'une fonction objective à une variable	109
Figure 6.3 : Processus de l'optimisation Fabiliste de mesure FTIR - Drone	111
Figure 6.4 : Classification des différentes méthodes de la RBDO	113
Figure 6.5 : Organigramme de l'approche hybride	114
Figure 6.6 : Source d'incertitude dans l'environnement du capteur IR	117
Figure 6.7 : Distribution de probabilité des paramètres de conception.....	120
Figure 6.8 : Historique de la convergence des fonctions	123

Liste des tableaux

Tableau 2.1 : Analyse fonctionnelle du système	32
Tableau 2.2 : Analyse fonctionnelle du capteur FTIR.....	33
Tableau 2.3 : Analyse fonctionnelle de la partie traitement de donnée	34
Tableau 2.4 : Analyse de risque du capteur FTIR	34
Tableau 2.5 : Analyse fonctionnelle du système	43
Tableau 3.1 : Paramètres de qualité des mailles	58
Tableau 3.2 : Analyse comparative coefficient de poussé : CFD vs. Données expérimentales avec erreur relative	62
Tableau 3.3 : Comparaison des techniques de correction de la vitesse et de l'inclinaison : conventionnel, curved Tip CT et gain recourbés.....	
Tableau 4.1 : Tableau des représentations des caractères vibratoires irréductibles du groupe D_{2h}^{2h}	79
Tableau 4.2 : Tableau des caractères des représentations vibratoires irréductibles du groupe C_{2v}^{2v}	80
Tableau 4.3 : Corrélation entre les IR des groupes D_{2h} et $D_{\infty h}$ et des groupes C_{2v} et $C_{\infty v}$	81
Tableau 4.4 : Valeurs de fréquence en nombre d'ondes (cm^{-1}) observées [21]-[24], [32], [34], [36] et [46] pour les isotopologues 626 et 628 du CO_2 dans différents milieux et calculées pour le mode ν_1	85
Tableau 4.5 : Constantes de force pour les coordonnées internes des isotopologues 626 et 628 du CO_2 dans différents milieux	86
Tableau 6.1: Variables de conception	118
Tableau 6.2: Contraintes de conception	118
Tableau 6.3: Contraintes de conception	120
Tableau 6.4: Résultats pour la molécule CO_2	123
Tableau 6.5: Résultats pour la molécule NO_2	123
Tableau 6.6: Résultats pour la molécule SO_2	123
Tableau 6.7: Résultats pour la molécule CO_2	124
Tableau 6.8: Résultats pour la molécule NO_2	124
Tableau 6.9: Résultats pour la molécule SO_2	124
Tableau 6.10: Résultats pour la molécule CO_2	124
Tableau 6.11: Résultats pour la molécule NO_2	124
Tableau 6.12: Résultats pour la molécule SO_2	124

Introduction générale

Le réchauffement climatique et le développement durable ont ouvert un champ de recherche orienté vers l'observation de l'environnement sur terre avec une diversité de percées technologiques et de méthodologies pour amener les capteurs au plus près du milieu d'intérêt comme cela est pratiqué dans les missions spatiales d'observation des planètes des atmosphères, des comètes ou des satellites comme avec les missions Mars Express et Vénus Express [1]. Les travaux de recherche en spectroscopie infrarouge (IR) sont segmentés en deux domaines principaux, expérimental et théorique.

L'étude expérimentale est menée avec un équipement instrumental de laboratoire approprié pour identifier l'empreinte IR des molécules et le travail théorique est réalisé avec des modèles basés généralement sur la transformation de contact par exemple, comme décrit dans les références [2]. Ensuite, en ajustant les paramètres théoriques spectroscopiques aux fréquences observées, le spectre d'une espèce moléculaire peut être reconstruit. Une déconvolution des spectres observés est nécessaire avant l'analyse en termes d'intensité, de largeur et de centre de raie caractérisant une forme de raie.

Pour collecter les données d'un environnement observé, les instruments embarqués à bord d'un orbiteur ou d'une sonde spatiale tels que SPICAM, SPICAV ou SOIR sont conçus sur la base des canaux de fréquences attendus en fonction des signatures spectrales identifiées lors de travaux de recherche comme sur le CO₂ pour Mars et Vénus ou les tholins pour les atmosphères de Titan . Très récemment, UVSQ-SAT [3] a été conçu pour une mission de nanosatellite LATMOS pour l'observation de variables climatiques, telles que les flux radiatifs d'ondes courtes et longues au sommet de l'atmosphère et l'irradiance spectrale solaire UV.

Les futures observations atmosphériques de la Terre, des planètes ou d'autres espaces dans le domaine IR, avec un capteur mobile pour leurs études spectroscopique IR in-situ, peuvent bénéficier du savoir-faire acquis dans la conception des instruments à bord de Mars et Vénus Express ou du nanosatellite UVSQ-SAT.

En ce qui concerne l'analyse en prise en compte des incertitudes des données, rappelons que la bande d'absorption dans les spectres de transmission de l'atmosphère de Vénus observée autour de 2982 cm⁻¹, avec l'instrument SOIR à bord de Vénus Express a été réalisé sur la base des travaux de trois recherches différentes. Les travaux théoriques de Perevalov et Tachkun, l'observation par une équipe américaine, Mumma et Al du spectre de la lumière solaire réfléchi par le sol de Mars et les résultats de l'étude des spectre de molécules de CO₂ isolées

en matrices de gaz rare ont permis d'identifier une transition non cataloguée à l'époque de la molécule $O^{16}C^{12}O^{18}$, une espèce isotopique du CO₂, par opposition à une attribution possible à une liaison C - H asymétrique d'espèces organiques. L'élaboration d'une méthodologie rigoureuse dès le début est cruciale pour intégrer efficacement l'analyse des données spectroscopiques durant la phase observationnelle. Cette intégration peut bénéficier de l'application d'algorithmes d'intelligence artificielle, spécialement conçus pour discerner les variations fines dans les signatures du spectre infrarouge. Ces variations dépendent notamment de l'état physico-chimique des espèces analysées, qu'elles soient en phase gazeuse, à différentes pressions, confinées dans des nano-cages telles que les fullerènes et les clathrates, ou adsorbées sur des surfaces. [4].

Dans cette optique, l'efficacité de l'analyse des données instrumentales peut être significativement renforcée par l'adoption d'une approche de conception optimisée basée sur la fiabilité (RBDO). Cette méthode, particulièrement pertinente pour l'amélioration des systèmes mécatroniques embarqués et des dispositifs IoT, prend en compte les incertitudes liées aux propriétés matérielles, aux dimensions géométriques, et aux charges appliquées. En intégrant la RBDO, nous visons à minimiser les risques d'erreur dans l'interprétation des données en anticipant et en ajustant les variables incertaines dès les phases initiales de conception, ce qui conduit à une augmentation notable de la précision et de la fiabilité des mesures spectroscopiques[5]. Basé sur le comportement multi-physique de la propagation des incertitudes dans l'arbre hiérarchique du système, RBDO utilise une modélisation probabiliste pour analyser l'écart par rapport à la sortie souhaitée comme paramètres de rétroaction pour optimiser la conception au départ. Ces paramètres de conception, peuvent être complétés par des paramètres de fenêtres d'observation IR, afin de traiter les questions de fiabilité au-delà de la conception mécatronique [6]–[8] pour inclure l'identification des espèces par l'analyse des données collectées.

Par exemple, lorsqu'une molécule comme le CO₂ est observée en phase gazeuse ou piégée dans un nano-cage en phase condensée ou dans des polymères comme les gels de silicone [9], l'empreinte IR est différente. Alors comment affirmer que l'espèce observée est bien du CO₂ ? Il est donc obligatoire d'assigner correctement l'espèce moléculaire à partir des données IR observées en utilisant les modèles théoriques appropriés afin d'analyser efficacement les données collectées [10]. Cela implique l'emploi de techniques de modélisation probabiliste pour quantifier et gérer les incertitudes inhérentes aux mesures spectroscopiques et aux conditions expérimentales. Dans cette étude, l'objectif principal est la conception d'un

système de détection de molécules gazeuses fiable, exploitant un spectromètre infrarouge (IR) intégré à un drone. L'accent est mis sur deux volets essentiels : L'analyse approfondie des incertitudes inhérentes à la spectroscopie IR en utilisant des modèles probabilistes et les spécifications techniques du drone et du système dans son ensemble. Diverses approches sont explorées pour modéliser et gérer les incertitudes. Des données collectées d'environnements variés tels que les phases gazeuses, les conditions de confinement en nano-cages, ou encore les matrices polymériques sont utilisées comme support théorique. La finalité est l'élaboration des stratégies robustes garantissant la fiabilité et l'efficacité de la détection des composés chimiques dans des conditions rencontrées par des capteurs mobiles.

Il se concentre sur les outils théoriques basés sur la symétrie pour l'étude spectroscopique des molécules qui permettent l'identification des fenêtres IR à sélectionner pour l'observation dans la conception de l'appareil comme discuté dans les références [11]–[13]. En outre, il décrit comment les résultats théoriques peuvent être inclus dans la méthodologie RBDO pour fixer le paramètre de fiabilité dans l'identification des espèces chimiques étudiées à partir de l'analyse des données collectées pendant la phase d'observation.

La post-analyse complète l'analyse en vol avec d'autres paramètres tels que la composition, la pression, la température, la dynamique ou tout autre paramètre pertinent de l'environnement observé. L'objectif est de fournir une méthode permettant de mettre en œuvre des processus d'IA pour identifier des molécules ou des groupes fonctionnels actifs IR ou Raman, en particulier, lorsqu'ils sont soumis à des contraintes environnementales ou lorsqu'ils sont piégés dans des nano-cages tels que des milieux poreux ou des hydrates de clathrates [14], ou des espèces chimiques dans un cristal à partir de l'analyse des groupes factoriels vibrationnels.

Les outils théoriques sont orientés sur l'analyse du champ de force de valence en termes de constantes de force de liaison plutôt que sur les constantes de force globales de l'analyse standard en termes de coordonnées normales, conformément à une stratégie basée sur la fenêtre IR d'absorption globale liée aux liaisons typiques. La méthode décrite est appliquée aux vibrations fondamentales du CO₂ et du N₂O telles qu'observées en phase gazeuse, par spectroscopie IR en matrices de gaz rares ou dans les clathrates. Les résultats de la théorie spectroscopique complète basée sur la transformation de contact telle que décrite dans la référence [2] et les méthodes numériques développées pour étudier les composés à transition de spin avec l'échantillonnage entropique et la technique de Monte-Carlo [15] couplée à la méthodologie RBDO sont combinés dans une approche systématique pour simuler la fenêtre

d'observation de données fiables pour localiser le spectre de la molécule pour les bandes froides. Le but est d'appliquer une approche qui extrait des connaissances sur les espèces chimiques et l'environnement qui procède en différentes étapes en partant d'une perspective d'analyse large basée sur le travail de laboratoire pour converger vers une analyse raffinée liée à l'observation. Le mémoire est organisé comme suit le premier chapitre consiste en une étude bibliographique de l'analyse spectrométrique et de son rôle dans la résolution de problèmes impliquant différents analytes. Il met en lumière la dépendance du signal d'un analyte non seulement de sa concentration, mais aussi d'autres facteurs complexes tels que la présence d'autres substances, la structure du matériau, la forme de l'échantillon et les conditions environnementales. Une attention particulière est accordée aux méthodes de préparation des échantillons et aux procédures d'analyse spectrophotométrique.

Dans le deuxième chapitre, nous explorons l'amélioration des performances des drones, en mettant l'accent sur la problématique du voyageur de commerce. Nous examinons ensuite diverses stratégies pour une analyse fonctionnelle du système drone-capteur et l'identification des risques associés. L'importance de l'innovation dans la conception des drones est soulignée, en particulier pour les tâches de vol stationnaire. Le design du drone est examiné en détail, avec une justification des choix effectués, basée sur une analyse des risques.

Le troisième chapitre se focalise sur la conception et l'optimisation d'une hélice à pointe incurvée de $10 * 4,7$ pouces pour drones. L'efficacité, la stabilité et l'impact de cette conception sur l'autonomie de la batterie sont analysés en détail grâce à la dynamique des fluides numérique (CFD), offrant des perspectives importantes pour l'avenir de la technologie des drones dans divers secteurs.

Dans le quatrième chapitre, nous avons développé un modèle basé sur la théorie des groupes pour étudier la spectroscopie infrarouge du CO₂ dans différents environnements, en utilisant des simulations de Monte Carlo pour prévoir la localisation du CO₂. Ces avancées enrichissent les bases de données existantes et facilitent la détection de molécules dans des milieux condensés, ce qui est crucial pour l'analyse des données des missions spatiales telles que JUICE de l'ESA. Nous envisageons d'étendre cette méthode à l'étude de la forme des lignes d'absorption et d'intégrer des outils d'intelligence artificielle pour affiner l'identification des composés chimiques.

Le cinquième chapitre se focalise sur l'impact de la température et des vibrations sur la fiabilité des observations spectroscopiques IR, en utilisant un banc d'essai spécifique. Nos résultats soulignent l'importance de développer une technologie d'absorption des vibrations

pour les drones, les vibrations ayant un impact plus significatif que la température. Nous projetons de continuer nos recherches en explorant des approches analytiques et techniques d'optimisation pour corriger les signaux affectés par des incertitudes de température, notamment en utilisant la RBDO.

Le sixième chapitre met en œuvre l'optimisation des systèmes de mesure FTIR embarqués sur drones, en soulignant l'importance des critères tels que la fiabilité, la durabilité, la faisabilité et le coût. Nous avons introduit le concept d'incertitudes mixtes, pertinentes tant pour les mesures infrarouges que pour la dynamique des drones. Au lieu d'ignorer ces incertitudes, nous proposons de les intégrer dans le processus d'optimisation via la RBDO. Une étude de cas démontre l'application de cette méthode à la spectroscopie FTIR par drone, illustrant comment elle peut améliorer la fiabilité des mesures tout en considérant les diverses incertitudes.

CHAPITRE 1 : Étude bibliographique

1. Systèmes de détection de molécules gazeuses	5
1.1. Présentation générale des systèmes de détection de molécules gazeuses	5
1.2. Présentation des systèmes optique de détection de gaz :	6
1.2.1. Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR)	6
1.2.2. Spectroscopie laser à diode accordable (TDLS)	8
2. Utilisation de drones pour détections des gaz	9
2.1. Modélisation de la détection de panache d'un système de détection de fuite de gaz naturel basé sur un drone	9
2.2. Une approche basée sur un drone pour la détection de fuites de gaz en utilisant l'analyse du flux optique	10
2.3. Détection de gaz dérivant près du sol par un drone en survol : Utilisation du flux d'air généré par deux quadricoptères connectés	10
3. Incertitude liée à la spectroscopie IR et au système de drone.	11
3.1. Incertitude relative à la spectroscopie IR :	11
3.1.1. Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR)	11
3.1.2. Incertitudes dans les mesures de gaz par OP-FTIR : Impact des variables environnementales et de la modélisation" :	11
3.1.3. Incertitude dans les mesures de température du gaz :	13
3.2. Incertitude liée au drone :	14
3.2.1. Incertitude de la poussée du drone :	14
3.2.2. Incertitude dans la capacité de la batterie :	15
3.2.3. Incertitude dans le rendement du drone :	15
3.2.4. Incertitude dans la localisation et le positionnement du drone :	16
3.2.5. Incertitude dans le plan de vol :	17
3.2.6. Incertitude dans les mesures de température du gaz :	18
4. Quantification des incertitudes	18
4.1. Classification des incertitudes	19
4.2. Gestion et dissémination des incertitudes	20
5. Approches basées sur la Possibilité	20
5.1. Techniques Probabilistes	20
5.2. Monte Carlo (MC)a	21
5.3. Approche de perturbation	21
5.4. Fiabilité d'un système	22
5.5. Fonction de performance	22
5.6. Probabilité de défaillance	23
6. Méthodes de simulations	25
7. Méthodes d'approximation FORM/SORM	25
8. Couplage drone – capteur FTIR	26
9. Conclusion	26

1. Systèmes de détection de molécules gazeuses

1.1. Présentation générale des systèmes de détection de molécules gazeuses

Les systèmes de détection de molécules gazeuses sont utilisés dans de nombreux domaines, tels que la surveillance de la qualité de l'air, la sécurité industrielle, la médecine, etc [16] [17] [18] [19]

Les recherches dans ce domaine sont très variées et portent sur différents types de capteurs et de molécules. Voici un aperçu des différents types de systèmes de détection de molécules gazeuses présentés dans les résultats de recherche :

- **Système de surveillance chimique de contaminants aériens utilisant un transducteur optique et des matériaux nano poreux :** Ce projet de recherche doctorale a été réalisé au sein de l'équipe « Surveillance des contaminants aériens » dirigée par Thu-Hoa TranThi, intégrée au Laboratoire Francis Perrin (URA 2453, CEA/CNRS[20].
Le groupe se focalise sur l'identification de gaz nocifs pour la qualité de l'air, le contrôle de l'exposition des employés et dans le cadre de la prévention du terrorisme chimique. Ils ont porté un intérêt particulier aux Composés Organiques Volatils (COV) et spécifiquement à la catégorie des composés carbonyles. Les deux membres les plus élémentaires de cette catégorie sont le formaldéhyde et l'acétaldéhyde.
- **Spectroscopie infrarouge utilisant un laser à cascade quantique à large gamme d'accordable:**
Cette méthode emploie des lasers à cascade quantique en cavité étendue pour la reconnaissance de gaz. Les lasers peuvent être réglés sur une étendue considérable de longueurs d'onde, permettant ainsi la détection de différentes molécules gazeuses. [21]
- **Détecteurs optiques pour l'identification de substances gazeuses et biochimiques :**
Ces détecteurs emploient des polymères spécifiques pour l'identification de gaz et de vapeurs via des capteurs optiques. Les polymères choisis appartiennent à la famille des hétéropolysiloxanes et constituent la gaine de la fibre optique leur indice optique se modifie lors de l'absorption des molécules gazeuses.[22]
- **Élaboration de capteurs sélectifs pour la détection de NH₃ et H₂S dans le cadre de la supervision et de la gestion des substances organiques dans la production de bio-énergies :** Cette recherche doctorale s'oriente vers le développement de micro-systèmes de détection de gaz sélectifs pour l'ammoniac (NH₃) et le sulfure

d'hydrogène (H₂S). Ces capteurs sont destinés à la supervision, à la gestion de la production et la sécurité dans les installations de méthanisation. À cet effet, deux sortes de capteurs chimiques utilisant des matériaux réactifs différents ont été explorées pour la détection des gaz[23]

- **Modification de la surface des couches minces d'oxydes pour une détection sélective de substances gazeuses et biologiques :** Cette recherche se concentre sur la modification de la surface des éléments réactifs de capteurs de gaz de type résistif basés sur du SnO₂ en utilisant des couches minces de membranes filtrantes, ainsi que la modification de la surface des couches minces d'oxydes par des oligonucléotides pour la détection de l'ADN[24]. Ces différents systèmes de reconnaissance de molécules gazeuses reposent sur des principes physiques distincts et sont adaptés à des applications spécifiques.

1.2. Présentation des systèmes optique de détection de gaz :

Les systèmes de détection de molécules gazeuses sont des outils essentiels dans divers domaines scientifiques et industriels. Ces systèmes utilisent une variété de technologies pour identifier et quantifier les molécules présentes dans un échantillon de gaz. Parmi ces technologies, on trouve les capteurs FTIR, qui sont particulièrement efficaces pour la détection de molécules spécifiques

1.2.1. Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR)

C'est une méthode expérimentale qui offre de nombreux avantages. Elle présente une sensibilité de détection élevée, une excellente sélectivité, la capacité de faire des mesures en ligne in situ, une vitesse d'acquisition rapide, et la possibilité d'analyser des mélanges de gaz complexes, comprenant jusqu'à plusieurs dizaines de composants. Malgré ces atouts, il est à noter que la méthode peut être affectée par des incertitudes, ce qui est une considération importante pour les applications de mesure précises.[25] [2]

La FTIR repose sur le principe de l'interférométrie, où l'intensité à la sortie de l'interféromètre de Michelson du laser peut être décrite par l'équation suivante :

$$I(\delta) = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\delta)$$

Où I_1 et I_2 représentent l'intensité de la lumière des deux bras de l'interféromètre, et δ est le déphasage introduit par la différence de trajet optique.

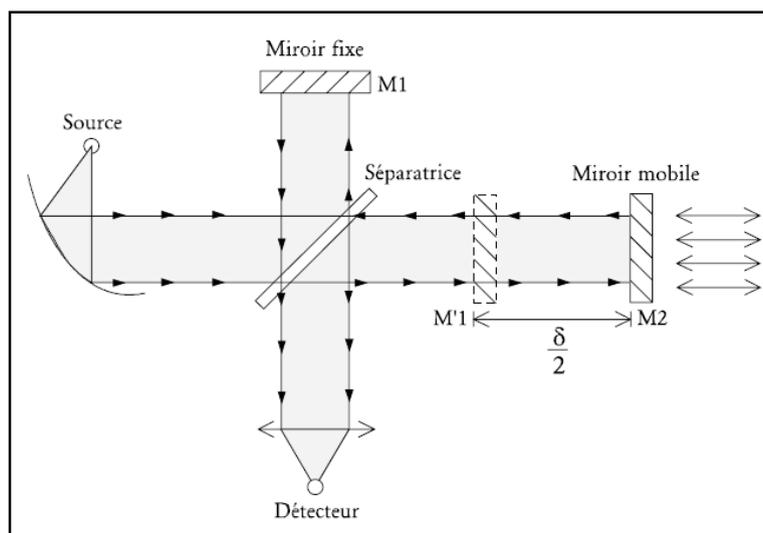


Figure 1.1 : Interféromètre de Michelson

Le FTIR est interféromètre de Michelson montré sur figure 1.1, équipé d'une source infrarouge et d'un algorithme de transformée de Fourier pour convertir le signal en un spectre. Ce spectre est alors analysé pour déterminer les molécules présentes dans l'échantillon, ainsi que leur concentration.

La résolution spectrale $\Delta\nu$ est inversement proportionnelle au chemin optique maximal (L) dans l'interféromètre de Michelson, ce qui peut être exprimé mathématiquement comme suit :

$$\Delta\nu = 1/(2L)$$

Ce qui est remarquable avec la spectroscopie IRTF, c'est qu'elle est adaptée à la mesure de nombreux gaz trace atmosphériques, comme l'O₃, HCHO, HONO, NO, NO₂, CH₄, SO₂, OCS, etc. Elle peut être réalisée à partir de plateformes variées, telles que le sol, des ballons, des avions, ou même des satellites [16]

Les capteurs FTIR permettent par d'obtenir des spectres infrarouges à haute résolution. Ces capteurs détectent des molécules spécifiques en mesurant l'absorption de la lumière infrarouge à différentes longueurs d'onde. Chaque molécule absorbe la lumière infrarouge à des longueurs d'onde spécifiques dans un intervalle spectral donné sous forme d'une raie caractérisée par sa largeur à mi hauteur et son maximum au centre, ce qui permet de quantifier et d'identifier les molécules présentes dans l'échantillon.

La transformée de Fourier est utilisée pour convertir le signal mesuré par le détecteur en un spectre. L'équation qui permet de faire cette transformée est la suivante :

$$f(\nu) = \int f(t)e^{-i2\pi\nu t}$$

$F(\nu)$ est le spectre infrarouge, $f(t)$ est l'interférogramme, ν est la fréquence, t est le temps.

1.2.2. Spectroscopie laser à diode accordable (TDLS)

La Spectroscopie Laser à Diode Accordable (TDLS) est une approche spectroscopique sophistiquée exploitant les diodes lasers pour générer des longueurs d'onde précises, montré sur la figure 1.2. Les principes fondamentaux qui régissent cette technique relèvent des domaines de la physique quantique et de l'optique.

Au cœur de cette méthode se trouve la loi de Beer-Lambert, une équation linéaire qui décrit comment l'intensité de la lumière est atténuée lors du passage à travers un milieu absorbant. Elle est formulée comme suit:

$$I = I_0 e^{-\alpha C L}$$

Où I_0 est l'intensité incidente, I est l'intensité lumineuse transmise, α est le coefficient d'absorption, C , est la concentration de l'absorbant, et L est la longueur du trajet optique.

De plus, la relation de Planck, qui établit un lien direct entre l'énergie d'un photon et sa fréquence, joue un rôle crucial dans le réglage de la longueur d'onde du laser. L'équation est donnée par

$E = h\nu$, où E est l'énergie du photon, h est la constante de Planck, et ν est la fréquence de la lumière. [26], [27]

Enfin, les équations de Maxwell, qui décrivent les interactions entre les champs électriques et magnétiques, fournissent un cadre nécessaire pour comprendre la propagation de la lumière, une onde électromagnétique, à travers le milieu d'intérêt.

Dans l'ensemble, la TDLS est une technique élégante qui s'appuie sur une variété de principes physiques pour produire des mesures de concentration précises de diverses espèces gazeuses. L'application de ces principes permet la conception d'expériences de TDLS robustes et leur interprétation rigoureuse.

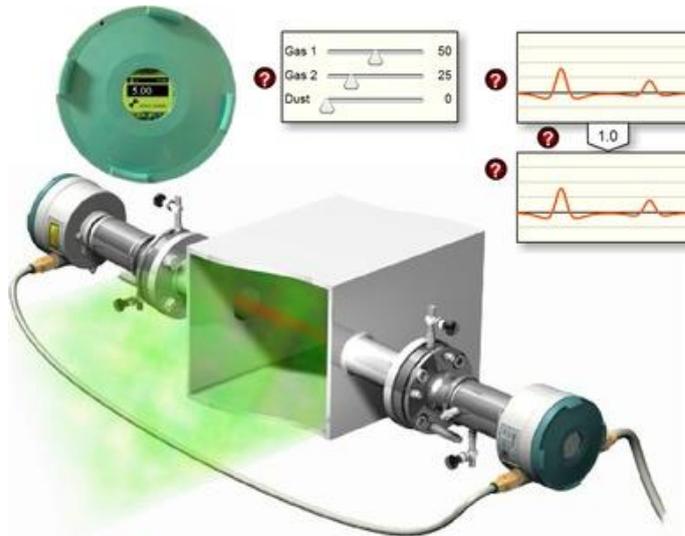


Figure 1.2 : Schéma des composants d'un spectromètre d'absorption à diode laser tenable

2. Utilisation de drones pour détections des gaz

2.1. Modélisation de la détection de panache d'un système de détection de fuite de gaz naturel basé sur un drone

Cette étude [28], examine l'utilisation de drones pour la détection de fuites de méthane dans les infrastructures de production d'hydrocarbures. Ils ont utilisé des libérations contrôlées pour examiner la probabilité de détection et ont constaté que la détection était meilleure à des vitesses de vent modérées et à 750-2000 m en aval de la source. Cependant, ils ont également noté que la probabilité de détection était faible dans toutes les conditions comme montré sur la figure 1.3, suggérant que des systèmes similaires pourraient souvent manquer de grandes fuites.

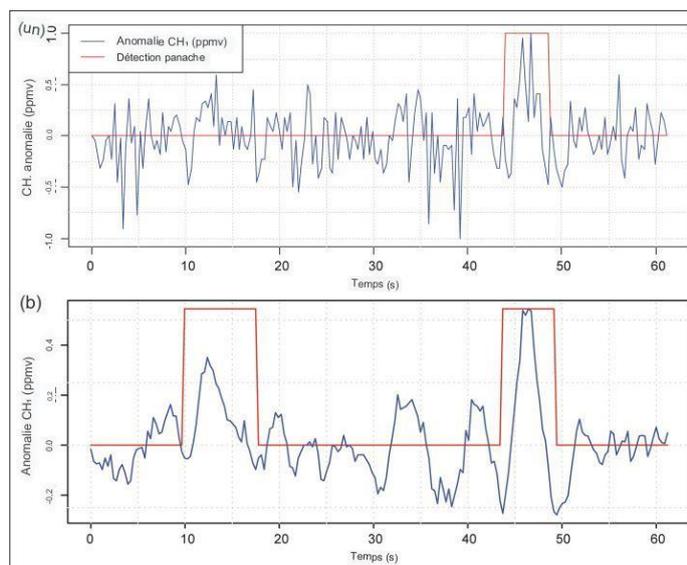


Figure 1.3 : Détection de plume de méthane

2.2 Une approche basée sur un drone pour la détection de fuites de gaz en utilisant l'analyse du flux optique

Dans cette étude, Parham Nooralishahi, Fernando López et Xavier Maldague [29] ont proposé une méthode pour la détection de fuites de gaz et l'amélioration visuelle de l'émanation de gaz impliquant des étapes de stabilisation et de détection de fuites de gaz. Ils ont également effectué une analyse comparative des techniques de stabilisation candidates pour trouver la technique la plus adaptée à l'application basée sur un drone. Un exemple de la méthodologie utilisée est illustrée sur la figure 1.4.

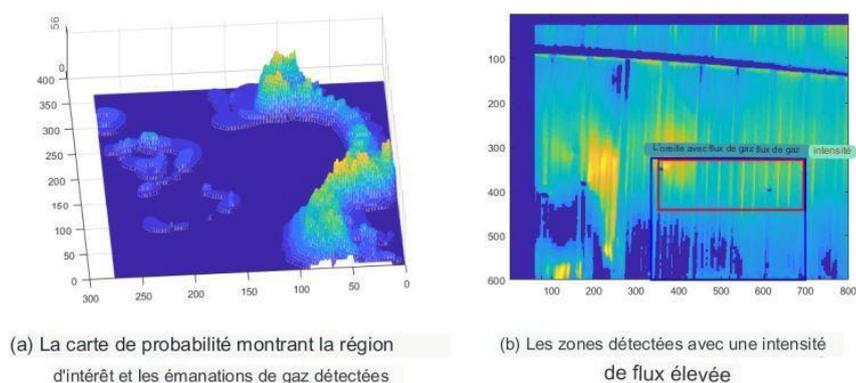


Figure 1.4 : Détection de plume de méthane

2.3. Détection de gaz dérivant près du sol par un drone en survol : Utilisation du flux d'air généré par deux quadricoptères connectés

Cette étude, menée par Ryohei Sato et ses collègues [30], décrit l'utilisation des descentes de multicoptères pour les applications de détection de gaz. Ils proposent d'utiliser deux multicoptères connectés par une tige ou une corde et de placer un capteur de gaz au milieu de la tige/corde un schéma illustratif de cette proposition est donné par la figure 1.5. Les résultats expérimentaux présentés montrent la solidité de la méthode proposée.

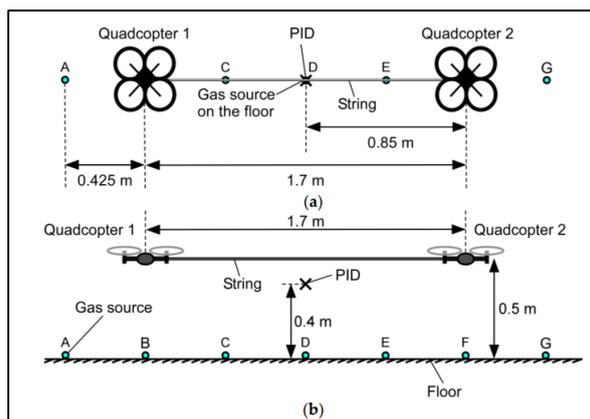


Figure 1.5 : Système de détection téléporté avec effet du sol

3. Incertitude liée à la spectroscopie IR et au système de drone.

La spectroscopie infrarouge (IR), en particulier la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FT-IR), présente plusieurs sources potentielles d'incertitudes qui peuvent affecter la précision des mesures. Certaines de ces sources d'incertitudes sont liées aux propriétés physiques du système de mesure, tandis que d'autres sont liées aux procédures d'étalonnage et à la qualité des données de référence utilisées pour l'étalonnage.

3.1. Incertitude relative à la spectroscopie IR :

3.1.1. Incertitude dans les valeurs de l'intensité :

Les valeurs de l'intensité constituent des éléments clés pour l'interprétation des résultats en spectroscopie infrarouge. Ces valeurs proviennent de bases de données comme la base de données HITRAN L'incertitude dans ces valeurs peut avoir un impact significatif sur l'exactitude des mesures. Il est donc crucial d'incorporer une estimation appropriée de l'incertitude de ces données dans les résultats de mesure comme indiqué sur la figure 1.6.[31],[32],[27].

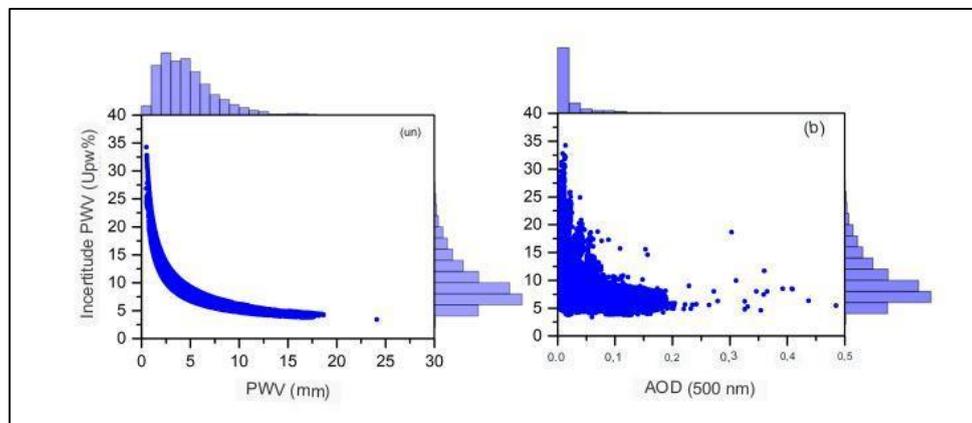


Figure 1.6 : Incertitude relative de EKO

3.1.2. Incertitudes dans les mesures de gaz par OP-FTIR : Impact des variables environnementales et de la modélisation :

Dans cette étude, la FTIR à trajet ouvert (OP-FTIR) a été examinée afin d'évaluer comment les variables environnementales, comme la vapeur d'eau, la température et la longueur du trajet ont un impact sur la mesure des gaz, en particulier le protoxyde d'azote (N_2O) et le dioxyde de carbone (CO_2), est notable. L'observation a révélé que l'introduction de vapeur d'eau dans les spectres tend à diminuer l'estimation des proportions molaires de N_2O de 3% pour les expériences en laboratoire et de 12% pour les expériences sur le terrain, lorsque le modèle de moindres carrés classiques (CLS) est utilisé à une température constante de 30°C [33].

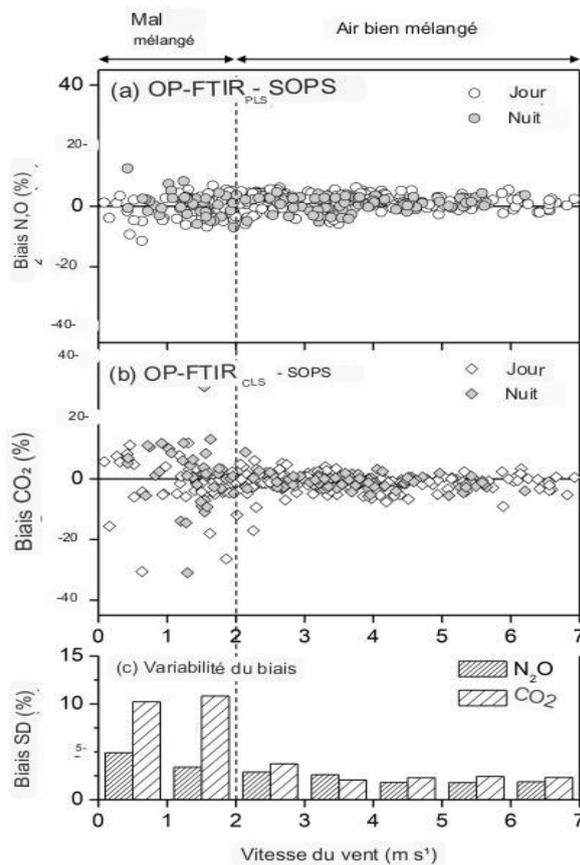


Figure 7. Effets de la vitesse du vent sur les différences de concentrations moyennées sur le trajet entre l'OP-FTIR et le S-OPS :

Figure 1.7 : Effet de la vitesse du vent

De plus, les variations de température entre le spectre de référence et le spectre échantillon conduisaient également à une sous-estimation des fractions molaires de N_2O , due à l'élargissement thermique et à l'augmentation des interférences de la vapeur d'eau dans les

spectres des échantillons humides. L'augmentation de la température de l'air a accentué ce biais de quantification lors de l'utilisation des modèles CLS. De même, les changements de longueur de trajet ont entraîné une réponse non linéaire des spectres et un biais, sous-estimant les fractions molaires de N₂O et de CO₂, respectivement de 30% et de 7,5%, sur un trajet optique de 100m avec les modèles CLS.

En revanche, pour la quantification de N₂O, les modèles à moindres carrés partiels (PLS) se sont révélés moins sensibles à la vapeur d'eau, à la température et à la longueur de trajet, offrant des estimations plus précises que les modèles CLS. Enfin, les faibles vitesses de vent (<2 m s⁻¹) ont conduit à une augmentation des incertitudes dans les fractions molaires moyennes sur le trajet illustré sur la figure 1.7.

La conclusion de l'étude propose que les modèles PLS offrent généralement des mesures plus précises que les modèles CLS, surtout si le gaz étudié est fortement perturbé par la vapeur d'eau ou d'autres gaz interférents. De plus, les modèles PLS sont moins sensibles aux variables environnementales que les modèles CLS. Pour les mesures OP-FTIR, il est recommandé de vérifier attentivement les concentrations calculées par CLS pour garantir la qualité et éviter des sous-estimations importantes. Aussi, il est suggéré d'adopter une résolution spectrale élevée (< 0.5 cm⁻¹) pour résoudre les caractéristiques spectrales complexes de tout gaz d'intérêt ou d'interférence.

3.1.3. Incertitude dans les mesures de température du gaz :

La température du gaz joue un rôle significatif dans les mesures spectroscopiques, y compris celles effectuées par FTIR. En spectroscopie, la température peut influencer la largeur de bande, l'intensité et la position des pics d'absorption, comme montré sur la figure 1.8. Par conséquent, toute variation de la température du gaz peut introduire des biais et des incertitudes dans les mesures spectroscopiques.

Ces incertitudes peuvent se propager aux résultats de la spectroscopie infrarouge. Par exemple, si la température augmente, cela peut provoquer une largeur de bande plus importante et une intensité moindre des pics d'absorption, ce qui peut mener à une sous-estimation de la concentration du gaz. Inversement, une température plus basse peut entraîner une surestimation de la concentration du gaz.

Il est donc essentiel de contrôler et de connaître précisément la température lors de la réalisation de mesures spectroscopiques pour minimiser ces incertitudes et obtenir des résultats plus fiables.

Dans cette étude [34] une étude de l'effet des variations de température sur la stabilité du spectromètre FT-IR. L'étude a montré que la variation de la sensibilité du détecteur et le désalignement du séparateur de faisceaux étaient associés à l'instabilité thermique du banc optique du spectromètre. Les auteurs ont conclu que le contrôle de la température du spectromètre était essentiel pour obtenir des mesures précises et fiables.

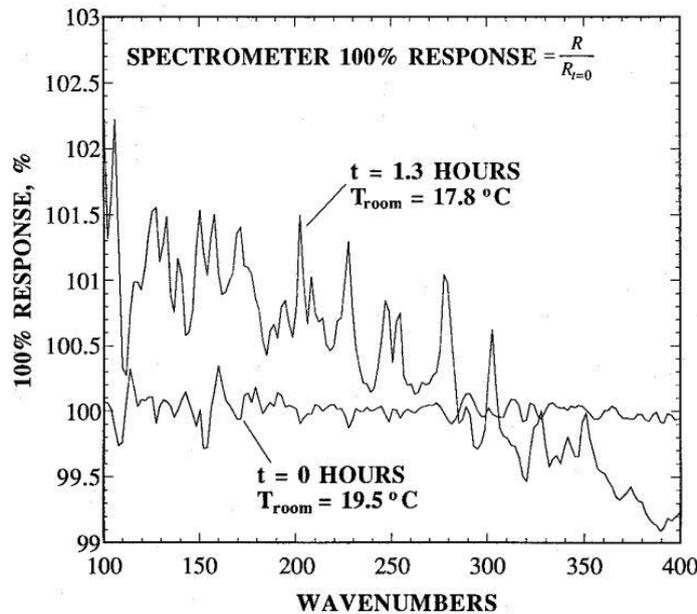


Figure 1.8 : Spectre de réflectance dans l'IR moyen

3.2. Incertitude liée au drone :

L'utilisation de drones, ou de systèmes d'aéronefs sans pilote (UAS), pour l'analyse in situ de panaches volcaniques présente plusieurs sources d'incertitude qui peuvent affecter la précision et la fiabilité des données collectées. Voici quelques-unes de ces incertitudes :

3.2.1. Incertitude dans la poussée du drone :

La poussée (T) d'un drone est généralement déterminée par l'équation suivante :

$$T = \rho * A * (\text{rpm})^2 * (D)^4$$

L'incertitude dans la poussée peut provenir de variations dans ces paramètres, notamment la densité de l'air (qui peut varier avec l'altitude et les conditions météorologiques), la vitesse de rotation de l'hélice (qui peut varier en fonction du contrôle de vol), et le diamètre de l'hélice (qui peut être affecté par l'usure).[35]

3.2.2. Incertitude dans la capacité de la batterie :

L'incertitude dans la capacité de la batterie peut être un facteur critique dans les opérations de drone, affectant directement le temps de vol et la distance de mission que le drone peut atteindre. Les batteries de drone, généralement des batteries au lithium-polymère (LiPo), ont une capacité nominale définie lors de la fabrication.

Pour estimer l'incertitude dans la capacité de la batterie, nous pouvons d'abord examiner l'équation de base pour la capacité de la batterie :

$$C = I * t$$

Où C, est la capacité de la batterie (généralement en milliampères-heures, mAh), I est le courant de décharge (en milliampères, mA), t est le temps pendant lequel ce courant est maintenu (en heures, h).

Dans le contexte d'une batterie de drone, le courant de décharge I peut être affecté par plusieurs facteurs, y compris la charge utile du drone, la vitesse de vol, et les conditions environnementales comme le vent et la température. De plus, la capacité de la batterie diminue avec l'âge, la température et les cycles de charge/décharge.

Pour quantifier l'incertitude dans la capacité de la batterie, nous pouvons utiliser le concept d'erreur relative, qui est une mesure de l'incertitude par rapport à la valeur nominale :

$$E = |(C_n - C_m) / C_n|$$

Où E est l'erreur relative, C_n est la capacité nominale de la batterie, C_m est la capacité mesurée de la batterie.

Cette équation donne une mesure de l'incertitude dans la capacité de la batterie en termes de pourcentage de la capacité nominale. Notez que cette équation ne prend pas en compte d'autres sources potentielles d'incertitude, telles que l'erreur de mesure dans le courant de décharge ou le temps de décharge.[36]

3.2.3. Incertitude dans le rendement du drone :

L'efficacité d'un drone peut être quantifiée de plusieurs manières, mais une mesure commune est le rendement en distance, qui est défini comme la distance parcourue par unité d'énergie consommée. Cette quantité peut être calculée à partir de la capacité de la batterie et du temps de vol.

Premièrement, nous pouvons définir le rendement en distance (η) comme suit :

$$\eta = d / E$$

Où d est la distance parcourue (en mètres), E est l'énergie consommée (en joules).

L'énergie consommée par le drone peut être dérivée de la capacité de la batterie et du temps de vol. Si nous supposons que le drone consomme une quantité constante de courant I (en ampères) pendant le temps de vol t (en secondes), alors l'énergie consommée est :

$$E = V * I * t$$

En substituant cette équation dans l'équation du rendement, nous obtenons

$$\eta = d / (V * I * t)$$

Il est important de mentionner que l'hypothèse de base de cette équation est l'existence d'un courant constant tout au long du vol. Toutefois, dans les conditions réelles, ce n'est pas forcément le cas. En effet, le courant peut être influencé par plusieurs éléments comme la rapidité du drone, la masse de la charge transportée ou encore les conditions atmosphériques durant le vol.

En complément, cette formule n'inclut pas l'efficacité du moteur du drone qui peut impacter son rendement. L'efficacité du moteur (η_m) est définie comme la proportion de la puissance bénéfique (la puissance employée pour le vol du drone) par rapport à la puissance entrante (la puissance apportée par la batterie):

$$\eta_m = P_u / P_i$$

où P_u est la puissance utile (en watts), P_i est la puissance d'entrée (en watts).

En substituant l'équation de la puissance d'entrée ($P_i = V * I$) et en réarrangeant, nous obtenons une autre équation pour le rendement :

$$\eta = \eta_m * d / (V * t).$$

3.2.4. Incertitude dans la localisation et le positionnement du drone :

La localisation du drone est généralement déterminée par le système GPS. Cependant, le signal GPS peut être affecté par des interférences atmosphériques, la réflexion des signaux sur des bâtiments ou d'autres structures, et des erreurs dans les horloges du satellite GPS. En outre, le drone peut être dévié de sa trajectoire prévue en raison de vents forts ou d'autres conditions de vol imprévues [37].

La localisation et le positionnement d'un drone sont généralement déterminés par le système de positionnement global (GPS). Cependant, il y a plusieurs sources d'incertitude dans les mesures GPS, notamment l'erreur de mesure du signal GPS, l'erreur de l'horloge du satellite, l'erreur due à l'ionosphère et à la troposphère, et l'erreur due à la réflexion des signaux (appelée multipath).

L'équation de base pour la position d'un drone en utilisant le GPS est donnée par le calcul de la pseudorange, qui est la distance entre le satellite et le récepteur (dans ce cas, le drone) : L'équation que vous avez mentionnée est utilisée pour calculer la pseudorange dans les systèmes de navigation par satellite comme le GPS. Voici une interprétation de chaque terme de l'équation :

- R est la pseudorange, c'est-à-dire la distance estimée entre le satellite et le récepteur (dans ce cas, le drone).
- $X_s, Y_s,$ et Z_s sont les coordonnées du satellite.
- $X_r, Y_r,$ et Z_r sont les coordonnées du récepteur (drone).
- C : la vitesse de la lumière.
- dT est le décalage de temps entre l'horloge du satellite et celle du récepteur.
- ϵ : Représente l'erreur de mesure, qui peut inclure des erreurs dues à l'atmosphère, au bruit du signal, etc.

L'équation est donc :

$$R = \sqrt{(X_s - X_r)^2 + (Y_s - Y_r)^2 + (Z_s - Z_r)^2} + c \cdot dT + \epsilon$$

Cette équation est utilisée pour estimer la position du drone en utilisant les signaux de plusieurs satellites. En pratique, le processus de résolution de ces équations pour obtenir la position du drone est assez complexe et nécessite des techniques d'estimation avancées.

3.2.5. Incertitude dans le plan de vol :

Le plan de vol d'un drone peut être affecté par des incertitudes peuvent survenir en raison de variations imprévues dans les conditions de vol, telles que des changements dans la direction et la vitesse du vent, des variations de température, ou des obstacles imprévus. Le plan de vol est souvent optimisé en utilisant des méta heuristiques le problème général ce décrit par le problème de voyageur de commerce.[38]

L'équation qui décrit le chemin parcouru par le drone dans le cadre du TSP peut être formulée comme suit :

1. Soit d_{ij} la distance entre le point i et le point j .
2. Soit x_{ij} une variable binaire qui vaut 1 si le drone se déplace directement du point i au point j , et 0 sinon.
3. Le problème du TSP peut alors être formulé comme le problème d'optimisation suivant :

Minimiser

$$\sum \sum d_{ij} x_{ij}$$

Sous les contraintes suivantes :

- Pour chaque point i , $\sum_j x_{ij} = 1$ (le drone quitte chaque point une fois et une seule fois)
- Pour chaque point j , $\sum_i x_{ij} = 1$ (le drone arrive à chaque point une fois et une seule fois)
- Il ne doit pas y avoir de sous-tours (c'est-à-dire de boucles qui ne passent pas par tous les points).

4. Quantification des incertitudes

4.1. Classification des incertitudes

Dans les problèmes relatifs aux systèmes de spectroscopie FTIR montés sur des drones, les incertitudes peuvent découler de variations de certains paramètres (géométriques, matériels, conditions de vol, etc). Oberkampff et al. [39] ont discuté en profondeur des sources d'incertitude et des méthodes de gestion de ces incertitudes. Ils ont classé les incertitudes en différentes catégories comme indique sur la figure 1.9:

1. Incertitudes stochastiques : Il s'agit de l'incertitude liée à un phénomène observé qui ne peut être expliqué par une approche déterministe. Cette incertitude est attribuable à la nature intrinsèquement aléatoire du phénomène.
2. Incertitudes cognitives : Il s'agit d'une lacune potentielle à n'importe quelle étape ou activité du processus de modélisation causée par un déficit de connaissances.

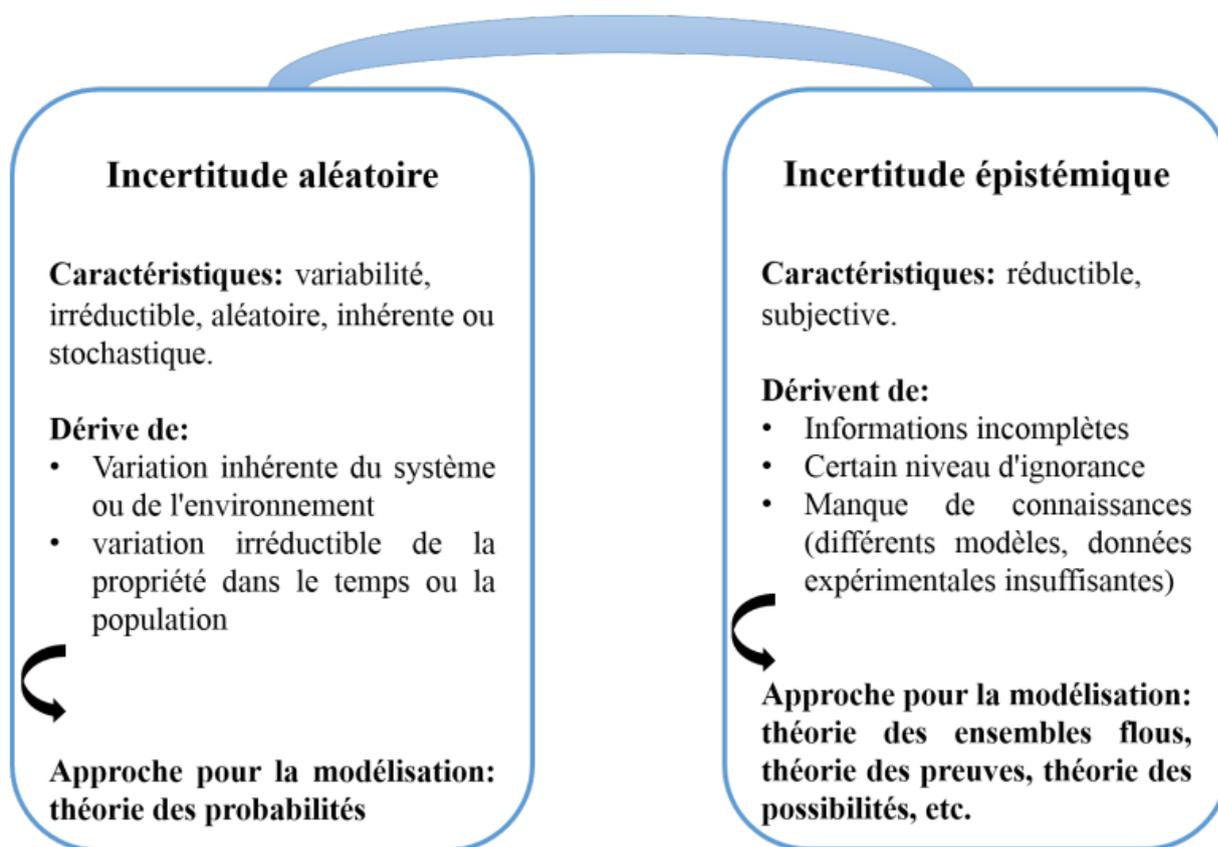


Figure 1.9 : Comparaison entre les incertitudes aléatoires et les incertitudes épistémiques

L'incertitude stochastique désigne la fluctuation naturelle qui est intrinsèquement présente. Cette forme d'incertitude peut être observée, par exemple, dans les conditions de bord d'un système ou dans la représentation de sa géométrie. En raison de la variabilité naturelle et de l'imprécision inhérente, par exemple, aux procédés de fabrication, les variations des conditions limites et des paramètres géométriques seront toujours présentes.

D'un autre côté, l'incertitude cognitive, qui peut être atténuée par l'acquisition de connaissances supplémentaires, est parfois considérée comme une incertitude réductible. Pour ce type d'incertitude, marqué par une certaine ambiguïté, aucune fonction de densité de probabilité précise ne peut être établie. Les exemples typiques de cette catégorie d'incertitudes comprennent un manque de données expérimentales ou une compréhension physique insuffisante du système en question. La différence entre l'incertitude stochastique et l'incertitude cognitive est clairement illustrée dans la figure 1.9

4.2. Gestion et dissémination des incertitudes

Dans la figure 1.10, diverses méthodes de traitement des incertitudes sont catégorisées en fonction des données d'entrée disponibles. Ces techniques peuvent être fusionnées et ajustées

en fonction de nos exigences spécifiques. En fonction de la complexité de la question, une méthode peut s'avérer plus appropriée que d'autres. L'approche basée sur la possibilité et l'approche probabiliste sont les plus couramment appliquées dans la littérature.

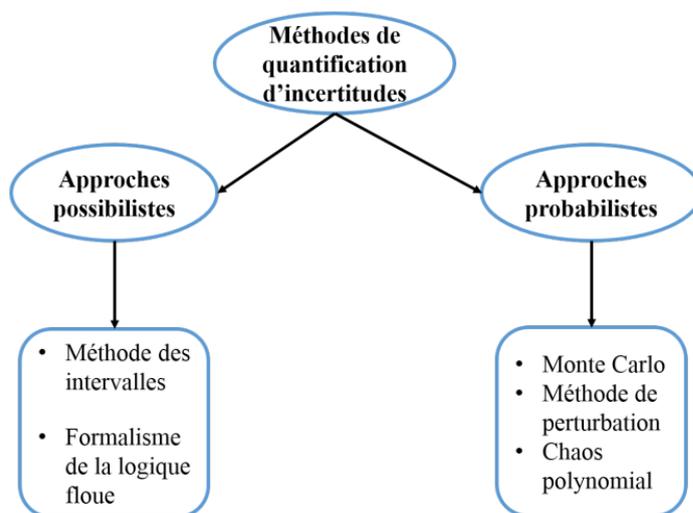


Figure 1.10 : Méthode de quantifications des incertitudes

5. Approches basées sur la Possibilité

L'avantage primordial des techniques basées sur la possibilité (ou encore ensemblistes) réside dans le fait qu'elles n'exigent pas la connaissance précise des lois qui régissent les incertitudes. Ces techniques visent à modéliser des données qui sont intrinsèquement imprécises.

5.1. Techniques Probabilistes

L'approche probabiliste est couramment utilisée dans le domaine de l'ingénierie. Cette stratégie met l'accent sur la représentation des incertitudes comme des variables aléatoires ou des processus stochastiques. L'adoption d'une vue probabiliste pose souvent deux défis significatifs. Le premier concerne le choix du type de distribution (uniforme, normal, lognormal, etc.). Ce choix est habituellement guidé par l'expérience ou par le savoir-faire spécialisé. Le deuxième défi est l'absence suffisante de données pertinentes pour déterminer les paramètres de distribution avec une grande fiabilité. Les méthodes de Monte Carlo [40],[41] de perturbation, et de chaos polynomial [42] sont amplement évoquées dans les écrits scientifiques, toutes nécessitant une description probabiliste de l'incertitude comme condition préalable à leur mise en pratique.

5.2. Monte Carlo (MC)

La méthode de Monte Carlo a vu le jour dans les années 1930, suite aux études de Fermi sur l'identification de nouvelles molécules. C'est un outil mathématique diversifié et facilement utilisable pour des systèmes déterministes avec des paramètres incertains modélisés par des variables aléatoires. Elle opère en créant des échantillons aléatoires pour chaque paramètre incertain, en accord avec leurs distributions de probabilité respectives. De ce fait, un jeu de paramètres est élaboré pour chaque échantillon, suivi d'un calcul déterministe. Ensuite, une évaluation statistique et probabiliste des résultats (moments statistiques, lois de probabilité) est réalisée. L'avantage crucial de la méthode de Monte Carlo est qu'elle peut être appliquée à tous les systèmes et que ses résultats sont exacts du point de vue statistique.

Néanmoins, sa contrainte principale est qu'elle nécessite une quantité considérable d'échantillons pour atteindre une précision convenable à un niveau de confiance spécifique, ce qui peut rendre cette méthode potentiellement coûteuse en termes de coût de calcul [41].

5.3. Approche de perturbation

L'approche de perturbation constitue une alternative pour la diffusion des incertitudes au sein des systèmes. Cette méthode repose sur l'approximation de l'ensemble des paramètres incertains via leur expansion de Taylor autour de leur moyenne [43],[44]. La fondation de cette approche réside dans le remplacement des fonctions aléatoires par leur expansion de Taylor au sein de la formule du modèle. Les composantes de même niveau sont assemblées pour ensuite générer un système d'équations. La résolution s'opère par la suite de manière progressive, en commençant par le niveau zéro. Néanmoins, l'implémentation de cette approche s'avère particulièrement ardue pour les systèmes complexes comportant un nombre élevé de degrés de liberté. Le désavantage principal de cette méthode est qu'elle ne peut être employée que dans les situations où les paramètres incertains présentent de faibles variations autour de leur moyenne.

5.4. Fiabilité d'un système

D'après les critères de l'AFNOR [45],[46] on pourrait considérer la stabilité comme la capacité d'un équipement à exécuter une tâche spécifiée sous des conditions préétablies. L'évaluation de la stabilité d'une infrastructure vise à déterminer la chance qu'une structure, exposée à des variables imprévisibles (turbulences, impacts, usure, etc.), soit en mesure de répondre à toutes les exigences pour une période de vie prédéfinie.

L'examen de la stabilité comporte trois phases :

- L'identification des facteurs aléatoires de base, qui vont assimiler les incertitudes via leurs lois de répartition.
- La définition de la fonction de rendement décrivant l'échec du système.
- L'estimation des indices de stabilité, qui vont apporter une évaluation quantitative et qualitative de la stabilité du système.

De plus, l'évaluation de la stabilité se résume à estimer la probabilité d'échec par rapport à chaque scénario d'échec possible.

5.5. Fonction de performance

La notion de fiabilité étant posée, un critère de défaillance est défini à l'aide d'une fonction dite de performance (ou d'état limite), notée $G(X)$, et qui dépend des variables de conception du modèle. On définit le domaine de sûreté D_s et le domaine de défaillance D_f de R_k comme montrée sur la figure 1.11.

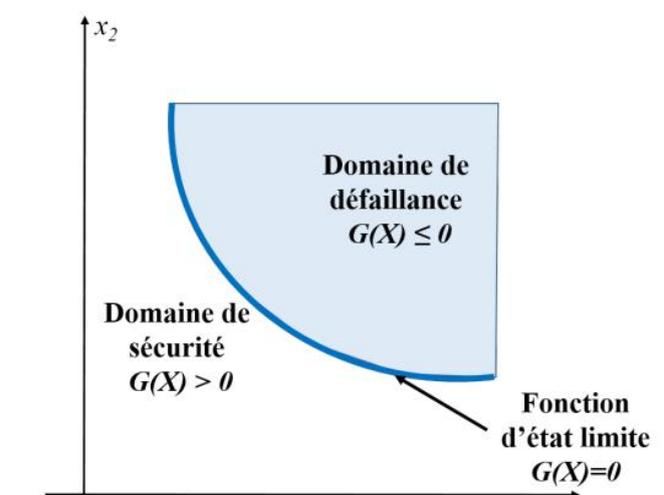


Figure 1.11 : Domaines de sûreté et de défaillance dans le cas de deux variables

5.6. Probabilité de défaillance

La fiabilité R (en anglais, reliability) d'une structure est par convention définie de la façon suivante :

$$R = 1 - P_f$$

Avec la probabilité de défaillance P_f (en anglais, probability of failure) qui correspond à la probabilité d'occurrence de l'événement $G(X) \leq 0$ et elle peut être écrite sous la forme :

$$Pf = \text{prob}(G(X) \leq 0)$$

Cette probabilité n'est que l'intégration de la densité conjointe de probabilité sur le domaine de défaillance.

$$Pf = \int_{D_f} F(x) \prod_{i=1}^k dx_i$$

Le défi de calculer cette intégrale provient de notre faible connaissance de la densité conjointe. De surcroît, la fonction de rendement est souvent implicite, émanant fréquemment d'un modèle numérique comme la technique des éléments finis. Dans les écrits scientifiques, diverses stratégies de résolution ont été mises en place pour surmonter ces obstacles. On peut les regrouper en deux catégories principales : celles qui s'appuient sur des simulations et celles qui font appel à une approximation de l'indice de fiabilité.

6. Méthodes de simulations

Ces méthodes sont basées sur le calcul de la fonction de performance pour un échantillon représentant. Elles sont les plus coûteuses en temps du calcul, mais restent la référence sur le résultat en probabilité de défaillance.

Les méthodes de simulation Monte Carlo sont fréquemment employées pour évaluer la fiabilité en génie civil et en ingénierie structurelle. La probabilité d'échec se calcule en divisant le nombre de simulations qui ont échoué par le nombre total de simulations réalisées (comme illustré sur la figure 1.12).

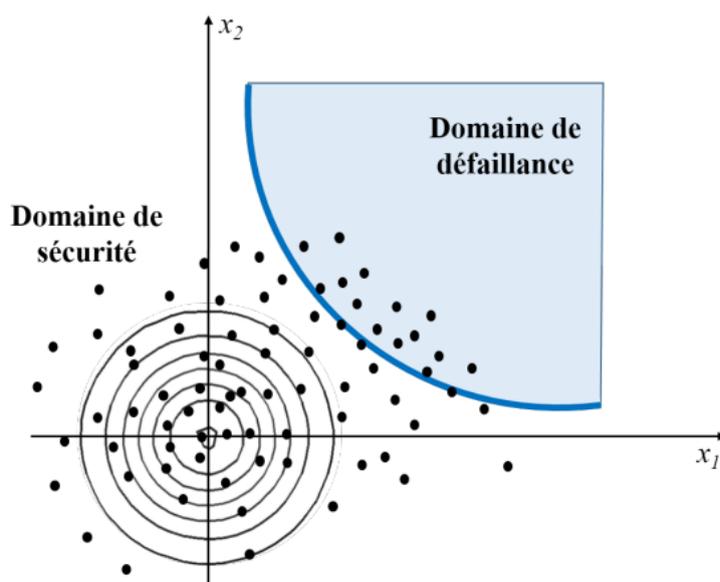


Figure 1.12 : Simulations de Monte Carlo pour la probabilité de défaillance

7. Méthodes d'approximation FORM/SORM

Dans un premier temps, il est nécessaire de présenter le concept d'indice de fiabilité, qui constitue la base de calcul des méthodes d'approximation. De nombreux auteurs ont formulé des indices de fiabilité, parmi lesquels les plus reconnus dans la littérature sont ceux de Rjanitzyne-Cornell (β_c) [46] et de Hasofer-Lind (β_{hl}). L'indice de Rjanitzyne-Cornell (β_c) est défini comme le rapport entre la moyenne et l'écart type de la fonction de performance. Ces indices permettent d'évaluer la probabilité de défaillance d'un système donné en utilisant des approximations analytiques avancées.

$$\beta_c = \frac{\mu_G}{\sigma_G}$$

Hasofer et Lind ont formulé une approche visant à calculer l'indice de fiabilité β_{hl} en utilisant l'espace des variables aléatoires normales centrées réduites et statistiquement indépendantes. Pour cela, le vecteur des variables aléatoires X_i de l'espace physique doit être transformé en un vecteur aléatoire U dans l'espace normal standard en utilisant une transformation iso-probabiliste [47], comme illustré dans la figure 1.13 .

Selon la définition de Hasofer et Lind, l'indice de fiabilité β_{hl} correspond à la distance minimale entre l'origine de l'espace normé et la fonction d'état limite $H(u) = 0$. Ainsi, la probabilité de défaillance peut être exprimée de la manière suivante, sous la forme :

$$Pf = \int \Phi m(u) du$$

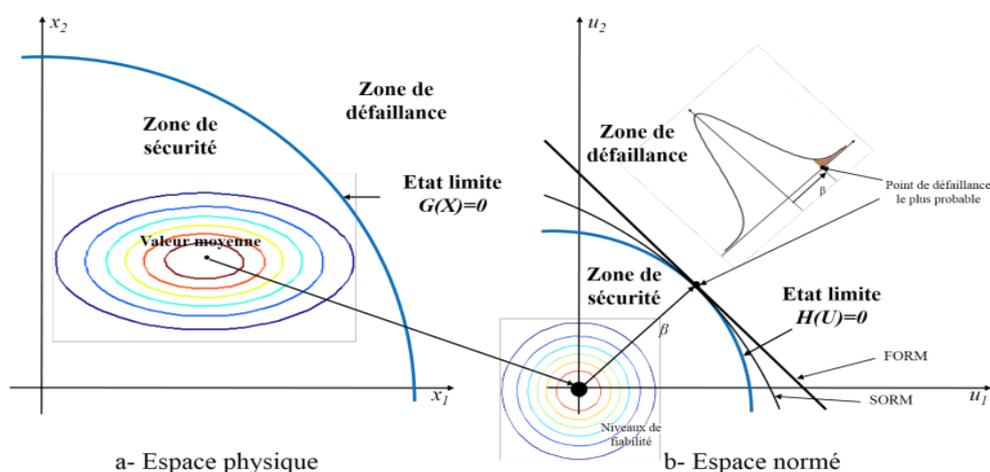


Figure 1.13 : Transformation iso-probabiliste de l'espace physique vers l'espace normal standard

En utilisant Φ_m , qui est la fonction représentant la densité de la loi multinormale centrée réduite, nous nous engageons à identifier ce que l'on nomme le point de conception, également appelé le point de défaillance le plus probable, ou plus techniquement le MPFP (Most Probable Failure Point). Cette tâche équivaut à résoudre l'équation d'optimisation suivante :

$$\text{Min } d(u) = \sqrt{\sum u_i^2}$$

$$\text{s.t. } H(x,u) \leq 0$$

– Méthode FORM (First Order Reliability Method):

Elle consiste à remplacer la surface d'état limite par un hyperplan tangent au point MPFP

P*. A l'aide de cette approximation, il est possible de donner une équation exprimant la probabilité de défaillance en fonction de l'indice de fiabilité $\beta = \beta_{hl}$:

$$P_f = \Phi(-\beta)$$

– Méthode SORM (Second Order Reliability Method) [48]

Cette technique d'approximation améliore l'exactitude des probabilités d'échec. En effet, on y substitue l'hyperplan par une hyper-surface quadratique tangentielle, dont les courbures correspondent à celles de la surface originelle au niveau du point de conception P*. Par conséquent, la fonction d'état limite, au point MPFP, est assimilée à une expansion de Taylor de deuxième ordre de sorte que la probabilité de défaillance devienne ainsi :

$$P_f = \Phi(-\beta) \left(\prod_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{1+\beta_{ki}}} \right)$$

8. Couplage drone – capteur FTIR

Le couplage des drones avec des instruments de mesure infrarouge offre un potentiel considérable dans le domaine de la télédétection, mais il subsiste des incertitudes [48]. Bien que ces systèmes fournissent des informations détaillées sur les émissions infrarouges, par conséquent sur la température, l'humidité, la végétation et d'autres paramètres environnementaux, leur précision dépend de nombreux facteurs, tels que les conditions météorologiques, l'altitude de vol du drone et la qualité de l'instrument de mesure. L'utilisation de drones pour transporter ces dispositifs infrarouges présente des avantages, tels que la capacité à couvrir de grandes étendues rapidement et à accéder à des zones difficiles. Cependant, leur utilisation pose également des défis, comme la nécessité d'une planification et d'une programmation précises pour les vols répétés, et la gestion de facteurs imprévus comme

les pannes de matériel ou les variations climatiques. De plus, bien que les drones réduisent les risques pour les chercheurs humains en explorant des territoires difficiles ou dangereux, ils peuvent également introduire de nouvelles sources d'erreur dans la collecte de données. En résumé, alors que le couplage des drones avec des instruments de mesure infrarouge ouvre de nouvelles possibilités dans le domaine de la télédétection, il est important de tenir compte de ces incertitudes lors de l'interprétation des résultats.

9. Conclusion

Pour conclure, nous avons exploré dans ce chapitre les divers systèmes de prélèvement de gaz, dont ceux qui utilisent la technologie optique et ceux qui s'appuient sur l'usage des drones. Les différentes incertitudes rattachées à ces systèmes ont également été abordées. L'intégration des drones aux dispositifs de mesure ouvre de nouvelles voies en matière de collecte de gaz. Toutefois, ce couplage entraîne de nouvelles zones d'incertitude qui doivent être considérées pour assurer la précision et la fiabilité des données collectées.

Dans le chapitre suivant, nous allons traiter de ce point clé en profondeur. Nous analyserons les deux catégories d'incertitudes : celles propres aux systèmes de prélèvement de gaz et celles qui émergent de l'emploi des drones. Notre but est de comprendre comment ces incertitudes peuvent influencer les résultats et comment nous pouvons les réduire pour accroître la précision de nos mesures.

En définitive, une meilleure appréhension de ces incertitudes nous permettra d'exploiter pleinement les bénéfices que les drones peuvent apporter à la collecte de gaz, tout en garantissant la fiabilité et la justesse de nos résultats..

CHAPITRE 2 : Etude et conception du système drone : optimisation du contrôleur de vol et du profil de mission

CHAPITRE 2 : Etude et conception du système drone : optimisation du contrôleur de vol et du profil de mission.....	28
1. Introduction	28
2. Objectifs et attentes	29
3. Analyse fonctionnelle des différents compartiments du projet :.....	30
4. Analyse de risques pour le capteur embarqué :	33
5. Cahier de charge du capteur et du drone :	35
5.1. Présentation du système.....	35
5.1.1. Partie vecteur aérien.....	35
5.1.2. Partie station sol	35
5.1.3. Pièces de rechange, outillage et documentation.....	35
5.1.4. Moyens de conditionnement destiné au stockage et au transport	36
5.1.5. Fonctionnalité du système.....	36
5.1.6. Robustesse du système.....	36
5.1.7. Visualisation des informations	36
5.1.8. Enregistrement des données.....	36
5.2. Caractéristiques du système et de ses composants	37
5.2.1. La partie vectrice aérien	37
5.2.2. La charge utile.....	38
5.2.3. La partie station sol	38
5.2.4. Profile de mission du drone.....	39
5.2.5. Conception des drones	39
5.2.5. Justification des choix de conception.....	40
6. Modélisation du vol vertical d'un drone et conception de son pilote automatique.....	40
7. Optimisation du plan de vol :	44
7.1. Utilisation d'une heuristique pour résoudre le problème du voyageur de commerce	46
7.1.1. L'approche MCMC pour résoudre le problème du voyageur de commerce	47
7.2. Résultats et conséquences.....	49

1. Introduction

L'analyse spectrométrique se distingue par sa simplicité, sa vitesse d'exécution et son exceptionnelle sélectivité, des attributs qui la rendent particulièrement appropriée pour traiter une multitude de problématiques impliquant divers analytes. Toutefois, la corrélation entre la concentration de l'analyte dans le matériau ou l'échantillon et le signal enregistré se révèle être complexe. En effet, le signal d'un analyte est généralement conditionné non seulement par la concentration de l'analyte en question, mais aussi par la présence d'autres substances, par la structure du matériau, la forme de l'échantillon, ainsi que les conditions environnementales. Par ailleurs, la précision et la fiabilité de l'analyse chimique dépendent largement de la méthodologie de préparation de l'échantillon étudié, chaque mesure chimique nécessitant un processus de préparation spécifique.[49]

La procédure d'analyse spectrophotométrique englobe couramment les techniques de mesure déployées dans les laboratoires d'examen chimique. L'objectif de ce projet est de rediriger ces techniques vers des applications plus dynamiques, en particulier en association avec des drones. Toutefois, l'évaluation de la métrologie des résultats obtenus par la mesure photométrique s'avère insatisfaisante.

2. Objectifs et attentes

L'objectif du projet est de mettre en place un système de capteur infrarouge monté sur des drones mobiles et intelligents qui permette de caractériser un milieu selon les espèces gazeuses présentes.

Des capteurs IR seront montés sur les drones qui doivent faire une campagne de mesure selon un cycle optimale et l'application doit avoir la possibilité de fonctionner dans le domaine spatial ce qui implique que les dispositifs capteurs doivent remplir des critères de robustesse et d'efficacité. Le drone doit donc décrire un trajet appelé plan de vol comme montre sur la figure 2.1 .

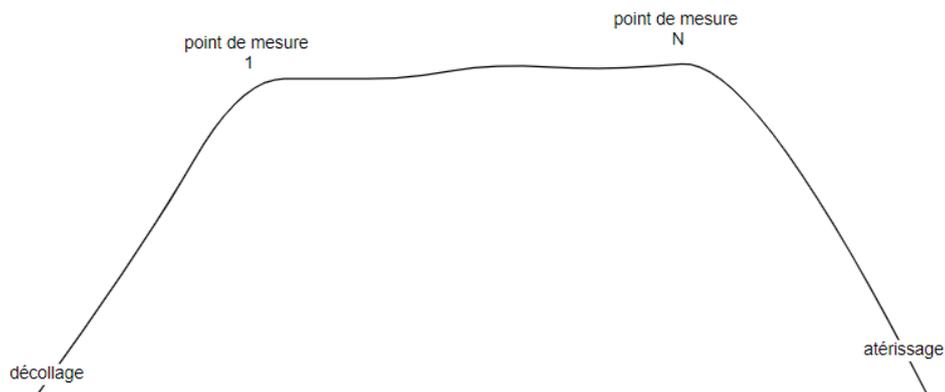


Figure 2.1 : Plan de mission du drone

Il est nécessaire d'avoir un mode de vol sous contrôle manuel qui permet à l'opérateur d'avoir la main pour interrompre la campagne de mesure et choisir une autre trajectoire ou d'annuler la mission.

Un mode de vol automatique dans lequel la trajectoire du drone sera déterminée par des algorithmes qui proposent une heuristique du problème de voyageur de commerce à travers N points et avec arrêt en chaque point pour faire la mesure et retourner en fin de la mission à la base au sol.

3. Analyse fonctionnelle des différents compartiments du projet :

Un système est une collection organisée d'éléments qui, ensemble, satisfont plusieurs besoins cohérents. C'est un ensemble large qui contient fréquemment toutes les sortes de produits (matériel, processus, service). Le terme "produit" est utilisé dans son acception la plus large. Il peut désigner : un objet, un matériel, une procédure administrative ou technique, un service, un logiciel...

La méthode SADT, illustrée dans la figure 2.2, est une technique graphique qui commence par une perspective générale pour se concentrer ensuite sur des détails spécifiques. Elle permet de décrire des systèmes dans lesquels coexistent des flux de matière, d'énergie et d'information. Cette technique repose sur l'interconnexion de ces divers flux avec les fonctions que le système assure. Une étude fonctionnelle du système, du capteur FTIR et du traitement des données est illustrée dans les tableaux 2.1, 2.2 et 2.3, ainsi que la représentation du diagramme de pieuvre dans les figures 2.3, 2.4 et 2.5.

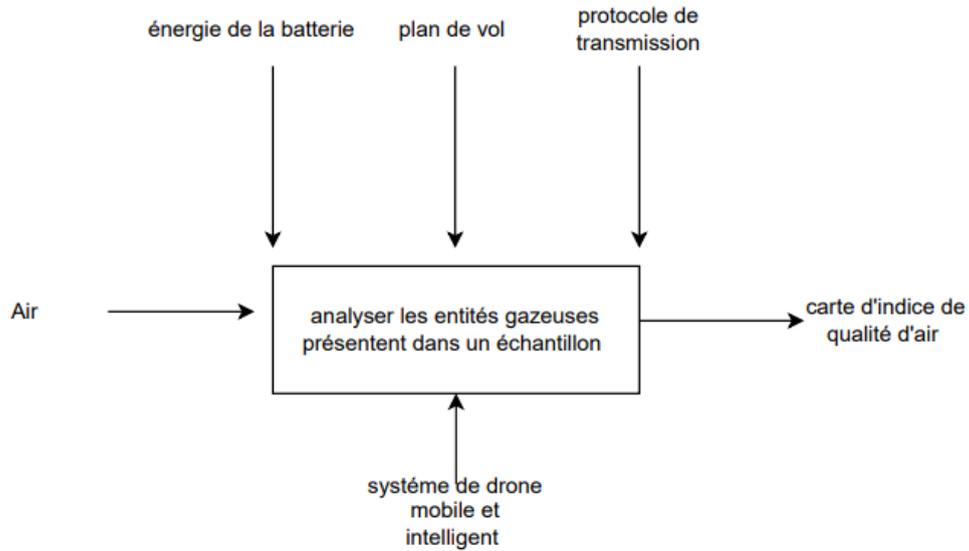


Figure 2.2 : Diagramme SADT du système

Fonction de service	Ri	Ra	FP	FC	Fu
Déterminer l'indice de qualité de l'air		×		FC2	×
Indiquer le gaz provoquant plus de pollution dans l'air	×		FP1		×
Choisir les positions de campagne de mesure		×		FC1	
Communiquer la position à l'opérateur	×		FP3		
Signaler le niveau de pollution à chaque position	×		FP2		

Tableau 2.1 : Analyse fonctionnelle du système

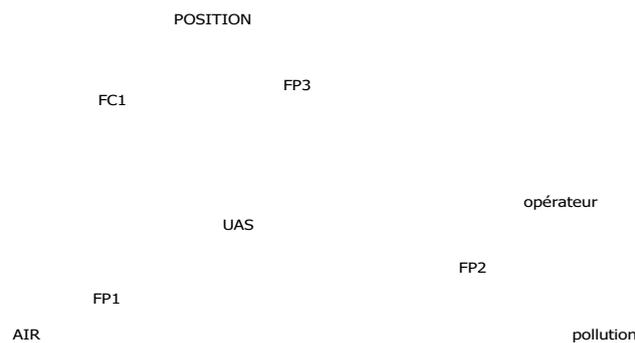


Figure 2.3 : Diagramme de pieuvre du drone de détection

Analyse fonctionnelle du capteur IR ;

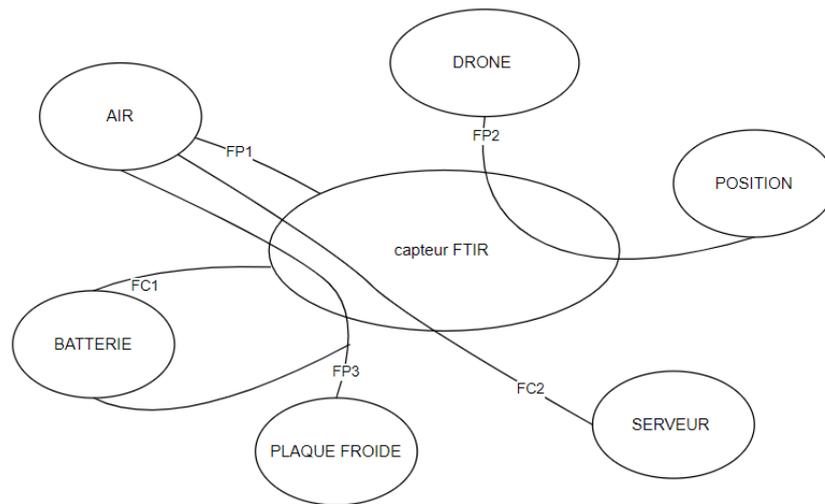


Figure 2.4 : Diagramme de pieuvre du drone du dispositif capteur

	Ri	Ra	FP	FC	FU
Transmettre les mesures des entités gazeuses présentes dans l'air au serveur (Cas de base Ad Hoc)	X		FP1		X
Prise une mesure IQA lors d'un vol de drone en vol stationnaire dans un position	X		FP2		
Intercepter l'air refroidi par la plaque froide pour minimiser la batterie énergie	X		FP3		
Réaliser des mesures en respectant l'énergie de la batterie niveau		X		FC1	X
Caractériser les entités gazeuses présentes dans l'air		X		FC2	X

Tableau 2.2 : Analyse fonctionnelle du capteur FTIR

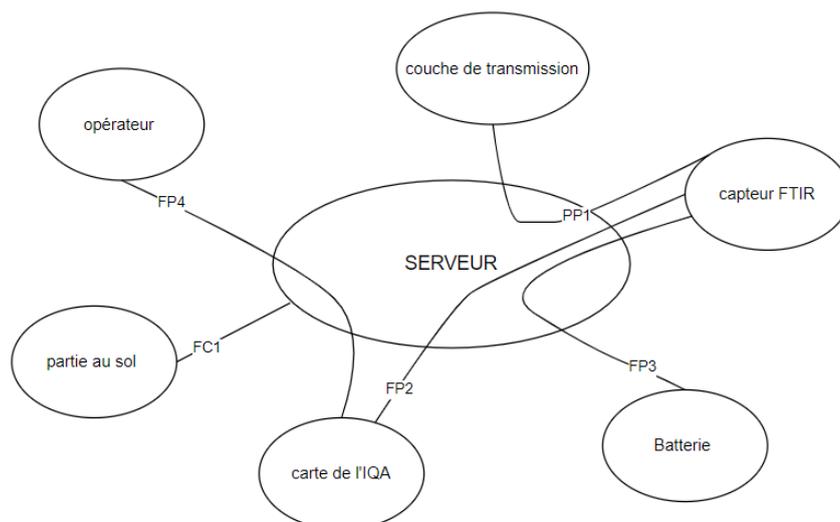


Figure 2.5 : Diagramme de la pieuvre de la couche de traitement de données

	Ri	Ra	FP	FC
Traiter les mesures prises par le capteur et transmises à travers la couche de transmission	X		FP1	
Guidez le capteur vers la position suivante dans un cycle qui prolonge la durée de vie de la batterie	X		FP3	
Étalonnez les valeurs reçues du capteur et faites une analyse de la qualité de l'air carte	X		FP2	
Générer une carte IQA compréhensible pour l'opérateur	X		FP4	
Installé dans une base au sol pour gérer les opérations		X		FC1

Tableau 2.3 : Analyse fonctionnelle de la partie traitement de donnée

4. Analyse de risques pour le capteur embarqué :

L'illustration présentée précédemment démontre l'indissociabilité de l'objet testé et de l'instrument de mesure lors du processus d'évaluation. Conformément à cette représentation, afin de procéder à une évaluation minutieuse d'un résultat de mesure, il est impératif d'analyser tous les facteurs pouvant influencer les résultats de manière exhaustive, tels qu'indiqués dans le tableau 2.4.

En cours de traitement, il est seulement après une analyse approfondie des facteurs mentionnés précédemment et l'évaluation des conditions supplémentaires spécifiques à chaque cas que l'incertitude, en tant qu'estimation précise du résultat de mesure, peut être correctement fournie. Le tableau suivant met en évidence l'impact de chacun de ces facteurs.

Description	Gravité 1-4	Occurrence 1-4	Criticité	Prévention	Réparation
Très faibles concentrations de gaz	3	3	9	Optimiser le volume de la chambre polluante	Spectroscopie à modulation de longueur d'onde (WMS)
Rapport signal/bruit réduit	3	2	6	Isolez de tout type d'exposition à des températures élevées.	Guides d'ondes à noyau creux à faible perte (HCW)
La divergence angulaire	2	3	6	Des problèmes d'interprétation	Choix d'une ouverture d'entrée et de sortie pour le faisceau laser
La présence de vapeur d'eau dans le milieu à étudier	2	2	4	Avoir une idée de la quantité de vapeur d'eau qui existe dans le milieu.	Différencier les caractéristiques spectrales de H ₂ O en éliminant complètement les interférences.
Des températures plus élevées	4	1	4	Surveiller la température du capteur	Refroidissement continu des dispositifs de détection
La précision de la mesure	2	2	4	Répétition du balayage du spectre IR	Contrôler la bande passante dans laquelle nous allons agir.

Tableau 2.4 : Analyse de risque du capteur FTIR

Les variations des charges et les incertitudes associées aux modèles d'analyse ont un

impact sur la performance de la conception optimale, ce qui la distingue de ce qui était initialement prévu. La figure 2.6 illustre cette distribution.

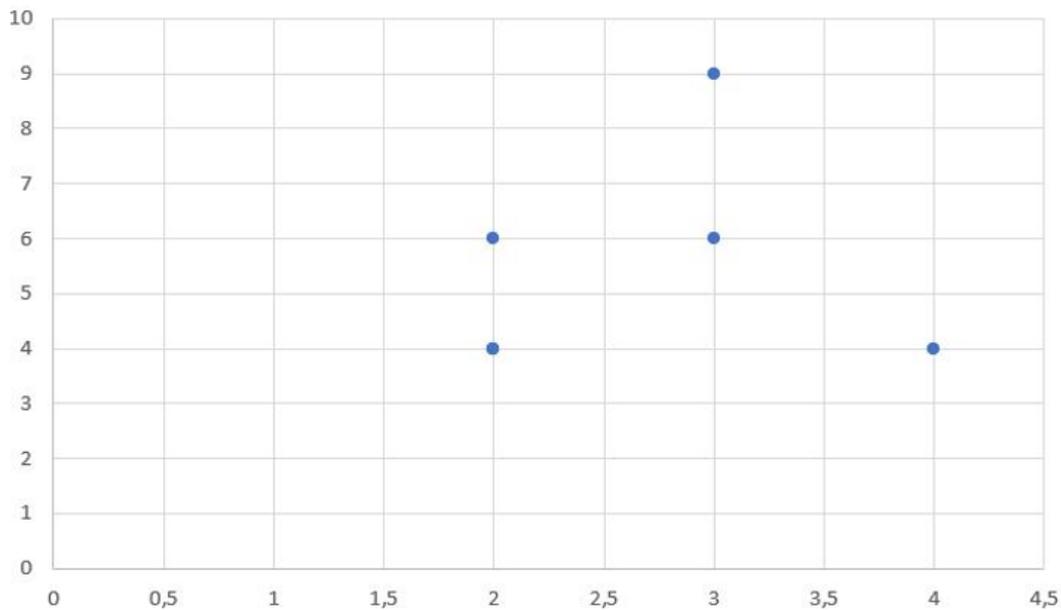


Figure 2.6 : Présentation des différentes criticités

Une étude de fiabilité peut être réalisée en utilisant des méthodes de simulation conjointement avec le modèle de masse et les forces externes, afin de procéder à une analyse de stabilité du drone.

5. Cahier de charge du capteur et du drone :

5.1. Présentation du système

Le système de drones est un ensemble de drones en nombre réduit d'aéronefs ayant comme caractéristiques la possibilité d'un vol autonome à décollage vertical (VTOL). Il est muni d'au moins quatre (4) moteurs électriques qui vont alimenter des ailettes assurant le maximum de drainage d'air, le drone doit garder sa position et son altitude lors de son stationnement au point de mesure, les supports des ailettes doivent avoir le maximum de degré de liberté pour garantir cette propriété. Il est muni de charges utiles de type capteur infrarouge dédiée à la spectroscopie.

Le système de drone complet est composé des éléments suivants.

5.1.1. Partie vecteur aérien

Une flotte de drones composés d'au moins 2 drones. Chaque drone doit avoir 4 moteurs qui alimentent ses ailettes. Son alimentation électrique (2 jeux de batteries). Une charge utile

amovible de capteur IR. Un système de refroidissement des dispositifs capteurs et de l'air qui va être analysé. Un protocole de communication entre les membres de l'équipe de drone. Un protocole de transmission de donnée vers la base au sol.

5.1.2. Partie station sol

Une station de réception et de traitement au sol permettant de calibrer les mesures reçus, faire le choix du cycle optimal entre N points, et construire la carte d'indice de qualité d'air à partir d'une campagne de mesure sélective.

Les algorithmes de transformées de Fourier et de calibration qui vont traiter le signal venant du capteur pour aboutir à un spectrographe (éliminer l'empreinte de vapeur d'eau, isoler les bruits dus au surchauffe brusque).

Une interface graphique pour donner une présentation de résultat sous forme de carte d'indice de qualité d'air.

Des dispositifs de transmission qui peuvent garantir la communication avec la flotte des drones en toute sécurité.

5.1.3. Pièces de rechange, outillage et documentation

Des batteries rechargeables (après 500 cycles)

Des outils de montage et de démontage de l'ensemble du drone.

Des pièces de rechanges pour les antennes de RC.

5.1.4. Moyens de conditionnement destiné au stockage et au transport

Des valises de stockages robuste et isolé thermiquement.

Des moyens de stockage qui peuvent protéger les dispositifs capteur dans des milieux sévères.

5.1.5. Fonctionnalité du système

Mise en vol et contrôle du vol du système

Le système dispose au minimum de deux modes de vol :

Observation

L'opérateur doit aboutir à une carte de l'indice de qualité d'air pour un milieu à partir d'une analyse en spectroscopie IR d'un échantillon d'air refroidit provenant du milieu.

5.1.6. Robustesse du système

Le système est conçu de sorte qu'il reste opérationnel dans des conditions climatiques sévères. Le dispositif capteur, les ailettes et la carcasse du drone doivent être conçues tout en considérant la finalité d'utilisation dans des applications planétaires dans des vitesses de vent et de températures élevées.

5.1.7. Visualisation des informations

Le système doit avoir la capacité de communiquer avec l'opérateur en temps réel indiquant l'état global des membres de l'équipe (position, altitude, niveau de batterie, échauffement du capteur) via une interface graphique, pour permettre à l'opérateur de prendre des décisions concernant la démarche de la mission.

Le système doit aussi avoir une interface graphique pour montrer les caractéristiques du milieu investigué après traitement des données reçues du drone, sous forme de carte d'indice de qualité d'air, la présentation doit comprendre une version pour les opérateurs non spécialistes et une autre pour les spécialistes.

5.1.8 Enregistrement des données

A chaque mission, le système doit :

- Enregistrer les mesures prises dans chaque point du milieu survolé.
- Garder une carte d'indice de qualité d'air référence pour chaque zone investiguée qui va servir pour éliminer les valeurs hors norme et pour faire le spatial « fitting » afin de générer une nouvelle carte.

Le nombre de missions stockées simultanément par les stations sol qui doivent être au minimum deux pour un vol de durée de 30 minutes au maximum par mission.

Le système doit permettre à l'opérateur d'enregistrer la mission même dans le cas où l'opérateur décide d'interrompre la campagne de mesure, les valeurs enregistrées pouvant servir à l'étalonnage des mesures pour les prochaines missions.

5.2. Caractéristiques du système et de ses composants

5.2.1. La partie vectrice aérien

Le drone doit être un système à voilure tournante équipé d'au moins 4 moteurs électriques.

La structure doit être robuste ayant le maximum de partie mobile, les plus compactes possibles avec un centre de gravité inclus dans le plan des ailettes. Sa masse à vide ne doit pas dépasser 8 kilogrammes. Le drone doit avoir la possibilité de montage et démontages rapide, il doit inclure le maximum de parties faites en impression 3D. Les matériaux choisis doivent être robuste, légères et résiste les hautes températures.

Le drone va accueillir une charge utile de capteur IR, il doit être installé en toute sécurité, il doit être accessible et aussi facile à démontre qu'on l'opérateur veut faire des activités de maintenances.

L'endurance de vol du drone être supérieure à 15 minutes dans les conditions climatiques sévères avec 1 kilogramme de charge utile et 30 minutes dans des conditions météorologiques courantes.

Le drone peut voler à une vitesse d'au moins 15 m/s en mode manuel et 10 m/s en mode automatique.

Les liaisons de données doivent être réalisées dans les bandes de fréquences en conformité avec le règlement en vigueur des radiocommunications.

Cet équipement volant doit être équipé d'un hôte pour recevoir le capteur infrarouge. Le système de drone doit comprendre une fusion de données permettant de connaître l'état global du drone et des autres membres de l'équipe. Il doit aussi avoir la possibilité d'interrompre le vol autonome et donner la main à l'opérateur pour qu'il prenne le contrôle du drone. Le système de drone doit être équipé d'un train d'atterrissage limitant l'énergie à l'impact afin de garantir un atterrissage sur des états de surface non plane.

5.2.2. La charge utile

La charge utile du système drone comprend les éléments suivants :

A. Un capteur IR à transformé de Fourier.

- Ce capteur doit disposer d'une bande passante optique entre 2.0 μm et 5.0 μm .
- Il doit avoir une bonne résolution d'au moins 6 cm^{-1} .
- Taux maximal de lecture du spectre complet d'au moins 600 Hz.
- Le capteur doit avoir des dimensions qu'ils lui permettent d'être monté sur un drone. Il doit avoir une longueur qui ne dépasse pas 270 mm, une largeur maximale de 170 mm et une hauteur de 90 mm.

- Les températures de fonctionnement doivent être entre 10 °C et 40 °C et la température doit être surveillée en temps réel car au-delà du seuil de 37°C, il faut déclencher le refroidissement du capteur.
- Le capteur doit avoir une excellente stabilité en intensité et en longueur d'onde.
- Le capteur doit avoir une masse qui ne dépasse pas les 2kg.
- Le capteur doit avoir un boîtier robuste, léger et isolant.

5.2.3. La partie station sol

Station de réception et de visualisation sol principale. La station principale est un serveur qui traite les informations reçus du drone et donne des instructions en retour. Son autonomie de fonctionnement est de quatre heures minimum.

- Elle permet de connaître l'état global du drone.
- Elle permet de planifier la trajectoire de la mission.
- Elle fait le mapping du milieu traité en faisant du spatial « fitting ».
- Elle traite le signal reçu du capteur infrarouge pour aboutir à un spectrographe tout en éliminant les bruits prévus (dus aux surchauffes temporaires ou à la vapeur d'eau)
- Elle intègre les dispositifs de communication avec les drones et les organes de commandes.
- Elle doit stocker les vols effectués jusqu'au minimum 2 missions par milieu.
- Elle comprend une interface graphique pour communiquer avec l'opérateur les données du système et les résultats trouvés.
- La communication avec le drone doit être protégée contre les attaques avec un protocole optimal.

La programmation de plan de vol qui comprend au moins 5 points (par drone) doit se faire dans un temps ne dépassant pas les 5 min y compris la coordination de tâches entre membre d'équipe de drone et le vol doit se faire en toute sécurité, en respectant le niveau d'énergie de batterie et le surchauffe du dispositif capteur.

L'opérateur doit avoir la pleine capacité à intervenir et manœuvrer l'aéronef dans n'importe quelle phase de la mission.

Le système de drone doit permettre :

- De maintenir la position du drone lors des vols stationnaires dans un point de mesure pendant 10s
- De partager le profil de mission entre les drones de l'équipe ;
- De voler à une vitesse d'au moins 15 m/s en mode manuel et 10 m/s en vol automatique.
- De rester en vol pour un temps minimum de 15 minutes dans des conditions climatiques sévère et de 30 minutes pour les conditions climatiques normales.

5.2.4. Profile de mission du drone

Le drone va décoller d'un point initial situé à la base au sol pour faire un cycle entre N points dédiées pour prendre des mesures et il va s'arrêter à chaque point durant le temps nécessaire pour que l'air entre dans la chambre de polluants afin qu'il soit analysé et la consommation d'énergie doit être optimisé par le choix du plus court cycle : il s'agit donc du problème de voyageur de commerce. Afin de garantir un fonctionnement efficace et en toute sécurité du dispositif drone il est nécessaire de maîtriser la partie de fusion de données car en effet le drone doit avoir un état de connaissance global sur son état et sur la position des autres membres de l'équipe.

5.2.5. Conception des drones

Le choix du quadcopter s'est fait après une comparaison de différents types de drones (hélicoptère, ailes fixes, hybride). Pour le type de drone le plus utile pour notre application de thèse, l'utilisation de drone multirotor nous semble la plus adaptée, nous avons besoin d'un vol stationnaire pour la détermination de l'indice de qualité de l'air en un point ; nous aurons également plus de facilité d'utilisation grâce à l'utilisation de multi-drone. Le logiciel solid works sera utilisé pour faire la conception des différentes parties du drone et l'assemblage (Fig.2.7).



Figure 2.7 : Conception du drone avec capteur fthir

5.2.6. Justification des choix de conception

- L'utilisation de six ailerons pour garantir la propulsion maximale possible.
- Dispositif d'atterrissage conçu avec six supports pour un atterrissage en toute sécurité.
- Le couvercle supérieur du drone servira de plaque froide qui garantira le refroidissement du capteur et de la carte électronique (encore à l'étude dans le travail final : supplémentaire).
- Problème de charge).
- Conception réalisée dans le but de maintenir le centre de gravité du drone dans le même plan que les ailerons.

6. Modélisation du vol vertical d'un drone et conception de son pilote automatique

Nous examinons ici le mouvement vertical d'un drone quadricoptère. Seule la dimension 'z' est prise en compte dans notre analyse. Le drone est soumis à son poids 'P' (avec une valeur de $g = 10$) ainsi qu'à la traction verticale exercée par ses quatre hélices 'T'. Sa masse est représentée par 'M'. De plus, le drone est soumis à une force visqueuse aérodynamique qui est proportionnelle et opposée à sa vitesse verticale.

$$F = -K_v * V \quad [1]$$

Equation différentielle du mouvement vertical ;

$$M * \ddot{z} + K_v \dot{z} + Mg = T \quad [2]$$

Linéarisation autour de l'équilibre statique ;

Aux abords de la position d'équilibre, il est possible d'affirmer que l'influence exercée par les ailettes T converge vers la force gravitationnelle P, et cette convergence peut être formulée de la manière suivante :

$$T = P + \Delta T = Mg + \Delta T \quad [3]$$

Lorsque l'on insère cette égalité dans l'équation différentielle du mouvement, une équation se forme avec des termes qui sont tous dépendants de Z (représentant le mouvement vertical selon l'axe Oz uniquement). On peut ainsi affirmer que cette équation est linéarisée :

$$\Delta T = M * \ddot{z} + K_v * \dot{z} \quad [4]$$

Nous allons maintenant formuler la fonction de transfert reliant ΔT et Z, afin de pouvoir concevoir un régulateur. Il est essentiel d'exprimer cette fonction de transfert dans la forme suivante :

$$\frac{A(P)}{1 + A(P) * B(P)} \quad [5]$$

$$\Delta T = (M * s^2 + K_v * s) * Z$$

On sait que la fonction de transfert s'écrit sous la forme :

$$(b_m * p^m + \dots + b_0) / (a_n * p^n + \dots + a_c * p^c)$$

Donc pour déterminer l'ordre et le gain statique on a besoin de l'écrire sous la forme :

$$\left(\frac{1}{P^c}\right) * \left(\frac{b_0}{a_c}\right) * H(p)$$

Avec $\left(\frac{b_0}{a_c}\right)$ est le gain statique, pour notre fonction :

$$Z = \frac{1}{s} * \frac{1}{m * s + K} \quad [6]$$

La relation $V = s * z$ (où V représente la vitesse de montée verticale et s est la variable de Laplace) suggère que le comportement de V est déterminé par un système du premier ordre. Une caractéristique importante est la présence d'un pôle nul dans le dénominateur. Pour que le système soit stable, il est impératif que tous les pôles de transmission se trouvent dans le demi-plan gauche, c'est-à-dire qu'ils soient strictement négatifs. Dans le cas présent, la fonction de transfert est considérée comme instable. En revenant à la fonction du premier ordre qui décrit la vitesse de montée V, on peut noter que le gain statique est: $\frac{1}{K_v}$ la constante du temps est $\frac{M}{K_v}$

Appliquons cette formule sur le cas du drone utilisé ;

$$T = 266.5 s \begin{cases} M = 5.33 \\ Kv = 0.02 \end{cases}$$

Voici ci-joint dans le tableau 2.5 [50]

	Trop bas	Optimale	Trop haut
P	Commande lente	Commande réactives et précises	Vibration
I	Difficulté à maintenir la position	Position stable	Mouvement instable
D	Rebond	Arrêt net	Chauffe excessive des moteurs

Tableau 2.5 : *effet des valeurs des paramètres P, I, D sur le profil de mission*

On sait que pour un système de premier ordre $T_r = 3 * T = 799.5 s = 13.25 \text{ min}$

Le temps de réponse pour que la vitesse de montée se stabilise est de 13.25 min un temps assez long. On peut aussi constater le caractère instable par une simulation sur scilab sur la figure 2.8 :

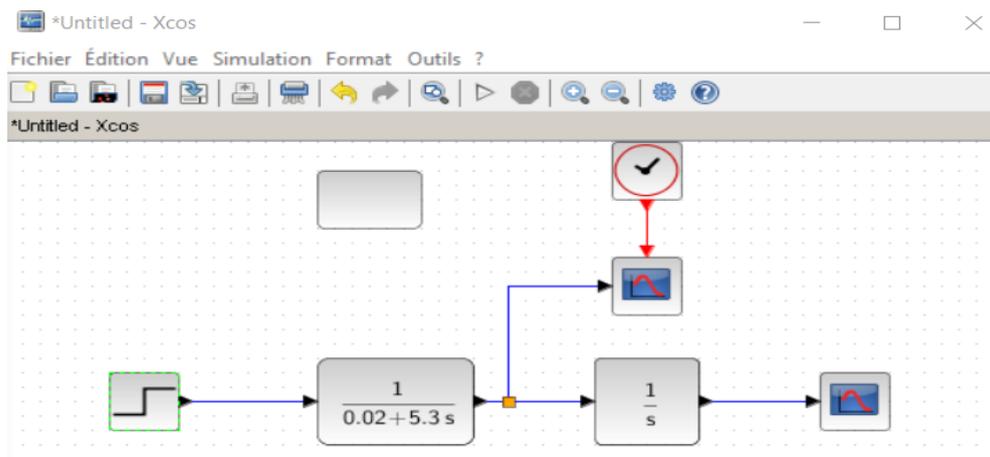


Figure 2.8 : Modélisation du contrôleur de vols du drone

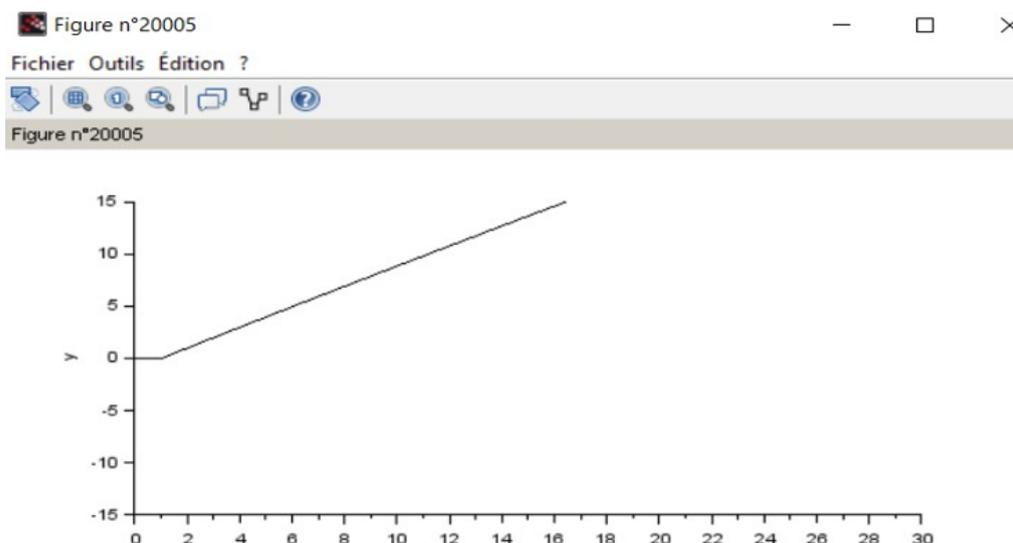


Figure 2.1 : Simulation avec valeurs aléatoire des p, i, d

La figure 2.9 montre que le drone gagne de l'altitude sans cesse ce qui signifie qu'il ne peut pas être stabilisé autour d'une altitude. On va donc essayer directement avec un PID, on a utilisé d'abord les valeurs mentionnées dans la littérature :

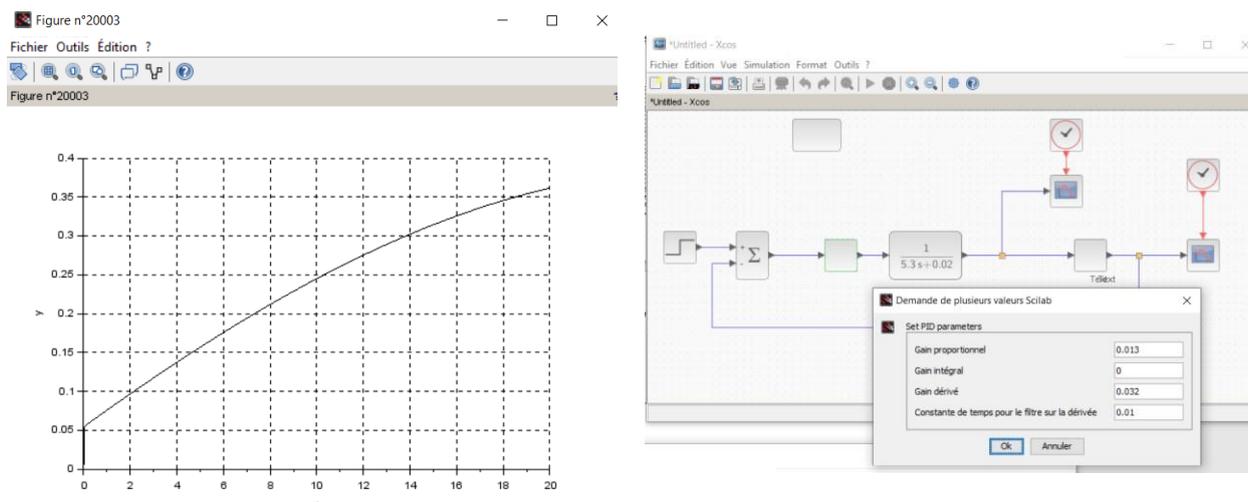


Figure 2.20 : Vitesse en fonction de l'altitude après un premier cycle d'optimisation

On remarque sur la figure 2.10 que la vitesse ne montre aucun critère de stabilité si on change la taille de la figure avant la simulation car on peut voir que la vitesse ne trouve pas une valeur de stabilité.

Le PID parfait n'existe pas, tout est une question de compromis. Après un nombre d'essai pour limiter le choix des valeurs de P, I et D (en prenant I= 0 dès le début du fait qu'on a un intégrateur dans la fonction de transfert introduit par le 1/s).

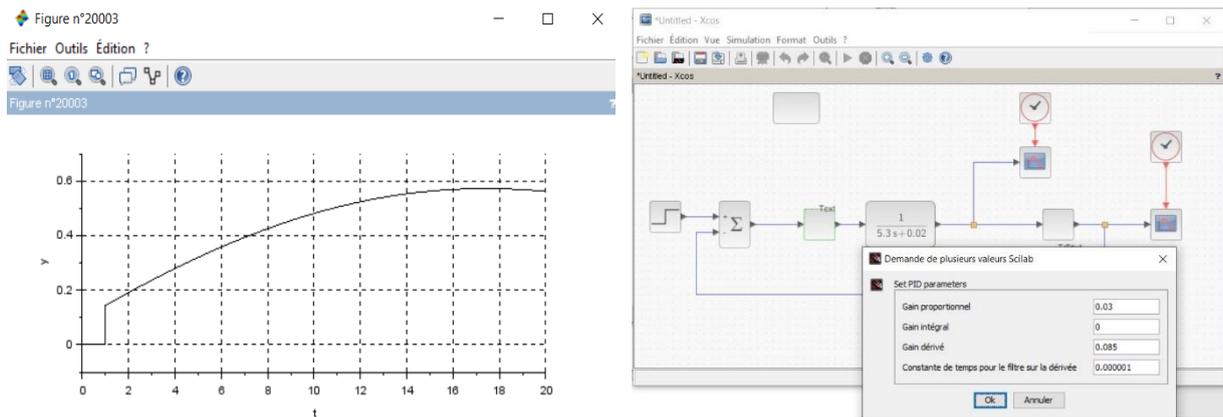


Figure 2.11 : Vitesse stabilisée après optimisation des valeurs de paramètres p , i , d

On augmente le paramètre P jusqu'à avoir des vibrations ou fluctuations de vitesse pour atteindre la valeur autour de laquelle on peut stabiliser le drone .[50]

Nous augmentons par la suite le paramètre I afin d'obtenir des perturbations de durée plus courte. Toutefois, il est important de noter que ces fluctuations seront plus intenses, car c'est le rôle de l'intégrateur de calculer l'aire entre la ligne représentant la stabilité de la vitesse (valeur constante) et la trajectoire finale après l'augmentation de la valeur de P . Étant donné que l'aire entre l'échelon et la trajectoire est maximale, cette partie sera principalement réduite, ce qui entraîne une diminution significative du temps de stabilisation dans un contexte réel. Par la suite, le rôle du dérivateur est d'atténuer les fluctuations jusqu'à atteindre une stabilisation de la vitesse.

Grâce à l'optimisation des paramètres du contrôleur de vol, nous avons identifié des valeurs qui assurent une certaine stabilité après une période réduite, comme illustré dans la figure 2.11. Ces travaux ont été réalisés pour un vol vertical du drone, mais ils peuvent également être appliqués au vol stationnaire. La section suivante sera consacrée au plan de vol et à la trajectoire effectuée par le drone.

7. Optimisation du plan de vol :

Le problème connu sous le nom du voyageur de commerce est un défi de recherche opérationnelle qui vise à déterminer l'ordre optimal dans lequel les villes ou les machines doivent être visitées, de manière à minimiser la somme totale des kilomètres, du temps ou des coûts engagés . Ce problème tire son appellation de la difficulté de trouver l'itinéraire optimal pour un voyageur devant visiter un certain nombre de lieux et revenir à son point de départ à la fin de son périple[51] .Pour représenter cette situation, on peut utiliser un réseau où les villages sont représentés par des sommets, les autoroutes par des arêtes et les distances par des poids

associés aux arêtes [3].

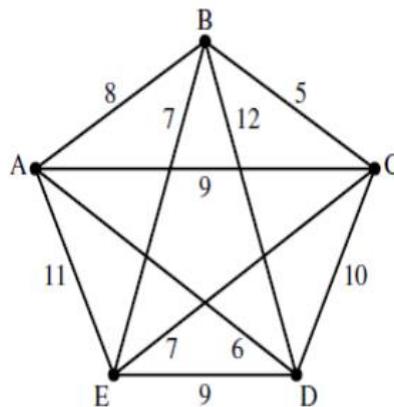


Figure 2.32 : cycle hamiltonien possible entre cinq points dans un plan 2d

Nous sommes confrontés à un problème de voyageur de commerce traditionnel où la contrainte est de visiter chaque sommet une seule fois. Un cycle Hamiltonien est défini comme un cycle qui passe par tous les sommets une seule fois [52](voir figure 2.12).

Dans ce contexte, les villes ont été substituées par des points de mesure. Notre objectif est de déterminer la distance la plus courte entre 25 points de mesure.

Ce problème s'avère plus complexe qu'il ne paraît pour un ensemble de n points, car il existe un total de $N!$ Chemins possibles. Étant donné que le point de départ n'a pas d'incidence sur la longueur du chemin, nous pouvons le choisir au hasard, ce qui nous donne $(N-1)!$ chemins différents [5]. De plus, chaque chemin peut être parcouru dans les deux directions et toutes les options ont la même longueur, nous pouvons donc diviser ce nombre par deux.

Pour identifier la meilleure approche dans notre application, nous devons calculer $(25-1)!/2$, ce qui équivaut à un total de $3.102242e+23$ alternatives.

En ce qui concerne la résolution du problème du voyageur de commerce, nous disposons de deux grandes catégories de méthodes[51]. D'une part, les méthodes exactes entraînent un temps de résolution exponentiel qui devient incontrôlable pour de grands échantillons. D'autre part, les méthodes approximatives ou heuristiques ne considèrent qu'une partie intéressante du problème afin d'approcher, voire de trouver, la solution optimale dans un temps de calcul raisonnable [53].

7.1. Utilisation d'une heuristique pour résoudre le problème du voyageur de commerce

Idéalement, la résolution du problème du voyageur de commerce prend un temps considérable. Par conséquent, il est préférable d'utiliser des procédures d'approximation ou des

heuristiques. La différence réside dans le fait que les méthodes d'approximation fournissent une garantie sur le degré de précision des solutions obtenues, généralement exprimée comme étant un multiple (c) de la valeur optimale. Plusieurs approches heuristiques ont été développées pour résoudre ce problème [51]. La formulation du problème du voyageur de commerce peut être présentée de la manière suivante;

$$x_i^j = \begin{cases} 1 & \text{de point } i \text{ vers } j \\ 0 & \text{dans tous autres cas} \end{cases}$$

Ce paramètre va garantir qu'on aboutit à un cycle unique qui passe par tous les points et non pas deux cycles détachés.

Pour $i=1 \dots N$ on a C_{ij} distance entre point donc on essaie de minimiser

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n C_{ij} x_{ij}^j$$
$$x_{ij} \in [0 \ 1]$$

Nous allons adopter une méthode connue sous le nom d'approche de Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) pour notre étude. Plus précisément, nous utiliserons la méthode de Metropolis-Hastings. L'algorithme de Metropolis-Hastings est une technique de Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) qui nous permettra de générer une séquence d'échantillons aléatoires à partir d'une distribution de probabilité lorsque l'échantillonnage direct n'est pas pratique .

Dans un premier temps, nous devons définir la fonction que nous souhaitons minimiser, qui représente la distance parcourue par le voyageur. L'ensemble des chemins possibles que le voyageur peut emprunter sera noté SN. Chaque chemin dans SN sera représenté par un vecteur contenant la liste ordonnée des villes visitées par le voyageur. Par exemple, dans l'exemple précédent, le voyageur visite la première ville, puis la deuxième ville..., et ainsi de suite, jusqu'à revenir à la première ville.

$$\sigma = (\sigma(1), \sigma(2), \sigma(3), \dots, \sigma(N))$$

Où I désigne la i -ième ville traversée par le voyageur.

En conséquence, la distance d'un chemin est donnée par la relation :

$$D_{\sigma} = \sum_{i=1}^N d((\sigma(i), \sigma(i+1))) + d(\sigma(N), \sigma(1))$$

La fonction à minimiser est la distance parcourue :

$$F : \sigma \in \text{SN}$$

La technique de Metropolis-Hastings permet de générer une séquence de valeurs d'échantillon, dans laquelle la distribution de ces valeurs se rapproche progressivement de la distribution cible P . Ces valeurs d'échantillon sont générées de manière itérative, où la distribution de l'échantillon suivant dépend uniquement de la valeur de l'échantillon actuel (formant ainsi une chaîne de Markov). À chaque itération, l'algorithme sélectionne un candidat pour la prochaine valeur d'échantillon en fonction de la valeur d'échantillon actuelle.

L'organigramme de l'algorithme utilisé est présenté dans la figure 2.13.

La décision d'accepter ou de rejeter une solution est basée sur une comparaison entre les valeurs de la fonction $f(x)$ pour les valeurs d'échantillon actuelles et les candidats, par rapport à la distribution souhaitée $P(x)$. Si la solution est acceptée, la valeur candidate est utilisée dans l'itération suivante. Si elle est rejetée, la valeur courante est réutilisée dans l'itération suivante. La probabilité d'acceptation est déterminée en fonction de cette comparaison..

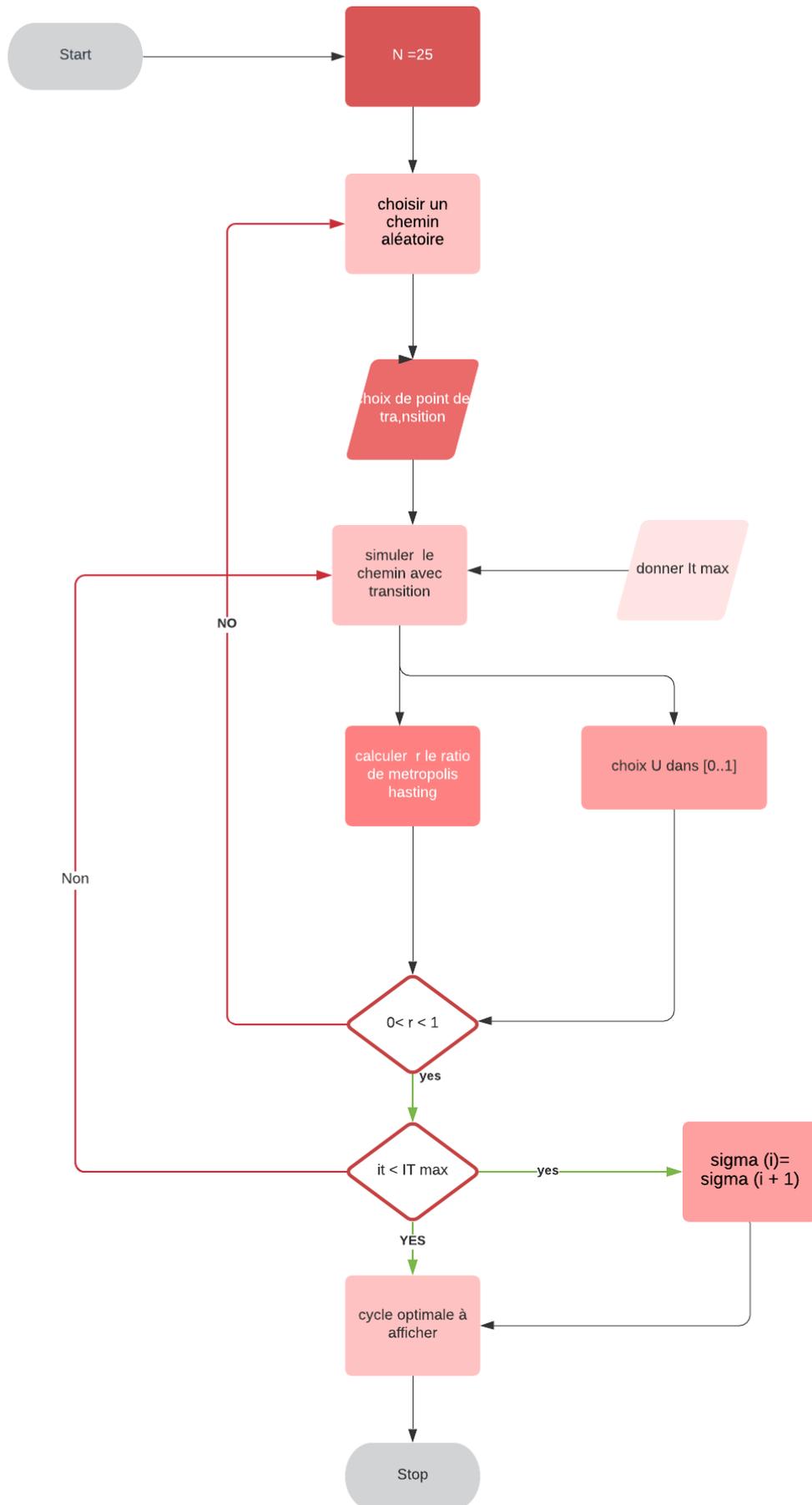


Figure 2.43 : Organigramme de résolution du TSP problème

7.2. Résultats et conséquences

Le premier cycle qu'on a conçu était un cycle aléatoire avec 25 points illustré par figure 2.15 de mesures qu'on a décidé de prendre, ce cycle a une longueur totale de 9.707.

Les batteries lithium-polymère (LiPo) sont des dispositifs de stockage d'énergie rechargeables qui exploitent la technologie lithium-ion, mais avec un électrolyte polymère semi-solide (gel) au lieu d'un électrolyte liquide. Ces batteries sont de plus en plus utilisées dans le domaine des drones. Le choix du nombre et du type de batteries à utiliser dépend du plan de vol, du modèle de drone et des conditions climatiques auxquelles le drone sera confronté. L'objectif ultime est d'augmenter la durée de vie des batteries, ce qui influence la décision. Dans cette étude, nous cherchons à évaluer les avantages de la méthode d'optimisation du plan de vol sur les batteries et leur autonomie. Le cycle optimal identifié dans la figure 2.16 correspond à une valeur de 7.064 .

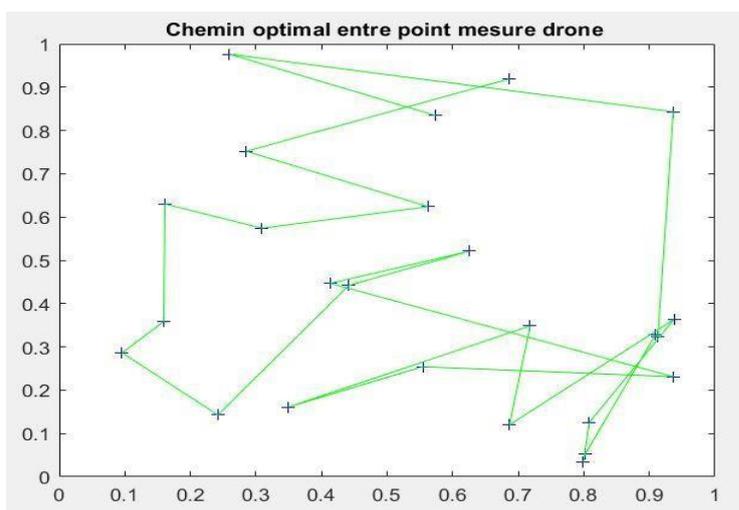


Figure 2.5 : Cycle aléatoire de longueur 9.707

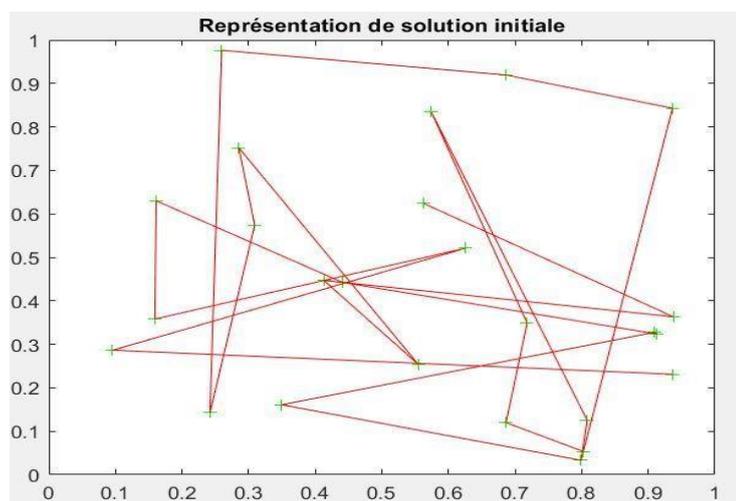


Figure 2.6 : cycle optimisé de longueur 7.064

$$V_{bat\ nominal} = LiPoCellVolt \cdot N_{series} \quad [6]$$

Nous allons examiner le nombre total de batteries, généralement utilisées dans des quadricoptères ou en les reliant en série par deux. Dans la plupart des cas, nous prendrons N égal à deux. Pour estimer la durée de vol prévue, une formule simple peut être utilisée[54], [55] ;

$$T_{flight} = [Q/I] * 0.06 \quad [7]$$

T_{flight} : Représente le temps de vol de votre drone en minutes ;

Q représente la capacité de la batterie LiPo en mAh ;[10]

Si on veut trouver le quotient $\frac{T_{Flight}}{T^0}$ ceci revient à calculer $\frac{L^0}{L^1}$

$$T^1 = \frac{L^0}{L^1} * T^0 = \frac{9.707}{7.064} * T^0 = 1.377T^0 \quad [8]$$

Il est possible de vérifier les avantages de ce gain dans notre exemple de drone. En effet, pour chaque vingt heures, le temps prévu pour la charge et la décharge de la batterie du drone, il est possible de gagner environ sept heures. Cela signifie qu'en effectuant quatre cycles de charge et de décharge, nous avons économisé une heure. Ainsi, la durée de vie d'une batterie Lippo, qui est généralement entre 150 et 250 cycles , peut être considérablement prolongée.

CHAPITRE 3 : Optimisation du système de propulsion, investigation de performance d'une nouvelle topologie utilisé pour application du drone

Sommaire :

CHAPITRE 3 : Optimisation du système de propulsion, investigation de performance d'une nouvelle topologie utilisé pour application du drone	51
1. Introduction	52
2. Méthodologie proposée pour l'étude des caractéristiques de performance d'une hélice de conception modifiée : Simulation numérique et validation	54
3. Configuration numérique	54
4. domaine de résolution des équations de Navier stocks	54
4.1. Domaine d'écoulement.....	54
4.2. Génération de maillage	55
4.3. Conditions limites	57
5. Résultats et discussions	58
5.1. Les résultats statiques des performances	58
5.2. Analyse dynamique des performances	63
Conclusion.....	70

1. Introduction

Les performances des drones sont fortement influencées par la conception et le fonctionnement de leurs hélices, qui ont un impact sur des paramètres cruciaux tels que l'efficacité, la stabilité, la manœuvrabilité et la durée du vol [54], [56]. L'aérodynamique des hélices, en particulier la génération et la gestion des tourbillons d'hélice, joue un rôle essentiel dans la définition des performances de vol. Cependant, ces tourbillons peuvent entraîner une réduction de la poussée, une augmentation du bruit, des interférences avec les équipements et des menaces potentielles pour l'intégrité du système de propulsion [57].

Pour améliorer les performances des hélices, de nombreuses stratégies ont été explorées, notamment l'utilisation de conduits pour atténuer le bruit de l'hélice. Toutefois, cette approche présente des contraintes inhérentes [58]. Des études numériques perspicaces menées par Mi [59] ont mis en évidence l'influence significative des facteurs environnementaux, tels que les conditions du sol, de la surface de la mer et des vagues, sur les propriétés aérodynamiques des hélices carénées. Des efforts de recherche considérables ont été consacrés à l'optimisation de l'efficacité et de la stabilité des hélices carénées grâce à des techniques de contrôle de l'écoulement et à des configurations innovantes [60]. Cela met en évidence l'interaction critique entre la conception de l'hélice et les conditions environnementales externes.

Des études comparatives ont été menées pour évaluer les performances aérodynamiques des ventilateurs hélicoïdaux à contre-rotation et des ventilateurs à contre-rotation ouverts [61]. Des chercheurs, comme Akturk et al [61], [62], ont fourni des informations précieuses sur la dynamique complexe du champ d'écoulement pendant les opérations de vol stationnaire et de vent de travers. Huang et al [63] ont souligné la nécessité d'innover davantage dans la conception des hélices carénées, en particulier pour les tâches de vol stationnaire. Leur conception inventive intégrant un jet d'extrémité pour les avions VTOL a permis d'améliorer la poussée des pales, tout en augmentant le poids total.

L'utilisation d'hélices carénées dans les vols avant à grande vitesse pose des problèmes en raison de l'augmentation de la traînée [63]. Le moment de tangage et les contraintes architecturales affectent leur stabilité et l'efficacité globale du système [64]. Les effets de proximité, tels que l'effet de sol, peuvent induire des phénomènes de décrochage rotationnel et réduire le débit [65]. Le jeu en bout de pale et le nombre de pales d'une hélice sont d'autres considérations de conception qui ont un impact sur les performances [66]–[69]. Cependant, des

recherches supplémentaires sont nécessaires pour comprendre pleinement ces facteurs et optimiser la conception des hélices carénées.

L'optimisation de la forme de l'hélice, y compris la longueur de corde, l'angle de calage, la torsion, le balayage et l'inclinaison, est essentielle pour obtenir des hélices efficaces et performantes [70]–[72]. Des études ont démontré l'impact de ces éléments de conception sur l'efficacité de l'hélice, le rapport de pression et les performances structurelles [73]. Les winglets spiroïdes ont montré leur potentiel pour réduire les tourbillons en bout d'aile et améliorer l'efficacité des aéronefs [74]. Les ailes à grand allongement ont été favorisées pour leur réduction de la traînée induite [75].

Dans cette étude, nous nous concentrons sur une hélice à pointe incurvée de $10 * 4,7$ pouces, une conception qui n'a pas été étudiée en profondeur dans le contexte des applications de drones. Inspirés par des recherches antérieures et par la modélisation de vols de drones, nous avons choisi cette hélice pour optimiser la portance et minimiser la traînée. Notre méthodologie comprend la validation d'un modèle de dynamique des fluides numérique (CFD) à l'aide de données expérimentales, suivie d'une analyse approfondie des caractéristiques aérodynamiques et de l'efficacité de l'hélice à bout recourbé. Nous étudions également l'impact de cette conception innovante sur la longévité de la batterie. Les résultats de cette étude contribuent à la compréhension de l'optimisation de la conception des hélices pour les drones et ont des implications significatives pour l'avenir de la technologie des drones dans diverses industries. La structure de ce document est la suivante. La section 1 présente un historique complet et une revue de la littérature, soulignant l'importance de la conception des hélices dans les performances des drones et les recherches existantes dans ce domaine. La section 2 décrit la méthodologie employée dans cette étude, y compris la sélection et la conception de l'hélice à bouts recourbés, ainsi que les simulations numériques de dynamique des fluides utilisées pour l'analyse des performances. La section 3 présente les résultats et la discussion, en examinant les caractéristiques aérodynamiques, l'efficacité et les compromis de l'hélice à bouts recourbés. Enfin, la section 4 conclut le document par un résumé des principaux résultats, des implications et des suggestions pour les recherches futures. L'organisation séquentielle du document garantit une présentation systématique et cohérente des objectifs, des méthodes, des résultats et des implications de l'étude.

2. Méthodologie proposée pour l'étude des caractéristiques de performance d'une hélice de conception modifiée : Simulation numérique et validation

Dans cette étude, nous proposons une approche d'intégration innovante qui exploite les capacités d'Ansys Fluent et de Scilab à travers un algorithme MATLAB dédié. Cette intégration permet de coupler de manière transparente les capacités d'Ansys Fluent en matière de dynamique des fluides numérique (CFD) avec les connaissances acquises grâce aux simulations de Scilab, facilitant ainsi une analyse complète des performances de l'hélice. Pour valider la précision de nos simulations CFD, des données expérimentales provenant de la base de données d'hélices de l'Université de l'Illinois, comprenant des types d'hélices conventionnelles, sont utilisées. Ce processus de validation rigoureux garantit la fiabilité et la précision de notre analyse numérique, ce qui renforce considérablement la crédibilité de nos résultats. Grâce à cette nouvelle approche d'intégration et au processus de validation, notre étude vise à faire progresser la compréhension des caractéristiques de performance de l'hélice modifiée et de son impact potentiel sur les systèmes de propulsion des drones.

3. Configuration numérique

La configuration numérique de notre simulation a été soigneusement conçue pour garantir des résultats précis et fiables. Cette section décrit la configuration du domaine d'écoulement et le processus de génération du maillage, en suivant les pratiques établies dans les simulations de dynamique des fluides numérique (CFD).

4. domaine de résolution des équations de Navier stocks

4.1. Domaine d'écoulement

Pour obtenir un écoulement entièrement développé à l'entrée et à la sortie du domaine de simulation, nous avons appliqué un étirement à l'entrée, à la sortie et aux limites du domaine stationnaire. Plus précisément, la limite d'entrée a été fixée à huit fois le diamètre de l'hélice (D) à partir de son origine, tandis que les limites de l'enceinte ont été fixées à $1,1 D$ pour le domaine rotatif et à $0,4 D$ pour les domaines stationnaire et rotatif représenté sur la figure 3.1.

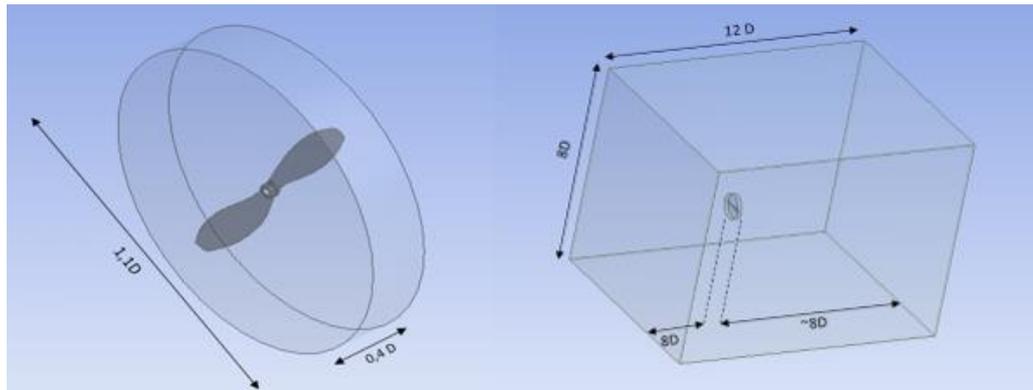


Figure 3.1 : Domaines de flux

4.2. Génération de maillage

La génération du maillage a été réalisée à l'aide de la méthode des volumes finis avec un solveur basé sur la pression, garantissant une discrétisation précise des équations de base. Une grille entièrement tétraédrique a été utilisée dans les zones tournantes et statiques, comme le montre la figure 3.2. L'adoption d'éléments tétraédriques a permis une représentation efficace des géométries complexes tout en minimisant les coûts de calcul.

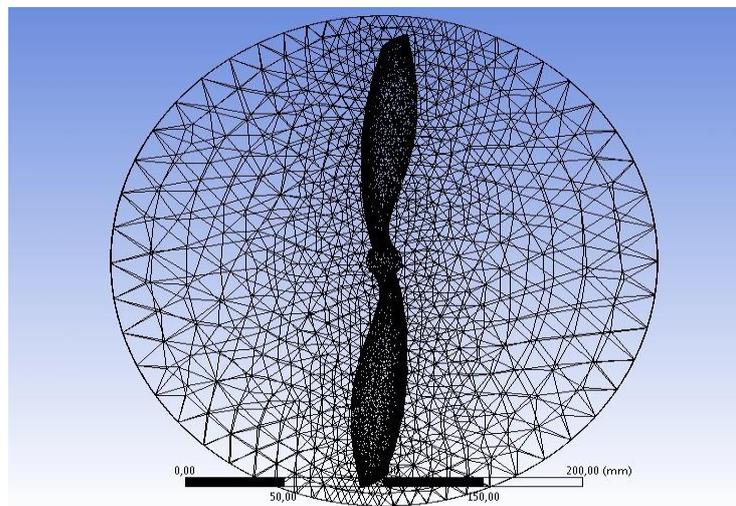


Figure 3.2 : Maillage généré

Modélisation de la turbulence et maillage de la couche limite : Pour la modélisation de la turbulence, le maillage a été conçu pour avoir 15 à 30 couches d'inflation ($N = 15$ à $N = 30$) dans toute l'épaisseur de la couche limite. Cette approche, couramment employée dans les simulations d'écoulements aérodynamiques basées sur la méthode RANS, utilise une seule feuille de matériau pour représenter la turbulence, ce qui simplifie la structure du maillage.

$$R = e \frac{\rho UL}{\mu} \quad [4]$$

Calcul du coefficient de frottement cutané et de la contrainte de cisaillement de la paroi : Le coefficient de frottement cutané (C_f) a été déterminé à l'aide d'une corrélation empirique pour un écoulement turbulent sur une surface plane. L'équation [5] fournit une estimation du frottement superficiel, qui a ensuite été utilisée pour calculer la contrainte de cisaillement de la paroi (τ_w) selon l'équation [6].

$$C_f = [2 \log_{10} (Re) - 0,65]^{-2,3} \quad [5]$$

$$\tau_w = 0.5 * \rho U^2 C_f \quad [6]$$

L'équation y^+ peut être modifiée pour obtenir la hauteur du mur le plus proche du centroïde de la cellule (y_p), ce qui donne y_h . La hauteur de la cellule y_h est le double de la valeur de y_p et la distance entre le centroïde de la cellule et le mur est de y_p [50];

$$y^+ = \frac{\rho y_p u_t}{\mu} \quad [7]$$

$$y_h = 2 y_p \quad [8]$$

Comme le coefficient de frottement cutané a été calculé empiriquement pour chaque situation d'écoulement, la hauteur de cellule de départ fournie par ces équations n'est qu'une approximation. Dans les calculs CFD réels, les coefficients de frottement cutané devraient être comparables, mais pas identiques, à ceux d'une plaque plane. Sur la base de ce calcul, les critères de taille des éléments ont été imposés comme $3e-3$ sur la surface de l'hélice. Un dimensionnement adaptatif a été mis en œuvre sur le domaine stationnaire et le taux de croissance a été fixé à 20 %. Le gonflement a été réglé pour être contrôlé par le programme avec une transition en douceur.

Plusieurs critères ont été pris en compte pour évaluer l'adéquation du maillage à l'étude CFD, notamment la hauteur initiale des cellules, le rapport de croissance et la hauteur ultime de la couche. En outre, les mesures de qualité du maillage et la résolution dans les zones d'intérêt ont été examinées. Le tableau 3.1 présente les détails de la grille de maillage, en mettant en évidence des paramètres tels que la qualité des éléments, l'asymétrie et le rapport d'aspect, qui répondent aux exigences de ce problème spécifique.

Métrique de la maille	Valeur minimale	Valeur maximale	Moyenne
Qualité des éléments	5.402 e-002	1	0.82935
Asymétrie	8.605 e-006	0.97	0.24
Rapport d'aspect	1.1594	31.06	1.8701

Tableau 3.1 : Paramètres de qualité des mailles

4.3. Conditions limites

Dans la définition de la configuration du solveur, un cadre absolu a été utilisé pour établir le domaine de calcul. Les parois de la zone tournante étant séparées spatialement des parois de la zone statique, la majorité de l'écoulement à l'extérieur de la région de l'hélice présentait de faibles vitesses. À l'entrée, l'intensité de la turbulence a été déterminée à 0,1 % et une condition de glissement a été imposée pour s'assurer que le fluide adhère aux parois et se déplace avec elles, compte tenu de leur mouvement. Cette condition a été remplie dans notre étude par un espacement approprié des parois de la zone statique.

Pour tenir compte du mouvement de rotation des cellules de la grille, une approche à cadres de référence multiples (MRF) a été adoptée dans le domaine de rotation de l'hélice. L'utilisation de simulations MRF a permis de réduire considérablement les besoins de calcul par rapport à la modélisation transitoire. Lorsqu'elles sont correctement configurées, les simulations MRF peuvent fournir des approximations raisonnablement précises avec un effort de calcul et un temps réduit. La zone de rotation de la paroi de l'hélice a également reçu une désignation de rotation.

Le couplage pression-vitesse a été réalisé à l'aide de la méthode semi-implicite pour les équations liées à la pression. La méthode Upwind du second ordre a été utilisée pour les calculs de vitesse et de pression. Les gradients ont été calculés à l'aide de l'algorithme des moindres carrés basé sur les cellules, tandis que le schéma Upwind du second ordre a été utilisé pour modéliser l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation turbulente.

Dans notre simulation, les modèles à deux équations, à savoir les modèles k- ϵ et k- ω , ont été utilisés pour décrire les caractéristiques de la turbulence par le biais de deux équations de transport. Ces modèles reposent sur l'approximation de Boussinesq de 1877, qui modélise le tenseur des contraintes dans le terme visqueux de l'équation de Navier-Stokes. Plus précisément, le modèle k- ϵ standard, adapté aux écoulements entièrement turbulents, a été

utilisé pour simuler les effets de la turbulence. La convergence a été assurée par le contrôle de la valeur résiduelle, qui doit tomber en dessous d'un seuil prédéterminé, ce qui indique une solution mathématique stable. Cependant, il est important de noter que si la convergence mathématique a été atteinte, il est également essentiel de surveiller les paramètres physiques tels que la force, la traînée ou la température moyenne pour valider l'aspect pratique de la solution obtenue.

La méthodologie de simulation proposée établit un cadre complet pour étudier les effets de la turbulence dans l'écoulement de l'hélice à l'aide de l'approche MRF. L'utilisation du modèle k-ε et le contrôle minutieux des paramètres physiques contribuent à une analyse numérique robuste.

5. Résultats et discussions

La force et la quantité de mouvement d'une hélice ont été résolues dans un système à trois coordonnées avec les paramètres x, y et z, où T (N) est la poussée, Q (N m) est le couple, n (rps) est la vitesse de rotation de l'hélice par seconde, d (m) est le diamètre et ρ est la densité du fluide. Le coefficient de poussée, K_T , et le coefficient de couple, K_Q , ont un pourcentage d'erreur relatif. Les résultats de l'analyse numérique ont été comparés aux données expérimentales disponibles pour confirmer l'influence de la grille.[54]

$$\Delta K_T = \frac{K_{TCFD} - K_{TEXP}}{K_{TEXP}} * 100 \quad [9]$$

$$K_T = \frac{T}{\rho n^2 D^4} \quad [10]$$

5.1. Les résultats statiques des performances

Dans la page des tâches de la méthode de solution, la méthode de résolution SIMPLE utilise une relation entre les corrections de vitesse et de pression pour assurer la conservation de la masse et obtenir le champ de pression. En outre, pour l'algorithme transitoire, une formulation implicite du second ordre a été utilisée. Les algorithmes du second ordre donnent les meilleurs résultats car ils réduisent considérablement les erreurs d'interpolation. En outre, la simulation a été lancée avec 1 e-006 pas de temps et 100 itérations par pas de temps. Dans cette approche, une précision d'ordre supérieur a été obtenue au niveau des faces des cellules grâce à une expansion en série de Taylor de la solution centrée sur la cellule autour du centroïde de la cellule, avec une convergence plus lente.

Dans une analyse CFD, le résidu mesure le déséquilibre local d'une variable conservée dans chaque volume de contrôle. Chaque cellule de votre modèle se voit attribuer sa propre

valeur résiduelle pour chacune des équations résolues.

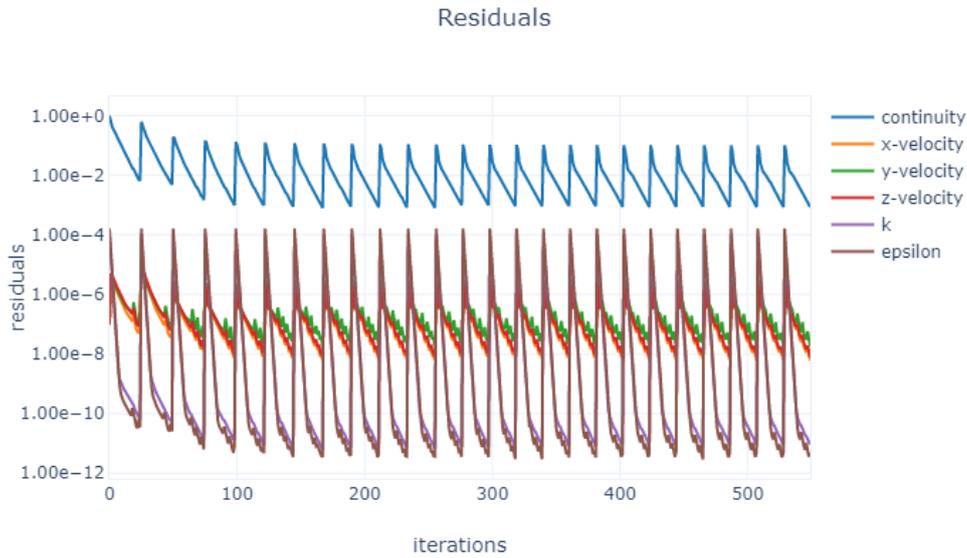


Figure 3.3 : Etat transitoire résiduel

Pour la CFD, des niveaux résiduels RMS de $1E-4$ sont considérés comme faiblement convergents, tandis que $1-5$ est considéré comme bien convergent et $1-6$ comme étroitement convergent. La figure 3.3 illustre une capture d'écran du rapport d'Ansys Fluent. Elle montre l'état de la convergence pour tous les résidus.

↕	Value ↕	Absolute Criteria ↕	Convergence Status ↕
continuity	0.0008600885	0.001	Converged
epsilon	4.861372e-12	0.001	Converged
k	9.260715e-12	0.001	Converged
x-velocity	6.044336e-09	0.001	Converged
y-velocity	1.819587e-08	0.001	Converged
z-velocity	7.709716e-09	0.001	Converged

Figure 3.4 : Etat de la convergence pour les résidus

Cependant, pour les problèmes complexes, il n'est pas toujours possible d'atteindre des niveaux résiduels aussi bas que $1E-6$ pour un problème simple. Dans notre simulation, les résidus obtenus sont aussi bas que $1e-6$, comme le montre la figure 3.4.

Pour qu'une analyse soit dite convergente, le champ de solution ne doit pas fluctuer d'une itération à l'autre. Dans la conception de notre carte, la traînée et la portance peuvent être

investies comme points de contrôle dans les études expérimentales et de simulation. Dans notre cas, le coefficient de portance a été choisi comme point de contrôle physique. La solution correspondante donne une progression stable des résultats lorsque l'on change de régime. Le modèle du coefficient de poussée a été stabilisé avec un coût de calcul minimal, comme le montre la figure 3.5

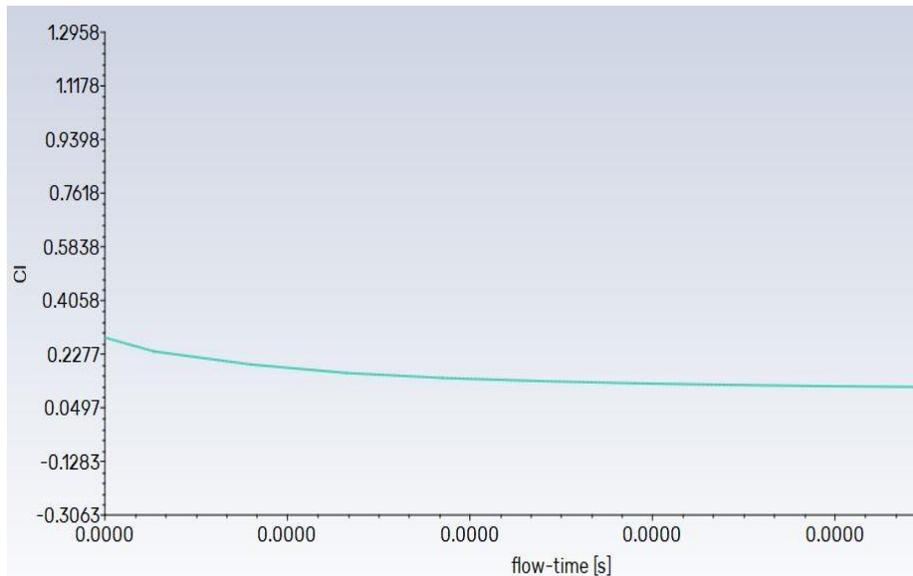


Figure 3.5 : Convergence de la solution

+ -		
the-lift-coefficient	0.1041333	
delta-time	1e-06	s
iters-per-timestep	21	
flow-time	2.5e-05	s

Figure 3.6 : Coefficient de poussée statique pour 2500 rpm

Les données expérimentales provenant de la source de données créée par l'université de l'Illinois à Urbana-Champaign ont été utilisées pour évaluer les résultats obtenus par l'analyse CFD. La première simulation a été réalisée pour une vitesse de 2500 tr/min. Les résultats fournis par ansys fluent sont présentés dans la figure 3.6. on a ainsi varié la vitesse allant de 2500 à 5000 RPM les résultats sont montrées dans le tableau 3.2 et figure 3.7 ce qui montre la validation du modèle établi sur ansys fluent.

Vitesse	Coefficient de poussée de l'analyse CFD	Coefficient de poussée tiré de la base de données expérimentale	erreur_absolue (%)
2500	0.1041	0.1039	0.0019249
3000	0.11187	0,11	1.6962
3500	0.11434	0.1117	2.3672
4000	0.11973	0.1158	3.3938
4500	0.1240	0.12	3.4122
5000	0.12542	0.1237	1.394

Tableau 3.2 : Analyse comparative coefficient de poussée : CFD vs. Données expérimentales avec erreur relative

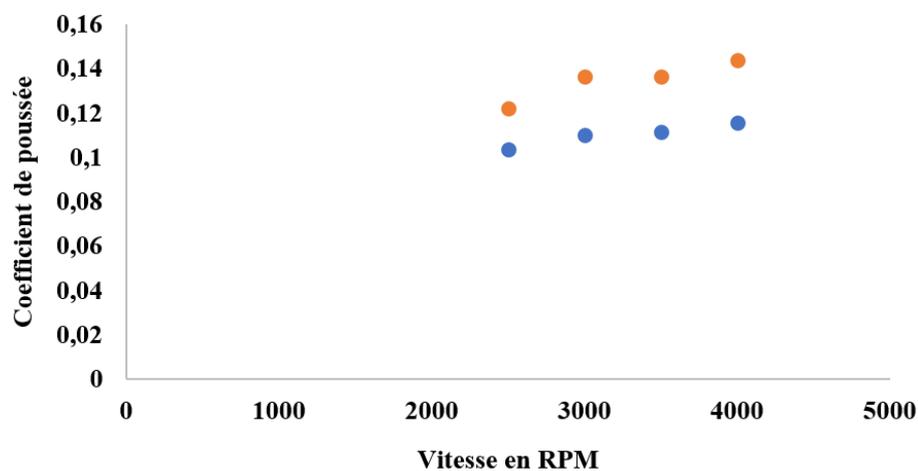


Figure 3.7 : Comparaison des coefficients de poussée : cfd vs. Données expérimentales

Le modèle sélectionné a été copié et la forme de l'hélice a été modifiée à l'aide de Solid works 2020 pour modifier la forme de l'hélice. Notre objectif principal est de concevoir des pointes courbes qui imitent l'intersection de l'hélice et du conduit couramment utilisé dans ces situations.

Après avoir courbé les extrémités dans Solidworks, nous avons procédé à une correction géométrique à l'aide de l'outil ansys space claim pour éliminer les coins mal créés, fusionner les surfaces et signaler les géométries problématiques, après quoi l'hélice modifiée sera injectée dans le modèle dupliqué en remplaçant simplement l'ancienne. Le dimensionnement du maillage a également été déterminé en utilisant la même méthode que pour la simulation précédente et en conservant les mêmes paramètres de maillage. Le tableau 3.3 ainsi que la figure 3.8 illustre la différence en performance entre l'hélice courbé et conventionnelle en statique pour

une vitesse qui varie entre 2500 RPM et 4000 RPM.

Vitesse	Coefficient de poussée		Gain
	Pointe conventionnelle	Pointe courbée	
2500	0,1039	0,12206	17.483
3000	0,11	0,1363	23.905
3500	0,1117	0,13661	22.299
4000	0,1158	0,14414	24.473

Tableau 3.3 : Comparaison des techniques de correction de la vitesse et de l'inclinaison : conventionnel, curved Tip CT et gain recourbés.

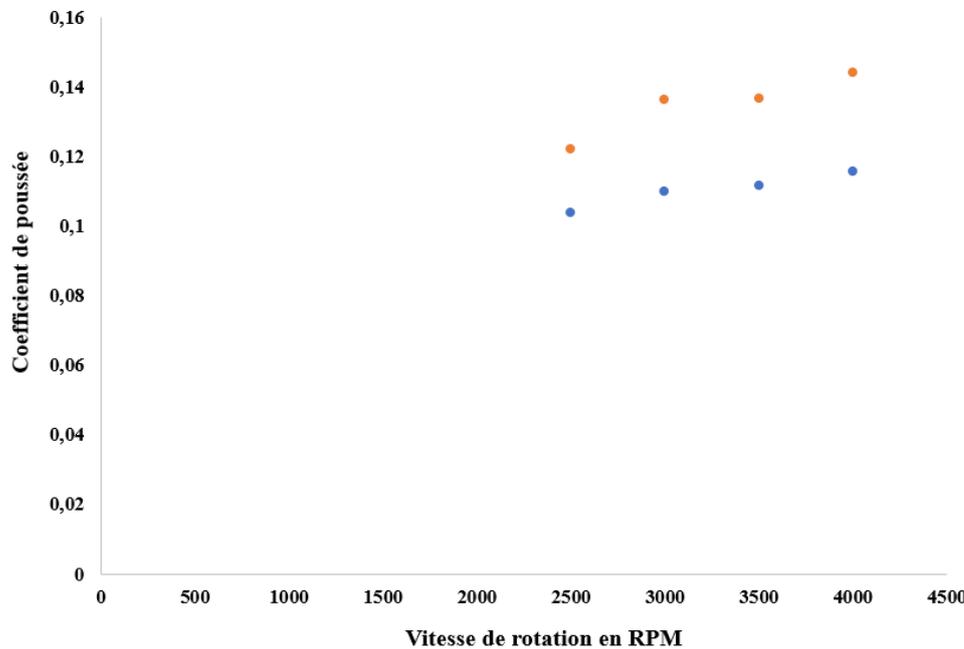


Figure 3.8 : Hélice conventionnelle et hélice à bouts

5.2. Analyse dynamique des performances

A ce stade de l'analyse, l'utilisation d'un rapport d'avance J pour simuler l'état de vol en imposant une vitesse d'air dans l'entrée à partir de j est indiquée par la formule $J = \frac{V}{n * D}$. Il est nécessaire d'introduire la vitesse de l'air V dans l'entrée pour inclure j dans la simulation. Les données collectés sont illustrés dans le tableau 3.4 les figure 3.9 , 3.10 et 3.11 montrent la différence entre les hélices conventionnelle et à forme modifiée en terme de charge utile maximale et du temps de durée de vol .

CHAPITRE 3 : Optimisation du système de propulsion, investigation de performance d'une nouvelle topologie utilisé pour application du drone

J	CT_conventional tip	CT_curved_tip	Temps de vol modifié	Temps de vol conventionnel	Charge utile maximale pointe courbée	Charge utile maximale pointe conventionnelle
4000 RPM						
0,1	0,0994	0,1106	0,814	0,905	430,662	386,747
0,2	0,0944	0,1062	0,847	0,953	413,410	367,142
0,2	0,0885	0,1035	0,869	1,017	402,823	344,008
0,3	0,0829	0,0917	0,981	1,086	356,555	322,050
0,3	0,077	0,0874	1,03	1,169	339,695	298,916
0,3	0,0719	0,0785	1,146	1,252	304,798	278,919
0,4	0,0652	0,0753	1,195	1,380	292,251	252,649
0,4	0,0582	0,0637	1,413	1,546	246,767	225,202
0,4	0,0502	0,0565	1,593	1,793	218,536	193,834
0,5	0,0441	0,0506	1,779	2,041	195,402	169,916
0,5	0,0343	0,0401	2,245	2,624	154,232	131,490
0,5	0,0288	0,0339	2,655	3,126	129,921	109,924
0,6	0,0178	0,0201	4,479	5,058	75,8120	66,793
0,6	0,0083	0,0089	10,116	10,84	31,896	29,544
0,7	-0,0011	-0,0011	-81,850	-81,85	-7,313	-7,313
0,7	-0,0122	-0,0133	-6,769	-7,379	-55,149	-50,836
0,7	-0,0218	-0,0254	-3,544	-4,130	-102,593	-88,47
5000 RPM						
0,1	0,1077	0,1225	0,734	0,835	477,322	419,291
0,1	0,1038	0,1209	0,744	0,867	471,048	404
0,2	0,0993	0,1161	0,775	0,906	452,227	386,355
0,2	0,0953	0,112	0,803	0,944	436,151	370,67
0,2	0,0908	0,0988	0,911	0,991	384,394	353,026
0,3	0,0856	0,0961	0,936	1,051	373,808	332,637
0,3	0,0811	0,0896	1,004	1,110	348,321	315
0,3	0,0766	0,0894	1,007	1,175	347,537	297,348
0,4	0,0709	0,0799	1,126	1,269	310,287	275
0,4	0,066	0,0708	1,271	1,364	274,606	255,785
0,4	0,0597	0,0656	1,372	1,508	254,217	231,083
0,4	0,0549	0,0608	1,480	1,639	235,396	212,262
0,5	0,0486	0,0532	1,692	1,852	205,597	187,560
0,5	0,0428	0,0468	1,923	2,103	180,50	164,818
0,5	0,0352	0,0413	2,180	2,557	158,937	135,011
0,6	0,028	0,032	2,813	3,215	122,471	106,787
0,6	0,0206	0,0234	3,847	4,370	88,751	77,68
6000 RPM						
0,1	0,1171	0,1317	0,683	0,768	513,395	456,148
0,12	0,1133	0,1239	0,726	0,794	482,811	441,249
0,15	0,1087	0,127	0,708	0,828	494,966	423,212
0,17	0,1048	0,1145	0,7863	0,859	445,954	407,920
0,19	0,1009	0,1175	0,766	0,892	457,717	392,628
0,22	0,0965	0,1053	0,855	0,933	409,881	375,376
0,24	0,0932	0,1093	0,823	0,966	425,565	362,437
0,27	0,0884	0,0977	0,921	1,018	380,081	343,616
0,29	0,0847	0,0919	0,097	1,062	357,337	329,108
0,32	0,0805	0,0879	1,024	1,118	341,655	312,640
0,33	0,0773	0,0881	1,021	1,164	342,440	300,093
0,36	0,0728	0,0816	1,103	1,236	316,953	282,448
0,38	0,0685	0,0757	1,189	1,314	293,819	265,588
0,41	0,0629	0,0734	1,226	1,431	284,801	243,630
0,43	0,0581	0,0659	1,366	1,549	255,393	224,810
0,45	0,0532	0,0601	1,490	1,692	232,652	205,597
0,48	0,048	0,0565	1,593	1,875	218,536	185,207

Tableau 3.4 ; Analyse dynamique des performances de l'hélice à forme modifiée

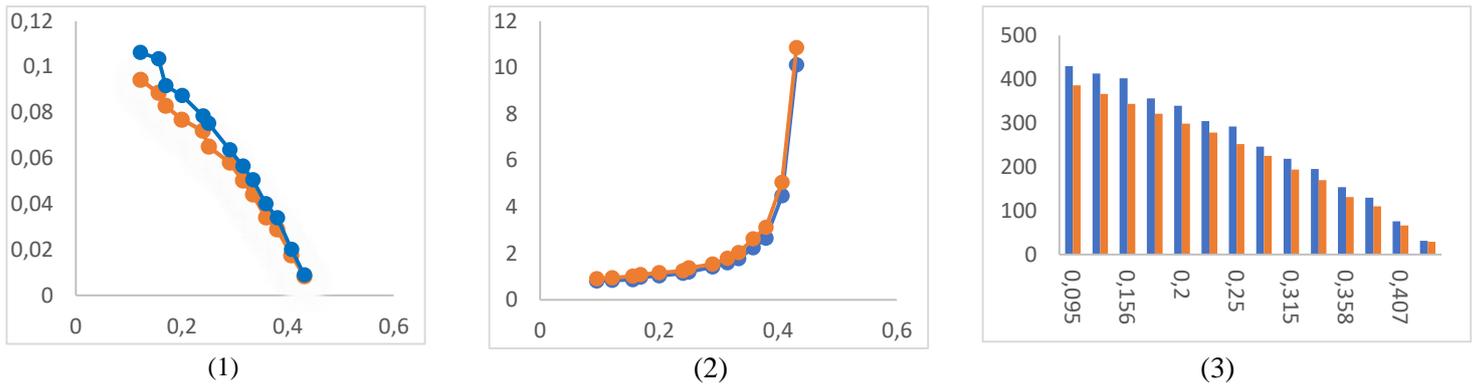


Figure 3.9 : Comparaison entre l'hélice à pointe courbe et l'hélice à pointe conventionnelle pour 4000 rpm : 1 - coefficient de poussée - 2 - durée du temps de vol - 3 - charge utile maximale

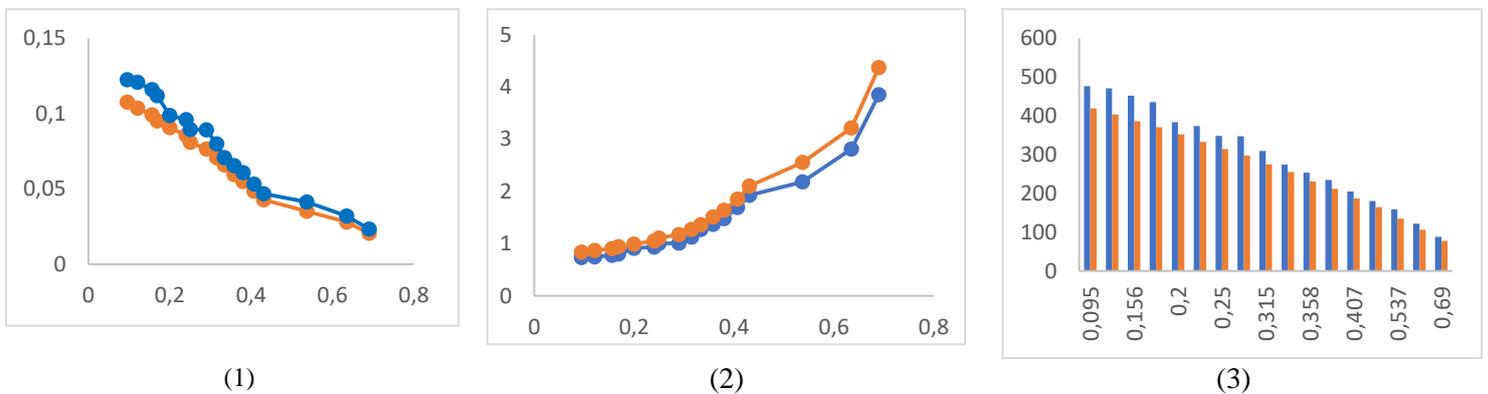


Figure 3.10 : Comparaison entre une hélice à bouts courbes et une hélice à bouts conventionnels pour 5000 tours/minute : 1 - coefficient de poussée - 2 - durée du vol - 3 - charge utile maximale.

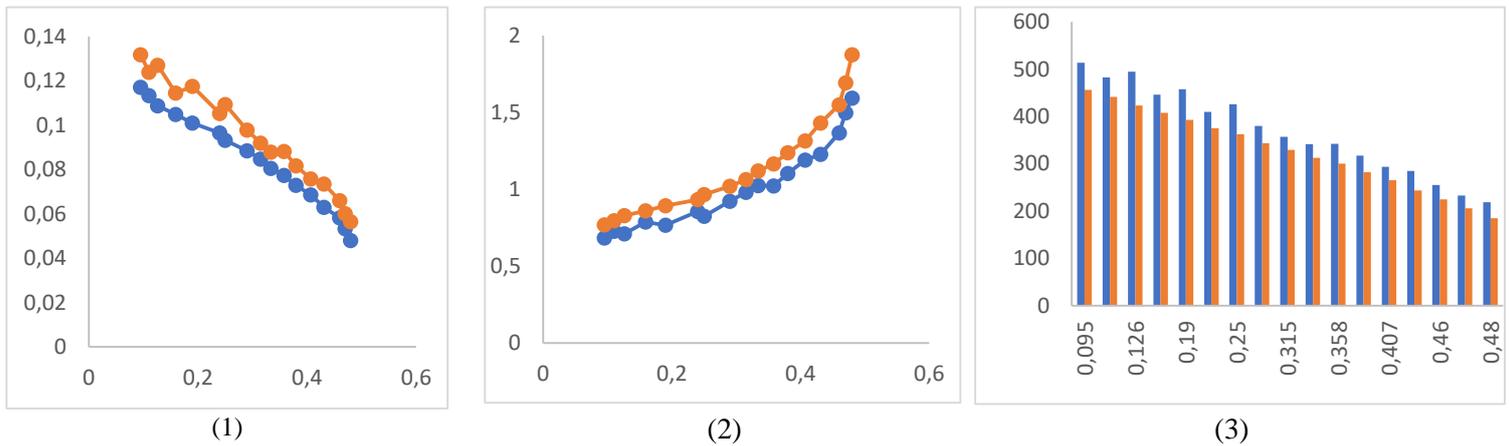


Figure 3.11 : comparaison entre l'hélice à pointe courbe et l'hélice à pointe conventionnelle pour 6000 rpm : 1 - coefficient de poussée - 2 - durée du temps de vol - 3 - charge utile maximale.

Dans l'étude de la dynamique de vol des drones quadcoptères, un paramètre clé est le coefficient de poussée (C_t), qui encapsule l'efficacité de la conception de l'hélice. Le temps de vol du drone (T) et sa capacité de transport de charge utile dépendent fortement de ce coefficient.

La puissance (P) requise pour le vol stationnaire, un mode de fonctionnement constituant une part importante de la plupart des profils de mission, est donnée par la formule suivante :

$$P = \frac{F}{\eta_m} \quad [11]$$

Où F est la poussée nécessaire pour le vol stationnaire, égale au poids du drone, et η_m est le rendement du moteur. La poussée elle-même est liée au coefficient de poussée (C_t) par :

$$F = C_t \times \rho \times A \times \omega^2 \quad [12]$$

Où ρ est la densité de l'air, A est la surface balayée par l'hélice et ω est la vitesse angulaire de l'hélice. Selon le principe de conservation de l'énergie, la consommation totale d'énergie, produit de la puissance et du temps de vol ($E=P \times T$), est égale à l'énergie disponible dans la batterie ($E=C \times V$), où C 'est la capacité de la batterie et V la tension. En mettant ces expressions en équation, on obtient

$$T = \frac{C \cdot V \cdot \eta_m}{C_t \cdot \rho \cdot A \cdot \omega^2} \quad [13]$$

L'équation [13] montre clairement qu'une augmentation du coefficient de poussée C_t , tous les autres paramètres étant constants, entraîne une diminution du temps de vol. En effet, un coefficient de poussée plus élevé implique une plus grande consommation d'énergie pour une même poussée, ce qui vide la batterie plus rapidement et réduit donc le temps de vol.

D'autre part, la charge utile maximale qu'un drone peut soulever (P_{max}), mesurée en kg, est déterminée par la différence entre la poussée maximale (F_{max}) que les hélices peuvent générer et le poids du drone sans charge utile (W_{drone}) :

$$P_{max} = \frac{F_{max} - W_{drone}}{g} \quad [14]$$

En substituant l'équation [12] à l'équation [14], on obtient

$$P_{max} = \frac{C_t \times \rho \times A \times \omega^2 - W_{drone}}{g} \quad [15]$$

D'après l'équation [15], une augmentation du coefficient de poussée entraîne une augmentation de la charge utile maximale que le drone peut soulever. Un coefficient de poussée plus élevé signifie que les hélices sont plus à même de générer une portance, ce qui permet au drone de transporter une charge utile plus importante.

En résumé, si une augmentation du coefficient de poussée peut potentiellement améliorer la capacité de transport de charge utile du drone, elle peut avoir un effet négatif sur le temps de vol en raison de l'augmentation de la consommation d'énergie. L'interaction entre ces paramètres est une considération essentielle dans la conception et le fonctionnement des drones quadcoptères. Il est essentiel d'équilibrer ces compromis pour optimiser les performances du drone en fonction des différentes exigences de la mission.

Dans notre étude, nous avons comparé le coefficient de poussée (C_t) et la capacité de charge utile maximale correspondante pour deux types d'hélices de drone : conventionnelles et courbes. En analysant les données fournies, nous pouvons quantifier les performances relatives de ces hélices et discuter de leurs implications sur la conception et le fonctionnement des drones.

L'hélice courbe présente une augmentation de 15,9 % du coefficient de poussée moyen par rapport à l'hélice conventionnelle.

L'analyse des capacités maximales de charge utile correspondantes révèle que la configuration de l'hélice courbe permet, en moyenne, une augmentation de 6,1 % de la capacité maximale de charge utile par rapport à la configuration de l'hélice conventionnelle.

Le coefficient de poussée plus élevé de l'hélice incurvée contribue à améliorer la capacité de charge utile, un résultat conforme à la relation décrite dans l'équation [15]. Cela démontre que des améliorations dans la conception de l'hélice, conduisant à une augmentation du coefficient de poussée, peuvent apporter des améliorations significatives dans la capacité de charge utile du drone.

Cependant, il est essentiel de garder à l'esprit que cette augmentation de la charge utile s'accompagne de compromis, notamment en termes de consommation d'énergie et de temps de vol, comme nous l'avons établi dans notre discussion précédente. Bien que la configuration de l'hélice courbée offre un avantage en termes de charge utile, les exigences spécifiques de la mission et les contraintes opérationnelles du drone doivent guider le choix du type d'hélice.

Nos résultats soulignent l'importance de la conception de l'hélice pour maximiser les performances du drone. Les recherches futures pourraient explorer d'autres formes et

configurations d'hélices, ainsi que l'influence d'autres paramètres de conception, afin d'optimiser davantage les capacités des drones pour des besoins de mission spécifiques. Notre analyse révèle une nette différence dans les caractéristiques de performance des hélices de type conventionnel et des hélices de type incurvé. Pour quantifier cette différence, nous avons calculé le coefficient de poussée moyen (C_t) pour les deux types d'hélices. Pour l'hélice de type conventionnel, le C_t moyen était d'environ 0,0717, tandis que pour l'hélice de type courbe, le C_t moyen était significativement plus élevé, d'environ 0,0829.

Cela se traduit par un gain moyen en coefficient de poussée d'environ 15,6 % lorsque l'on utilise des hélices de type incurvé par rapport aux hélices conventionnelles. Ce gain en C_t indique qu'en moyenne, les hélices courbes sont plus efficaces pour générer de la portance.

Cependant, l'examen des temps de vol correspondants révèle une relation complexe. Le temps de vol moyen des drones équipés d'hélices de type conventionnel était d'environ 1,5 heure, tandis que celui des drones équipés d'hélices de type courbe était d'environ 1,4 heure. Cela correspond à une diminution approximative de 6,7 % du temps de vol malgré l'augmentation du coefficient de poussée des hélices courbes.

Ces résultats mettent en évidence l'interaction entre le coefficient de poussée et le temps de vol, conformément à notre modèle théorique. Si une augmentation du coefficient de poussée accroît la capacité de levage du drone, elle augmente également la consommation d'énergie, ce qui peut entraîner une réduction du temps de vol. Cette interaction représente un compromis critique et suggère qu'un équilibre doit être trouvé entre la génération de portance et la consommation d'énergie dans la conception des drones, en particulier lorsque l'on considère différentes formes d'hélice.

Nos résultats soulignent l'importance de la conception de l'hélice dans les performances du drone et suggèrent que si les hélices de type incurvé peuvent offrir un avantage dans la génération de la portance, cela se fait au prix d'une réduction du temps de vol. Il s'agit d'une considération essentielle pour les opérateurs et les concepteurs de drones, en particulier pour les missions où le temps de vol est un paramètre critique. Les recherches futures devraient se concentrer sur l'optimisation de la conception des hélices afin de maximiser à la fois la génération de portance et l'efficacité énergétique, éventuellement grâce à des formes ou des matériaux d'hélice plus avancés.

Conclusion

En conclusion, cette recherche s'appuie sur les connaissances existantes dans le domaine de la conception des drones quadcoptères, avec un accent particulier sur l'influence du coefficient de poussée de l'hélice sur la définition des attributs de performance critiques. En particulier, la rareté des recherches concernant les effets des petites hélices à bouts recourbés pour les drones a révélé une lacune importante dans notre compréhension, ce qui a été le principal objectif de notre enquête.

Nos résultats offrent une nouvelle perspective sur la performance des hélices à bouts incurvés par rapport aux conceptions traditionnelles. Nous avons observé que les hélices à bouts incurvés permettaient un gain moyen d'environ 15,6 % du coefficient de poussée, ce qui suggère une meilleure efficacité dans la génération de la portance. Cependant, cette augmentation s'accompagne d'une réduction d'environ 6,7 % du temps de vol, ce qui souligne l'équilibre critique entre la génération de portance et la consommation d'énergie dans la conception des drones.

Les implications de ces résultats sont importantes pour les diverses applications de la technologie des drones. Par exemple, la compréhension du compromis entre la capacité de la charge utile et le temps de vol pourrait orienter le processus de conception des drones vers des exigences spécifiques aux missions, telles que les opérations de surveillance de longue durée pour lesquelles le temps de vol est primordial, ou les missions exigeant le transport de charges utiles substantielles sur des durées plus courtes.

En outre, notre étude met en évidence le potentiel des hélices à bouts incurvés pour augmenter la capacité de charge des drones. Cette découverte pourrait catalyser des développements révolutionnaires dans divers secteurs, notamment la livraison de colis et les services d'intervention d'urgence.

Dans une perspective d'avenir, il est pertinent d'explorer d'autres conceptions d'hélices permettant d'atteindre des coefficients de poussée élevés tout en optimisant la consommation d'énergie. Cela pourrait impliquer l'étude de matériaux avancés pour la construction des hélices afin de trouver un équilibre optimal entre ces paramètres clés. En outre, l'intégration de modèles de batterie et de consommation d'énergie plus sophistiqués permettrait de mieux comprendre la dynamique de vol des drones.

En substance, cette étude contribue de manière significative à notre compréhension de la conception des hélices de drones en dévoilant le potentiel des hélices à bouts incurvés pour améliorer les performances des drones. Alors que la technologie des drones continue de progresser, nous espérons que ces résultats éclaireront la conception des futurs drones, en optimisant leur efficacité, leur polyvalence et leur capacité à répondre aux diverses exigences d'un paysage technologique en évolution rapide.

CHAPITRE 4 : Des outils théoriques pour une analyse en deux phases des spectres IR observés : application de la RBDO pour comprendre le spectre IR de la molécule CO₂

Sommaire :

CHAPITRE 4 : Des outils théoriques pour une analyse en deux phases des spectres IR observés : application de la RBDO pour comprendre le spectre IR de la molécule CO ₂	72
1. Introduction :	73
2. Modèle et méthodes.....	75
2.1 Symétrie vibrationnelle et coordonnées normales	75
2.2 Groupe de symétrie et coordonnées de symétrie de la molécule CO ₂	78
3. Matrices F et G de Wilson.....	82
4. Résultats numériques.....	85
4.1. Isotopes O C ¹⁶ 12 ¹⁶ O et O C ¹⁶ 12 ¹⁸ O dans différents milieux	85
4.2. Calcul des constantes de force pour le CO ₂ , en phase gazeuse, les matrices de gaz rares et l'hydrate de clathrate I.....	86
5. Résultats et discussion.....	88
6. Conclusion.....	93

1. Introduction :

Le réchauffement climatique et le développement durable ont ouvert un champ de recherche axé sur l'observation de l'environnement sur terre [3], [76]. Diverses percées technologiques et méthodologies innovantes sont développées pour amener les capteurs au plus près du milieu d'intérêt, comme c'est le cas pour l'observation des planètes, des atmosphères, des comètes ou des satellites, par exemple avec les missions spatiales Mars Express et Venus Express [1], [77]–[80]

L'une des principales méthodes utilisées pour la caractérisation de l'atmosphère, sur terre ou ailleurs, est la spectroscopie infrarouge (IR). Les activités de recherche portant sur cette technologie se répartissent en deux aspects principaux : théorique et expérimental. Les progrès des méthodes théoriques adaptées au calcul des spectres IR ont ouvert la voie à la modélisation des spectres IR de diverses molécules. En fait, la spectroscopie IR présente des progrès en matière de simulation dans de multiples directions. À plusieurs niveaux, la spectroscopie vibrationnelle a créé une synergie remarquable avec la chimie théorique et computationnelle [81]–[85]. D'une part, la chimie computationnelle fournit une interprétation des spectres observés, tandis que, d'autre part, la spectroscopie expérimentale apporte un soutien. Le spectre d'une espèce moléculaire peut être reconstruit à l'aide de modèles basés sur la transformation de contact, comme décrit dans les références suivantes [86]. Une déconvolution des spectres observés précède l'analyse en termes d'intensité, de largeur et de centre de raie caractérisant une forme de raie [87, p. 1]. Les études expérimentales sont menées dans un laboratoire approprié utilisant une configuration instrumentale pour identifier l'empreinte IR des molécules [1], [78]–[80]

Il est généralement connu que les dérivées secondes estimées de l'énergie potentielle, c'est-à-dire les constantes de force qui sont en correspondance avec les fréquences vibratoires, sont très sensibles aux champs de force externe à la molécule et d'origines diverses. Selon l'environnement dans lequel la molécule est observée, dans un piège à nanocage dans un milieu créé en laboratoire, dans un environnement expérimental hostile comme lors d'une observation en milieu planétaire, en phase condensée ou dans des polymères comme les gels de silicone [6], le spectre IR est modifié. Par conséquent, la corrélation entre la précision de la géométrie de référence du système moléculaire, son énergie et ses constantes de force, fournit un retour d'information utile sur la performance et l'utilité des approches de chimie quantique. Il est donc obligatoire d'attribuer correctement les espèces moléculaires à partir des données IR observées

en utilisant les modèles théoriques appropriés et d'analyser efficacement, par exemple, les données collectées pour le CO₂ dans différents milieux en utilisant des capteurs adéquats [88]–[91].

Le principal problème est la limite des techniques de chimie quantique et leur applicabilité à des molécules plus grosses. Ceci est particulièrement important pour la spectroscopie NIR (proche infrarouge), où l'accent est mis sur les échantillons compliqués et où des approches anharmoniques sont nécessaires. En revanche, la précision des petites molécules dissoutes dans un solvant modérément inerte dans des conditions favorables est suffisante pour une interprétation complète des spectres expérimentaux dans le proche infrarouge [92]. D'autre part, l'incorporation d'une matrice chimique dans la simulation anharmonique est pratiquement irréalisable en raison de la complexité informatique de ces approches. Une telle matrice illustrerait un échantillon compliqué rencontré dans les applications de spectroscopie IR analytique [81]–[85]. La réalisation de cet objectif ouvrirait la voie à un soutien direct de la chimie computationnelle dans les applications de spectroscopie vibrationnelle analytique. Dans ce travail, nous présenterons la symétrie basée sur des outils théoriques pour l'étude spectroscopique des molécules qui permettent l'identification des fenêtres IR à sélectionner pour l'observation dans la conception de l'appareil comme discuté dans les références [1], [78], [79]. L'objectif est de fournir une méthode pour mettre en œuvre des processus d'intelligence artificielle [93], en identifiant des molécules ou des groupes fonctionnels à partir de vibrations actives IR ou Raman, lorsqu'ils sont soumis à des contraintes environnementales ou lorsqu'ils sont piégés dans des nanocages tels que des milieux poreux [14] ou des hydrates de clathrates [94]–[97] ou aux espèces chimiques dans un cristal [98].

Dans ce travail, la configuration du modèle est dérivée des méthodes de la théorie des groupes en utilisant, comme étude de cas, la molécule CO₂ qui est constamment étudiée car elle est impliquée dans le phénomène de réchauffement de la planète. Deux isotopes du dioxyde de carbone sont choisis : le symétrique standard $O^{16}C^{12}O^{16}O$ et l'asymétrique $O^{16}C^{12}O^{18}O$. Leurs groupes de symétrie sont $D_{\infty h}$ et $C_{\infty v}$ en ordre infini. Ils sont analysés à l'aide de deux sous-groupes d'ordre fini, D_{2h} et C_{2v} , pour déterminer leurs matrices F et G de Wilson [99] qui permettent d'analyser leurs vibrations actives IR ou Raman. Ensuite, sur la base de la théorie bien établie de la transformation du contact pour l'étude rovibrationnelle des molécules linéaires, les résonances pertinentes telles que la Fermi-Dennison (FD) présente dans les molécules linéaires, sont prises en compte pour analyser les niveaux vibrationnels fondamentaux en termes de constantes de force de liaison plutôt que de constantes de force

globales liées aux coordonnées normales. La méthode décrite est appliquée aux vibrations fondamentales du CO₂ telles qu'elles sont observées en phase gazeuse, en spectroscopie d'espèces isolées en matrice ou dans les clathrates. Ce travail est une tentative pour fournir une méthode d'extraction d'informations sur une espèce moléculaire piégée dans un milieu condensé, au-delà des valeurs spectroscopiques IR standard en phase gazeuse déjà présentes dans des bases de données telles que Hitran, à partir des constantes de force de liaison. Cet article est organisé comme suit : la section 2 décrit le modèle et la méthode de calcul basée sur des considérations de symétrie ; la section 3 présente la forme donnant les matrices F et G ; la section 4 est consacrée aux résultats numériques des valeurs des constantes de force calculées pour la phase gazeuse et les espèces piégées dans un nanocage matriciel et la section 5 est consacrée à la discussion des résultats comparant les valeurs pour différents environnements et aux conclusions.

2. Modèle et méthodes

Dans cette section, nous décrivons comment établir un modèle à partir de méthodes théoriques de groupe en utilisant la molécule CO₂ impliquée dans le phénomène du réchauffement climatique comme exemple de modèle. Nous avons choisi deux isotopes du dioxyde de carbone, le symétrique standard O¹⁶ C¹² O¹⁶ ¹⁶O¹²C¹⁶O et l'asymétrique O¹⁶ C¹² O¹⁸ ¹⁶O¹²C¹⁸O. Leurs groupes de symétrie, D_{∞h} et C_{∞v}, sont infinis. Leurs groupes de symétrie, D_{∞h} et C_{∞v} étant d'ordre infini, ils sont analysés à l'aide de deux sous-groupes d'ordre fini, D_{2h} et C_{2v}, afin de déterminer leurs matrices F et G de Wilson [99] qui permettent l'analyse de leurs vibrations actives IR ou Raman.

2.1 Symétrie vibrationnelle et coordonnées normales

L'application de la théorie mathématique des groupes basée sur la symétrie d'une espèce chimique est un outil puissant pour étudier les vibrations et les rotations des molécules [86], [87, p. 1]. En fait, la théorie des groupes est appliquée pour construire un modèle mathématique de l'opérateur hamiltonien de la molécule à partir de ses propriétés de symétrie. Pour déterminer l'empreinte vibratoire IR d'une molécule, il est nécessaire de résoudre l'équation des valeurs propres de Schrödinger :

$$H|\Psi_v\rangle = E_v|\Psi_v\rangle \quad [1]$$

Où H est l'opérateur hamiltonien de la molécule, somme de son opérateur d'énergie cinétique T et de son opérateur d'énergie potentielle V. $|\Psi_v\rangle$ et E_v sont respectivement la fonction propre et la valeur propre, étiquetées par l'indice v qui représente les nombres

quantiques vibrationnels qui décrivent les modes vibrationnels indépendants.

L'énergie potentielle est généralement exprimée en termes de coordonnées qui sont les plus appropriées pour diagonaliser l'opérateur hamiltonien et obtenir ainsi les fréquences vibratoires de la molécule. Elles correspondent à la gamme de valeurs propres réelles de l'opérateur. Dans le cas où seuls les degrés de liberté vibratoires sont considérés, il est nécessaire d'effectuer les calculs dans le système de référence lié à la molécule en appliquant les conditions d'Eckart-Sayvetz. L'énergie potentielle d'une molécule est à son minimum lorsque la molécule est dans sa configuration d'équilibre. En fixant l'origine des énergies à la configuration d'équilibre, seuls les termes de degré supérieur ou égal à 2 contribuent à l'énergie de vibration. Au niveau harmonique, correspondant aux termes du second ordre, il est possible d'utiliser les coordonnées internes R_k des atomes de la molécule, et d'écrire l'opérateur d'énergie potentielle harmonique sous la forme suivante :

$$2V = \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial^2 V}{\partial R_i \partial R_j} \right)_0 R_i R_j = \sum_i \sum_j F_{ij} R_i R_j \quad \text{ou} \quad 2V = R'FR \quad [2]$$

Pour de petits déplacements des atomes autour de leurs positions d'équilibre, l'opérateur d'énergie cinétique de la molécule peut être exprimé sous une forme similaire telle que :

$$2T = \sum_i \sum_j M_{ij} \dot{R}_i \dot{R}_j \quad [3]$$

Où les paramètres M_{ij} représentent des fonctions de la masse atomique et de la géométrie d'équilibre de la molécule. Il est plus commode d'exprimer l'énergie cinétique en termes de variables conjuguées définies comme suit :

$$P_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{R}_i} = \sum_j M_{ij} \dot{R}_j \quad [4]$$

L'équation [3] devient alors ;

$$2T = \sum_i \sum_j G_{ij} P_i P_j \quad \text{ou} \quad 2T = P'GP \quad [5]$$

$$\sum_j G_{ij} M_{jk} = \delta_{ik}$$

Ou $GM = I$ sous forme de matrice.

La meilleure méthode pour dériver ces équations est d'utiliser les coordonnées normales, car T et V sont exprimés simultanément sous une forme diagonale dans l'approximation harmonique. Les coordonnées internes sont définies comme des combinaisons linéaires des coordonnées normales, comme suit :

$$R_j = \sum_k L_{jk} Q_k \quad [6]$$

Où j est un nombre compris entre 1 et n , et :

$$L_{jk} = \frac{\partial R_j}{\partial Q_k}$$

Cette transformation conduit aux relations suivantes :

$$2V = \sum_k \lambda_k Q_k^2 \text{ et } 2T = \sum_k \dot{Q}_k^2$$

Pour chaque coordonnée Q_k , le mode de vibration k^{th} , la fréquence ω_k est donnée par :

$$\lambda_k = 4\pi^2 c^2 \omega_k^2$$

Dans la formulation matricielle, les expressions correspondantes s'écrivent comme suit :

$$R = LQ \tag{7}$$

$$2V = Q' \Lambda Q \tag{8}$$

$$2T = \dot{Q}' \dot{Q} \tag{9}$$

Où Λ est une matrice diagonale dont les éléments sont les paramètres λ_k

La substitution de l'équation [7] dans les équations [2] et [3] et la comparaison avec les équations [8] et [9], respectivement, conduisent aux égalités suivantes :

$$\Lambda = L'FL \text{ et } L'ML = I$$

En combinant les deux dernières équations, on obtient la forme suivante :

$$FL = MLA \tag{10}$$

et en multipliant par $G = M^{-1}$, on obtient

$$GFL = LA \tag{11}$$

Les déterminants des deux dernières équations vérifient :

$$|F - \lambda M| = 0 \tag{12}$$

$$|GF - \lambda I| = 0 \tag{13}$$

Enfin, le problème de la détermination des coordonnées normales se réduit au calcul des déterminants une fois donné M_{ij} ou G_{ij} .

Les coordonnées de symétrie peuvent alors être utilisées pour simplifier le calcul des déterminants car il s'agit de combinaisons linéaires de coordonnées internes basées sur les propriétés de symétrie de la molécule. Ces propriétés de symétrie permettent la décomposition des matrices en blocs selon les propriétés de symétrie de la molécule. La transformation des

coordonnées internes en coordonnées de symétrie peut être réalisée par la matrice de transformation U, telle que : $\mathbf{S} = \mathbf{UR}$ et $2\mathbf{V} = \mathbf{R}'\mathbf{FR} = \mathbf{S}'\mathbf{FS}$, avec $\mathbf{F} = \mathbf{U}'^{-1}\mathbf{FU}^{-1}$ et $\mathbf{S} = \mathbf{L}^s\mathbf{Q}$. On peut montrer que les coordonnées internes sont liées aux coordonnées normales comme suit :

$$\mathbf{R} = \mathbf{LQ} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{L}^s\mathbf{Q} = \mathbf{U}'\mathbf{L}^s\mathbf{Q} \quad [14]$$

Il est alors nécessaire d'exprimer les déplacements cartésiens ΔP à partir de la géométrie de la configuration d'équilibre en termes de coordonnées internes. Les coordonnées cartésiennes sont établies en fixant un cadre local sur chaque noyau étiqueté i de telle sorte que son déplacement soit donné par $(\Delta x_i = x_i - x_i^e, \Delta y_i = y_i - y_i^e, \Delta z_i = z_i - z_i^e)$ et en appliquant les conditions d'Eckart-Sayvetz. Notez que les composantes de R sont des fonctions non linéaires de ces déplacements et s'expriment sous forme de matrice par $\mathbf{R} = \mathbf{B}\Delta P$, où B est une matrice rectangulaire qui peut être transformée en matrice carrée en incluant les degrés de liberté de translation et de rotation dans le cadre des conditions d'Eckart-Sayvetz.

2.2 Groupe de symétrie et coordonnées de symétrie de la molécule CO₂

Comme indiqué dans [14], le groupe de symétrie de l'isotope O¹⁶C¹²O¹⁶ ¹⁶O¹²C¹⁶O est le groupe D_{∞h}, tandis que celui de l'isotope O¹⁶C¹²O¹⁸ ¹⁶O¹²C¹⁸O est C_{∞v}. La représentation réductible Γ d'un groupe G est la somme directe des représentations irréductibles Γ^α du groupe telles que :

$$\Gamma = a_1\Gamma^1 \oplus a_2\Gamma^2 \oplus \dots \oplus a_d\Gamma^d = \sum_{\oplus\alpha} a_\alpha\Gamma^\alpha \quad [15]$$

lorsque le nombre de représentations irréductibles est égal à d. Les coefficients a_α , le nombre de fois que la représentation irréductible Γ^α apparaît dans la représentation Γ sont calculés à partir de la formule suivante :

$$a_\alpha = \frac{1}{h} \sum_{O_i \in G} h_i \chi(O_i) (\chi^\alpha(O_i))^* \quad [16]$$

où h est l'ordre du groupe de symétrie complet, O_i l'une des opérations de symétrie géométrique du groupe, et χ^α est la trace de la matrice de l'opération de symétrie dans la base de la représentation irréductible α d'ordre h_i avec

$$\chi(O_i) = \sum_\alpha a_\alpha \chi^\alpha(O_i). \quad [17]$$

Cette expression est utilisée pour trouver le nombre de vibrations appartenant à une représentation irréductible donnée du groupe ponctuel moléculaire à partir des différents types de vibrations d'une molécule qui peuvent être un mode d'étirement unique ou dégénéré, un mode

de flexion, un mode de torsion. Toutefois, lorsque h est infini, comme pour les groupes $D_{\infty h}$ et $C_{\infty v}$, la formule ne peut pas être appliquée. Dans ce cas, les sous-groupes correspondants D_{2h} pour $O^{16}C^{12}O^{16}$ et $^{16}O^{12}C^{16}O$ et C_{2v} pour

$O^{16}C^{12}O^{18}$ et $^{16}O^{12}C^{18}O$ sont utilisés à la place. Les corrélations entre les représentations irréductibles des sous-groupes et celles des groupes complets permettent d'identifier les représentations irréductibles correspondantes des vibrations fondamentales.

En suivant la méthode décrite dans le chapitre 3 de la référence [14], pour le groupe D_{2h} d'ordre $h = 8$, la représentation réductible Γ s'écrit :

$\Gamma = A_g + B_{1g} + B_{2g} + 2B_{1u} + 2B_{2u} + 2B_{3u}$, en termes de représentation irréductible de D_{2h} . Pour les degrés de liberté de translation et de rotation, la réduction s'écrit :

$\Gamma_{\text{translation}} = B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$ et $\Gamma_{\text{rotation}} = B_{1g} + B_{2g} + B_{3g}$. Il est à noter que la molécule étant linéaire, le terme B_{3g} pour le mouvement de rotation disparaît. Par conséquent, pour les degrés de liberté vibratoires, $\Gamma_{\text{vibration}} = \Gamma - (\Gamma_{\text{translation}} + \Gamma_{\text{rotation}}) = A_g + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$. Les quatre vibrations ainsi déterminées correspondent à deux modes d'étirement et deux modes de flexion. De même, dans le cas du groupe C_{2v} d'ordre $h = 4$, la représentation réductible Γ s'écrit :

$\Gamma = 3A_1 + 3B_1 + 3B_2$, en termes de représentations irréductibles de C_{2v} . Pour les degrés de liberté de translation et de rotation, la réduction s'écrit :

$\Gamma_{\text{translation}} = A_1 + B_1 + B_2$ et $\Gamma_{\text{rotation}} = A_2 + B_1 + B_2$. La molécule étant linéaire, le terme A_2 pour la rotation disparaît cette fois. Par conséquent, pour les degrés de liberté vibratoires, $\Gamma_{\text{vibration}} = \Gamma - (\Gamma_{\text{translation}} + \Gamma_{\text{rotation}}) = 2A_1 + B_1 + B_2$. Les quatre vibrations ainsi déterminées correspondent également à deux modes d'étirement et deux modes de flexion. La méthode de projection, telle qu'elle est appliquée dans le chapitre 3 de [14] est utilisée pour déterminer les coordonnées de symétrie à partir des coordonnées internes de la molécule, définies comme la longueur de liaison entre les atomes 1 et 2 et les atomes 2 et 3 de la molécule linéaire CO₂ et l'angle entre les deux liaisons dans deux plans perpendiculaires comme indiqué dans la figure 1, pour les deux isotopes $O^{16}C^{12}O^{16}$ et $O^{16}C^{12}O^{18}$. L'atome 3 est donc ^{16}O pour l'isotope symétrique et ^{18}O pour l'isotope non symétrique.

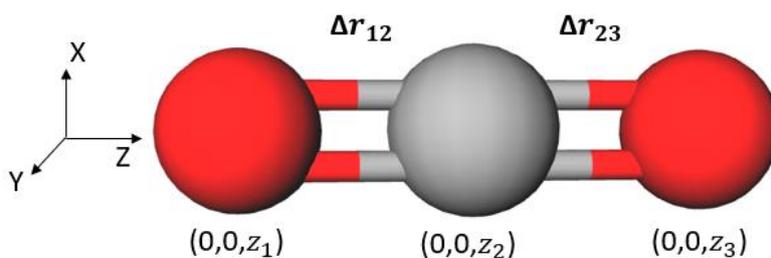


Figure 4.1 : Coordonnées internes et cartésiennes de la molécule linéaire CO₂

Pour déterminer les symétries en termes de représentation irréductible, la formule de projection est appliquée aux coordonnées internes comme indiqué dans la référence [14]:

$$P^\alpha = \frac{l_\alpha}{h} \sum_{O_i \in G} (\chi^\alpha(O_i)) O_i . \quad [18]$$

Pour le groupe D_{2h} pour lequel h = 8, les applications des opérations de symétrie sur les coordonnées internes sont données dans le tableau 1. Pour la représentation irréductible A_g, par exemple, $\chi^{A_g}(O_i)$ est égal à 1 pour toutes les opérations de symétrie du groupe et l_{A_g} est égal à 1. Dans le cas de la représentation irréductible B_{1u}, $\chi^{B_{1u}}(O_i)$ est égal à 1 ou -1 selon les opérations de symétrie et $l_{B_{1u}}$ est égale à 1.

D _{2h}	E	C ₂ (z)	C ₂ (y)	C ₂ (x)	I	σ(xy)	σ(xz)	σ(yz)
Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₁₂	Δr ₁₂
Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₂₃	Δr ₂₃
Δα ₁	Δα ₁	-Δα ₁	-Δα ₁	Δα ₁	-Δα ₁	Δα ₁	Δα ₁	-Δα ₁
Δα ₂	Δα ₂	-Δα ₂	Δα ₂	-Δα ₂	-Δα ₂	Δα ₂	-Δα ₂	Δα ₂
A _{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1
B _{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
B _{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
B _{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

Tableau 4.1 : Tableau des représentations des caractères vibratoires irréductibles du groupe D^{2h}

En appliquant la formule de projection pour le groupe D_{2h}, les coordonnées de symétrie correspondantes sont obtenues pour les modes d'étirement :

$$S_1^{A_g} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta r_{12} + \Delta r_{23}), \quad [19a]$$

$$S_3^{B_{1u}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta r_{12} - \Delta r_{23}), \quad [19b]$$

et pour les modes de flexion :

$$S_{21}^{B_{3u}} = \Delta \alpha_1, \quad [19c]$$

$$S_{22}^{B_{2u}} = \Delta\alpha_2. \quad [19d]$$

Pour le groupe C_{2v} pour lequel h = 4, les applications des opérations de symétrie sur les coordonnées internes sont données dans le tableau 2. Comme le montre la représentation irréductible A₁, par exemple, $\chi^{A_1}(\mathbf{O}_i)$ est égale à 1 pour toutes les opérations de symétrie du groupe et l_{A_1} est égal à 1. Dans le cas de la représentation irréductible B₁, $\chi^{B_1}(\mathbf{O}_i)$ est égal à 1 ou -1 selon les opérations de symétrie et l_{B_1} est égale à 1.

C _{2v}	E	C ₂ (z)	σ (xz)	σ (yz)
Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₁₂
Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₂₃
Δun site ₁	Δa ₁	Δ ₁	Δ ₁	Δa ₁
Δun site ₂	Δa ₂	Δ ₂	Δa ₂	Δ ₂
A ₁	1	1	1	1
B ₁	1	-1	1	-1

C _{2v}	E	C ₂ (z)	σ (xz)	σ (yz)
Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₁₂
Δr ₂₃	Δr ₂₃	Δr ₁₂	Δr ₁₂	Δr ₂₃
Δα ₁	Δα ₁	-Δα ₁	-Δα ₁	Δα ₁
Δα ₂	Δα ₂	-Δα ₂	Δα ₂	-Δα ₂
A ₁	1	1	1	1
B ₁	1	-1	1	-1
B ₂	1	-1	-1	1

Tableau 4.2 : Tableau des caractères des représentations vibratoires irréductibles du groupe C_{2v}

De même, pour le groupe C_{2v}, les coordonnées de symétrie correspondantes s'écrivent comme suit :

$$S_1^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta r_{12} + \Delta r_{23}), \quad [20a]$$

$$S_3^{A_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Delta r_{12} - \Delta r_{23}), \quad [20b]$$

$$S_{21}^{B_2} = \Delta\alpha_1, \quad [20c]$$

$$S_{22}^{B_1} = \Delta\alpha_1. \quad [20d]$$

Pour les deux groupes de symétrie, la matrice U de l'équation [14] qui donne S en termes de R par la relation $S = UR$, s'écrit :

$$U = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad [21]$$

lorsque les coordonnées S sont classées dans l'ordre S₁, S₃, S₂₁ et S₂₂ et que les coordonnées R sont classées dans l'ordre Δr₁₂, Δr₂₃, Δα₁ et Δα₂. Enfin, à partir de la corrélation entre les sous-groupes et le groupe de symétrie complet, les correspondances suivantes sont déterminées pour D_{2h} et D_{∞h} et C_{2v} et C_{∞v} comme indiqué dans le tableau 3.

D _{2h}	D _{∞h}		C _{2v}	C _{∞v}
A _g	Σ _g ⁺		A ₁	Σ ⁺
B _{1u}	Σ _u ⁺		A ₁	Σ ⁺
B _{2u}	π _u		B ₁	π
B _{3u}			B ₂	

Tableau 4.3 : Corrélation entre les IR des groupes D_{2h} et D_{∞h} et des groupes C_{2v} et C_{∞v}

3. Matrices F et G de Wilson

Les expressions de la matrice GF en fonction des coordonnées de symétrie sont calculées pour la forme générale XYZ d'une molécule linéaire, ce qui peut également s'appliquer au type XY₂. La fonction d'énergie potentielle en termes de coordonnées internes est exprimée comme suit :

$$V = f_{11}(\Delta r_{12})^2 + f_{22}(\Delta r_{23})^2 + 2f_{12}\Delta r_{12}\Delta r_{23} + f_{\alpha\alpha}((\Delta\alpha_1)^2 + (\Delta\alpha_2)^2) \quad [22a]$$

où f_{11} , f_{12} , f_{22} sont les constantes de force associées aux modes d'étirement vibratoire et $f_{\alpha\alpha}$ est la constante de force associée au mode de flexion vibratoire. Cependant, comme l'énergie potentielle est invariante par rapport à toutes les opérations de symétrie du groupe de points moléculaires, il n'y a pas de termes croisés du type $\Delta r_{ij}\Delta\alpha_k$ (i = 1 ou 2, j = 2 ou 3 et k = 1 ou 2). En termes de coordonnées de symétrie telles que $F = UfU'$, où U' est la transposée de U, l'expression [22a] peut être écrite comme suit :

$$V = F_{11}S_1^2 + F_{22}S_3^2 + 2F_{12}S_1S_3 + F_{\alpha\alpha}((S_{21})^2 + (S_{22})^2) \quad [22b]$$

Où F_{ii} et F_{ij} sont respectivement les éléments diagonaux et non diagonaux de la matrice F

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}(f_{11} + f_{22} + 2f_{12}) & \frac{1}{2}(f_{11} - f_{22}) & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(f_{11} - f_{22}) & \frac{1}{2}(f_{11} + f_{22} - 2f_{12}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_{\alpha\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_{\alpha\alpha} \end{bmatrix} \quad [22c]$$

Les éléments de la matrice g qui implique les masses présentes dans le terme de l'opérateur d'énergie cinétique du hamiltonien vibratoire, peuvent être calculés selon la méthode décrite dans la référence [99] à partir de la formule : $g_{tt'} = \sum_{k=1}^3 \mu_k \vec{s}_{tk} \vec{s}_{t'k}$ où μ_k est l'inverse de la masse de l'atome k et \vec{s}_{tk} sont les 3 vecteurs unitaires, un pour chaque atome, tels qu'ils pointent dans la direction qui donne l'augmentation maximale de la coordonnée interne R_t . Par exemple, avec la notation de la figure 1 :

$$\vec{s}_{(\Delta r_{12})1} = \vec{e}_{21}, \vec{s}_{(\Delta r_{12})2} = -\vec{e}_{21}, \vec{s}_{(\Delta r_{12})3} = \mathbf{0}, \vec{s}_{(\Delta r_{23})1} = \mathbf{0}, \vec{s}_{(\Delta r_{23})2} = -\vec{e}_{23},$$

$$\vec{s}_{(\Delta r_{23})3} = \vec{e}_{23}, \vec{s}_{(\Delta \alpha_1)1} = \frac{\vec{f}_{13}}{r_{12}}, \vec{s}_{(\Delta \alpha_1)2} = -\left(\frac{\vec{f}_{13}}{r_{12}} + \frac{\vec{f}_{31}}{r_{23}}\right), \vec{s}_{(\Delta \alpha_1)3} = \frac{\vec{f}_{31}}{r_{23}}.$$

Ces expressions peuvent être utilisées pour calculer les \vec{s}_{tk} vecteurs tels que :

$$\vec{s}_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_{21}, \vec{s}_{12} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_{21} + \vec{e}_{23}), \vec{s}_{13} = \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_{23}, \vec{s}_{21} = \frac{\vec{f}_{13}}{r_{12}}, \vec{s}_{22} = -\left(\frac{\vec{f}_{13}}{r_{12}} + \frac{\vec{f}_{31}}{r_{23}}\right), \vec{s}_{23} = \frac{\vec{f}_{31}}{r_{23}},$$

$$\vec{s}_{31} = \frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_{21}, \vec{s}_{32} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_{21} - \vec{e}_{23}), \vec{s}_{33} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \vec{e}_{23}.$$

Ensuite :

Pour l'étirement de la liaison et les 2 masses reliées par la liaison Δr_{12} , g_{11} est donné par :

$$g_{11} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}, \quad [23a]$$

pour l'étirement de la liaison et les 2 masses reliées par la liaison Δr_{23} , g_{22} est donné par :

$$g_{22} = \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}, \quad [23b]$$

pour l'étirement des liaisons, avec $\alpha = \pi$, le terme de couplage entre les liaisons Δr_{12} et Δr_{23} , g_{12} s'écrit

$$g_{12} = -\frac{1}{m_2}, \quad [23c]$$

et pour l'angle inter liaison et les 2 masses reliées par des liaisons Δr_{12} et Δr_{23} , $g_{\alpha\alpha}$ dans chaque plan perpendiculaire est donné par

$$g_{\alpha\alpha} = \frac{1}{r_{12}^2} \frac{1}{m_1} + \frac{1}{r_{23}^2} \frac{1}{m_3} + \left(\frac{1}{r_{12}^2} + \frac{1}{r_{23}^2} + \frac{2}{r_{12}r_{23}} \right) \frac{1}{m_2}. \quad [23d]$$

En termes de coordonnées de symétrie telles que $G = U g U'$, la matrice G s'écrit [23][45] :

$$\begin{bmatrix}
 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_3} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_3} \right) & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_3} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_3} + \frac{4}{m_2} \right) & 0 & 0 \\
 0 & 0 & \frac{1}{r_{12}^2} \frac{1}{m_1} + \frac{1}{r_{23}^2} \frac{1}{m_3} + \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} \right)^2 \frac{1}{m_2} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \frac{1}{r_{12}^2} \frac{1}{m_1} + \frac{1}{r_{23}^2} \frac{1}{m_3} + \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} \right)^2 \frac{1}{m_2}
 \end{bmatrix}$$

[24]

Enfin, la matrice GF à diagonaliser peut être écrite comme suit [45] :

$$\begin{bmatrix}
 \frac{1}{2} \left(\frac{f_{11}+f_{12}}{m_1} + \frac{f_{22}+f_{12}}{m_3} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{f_{11}-f_{12}}{m_1} - \frac{f_{22}-f_{12}}{m_3} \right) & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} \left(\frac{f_{11}+f_{12}}{m_1} - \frac{f_{22}+f_{12}}{m_3} + 2 \frac{f_{11}-f_{22}}{m_2} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{f_{11}-f_{12}}{m_1} + \frac{f_{22}-f_{12}}{m_3} + 2 \frac{f_{11}+f_{22}-2f_{12}}{m_2} \right) & 0 & 0 \\
 0 & 0 & (GF)_{\alpha\alpha} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & (GF)_{\alpha\alpha}
 \end{bmatrix}$$

[25]

$$\text{Dans lequel } (GF)_{\alpha\alpha} = f_{\alpha\alpha} \left(\frac{1}{r_{12}^2} \frac{1}{m_1} + \frac{1}{r_{23}^2} \frac{1}{m_3} + \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} \right)^2 \frac{1}{m_2} \right).$$

Notons toutefois que GF peut être séparé en deux matrices de dimensions 2x2 dont les valeurs propres sont les fréquences harmoniques observées pour les vibrations fondamentales.

Les valeurs propres λ_1 et λ_3 de la première matrice bloc 2x2 caractérisent les modes vibratoires symétriques et antisymétriques d'étirement, elles vérifient les conditions

$$\lambda_1 \lambda_3 = \frac{m_1+m_2+m_3}{m_1 m_2 m_3} (f_{11} f_{22} - f_{12}^2), \quad [26a]$$

$$\lambda_1 + \lambda_3 = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) f_{11} + \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) f_{22} - \frac{2}{m_2} f_{12}, \quad [26b]$$

Afin de déterminer les constantes de force f_{11} , f_{12} et f_{22} l'équation [26b] est appliquée aux espèces isotopiques (626) et (628) de la molécule de CO₂, ce qui conduit à l'équation suivante :

$$\lambda_1 + \lambda_3 - \lambda'_1 - \lambda'_3 = \left(\frac{1}{m_3} - \frac{1}{m'_3} \right) f_{22} \quad [26c]$$

Pour l'atome final indexé 3 qui est différent dans chaque espèce isotopique et à partir duquel f_{22} peut être calculé.

Enfin, $f_{\alpha\alpha}$ peut être calculée à partir de la valeur propre λ_2 de la deuxième matrice bloc et qui est doublement dégénérée et caractérise le mode de vibration de flexion donné par :

$$\lambda_2 = f_{\alpha\alpha} \left(\frac{1}{r_{12}^2} \frac{1}{m_1} + \frac{1}{r_{23}^2} \frac{1}{m_3} + \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} \right)^2 \frac{1}{m_2} \right). \quad [26d]$$

Comme le mode d'étirement symétrique ν_1 est en résonance fermi avec le mode de flexion ν_2 lorsque ce dernier absorbe 2 quanta de rayonnement IR, deux valeurs sont déterminées pour f_{11} et f_{12} pour chaque valeur de λ_1 .

4. Résultats numériques

Au niveau harmonique, l'observation des bandes fondamentales permet d'identifier la molécule à partir des bases de données si la matrice GF est connue grâce aux travaux de laboratoire. Au contraire, lorsque la matrice GF est inconnue, il est possible de déterminer si des espèces isotopiques sont également présentes dans les spectres observés, car la matrice F ne dépend pas des masses atomiques et permet une attribution sans ambiguïté. L'approche théorique est appliquée au dioxyde de carbone CO₂. Dans la section 4.1, la matrice F est calculée à partir des valeurs des bandes fondamentales observées dans les matrices, pour les isotopes O¹⁶ C¹² O¹⁸ et O¹⁶ C¹² O¹⁶ [90].

4.1. Isotopes ¹⁶O¹²C¹⁶O et ¹⁶O¹²C¹⁸O dans différents milieux

Les fréquences observées ω_k (en unités de nombre d'onde cm⁻¹) et les valeurs propres correspondantes λ_k (en s⁻²) sont reliées par la formule suivante $\lambda_k = 4\pi^2 c^2 \omega_k^2$ où c est la vitesse de la lumière dans le vide. Cependant, lorsque ces fréquences sont perturbées par des résonances telles que le type Fermi-Dennison, il est nécessaire d'accéder à la valeur de la fréquence non perturbée du mode avant de calculer la constante de force de liaison.

Ainsi, comme la fréquence du mode ν_1 est le double de celle du mode ν_2 , les états vibratoires quantiques étiquetés ν_1 et ν_2 tels que $2\nu_1 + \Delta_1 \Delta_2$ vont les mêmes valeurs et où $\nu_1 \Delta_1$ et $\nu_2 \Delta_2$ sont les changements de nombres quantiques lorsqu'une transition se produit entre les niveaux vibratoires, ces derniers étant soumis à la résonance de Fermi-Dennison (FD) qui scinde les niveaux quasi-dégénérés correspondants. L'énergie vibratoire de ces niveaux après la division des niveaux quasi-dégénérés est déterminée à partir des valeurs propres d'une matrice 2 x 2 dont les termes diagonaux sont donnés par les valeurs de fréquence non perturbées des modes absorbants et les termes hors diagonale sont donnés par le terme de résonance FD [100]. Si l'énergie des niveaux non perturbés sur la diagonale principale de la matrice est notée E_a et E_b et l'élément hors diagonale, W, l'équation caractéristique de la matrice 2 x 2 conduit aux expressions suivantes à partir desquelles les niveaux de Fermi X_I et X_{II} peuvent être obtenus.

$$X_I = \frac{E_a + E_b}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_a - E_b}{2}\right)^2 + W^2} \quad [27a]$$

$$X_{II} = \frac{E_a + E_b}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_a - E_b}{2}\right)^2 + W^2} \quad [27b]$$

Les valeurs non perturbées peuvent être déterminées par l'opération inverse.

$$E_a = \frac{X_I + X_{II}}{2} + \sqrt{\left(\frac{X_I - X_{II}}{2}\right)^2 - W^2} \quad [28a]$$

$$E_b = \frac{X_I + X_{II}}{2} - \sqrt{\left(\frac{X_I - X_{II}}{2}\right)^2 - W^2} \quad [28b]$$

À partir des fréquences observées relatives aux isotopologues 626 s ¹⁶O¹²C¹⁶O et 628 ¹⁶O¹²C¹⁸O qui ont été données pour les matrices en phase gazeuse et les matrices de gaz rares, dans les références [10], [89]–[91] et dans les références [92], [94], [95] pour la structure I de la matrice de clathrate hydrate, les valeurs non perturbées correspondantes ont été calculées pour le mode ν_1 et indiquées dans le tableau 4 pour les isotopologues 626 O¹⁶C¹²O¹⁶ et 628 O¹⁶C¹²O¹⁸ ainsi que les valeurs observées pour les modes ν_2 et ν_3 à partir des valeurs propres correspondantes λ_k (en s⁻²), les constantes de force de liaison peuvent alors être calculées.

Isotope	Vibrational modes	Gas Phase	Argon Matrix	Krypton Matrix	Xenon Matrix	Clathrate hydrate I small cage	Clathrate hydrate I large cage
626	Stretching ν_1 calculated	1334.6	1330.8	1329.9	1329.3	1322.3	1328.1
626	Bending ν_2	667.4	661.9	660.6	659.3	655	660
626	Stretching ν_3	2349.2	2345.1	2340.6	2334.2	2347	2335
628	Stretching ν_1 calculated	1295.6	1291.8	1290.4	1289.2	1283.5	1285.7
628	Bending ν_2	662.4	656.8	656.1	655.2	650	655
628	Stretching ν_3	2332.1	2328.1	2323.9	2317.9	2330	2320

Tableau 4.4 : Valeurs de fréquence en nombre d'ondes (cm⁻¹) observées [21]–[24], [32], [34], [36] et [46] pour les isotopologues 626 et 628 du CO₂ dans différents milieux et calculées pour le mode ν_1

4.2. Calcul des constantes de force pour le CO₂, en phase gazeuse, les matrices de gaz rares et l'hydrate de clathrate I

À partir des paramètres caractéristiques suivants, $1,162 \times 10^{-10}$ m pour la longueur de la liaison C-O, $12,01074 \text{ g.mol}^{-1}$ pour la masse de l'atome C¹², $15,9994 \text{ g.mol}^{-1}$ et $17,9992 \text{ g.mol}^{-1}$ pour les atomes ¹⁶O et ¹⁸O, les valeurs des constantes de force peuvent être déterminées à partir des formules [25], [26a] [26b] [26c] et [26d] comme indiqué dans le tableau 5 pour le CO₂ en phase gazeuse et piégé dans des matrices de gaz rares et dans des cages petites et grandes de la structure I du clathrate. L'effet du champ électromagnétique dans la nanocage

correspondante (site de piégeage dans la matrice de gaz rares ou petite cage ou grande cage dans le clathrate hydrate de type I) est évalué à partir du carré des fréquences observées par le biais des constantes de force.

Force constants	Gas phase	Argon Matrix	Krypton Matrix	Xenon Matrix	Clathrate hydrate I Small cage	Clathrate hydrate I Large cage
f_{11} (dyne/cm) x 10^{-5}	15.495	15.422	15.382	15.337	15.326	15.327
f_{12} (dyne/cm) x 10^{-5}	1.2963	1.2735	1.2886	1.3198	1.1557	1.3003
f_{22} (dyne/cm) x 10^{-5}	15.495	15.422	15.382	15.337	15.326	15.327
$f_{\alpha\alpha}$ (dyne.cm/rad ²) x 10^{12}	7.73626857	7.60928579	7.57942522	7.54962335	7.45146616	7.56566321

Tableau 4.5 : Constantes de force pour les coordonnées internes des isotopologues 626 et 628 du CO₂ dans différents milieux

Les constantes de force sont fixées à partir de la matrice L dans l'équation [7], obtenue à partir des vecteurs propres de la matrice GF en termes de coordonnées de symétrie telles que $L = U'L^S$ où les colonnes vectorielles de L^S sont les vecteurs propres de la matrice GF. La matrice L^S donne les coordonnées normales Q_i en termes de coordonnées symétriques S_i . Les constantes de force fixées sont celles qui donnent Q_1 de préférence en termes de S_1 et Q_3 de préférence en termes de S_3 .

5. Résultats et discussion

L'effet des contraintes mécaniques et électriques imposées par l'environnement tel qu'un nanocage dans un milieu condensé conduit à une modification des spectres ro-vibrationnels IR standard en phase gazeuse avec l'observation d'une structure de bande IR soit restreinte à une branche Q en l'absence de degrés de liberté rotationnels, soit à des branches P et R perturbées [82]–[84]. Lorsqu'une molécule se déplace dans un environnement contraint tel qu'un nanocage, les degrés de liberté externes de translation et de rotation sont restreints et le champ électromagnétique présent dans la nanocage dans laquelle la molécule est confinée modifie le potentiel électronique qui entraîne les mouvements des noyaux, ce qui se traduit par une modification des transitions vibrationnelles. Des modèles théoriques spécifiques peuvent être construits pour simuler les spectres observés [86], [87, p. 1], [87, p. 2]

Dans les matrices de gaz rares, les décalages augmentent de l'argon au xénon, étant plus importants pour l'étirement antisymétrique que pour l'étirement symétrique et le mode de

flexion. Toutefois, comme il existe deux sites de piégeage dans l'argon, l'un stable et l'autre instable, les décalages des trois modes se situent dans la même fourchette. La même tendance est observée pour la grande cage et la petite cage dans l'hydrate de clathrate de type I. Dans la grande cage, les résultats sont similaires pour le xénon. Mais dans la petite cage, les déplacements des modes symétriques d'étirement et de flexion sont plus élevés que dans la grande cage, comme le montre le tableau 4. Comme indiqué dans les sections 3 et 4, les constantes de force de liaison ont été calculées en tenant compte des corrélations entre les représentations irréductibles des sous-groupes D_{2h} pour $O^{16}C^{12}O^{16}$ et C_{2v} pour $O^{16}C^{12}O^{18}$ et celles du groupe complet $D_{\infty h}$ et $C_{\infty v}$, selon la méthode décrite dans les références [86] et [99], à partir des fréquences des modes fondamentaux après un calcul préalable de la fréquence du mode non perturbé ν_1 . Les résultats obtenus pour le mode ν_1 témoignent d'un progrès significatif dans l'analyse des données IR de CO₂ par rapport à un résultat qui a été montré et discuté pour la première fois par Amat et Pimbert [100]. Ces auteurs ont démontré que la fréquence du mode ν_1 non perturbé est à une valeur inférieure à celle du mode $2\nu_2$ pour l'isotopologue 626. Il faut noter que c'est la situation inverse qui était alors couramment admise. A cet égard, nos calculs montrent que, de même, le mode ν_1 non perturbé se situe à une valeur plus faible que le mode $2\nu_2$ non perturbé pour les isotopologues 626 et 628 lorsque la molécule est piégée dans une matrice de gaz rares ou dans une nano cage d'hydrate de clathrate. Pour extraire des données relatives à cette dernière situation environnementale, les fenêtres IR pertinentes pour l'observation doivent être localisées pour les principales raies d'absorption et les isotopologues attendus.

De plus, en appliquant les méthodes de la mécanique quantique dans le cadre des transformations de contact, l'énergie vibratoire d'une molécule linéaire peut être exprimée comme suit :

$$E_v = \sum_{s=1}^3 \omega_s \left(\nu_s + \frac{g_s}{2} \right) + \sum_{s \leq s'}^3 x_{ss'} \left(\nu_s + \frac{g_s}{2} \right) \cdot \left(\nu_{s'} + \frac{g_{s'}}{2} \right) + \sum_{s \leq s'}^3 x_{\ell_s \ell_{s'}} \ell_s \ell_{s'} \quad [29]$$

Où chaque mode normal de vibration de fréquence ω_s est désigné par le nombre quantique ν_s et où g_s est le degré de dégénérescence de la vibration ($g_s = 1$ si non dégénéré et $g_s = 2$ si doublement dégénéré) et le terme avec ℓ_s qui est lié à la rotation interne de la vibration dégénérée et qui s'applique au cas des molécules linéaires. Les constantes anharmoniques $x_{ss'}$ et $x_{\ell_s \ell_{s'}}$ sont données par le calcul de perturbation dans la méthode de transformation du cadre de contact et dont les expressions sont données dans les références

[10], [86] ainsi que les valeurs numériques pour les molécules linéaires symétriques et asymétriques CO₂.

Pour définir les fenêtres d'observation IR pour la collecte et l'analyse des données, l'étape initiale consiste à travailler sur les constantes de force de liaison de la molécule isolée, ce qui est bien connu grâce aux travaux théoriques présentés dans les références [84]–[86]. La méthode suivie consiste à définir une série de niveaux pour les valeurs des constantes de force de liaison attribuées aux isotopologues en phase gazeuse libre, comme indiqué dans les sections 3 et 4. Le premier niveau est attribué à l'isotopologue le plus courant (626 pour CO₂) et les autres niveaux aux isotopologues dans l'ordre croissant des masses des atomes. Cela correspond à un changement des valeurs des éléments de la matrice G. Ensuite, en suivant la règle simple selon laquelle le carré de la fréquence est proportionnel à la constante de force, qui est d'origine électrique, et inversement proportionnel à la masse, qui est d'origine mécanique, les fréquences devraient diminuer à mesure que les masses augmentent pour les isotopologues.

Ensuite, la deuxième étape consiste à définir une série de niveaux lorsque la molécule est confinée dans un milieu condensé ou sur une surface. Cette fois, en raison du champ électromagnétique moyen auquel sont soumis les atomes vibrants, les constantes de force de liaison sont modifiées pour chaque isotopologue. Dans les matrices de gaz rares, on observe un décalage vers le rouge du centre de bande proportionnel à la polarisabilité des atomes de gaz rares. Cependant, dans les matrices d'azote, un décalage bleu est observé pour le CO₂. Le décalage peut donc être positif ou négatif selon le milieu condensé. Cela correspond à un changement des valeurs des éléments de la matrice F.

Par conséquent, pour la molécule CO₂ considérée dans ce travail, le spectre IR peut être simulé à partir des constantes de force de liaison qui permettent de calculer le mode normal de vibration de fréquence ω_s comme indiqué dans les sections 3 et 4 à partir de la matrice GF. Ensuite, en appliquant les méthodes développées pour RBDO basées sur une procédure Monte-Carlo, les fenêtres IR pour observer le mode de vibration fondamental de la molécule de CO peuvent être simulées à partir des constantes de force de liaison. ν_1 , ν_2 et ν_3 peuvent être simulées pour des isotopologues et pour des environnements différents des atmosphères en phase gazeuse, en particulier des nanocages qui piègent la molécule en phase condensée.

Les résultats du tableau 4.5 montrent que la symétrie de la molécule est préservée puisque f_{11} et f_{22} sont égales quel que soit le type de matière condensée qui piège la molécule de CO₂ dans une nanocage. Les décalages maximaux des constantes de force par rapport aux

valeurs de la phase gazeuse sont égaux à 1,09%, 1,81% et 3,68% respectivement pour $f_{11} = f_{22}$, f_{12} et $f_{\alpha\alpha}$. A titre de comparaison, les décalages relatifs des fréquences des modes vibrationnels sont respectivement égaux à 0,92%, 1,86% et 0,64% pour les modes fondamentaux ν_1 , ν_2 et ν_3 .

Dans un premier temps, les fréquences fondamentales des modes sont calculées pour l'isotope 628, à partir des constantes de force de liaison calculées pour CO₂. Les valeurs sont comparables à moins de 0,01% de décalage relatif pour les trois modes avec les valeurs observées. Ensuite, une procédure de Monte-Carlo est appliquée pour déterminer les fréquences en fixant une incertitude sur la masse d'un atome d'oxygène. Les résultats montrent que la procédure numérique se compare bien à la procédure analytique dans la mesure où les valeurs observées se situent dans les intervalles de fréquence calculés.

Pour les décalages observés dans les nanocages par rapport aux valeurs en phase gazeuse, la procédure MC permet de déterminer une fenêtre d'observation qui dépend du poids imposé à la valeur délivrée par la fonction aléatoire. Ces poids ont été fixés en fonction des décalages relatifs déterminés pour les constantes de force calculées à partir des valeurs observées. Les distributions suivantes, telles qu'illustrées à la figure 4.2, sont obtenues pour les modes ν_1 et ν_3 . La relation entre les constantes de force et les fréquences calculées n'étant pas linéaire, la forme des distributions est triangulaire. Il convient de noter que pour le mode ν_2 , cette distribution des fréquences pour une exécution MC de 10 000 pas est presque plate dans l'intervalle des fréquences calculées. Ces résultats reflètent la relation entre les constantes de force et les fréquences calculées, puisque la fréquence ν_2 est égale à la racine carrée de la constante de force.

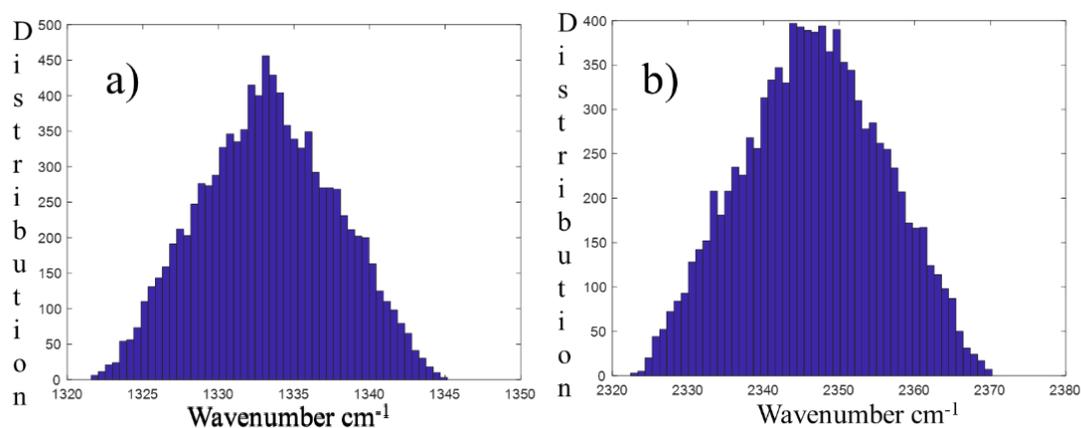


Figure 4.2 : Distribution des fréquences pour les modes ν_1 a) et ν_3 b) pour un ensemble de valeurs pondérées données par la fonction aléatoire utilisée pour la procédure MC avec 10000 étapes.

L'association entre la précision de la géométrie de référence du système moléculaire, son énergie et, par la suite, les constantes de force de liaison, fournit des informations précieuses sur les performances et l'applicabilité des techniques de physique et de chimie quantiques. La procédure de Monte-Carlo est utilisée pour déterminer la plage dans laquelle les constantes de force de liaison sont attendues lorsque la molécule est piégée dans un nanocage dans un environnement de matière condensée. Les fréquences fondamentales sont des fonctions non linéaires des constantes de force. Elles sont obtenues numériquement à partir des constantes de force de liaison déterminées par la procédure MC. Ainsi, en ce qui concerne les vibrations internes, des fenêtres d'absorption IR spécifiques peuvent être localisées pour l'analyse des données obtenues à partir des fréquences IR observées et différents environnements peuvent être traités à partir de l'analyse. Pour les fréquences en résonance, une correction doit être appliquée, telle que celle de Fermi-Dennison, pour corriger les intervalles.

Dans la conception d'un détecteur mobile, ces fenêtres spécifiques peuvent être optimisées pour l'analyse in situ des données de n'importe quelle espèce chimique à partir de la spectroscopie IR ou Raman. La région de l'infrarouge moyen, qui couvre le domaine IR de 400 cm^{-1} à 4000 cm^{-1} , est généralement divisée en quatre domaines correspondant à : de 2500 cm^{-1} à 4000 cm^{-1} pour O - H (3600 cm^{-1} à 3700 cm^{-1}), N - H (3300 cm^{-1} à 3400 cm^{-1}) et C - H (2850 cm^{-1} à 3000 cm^{-1}); de 2500 cm^{-1} à 2000 cm^{-1} pour $\text{C}\equiv\text{C}$ et $\text{C}\equiv\text{N}$; de 2000 cm^{-1} à 1500 cm^{-1} pour $\text{C}=\text{C}$, $\text{C}=\text{O}$ et $\text{C}=\text{N}$ et de 600 cm^{-1} à 1500 cm^{-1} pour $\text{C}-\text{C}$, $\text{C}-\text{O}$ et $\text{C}-\text{N}$. Ces régions définissent les limites de détection des transitions IR. En fonction des effets environnementaux, ces limites peuvent fluctuer et être considérées comme des domaines IR soumis à des incertitudes.

Pour évaluer ces incertitudes, la méthode décrite dans ce travail peut être appliquée. En outre, pour tenir compte du caractère aléatoire des paramètres d'entrée, les méthodes de Monte-Carlo, dans le cadre des modèles d'optimisation de la conception basée sur la fiabilité (RBDO) [18], [48]-[50] peuvent être couplées aux techniques d'échantillonnage entropique de Monte-Carlo (MCES) [51]-[54] afin de renforcer l'effet des états au-delà de l'équilibre thermodynamique, en particulier pour tenir compte des variations de température qui ont un impact sur l'entropie du système moléculaire observé. Enfin, la motivation derrière le travail présenté réside dans l'application des techniques RBDO et MCES en tant que stratégies numériques pour gérer les incertitudes telles que celles illustrées.

6. Conclusion

Dans ce travail, nous avons réalisé un modèle théorique simplifié basé sur la théorie des groupes pour déterminer les constantes de force de liaison pour la molécule CO₂ dans différents milieux et prédire un intervalle d'incertitude pour localiser CO₂ dans un milieu par ailleurs inconnu. À notre connaissance, c'est la première fois que des calculs de la fréquence attribuée au mode ν_1 pour l'état vibratoire quantique non perturbé ont été effectués pour le CO₂ piégé dans des nanocages de matrices de gaz rares et de clathrate de type I. Les résultats sont également en accord avec les résultats d'Amat et Pimbert concernant la position relative de l'état vibratoire quantique non perturbé ν_1 par rapport au mode $2\nu_2$. Une procédure de Monte Carlo est ensuite appliquée pour faire varier les constantes de force de liaison f_{ij} ou la masse du troisième atome de CO₂ et l'intervalle de fréquence dans lequel il faut observer la réponse de la molécule en tant qu'absorbant est déterminé. Ensuite, les fréquences vibratoires correspondantes calculées peuvent être optimisées pour chaque isotopologue afin d'élargir la base de données pour analyser les données IR CO₂ observées dans la matière condensée ainsi que les rapports isotopiques. Ce travail est une tentative de fournir une méthode pour extraire des informations sur une espèce moléculaire piégée dans un milieu condensé, au-delà des valeurs spectroscopiques IR standard en phase gazeuse déjà présentes dans des bases de données telles que Hitran, à partir des constantes de force de liaison. Elle fournit une méthode permettant d'utiliser les données d'Hitran afin de sélectionner des plages IR pour rechercher des espèces moléculaires piégées dans la matière condensée. À cet égard, les résultats du présent travail peuvent servir à analyser les données attendues de la mission d'exploration des principaux satellites de Jupiter de l'ESA, la mission JUICE, étant donné qu'une grande quantité d'eau est présente sur les plus grandes lunes de la planète - Europe, Ganymède et Callisto - enfouie sous leurs surfaces glacées [55]. Dans une prochaine étape, la méthode sera élargie à la forme de la raie d'absorption, y compris la largeur et la surface, en plus de l'énergie de la transition qui correspond au centre de la raie. L'analyse des données acquises par les instruments spectroscopiques IR peut encore être améliorée par des outils d'intelligence artificielle, ce qui simplifie considérablement l'identification des composés chimiques.

CHAPITRE 5 : Conception du banc d'essai simuler expérimentalement les conditions rencontrées par un capteur FTIR sur drone

Sommaire :

CHAPITRE 5 : Conception du banc d'essai simuler expérimentalement les conditions rencontrées par un capteur FTIR sur drone.....	94
1. Introduction	95
2. Matériels et méthodes.....	96
2.1. Le détecteur IR et la source lumineuse.....	96
2.2. La cellule à gaz.	100
3. Discussion	104
4. Conclusion.....	105

1. Introduction

Les effets de la pollution atmosphérique sur l'environnement, l'économie et la santé des citoyens des pays touchés s'intensifient avec le temps. À des concentrations élevées, les polluants atmosphériques peuvent entraîner de graves problèmes de santé, notamment une gêne respiratoire, une inflammation des voies respiratoires, des lésions de l'épithélium pulmonaire et une diminution de la clairance mucociliaire.

Dans un monde en voie d'urbanisation, la surveillance de ces toxines constitue un problème majeur pour la civilisation humaine [101]–[103].

En effet, on prévoit que 68 % de la population mondiale résidera dans des régions urbaines d'ici 2050. L'indice de qualité de l'air est l'indicateur utilisé pour mesurer la présence de contaminants dans l'air [104]. Les systèmes terrestres sont essentiellement mis en œuvre dans les zones industrielles. Le système d'observation et de prévision de l'environnement (EOFS), GEMS Air et WAQI sont des réseaux de capteurs à grande échelle qui permettent de surveiller et de prévoir la qualité de l'air à l'échelle mondiale. Cependant, ils présentent plusieurs défauts, notamment une précision réduite, une restriction de la collecte de données tridimensionnelles et la possibilité de passer de lieux connus à des lieux inconnus [105].

En outre, la couverture terrestre restreinte nécessite la création d'un réseau de capteurs dense et l'utilisation de technologies modernisées et rentables [13], [106], [107]. Par exemple, les moniteurs d'atténuation bêta (BAM) traditionnels sont remplacés par des micro-équilibres oscillants à éléments coniques (TOEM) contemporains [108] un GAIA A12 semi-professionnel est en cours d'installation et la technologie SIG est utilisée [109]. L'installation de vastes réseaux de capteurs de gestion de la qualité de l'air nécessite un investissement important et de nombreux travailleurs pour une couverture territoriale limitée. Les applications technologiques modernes, telles que la télédétection et les systèmes géoréférencés, peuvent fournir une couverture complète de la surface de la terre. Les drones dotés d'équipements analytiques qui servent d'instruments exceptionnels pour la surveillance de l'environnement comptent parmi les meilleures options. L'augmentation annuelle du nombre de recherches scientifiques sur l'utilisation des drones pour la surveillance de la pollution de l'air, ainsi que les progrès significatifs de l'industrie de fabrication des drones et le développement d'équipements analytiques abordables et légers, renforcent encore l'intérêt et l'attrait de ces systèmes [110]. Quelques tentatives ont été faites pour monter un capteur de spectroscopie IR

sur un drone, mais la phase d'étude n'a pas été décrite de manière adéquate.

À notre connaissance, cet article est le premier à fournir un banc d'essai imitant les conditions rencontrées sur un drone. En fait, cet article étudie la mise en œuvre d'un détecteur IR sur un drone et simule ces conditions à l'aide d'un banc d'essai. Les résultats obtenus seront discutés afin d'examiner l'impact correspondant sur la conception du drone.

Les autres sections de ce travail sont structurées comme suit : Les matériaux utilisés dans cette expérience sont décrits en détail dans la section 2. La troisième section présente les expériences menées pour développer le détecteur et la source laser. La section 4 traite des informations fournies par les résultats de ces expériences. La cinquième section aborde la manière dont ces résultats expérimentaux peuvent être appliqués à la conception du capteur mobile requis.

2. Matériels et méthodes

2.1. Le détecteur IR et la source lumineuse

Sur le plan mécanique, les molécules d'un gaz peuvent être comparées à des poids reliés par des ressorts. En fonction du nombre d'atomes, de leur taille individuelle et de leur masse, la constante élastique des ressorts et les molécules peuvent changer de direction, vibrer le long d'un axe, tourner, se tordre, s'étirer, se balancer, s'agiter, etc.[100].

Les molécules complexes étant formées de plusieurs atomes, elles peuvent absorber et émettre de la chaleur plus efficacement que les molécules simples.

Selon la fréquence des transitions, certaines se situent dans les plages d'énergie sensibles à l'infrarouge [111]

Pour qu'une molécule absorbe un photon infrarouge lors d'une transition entre deux états quantiques, elle doit être caractérisée par un moment dipolaire capable d'interagir avec le champ électrique associé au photon dont l'énergie est égale à l'écart en énergie entre les deux états. Cette interaction lumière-matière d'origine quantique a pour conséquence l'absorption de l'énergie du champ électromagnétique du photon par la molécule [112].

En optique, la mesure du nombre de photons délivrés en un point donné par unité de temps est appelée intensité "I". Une intensité plus élevée peut être considérée comme "plus lumineuse" et une intensité plus faible comme "moins lumineuse".

La proportion de lumière entrant et sortant d'un échantillon est connue sous le nom de Transmittance [15]:

$$T = \frac{I}{I_0} \quad [1]$$

Il est mathématiquement plus judicieux de définir un autre paramètre que T, l'absorbance A, dont l'expression est donnée par :

$$A = -\log_{10} \frac{I}{I_0} \quad [2]$$

En physique, l'absorbance correspond à une propriété de la lumière qui est proportionnelle à la concentration de l'échantillon. La lumière se déplaçant à une vitesse constante, l'absorbance doit être proportionnelle au temps que passe le faisceau à traverser l'échantillon. La constante de proportionnalité est connue sous le nom d'absorbance molaire lorsque la longueur du trajet est mesurée en centimètres et que la concentration de l'espèce absorbante est quantifiée en molarité.[113]

- $A = \varepsilon * l * c$ [3]
- k = constante de proportionnalité,
- l = longueur du chemin, et
- c = concentration de l'espèce chimique absorbante

En spectroscopie IR, ces propriétés physiques sont utilisées pour déterminer les espèces chimiques et leur concentration. Dans cette étude, nous utiliserons la source de lumière IR HAMAMATSU L15969 qui peut nous aider à détecter des molécules telles que le CO₂ qui représente un contributeur majeur au phénomène de réchauffement climatique. Le CO₂ est actif dans l'IR, ce qui signifie que sa détection peut être effectuée par spectroscopie IR. Ici, un pic important devrait être observé à 2349 cm⁻¹. Cependant, il y a une surprise : à 2349 cm⁻¹ précisément, il n'y a pas de pic du tout, mais à gauche et à droite de ce point, il y a plusieurs pics avec une distribution de hauteurs distinctes. En choisissant la source lumineuse et le détecteur adéquats dans la bibliothèque de sélection Hamamatsu, l'accent est mis sur la région de 4,1 μm (qui correspond dans l'échelle des longueurs d'ondes à l'énergie mesurée à 2349 cm⁻¹), ce qui permet à l'utilisateur de détecter le CO₂.

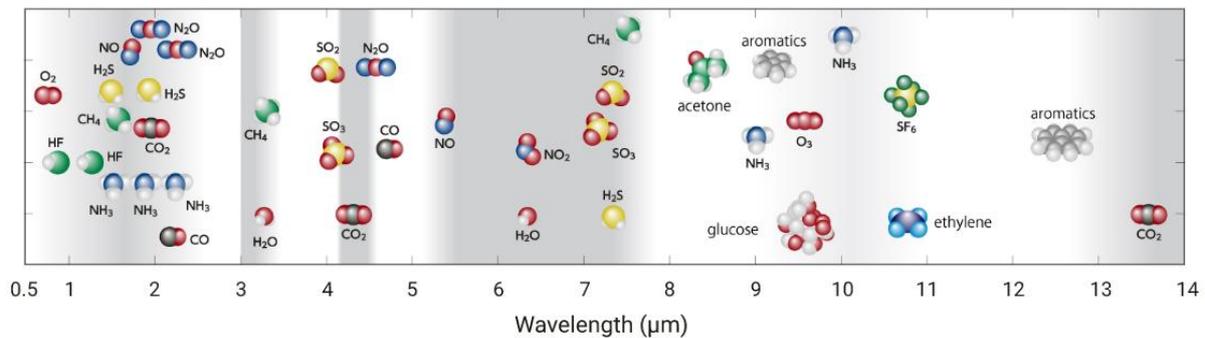


Figure 5.1 : La région IR pour la détection du CO₂

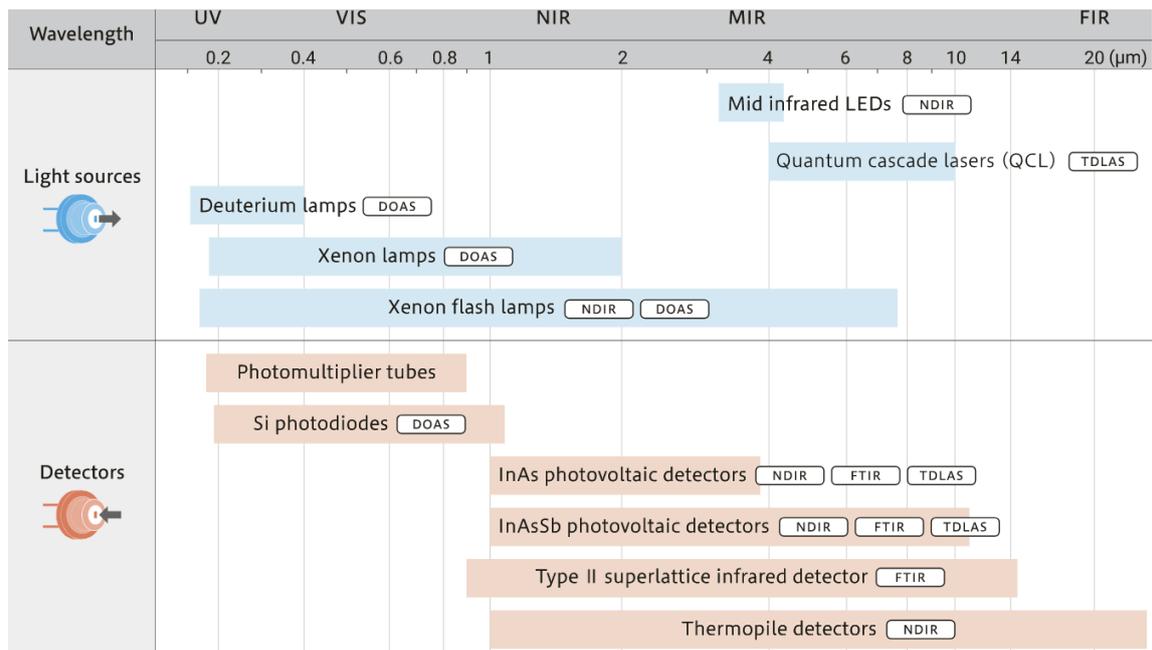


Figure 5.2 : Choix de la source lumineuse et du détecteur adéquats

A partir de ce tableau, nous déduisons que le choix se portera sur deux candidats. Pour la source lumineuse, les LED infrarouges moyennes et les lasers à cascade quantique (QCL) ; pour les détecteurs, le choix est plus confortable entre les détecteurs photovoltaïques à l'As, les détecteurs photovoltaïques à l'INAsSB, les détecteurs IR à super réseau de type II et les détecteurs à thermopile. La large gamme de produits proposée par Hamamatsu facilite le choix. D'autres facteurs tels que la dimension et le coût sont ensuite pris en considération pour sélectionner la source lumineuse et le détecteur. Dans cette application, nous avons opté pour la source lumineuse L15969 représenté sur la figure 5.3 et figure 5.4 ; quant au détecteur, nous avons choisi le photovoltaïque INAsSB P13243-043CF. Il s'agit là de caractéristiques exceptionnelles fournies par le fabricant :

Source de lumière IR en graphène L15969

Température ambiante de fonctionnement -10 °C à 60°C.

La tension d'entrée Caractéristiques à 25° 1 kHz pour la fréquence et 50 % de service donne 2,6 V.

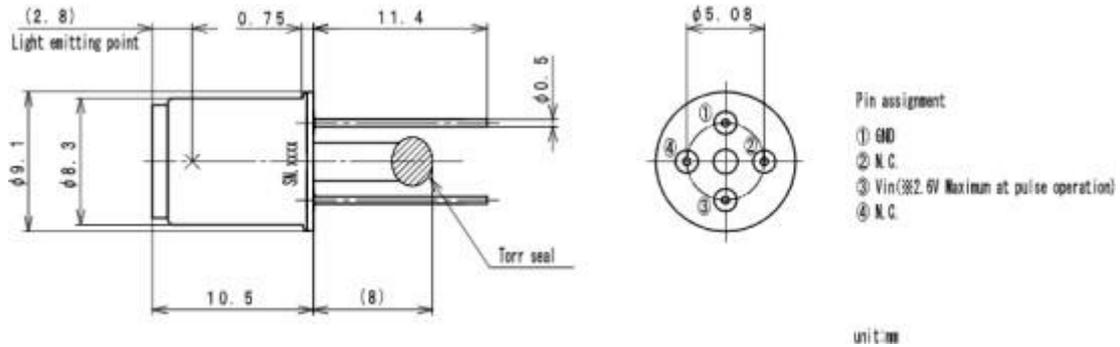


Figure 5.3 : conception technique de la source lumineuse L15969

En ce qui concerne le détecteur, le choix s'est porté sur des détecteurs photovoltaïques



Figure 5.4 : Vue de face de la source IR L15969

INAsSB qui applique un filtre passe-bande pour la fenêtre. Les types utilisant un filtre passe-bande avec une longueur d'onde centrale de 3,3 μm , 3,9 ou 4,6 μm sont adaptés à la mesure des gaz. les figures 5.5 et 5.6 présentent une explication détaillée de l'installation de la carte d'acquisition figure 5.7.

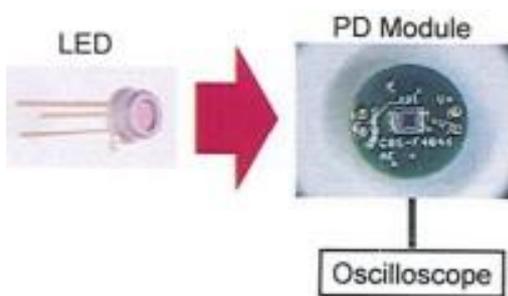


Figure 5.5 : La procédure d'acquisition

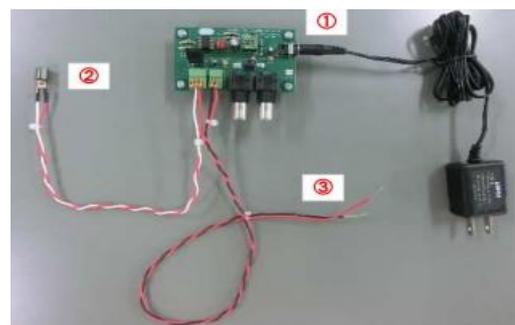


Figure 5.6 : Détecteur IR monte sur la CART

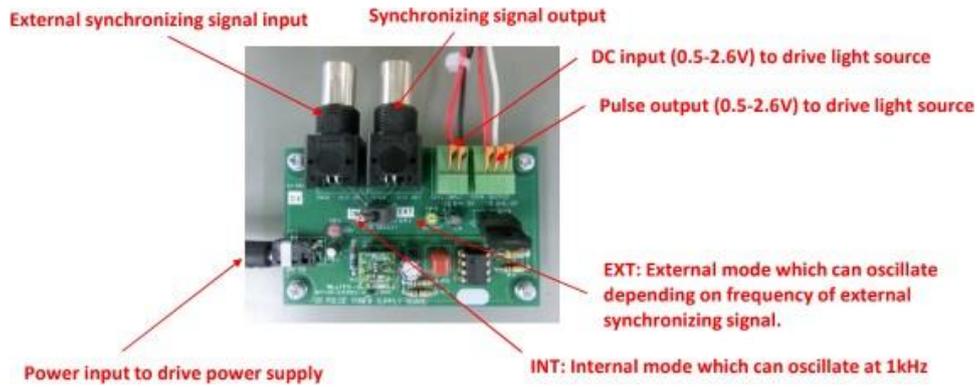


Figure 5.7 : Détecteur IR monte sur la carte

- ✓ Double affichage de la fréquence et de l'amplitude.
- ✓ Contrôle variable de l'offset DC.
- ✓ Protection contre la surcharge de la sortie.

2.2. La cellule à gaz

La cellule à gaz illustrée à la Figure 5.8 est conçue sous la forme de deux cylindres coaxiaux. Le cylindre extérieur permet au liquide de s'écouler pour modifier la température. Le tube intérieur contient le gaz à l'étude. Dans le cas du CO₂, les dimensions du cylindre intérieur sont adaptées au diamètre de 15 mm du détecteur.



Figure 5.8 : La bouteille de gaz

Dispositif expérimental :

Expérience 1 :

Pour confirmer que notre détecteur IR est effectivement fonctionnel, une comparaison directe a été effectuée entre les mesures du fabricant et celles obtenues sur notre banc d'essai

après réception des équipements de HAMAMATSU. L'objectif principal est de corroborer le fait qu'au cours du processus d'emballage, le détecteur peut devenir non fonctionnel en raison d'accidents d'emballage. Le capteur IR a été monté à température ambiante et dans des conditions de fonctionnement normales.

Expérience 2 :

La température affecte notamment les capteurs infrarouges (IR), car les longueurs d'onde émises par le transducteur varient en fonction de la température environnante. Un capteur monté sur un drone peut subir une variation de température complexe. Nous avons donc choisi d'étudier l'effet de ce paramètre dans cette expérience. La source de lumière infrarouge a été placée à l'intérieur du cylindre intérieur fixé sur sa circonférence à l'aide d'un diaphragme en caoutchouc afin de rencontrer exactement le détecteur infrarouge monté à l'extrémité du cylindre, ce qui est démontré en référence sur la figure 5.9. La température a été contrôlée à l'aide de thermocouples et sera modifiée en utilisant de l'eau chaude.

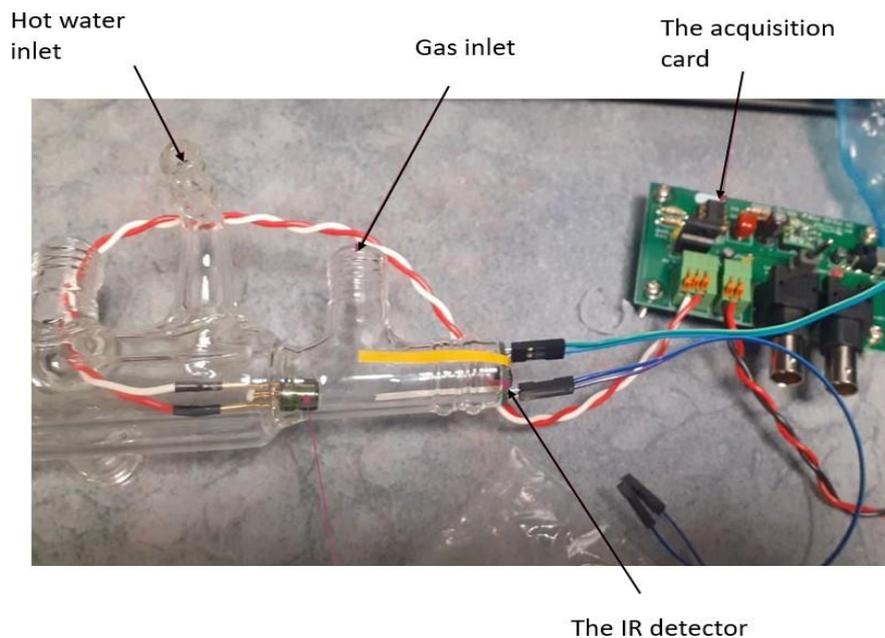


Figure 5.9 : Détails du banc d'essai

Trois mesures à des températures de 25°, 35° et 45° ont été effectuées. La sortie du signal sera étudiée pour déterminer l'effet de la variation de température sur le signal.

Dans les résultats, la sortie avec l'effet de température le plus clair, qui correspond à la température de 45°, sera discuté.

Ensemble expérimental 3 :

Cette expérience a permis d'examiner l'influence des vibrations sur le capteur IR. HAMAMATSU a fourni des tables de vibration avec ses moteurs FTIR. Ces tables sont conçues pour des systèmes de détection à grande échelle ; cependant, dans notre cas, un système beaucoup plus petit a été utilisé. Il est donc avantageux d'étudier l'effet de ce paramètre en plus de la simulation des vibrations générées par la résistance de l'air et les vibrations aléatoires.

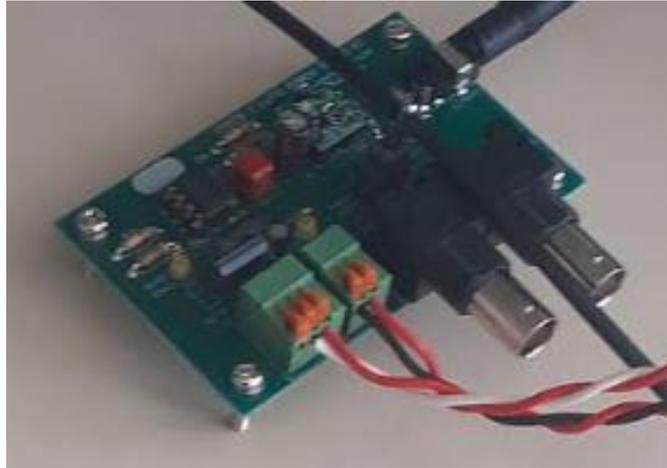


Figure 5.10 : Essai expérimental

L'application directe de vibrations à la carte d'acquisition de données a été évitée en raison de la fragilité du capteur. Celui-ci a été monté sur une table vibrante, figure 5.10. Compte tenu de la proximité de la sortie de la carte d'acquisition, ces vibrations ont été transmises au capteur.

3. Résultats

Pour les trois séries d'expériences, nous avons utilisé ce signal d'excitation de 2,44 V, conformément aux instructions du fabricant HAMAMATSU qui affirme que la tension d'excitation ne doit pas dépasser 2,6 V figure 5.11.

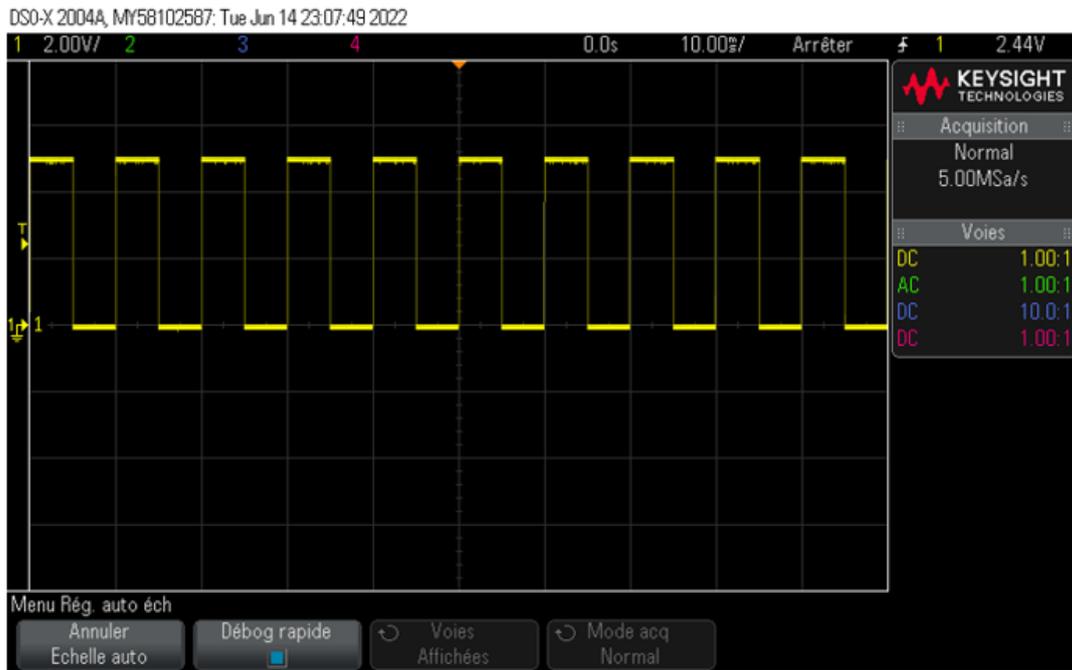


Figure 5.11 : Le signal d'entrée

Le courant d'entrée fourni par le second générateur représenté à la figure 5.11 a fourni l'ampérage nécessaire de 500mA.CO₂ Les molécules ont absorbé une partie de la force du signal, et la sortie a indiqué que le capteur était toujours opérationnel. La figure 5.12 montre la sortie dans des conditions de fonctionnement optimales.

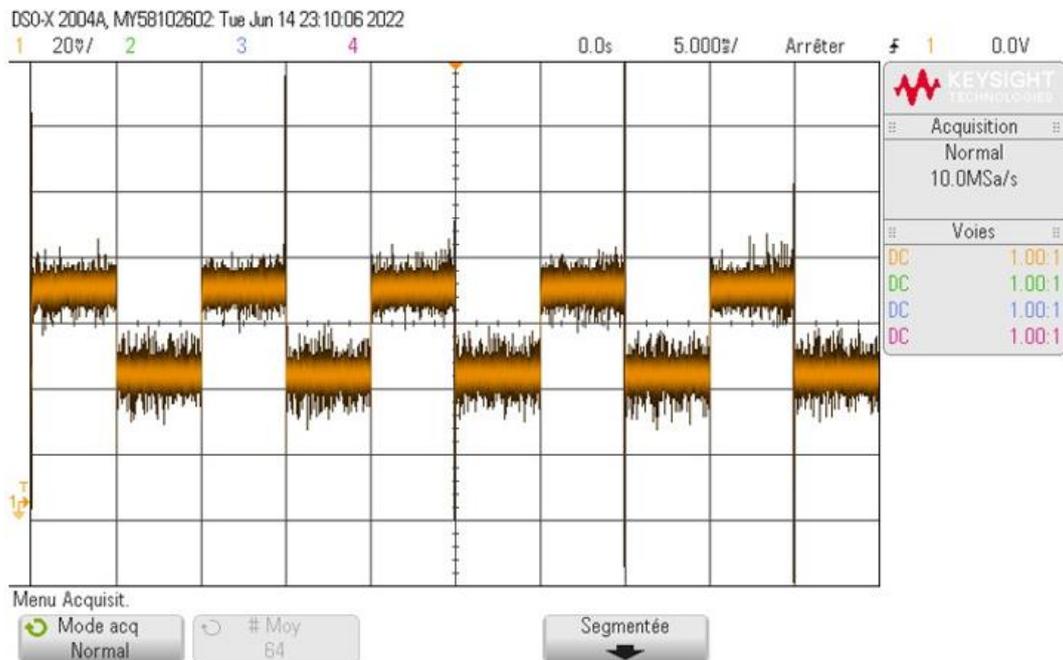


Figure 5.12 : Signal de sortie en mode de fonctionnement normal

La figure 5.13 montre la forme du signal de sortie à mesure que la température augmente. Nous en déduisons que la température influence non seulement le capteur, en modifiant la forme du signal avec de multiples impuretés sous la forme de multiples pics, mais aussi les valeurs d'amplitude du signal de sortie. Cela peut s'expliquer par le fait que des températures plus élevées provoquent l'agitation d'un plus grand nombre de molécules, ce qui augmente la probabilité qu'une molécule absorbe le laser. Il est évident que le capteur sera endommagé s'il est exposé à une température supérieure à 60°, comme le souligne le fabricant. Notre objectif de base était de déterminer la viabilité du montage d'un tel capteur optique sur un drone. Pour cette raison, nous n'avons pas dépassé les 45 degrés pendant notre essai. Une fois connecté au drone, la température du capteur ne pouvait pas dépasser 40° lorsqu'il était refroidi par l'air.

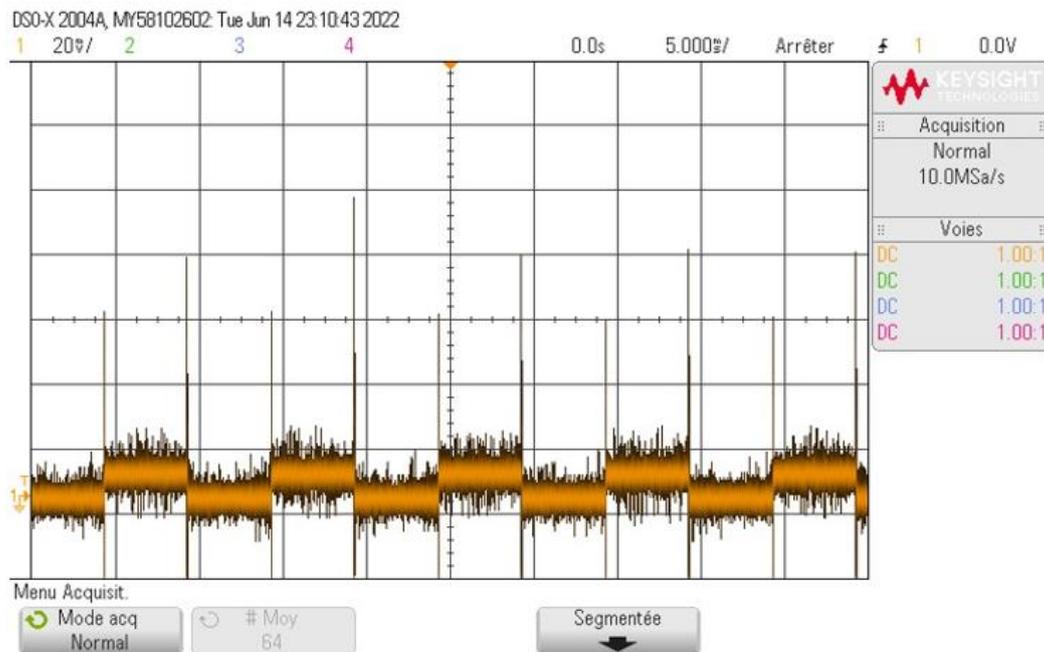


Figure 5.13 : Signal de sortie dans des conditions de température modifiées

La figure 5.14 montre clairement que la vibration aléatoire mixte a un effet dévastateur sur la mesure, entraînant une distorsion totale du signal de sortie. La mesure n'est donc plus possible et le signal de sortie ne peut pas être interprété.

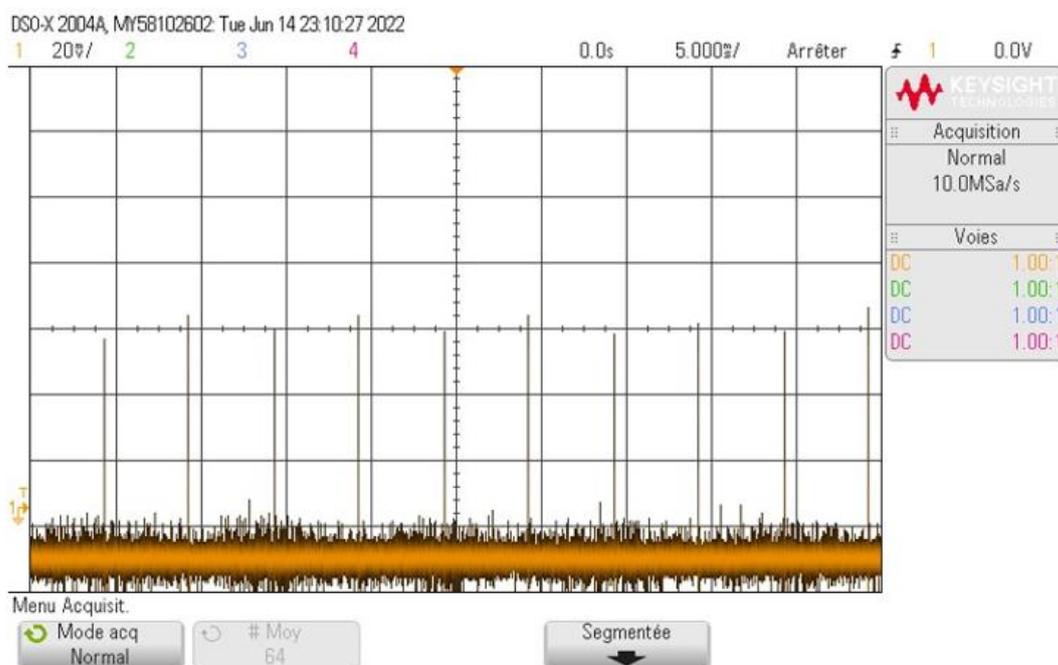


Figure 5.14 : Le signal de sortie dans un environnement vibratoire

4. Discussion

Les distorsions du signal générées par les fluctuations de température peuvent être traitées en reproduisant les circonstances rencontrées par un détecteur IR monté sur un drone. La différence entre la valeur originale du signal de sortie et le signal produit par l'ajout de la variation induite par la température peut être inférieure à 5 %. Cela démontre que, selon l'environnement, la précision de la mesure diminue à mesure que la température augmente. La capacité de l'énergie thermique à accélérer la rotation moléculaire et à remplir les lignes qui s'éloignent de la vibration fondamentale augmente avec la température. Par conséquent, les techniques analytiques dont la dispersion de la fréquence du mode fondamental est de 5 % peuvent être utilisées pour modéliser les spectres IR pour chaque type de molécule, CO₂ ou N₂O. Compte tenu de la différence de coût et du poids et de la complexité supplémentaires que les solutions techniques peuvent apporter, cette approche s'est avérée beaucoup plus facile. En fait, la mise en œuvre d'un système de réfrigération à petite échelle sur un drone est une question d'ingénierie difficile.

D'autre part, le signal de sortie de la troisième expérience a révélé que le signal est tellement incohérent qu'il est impossible à déchiffrer. En raison de leur nature, les détecteurs optiques requièrent une grande stabilité, car leur fonctionnement dépend fortement de l'alignement du détecteur de lumière et du laser incident. La nécessité d'inclure un dispositif

d'absorption des vibrations dans la conception du drone sera fortement influencée par ces résultats. Certaines solutions, telles que les tables d'absorption des vibrations investies par HAMAMATSU, peuvent être utiles, mais l'ajout d'un tel dispositif aura un impact négatif sur la masse du drone, sa consommation d'énergie et, par conséquent, le profil de la mission. Notre objectif sera bien mieux atteint si nous optons pour d'autres solutions, telles que des gels et des polymères absorbant les vibrations avec des coefficients d'amortissement élevés, qui seront utilisés pour la fixation de la source lumineuse et du détecteur.

5. Conclusion

La température et les vibrations sont deux des facteurs les plus importants qui influent sur la fiabilité des observations spectroscopiques IR, et elles constituent le principal objet de cette étude expérimentale. Le développement d'un banc d'essai a permis de démontrer comment les variables expérimentées par un détecteur spectroscopique IR dans l'environnement d'un drone affectent la mesure. Le détecteur, la source laser et le réservoir de gaz ont tous été soigneusement sélectionnés. La spécificité du profil de la mission, à savoir l'identification de gaz dans une zone, justifie la décision d'utiliser un mode de vibration hybride et de fonctionner à des températures allant de la température ambiante à 45°.

Les résultats de l'expérience nous ont orientés sur la priorité à donner au développement d'une technologie d'absorption des vibrations pour les drones. En effet, l'effet de température est nettement moins nocif que l'effet de vibration.

À ce stade de l'analyse, nous affirmons que cette recherche sera reprise en termes de travail sur les approches analytiques et les bibliothèques d'optimisation qui peuvent être utilisées pour rectifier le signal en présence d'une incertitude induite par la température. À cet égard, la technique d'optimisation de la conception basée sur la fiabilité (RBDO) peut être utilisée comme une nouvelle perspective pour les travaux futurs afin d'améliorer les capacités d'analyse des données de l'appareil.

CHAPITRE 6 : Méthodologie IR-RBDO : Nouveaux aspects de la télédétection IR

CHAPITRE 6 : Méthodologie IR-RBDO : Nouveaux aspects de la télédétection IR	107
1. Introduction	108
2. Optimisation des signaux	109
3. Formulation du problème et méthodologie	110
3.1. Énoncé du problème	110
3.2. Évaluation de l'Optimisation de Mesures Infrarouges par Comparaison à la Base de Données HITRAN : Une Alternative à l'Optimisation de Conception Déterministe : ...	112
3.3. Optimisation basée sur la fiabilité pour l'analyse de signal infrarouge (Reliability-Based Infrared Signal Analysis Optimization - RBISAO)	113
4. Formalisation de l'Optimisation Basée sur la Fiabilité pour l'Analyse de Signal Infrarouge	113
4.1 Présentation générale de la méthode RBDO ;	113
4.2 Approche hybride (HM)	115
5. Méthode proposée	116
5.1. Énoncé du problème	116
5.2. Équations de base :	116
5.3. Approche stochastique : théorie de Monté Carlo ;	117
6. Optimisation fiabiliste basée sur la méthode HM de la mesure réalisée par un spectromètre FTIR monté sur un drone.....	118
6.1. Description de l'étude de cas :	118
6.2. Méthode probabiliste :	119
6.3. Mise en œuvre de la méthode RBDO	122
6.3.1 Mise en œuvre du méta modèle par Krigeage.....	122
6.3.2 Mesure FTIR amélioré par RBDO	123

1. Introduction

Au fil des années, l'optimisation s'est révélée être un sujet d'un intérêt significatif pour les chercheurs et les ingénieurs, en particulier dans le domaine en expansion rapide de la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR). La mise en œuvre de la spectroscopie FTIR dans des applications de télédétection par drone présente un défi majeur : obtenir une conception de système de détection optimale qui satisfait à des critères tels que la fiabilité, la durabilité et la faisabilité, tout en minimisant les coûts associés.

La méthodologie d'optimisation traditionnelle est généralement formulée comme une minimisation d'une "fonction objectif" soumise à des contraintes, internes ou externes. Toutefois, une dimension unique et novatrice dans ce domaine de recherche est l'intégration d'incertitudes mixtes qui peuvent affecter à la fois le drone et le système de mesure FTIR.

Dans le contexte de la spectroscopie FTIR par drone, ces incertitudes mixtes peuvent être classées en deux catégories. Premièrement, il existe des incertitudes intrinsèques à la mesure infrarouge, notamment les variations de température et les vibrations, qui peuvent avoir un impact sur la qualité et la précision des données recueillies par la spectroscopie FTIR. Deuxièmement, il existe des incertitudes liées à la dynamique du drone, comme les variations d'altitude et de position, qui peuvent influencer la performance du système de détection.

Ignorer ces incertitudes mixtes dans le processus d'optimisation peut entraîner des divergences non prévues entre les performances réelles et prévues du système de mesure FTIR par drone. Par conséquent, l'incorporation de ces facteurs d'incertitude dans les méthodologies d'optimisation s'impose comme une nécessité. Un exemple notable de ce type de méthodologie est l'Optimisation de la Conception Basée sur la Fiabilité (RBDO)[8], [114], [115].

Dans ce contexte, ce document vise à explorer l'implémentation de diverses méthodes d'optimisation basées sur la fiabilité (RBDO) spécifiquement pour le problème de la spectroscopie FTIR par drone. Après une présentation du contexte et de la formulation du problème, nous décrivons la méthodologie RBDO et comment elle peut être utilisée pour traiter efficacement les incertitudes mixtes. Une étude de cas illustrant l'application de cette méthodologie est ensuite présentée. En conclusion, nous discutons des implications et des avantages potentiels de l'approche RBDO, notamment en termes d'amélioration de la fiabilité des mesures FTIR effectuées par drone une explication de la méthodologie est présentée sur la figure 6.1.

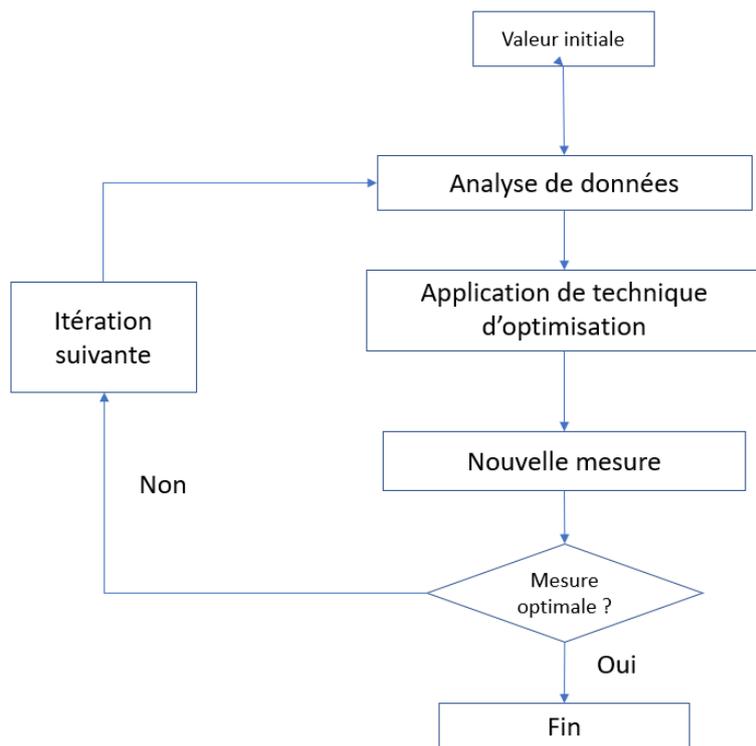


Figure 6.1 : Mise en œuvre de l'optimisation de la mesure

2. Optimisation des signaux

L'optimisation des signaux vise à résoudre des problèmes contradictoires : minimiser le bruit et maximiser l'information utile. Parmi les problèmes d'optimisation des signaux, on peut distinguer trois grandes catégories en fonction de la nature des variables de décision[7] :

1. **Optimisation du traitement** : Elle a pour objectif d'améliorer la qualité du signal alors que la source du signal et le système de mesure sont préétablis. Les variables de décision pourraient être, par exemple, les paramètres d'un filtre, les coefficients d'un égaliseur adaptatif, etc.
2. **Optimisation de la source** : Cette approche vise à modifier la source du signal tout en gardant le système de mesure et le processus de traitement du signal inchangés. Les variables de décision pourraient être les paramètres qui contrôlent la génération du signal, tels que la fréquence, l'amplitude, la phase, etc.

Optimisation du système de mesure : Elle a pour but de contrôler, en plus de la source et du traitement du signal, le système de mesure lui-même. Elle cherche à trouver les paramètres optimaux du système de mesure à partir des caractéristiques initiales de la source, des conditions environnementales et des objectifs de mesure.

Cette classification offre un cadre pour structurer et systématiser les efforts d'optimisation des signaux. Chacune de ces catégories présente des défis uniques et requiert des techniques d'optimisation adaptées. De plus, dans de nombreux cas pratiques, une approche combinée peut être nécessaire, où plusieurs aspects du système de signal sont optimisés simultanément.

Dans la suite de ce travail, nous nous intéresserons à l'optimisation combinée. Cette approche comprend non seulement l'optimisation du traitement et de la source du signal, mais aussi l'optimisation du système de mesure lui-même. Cette méthode holistique permet une considération complète et intégrative de l'ensemble du système de mesure par infrarouge monté sur un drone, ce qui permet d'aborder simultanément les défis associés à chaque composante individuelle.

3. Formulation du problème et méthodologie

3.1. Énoncé du problème

L'optimisation combinée est formulée par la recherche des paramètres intervenant à la fois dans le processus de génération du signal infrarouge et dans le système de mesure FTIR, qui minimisent une fonction objectif (habituellement orientée vers la minimisation du bruit ou la maximisation de la qualité du signal), tout en respectant les contraintes liées à la précision de la mesure, aux conditions environnementales et aux limites opérationnelles du drone et du système FTIR.

$$\min_x f(x)$$

$$\text{s.t. } g_k(x) \leq 0, k = 1 \dots k$$

$$h_j(x) = 0; j = 1, \dots, J$$

$$x_L \leq x \leq x_U$$

Soit x un vecteur contenant les variables de décision, $f(x)$ une fonction objectif à minimiser, $g_k(x)$ et $h_j(x)$ les contraintes d'inégalité et d'égalité respectivement, et x_L et x_U les bornes inférieures et supérieures du domaine de recherche des variables de décision. Il est envisageable de convertir un problème de maximisation en un problème de minimisation en utilisant la propriété suivante :

$$\min_x f(x) = \max_x (-f(x))$$

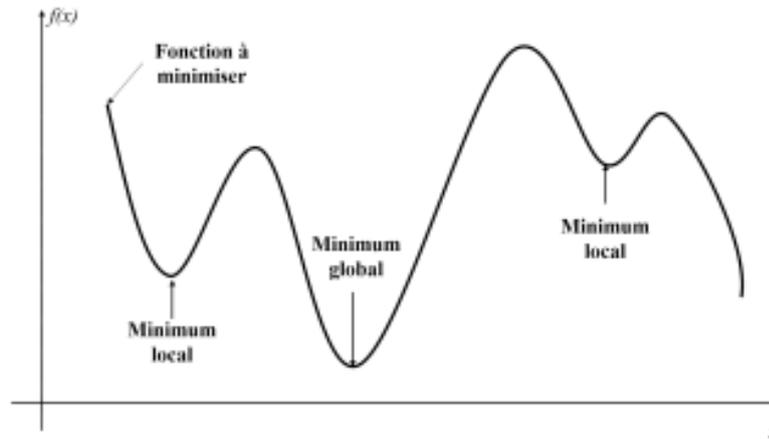


Figure 6.2 : Minimisation d'une fonction objective à une variable

Il est possible de catégoriser les algorithmes d'optimisation en deux classes distinctes : ceux qui exploitent le gradient de la fonction objectif et des contraintes, et ceux qui n'ont pas besoin de cette information. En règle générale, ces algorithmes tendent à converger vers un minimum local plutôt que d'atteindre le minimum global. La Figure 6.2 montre un exemple d'une fonction à une variable avec des minima locaux et un minimum global. Dans notre contexte, cette fonction pourrait représenter, par exemple, le bruit du signal en fonction des différents paramètres du processus de génération du signal, du traitement du signal et du système de mesure.

Dans notre travail, nous avons choisi de formuler le problème en visant à maximiser l'intensité du signal infrarouge. C'est notre fonction objective principale : maximiser la qualité du signal capté par le capteur FTIR monté sur le drone. Cependant, cette maximisation doit se faire tout en respectant un certain nombre de contraintes strictes.

Premièrement, la contrainte liée au bruit. Le bruit peut provenir de différentes sources, comme l'électronique du capteur infrarouge, les vibrations du drone ou même l'atmosphère. Il est crucial de garder ce bruit à un niveau bas pour garantir la qualité du signal infrarouge.

Deuxièmement, la contrainte d'altitude. Le drone doit voler à une altitude relativement faible pour permettre une mesure infrarouge précise. Une altitude élevée pourrait nuire à la qualité du signal à cause de l'atténuation du signal dans l'atmosphère et d'autres facteurs environnementaux.

Enfin, nous devons tenir compte de la contrainte de température. Les composants infrarouges ont des limites spécifiques de température de fonctionnement, au-delà desquelles leur performance peut être affectée ou même endommagée. Ces limites de température sont

généralement fournies par le fabricant du composant infrarouge.

Notre objectif est donc de trouver les paramètres de fonctionnement optimaux qui maximisent l'intensité du signal infrarouge tout en respectant ces contraintes. Cela nécessite l'utilisation d'algorithmes d'optimisation sophistiqués capables de gérer ce genre de problèmes d'optimisation avec multiples contraintes.

3.2. Évaluation de l'Optimisation de Mesures Infrarouges par Comparaison à la Base de Données HITRAN : Une Alternative à l'Optimisation de Conception Déterministe :

La comparaison de nos mesures infrarouges avec la base de données HITRAN, au lieu de l'utilisation de l'Optimisation de Conception Déterministe (Deterministic Design Optimization - DDO), permet d'ajouter une dimension de vérification et de validité à notre travail. En effet, au lieu de simplement maximiser nos mesures en fonction des paramètres de conception, nous faisons une comparaison directe avec une base de données de référence.

Dans notre approche, nous ne cherchons pas à introduire des coefficients de sécurité pour augmenter la sûreté de notre mesure. Au lieu de cela, nous utilisons directement les données HITRAN comme référence pour évaluer la qualité de nos mesures.

Le processus de notre approche est illustré en trois étapes principales:

1. Acquisition du signal infrarouge à partir du capteur FTIR monté sur le drone.
2. Traitement et analyse du signal pour extraire les informations pertinentes.
3. Comparaison des résultats obtenus avec les données de la base HITRAN pour évaluer leur précision et leur validité.

Plusieurs algorithmes et techniques ont été mis en œuvre pour réaliser cette comparaison de manière efficace. L'utilisation de la base de données HITRAN offre l'avantage de fournir une référence fiable et précise pour évaluer la qualité de nos mesures.

Bien que notre approche diffère de l'Optimisation de Conception Déterministe traditionnelle, elle permet de garantir la précision et la validité de nos mesures en les comparant directement à une référence reconnue. Cela offre l'avantage d'une plus grande confiance dans les résultats obtenus, sans avoir à recourir à l'utilisation de coefficients de sécurité basés sur l'expérience.

3.3. Optimisation basée sur la fiabilité pour l'analyse de signal infrarouge (Reliability-Based Infrared Signal Analysis Optimization - RBISAO)

La méthode d'optimisation basée sur la fiabilité se concentre sur l'analyse des perturbations à chaque itération afin d'évaluer l'impact des incertitudes sur le système de mesure infrarouge. Cependant, dans les applications pratiques, l'intégration de l'analyse de la fiabilité et des procédures d'optimisation entraîne des temps de calcul considérables et une convergence peu stable. Dans le cadre du RBISAO (Réseau de Boucles Imbriquées pour l'Analyse et l'Optimisation), comme représenté à la figure 6.3, deux boucles imbriquées sont utilisées : l'une se concentre sur l'optimisation de la fonction objectif sous des contraintes physiques (telles que le bruit, la température, l'altitude, etc.), tandis que l'autre est dédiée au calcul de la fiabilité, nécessitant elle-même une procédure d'optimisation de la performance du système de mesure infrarouge.

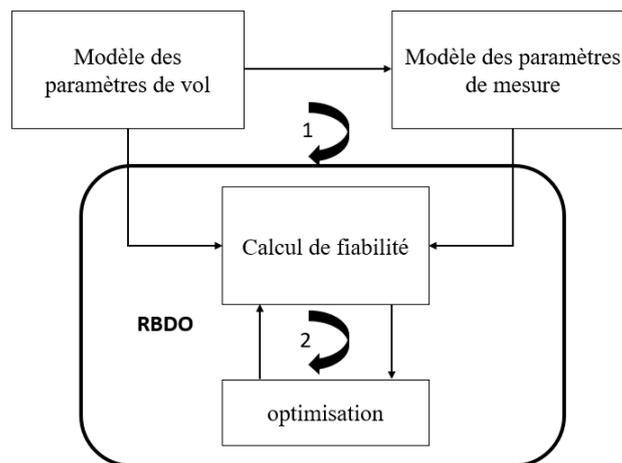


Figure 6.3 : Processus de l'optimisation Fabiliste de mesure FTIR - Drone

4. Formalisation de l'Optimisation Basée sur la Fiabilité pour l'Analyse de Signal Infrarouge

En contraste avec l'optimisation déterministe, l'objectif de l'optimisation basée sur la fiabilité pour l'analyse de signal infrarouge (RBISAO) est de trouver la solution optimale qui maintient la fonction de performance (le seuil de défaillance) suffisamment distante du point de conception.

4.1 Présentation générale de la méthode RBDO ;

La présentation de la RBDO peut être exprimée comme suit, considérons x comme le vecteur contenant les variables déterministes liées à la conception, et y comme le vecteur contenant les variables aléatoires. La fonction f représente l'objectif à atteindre, tel que le coût, la masse, etc.

Pr[:] désigne l'opérateur de probabilité, tandis que PiT correspond au niveau de fiabilité visé. Gi(x,y) représente la fonction de performance, basée sur l'état limite, et hj(x) représente la contrainte déterministe.

Il existe deux types d'algorithmes qui permettent de la mettre en œuvre :

- Les algorithmes stochastiques basés sur des simulations aléatoires, comme par exemple les algorithmes génétiques.
- Les algorithmes de programmation non-linéaire (NLP) basés sur le calcul des gradients de la fonction objectif et des contraintes mécaniques.

Selon [116], on peut aussi classifier les différentes approches de RBDO dans trois catégories principales comme illustré à la figure 6.4 :

- Méthodes mono-niveau (Mono-level Approches MLA)
- Méthodes à deux-niveaux (Double-level Approaches DLA)
- Méthodes séquentielles découplées (Sequential Decoupled Approaches SDA)

Le temps de calcul nécessaire pour obtenir l'indice de fiabilité est considérable. Afin d'améliorer les performances numériques, Kharmanda et ses collègues ont développé une méthode efficace connue sous le nom de méthode hybride (Hybrid method HM) [47]. Cette méthode vise à résoudre simultanément les problèmes de fiabilité et d'optimisation. La solution est obtenue dans un nouvel espace appelé espace hybride de conception (Hybrid Design Space HDS), qui comprend à la fois des variables déterministes et aléatoires.

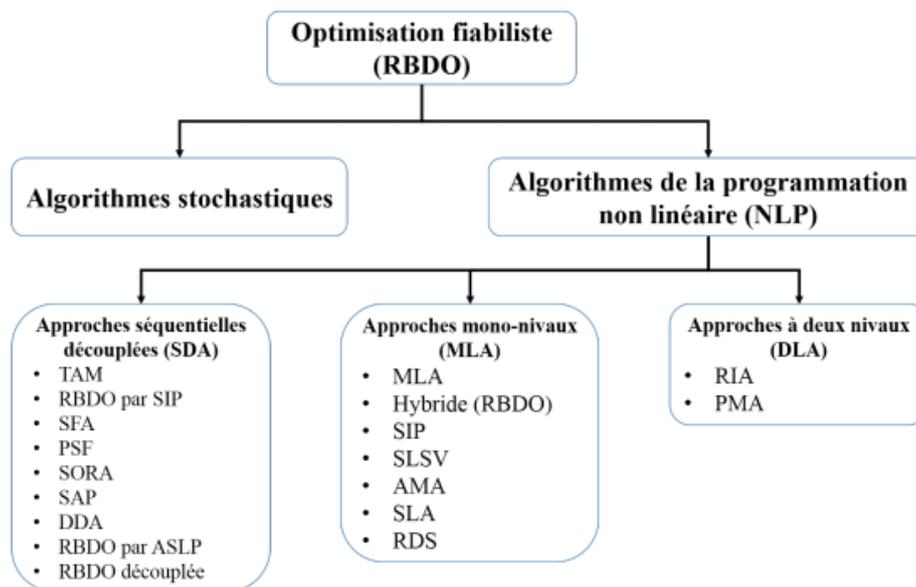


Figure 6.4 : Classification des différentes méthodes de la RBDO

Cette méthode a réduit énormément le temps de calcul mais le problème RBDO devient plus complexe que le problème DDO. Dans le développement de notre approche nous avons utilisé la méthode hybride HM pour atténuer la complexité du problème.

4.2 Approche hybride (HM)

Dans cette approche, il est nécessaire de traiter simultanément les problèmes de fiabilité et d'optimisation dans un espace de conception hybride, comprenant à la fois des variables déterministes et aléatoires. Le principe fondamental de cette approche consiste à élaborer une nouvelle fonction objective qui établit un lien entre les deux problèmes de la formulation classique. Ainsi, cette fonction peut être exprimée de la manière qui suit :

$$F(x;y) = f(x):d_{\beta}(x;y)$$

Considérant $f(x)$ comme la fonction objectif standard et $d_{\beta}(x;y)$ comme la distance dans l'espace hybride de conception entre le point optimal et le point de conception, étant donné une distribution normale des variables aléatoires, nous pouvons représenter visuellement les paramètres β sous forme d'ellipses pour décrire l'incertitude dans le système. Il est crucial d'identifier deux éléments clés : la solution optimale, P_{x^*} , et le point de défaillance, P_{y^*} .

Ce dernier est déterminé par l'intersection de la courbe d'état limite $G(x;y) = 0$ et de l'indice de fiabilité cible $d_{\beta} = \beta_t$. Ainsi, la reformulation de cette approche permet de mieux appréhender et modéliser les incertitudes qui peuvent influencer les performances et la stabilité du système. RBDO par l'approche hybride est écrite comme suit :

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & F(x,y) = f(x).d_{\beta}(x,y) \\ \text{s.t.} \quad & G(x,y) \leq 0 \\ & g_k(x,y) \leq 0, k = 1, \dots, K \\ & d_{\beta}(x,y) \geq \beta_t \end{aligned}$$

L'algorithme de la formulation basée sur l'approche hybride appliqué à est illustré dans la figure 6.5.

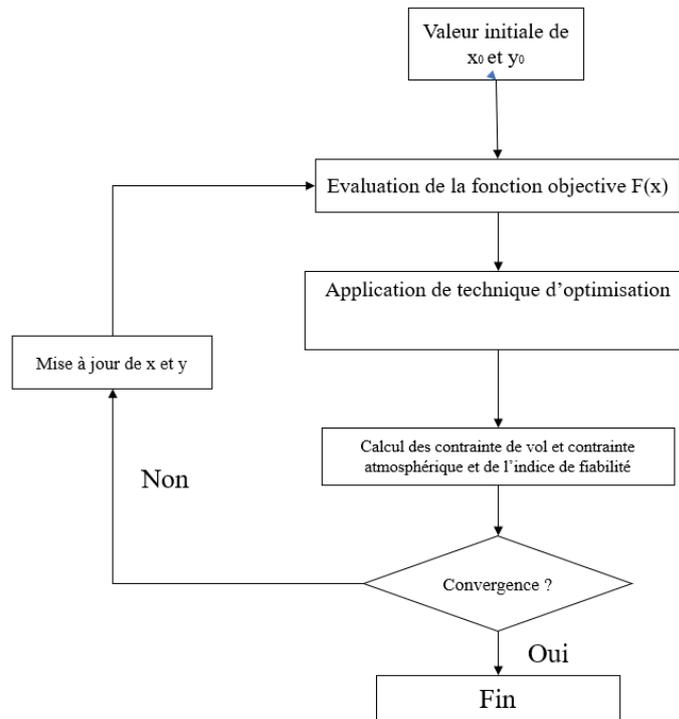


Figure 6.5 : Organigramme de l'approche hybride

5. Méthode proposée

5.1. Énoncé du problème

L'objectif principal de cette étude est d'optimiser le système infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) basé sur un drone en utilisant l'optimisation de la conception basée sur la fiabilité (RBDO) pour prendre en compte les incertitudes de la spectroscopie infrarouge (IR). Le problème d'optimisation vise à maximiser la performance du système FTIR dans la détection et l'analyse des substances cible, tout en garantissant que le système fonctionne de manière fiable dans diverses sources d'incertitude.

5.2. Équations de base :

Selon la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR), I , l'intensité du laser, peut être représentée comme une fonction de E , l'énergie des photons du laser, et I est l'intensité du rayonnement (énergie par unité de surface par unité de temps), R est la distance de la source

de rayonnement. Pour illustrer la loi de l'inverse du carré, qui affirme que l'intensité du laser diminue quadratiquement avec l'augmentation de la distance :

$$I = \frac{E}{4\pi R^2} \quad (1)$$

Sur la base de la vitesse de la lumière (c), de la longueur du trajet du laser (L) et de la transmittance du milieu (T), nous pouvons déterminer l'énergie des photons E en utilisant la constante de Planck (h) et le nombre d'ondes du laser (ν) (équation 2) :

$$E = h\nu \quad (2)$$

En utilisant les coordonnées x , y et z du laser et l'indice de réfraction N du milieu (équation 3), nous pouvons calculer la longueur de trajet L

$$L = 2 \sqrt{x(1)^2 + x(2)^2 + \left(\frac{x(3)}{N}\right)^2} \quad (3)$$

Cette équation calcule la longueur du trajet du faisceau laser en fonction des coordonnées de la source laser ($x(1)$, $x(2)$ et $x(3)$) et de l'indice de réfraction du milieu (N). L'indice de réfraction N du milieu affecte la direction et la vitesse de propagation du faisceau laser, pas directement sa longueur de trajet. Si le faisceau laser se déplace à travers différents milieux ayant des indices de réfraction différents, alors le chemin effectif que le faisceau prendra sera différent de la ligne droite entre le point de départ et le point d'arrivée.

Il prend en compte la distance parcourue dans les directions x , y et z , ainsi que l'effet de l'indice de réfraction sur la longueur du trajet. Le facteur de réflexion R est fourni comme paramètre d'entrée dans le code. Il représente la fraction de la lumière incidente qui est réfléchiée par l'échantillon et dépend de divers facteurs, tels que les propriétés optiques de l'échantillon et l'angle d'incidence. Le problème d'optimisation de cette étude vise à trouver les valeurs optimales des variables de conception x qui maximisent l'intensité du laser, sous réserve de contraintes sur les variables de conception, l'altitude, la vitesse, l'orientation, la configuration du moteur FTIR et les conditions environnementales. Ces contraintes sont mises en œuvre sous forme de contraintes non linéaires dans le problème d'optimisation et sont définies par des limites inférieures et supérieures sur les variables de conception et les autres paramètres.

5.3. Approche stochastique : théorie de Monté Carlo ;

La méthode de Monte Carlo (MC) offre une approche systématique pour l'analyse des systèmes déterministes qui intègrent des paramètres incertains représentés par des variables aléatoires. Le principal avantage de cette méthode réside dans sa large applicabilité, puisqu'elle

peut théoriquement être appliquée à un large éventail de problèmes, y compris ceux impliquant des espaces incertains linéaires, non linéaires et de haute dimension [117].

La méthode MC produit des résultats statistiquement exacts, ce qui signifie qu'ils possèdent un certain niveau d'incertitude qui diminue à mesure que le nombre d'itérations augmente. L'obtention d'une précision raisonnable nécessite généralement un grand nombre d'itérations, ce qui rend la méthode MC très coûteuse sur le plan informatique. Cette technique génère des échantillons aléatoires pour tous les paramètres incertains, en tenant compte de leurs distributions de probabilité et de leurs corrélations. Pour chaque échantillon, un ensemble de paramètres spécifique est obtenu et un calcul déterministe est effectué à l'aide de modèles analytiques ou numériques bien définis.

Dans cette étude, la technique classique de MC est utilisée comme méthode de référence pour vérifier la précision et l'efficacité de l'approche du chaos polynomial généralisé. L'approche Monte Carlo standard considère les fonctions de la forme suivante : $Y = M(X)$

où M représente le modèle considéré, X est un vecteur de paramètres d'entrée incertains modélisés par un vecteur aléatoire $X = [X_1, X_2, \dots, X_n]^T$ et Y représente un vecteur de sorties estimées qui sera un vecteur aléatoire.

6. Optimisation fiabiliste basée sur la méthode HM de la mesure réalisée par un spectromètre FTIR monté sur un drone

6.1. Description de l'étude de cas :

Les défis associés à ce problème sont les suivants : Les incertitudes de la spectroscopie IR : La dynamique du drone, comme l'altitude, la vitesse, l'orientation, la capacité de la charge utile et la consommation d'énergie, doit être prise en compte lors de l'optimisation du système FTIR, car elle peut influencer de manière significative les performances et la faisabilité de la conception.

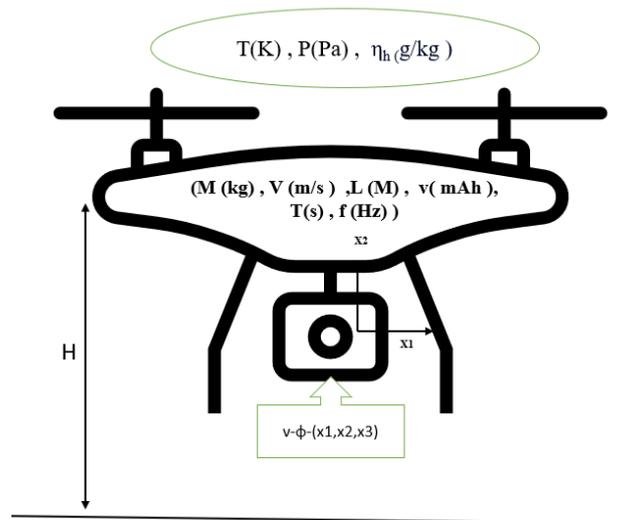


Figure 6.6 : Source d'incertitude dans l'environnement du capteur IR

La combinaison des incertitudes de la spectroscopie IR, de la dynamique des drones et des contraintes se traduit par un problème d'optimisation complexe et multidimensionnel qui implique des contraintes multiples et des critères de fiabilité une illustration de ces paramètres est montré sur la figure 6.6. La résolution de ce problème nécessite des techniques d'optimisation avancées et des algorithmes efficaces capables de gérer la complexité inhérente et les compromis impliqués.

6.2. Méthode probabiliste :

Dans cette section, nous mettons en œuvre et intégrons la méthode stochastique abordée dans le chapitre 1 dans la simulation analytique décrite précédemment. L'objectif est d'améliorer les performances et la robustesse des systèmes FTIR - UAV couplés qui fonctionnent en présence de paramètres incertains inévitables liés simultanément aux propriétés du milieu et conditions de fonctionnement. Le tableau 6.1 illustre les variables de conception sujet d'incertitude, le tableau 6.2 comporte les contraintes de conceptions.

Catégorie	Paramètres	Limite inférieure	Limite supérieure	Valeur initiale
Instrumental	Résolution spectrale	0.001	0.1	0.02
Instrumental	Gamme spectrale	500	2000	1500
Télédétection	Altitude de la source laser	50	200	0
Télédétection	Vitesse de la source laser	5	20	0
Télédétection	Orientation de la source laser	-10	10	0
Environnement	Température	-20°C	50°C	11
Environnement	Pression	960 hPa	1040 hPa	980
Environnement	Humidité	0%	100%	20
Basé sur les drones	Vibrations	20 hz	4000	100
Télédétection	Bruit	0 dB	60 dB	15
Télédétection	Limitations du temps de vol	10 min	30 minutes	15
Télédétection	Capacité de charge utile	0,5 kg	5 kg	0,8

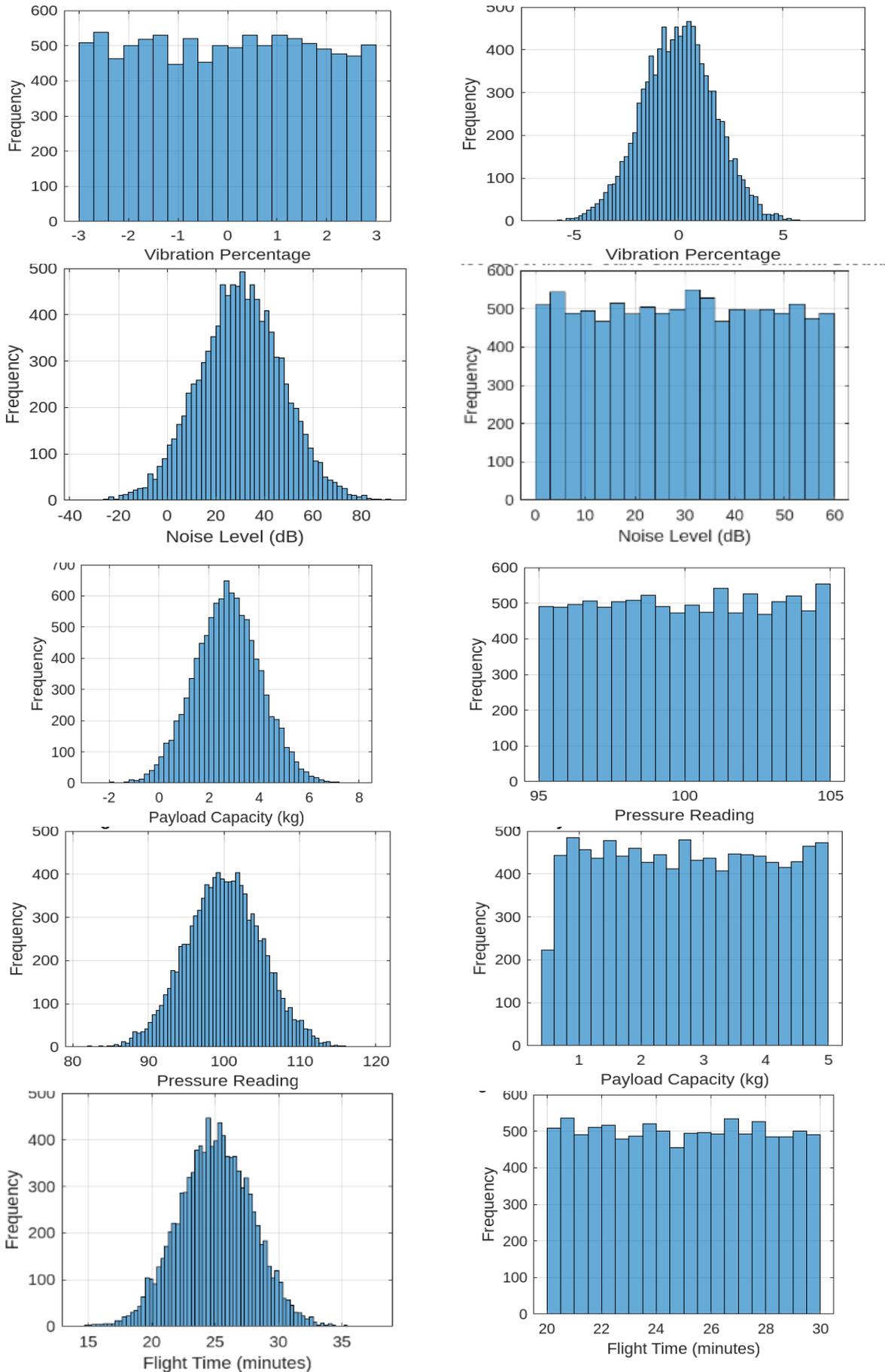
Tableau 6.1: Variables de conception

Contrainte	Limite inférieure	Limite supérieure
Longueur du trajet L	0	50
L'énergie des photons E	0	1e-17 Joules
Altitude de la source laser	50 (unités)	200 (unités)
Vitesse de la source laser	5 (unités)	20 (unités)
Orientation de la source laser	-10 (unités)	10 (unités)
Résolution spectrale	0,001 (unités)	0,1 (unités)
Gamme spectrale	500 (unités)	2000 (unités)

Tableau 6.2: Contraintes de conception

Dans notre problème, notre objectif est d'optimiser l'utilisation du spectromètre FTIR monté sur un drone. Nous souhaitons étudier l'effet des incertitudes sur les mesures réalisées par le spectromètre.

Pour ce faire, nous utilisons la méthode MC (Monte-Carlo) pour générer une grille de valeurs numériques représentant les paramètres incertains illustré sur figure 6.7. Ensuite, nous effectuons des calculs pour chaque valeur de la grille afin d'analyser la quantité d'intérêt du spectromètre FTIR. Cette analyse est répétée pour un total de 1000 simulations, ce qui nous permet d'obtenir des résultats fiables et de prendre en compte les variations causées par les incertitudes.



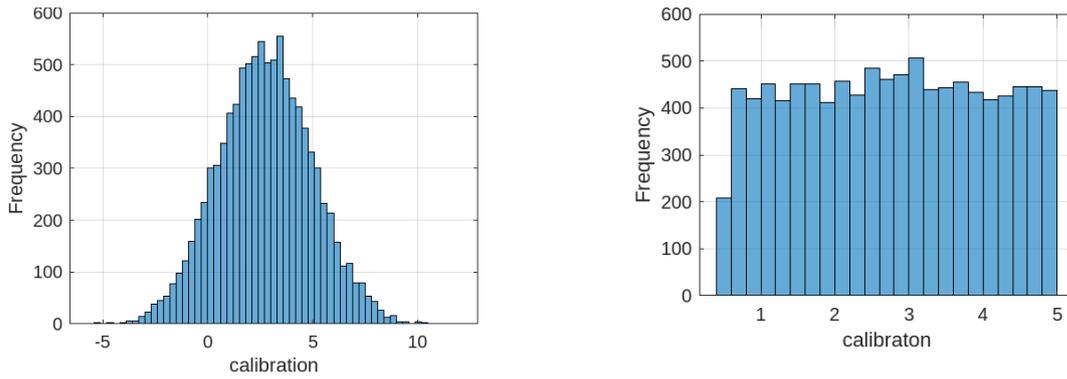


Figure 6.7 : Distribution de probabilité des paramètres de conception

Dans cette partie, deux exemples numériques sont examinés : l'application à l'intensité S_{if}^g d'une raie d'absorption vibration-rotation en phase gazeuse et la dépendance en température des largeurs de raies γ (T). De nombreuses hypothèses sont utilisées dans la première application pour simplifier la formule définissant l'intensité. Ensuite, une RBDO est effectuée pour déterminer les circonstances et la valeur de mesure appropriées. Dans la seconde application, le RHM est directement appliqué à la largeur de raie, car le modèle théorique de Robert et Bonamy fournit une forme plus simple de la fonction.

La liste des constantes physiques est donnée dans le tableau 6.3 :

Certains paramètres	Valeur
Indice de réfraction (N)	1.003
Réflexion de l'échantillon (R)	0.5
Vitesse de la lumière (c)	299792458
Constante de Planck (h) :	6.62607015e-34
Vitesse de la lumière	299792458
Constante d'Avogadro	6.02214129 × 10 ²³
Constante de Boltzmann	1.38064880 × 10 ⁻²³
Constante de Planck	6.62606957 × 10 ⁻³⁴
Constante de Loschmidt	2.6867805 × 10 ²⁵

Tableau 6.3: Contraintes de conception

6.3. Mise en œuvre de la méthode RBDO

Les métamodèles sont largement adoptés en ingénierie pour analyser des systèmes complexes implémentés par des codes informatiques. Ils permettent de créer des approximations du code d'analyse et de décrire la relation fonctionnelle entre les variables de conception et les réponses correspondantes. Cette approche permet de réduire les coûts de calcul.

Il existe une variété de méta-modèles dans la littérature scientifique. Ces méta-modèles peuvent être classés en deux catégories distinctes :

1. Les méta-modèles paramétriques, qui nécessitent la sélection manuelle des paramètres internes par l'utilisateur ou de manière automatique en utilisant une méthodologie dédiée. Pour certains méta-modèles paramétriques, le choix précis de ces paramètres est essentiel et ne peut être négligé. Ces techniques, spécifiques au type de méta-modèles utilisés, requièrent des outils adaptés tels qu'un algorithme d'optimisation. La phase de sélection des paramètres peut représenter la majeure partie du coût associé à la construction du méta-modèle. Parmi les méta-modèles paramétriques, on trouve le krigeage, les fonctions de base radiales (RBF) et la régression à vecteur de support (SVR).
2. Les méta-modèles non-paramétriques, qui, contrairement aux précédents, ne nécessitent pas de déterminer des paramètres internes. Historiquement, ce sont ces modèles qui ont été les premiers à être utilisés, tels que la régression linéaire, quadratique et polynomiale.

Les méta-modèles offrent une approche efficace pour obtenir des approximations précises des systèmes complexes, en réduisant considérablement le temps de calcul nécessaire.

6.3.1 Mise en œuvre du méta modèle par Krigeage

Pour accélérer le processus d'optimisation, un modèle de substitution est généré à l'aide d'un plan d'expériences (DoE) et ajusté à l'aide d'un processus de régression gaussienne (krigeage). Le modèle de substitution est ensuite utilisé pour prédire l'intensité du laser dans l'espace de conception, ce qui permet une exploration efficace de l'espace de conception et l'identification des variables de conception optimales qui maximisent l'intensité du laser. Nous utilisons le krigeage, une technique d'interpolation statistique, pour modéliser le coefficient d'absorption d'un échantillon dans la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR). Le modèle de krigeage se compose de plusieurs équations clés [118]:

La fonction moyenne $m(x)$:

$$m(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n \quad (4)$$

où $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ sont les coefficients de la fonction moyenne, et x_1, x_2, \dots, x_n sont les variables d'entrée (variables de conception) du modèle. La fonction de covariance ou noyau $C(x, x')$: La fonction de covariance ou noyau $C(x, x')$ caractérise la corrélation spatiale entre les coefficients d'absorption en deux points différents x et x' . [119] Elle est définie comme suit :

$$C(x, x') = \sigma^2 f(\theta \| x - x' \|) \quad (5)$$

où σ^2 est la variance du terme d'erreur, f est une fonction de corrélation qui détermine la forme de la fonction de covariance, θ est un paramètre qui contrôle l'étendue de l'influence des points proches, et x et x' sont les variables d'entrée (variables de conception) du modèle.

La fonction de prédiction $y^{\wedge}(x)$ à un point x^* non testé fournit une estimation du coefficient d'absorption. Elle est donnée par :

$$y^{\wedge}(x^*) = m(x^*) + \sum_{i=1}^N \lambda_i C(x_i, x^*) \quad (6)$$

où N est le nombre de points de données disponibles, x_i sont les variables d'entrée (variables de conception) des points de données, et λ_i sont les poids de krigeage qui sont déterminés par l'optimisation de la fonction de vraisemblance maximale.

La variance de krigeage à un point non testé x^* quantifie l'incertitude du coefficient d'absorption prédit. Elle est donnée par :

$$\sigma_{kr}^2(x^*) = C(0) - \sum_{i=1}^N \lambda_i C(x_i, x^*) \quad (7)$$

où $C(0)$ est la valeur de la fonction de covariance au décalage zéro, qui représente la variance des données sous-jacentes, et λ_i sont les poids de krigeage. La loi de Beer-Lambert relie l'intensité du laser au coefficient d'absorption et à l'épaisseur de l'échantillon dans la spectroscopie FTIR. Elle est donnée par

$$I(x) = I_0(x) \cdot 10^{-\epsilon(x) \cdot d} \quad (8)$$

$I(x)$ l'intensité du laser, $I_0(x)$ l'intensité initiale du laser, $\epsilon(x)$ le coefficient d'absorption de l'échantillon et d l'épaisseur de l'échantillon.

6.3.2 Mesure FTIR amélioré par RBDO

Le problème de l'optimisation de la conception basée sur la fiabilité (RBDO) est résolu en utilisant une combinaison de modèles de substitution, d'algorithmes d'optimisation et de méthodes d'analyse de la fiabilité. Le modèle de krigeage est utilisé pour explorer efficacement l'espace de conception, en tenant compte des incertitudes des variables d'entrée, tandis que les algorithmes d'optimisation recherchent les variables de conception optimales qui maximisent l'intensité du laser et satisfont les contraintes probabilistes. La figure 6.8 montre la convergence vers une solution.

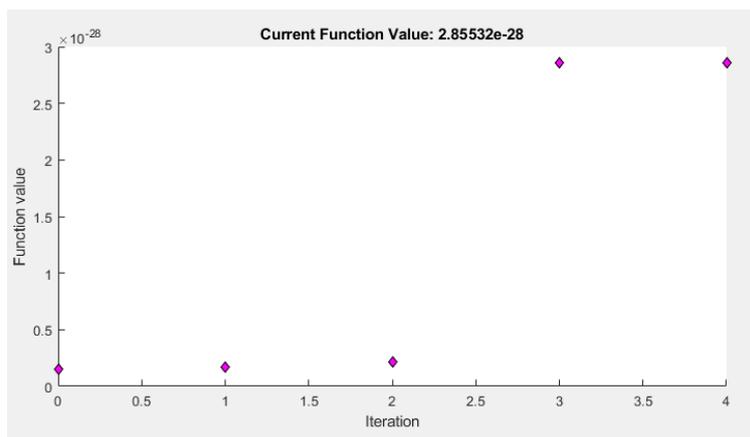


Figure 6.8 : Historique de la convergence des fonctions

Analyse des résultats pour une fenêtre entre 400 et 1500 cm⁻¹

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Valeur de la fonction objective
Uniforme	0.003	1500	2.855e-28
Normal	0.002	1700	6.1579e-28
HITRAN	-	-	2.841E-28

Tableau 6.4: Résultats pour la molécule CO₂

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Intensité optimale
Uniforme	0.02	2200	2.9011e-28
Normal	0.02	2400	6.1579e-28
HITRAN	-	-	2.697E-28

Tableau 6.5: Résultats pour la molécule NO₂

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Intensité optimale
Uniforme	0.02	220	2.1118e-28
Normal	0.02	2400	9.8898e-28
HITRAN	-	500	2.910E-28

Tableau 6.6: Résultats pour la molécule SO₂

Analyse des résultats pour une fenêtre entre 1500 et 2500 cm⁻¹ ;

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Valeur de la fonction objective
Uniforme	0.003	2000	2.485e-29
Normal	0.002	2100	4.579e-29
HITRAN	-	-	2.571E-29

Tableau 6.7: Résultats pour la molécule CO₂

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Intensité optimale
Uniforme	0.02	2200	1.678e-28
Normal	0.02	2400	5.247e-28
HITRAN	-	-	1.488e-28

Tableau 6.8: Résultats pour la molécule NO₂

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Intensité optimale
Uniforme	0.02	220	2.457e-28
Normal	0.02	2400	4.874e-28
HITRAN	-	500	2.910E-28

Tableau 6.9: Résultats pour la molécule SO₂

Analyse des résultats pour une fenêtre entre 2500 et 4000 cm⁻¹ ;

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Valeur de la fonction objective
Uniforme	0.003	1500	2.855e-28
Normal	0.002	1700	6.1579e-28
HITRAN	-	-	2.841E-28

Tableau 6.10: Résultats pour la molécule CO₂

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Intensité optimale
Uniforme	0.02	2200	2.9011e-28
Normal	0.02	2400	6.1579e-28
HITRAN	-	-	2.4797e-28

Tableau 6.11: Résultats pour la molécule NO₂

Distribution	Résolution spectrale	Gamme spectrale	Intensité optimale
Uniforme	0.02	220	2.723e-28
Normal	0.02	2400	9.584e-28
HITRAN	-	500	2.620E-28

Tableau 6.12: Résultats pour la molécule SO₂

En comparant les distributions uniformes et normales, il est essentiel d'évaluer leur capacité à représenter fidèlement les valeurs d'intensité, en utilisant la base de données HITRAN comme référence. L'analyse est structurée autour de trois gammes spectrales spécifiques. La première gamme, de 400 à 1500 cm^{-1} , dont les résultats sont détaillés dans les tableaux 6.4 , 6.5 et 6.6. La deuxième gamme, de 1500 à 2500 cm^{-1} , est exposée dans les tableaux 6.7 , 6.8 et 6.9. Enfin, la troisième gamme, de 2500 à 4000 cm^{-1} , dont les résultats sont présentés dans les tableaux 6.10 , 6.11 et 6.12. Cette organisation permet d'aborder l'analyse des échantillons sous différents aspects spectraux, facilitant ainsi l'interprétation des données recueillies. Voici quelques points cruciaux pour notre analyse :

La précision de chaque distribution peut être évaluée en comparant sa valeur d'intensité à la référence HITRAN. Les distributions uniformes et normales produisent toutes deux des valeurs d'intensité proches de la valeur HITRAN, la distribution uniforme étant légèrement plus précise.

Ce phénomène peut être attribué aux caractéristiques inhérentes à la distribution uniforme. Contrairement à la distribution normale, la distribution uniforme n'accorde pas plus de poids à une plage spécifique de valeurs dans ses limites définies. Cette caractéristique aurait pu conduire à un système plus robuste et plus résistant lors de la gestion des incertitudes dans les paramètres du système FTIR monté sur drone.

Un autre facteur pourrait être la nature unique des paramètres de notre système FTIR. Si ces paramètres se répartissent naturellement de manière uniforme plutôt que normale, la répartition uniforme offrirait intrinsèquement une meilleure adéquation et, par conséquent, des performances supérieures.

Ces interprétations sont toutefois préliminaires et d'autres études sont nécessaires pour comprendre pleinement les mécanismes sous-jacents. Les recherches futures pourraient se concentrer sur l'examen des propriétés spécifiques des paramètres du système FTIR et de leurs interactions avec différentes distributions d'incertitude. Il pourrait en résulter des modèles plus sophistiqués et des performances accrues dans les applications réelles.

Un autre aspect à prendre en compte est la robustesse des distributions. La distribution uniforme offre généralement une représentation plus robuste dans ce contexte, car elle attribue une probabilité égale à toutes les valeurs comprises dans l'intervalle spécifié.

Conclusion :

Ce travail a un impact significatif sur la spectroscopie infrarouge (IR) en fournissant une approche pour évaluer et gérer l'incertitude associée aux paramètres du système FTIR monté sur drone. La précision et la fiabilité des mesures spectroscopiques IR dépendent en grande partie de la qualité des données acquises et des incertitudes associées à ces mesures. En utilisant des distributions d'incertitude, telles que les distributions uniformes et normales, pour modéliser les variations des paramètres du système FTIR, ce travail offre un cadre pour quantifier et prendre en compte ces incertitudes.

L'utilisation de distributions d'incertitude permet une évaluation plus réaliste des performances du système FTIR et des mesures spectroscopiques IR. En prenant en compte l'incertitude, il devient possible de mieux interpréter les résultats expérimentaux, de prendre des décisions éclairées et d'améliorer la précision des analyses spectrales.

De plus, ce travail ouvre la voie à de futures recherches sur l'optimisation des performances du système FTIR monté sur drone en utilisant des modèles plus sophistiqués de propagation des incertitudes. En explorant des méthodes telles que le krigeage ou d'autres modèles de régression, il est possible d'améliorer davantage la précision et la robustesse des mesures spectroscopiques IR.

En fin de compte, l'impact de ce travail sur la spectroscopie IR réside dans son potentiel à améliorer la précision, la fiabilité et l'interprétation des données acquises par les systèmes FTIR montés sur drone. Cela ouvre de nouvelles possibilités pour la surveillance environnementale, la détection de polluants, l'analyse des gaz à effet de serre et d'autres applications de spectroscopie IR qui nécessitent des mesures précises et une gestion rigoureuse des incertitudes.

Conclusion Générales et perspectives :

L'objectif principale de cette thèse était de prendre en compte les incertitudes inhérentes aux paramètres d'entrée en adoptant des approches probabilistes pour la propagation d'incertitudes, avant de cibler la détermination de la méthodologie optimale pour l'optimisation fiabiliste dans le contexte spécifique des systèmes intégrés de drones équipés de spectromètres infrarouges à transformée de Fourier (FTIR). En parallèle, ce travail s'est attelé à contourner la complexité inhérente à l'intégration et à l'optimisation de ces technologies par l'application des méthodes de méta-modélisation. Réalisée sous une cotutelle, cette recherche a bénéficié de la collaboration productive entre le Laboratoire de recherche de Mécanique, Modélisation et Production (LA2MP) de l'Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax (ENIS) et le Laboratoire de Mécanique de Normandie (LMN) de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen (INSA Rouen).

Cette thèse s'est articulée autour de deux axes de recherche fondamentaux : d'une part, l'élaboration et l'optimisation du drone, et d'autre part, l'examen approfondi des variables d'incertitude intrinsèques à la spectrométrie FTIR. L'apogée de ce travail réside dans l'intégration synergique de ces axes via l'application de la (RBDO) visant à affiner la performance des dispositifs FTIR embarqués sur ces vecteurs.

Le premier segment de l'étude a été consacré à l'augmentation de la performance opérationnelle des drones, avec une emphase particulière sur l'innovation d'une hélice à profil incurvé de dimensions 10 * 4,7 pouces. L'étude, s'appuyant sur la dynamique des fluides numérique (CFD), a évalué l'efficacité, la stabilité et l'impact sur l'autonomie de la batterie de cette conception d'hélice. Les résultats ont démontré une optimisation de l'efficacité aérodynamique et une réduction de la consommation énergétique, entraînant une prolongation de l'autonomie de vol. De plus, cette amélioration de la stabilité en vol favorise un contrôle plus précis du drone.

Le second segment a abordé les défis posés par les incertitudes associées à l'utilisation de la spectrométrie FTIR. Dans cette perspective, une approche novatrice basée sur la théorie des groupes a été élaborée afin d'effectuer une analyse spectrale du dioxyde de carbone (CO₂) dans divers environnements condensés, visant à mieux comprendre les incertitudes liées aux différentes conditions climatiques. Ce procédé a offert un éclairage précis sur l'influence de divers paramètres sur la fiabilité des mesures spectroscopiques.

La fusion de ces deux aspects à travers la RBDO à été abordé dans le dernier chapitre afin de renforcer la fiabilité et l'exactitude des mesures obtenues par les dispositifs FTIR montés sur drones. Cette démarche a été validée par comparaison avec les données expérimentales élaborées par la base de données HITRAN.

En résumé, ce travail a établi un pont entre la technologie des drones et la spectrométrie FTIR, soulignant les défis et les opportunités inhérents à leur intégration. L'exploitation de la RBDO a ouvert des perspectives novatrices pour le perfectionnement des systèmes FTIR embarqués, promettant des avancées substantielles dans le domaine de la surveillance environnementale et au-delà.

Malgré ces avancées, il faut souligner que des défis demeurent. La complexité du couplage de ces deux systèmes, l'optimisation de leur performance dans des conditions réelles et l'automatisation complète du système en tenant compte des facteurs environnementaux et de sécurité, sont autant de problématiques qui nécessitent des recherches futures.

En somme, cette thèse ouvre de nouveaux horizons pour l'application de cette méthode dans la conception de systèmes intégrés et stimule l'intérêt pour des recherches futures dans ce domaine. De nombreuses perspectives sont envisageables à la suite de ce travail :

- Optimisation multi-objectifs approfondie : Poursuivre l'exploration de l'optimisation multi-objective pour traiter des problèmes de conception encore plus complexes.
- Explorer l'utilisation de l'intelligence artificielle (IA) et de l'apprentissage automatique pour l'interprétation automatique des données FTIR collectées par les drones.
- Développement de nouvelles méthodologies pour la calibration en temps réel du spectromètre FTIR durant le vol.

Recueil des publications

Nom du doctorant : mohamed abdessamia chakchouk

Numéro d'inscription : 2019 –GM-ENIS-0302

Article dans un journal scientifique :

- The impact of curved-tip propeller geometry on hovering drone performance for air quality monitoring

Mohamed Abdessamia Chakchouk ; Abdelkhalak El Hami ; Pierre Richard Dahoo ;
Azzedine Lakhlifi ; Wajih Gafsi ; Mohamed Haddar

- DOI: [10.1177/16878132231206330](https://doi.org/10.1177/16878132231206330)
- IR spectroscopic observation windows and analysis for environmental issues: application to CO₂
Mohamed Abdessamia Chakchouk ; Abdelkhalak El Hami ; Pierre Richard Dahoo ;
Azzedine Lakhlifi ; Wajih Gafsi ;
- DOI: [10.1140/epid/s10053-023-00761-y](https://doi.org/10.1140/epid/s10053-023-00761-y)

Chapitre dans un livre scientifique :

- Detailed Specification for an Intelligent Mobile Sensor for Air Quality Monitoring Based on a Risk and Functional Analysis

Mohamed Abdessamia Chakchouk ; Abdelkhalak El Hami ; Pierre Richard Dahoo ;
Azzedine Lakhlifi ; Wajih Gafsi ; Mohamed Haddar

- Design Discussion of a Mobile and Intelligent Infrared Detector for the Measurement of the Air Quality Index

Mohamed Abdessamia Chakchouk ; Abdelkhalak El Hami ; Pierre Richard Dahoo ;
Azzedine Lakhlifi ; Wajih Gafsi ; Mohamed Haddar

Références

- [1] A. Mahieux, S. Berkenbosch, et R. Clairquin, « In-flight performance and calibration of SPICAV SOIR onboard Venus Express », *Appl. Opt.*, vol. 47, n° 13, p. 2252-2265, 2008, doi: 10.1364/AO.47.002252.
- [2] C. D. Lopes, P. H. Limirio, V. R. Novais, et P. Dechichi, « Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) application chemical characterization of enamel, dentin and bone », *Appl. Spectrosc. Rev.*, vol. 53, p. 747-769, 2018.
- [3] M. Meftah, L. Damé, et P. Keckhut, « UVSQ-SAT, a pathfinder cubesat mission for observing essential climate variables », *Remote Sens.*, vol. 12, n° 1, p. 92, 2019, doi: 10.3390/rs12010092.
- [4] P. R. Dahoo, R. Puig, A. Lakhlifi, C. Meis, et J. D. Gale, « Simulating relaxation channels of CO₂ in clathrate nanocages », présenté à Journal of Physics: Conference Series, Institute of Physics Publishing, sept. 2016. doi: 10.1088/1742-6596/738/1/012072.
- [5] N. Sundaraganesan, S. Ilakiamani, H. Saleem, P. M. Wojciechowski, et D. Michalska, « FT-Raman and FT-IR spectra, vibrational assignments and density functional studies of 5-bromo-2-nitropyridine », *Spectrochim. Acta - Part Mol. Biomol. Spectrosc.*, vol. 61, n° 13-14, p. 2995-3001, oct. 2005, doi: 10.1016/j.saa.2004.11.016.
- [6] D. Pierre-Richard, Pougnet Philippe, et El Hami Abdelkhalak, *A Nanometer-scale Defect Detection Using Polarized Light*, vol. 2. Wiley-ISTE, 2016.
- [7] Abdelkhalak El Hami, Mohamed Haddar, et Mohamed Abdessamia Chakchouk, « La fiabilité appliqué à la conception du dispositifs spectromètre mobile I ; optimisation des paramètres de vols », *Incert. Fiabilité Systèmes Multiphysiques*, vol. 5, n° 1, janv. 2022, doi: 10.21494/ISTE.OP.2022.0780.
- [8] D. Pierre-Richard, Pougnet Philippe, et el Hami Abdelkhalak, *Applications et métrologie à l'échelle du nanomètre 2 : Systèmes de mesure, ingénierie quantique et méthode RBDO*. Wiley-ISTE, 2021.
- [9] K. B. Beć, J. Grabska, et C. W. Huck, « In silico NIR spectroscopy – A review. Molecular fingerprint, interpretation of calibration models, understanding of matrix effects and instrumental difference », *Spectrochim. Acta - Part Mol. Biomol. Spectrosc.*, vol. 279, oct. 2022, doi: 10.1016/j.saa.2022.121438.
- [10] A. Lakhlifi, H. Chabbi, P. R. Dahoo, et J. L. Teffo, « A theoretical study of CO₂ and N₂O molecules trapped in an argon matrix: Vibrational energies, and transition moments for low-lying levels and IR bar spectra », *Eur. Phys. J. - At. Mol. Opt. Plasma Phys.*, vol. 12, n° 3, p. 435-448, nov. 2000, doi: 10.1007/s100530070005.
- [11] R. I. Crocker, J. A. Maslanik, J. J. Adler, S. E. Palo, U. C. Herzfeld, et W. J. Emery, « A sensor package for ice surface observations using small unmanned aircraft systems »,

- IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 50, n° 4, p. 1033-1047, avr. 2012, doi: 10.1109/TGRS.2011.2167339.
- [12] E. Dartois et F. Langlet, « Ethane clathrate hydrate infrared signatures for solar system remote sensing », mars 2021, doi: 10.1016/j.icarus.2020.114255.
- [13] J. A. Engel-Cox, R. M. Hoff, et A. D. J. Haymet, « Recommendations on the Use of Satellite Remote-Sensing Data for Urban Air Quality », *J. Air Waste Manag. Assoc.*, vol. 54, n° 11, p. 1360-1371, nov. 2004, doi: 10.1080/10473289.2004.10471005.
- [14] A. Lakhlifi, P. R. Dahoo, et E. Chassefière, « Potential infrared relaxation channels calculated for CO₂ clathrate hydrates " » », *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 187, p. 124-134, 2017.
- [15] C. Simpson, M. Kohl, M. Essenpreis, et M. Cope, « Near-infrared optical properties of ex vivo human skin and subcutaneous tissues measured using the Monte Carlo inversion technique », *Phys. Med. Biol.*, vol. 43, p. 2465-2478, oct. 1998, doi: 10.1088/0031-9155/43/9/003.
- [16] C. A. Andrade et C. G. D. SANTOS, « Composites à base de nanoparticules fluorescentes, procédé de préparation de tels composites, et utilisation dans des systèmes de diagnostic rapide présentant une affinité avec des molécules biologiques », EP2268571B1, 25 octobre 2017 Consulté le: 6 décembre 2023. [En ligne]. Disponible sur: <https://patents.google.com/patent/EP2268571B1/fr>
- [17] J. L. Gallo, A. F. De, S. Gill, et D. Stellick, « Système de détection équipé de capteurs », 2015.
- [18] P. Smets, D. V. Van, et D. Garrett, « Detection de collision et plans d'annulation de systemes de paiement par carte sans contact », 2005.
- [19] A. Roucou, « Spectroscopie haute résolution de spectres rotationnellement denses dédiée à la détection en phase gazeuse de molécules d'intérêt environnemental et défense », Theses, Université du Littoral Côte d'Opale, 2018. [En ligne]. Disponible sur: <https://theses.hal.science/tel-02001872>
- [20] R. Dagnelie, « Développement d'un capteur chimique de polluants atmosphériques à transduction optique et à la base de matériaux nanoporeux : application à la détection des composés carbonylés pour le contrôle de la qualité de l'air », 2009.
- [21] B. G. Lee *et al.*, « Widely tunable single-mode quantum cascade laser source for mid-infrared spectroscopy », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, p. 231101, 2007.
- [22] Y. Guo et X. Fan, « Optofluidics in BioChemical Analysis », 2012.
- [23] A. L. Harmer et G. Boisdé, « Chemical and Biochemical Sensing with Optical Fibers and Waveguides », 1996.
- [24] Y. Luo et J. Huang, « Surface modification of natural cellulose substances: toward functional materials and applications », *Sci. China Chem.*, vol. 57, p. 1672-1682, 2014.
- [25] Y. Chen, C. Zou, M. Mastalerz, S. Hu, C. Gasaway, et X. Tao, « Applications of Micro-Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) in the Geological Sciences—A Review », *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 16, n° 12, p. 30223-30250, 2015, doi: 10.3390/ijms161226227.
- [26] J. Chen, A. Hangauer, et R. Strzoda, « Modulation non linéaire de longueur d'onde en spectroscopie laser », 2010. [En ligne]. Disponible sur: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:102759593>
- [27] P.-M. Flaud, « Développement et caractérisation d'un spectromètre laser infrarouge par différence de fréquences : application à la spectroscopie infrarouge à très haute résolution », 2005.
- [28] T. E. Barchyn, C. H. Hugenholtz, et T. A. Fox, « Plume detection modeling of a drone-based natural gas leak detection system », *Elem. Sci. Anthr.*, vol. 7, 2019.

- [29] P. Nooralishahi, F. López, et X. P. Maldague, « Drone-Enabled Multimodal Platform for Inspection of Industrial Components », *IEEE Access*, vol. 10, p. 41429-41443, 2022.
- [30] R. Sato *et al.*, « Detection of gas drifting near the ground by drone hovering over: Using airflow generated by two connected quadcopters », *Sensors*, vol. 20, n° 5, p. 1397, 2020.
- [31] A. Alenda, « Analyses quantitatives en spectroscopie infrarouge : l'AG-IR (Analyses Gravimétriques et spectroscopie InfraRouge) nouvel outil d'analyse pour les espèces adsorbées », 2010.
- [32] P. lat tabara Sow, « Développement d'un spectromètre laser à cascade quantique pour des applications en spectroscopie de haute résolution et en métrologie des fréquences », 2015. [En ligne]. Disponible sur: <http://www.theses.fr/2015USPCD011/document>
- [33] T. E. L. Smith, M. J. Wooster, M. Tattaris, et D. W. T. Griffith, « Absolute accuracy and sensitivity analysis of OP-FTIR retrievals of CO₂, CH₄ and CO over concentrations representative of “clean air” and “polluted plumes” », *Atmospheric Meas. Tech.*, vol. 4, n° 1, p. 97-116, janv. 2011, doi: 10.5194/amt-4-97-2011.
- [34] D. M. MacBride, C. G. Malone, J. P. Hebb, et E. G. Cravalho, « Effect of temperature variation on FT-IR spectrometer stability », *Appl. Spectrosc.*, vol. 51, n° 1, p. 43-50, 1997.
- [35] A. Kaba, E. Yurdusevimli Metin, et O. Turan, « Thrust modelling of a target drone engine with nonlinear least – squares estimation based on series expansions », *Aircr. Eng. Aerosp. Technol.*, vol. 95, n° 1, p. 38-52, janv. 2023, doi: 10.1108/AEAT-08-2021-0236.
- [36] S. Sundaresan, S. Sunil, B. Balasingam, et K. R. Pattipati, « Fast Offline Battery Capacity Estimation Approach With Performance Bounds », in *2022 IEEE Electrical Power and Energy Conference (EPEC, 2022*, p. 188-193.
- [37] Y. Wang et Y. J. Morton, « Ionospheric total electron content and disturbance observations from space-borne coherent GNSS-R measurements », *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 60, p. 1-13, 2021.
- [38] Y. Rao, J. Cao, Z. Zeng, C. Duan, et X. Wei, « An Improved Ant Colony Algorithm for UAV Path Planning in Uncertain Environment », in *2021 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN, 2021*, p. 1-10.
- [39] W. L. Oberkampf, J. C. Helton, C. A. Joslyn, S. F. Wojtkiewicz, et S. Ferson, « Challenge problems: uncertainty in system response given uncertain parameters », *Altern. Represent. Epistem. Uncertain.*, vol. 85, n° 1, p. 11-19, 2004, doi: 10.1016/j.ress.2004.03.002.
- [40] G. Carl, T. Denis, et C. Graham, *Simulation stochastique et méthodes de Monte-Carlo / Carl Graham et Denis Talay*. in Mathématiques appliquées. Palaiseau: les Éditions de l'École polytechnique, 2011.
- [41] B. Lapeyre, E. Pardoux, et R. Sentis, *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*. in Mathématiques et Applications. Springer Berlin Heidelberg, 1997. [En ligne]. Disponible sur: <https://books.google.tn/books?id=qgIqQgAACAAJ>
- [42] D. Xiu et G. E. Karniadakis, « The Wiener-Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations », *SIAM J Sci Comput*, vol. 24, p. 619-644, 2002.
- [43] X. Li et C. C. Cheah, « A Simple Trapping and Manipulation Method of Biological Cell Using Robot-Assisted Optical Tweezers: Singular Perturbation Approach », *IEEE Trans. Ind. Electron.*, vol. 64, p. 1656-1663, 2017.
- [44] S. Ito et K. Murota, « An Algorithm for the Generalized Eigenvalue Problem for Nonsquare Matrix Pencils by Minimal Perturbation Approach », *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, vol. 37, p. 409-419, janv. 2016, doi: 10.1137/14099231X.
- [45] S. Dubreuil, N. Bartoli, C. Gogu, et T. Lefebvre, « Réduction d'incertitudes en analyse multidisciplinaire basée sur une étude de sensibilité par chaos polynomial », in *Ingénierie*

- mécanique en contexte incertain*, ISTE Group, 2021, p. 121-150. [En ligne]. Disponible sur: <https://hal.science/hal-03533218>
- [46] M. E. Ben Seghier, M. Bettayeb, J. A. Correia, A. M. Jesus, et R. Calçada, « Structural reliability of corroded pipeline using the so-called Separable Monte Carlo method », *J. Strain Anal. Eng. Des.*, vol. 53, p. 730-737, 2018.
- [47] A. Dudzik et B. Potrzezycz-Sut, « Hybrid Approach to the First Order Reliability Method in the Reliability Analysis of a Spatial Structure », *Appl. Sci.*, vol. 11, p. 648, janv. 2021, doi: 10.3390/app11020648.
- [48] B. Shahzaad, A. Bouguettaya, et S. Mistry, « Robust composition of drone delivery services under uncertainty », in *2021 IEEE International Conference on Web Services (ICWS)*, IEEE, sept. 2021, p. 675-680.
- [49] J. Haas et B. Mizaikoff, « Advances in Mid-Infrared Spectroscopy for Chemical Analysis », *Annu. Rev. Anal. Chem.*, vol. 9, n° 1, p. 45-68, juin 2016, doi: 10.1146/annurev-anchem-071015-041507.
- [50] Ezhil, V. S., Sriram, B. R., Vijay, R. C., Yeshwant, S., Sabareesh, R. K., Dakkshesh, G., & Raffik, R, « Investigation on PID controller usage on Unmanned Aerial Vehicle for stability control. »
- [51] H. A. Abdulkarim et I. F. Alshammari, « Comparison of Algorithms for Solving Traveling Salesman Problem », 2015.
- [52] A. Chassein et M. Goerigk, « On the recoverable robust traveling salesman problem », *Optim. Lett.*, vol. 10, n° 7, p. 1479-1492, oct. 2016, doi: 10.1007/s11590-015-0949-5.
- [53] S. Ejim, « Implementation of Greedy Algorithm in Travel Salesman Problem A Computer Based Test with Messging Delivery Feature View project », doi: 10.13140/RG.2.2.23921.48485.
- [54] D. P. Bergmann, J. Denzel, O. Pfeifle, S. Notter, W. Fichter, et A. Strohmayr, « In-flight lift and drag estimation of an unmanned propeller-driven aircraft », *Aerospace*, vol. 8, n° 2, p. 1-16, févr. 2021, doi: 10.3390/aerospace8020043.
- [55] M. Chakchouk *et al.*, « Optimisation de plan de vol d'un drone faisant un cycle hamiltonien entre N points de mesures ; Problème du voyageur de commerce et durée de vie de batterie Optimisation de plan de vol d'un drone faisant un cycle hamiltonien entre N points de mesures ; Problème du voyageur de commerce et durée de vie de batterie Flight plan optimization of a UAV making a Hamiltonian cycle between N measurement points; Traveler problem and battery lifetime », vol. 2022, n° 1, p. 7-7, 2022, doi: 10.21494/ISTE.OP.2022.0806i.
- [56] Q. R. Wald, « The aerodynamics of propellers », *Prog. Aerosp. Sci.*, vol. 42, n° 2, p. 85-128, févr. 2006, doi: 10.1016/j.paerosci.2006.04.001.
- [57] H. Jiang, H. Wu, et W. Chen, « Toward high-efficiency low-noise propellers: A numerical and experimental study », *Phys. Fluids*, vol. 34, n° 7, p. 076116, juill. 2022, doi: 10.1063/5.0098891.
- [58] M. Rostami et A. hamzeh Farajollahi, « Aerodynamic performance of mutual interaction tandem propellers with ducted UAV », *Aerosp. Sci. Technol.*, vol. 108, p. 106-399, janv. 2021, doi: 10.1016/j.ast.2020.106399.
- [59] B. Mi, « Numerical investigation on aerodynamic performance of a ducted fan under interferences from the ground, static water and dynamic waves », *Aerosp Sci Technol*, vol. 100, mai 2020, doi: 10.1016/j.ast.2020.105821.
- [60] H. Han, C. Xiang, B. Xu, et Y. Yu, « Aerodynamic performance and analysis of a hovering micro-scale shrouded rotor in confined environment », *Adv. Mech. Eng.*, vol. 11, n° 4, avr. 2019, doi: 10.1177/1687814018823327.

- [61] A. Akturk et C. Camcı, « Double Ducted Fan (DDF) as a Novel Ducted Fan Inlet Lip Separation Control Device », 2010. [En ligne]. Disponible sur: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:23321708>
- [62] A. Akturk et C. Camcı, « Experimental and computational assessment of a ducted-fan rotor flow model », *J. Aircr.*, vol. 49, n° 3, p. 885-897, 2012, doi: 10.2514/1.C031562.
- [63] J. Chen, L. Li, G. Huang, et X. Xiang, « Numerical investigations of ducted fan aerodynamic performance with tip-jet », *Aerosp Sci Technol*, vol. 78, p. 510-521, juill. 2018, doi: 10.1016/j.ast.2018.05.016.
- [64] Y. Hu, J. Qing, Z. H. Liu, Z. J. Conrad, J. N. Cao, et X. P. Zhang, « Hovering efficiency optimization of the ducted propeller with weight penalty taken into account », *Aerosp Sci Technol*, vol. 117, oct. 2021, doi: 10.1016/j.ast.2021.106937.
- [65] A. F. ElGhazali et S. S. Dol, « Aerodynamic optimization of unmanned aerial vehicle through propeller improvements », *J. Appl. Fluid Mech.*, vol. 13, n° 3, p. 793-803, 2020, doi: 10.29252/JAFM.13.03.30414.
- [66] Y. Liu, L. Tan, et B. Wang, « A Review of Tip Clearance in Propeller, Pump and Turbine », *Energies*, vol. 11, n° 9, p. 2202, août 2018, doi: 10.3390/en11092202.
- [67] B. N. Tran, H. Jeong, J. H. Kim, J. S. Park, et C. Yang, « Effects of tip clearance size on energy performance and pressure fluctuation of a tidal propeller turbine », *Energies*, vol. 13, n° 15, août 2020, doi: 10.3390/en13164055.
- [68] Y. Liu et L. Tan, « Influence of C groove on suppressing vortex and cavitation for a NACA0009 hydrofoil with tip clearance in tidal energy », *Renew Energy*, vol. 148, p. 907-922, avr. 2020, doi: 10.1016/j.renene.2019.10.175.
- [69] V. Andichamy, G. Khokhar, et C. Camcı, *An Experimental Study of Using Vortex Generators As Tip Leakage Flow Interrupters in an Axial Flow Turbine Stage*. 2018.
- [70] W. B. Roberts, A. Armin, G. Kassaseya, K. L. Suder, S. A. Thorp, et A. J. Strazisar, « The Effect of Variable Chord Length on Transonic Axial Rotor Performance », *J. Turbomach.*, vol. 124, n° 3, p. 351-357, juill. 2002, doi: 10.1115/1.1459734.
- [71] C. F. Wisniewski, A. R. Byerley, W. H. Heiser, K. W. Treuren, et W. R. Liller, « The influence of airfoil shape, tip geometry, reynolds number and chord length on small propeller performance and noise », in *33rd AIAA Applied Aerodynamics Conference*, 2015. doi: 10.2514/6.2015-2266.
- [72] T. Zhang, G. Qiao, D. A. Smith, G. N. Barakos, et A. Kusyumov, « Parametric study of aerodynamic performance of equivalent ducted/un-ducted rotors », *Aerosp Sci Technol*, vol. 117, oct. 2021, doi: 10.1016/j.ast.2021.106984.
- [73] C. Fan, R. A. Adjei, Y. Wu, et A. Wang, « Parametric study on the aerodynamic performance of a ducted-fan rotor using free-form method », *Aerosp Sci Technol*, vol. 101, juin 2020, doi: 10.1016/j.ast.2020.105842.
- [74] M. Sweetey, G. Samuel, G. Manikandan, V. Rajashree, S. Merryisha, et S. Gracia, « Design and Performance Analysis of Spiroid Winglet with Normal Wing Aircraft winglets and their vortex detection View project surface dimple effect View project Design and Performance Analysis of Spiroid Winglet with Normal Wing », *Imp. J. Interdiscip. Res. IJIR*, vol. 3, 2017.
- [75] E. Yilmaz et J. Hu, *CFD Study of Quadcopter Aerodynamics at Static Thrust Conditions*. 2018.
- [76] M. Meftah, T. Boutéraon, et C. Dufour, « The UVSQ-SAT/INSPIRESat-5 CubeSat Mission : First In-Orbit Measurements of the Earth's Outgoing Radiation », *Remote Sens.*, vol. 13, n° 8, p. 1449, 2021, doi: 10.3390/rs13081449.
- [77] J.-L. Bertaux, O. Korablev, et S. Perrier, « SPICAM on Mars Express: Observing modes and overview of UV Spectrometer data and scientific Results », *J. Geophys. Res.-Planets*, vol. 111, n° 10, oct. 2006, doi: 10.1029/2006JE002690.

- [78] O. Korablev, « SPICAM IR acousto-optic spectrometer experiment on Mars Express », *J. Geophys. Res. Planets*, vol. 111, n° 9, sept. 2006, doi: 10.1029/2006JE002696.
- [79] J.-L. Bertaux, D. Nevejans, et O. Korablev, « SPICAV on Venus Express: Three spectrometers to study the global structure and composition of the Venus atmosphere », *Planet Venus Venus Express Mission Part 2*, vol. 55, n° 12, p. 1673-1700, oct. 2007, doi: 10.1016/j.pss.2007.01.016.
- [80] J. L. Bertaux, « First observation of 628 CO₂ isotopologue band at 3.3 μm in the atmosphere of Venus by solar occultation from Venus Express », *Icarus*, vol. 195, n° 1, p. 28-33, 2008.
- [81] K. B. Bec, J. Grabska, et C. W. Huck, « Current and future research directions in computer-aided near-infrared spectroscopy: A perspective », *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.*, vol. 254, p. 119-625, juin 2021, doi: 10.1016/j.saa.2021.119625.
- [82] J. Grabska, « Current frontiers in quantum chemical simulations of NIR spectra – Polymers, biomolecules, aqueous matrix and interpretation of instrumental difference of handheld spectrometers », *NIR News*, vol. 32, n° 7-8, p. 7-14, déc. 2021, doi: 10.1177/09603360211059285.
- [83] G. Vasseur, Y. Fagot-Revurat, B. Kierren, M. Sicot, et D. Malterre, « Effect of symmetry breaking on electronic band structure: Gap opening at the high symmetry points », *Symmetry Basel*, vol. 5, n° 4, p. 344-354, 2013.
- [84] L. Han, F. Liu, et L. Zhang, « An Improved Sub-Model PLSR Quantitative Analysis Method Based on SVM Classifier for ChemCam Laser-Induced Breakdown Spectroscopy », *Symmetry*, vol. 13, p. 319, févr. 2021, doi: 10.3390/sym13020319.
- [85] R. E. Sonstrom, D. M. Cannon, et J. L. Neill, « Chiral Analysis of Linalool, an Important Natural Fragrance and Flavor Compound, by Molecular Rotational Resonance Spectroscopy », *Symmetry Basel*, vol. 14, n° 5, p. 10-3390 14050917, 2022.
- [86] Dahoo Pierre-Richard et Lakhlifi Azzedine, *Spectroscopie infrarouge des triatomes pour l'observation spatiale*, vol. 2. Wiley-ISTE, 2019.
- [87] Dahoo Pierre-Richard et Lakhlifi Azzedine, *Infrared Spectroscopy of Symmetric and Spherical Top Molecules for Space Observation 2*, vol. volume 4. John Wiley & Sons, 2021.
- [88] M. Margottin-maclou, P. Dahoo, et A. Henry, « Self-, N₂-, and O₂-broadening parameters in the ν₃ and ν₁+ν₃ bands of ¹²C¹⁶O₂ », *J. Mol. Spectrosc.*, vol. 131, n° 1, p. 21-35, 1988, doi: 10.1016/0022-2852(88)90102-6.
- [89] F. et D. E. V. L. I. N. FLEYFEL et J. Paul, « Carbon dioxide clathrate hydrate epitaxial growth: Spectroscopic evidence for formation of the simple type-II carbon dioxide hydrate », *J. Phys. Chem.*, vol. 95, n° 9, p. 3811-3815, 1991.
- [90] V. Raducu, B. Gauthier-Roy, R. Dahoo, et L., « Conformational dynamics of the CO:CO₂ complex in argon matrices. I. Thermodynamical considerations derived from the observed kinetics », *J. Chem. Phys.*, vol. 105, n° 22, p. 10092-10098, déc. 1996, doi: 10.1063/1.472838.
- [91] P. Dahoo, I. Berrodier, et V. Raducu, « Splitting of vibrational mode of CO isotopic species in the unstable trapping site in argon matrix », *Eur Phys J D*, vol. 5, p. 71-81, 1999, doi: 10.1007/s100530050231.
- [92] S. Mayr *et al.*, « Challenging handheld NIR spectrometers with moisture analysis in plant matrices: Performance of PLSR vs. GPR vs. ANN modelling », *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.*, vol. 249, p. 119-342, mars 2021, doi: 10.1016/j.saa.2020.119342.
- [93] A. Argun, T. Thalheim, S. Bo, F. Cichos, et G. Volpe, « Enhanced force-field calibration via machine learning », *Appl. Phys. Rev. Am. Inst. Phys.*, vol. 7, n° 4, 2020.

- [94] E. D. B. Schmitt, « Carbon dioxide clathrate hydrate FTIR spectrum », *Astron Astrophys*, vol. 504, n° 3, p. 869-873, 2009.
- [95] J. Ghosh, « Clathrate hydrates in interstellar environment », *Proc Natl Acad Sci U A*, vol. 116, n° 5, p. 1526-1531, 2019.
- [96] S. P. Pinnelli et S. K. Burla, « Synergistic effects of amino acids in clathrates hydrates: Gas capture and storage applications », *Chem. Eng. J. Adv.*, vol. 3, p. 100022, nov. 2020, doi: 10.1016/j.cej.2020.100022.
- [97] E. et L. A. N. G. L. E. T. Dartois et François, « Carbon dioxide clathrate hydrate formation at low temperature- Diffusion-limited kinetics growth as monitored by FTIR », *Astron. Astrophys.*, vol. 652, p. 74, 2021.
- [98] G. Bera *et al.*, « Vibrational spectra and optical properties of Fe_{1-x}Cr_xVO₄ solid solutions: With a group theory analysis », *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.*, vol. 227, p. 117668, févr. 2020, doi: 10.1016/j.saa.2019.117668.
- [99] E. B. Wilson, J. C. DECIUS, CROSS, et P. C, *Molecular vibrations : the theory of infrared and Raman vibrational spectra*. Courier Corporation, 1980.
- [100] G. et P. I. M. B. E. R. T. Amat et M., « On Fermi resonance in carbon dioxide », *J. Mol. Spectrosc.*, vol. 16, n° 2, p. 278-290, 1965, doi: 10.1016/0022-2852(65)90123-2.
- [101] H. Boogaard, K. Walker, et A. J. Cohen, « Air pollution: The emergence of a major global health risk factor », *Int Health*, vol. 11, p. 417-21, 2019, doi: 10.1093/inthealth/ihz078.
- [102] M. U. Ali *et al.*, « Health impacts of indoor air pollution from household solid fuel on children and women », *J. Hazard. Mater.*, vol. 416, p. 126-127, août 2021, doi: 10.1016/j.jhazmat.2021.126127.
- [103] A. Frontera, L. Cianfanelli, K. Vlachos, G. Landoni, et G. Cremona, « Severe air pollution links to higher mortality in COVID-19 patients: The “double-hit” hypothesis. », *J. Infect.*, vol. 81, n° 2, p. 255-259, août 2020, doi: 10.1016/j.jinf.2020.05.031.
- [104] W. T. Tsai et Y. Q. Lin, « Trend analysis of air quality index (Aqi) and greenhouse gas (ghg) emissions in taiwan and their regulatory countermeasures », *Environ. - MDPI*, vol. 8, 2021, doi: 10.3390/environments8040029.
- [105] D. Byun et K. L. Schere, « Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modeling system », *Appl Mech Rev*, vol. 59, p. 51-76, 2006, doi: 10.1115/1.2128636.
- [106] T. Villa, F. Gonzalez, B. Miljevic, Z. D. Ristovski, et L. Morawska, « An overview of small unmanned aerial vehicles for air quality measurements: Present applications and future perspectives », *Sens. Switz.*, vol. 16, 2016, doi: 10.3390/s16071072.
- [107] T. Drosoglou *et al.*, « Comparisons of ground-based tropospheric NO₂ MAX-DOAS measurements to satellite observations with the aid of an air quality model over the Thessaloniki area, Greece », *Atmospheric Chem. Phys.*, vol. 17, n° 9, p. 5829-5849, mai 2017, doi: 10.5194/acp-17-5829-2017.
- [108] J. J. Schwab, H. D. Felton, R. O. v., et K. L. Demerjian, « New york state urban and rural measurements of continuous PM_{2.5}Mass by FDMS, TEOM, and BAM », *J Air Waste Manage Assoc*, vol. 56, p. 372-83, 2006, doi: 10.1080/10473289.2006.10464523.
- [109] D. Singh, M. Dahiya, R. Kumar, et C. Nanda, « Sensors and systems for air quality assessment monitoring and management: A review », *J Env. Manage*, vol. 289, 2021, doi: 10.1016/j.jenvman.2021.112510.
- [110] S. Jamil, M. Ur Rahman, et Fawad, « A Comprehensive Survey of Digital Twins and Federated Learning for Industrial Internet of Things (IIoT) », in *Internet of Learning for Industrial Internet of Things (IIoT), Internet of Vehicles (IoV) and Internetof Drones (IoD). Applied System Innovation*, vol. 5, 2022. [En ligne]. Disponible sur: <https://doi.org/10.3390/asi5030056>.

- [111] M. D. Eisaman, J. Fan, A. Migdall, et S. V. Polyakov, « Invited Review Article: Single-photon sources and detectors », *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 82, n° 7, p. 071101, juill. 2011, doi: 10.1063/1.3610677.
- [112] M. Makarem, C. M. Lee, K. Kafle, S. Huang, I. Chae, et H. Yang, « Probing cellulose structures with vibrational spectroscopy », *Cellulose*, vol. 26, p. 35-79, 2019, doi: 10.1007/s10570-018-2199-z.
- [113] J. H. Hardesty, B. Attili, et C. College, « Spectrophotometry and the Beer-Lambert Law: An Important Analytical Technique in Chemistry », 2010.
- [114] P.-R. Dahoo et P. POUGNET, *Applications et métrologie à l'échelle du nanomètre 2 : Systèmes de mesure, ingénierie quantique et méthode RBDO*. John Wiley & Sons, 2021.
- [115] R. El Maani, A. Makhloufi, B. Radi, et A. El Hami, « RBDO analysis of the aircraft wing based aerodynamic behavior », *Struct. Eng. Mech.*, vol. 61, n° 4, p. 441-451, févr. 2017, doi: 10.12989/sem.2017.61.4.441.
- [116] K. Dammak, A. El Hami, S. Koubaa, L. Walha, et M. Haddar, « Reliability based design optimization of coupled acoustic-structure system using generalized polynomial chaos », *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 134, p. 75-84, déc. 2017, doi: 10.1016/j.ijmecsci.2017.10.003.
- [117] K. Dammak, A. El Hami, S. Koubaa, L. Walha, et M. Haddar, « Reliability based design optimization of coupled acoustic-structure system using generalized polynomial chaos », *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 134, p. 75-84, déc. 2017, doi: 10.1016/j.ijmecsci.2017.10.003.
- [118] X. Li, « Limit state Kriging modeling for reliability-based design optimization through classification uncertainty quantification », *Reliab Eng Syst Saf*, vol. 224, p. 10-1016 2022 108539, août 2022.
- [119] K. Dammak, S. Koubaa, A. El Hami, L. Walha, et M. Haddar, « Numerical modelling of vibro-acoustic problem in presence of uncertainty: Application to a vehicle cabin », *Appl. Acoust.*, vol. 144, p. 113-123, janv. 2019, doi: 10.1016/j.apacoust.2017.06.001.