HAL
open science

Détermination de profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide, le nitrométhane

François Clément, Guy Chavent

▶ To cite this version:

François Clément, Guy Chavent. Détermination de profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide, le nitrométhane. [Rapport de recherche] RR-4641, INRIA. 2002. inria-00071944

HAL Id: inria-00071944
https://inria.hal.science/inria-00071944

Submitted on 23 May 2006

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.

INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET EN AUTOMATIQUE

Détermination de profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide, le nitrométhane

François Clément — Guy Chavent

N° 4641

Novembre 2002

THÈME 4

Rapport de recherche

ISSN 0249-6399 ISRN INRIA/RR--4641--FR

Détermination de profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide, le nitrométhane

François Clément * , Guy Chavent †

Thème 4 — Simulation et optimisation
de systèmes complexes
Projet Estime

Rapport de recherche n° 4641 — Novembre 2002 — 98 pages

Résumé : Ce travail concerne la validation par méthode inverse d'un modéle physique de la phase d'amorçage de la détonation d'un explosif liquide. Le problème direct repose essentiellement sur l'équation du transfert radiatif qui exprime le bilan énergétique entre les phénomènes d'émission et d'absorption du rayonnement. L'analyse de la sensibilité des luminances évaluées en sortie par rapport aux distributions de température et de coefficient d'absorption monochromatique détermine des indicateurs permettant de guider le choix des paramètres à estimer. Ensuite, l'inversion consiste à mettre en œuvre un algorithme de minimisation, les dérivées étant calculées de façon efficace par la technique de l'état adjoint. La présente étude porte sur l'analyse de quatre cas-tests synthétiques issus de la détonation du nitrométhane.

Mots-clés : inversion, moindres carrés, analyse de sensibilité, décomposition en valeurs singulières, paramétrisation, transfert radiatif, loi de conservation scalaire

Rapport final pour le marché n°0125046 (DGA/CEG).

* Projet Estime. Francois.Clement@inria.fr.
† Projet Estime et CEREMADE, Université de Paris 9-Dauphine, F-75775 Paris Cédex 16. Guy.Chavent@inria.fr.

Unité de recherche INRIA Rocquencourt
Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 Le Chesnay Cedex (France)
Téléphone : +33 1 39 63 55 11 — Télécopie : +33 1 39 63 53 30

Determination of Temperature Profiles during the Detonation of a Liquid Explosive: Nitromethane

Abstract: This work deals with the validation, through an inverse method, of a physical model for the priming phase during the detonation of a liquid explosive. The direct problem follows the radiative transfer equation which expresses the energetic BILAN between emission and absorption of the radiation. The sensitivity analysis of the output luminance with respect to the temperature and the extinction coefficient distributions determines indicators for the choice of optimization parameters. Then, inversion consists in using a minimisation algorithm, where the derivatives are efficiently computed by the adjoint state method. The present study deals with the analysis of four synthetic test-cases for the detonation of the nitromethane.

Key-words: inversion, least-squares, sensitivity analysis, singular value decomposition, parameterisation, radiative transfert, scalar conservation law

Table des matières

Introduction **6**
Présentation du problème . . . 6
Méthodologie proposée . . . 13

1 Paramétrisations **15**
1.1 Paramétrisations réduites de la température . . . 15
1.1.1 Loi de conservation scalaire . . . 15
1.1.2 Mise en œuvre numérique . . . 17
1.1.3 Dérivation . . . 18
1.1.4 Paramétrisations de u_i, u_g, f et g . . . 18
1.1.5 Choix du paramètre de température m_t . . . 26
1.2 Paramétrisations réduites du coefficient d'absorption . . . 28
1.2.1 Interpolation linéaire . . . 28
1.2.2 Dérivation . . . 28
1.2.3 Tables de coefficients . . . 28
1.2.4 Représentation hiérarchique . . . 29
1.3 Représentations fines des paramètres physiques . . . 32
1.4 Transfert radiatif . . . 33
1.4.1 Schéma numérique . . . 34
1.4.2 Dérivation . . . 34
1.4.3 Luminances . . . 35
1.5 Normalisation des luminances . . . 38
1.6 Trois niveaux de paramétrisation du problème . . . 41
1.7 Validation des dérivées . . . 41

2 Problème inverse **43**
2.1 Mesures à inverser . . . 43
2.2 Points initiaux . . . 43

3 Analyse de sensibilité **54**
3.1 Analyse locale . . . 54
3.2 Décomposition en valeurs singulières . . . 54
3.2.1 Les cas du marché . . . 54
3.3 Un indicateur global . . . 73
3.3.1 Tracés du critère des moindres carrés sur un segment . . . 73
3.3.2 Les cas du marché . . . 73

4 Inversion **83**
4.1 Algorithme de minimisation . . . 83
4.2 Stratégies d'optimisation . . . 83
4.3 Les cas du marché . . . 83

Conclusions et perspectives **96**

Table des figures

1 Schéma simplifié du dispositif de détonation et de spectroscopie. 6
2 Modèle classique de transition choc-détonation dans un explosif homogène. 7
3 Intensité lumineuse émise durant la détonation du NM. 8
4 Émission/absorption d'un élément de volume. 8
5 Profils de température théoriques du marché. 11
6 Maillages dans le repère mobile. 17
7 Classe de profils modélisés dans le cas 1. 22
8 Classe de profils modélisés dans le cas 2. 23
9 Classe de profils modélisés dans le cas 3. 24
10 Classe de profils modélisés dans le cas 4. 25
11 Profils de température modélisés. 27
12 Tables régulière et maximale. 29
13 Coefficients d'absorption monochromatiques théoriques. 30
14 Coefficients d'absorption monochromatiques modélisés. 31
15 Coefficients d'absorption relatifs. 33
16 Luminances théoriques. 36
17 Luminances modélisées. 37
18 Profils complets dans le cas 1 pour la table régulière. 38
19 Mesures exactes. 39
20 Mesures modélisées. 40
21 Mesures bruitées. 45
22 Points initiaux pour l'inversion dans le cas 1. 46
23 Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 1. 47
24 Points initiaux pour l'inversion dans le cas 2. 48
25 Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 2. 49
26 Points initiaux pour l'inversion dans le cas 3. 50
27 Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 3. 51
28 Points initiaux pour l'inversion dans le cas 4. 52
29 Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 4. 53
30 Valeurs singulières pour les sept paramétrisation dans le cas 1. 57
31 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 1 dans le cas 1. 57
32 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 1. 58
33 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 1. 59
34 Éléments singuliers aux points initiaux pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 1. 60
35 Valeurs singulières pour les sept paramétrisations dans le cas 2. 61
36 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 1 dans le cas 2. 61
37 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 2. 62
38 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 2. 63
39 Éléments singuliers aux points initiaux pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 2. 64
40 Valeurs singulières pour les sept paramétrisations dans le cas 3. 65
41 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 1 dans le cas 3. 65
42 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 3. 66
43 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 3. 67
44 Éléments singuliers aux points initiaux pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 3. 68
45 Valeurs singulières pour les sept paramétrisations dans le cas 4. 69
46 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 1 dans le cas 4. 69
47 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 4. 70
48 Éléments singuliers pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 4. 71
49 Éléments singuliers aux points initiaux pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 4. 72
50 Critère pour les sept paramétrisations dans le cas 1. 75
51 Critère pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 1. 76
52 Critère pour les sept paramétrisations dans le cas 2. 77
53 Critère pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 2. 78
54 Critère pour les sept paramétrisations dans le cas 3. 79
55 Critère pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 3. 80

56 Critère pour les sept paramétrisations dans le cas 4. 81
57 Critère pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 4. 82
58 Résultats d'inversion des mesures exactes dans le cas 2. 87
59 Résultats d'inversion des mesures modélisées dans le cas 2. 89
60 Résultats d'inversion des mesures exactes dans le cas 3. 91
61 Résultats d'inversion des mesures modélisées dans le cas 3. 92
62 Résultats d'inversion des mesures exactes dans le cas 4. 93
63 Résultats d'inversion des mesures modélisées dans le cas 4. 95

Liste des tableaux

1 Caractéristiques des détecteurs du dispositif de mesure. 9
2 Table de coefficients d'absorption monochromatique. 10
3 Vérification des dérivées. 42
4 Composantes des points initiaux et recherché dans le cas 1. 43
5 Composantes des points initiaux et recherché dans le cas 2. 44
6 Composantes des points initiaux et recherché dans le cas 3. 44
7 Composantes des points initiaux et recherché dans le cas 4. 44
8 Comptes rendus d'inversion dans le cas 1. 86
9 Comptes rendus d'inversion dans le cas 2. 88
10 Comptes rendus d'inversion dans le cas 3. 90
11 Comptes rendus d'inversion des mesures exactes dans le cas 4. 93
12 Comptes rendus d'inversion des mesures modélisées dans le cas 4. 94

Introduction

Le marché porte sur la réalisation du logiciel IPTEMP (pour Inversion de Profils de TEMPérature) écrit en MATLAB permettant la détermination de profils de température à partir de mesures de luminances au moyen d'une technique de résolution de l'équation du transfert radiatif appliquée à la détonation, par méthode inverse.

Présentation du problème

(D'après le Cahier des clauses techniques particulières n°2001-022618 de la consultation n°01-010/N/HA/A.)

Cette étude s'inscrit dans un programme d'amélioration et de validation des modèles de détonation du Centre d'Études de Gramat (CEG). L'objectif des travaux menés sur le nitrométhane (NM) est d'élaborer un modèle de la phase d'amorçage appelée transition choc-détonation à partir des profils de température des produits de réaction du NM soumis à choc. Ces travaux sont basés sur l'analyse spectrale du NM entre 0,35 et 5 μm par spectroscopie d'émission. Les dispositifs expérimentaux visible et infrarouge permettent d'obtenir des mesures de luminance en fonction du temps (résolution de 10 ns) et de la longueur d'onde (résolution spectrale allant de 30 à 2 nm) sur un large domaine spectral.

Dispositif expérimental

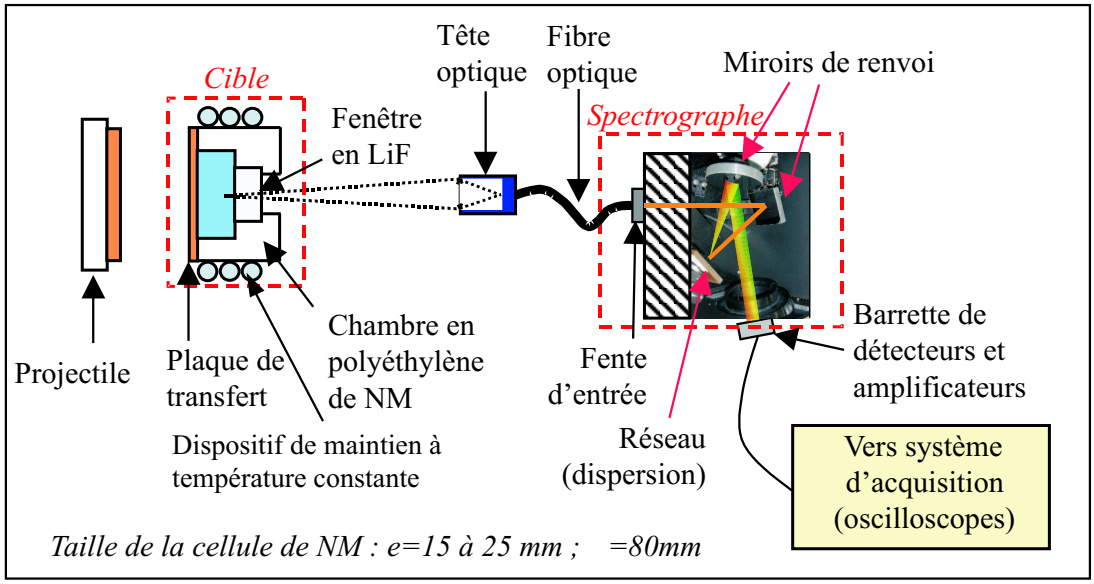

FIG. 1 – *Schéma simplifié du dispositif de détonation et de spectroscopie.*

Le principe des essais de détonation consiste à induire une onde de choc plane soutenue dans le NM par impact plan d'un projectile sur une cellule contenant l'explosif (Figure 1). Les dimensions du dispositif sont telles que les phénomènes observés se déroulent selon un écoulement plan soutenu, non perturbé par les effets de bord.

Un lanceur à poudre propulse le projectile à une vitesse pouvant atteindre 2400 m/s. La vitesse du projectile et la planéité est mesurée lors de chaque tir à l'aide d'aiguilles de chronométrie fixées sur la cible. Le vide est réalisé entre le projectile et la cible pour éviter la formation d'un coussin d'air à l'impact.

Le NM est confiné dans une chambre en polyéthylène fermée par une plaque de transfert en cuivre. L'épaisseur de l'explosif est comprise entre 15 et 25 mm. À l'autre extrémité de la cellule est collée une fenêtre en fluorure de lithium (LiF), matériau qui a comme intérêt principal d'être transparent sur un grand domaine de longueur d'onde et de résister à des sollicitations élevées en pression.

Le rayonnement émis par la détonation est collecté par une tête optique et transmis au système de spectroscopie par fibre optique. La dispersion du faisceau lumineux se fait grâce à un spectromètre à réseau. Deux barrettes de détecteurs sont utilisées selon le domaine spectral étudié :

- un photomultiplicateur multianodes (350–800 nm) pour l'étude du domaine visible,
- une barrette de 32 détecteurs HgCdZnTe (0,8–5 μm) pour le domaine infrarouge.

Détonation

Les phénomènes qui conduisent à la formation de la détonation (Figure 2) peuvent s'expliquer de la façon suivante :

- après impact, un choc (S) se propage dans l'explosif ; l'explosif est mis en mouvement et atteint des pressions de l'ordre de 100 kbar et des températures de l'ordre de 1000 K,
- une explosion thermique a lieu dans la région soumise le plus longtemps à l'élévation de température ; elle consiste en des réactions chimiques du NM,
- il se forme alors une détonation dans le milieu comprimé par le choc initial que l'on appelle superdétonation (SD),
- la superdétonation se propage et rattrape le choc initial ; on observe la formation d'une onde de détonation forte puis stationnaire qui va se propager dans le NM.

Les vitesses de l'interface plaque/explosif V_P, du choc D_S et de la détonation stable sont connues. En effet, les aiguilles de chronométrie disposées dans la cible d'explosif permettent d'avoir ces informations. Lorsque la détonation devient stable, la température est constante, d'après les modèles de détonation classique.

Le dispositif de spectroscopie permet de mesurer l'intensité lumineuse émise par le système durant toute la durée du phénomène. On obtient 16 mesures en fonction de la longueur d'onde dans le visible et 32 dans l'infrarouge.

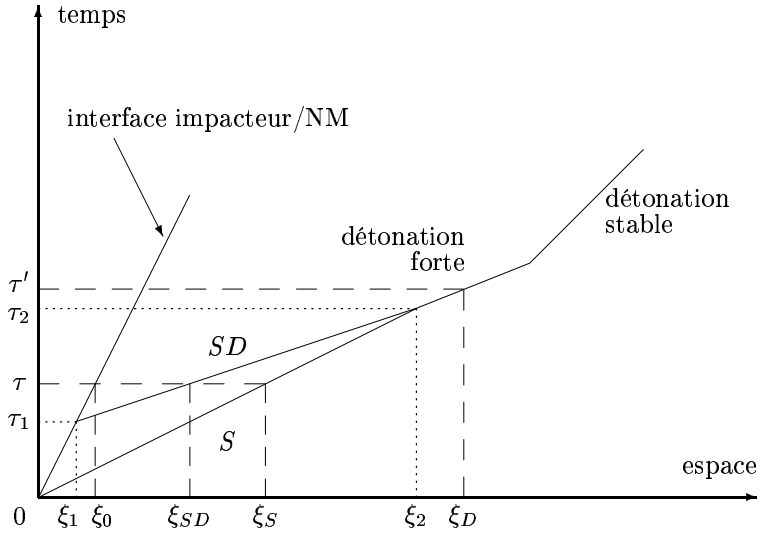

FIG. 2 – *Modèle classique de transition choc-détonation dans un explosif homogène.*

La figure 3 représente un exemple de la réponse du détecteur pour deux longueurs d'onde dans le domaine visible. Ces mesures mettent en évidence l'entrée du choc, la formation de la superdétonation, la formation de l'onde de détonation et l'interaction de l'onde avec la fenêtre d'observation. Les signaux sont donnés ici en unité arbitraire mais ils seront par la suite donnés sous forme de luminance $L_\lambda(t)$, en tenant compte d'une calibration du dispositif en dynamique.

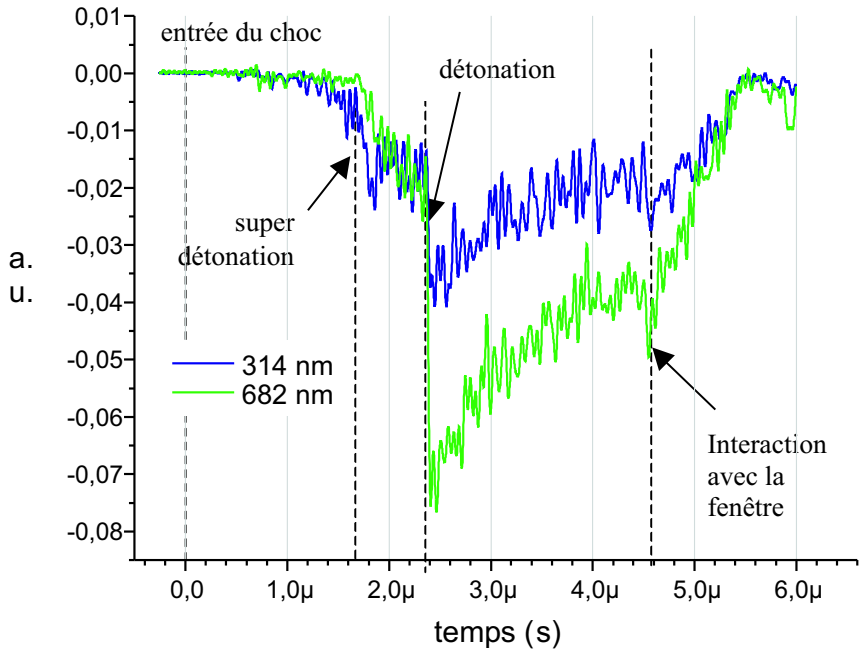

FIG. 3 – *Intensité lumineuse émise durant la détonation du NM (épaisseur de l'explosif 25 mm, vitesse d'impact du projectile 1947 m/s.*

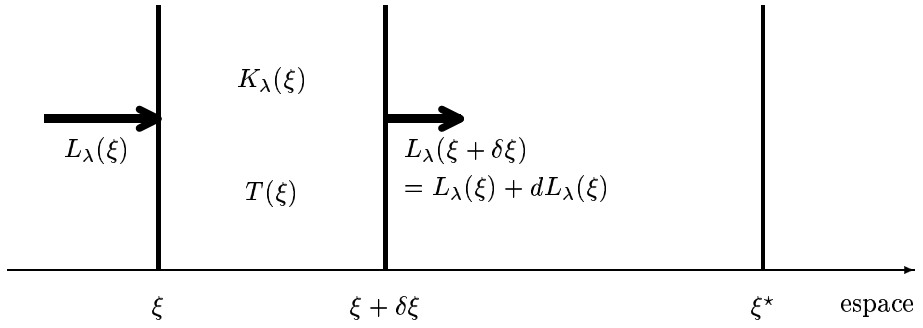

FIG. 4 – *Émission/absorption d'un élément de volume.*

Transfert radiatif

Un milieu semi-transparent est susceptible d'absorber, d'émettre et de diffuser un rayonnement dans chaque élément de volume (Figure 4). L'équation de transfert radiatif est obtenue en effectuant le bilan énergétique de ces effets sous les hypothèses suivantes :

– l'équilibre thermodynamique local est atteint,

– l'effet de la diffusion est négligé,

– la propagation du rayonnement est instantanée.

Pour une longueur d'onde donnée λ, la perte par absorption dans l'élément de volume est exprimée à l'aide du coefficient d'absorption monochromatique K_λ par

$$dL^a_\lambda(\xi) = -K_\lambda(\xi)L_\lambda(\xi)d\xi. \tag{1}$$

Le gain par émission fait également intervenir la luminance du corps noir L^0_λ,

$$dL^e_\lambda(\xi) = K_\lambda(\xi) L^0_\lambda(T(\xi)) d\xi \tag{2}$$

où $T(\xi)$ est la température dans l'élément de volume. La luminance du corps noir est donnée en fonction de la température T par la loi de Planck :

$$L^0_\lambda(T) = \frac{c_1}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) - 1\right)} \tag{3}$$

où $c_1 = 1,191\,10^8$ $\mathrm{Wm^{-2}\mu m^4 sr^{-1}}$ et $c_2 = 1,4388\,10^4$ μmK (la température T étant exprimée en K et la longueur d'onde λ en μm, la luminance L^0_λ est alors donnée en $\mathrm{Wm^{-2}\mu m^{-1} sr^{-1}}$). Le bilan énergétique dans l'élément de volume s'écrit $dL_\lambda = dL^a_\lambda + dL^e_\lambda$, ce qui donne l'équation de transfert radiatif exprimée sous forme différentielle :

$$\frac{dL_\lambda}{d\xi}(\xi) + K_\lambda(\xi) L_\lambda(\xi) = K_\lambda(\xi) L^0_\lambda(T(\xi)). \tag{4}$$

Si la zone comprise entre ξ et $\xi^\star$ est homogène, de coefficient d'absorption K_λ et de température T, alors la solution exacte de l'équation différentielle (4) est donnée par

$$L_\lambda(\xi^\star) = L^0_\lambda(T) + \exp(-(\xi^\star - \xi) K_\lambda)(L_\lambda(\xi) - L^0_\lambda(T)). \tag{5}$$

Les cas du marché

Pour réduire le nombre d'inconnues, il est proposé de traiter successivement des cas simplifiés :

- la détonation stationnaire soutenue (cas 1),
- la détonation stationnaire avec détente des produits issus de la détonation (cas 2),
- la superdétonation simplifiée (cas 3) pour plusieurs instants,
- un cas générique (cas 4) issu d'une simulation numérique directe de l'hydrodynamique radiative sera ensuite traité pour valider la méthode.

j	λ_j (μm)	$\varepsilon^{\mathrm{mes}}_j$	$\sigma^{\mathrm{bruit}}_j$ ($\mathrm{Wm^{-2}\mu m^{-1} sr^{-1}}$)
1	0,86097642	0,01640	976625,44988
2	0,82817957	0,02948	761786,52513
3	0,79538271	0,00922	263838,10811
4	0,76258585	0,00706	76373,88040
5	0,72978900	0,00746	45037,34406
6	0,69699214	0,00400	39647,08847
7	0,66419528	0,02557	58269,67795
8	0,63139843	0,00855	44798,34246
9	0,59860157	0,01302	74549,85887
10	0,56580472	0,02473	55569,75082
11	0,53300786	0,02745	56815,63143
12	0,50021100	0,04780	46359,72549
13	0,46741415	0,04035	22987,80568
14	0,43461729	0,06325	32098,67468
15	0,40182043	0,04919	8267,14331
16	0,36902358	0,10795	4184,57582

TAB. 1 – *Numéro j, longueurs d'onde moyenne λ, erreur relative de mesure à 1773 K $\varepsilon^{\mathrm{mes}}$ et déviation standard du niveau de bruit σ^{bruit} des 16 détecteurs du photomultiplicateur multianodes utilisé pour l'étude du domaine visible.*

Caractéristiques communes L'épaisseur initiale de NM est de 25 mm. Les caractéristiques des 16 détecteurs du dispositif pour le domaine visible sont listées dans le Tableau 1. L'erreur relative de mesure des tensions

j	293 K	3500 K	3850 K	4500 K	6000 K	7000 K
1	0,96897	–	289,11947	57,69699	17,38245	10,86302
2	0,00000	–	98,51271	36,35487	11,53008	7,20144
3	0,04369	206,050337	68,5305	27,3093	8,64839	5,3551
4	0,00000	110,652	48,96203	20,27497	6,34888	3,88917
5	0,01646	63,49016	31,74315	13,50382	4,15829	2,51445
6	0,00000	66,44755	31,9675	13,09585	3,84328	2,27932
7	0,00000	72,5369	33,12494	12,97302	3,60481	2,0918
8	0,00000	85,94305	36,17214	13,38429	3,49128	1,97649
9	0,00000	90,55197	36,04788	12,70921	3,11205	1,71643
10	0,00000	84,37856	32,82132	11,08429	2,5334	1,35623
11	0,00000	81,13732	30,38055	9,73568	2,05442	1,0628
12	0,00000	73,56197	26,8016	8,12762	1,56735	0,77966
13	0,05803	74,18482	25,33598	7,13995	1,23696	0,58779
14	1,12914	45,46601	16,22759	4,36117	0,6763	0,3055
15	17,02076	3,93742	1,53094	0,39682	0,05409	0,02299
16	10390,9945	4,18694	1,49548	0,34377	0,03927	0,01548

TAB. 2 – *Table de coefficients d'absorption monochromatique (en m^{-1}) pour les 16 longueurs d'onde du dispositif de mesure. Pour le NM au repos à 293 K et pour les produits de détonation aux températures supérieures.*

diminue avec la température ; prendre la valeur moyenne à 1773 K revient donc à majorer cette erreur dans la plupart des cas qui nous concernent.

Une table de coefficients d'absorption monochromatique pour quelques températures est également fournie par le CEG et listée dans le Tableau 2. À 293 K, cela correspond aux coefficients d'absorption pour le NM au repos, et au delà, pour les produits de détonation. Ces derniers coefficients sont déterminés de façon expérimentale à partir d'un jeu de luminances par une technique ne permettant pas de définir de valeur pour les deux premières longueurs d'onde à 3500 K (ni pour des températures inférieures, à toutes les longueurs d'onde).

Initialement, il était convenu que les luminances dans les quatre cas du marché seraient fournies par le CEG, cependant, la simplicité et la rapidité d'utilisation du logiciel développé par l'Inria ont fait que ces luminances ont été calculées à l'Inria sous les directives du CEG, en particulier concernant les caractéristiques précises des profils théoriques de température. Les valeurs de coefficient d'absorption sont toujours déterminées en fonction des températures à l'aide du Tableau 2.

Cas 1 : détonation autonome stationnaire soutenue Les profils de température théoriques sont des créneaux de température représentés sur la Figure 5a. La détonation est représentée comme une discontinuité thermique, mécanique et chimique : l'état 0 (en avant du front) est le NM au repos (à pression et température ambiante donc non décomposé) et l'état D (en arrière du front) représente les produits de détonation (NM décomposé).

Les caractéristiques de ces profils sont :

- à $\tau_0 = 0$ μs, le front se trouve en $\xi_0 = 0$ mm,
- la vitesse de l'interface plaque/explosif est $V_P = 1625$ m/s,
- la température du NM au repos est $T_0 = 293$ K,
- la température du NM décomposé est $T_D = 3600$ K,
- la vitesse du front est $D_D = 6700$ m/s,
- les luminances sont mesurées tous les $\Delta\tau = 20$ ns jusqu'à $\tau_{\max} = 4$ μs.

Les inconnues pour l'inversion sont la température du front T_D et la table de coefficients d'absorption pour les produits de détonation.

Cas 2 : détonation stationnaire avec détente des produits issus de la détonation Les profils de température théoriques représentés sur la Figure 5b montrent une discontinuité de température suivie d'une détente (diminution de la température jusqu'à une température constante). T_0 représente la température du NM au repos, T_D la température des produits issus de la détonation juste après la discontinuité et T_{Sout} la température constante après la détente.

Les caractéristiques de ces profils sont :

- à $\tau_0 = 0$ μs, le front se trouve en $\xi_0 = 0$ mm,
- la vitesse de l'interface plaque/explosif est $V_P = 1300$ m/s,
- la température du NM au repos est $T_0 = 293$ K,
- la température des produits de détonation juste après la discontinuité est $T_D = 3530$ K,
- la température du NM décomposé est $T_{\mathrm{Sout}} = 3000$ K,
- la vitesse du front est $D_D = 6280$ m/s,
- les luminances sont mesurées tous les $\Delta\tau = 31{,}847$ ns jusqu'à $\tau_{\max} = 3{,}949$ μs.

Les inconnues pour l'inversion sont la température du front T_D, la température soutenue après la détente T_{Sout}, la forme de la détente et la table de coefficients d'absorption pour les produits de détonation.

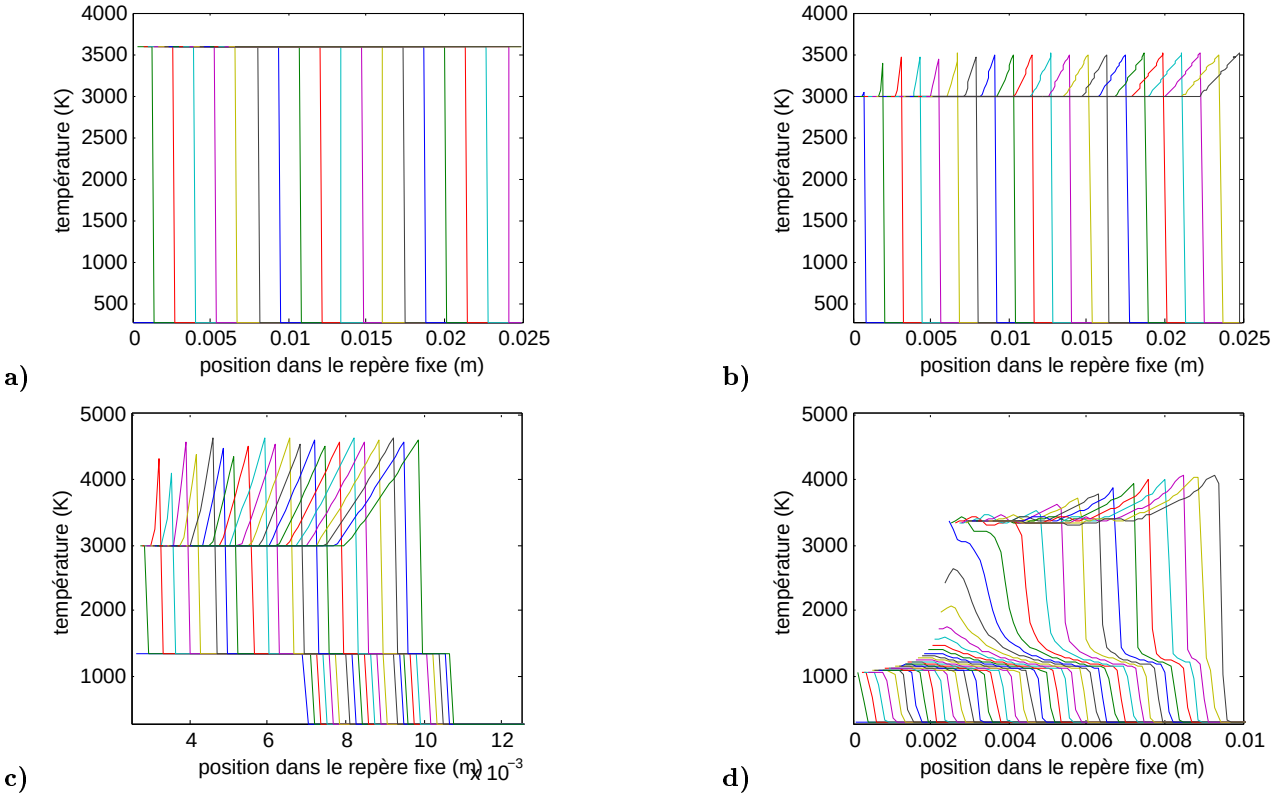

FIG. 5 – *Profils de température théoriques du marché.* **a)** *Cas 1 : détonation autonome stationnaire soutenue (un profil tous les 0,2 μs).* **b)** *Cas 2 : détonation stationnaire avec détente des produits issus de la détonation (un profil tous les 0,191 μs).* **c)** *Cas 3 : superdétonation simplifiée (un profil tous les 0,04 μs).* **d)** *Cas 4 : cas générique calculé avec un modèle physique (un profil tous les 0,05 μs).*

Cas 3 : superdétonation simplifiée Chaque profil de température théorique de la Figure 5c est constitué successivement de la droite vers la gauche :

- d'une discontinuité de température due à un choc,
- d'un état constant,
- d'une seconde discontinuité thermique, mécanique et chimique correspondant à l'apparition de la superdétonation,
- d'une détente caractérisée par une diminution de température puis une température constante.

La distance entre les deux discontinuités diminue en fonction du temps.

Les caractéristiques de ces profils sont :

- à $\tau_0 = 0$ μs, le choc se trouve en $\xi_0 = 0$ mm,
- la vitesse de l'interface plaque/explosif est $V_P = 1625$ m/s,
- à $\tau_1 = 1{,}6$ μs, l'onde de superdétonation apparaît, le choc se trouve donc en $\xi_1 = 2{,}6$ mm,
- la température du NM au repos est $T_0 = 293$ K,
- la température derrière le front de choc est $T_S = 1336$ K,
- la température juste après le front de superdétonation est $T_{SD} = 4650$ K,
- la température après la détente est $T_{\mathrm{Sout}} = 3000$ K,
- la vitesse du choc est $D_S = 4350$ m/s,
- la vitesse de la superdétonation est $D_{SD} = 8290$ m/s,
- les luminances sont mesurées tous les $\Delta\tau = 20$ ns jusqu'à $\tau_{\max} = 2{,}5$ μs.

Les inconnues pour l'inversion sont la température des fronts T_S et T_{SD}, la vitesse de la superdétonation D_{SD}, la température soutenue après la détente T_{Sout}, la forme de la détente et la table de coefficients d'absorption pour les produits de détonation.

Cas 4 : cas générique issu de l'hydrodynamique radiative Les profils de températures sont calculés avec un modèle plus sophistiqué intégrant l'hydrodynamique radiative, ils sont représentés sur la Figure 5d. Dans ce cas, on assiste à la formation de la superdétonation au cours du temps.

Le profil de température est d'abord constitué d'une discontinuité due au choc suivi d'une augmentation monotone de la température. Cette température chute au voisinage de l'interface impacteur/NM. Ensuite, il y a formation de la superdétonation et les profils sont du même type que ceux du cas 3 ; cependant la température varie légèrement sur les paliers.

Les caractéristiques de ces profils sont évaluées sur les courbes fournies par le CEG :

- à $\tau_0 = 0$ μs, le choc se trouve en $\xi_0 = 0$ mm,
- la vitesse de l'interface plaque/explosif est $V_P = 1715$ m/s,
- à $\tau_1 = 1{,}4$ μs, l'onde de superdétonation est formée, le choc se trouve donc en $\xi_1 = 2{,}4$ mm,
- la température du NM au repos est $T_0 = 298$ K,
- la température derrière le front de choc est $T_S \simeq 1100$ K,
- la température juste après le front de superdétonation est $T_{SD} \simeq 4050$ K,
- la température après la détente est $T_{\mathrm{Sout}} \simeq 3400$ K,
- la vitesse du choc est $D_S = 4560$ m/s,
- la vitesse de la superdétonation est $D_{SD} = 8980$ m/s,
- les luminances sont mesurées tous les $\Delta\tau = 50$ ns jusqu'à $\tau_{\max} = 2{,}05$ μs.

Les inconnues pour l'inversion sont la température des fronts T_S et T_{SD}, la vitesse de la superdétonation D_{SD}, la température soutenue après la détente T_{Sout}, les formes de la montée de la superdétonation et de la détente et la table de coefficients d'absorption pour les produits de détonation.

Méthodologie proposée

La méthodologie proposée s'inscrit dans un cadre général d'étude de problèmes inverses qui repose principalement sur le choix d'une paramétrisation du problème, lui-même guidé par l'analyse de sensibilité des mesures à inverser. Mais l'aspect original de la paramétrisation proposée par l'Inria est le fruit de deux remarques essentielles propres au présent problème.

Cadre général

Les difficultés du problème sont, du point de vue de l'inversion :

- **Quelles quantité d'information** les mesures de luminance contiennent-elles sur les profils de température $T(\xi, \tau)$ et sur ceux de coefficient d'absorption monochromatique $K_\lambda(\xi, \tau)$?
- **Quelle paramétrisation** de T et K_λ choisir pour l'inversion ?
  - Une paramétrisation trop riche permettra une interprétation physique des résultats d'inversion, mais risquera de mener à un problème d'inversion sous-déterminé, donc possédant plusieurs solutions et inutilisable pour l'interprétation physique !
  - Une paramétrisation avec trop peu de paramètres donnera des paramètres estimés uniques et stables, mais trop globaux pour permettre une interprétation physique détaillée.

Pour répondre à ces questions, la méthodologie que nous proposons met l'accent, dans sa première étape, sur l'analyse de sensibilité et la détermination d'indicateurs permettant de guider le choix des paramètres à estimer. Ce n'est que dans une deuxième étape que la paramétrisation définitive est choisie, en essayant de concilier, si c'est possible, le potentiel d'interprétation physique de la paramétrisation avec les contraintes de dimension dues à la nature des mesures et du modèle, que l'on a mises à jour dans la première étape. La mise en œuvre d'un algorithme de moindres carrés n'est alors plus qu'une formalité.

Cette méthodologie est basée sur les outils classiques d'analyse de la sensibilité et de décomposition en valeurs singulières, et sa mise en œuvre est ici rendue possible par l'utilisation de techniques performantes issues de la théorie du contrôle, qui permettent le calcul des dérivées à des coûts indépendant du nombre de variables (état adjoint).

Deux remarques essentielles

Une première remarque est que les profils de température tels que ceux correspondant aux quatre cas du marché présentent une série de plateaux, indiquant que les différents états successifs présents dans les produits de détonation sont simplement caractérisés par leur température. Ainsi, le coefficient d'absorption monochromatique K_λ, qui dépend a priori de l'espace et du temps, pourra-t-il être paramétré directement par la température (qui dépend bien de l'espace et du temps). Cette paramétrisation pouvant être, par exemple, une simple interpolation linéaire pour laquelle les valeurs de la table d'interpolation sont, bien sûr, également à retrouver.

Le principal inconvénient de ce choix est que nous serons amenés à interpoler entre les coefficients d'absorption du NM au repos et ceux des produits issus de la détonation. Cela a-t-il un sens ? Mais il s'agit là d'une difficulté intrinsèque du problème : que se passe-t-il physiquement aux températures concernées ? Un embryon de réponse viendra peut-être de la présente étude...

La seconde remarque est que ces profils de température présentent des chocs qui se forment et se propagent, et devraient donc pouvoir être modélisés par une loi de conservation scalaire. Les profils de température des trois premiers cas pourraient, bien sûr, être modélisés avec une simple formule faisant intervenir leurs différentes caractéristiques, mais cette technique est difficilement applicable au quatrième cas.

Le principal inconvénient de la paramétrisation par équation hyperbolique de réaction/advection est qu'elle ne permet pas de reproduire parfaitement les profils théoriques exacts des trois premiers cas, ajoutant ainsi un bruit de modélisation au problème inverse. Mais elle est néanmoins retenue pour son potentiel dans le cas générique, qui est plutôt la finalité de la présente étude.

Plan du document

Dans le premier chapitre, nous détaillons la mise en œuvre du problème directe : les différentes paramétrisations des profils de température et de coefficient d'absorption ainsi que de leurs dérivées. Dans le deuxième chapitre, nous présentons les éléments du problème inverse dans chaque cas du marché. Le troisième chapitre est dédié à l'analyse de sensibilité du modèle à inverser dans chacun des quatre cas du marché : d'abord localement par décomposition en valeurs singulières de la matrice jacobienne, puis globalement par tracé du critère des moindres carrés sur des segments dans l'espace des paramètres. Les résultats d'inversion sont exposés dans le quatrième chapitre pour chaque cas du marché. En annexe, sont regroupés les manuels des différentes routines du logiciel IPTemp développé en Matlab.

1 Paramétrisations

La paramétrisation du problème est réalisée en cinq modules intégrant le calcul des dérivées nécessaires à mise en œuvre de l'inversion.

Le critère des moindres carrés qui est utilisé pour l'inversion est intégré à la routine d'optimisation `lsqcurvefit` de MATLAB, il s'agit de la simple norme euclidienne au carré. Pour modifier cette norme, il nous suffit d'affecter une matrice de poids (diagonale) aux luminances. Cette normalisation intègre l'incertitude liée aux erreurs de mesure et au niveau de bruit. Si N_k est le nombre d'instants de mesure et N_j le nombre de longueurs d'onde utilisées, la dimension des luminances est $N_k N_j$. Soit, suivant les cas du marché, de l'ordre de plusieurs centaines à quelques milliers.

Les luminances sont calculées à partir de distributions spatio-temporelles de température et de coefficients d'absorption monochromatiques par résolution de l'équation différentielle du transfert radiatif dans un milieu se rétrécissant au cours du temps pour chaque longueur d'onde. Si N_i est le nombre de mailles en espace, la dimension de la température est de $N_k N_i$ et celle du coefficient d'absorption de $N_k N_i N_j$. Soit au total quelques centaines de milliers !

Les paramètres physiques que sont la température et le coefficient d'absorption sont normalisés par des valeurs de référence. Le premier niveau de paramétrisation consiste en la représentation fine de ces paramètres normalisés. La dimension reste au total de l'ordre de quelques centaines de milliers.

Le coefficient d'absorption est évalué à partir de la température par interpolation linéaire aux nœuds d'une table d'interpolation. Trois paramétrisations réduites du coefficient d'absorption sont proposées. Si N_l est le nombre de n œuds de température dans la table, la dimension du paramètre de coefficient d'absorption est successivement $N_l N_j$, $N_l + N_j - 1$ et 1. Le deuxième niveau de paramétrisation consiste en la représentation fine de la température et l'une des représentations réduites du coefficient d'absorption. La dimension reste de l'ordre de quelques dizaines de milliers.

La température est modélisée comme solution d'une loi de conservation scalaire. Une paramétrisation réduite de la température est proposée pour chaque cas du marché, modélisant chacune une classe de profils dans le domaine espace-temps. La dimension du paramètre de température est de 1 à 9 suivant les cas. Le troisième et dernier niveau de paramétrisation consiste en la représentation réduite de la température et du coefficient d'absorption. Cette fois-ci, la dimension totale est de 2 à quelques dizaines suivant les cas.

Ces cinq étapes sont présentées dans l'ordre inverse, de la paramétrisation de la température, la plus en amont, à la normalisation des luminances.

1.1 Paramétrisations réduites de la température

L'objet de cette section est la définition de la paramétrisation de la température normalisée

$$t = \varphi_t(m_t) \tag{6}$$

ainsi que du choix du jeu de paramètres m_t nécessaire à la reproduction des profils de température dans les quatre cas du marché, et du calcul de la matrice jacobienne de ses dérivées

$$\varphi_t'(m_t) = \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial m_t}(m_t)\right). \tag{7}$$

Nous proposons un jeu de paramètres différent par cas à traiter.

La paramétrisation réduite de la température est matérialisée par la routine d'initialisation `initmt` et par la routine `tdemt` correspondant à la fonction φ_t. Les deux modules `mod_foncf` et `mod_foncg` regroupent respectivement le calcul des fonctions f et g.

1.1.1 Loi de conservation scalaire

Les profils de température sont vus comme solution d'une loi de conservation scalaire, ou équation hyperbolique de réaction-advection à une dimension d'espace. Une telle loi pour un champ scalaire $u(\zeta, \tau)$ est de la forme

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial \tau}(\zeta,\tau) + \dfrac{\partial}{\partial \zeta}\left(f(u(\zeta,\tau))\right) = g(u(\zeta,\tau)) & \zeta \in [0, \zeta_{\max}],\ \tau \in [0, \tau_{\max}], \\ u(\zeta, 0) = u_i(\zeta) & \zeta \in [0, \zeta_{\max}], \\ u(0, \tau) = u_g(\tau) & \tau \in [0, \tau_{\max}], \end{cases} \tag{8}$$

où u_i représente la condition initiale, u_g la condition à la limite à gauche et les fonctions f et g les termes d'advection (ou de transport) et de réaction (ou terme source).

Les lois de conservation sont largement étudiées dans la littérature et, tout particulièrement pour les lois scalaires, leurs comportement est bien compris. Nous pouvons par exemple citer [3, 4, 1]. Nous retiendrons principalement que le terme d'advection permet de contrôler la vitesse des ondes de choc et que le terme de réaction, ou terme source, permet de contrôler l'apparition de ces chocs. Plus précisément, nous utiliserons les résultats suivants :

- la vitesse de propagation d'un choc est déterminée par la pente de la sécante à la courbe représentative de la fonction f entre les valeurs de part et d'autre du choc,
- pour un point régulier, la vitesse de transport est égale à la pente de la tangente en ce point,
- localement, les solutions de l'équation aux dérivées partielles sont données implicitement par $\Phi(\zeta, \tau, u) = 0$ où Φ est une intégrale première arbitraire, telle que $\frac{\partial \Phi}{\partial u}$ ne s'annule pas, du système différentiel caractéristique associé

$$\frac{d\tau}{1} = \frac{d\zeta}{f'(u)} = \frac{du}{g(u)}. \tag{9}$$

D'un point de vie pratique, nous avons besoin de paramétrer des profils de température qui sont définis sur un domaine spatial se rétrécissant au cours du temps. Initialement, afin d'éviter des interpolations, nous avions envisagé de résoudre la loi de conservation scalaire (8) sur un maillage espace-temps trapézoïdal qui suit cette déformation. Cependant, les difficultés soulevées par l'établissement d'un schéma numérique sur ce maillage non rectangulaire étaient hors du cadre de la présente étude. Nous avons donc plutôt choisi de résoudre l'équation (8) sur un maillage rectangulaire puis de calculer les valeurs de température qui nous intéressent par interpolation linéaire en espace. Les profils de température étant même considérés dans le repère mobile lié au déplacement du piston, ce qui permet d'imposer la condition à la limite à gauche pour la loi de conservation en un point qui reste fixe au cours du temps. À condition, bien sûr, de considérer les vitesses des fronts également dans ce repère mobile, et donc de leur retrancher la vitesse du piston.

Concernant la résolution numérique des lois de conservation, la littérature est tout aussi abondante, et nous pouvons également citer par exemple [4, 1]. Nous utilisons un schéma de Godunov, simplifié par l'hypothèse que la fonction f est croissante (les fronts avancent dans le sens des ζ croissants), ou schéma "upwind", ou encore schéma décentré arrière. Ce schéma d'ordre 1 a été choisi par soucis de simplicité de la mise en œuvre, car il ne faut pas oublier qu'il faudra dériver le schéma par rapport aux paramètres que sont les conditions initiale et à la limite à gauche et les fonctions dans les termes d'advection et de réaction. Ainsi des schémas d'ordre supérieur impliquant des limiteur de pente et permettant de mieux contrôler la diffusion numérique sortent du cadre de cette première étude.

Pour un tel schéma du premier ordre, la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (ou CFL) permettant d'assurer sa stabilité numérique est de la forme

$$V_{\max} \frac{\Delta \tau'_{\max}}{h'} < 1 \tag{10}$$

où $V_{\max}$ est le maximum de la dérivée de f, $\Delta \tau'_{\max}$ est le pas de temps maximum et h' le pas d'espace (supposé constant). Cette condition exprime le fait que les caractéristiques issues du bord inférieur d'une maille sortent nécessairement par l'un des deux cotés latéraux (suivant le signe de la dérivée de f) et non par le bord supérieur.

Pour les schémas d'ordre 1, la diffusion numérique (qui nuit à la verticalité des fronts qui se propagent) ne peut être contrôlée que par l'emploi d'un nombre suffisant de point en espace $N_{i'}$ vérifiant

$$N_{i'} = \frac{\zeta_{\max}}{h'} \geq N_{i' \min} \tag{11}$$

pour un nombre de points minimum $N_{i' \min}$ approprié (par exemple 1000), et d'un maillage qui satisfait au mieux la condition de stabilité (10). La diffusion numérique a tendance à lisser les chocs, c'est-à-dire à retarder les points situés en haut du front tout en accélérant ceux du bas. Il est donc également possible d'amoindrir la diffusion en "creusant" la fonction f sous la sécante qui nous intéresse (dont la pente représente la vitesse souhaitée du front), de façon convexe ou non. En effet, cela retardera les points situés au pied du front et accélérera ceux du haut, et comme la solution reste une fonction qui ne peut être multivaluée, le front est ainsi redressé. D'une façon imagée, les points du haut se "jètent" dans le front ! Bien sûr, cela ne peut avoir l'effet escompté que si le choc est suivi d'un plateau, agissant comme une réserve de points à cette valeur ; cela n'est donc pas approprié à la modélisation d'une détente.

1.1.2 Mise en œuvre numérique

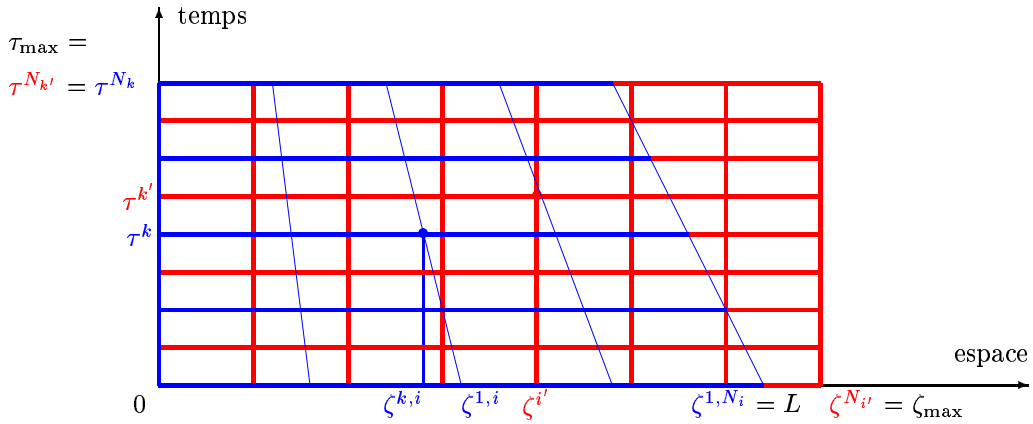

FIG. 6 – *Maillages dans le repère mobile lié au déplacement de l'interface impacteur/NM. Le maillage trapézoïdal pour la résolution de l'équation de transfert radiatif est en bleu et le maillage rectangulaire pour la résolution de la loi de conservation est en rouge.*

Supposons que les profils de température à modéliser sont définis aux nœuds d'un maillage espace-temps trapézoïdal inscrit dans le rectangle $[0, L] \times [0, \tau_{\max}]$, voir Figure 6. Plus précisément, t est la collection des $t^{k,i} = t(\zeta^{k,i-\frac{1}{2}}, \tau^k)$ pour $i = 1, \ldots, N_i$ et $k = 1, \ldots, N_k$ où les τ^k forment une subdivision de l'intervalle temporel $[0, \tau_{\max}]$ et les $\zeta^{k,i}$, pour $i = 0, \ldots, N_i$, constituent une subdivision de l'intervalle spatial $[0, L - V_p\tau^k]$ (V_p étant la vitesse du piston et $\zeta^{k,i-\frac{1}{2}}$ le centre de la maille spatiale $[\zeta^{k,i-1}, \zeta^{k,i}]$). Posons $\Delta\tau_{\max} = \max_{k=2,\ldots,N_k}(\tau^k - \tau^{k-1})$.

Le maillage rectangulaire sur lequel nous voulons résoudre la loi de conservation (8) est noté $(\zeta^{i'}, \tau^{k'})$, pour $i' = 0, \ldots, N_{i'}$ et $k' = 1, \ldots, N_{k'}$, voir Figure 6. Il est supposé obtenu en temps par un raffinement d'un facteur N_τ (chaque maille en temps est subdivisée en N_τ sous-intervalles de même longueur) et régulier en espace de pas h'. La condition de CFL (10), satisfaite à un petit ε de sécurité près, ainsi que le nombre minimal de points en espace (11) imposent

$$N_{i'\,\min}\frac{V_{\max}\Delta\tau_{\max}}{\zeta_{\max}N_\tau} \leq 1 - \varepsilon. \tag{12}$$

Nous prenons donc

$$N_\tau = \left\lceil N_{i'\,\min}\frac{V_{\max}\Delta\tau_{\max}}{(1-\varepsilon)\zeta_{\max}} \right\rceil \qquad \text{et} \qquad h' = \frac{V_{\max}\Delta\tau_{\max}}{(1-\varepsilon)N_\tau} \tag{13}$$

où $\lceil . \rceil$ représente la fonction plafond[1].

Sur ce maillage, nous posons $u^{k',i'} = u(\zeta^{i'-\frac{1}{2}}, \tau^{k'})$ où $\zeta^{i'-\frac{1}{2}}$ est le centre de la maille spatiale $[\zeta^{i'-1}, \zeta^{i'}]$. Le schéma pour la résolution numérique de l'équation (8) s'écrit alors, pour $i' = 1, \ldots, N_{i'}$ et $k' = 2, \ldots, N_{k'}$,

$$\left\{\begin{array}{l} u^{1,i'} = u_i(\zeta^{i'-\frac{1}{2}}), \\ u^{k'-1,0} = u_g(\tau^{k'-\frac{1}{2}}), \\ u^{k',i'} = u^{k'-1,i'} + \Delta\tau^{k'-\frac{1}{2}}\left(g(u^{k'-1,i'}) - \dfrac{f(u^{k'-1,i'}) - f(u^{k'-1,i'-1})}{h'}\right) \end{array}\right. \tag{14}$$

où $\tau^{k'-\frac{1}{2}}$ représente le centre de la maille temporelle $[\tau^{k'-1}, \tau^{k'}]$ et $\Delta\tau^{k'-\frac{1}{2}}$ sa durée.

Les valeurs des profils de température sur le maillage trapézoïdal sur lequel sera résolue l'équation du transfert radiatif sont ensuite obtenues par interpolation linéaire en espace aux instants voulus, pour $k = 1, \ldots, N_k$,

$$(t^{k,i})_{i=1,\ldots,N_i} = A^k(u^{N_\tau(k-1)+1,i'})_{i'=1,\ldots,N_{i'}} \tag{15}$$

où A^k est la matrice d'interpolation à l'instant τ^k (réalisé par la routine MATLAB `interp1q`). Ces valeurs sont enfin tronquées aux bornes $t_{\min}$ et $t_{\max}$.

1. $\lceil x \rceil = n$ pour $n - 1 < x \leq n$.

1.1.3 Dérivation

Le schéma dérivé s'écrit simplement, pour $i' = 1, \ldots, N_{i'}$ et $k' = 2, \ldots, N_{k'}$,

$$
(16) \qquad \left\{ \begin{array}{l}
\delta u^{1,i'} = \delta u_i(\zeta^{i'-\frac{1}{2}}), \\
\delta u^{k'-1,0} = \delta u_g(\tau^{k'-\frac{1}{2}}), \\
\delta u^{k',i'} = \left(1 + \Delta\tau^{k'-\frac{1}{2}} g'(u^{k'-1,i'})\right) \delta u^{k'-1,i'} \\
\qquad + \Delta\tau^{k'-\frac{1}{2}} \left(\delta g(u^{k'-1,i'}) - \dfrac{\delta f(u^{k'-1,i'}) - \delta f(u^{k'-1,i'-1})}{h'} \right. \\
\qquad \left. - \dfrac{f'(u^{k'-1,i'})\delta u^{k'-1,i'} - f'(u^{k'-1,i'-1})\delta u^{k'-1,i'-1}}{h'} \right).
\end{array} \right.
$$

L'interpolation étant linéaire, sa dérivée est égale à elle-même. L'opération de troncature n'est pas dérivable aux points de valeur égale à l'une des bornes, nous imposons la valeur 0 aux points tronqués.

1.1.4 Paramétrisations de u_i, u_g, f et g

Il reste maintenant à étudier le comportement de la solution de la loi de conservation en fonction des conditions initiale u_i et à la limite à gauche u_g ainsi que des fonctions f et g intervenant dans les termes d'advection et de réaction. Cela guidera, à la sous-section suivante, notre choix pour le jeu de paramètres de température m_t permettant de définir une classe de profils de température solutions de la loi de conservation ressemblants qualitativement aux profils théoriques des quatre cas du marché.

Pour la dérivation, il faudra résoudre une loi de conservation discrète par composante du paramètre de température m_t en remplaçant les termes δu_i, δu_g, δf et δg par leur dérivée partielle par rapport à cette composante.

Les profils de température souhaités sont caractérisés par les éléments génériques suivants :

- la valeur minimale t_m,
- la valeur du front secondaire t_2,
- la valeur soutenue en arrière de la détente t_3,
- la valeur maximale t_M (ou valeur du front principal),
- la vitesse du front secondaire V_2,
- la vitesse du front principal V_M,
- l'instant d'apparition du front principal τ_1,
- le délai de retour à la valeur soutenue τ_3.

La condition initiale Suivant les cas, l'état initial est soit une constante égale à la valeur minimale t_m (cas 1, 2 et 4), soit un créneau entre les valeurs du front secondaire t_2 et minimale t_m (cas 3).

Nous proposons donc deux paramétrisations de la condition initiale,

$$
(17) \qquad u_{i1}(\zeta) \equiv t_m
$$

$$
(18) \qquad u_{i2}(\zeta) = \left\{ \begin{array}{ll} t_2 & \text{si } \zeta < V_2\tau_1, \\ t_m & \text{si } V_2\tau_1 \leq \zeta, \end{array} \right.
$$

dont la dérivation donne simplement

$$
(19) \qquad \delta u_{i1}(\zeta) \equiv 0,
$$

$$
(20) \qquad \delta u_{i2}(\zeta) = \left\{ \begin{array}{ll} \delta t_2 & \text{si } \zeta < V_2\tau_1, \\ 0 & \text{si } V_2\tau_1 \leq \zeta, \end{array} \right.
$$

puisque la valeur minimale t_m est une constante.

La condition à la limite à gauche La valeur à l'interface impacteur/NM est soit une constante égale à la valeur maximale t_M (cas 1), soit une fonction décroissante de la valeur maximale t_M à la valeur soutenue t_3 pendant le délai τ_3 (cas 2 et 3), soit une fonction croissante de la valeur du front secondaire t_2 à la valeur soutenue t_3 également pendant le délai τ_3 (cas 4).

Nous proposons donc trois paramétrisations de la condition à la limite à gauche et de sa dérivée en temps (utilisée dans le terme source),

$$u_{g1}(\tau) \equiv t_M, \tag{21}$$

$$u'_{g1}(\tau) \equiv 0, \tag{22}$$

$$u_{g2}(\tau) = \begin{cases} t_3 + (t_M - t_3)(1-\eta_3)^2 & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ t_3 & \text{si } 1 \leq \eta_3, \end{cases} \tag{23}$$

$$u'_{g2}(\tau) = \begin{cases} -2(t_M - t_3)\dfrac{1-\eta_3}{\tau_3} & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ 0 & \text{si } 1 \leq \eta_3, \end{cases} \tag{24}$$

$$u_{g3}(\tau) = \begin{cases} t_2 + (t_3 - t_2)\eta_3^{c_g} & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ t_3 & \text{si } 1 \leq \eta_3, \end{cases} \tag{25}$$

$$u'_{g3}(\tau) = \begin{cases} (t_3 - t_2)c_g\dfrac{\eta_3^{c_g-1}}{\tau_3} & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ 0 & \text{si } 1 \leq \eta_3, \end{cases} \tag{26}$$

avec $\eta_3 = \dfrac{\tau}{\tau_3}$. Et leur dérivation donne

$$\delta u_{g1}(\tau) \equiv \delta t_M, \tag{27}$$

$$\delta u'_{g1}(\tau) \equiv 0, \tag{28}$$

$$\delta u_{g2}(\tau) = \begin{cases} (1-\eta_3)^2\delta t_M \\ \quad +(2-\eta_3)\eta_3\delta t_3 \\ \quad +2(t_M - t_3)\dfrac{(1-\eta_3)\eta_3}{\tau_3}\delta\tau_3 & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ \delta t_3 & \text{si } 1 \leq \eta_3, \end{cases} \tag{29}$$

$$\delta u'_{g2}(\tau) = \begin{cases} -2\dfrac{1-\eta_3}{\tau_3}\delta t_M \\ \quad +2\dfrac{1-\eta_3}{\tau_3}\delta t_3 \\ \quad +2(t_M - t_3)\dfrac{1-2\eta_3}{\tau_3^2}\delta\tau_3 & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ 0 & \text{si } 1 \leq \eta_3, \end{cases} \tag{30}$$

$$\delta u_{g3}(\tau) = \begin{cases} \eta_3^{c_g}\delta t_3 \\ \quad +(1-\eta_3^{c_g})\delta t_2 \\ \quad +(t_3 - t_2)\log(\eta_3)\eta_3^{c_g}\delta c_g \\ \quad +(t_3 - t_2)c_g\dfrac{\eta_3^{c_g}}{\tau_3}\delta\tau_3 & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ \delta t_3 & \text{si } 1 \leq \eta_3. \end{cases} \tag{31}$$

$$\delta u'_{g3}(\tau) = \begin{cases} c_g\dfrac{\eta_3^{c_g-1}}{\tau_3}\delta t_3 \\ \quad -c_g\dfrac{\eta_3^{c_g-1}}{\tau_3}\delta t_2 \\ \quad +(t_3 - t_2)\dfrac{\eta_3^{c_g-1}}{\tau_3}(1 + c_g\log(\eta_3))\delta c_g \\ \quad -(t_3 - t_2)c_g^2\dfrac{\eta_3^{c_g}}{\tau_3^2}\delta\tau_3 & \text{si } 0 < \eta_3 < 1, \\ 0 & \text{si } 1 \leq \eta_3. \end{cases} \tag{32}$$

Le terme d'advection Pour les deux premiers cas, les profils de température théoriques présentent un seul front (entre la valeurs minimale t_m et la valeur maximale t_M) avançant à la vitesse V_M. Une fonction f présentant

une sécante de pente V_M entre ces valeurs est donc requise. Elle peut très bien être strictement sous cette sécante pour maîtriser l'effet de diffusion numérique dans le cas 1. Cependant, dans le second cas, le front est suivi d'une détente (de la valeur maximale t_M à la valeur soutenue t_3). Il est alors nécessaire que la fonction soit linéaire dans cet intervalle.

Dans les deux cas suivants, les profils théoriques présentent deux fronts se propageant à deux vitesses différentes : le premier (entre la valeur minimales t_m et la valeur du plateau secondaire t_2) à la vitesse V_2 et le second (entre la valeur du plateau secondaire t_2 et la valeur maximale t_M) à la vitesse $V_M > V_2$. Il faut donc construire une fonction f présentant une sécante de pente V_2 entre les valeurs t_m et t_2 et une sécante de pente V_M entre les valeurs t_2 et t_M. Ensuite, une détente (de la valeur maximale t_M à la valeur soutenue $t_3 > t_2$) suit le front principal. Dans le cas 3, cette détente est déjà établie, comme dans le cas 2, il faut donc que la fonction soit linéaire entre les valeurs t_3 et t_M. Par contre, dans le cas 4, la présence d'un terme source permet de se passer de cette partie linéaire ; ce qui devrait favoriser la formation du front principal.

Nous proposons donc quatre paramétrisations du terme d'advection (une par cas à traiter),

$$f_1(u) = \begin{cases} V_M(t_M - t_m)(1-\alpha_f)\eta_{mM} & \text{si } \eta_{mM} \le 0, \\ V_M(t_M - t_m)(1-\alpha_f(1-\eta_{mM}))\eta_{mM} & \text{si } 0 < \eta_{mM} < 1, \\ V_M(t_M - t_m)((1+\alpha_f)\eta_{mM} - \alpha_f) & \text{si } 1 \le \eta_{mM}, \end{cases} \tag{33}$$

$$f_2(u) = \begin{cases} V_M(t_3 - t_m)(1-\alpha_f)\eta_{m3} & \text{si } \eta_{m3} \le 0, \\ V_M(t_3 - t_m)(1-\alpha_f(1-\eta_{m3})^2)\eta_{m3} & \text{si } 0 < \eta_{m3} < 1, \\ V_M(t_3 - t_m)\eta_{m3} & \text{si } 1 \le \eta_{m3}, \end{cases} \tag{34}$$

$$f_3(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } \eta_{m2} \le 0, \\ V_2(t_2 - t_m)(2-\eta_{m2})\eta_{m2}^2 & \\ \quad -(V_M - V_2)(t_2 - t_m)(1-\alpha_f)(1-\eta_{m2})\eta_{m2}^2 & \text{si } 0 < \eta_{m2} \le 1, \\ V_2(t_2 - t_m) + V_M(t_3 - t_2)\eta_{23} & \\ \quad -(V_M - V_2)(t_3 - t_2)\alpha_f(1-\eta_{23})^2\eta_{23} & \text{si } 0 < \eta_{23} < 1, \\ V_2(t_2 - t_m) + V_M(t_3 - t_2)\eta_{23} & \text{si } 1 \le \eta_{23} \end{cases} \tag{35}$$

$$f_4(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } \eta_{m2} \le 0, \\ V_2(t_2 - t_m)(2-\eta_{m2})\eta_{m2}^2 & \\ \quad -(V_M - V_2)(t_2 - t_m)(1-\alpha_f)(1-\eta_{m2})\eta_{m2}^2 & \text{si } 0 < \eta_{m2} \le 1, \\ V_2(t_2 - t_m) + V_M(t_M - t_2)\eta_{2M} & \\ \quad -(V_M - V_2)(t_M - t_2)\alpha_f(1-\eta_{2M})^2\eta_{2M} & \text{si } 0 < \eta_{2M} < 1, \\ V_2(t_2 - t_m) + V_M(t_M - t_2)\eta_{2M} & \text{si } 1 \le \eta_{2M} \end{cases} \tag{36}$$

avec $\eta_{mM} = \dfrac{u - t_m}{t_M - t_m}$, $\eta_{m3} = \dfrac{u - t_m}{t_3 - t_m}$, $\eta_{m2} = \dfrac{u - t_m}{t_2 - t_m}$, $\eta_{23} = \dfrac{u - t_2}{t_3 - t_2}$ et $\eta_{2M} = \dfrac{u - t_2}{t_M - t_2}$. La dérivation donne

$$f_1'(u) = \begin{cases} V_M(1-\alpha_f) & \text{si } \eta_{mM} \le 0, \\ V_M(1-\alpha_f(1-2\eta_{mM})) & \text{si } 0 < \eta_{mM} < 1, \\ V_M(1+\alpha_f) & \text{si } 1 \le \eta_{mM}, \end{cases} \tag{37}$$

$$\delta f_1(u) = \begin{cases} (t_M - t_m)(1-\alpha_f)\eta_{mM}\delta V_M & \text{si } \eta_{mM} \le 0, \\ -V_M\alpha_f\eta_{mM}^2\delta t_M & \\ \quad +(t_M - t_m)(1-\alpha_f(1-\eta_{mM}))\eta_{mM}\delta V_M & \text{si } 0 < \eta_{mM} < 1, \\ -V_M\alpha_f\delta t_M & \\ \quad +(t_M - t_m)((1+\alpha_f)\eta_{mM} - \alpha_f)\delta V_M & \text{si } 1 \le \eta_{mM}, \end{cases} \tag{38}$$

$$f_2'(u) = \begin{cases} V_M(1-\alpha_f) & \text{si } \eta_{m3} \le 0, \\ V_M(1-\alpha_f(1-\eta_{m3})(1-3\eta_{m3})) & \text{si } 0 < \eta_{m3} < 1, \\ V_M & \text{si } 1 \le \eta_{m3}, \end{cases} \tag{39}$$

$$\delta f_2(u) = \begin{cases} (t_3 - t_m)(1-\alpha_f)\eta_{m3}\delta V_M & \text{si } \eta_{m3} \le 0, \\ (t_3 - t_m)(1-\alpha_f(1-\eta_{m3})^2)\eta_{m3}\delta V_M & \\ \quad -2V_M\alpha_f(1-\eta_{m3})\eta_{m3}^2\delta t_3 & \text{si } 0 < \eta_{m3} < 1, \\ (t_3 - t_m)\eta_{m3}\delta V_M & \text{si } 1 \le \eta_{m3}, \end{cases} \tag{40}$$

$$f_3'(u) = \begin{cases} 0 & \text{si } \eta_{m2} \le 0, \\ (V_2(4-3\eta_{m2}) & \\ \quad -(V_M - V_2)(1-\alpha_f)(2-3\eta_{m2}))\eta_{m2} & \text{si } 0 < \eta_{m2} \le 1, \\ V_M - (V_M - V_2)\alpha_f(1-\eta_{23})(1-3\eta_{23}) & \text{si } 0 < \eta_{23} < 1, \\ V_M & \text{si } 1 \le \eta_{23}, \end{cases} \tag{41}$$

$$
(42) \qquad \delta f_3(u) = \begin{cases}
0 & \text{si } \eta_{m2} \leq 0, \\
-(t_2 - t_m)(1-\alpha_f)(1-\eta_{m2})\eta_{m2}^2 \delta V_M & \\
\quad -(2V_2(1-\eta_{m2}) & \\
\qquad -(V_M - V_2)(1-\alpha_f)(1-2\eta_{m2}))\eta_{m2}^2 \delta t_2 & \text{si } 0 < \eta_{m2} \leq 1, \\
(t_3 - t_2)(1-\alpha_f(1-\eta_{23}))^2 \eta_{23} \delta V_M & \\
\quad -2(V_M - V_2)\alpha_f(1-\eta_{23})\eta_{23}^2 \delta t_3 & \\
\quad -(V_M - V_2)(1-\alpha_f(1-\eta_{23})^2(1-2\eta_{23}))\delta t_2 & \text{si } 0 < \eta_{23} < 1, \\
(t_3 - t_2)\eta_{23}\delta V_M & \\
\quad -(V_M - V_2)\delta t_2 & \text{si } 1 \leq \eta_{23},
\end{cases}
$$

$$
(43) \qquad f_4'(u) = \begin{cases}
0 & \text{si } \eta_{m2} \leq 0, \\
(V_2(4-3\eta_{m2}) & \\
\quad -(V_M - V_2)(1-\alpha_f)(2-3\eta_{m2}))\eta_{m2} & \text{si } 0 < \eta_{m2} \leq 1, \\
V_M - (V_M - V_2)\alpha_f(1-\eta_{2M})(1-3\eta_{2M}) & \text{si } 0 < \eta_{2M} < 1, \\
V_M & \text{si } 1 \leq \eta_{2M},
\end{cases}
$$

$$
(44) \qquad \delta f_4(u) = \begin{cases}
0 & \text{si } \eta_{m2} \leq 0, \\
-(t_2 - t_m)(1-\alpha_f)(1-\eta_{m2})\eta_{m2}^2 \delta V_M & \\
\quad -(2V_2(1-\eta_{m2}) & \\
\qquad -(V_M - V_2)(1-\alpha_f)(1-2\eta_{m2}))\eta_{m2}^2 \delta t_2 & \text{si } 0 < \eta_{m2} \leq 1, \\
-2(V_M - V_2)\alpha_f(1-\eta_{2M})\eta_{2M}^2 \delta t_M & \\
\quad +(t_M - t_2)(1-\alpha_f(1-\eta_{2M}))^2 \eta_{2M}\delta V_M & \\
\quad -(V_M - V_2)(1-\alpha_f(1-\eta_{2M})^2(1-2\eta_{2M}))\delta t_2 & \text{si } 0 < \eta_{2M} < 1, \\
(t_M - t_2)\eta_{2M}\delta V_M & \\
\quad -(V_M - V_2)\delta t_2 & \text{si } 1 \leq \eta_{2M},
\end{cases}
$$

Le maximum de la dérivée de la fonction f_1 est $V_M(1+\alpha_f)$, celui de la dérivée de f_2 est $V_M\left(1+\frac{\alpha_f}{3}\right)$ et celui de la dérivée de f_3 est $V_M\left(1+\frac{\alpha_f}{3}\right) - V_2\frac{\alpha_f}{3}$.

Le degré de liberté α_f, lorsqu'il croît de 0 à 1, permet de "creuser" la fonction f sous sa sécante. Les Figures 7 à 10 montrent l'effet de ce "creusement" pour une CFL sous-optimale (0,99) et une moins favorable (0,9).

Pour les trois premiers cas, le nombre de points en espace étant élevé (de l'ordre de 1000), l'emploi d'une condition de stabilité sous-optimale (en haut à gauche) permet de bien contrôler la diffusion numérique du schéma sans creuser la fonction ($\alpha_f = 0$). Cependant une telle condition de stabilité n'est accessible que si l'on connaît la valeur maximale de la dérivée de la fonction f ; ce qui n'est pas le cas dans le cas 3, pour lequel la vitesse du front principal est également recherchée. Il faut alors considérer la borne supérieure de ce paramètre et donc utiliser une condition de stabilité qui s'éloigne de la valeur optimale 1. Pour une condition de stabilité moins favorable (en haut à droite), la diffusion numérique à tendance à lisser le front, et donc à rogner le pic précédent la détente. Creuser la fonction, en prenant $\alpha_f = 0{,}5$ puis 1, permet de rétablir un front vertical, mais au détriment du pic qui précède l'éventuelle détente.

Pour le cas 4, la présence d'un terme source change la situation puisqu'il devient possible de régénérer les points qui sont "tombés" dans le front.

Le terme de réaction Dans les trois premiers cas, les profils de température théoriques ne présentent que des front établis qui se propagent et il n'est pas nécessaire de prévoir de terme source ; sauf peut-être pour contrebalancer les effets néfastes sur la détente du "creusement" de la fonction f sous sa sécante (voir les Figures 8 et 9), mais cela nécessiterait de nouveaux développements.

Dans le dernier cas, les profils de température génériques présentent l'apparition du front de superdétonation et de la détente. Il est donc nécessaire d'insuffler de l'énergie au système entre la valeur du front secondaire t_2 et la valeur à la limite à gauche u_g (elle-même entre cette même valeur du front secondaire t_2 et la valeur soutenue t_3), ainsi qu'entre la valeur soutenue t_3 et la valeur maximale t_M. Il est raisonnable de supposer que chacun des termes est une fonction croissante de la température, et que pour le premier (associé à l'apparition du front de superdétonation), la valeur maximum en u_g soit $\frac{\partial u_g}{\partial \tau}$ pour assurer la formation d'un plateau suivant la valeur à la limite à gauche (un tel plateau à gauche vérifie $u = u_g$ et $\frac{\partial u}{\partial \zeta} = 0$, l'équation donne alors $g(u_g) = \frac{\partial u_g}{\partial \tau}$).

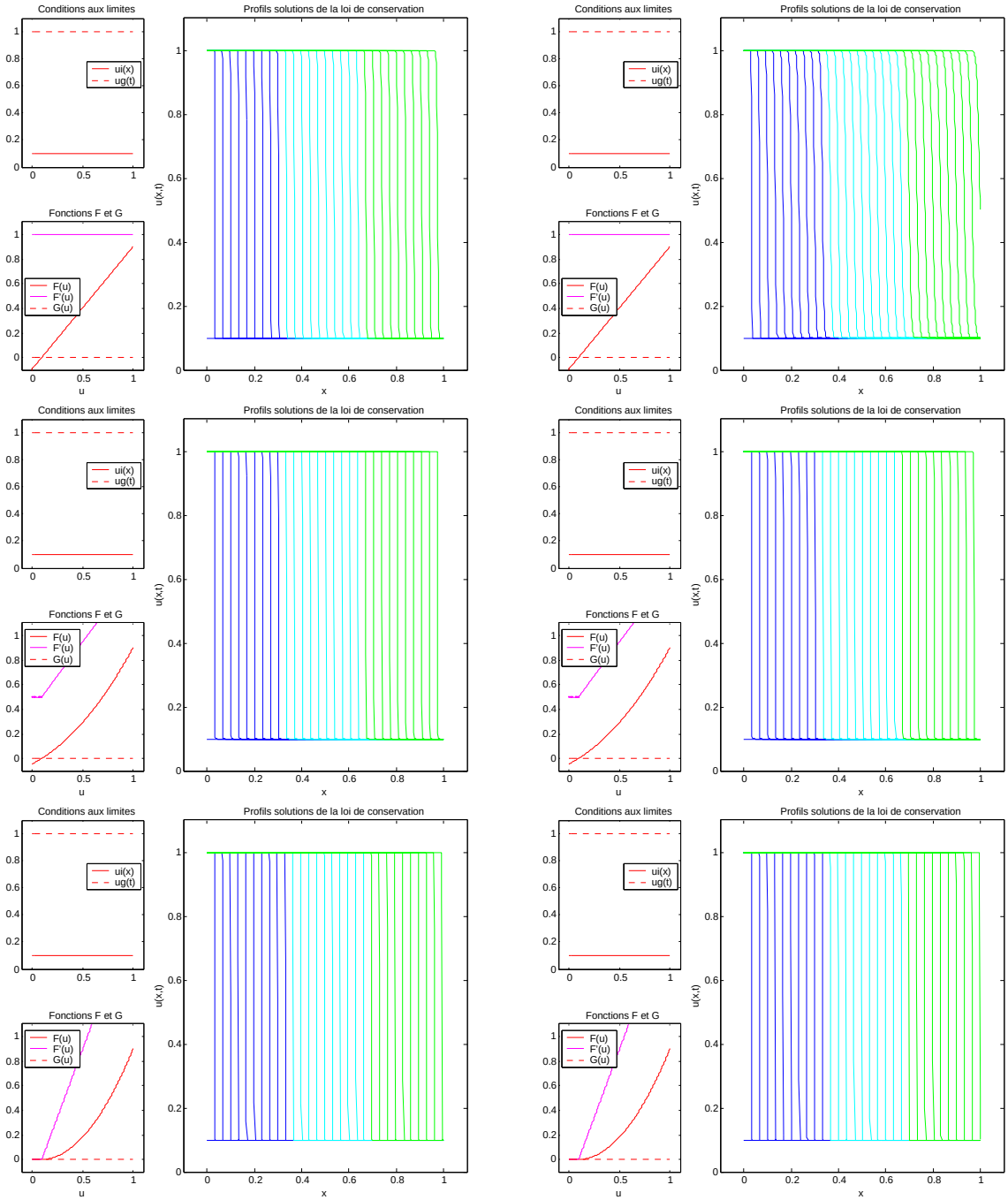

FIG. 7 – *Classe de profils modélisés pour les choix (17), (21), (33) et (45) correspondant au cas 1 avec* $t_M = 1$, $t_m = 0{,}1$ *et* $V_M = 1$ ($\zeta_{\max} = \tau_{\max} = 1$). *De haut en bas,* $\alpha_f = 0$, $0{,}5$ *puis 1. À gauche, CFL = 0,99, et à droite, CFL = 0,9. Au cours du temps, les profils sont d'abord tracés en bleu foncé, puis en bleu clair et enfin en vert.*

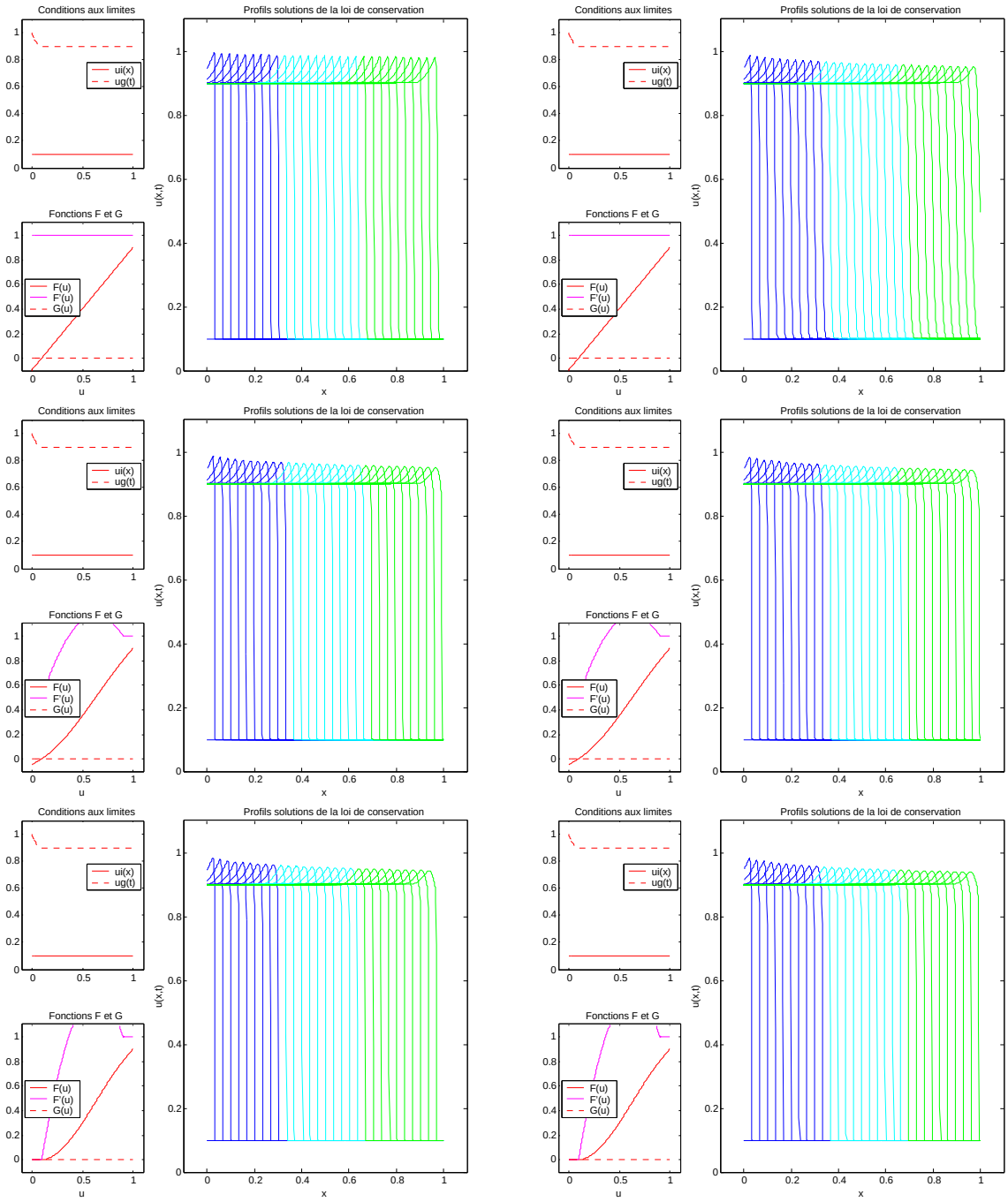

FIG. 8 – *Classe de profils modélisés pour les choix (17), (23), (34) et (45) correspondant au cas 2 avec* $t_M = 1$, $t_3 = 0{,}9$, $t_m = 0{,}1$, $V_M = 1$ *et* $\tau_3 = 0{,}1$ ($\zeta_{\max} = \tau_{\max} = 1$). *De haut en bas,* $\alpha_f = 0$, $0{,}5$ *puis 1. À gauche, CFL = 0,99, et à droite, CFL = 0,9. Au cours du temps, les profils sont d'abord tracés en bleu foncé, puis en bleu clair et enfin en vert.*

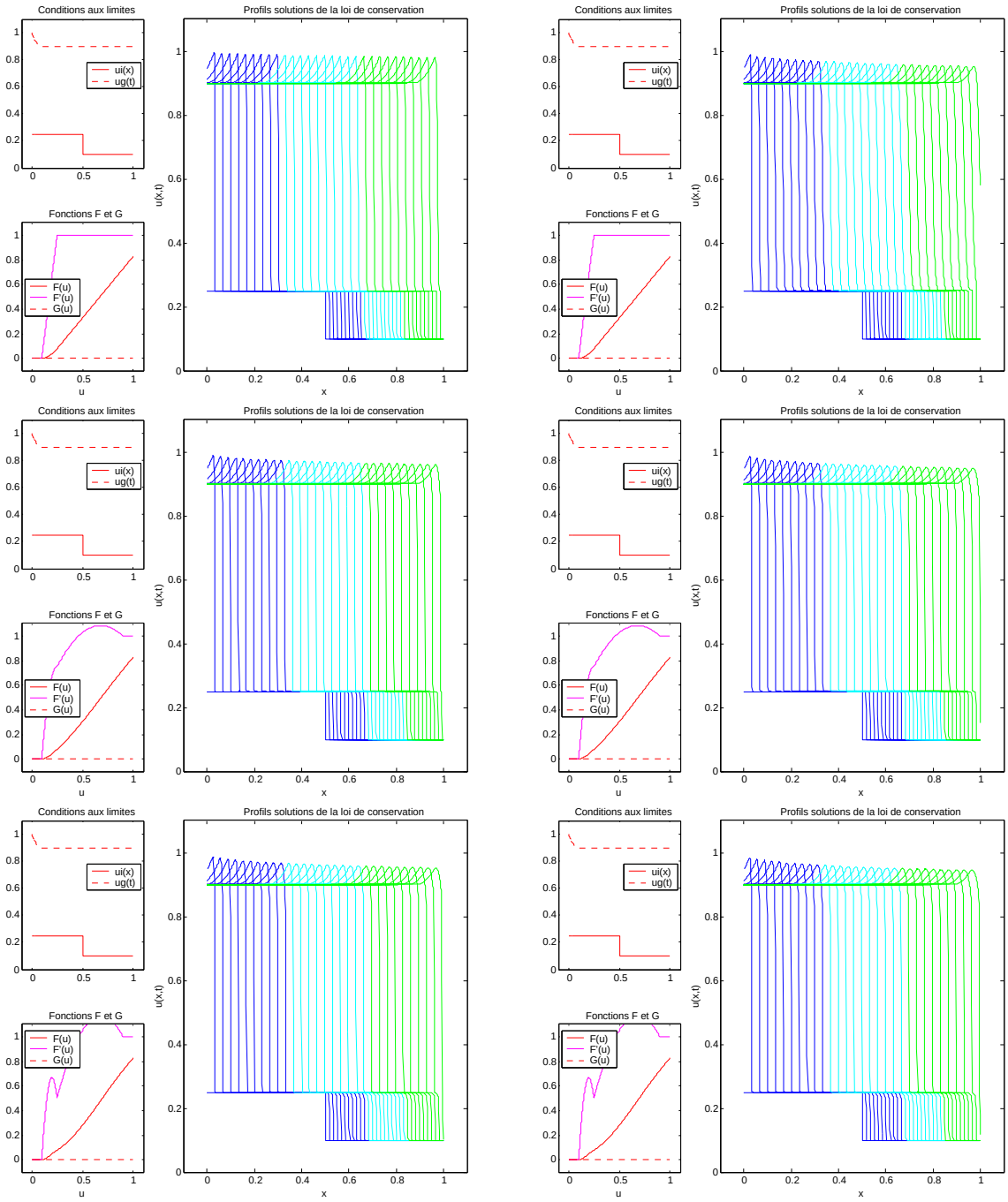

FIG. 9 – *Classe de profils modélisés pour les choix (18), (23), (35) et (45) correspondant au cas 3 avec* $t_M = 1$, $t_3 = 0{,}9$, $t_2 = 0{,}25$, $t_m = 0{,}1$, $V_M = 1$, $V_2 = 0{,}5$ *et* $\tau_3 = 0{,}1$ ($\zeta_{\max} = \tau_{\max} = 1$). *De haut en bas,* $\alpha_f = 0$, $0{,}5$ *puis 1. À gauche, CFL = 0,99, et à droite, CFL = 0,9. Au cours du temps, les profils sont d'abord tracés en bleu foncé, puis en bleu clair et enfin en vert.*

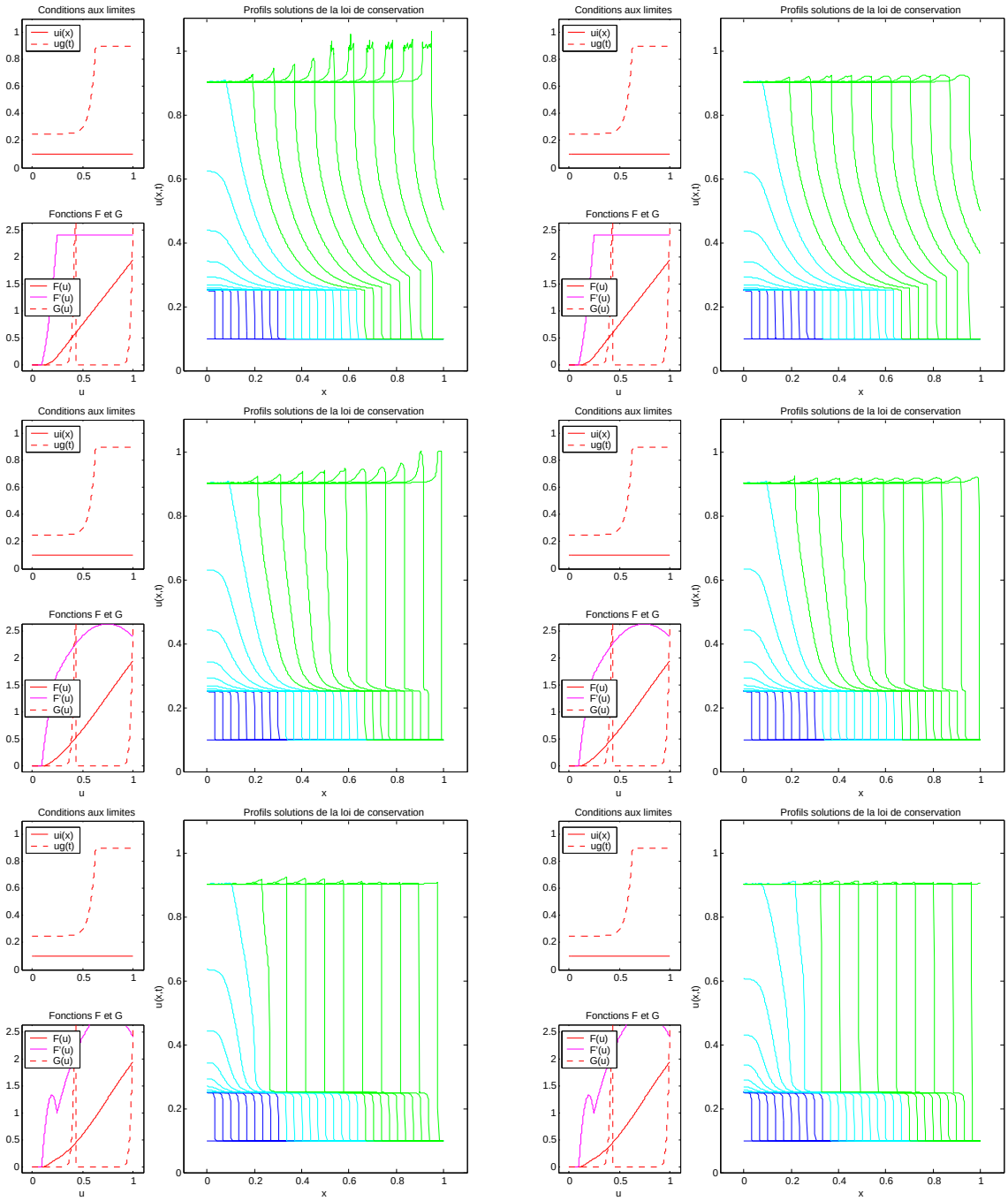

FIG. 10 – *Classe de profils modélisés pour les choix (17), (25), (36) et (46) correspondant au cas 4 avec* $t_M = 1$, $t_3 = 0{,}9$, $t_2 = 0{,}25$, $t_m = 0{,}1$, $V_M = 2{,}4$, $V_2 = 1$, $c_g = 12$, $\tau_3 = 0{,}63$, $c_2 = 8$, $c_3 = 6$ *et* $g_M = 3$, *ainsi que* $\varepsilon_2 = 0{,}01$ *et* $\varepsilon_3 = 0{,}07$ ($\zeta_{\max} = \tau_{\max} = 1$). *De haut en bas,* $\alpha_f = 0$, $0{,}5$ *puis 1. À gauche, CFL = 0,99, et à droite, CFL = 0,9. Au cours du temps, les profils sont d'abord tracés en bleu foncé, puis en bleu clair et enfin en vert.*

Nous proposons donc deux paramétrisations du terme de réaction,

$$g_1(u) \equiv 0 \tag{45}$$

$$g_2(u,\tau) = \begin{cases} (1-\varepsilon_2)u_g'(\tau)\eta_{2g}^{c_2} & \text{si } 0 < \eta_{2g} \leq 1, \\ +g_M\eta_{3M}^{c_3} & \text{si } 0 < \eta_{3M} \leq 1 \end{cases} \tag{46}$$

avec $\eta_{2g} = \dfrac{u-t_2}{u_g(\tau)-t_2}$, $t_{3'} = \varepsilon_3 t_2 + (1-\varepsilon_3)t_3$ et $\eta_{3M} = \dfrac{u-t_{3'}}{t_M - t_{3'}}$. Et la dérivation donne

$$g_1'(u) \equiv 0, \tag{47}$$

$$\delta g_1(u) \equiv 0, \tag{48}$$

$$g_2'(u,\tau) = \begin{cases} (1-\varepsilon_2)u_g'(\tau)c_2\dfrac{\eta_{2g}^{c_2-1}}{u_g(\tau)-t_2} & \text{si } 0 < \eta_{2g} \leq 1, \\ +g_M c_3 \frac{\eta_{3M}^{c_3-1}}{t_M - t_{3'}} & \text{si } 0 < \eta_{3M} \leq 1, \end{cases} \tag{49}$$

$$\delta g_2(u,\tau) = \begin{cases} -(1-\varepsilon_2)u_g'(\tau)c_2\dfrac{(1-\eta_{2g})\eta_{2g}^{c_2-1}}{u_g(\tau)-t_2}\delta t_2 \\ \quad +(1-\varepsilon_2)u_g'(\tau)\log(\eta_{2g})\eta_{2g}^{c_2}\delta c_2 \\ \quad -(1-\varepsilon_2)u_g'(\tau)c_2\dfrac{\eta_{2g}^{c_2}}{u_g(\tau)-t_2}\delta u_g(\tau) \\ \quad +(1-\varepsilon_2)\eta_{2g}^{c_2}\delta u_g'(\tau) & \text{si } 0 < \eta_{2g} \leq 1, \\ -g_M c_3 \dfrac{\eta_{3M}^{c_3}}{t_M - t_{3'}}\delta t_M \\ \quad -(1-\varepsilon_3)g_M c_3 \dfrac{(1-\eta_{3M})\eta_{3M}^{c_3-1}}{t_M - t_{3'}}\delta t_3 \\ \quad -\varepsilon_3 g_M c_3 \dfrac{(1-\eta_{3M})\eta_{3M}^{c_3-1}}{t_M - t_{3'}}\delta t_2 \\ \quad +g_M \log(\eta_{3M})\eta_{3M}^{c_3}\delta c_3 \\ \quad +\eta_{3M}^{c_3}\delta g_M & \text{si } 0 < \eta_{3M} \leq 1. \end{cases} \tag{50}$$

La Figure 10 montre qu'il est difficile de modéliser une détente en essayant de remplacer à l'aide d'un terme source les points qui se jètent dans le vide pour former le front.

1.1.5 Choix du paramètre de température m_t

Pour chaque cas, les profils modélisés sont représentés sur la Figure 11. Ils sont à comparer avec les profils théoriques du marché de la Figure 5.

Cas 1 Nous choisissons $u_i = u_{i1}$, $u_g = u_{g1}$, $f = f_1$ avec $\alpha_f = 1$ et $g = g_1$.

Le paramètre de température contient les éléments nécessaires à la modélisation du front, soit la seule valeur maximale,

$$m_{t1} = t_M. \tag{51}$$

La dimension de m_t est donc $N_{m_t} = 1$ dans le cas 1.

Cas 2 Nous choisissons $u_i = u_{i1}$, $u_g = u_{g2}$, $f = f_2$ avec $\alpha_f = 0$ et $g = g_1$. Ce choix ne permet pas de modéliser de détente dont le support augmente avec le temps, il y aura donc un bruit de modélisation pour l'inversion. Pour la Figure 11b, $\tau_3 = 0{,}4$ μs.

Le paramètre de température contient les éléments nécessaires à la modélisation du front suivi de la détente, soit la valeur maximale et la valeur soutenue ainsi que le délai τ_3 pour passer de l'une à l'autre,

$$m_{t2} = (t_M, t_3, \tau_3). \tag{52}$$

La dimension de m_t est donc $N_{m_t} = 3$ dans le cas 2.

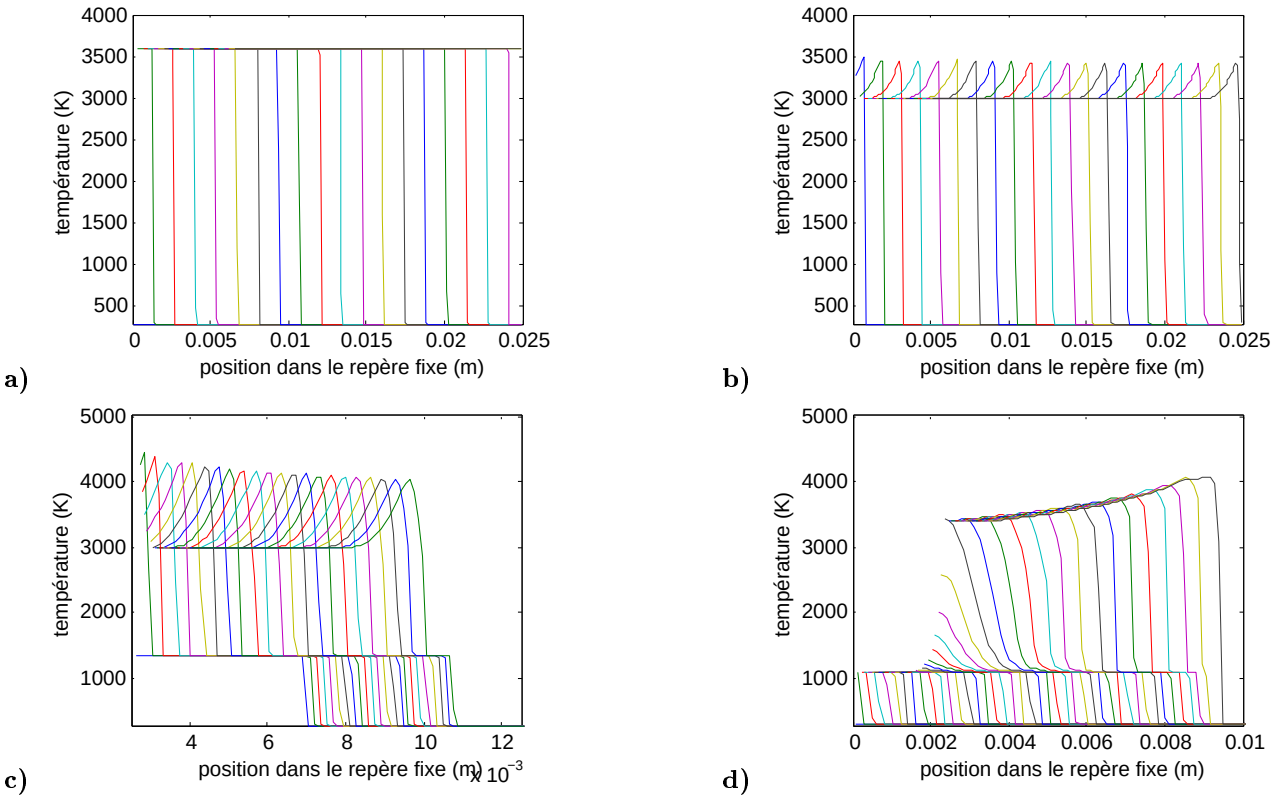

FIG. 11 – *Profils de température modélisés.* **a)** *Cas 1, un profil tous les 0,2 µs.* **b)** *Cas 2, un profil tous les 0,191 µs.* **c)** *Cas 3, un profil tous les 0,04 µs.* **d)** *Cas 4, un profil tous les 0,05 µs.*

Cas 3 Nous choisissons $u_i = u_{i2}$, $u_g = u_{g2}$, $f = f_3$ avec $\alpha_f = 0{,}5$ et $g = g_1$. Ce choix ne permet pas de modéliser de détente dont le support augmente avec le temps et dont la la valeur maximale reste constante, il y aura donc un bruit de modélisation supplémentaire pour l'inversion. Pour la Figure 11c, $\tau_3 = 0{,}25$ µs.

Le paramètre de température contient les éléments nécessaires à la modélisation du front principal suivi de la détente et du front secondaire, soit la valeur maximale et la vitesse du front principal, la valeur soutenue et le délai de détente, et la valeur du plateau secondaire,

$$m_{t3} = (t_M, V_M, t_3, \tau_3, t_2). \tag{53}$$

La dimension de m_t est donc $N_{m_t} = 5$ dans le cas 3.

Cas 4 Nous choisissons $u_i = u_{i1}$, $u_g = u_{g3}$, $f = f_4$ avec $\alpha_f = 0{,}7$, $g = g_2$ avec $\varepsilon_2 = 0{,}01$ et $\varepsilon_3 = 1$ (soit $t_{3'} = t_2$). Ce choix ne permet pas de modéliser la propagation d'une détente, d'où également la présence d'un bruit de modélisation certain. Pour la Figure 11c, $c_g = 12$, $\tau_3 = 1{,}35$ µs, $c_2 = 10$, $c_2 = 6$ et $g_M = 0{,}45$ µs^{-1}.

Le paramètre de température contient les éléments nécessaires à la modélisation de l'apparition du front principal et de la détente ainsi que du front secondaire, soit la valeur maximale et la vitesse du front principal, la valeur soutenue, la valeur du plateau secondaire, la courbure et le délai réglant la rapidité d'apparition du plateau principal, les courbures réglant la rapidité d'apparition du front principal et de la détente, puis la valeur maximale du terme source,

$$m_{t4} = (t_M, V_M, t_3, t_2, c_g, \tau_3, c_2, c_3, g_M). \tag{54}$$

La dimension de m_t est donc $N_{m_t} = 9$ dans le cas 4.

1.2 Paramétrisations réduites du coefficient d'absorption

Cette section est dévolue à la définition de la paramétrisation du coefficient d'absorption normalisé

$$k = \varphi_k(t, m_k) \tag{55}$$

ainsi que du choix du jeu de paramètres m_k permettant de décrire la physique, et du calcul de la matrice jacobienne de ses dérivées

$$\varphi'_k(t, m_k) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \varphi_k}{\partial t}(t, m_k) & \dfrac{\partial \varphi_k}{\partial m_k}(t, m_k) \end{pmatrix}. \tag{56}$$

Nous proposons trois jeux emboîtés de paramètres, permettant une stratégie hiérarchique d'optimisation.

La paramétrisation réduite du coefficient d'absorption monochromatique est matérialisée par les deux routines d'initialisation `initkc` et `initmk` et par la routine `kdetmk` correspondant à la fonction φ_k.

1.2.1 Interpolation linéaire

Étant données N_l+1 températures normalisées $(\hat{t}^l)_{l=0,\dots,N_l}$ et des coefficients d'absorption normalisés $(\hat{k}^l_j)_{l=0,\dots,N_l}$ pour chaque longueur d'onde de numéro $j = 1, \dots, N_j$, nous estimons la valeur du coefficient d'absorption normalisé dans une maille à partir de la valeur de la température normalisée dans cette même maille par interpolation linéaire aux nœuds $\hat{t}$ de la table d'interpolation.

La table est prolongée à tout l'intervalle $[t_{\min}, t_{\max}]$. Cela revient à poser $\hat{t}^{-1} = t_{\min}$, $\hat{t}^{N_l+1} = t_{\max}$ et, pour chaque $j = 1, \dots, N_j$, $\hat{k}^{-1}_j = \hat{k}^0_j$ et $\hat{k}^{N_l+1}_j = \hat{k}^{N_l}_j$.

Ainsi, pour $k = 1, \dots, N_k$ et $i = 1, \dots, N_i$, si $t^{k,i} \in [\hat{t}^{l^{k,i}}, \hat{t}^{l^{k,i}+1}[$ (avec $-1 \le l^{k,i} \le N_l$), alors

$$k^{k,i}_j = b^{l^{k,i}}_j + a^{l^{k,i}}_j t^{k,i} \tag{57}$$

avec

$$a^{l^{k,i}}_j = \frac{\hat{k}^{l^{k,i}+1}_j - \hat{k}^{l^{k,i}}_j}{\hat{t}^{l^{k,i}+1} - \hat{t}^{l^{k,i}}} \quad \text{et} \quad b^{l^{k,i}}_j = \hat{k}^{l^{k,i}}_j - a^{l^{k,i}}_j \hat{t}^{l^{k,i}}. \tag{58}$$

Si nécessaire, les valeurs interpolées sont tronquées aux bornes $k_{\min}$ et $k_{\max}$.

1.2.2 Dérivation

L'interpolation linéaire est dérivable, sauf aux points où la température est égale à l'un des nœuds d'interpolation. En ces rares points, nous imposons une dérivée nulle. En tous les autres, la dérivation de l'interpolation linéaire donne, pour $k = 1, \dots, N_k$, $i = 1, \dots, N_i$ et $j = 1, \dots, N_j$, si $t^{k,i} \in]\hat{t}^{l^{k,i}}, \hat{t}^{l^{k,i}+1}[$ (avec $-1 \le l^{k,i} \le N_l$),

$$\delta k^{k,i}_j = a^{l^{k,i}}_j \delta t^{k,i} + t^{k,i} \delta a^{l^{k,i}}_j + \delta b^{l^{k,i}}_j \tag{59}$$

avec

$$\delta a^{l^{k,i}}_j = \frac{\delta \hat{k}^{l^{k,i}+1}_j - \delta \hat{k}^{l^{k,i}}_j}{\hat{t}^{l^{k,i}+1} - \hat{t}^{l^{k,i}}} \quad \text{et} \quad \delta b^{l^{k,i}}_j = \delta \hat{k}^{l^{k,i}}_j - \hat{t}^{l^{k,i}} \delta a^{l^{k,i}}_j. \tag{60}$$

Bien sûr, pour $j = 1, \dots, N_j$, nous avons $\delta \hat{k}^{-1}_j = \delta \hat{k}^0_j = 0$ (car les $\hat{k}^0_j$ représentent les valeurs au repos, qui sont supposées connues) et $\delta \hat{k}^{N_l+1}_j = \delta \hat{k}^{N_l}_j$.

1.2.3 Tables de coefficients

La table fournie par le CEG (voir Tableau 2) donne des valeurs de coefficient d'absorption monochromatique pour les longueurs d'onde du dispositif à différentes températures. Les valeurs au repos (à la température ambiante 293 K) sont supposées connues et sont donc considérées comme des constantes. Selon le CEG, ces valeurs peuvent être utilisées jusqu'à environ 1500 K. Au delà, le NM se décompose, et c'est l'inconnu ; d'où la présente étude...

Les valeurs pour les températures supérieures sont estimées à partir de mesures expérimentales de luminances. Cependant, cette technique ne permet pas de définir de coefficients pour des températures inférieures à 3500 K (ni même à cette température pour les deux premiers détecteurs). Or, les profils de température faisant l'objet du marché présentent de nombreuses zones dans la gamme 2500–3500 K. Il est donc nécessaire de définir des degrés de liberté permettant de caractériser les coefficients d'absorption dans cet intervalle.

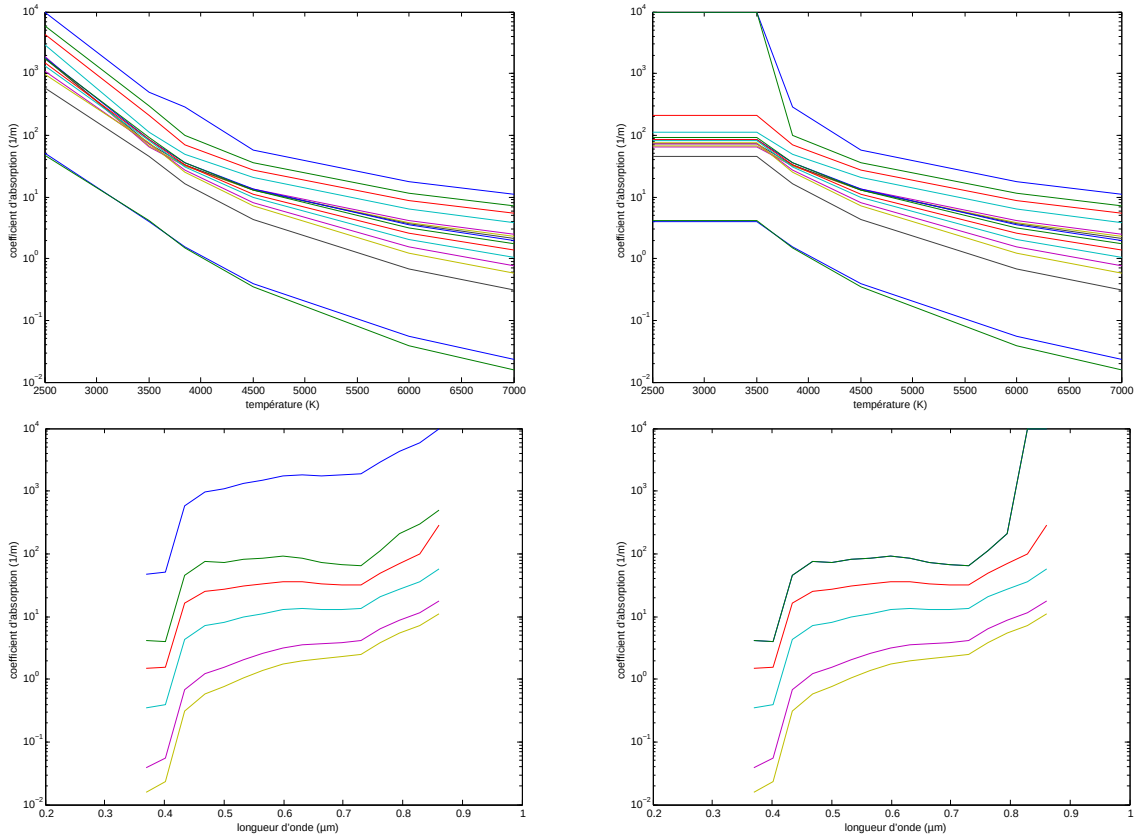

FIG. 12 – *Coefficients d'absorption en fonction de la température (en haut) et de la longueur d'onde (en bas) pour la table régulière (à gauche) et la table maximale (à droite).*

Nous avons créé deux tables pour l'interpolation des coefficients d'absorption : la première, dite "maximale", est obtenue en imposant arbitrairement la borne supérieure (10000 m^{-1}) aux entrées non définies à 3500 K et en dupliquant les valeurs à 3500 K pour 2500 K, et la seconde, dite "régulière", est obtenue en prolongeant de façon régulière les valeurs déjà fournies (voir la Figure 12 où les coefficients des deux tables sont représentés en fonction de la température puis en fonction des longueurs d'ondes).

Les profils du coefficient d'absorption monochromatique théoriques pour la longueur d'onde la plus sensible (sixième détecteur) sont représentées sur la Figure 13. Ils correspondent à l'évaluation par interpolation à partir des profils de température théoriques de la Figure 5. Les coefficient d'absorption interpolés à l'aide des deux tables montrent des différences d'autant plus marquées que les températures sont comprises dans la gamme 1500–3500 K ; ce qui est le cas dans les trois derniers cas. La table régulière à tendance à produire des coefficients d'absorption plus élevés pour ces températures. Avec cette table régulière, les coefficient d'absorption dans le cas 4 revêtent un caractère particulièrement complexe.

Les profils du coefficient d'absorption modélisés sont représentés sur la Figure 14. Ils correspondent à l'évaluation par interpolation à partir des profils de température modélisés de la Figure 11. De nombreux pics parasites sont présents dans les cas 1, 2 et 3, surtout pour la table régulière. Ils s'expliquent par le fait que la diffusion numérique étant plus ou moins bien contrôlée, les profils de températures sont plus ou moins continus, et donc l'interpolation dans la gamme 1500–3500 K fait apparaître ce pic, plus marqué pour la table régulière. Mais, pour faire des calculs, il faut bien affecter une valeur au coefficient d'absorption dans cette gamme de température... Dans le cas 4, les profils théoriques sont déjà continus, ces pics étaient donc déjà présents.

1.2.4 Représentation hiérarchique

Nous proposons trois paramétrisations réduites emboîtées du coefficient d'absorption monochromatique : elles correspondent à une ouverture progressive des degrés de libertés que sont les entrées de la table de coefficients

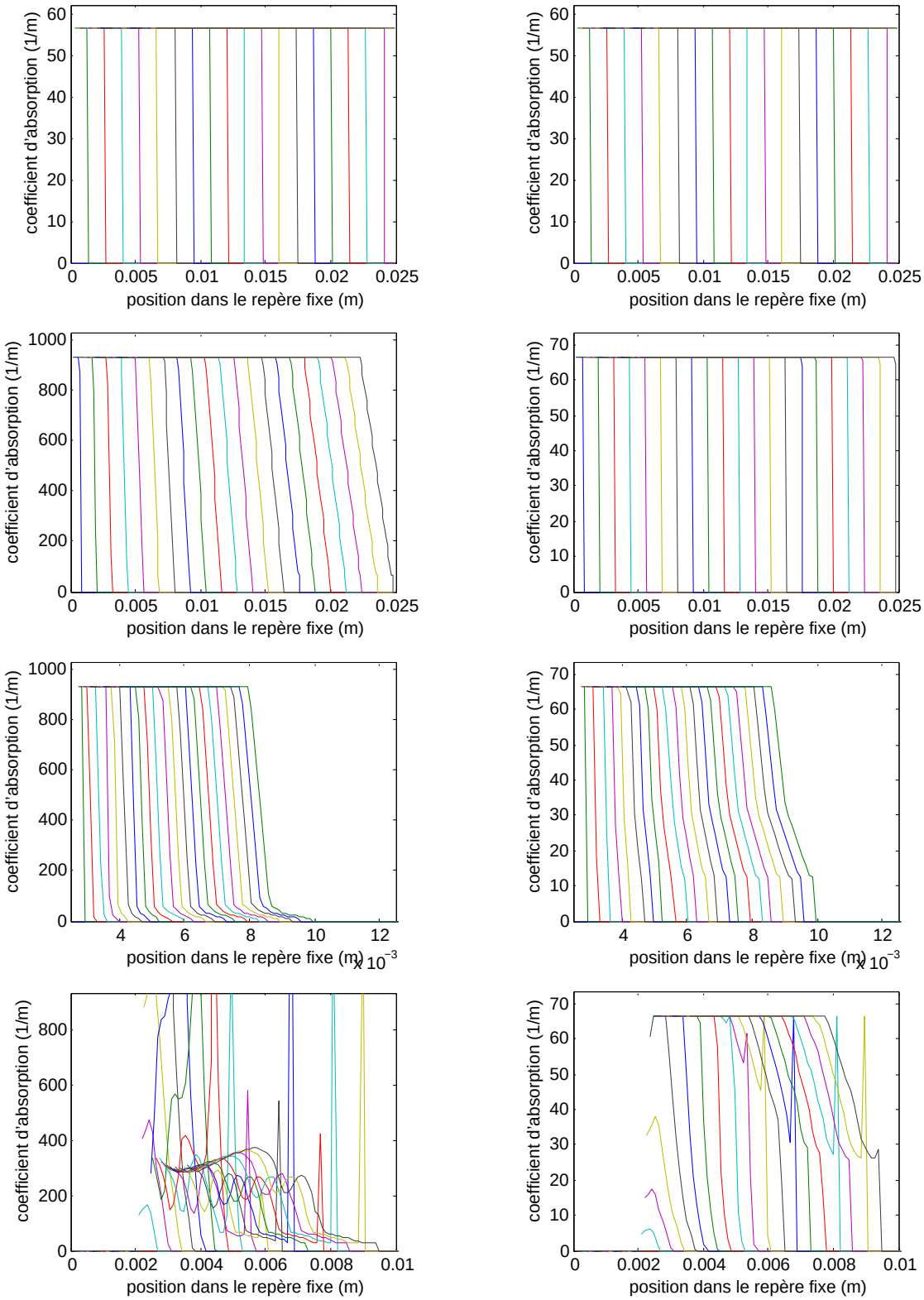

FIG. 13 – *Profils de coefficient d'absorption pour la sixième longueur d'onde (la plus sensible) correspondant aux profils de température théoriques de la Figure 5. De haut en bas, les quatre cas du marché, ã gauche, avec la table régulière, et à droite avec la table maximale.*

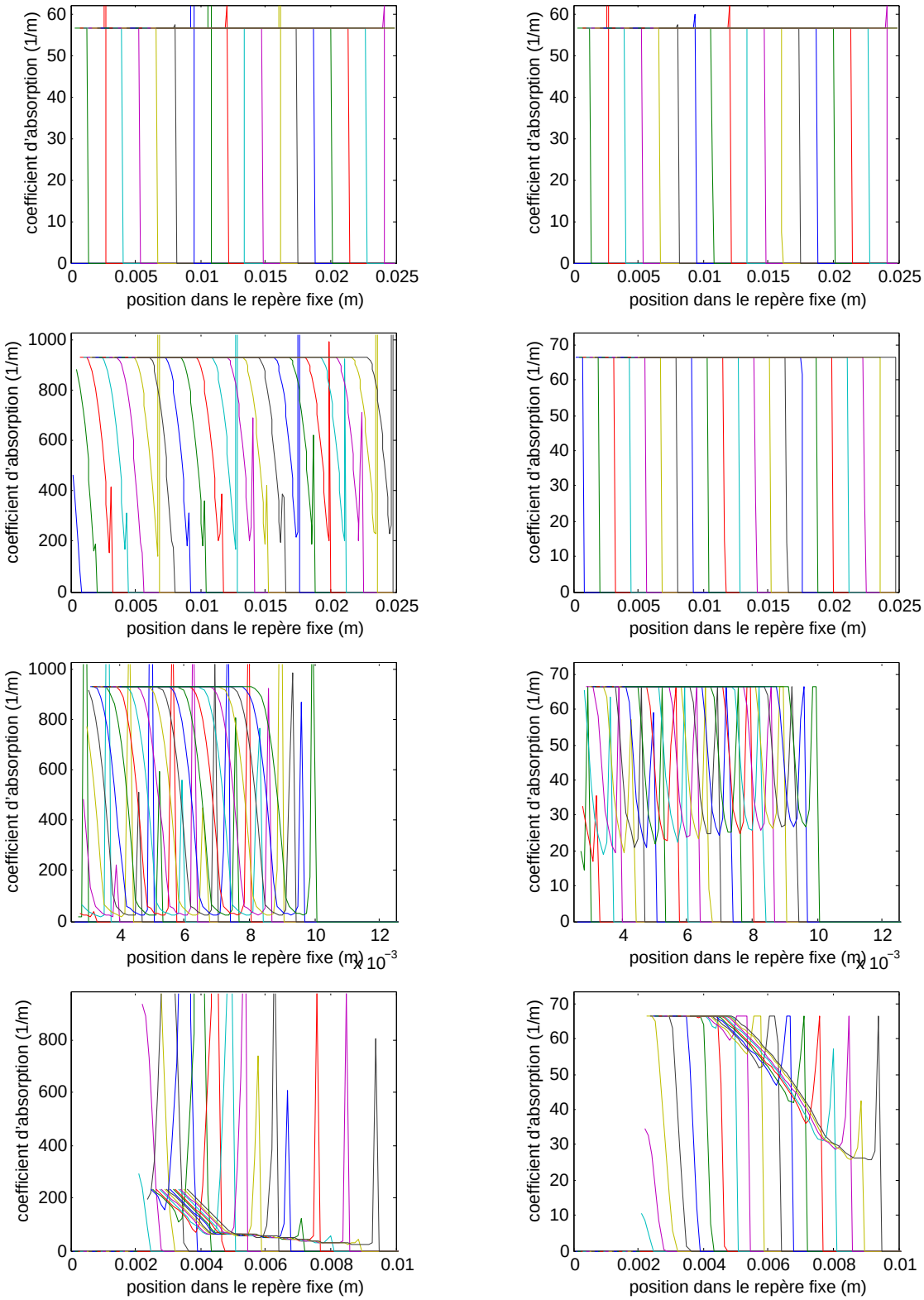

FIG. 14 – *Profils de coefficient d'absorption pour la sixième longueur d'onde (la plus sensible) correspondant aux profils de température modélisés de la Figure 11. De haut en bas, les quatre cas du marché, ã gauche, avec la table régulière, et à droite avec la table maximale.*

pour l'interpolation. Cet aspect hiérarchique (ou multiéchelle) est très important pour l'inversion car il permet de converger vers une solution plus régulière.

Paramétrisation complète La première paramétrisation, dite "complète", revient à considérer que toutes les entrées de la table de coefficients sont des degrés de liberté pour l'inversion. Ainsi,

$$m_{k0} = (\hat{k}_j^l)_{l=1,\dots,N_l, j=1,\dots,N_j}. \tag{61}$$

La dimension est donc $N_l N_j$ et la dérivée de la table est, pour $l = 1, \dots, N_l$ et $j = 1, \dots, N_j$,

$$\delta \hat{k}_j^l = (\delta m_{k0})_j^l. \tag{62}$$

Paramétrisation tensorielle La deuxième paramétrisation, dite "tensorielle", est guidée par la remarque selon laquelle la table de coefficients représentée en échelle logarithmique (voir Figure 12) montre des courbes presque parallèles (surtout pour la table régulière, à gauche). Ainsi, si l'on normalise ces courbes par leur valeur maximale (correspondant à la température la plus basse ou au premier détecteur), elles se superposent presque (voir Figure 15 en haut et au milieu).

L'idée est donc de séparer les variables et de considérer des formes dans chaque directions, $(1, \tilde{k}_2^t, \dots, \tilde{k}_{N_l}^t)$ pour la température et $(1, \tilde{k}_2^\lambda, \dots, \tilde{k}_{N_j}^\lambda)$ pour la longueur d'onde, d'un facteur d'échelle $\hat{k}_1^1$, et de calculer les valeurs de la table par produit tensoriel : pour $l = 1, \dots, N_l$ et $j = 1, \dots, N_j$,

$$\hat{k}_j^l = \hat{k}_1^1 \tilde{k}_l^t \tilde{k}_j^\lambda. \tag{63}$$

L'erreur relative commise par cette paramétrisation est représentée en bas de la Figure 15. Elle reste raisonnable, surtout dans le cas de la table régulière.

Ainsi,

$$m_{k1} = (\hat{k}_1^1, (\tilde{k}_l^t)_{l=2,\dots,N_l}, (\tilde{k}_j^\lambda)_{j=2,\dots,N_j}). \tag{64}$$

Donc la dimension est $N_l + N_j - 1$ et la dérivée de la table est, pour $l = 1, \dots, N_l$ et $j = 1, \dots, N_j$,

$$\delta \hat{k}_j^l = \tilde{k}_l^t \tilde{k}_j^\lambda (\delta m_{k1})_1 + \hat{k}_1^1 \tilde{k}_j^\lambda (\delta m_{k1})_l + \hat{k}_1^1 \tilde{k}_l^t (\delta m_{k1})_{N_l+j}. \tag{65}$$

Paramétrisation scalaire La troisième paramétrisation, dite "scalaire", est réduite au seul facteur d'amplitude, les formes dans chaque direction étant fixées. Ainsi,

$$m_{k2} = \hat{k}_1^1. \tag{66}$$

Donc la dimension est 1 et la dérivée de la table est, pour $l = 1, \dots, N_l$ et $j = 1, \dots, N_j$,

$$\delta \hat{k}_j^l = \tilde{k}_l^t \tilde{k}_j^\lambda \delta m_{k2}. \tag{67}$$

1.3 Représentations fines des paramètres physiques

Afin d'équilibrer les valeurs des deux grandeurs physiques que sont la température et le coefficient d'absorption monochromatique, nous fixons deux valeurs de référence, par exemple

$$T_{\text{ref}} = 5000 \text{ K} \quad \text{et} \quad K_{\text{ref}} = 100 \text{ m}^{-1}, \tag{68}$$

et nous normalisons les paramètres physiques T et K par ces valeurs. Ainsi, pour $k = 1, \dots, N_k$, $i = 1, \dots, N_i$ et $j = 1, \dots, N_j$,

$$T^{k,i} = T_{\text{ref}} t^{k,i} \quad \text{et} \quad K_j^{k,i} = K_{\text{ref}} k_j^{k,i}. \tag{69}$$

Donc la dimension de la température normalisée est $N_k N_i$ et celle du coefficient d'absorption normalisé est $N_k N_i N_j$ et la dérivation de la normalisation donne simplement, pour $k = 1, \dots, N_k$, $i = 1, \dots, N_i$ et $j = 1, \dots, N_j$,

$$\delta T^{k,i} = T_{\text{ref}} \delta t^{k,i} \quad \text{et} \quad \delta K_j^{k,i} = K_{\text{ref}} \delta k_j^{k,i}. \tag{70}$$

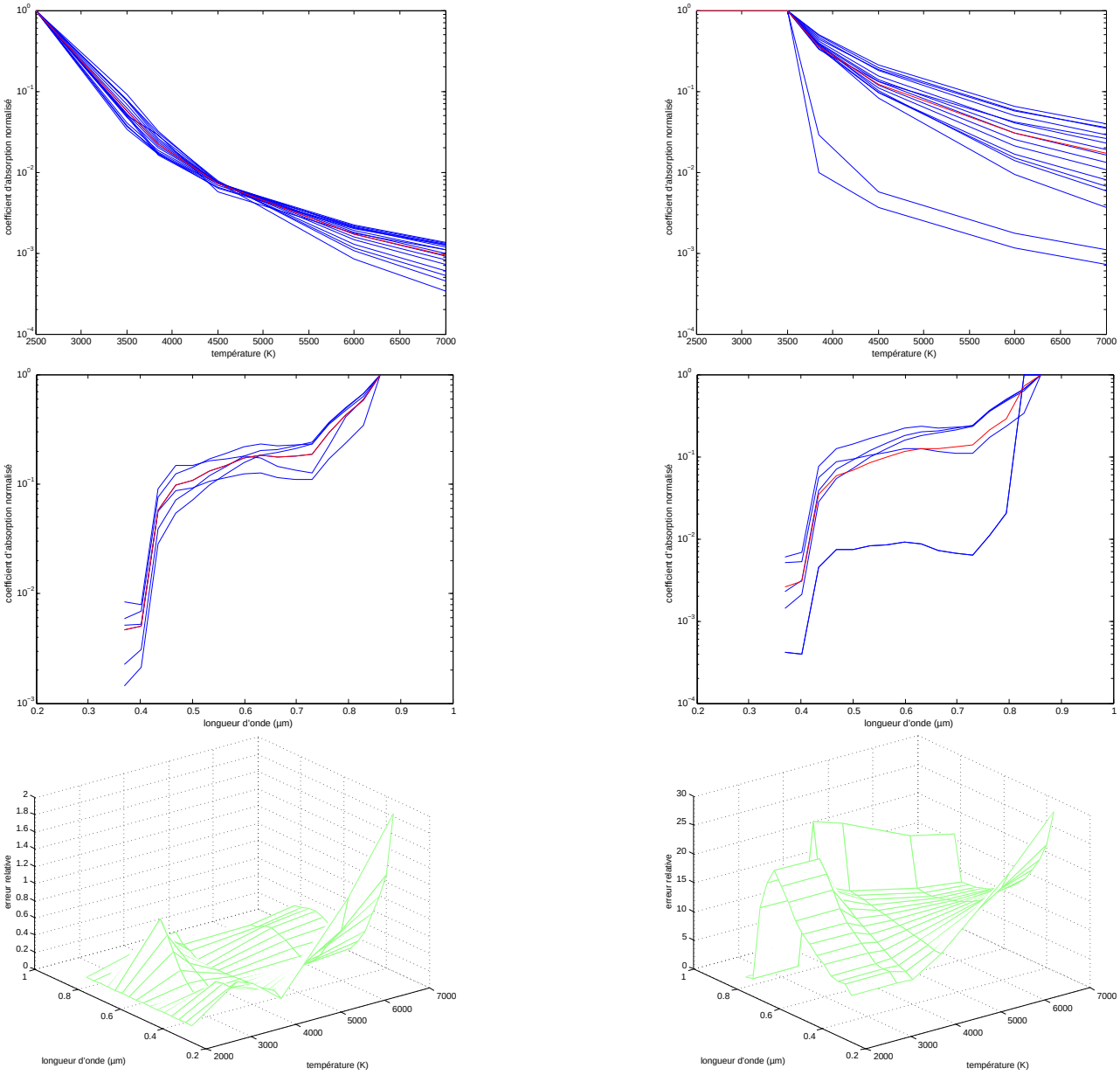

FIG. 15 – *Coefficients d'absorption relatifs en fonction de la température (en haut) et de la longueur d'onde (au milieu) pour la table régulière (à gauche) et la table maximale (à droite). Les courbes en bleu correspondent à la normalisation des courbes de la Figure 12 par leur valeur maximale. Les courbes en rouge sont la moyenne des courbes bleues. En bas est représentée l'erreur relative entre la table complète d'origine et son estimation par produit tensoriel des moyennes.*

1.4 Transfert radiatif

Cette section définit le calcul des luminances à partir de la température et du coefficient d'absorption monochromatique par résolution de l'équation du transfert radiatif,

$$L^{\mathrm{cal}} = F(T, K) \tag{71}$$

et du calcul de la matrice jacobienne des dérivées

$$F'(T, K) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial F}{\partial T}(T, K) & \dfrac{\partial F}{\partial K}(T, K) \end{pmatrix}. \tag{72}$$

Le calcul des luminances est matérialisé par les deux routines d'initialisation `initt` et `initk` et par la routine `LcaldeTK` correspondant à la fonction F.

1.4.1 Schéma numérique

À chaque instant τ^k, pour $k = 1, \ldots, N_k$, nous considérons une subdivision régulière de l'intervalle $[\xi^{k,0}, L]$ en N_i sous-intervalles de longueur $h^k = (L - \xi^{k,0})/N_i$ où $\xi^{k,0} = V_P \tau^k$ est la position de l'interface impacteur/NM.

Sur chaque maille $M_i^k = [\xi^{k,i-1}, \xi^{k,i}]$, pour $i = 1, \ldots, N_i$, les coefficients d'absorption monochromatique pour les longueurs d'onde numéros $j = 1, \ldots, N_j$ et la température sont supposés constants et respectivement notés $K_j^{k,i}$ et $T^{k,i}$, la luminance du corps noir est donnée par (3), elle est ici notée

$$L_{0j}^{k,i} = L_{\lambda_j}^0(T^{k,i}) = \frac{c_1}{\lambda_j^5 \left(\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T^{k,i}}\right) - 1\right)}. \tag{73}$$

La solution exacte de l'équation différentielle de transfert radiatif (4) sur la maille M_i^k est donnée par (5), qui se réécrit ici, en posant $L_j^{k,i} = L_{\lambda_j}^k(\xi^{k,i})$,

$$L_j^{k,i} = L_{0j}^{k,i} + \exp(-h^k K_j^{k,i})(L^{k,i-1} - L_{0j}^{k,i}). \tag{74}$$

Le schéma est fermé par la condition initiale

$$L_j^{k,0} = 0 \tag{75}$$

et la luminance reçue à l'extrémité droite du milieu est alors donnée par

$$L^{\mathrm{cal}^k}_j = L_j^{k,N_i}. \tag{76}$$

1.4.2 Dérivation

Les dérivées sont obtenues de façon efficace par la technique de l'état adjoint en résolvant une équation rétrograde (de la droite vers la gauche).

Les différentes équations de transfert radiatif (en temps-longueur d'onde) étant indépendantes entre elles, nous fixons les indices k et j (que nous omettons pour alléger les notations) et nous définissons le lagrangien

$$\begin{aligned}\mathcal{L}((L_0^i)_i, (L^i)_i, (\bar{L}_0^i)_i, (\bar{L}^i)_i; (T^i)_i, (K^i)_i) &= L^{N_i} \\ &+ \sum_{i=1}^{N_i} \left[\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T^i}\right) - 1\right) L_0^i - c_1\right] \bar{L}_0^i \\ &+ \sum_{i=1}^{N_i} \left[L^i - L_0^i - \exp(-hK^i)(L^{i-1} - L_0^i)\right] \bar{L}^i\end{aligned} \tag{77}$$

où les $\bar{L}_0^i$ et les $\bar{L}^i$ sont les multiplicateurs de Lagrange associés à chacune des équations (73) et (74) pour $i = 1, \ldots, N_i$.

Si les luminances $(L_0^i)_i$ et $(L^i)_i$ sont solutions des équations (73) et (74), alors pour tous $(\bar{L}_0^i)_i$ et pour tous $(\bar{L}^i)_i$, nous avons

$$\mathcal{L}((L_0^i)_i, (L^i)_i, (\bar{L}_0^i)_i, (\bar{L}^i)_i; (T^i)_i, (K^i)_i) = L^{N_i}. \tag{78}$$

Donc si nous choisissons les multiplicateurs tels que, pour tous $(\delta L_0^i)_i$ et $(\delta L^i)_i$,

$$\forall i = 1, \ldots, N_i, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial L_0^i} \delta L_0^i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial L^i} \delta L^i \equiv 0, \tag{79}$$

alors nous avons simplement, d'après (78),

$$\forall i = 1, \ldots, N_i, \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial T^i} = \frac{\partial L^{N_i}}{\partial T^i} \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial K^i} = \frac{\partial L^{N_i}}{\partial K^i}. \tag{80}$$

Nous différentions d'abord par rapport aux luminances du corps noir,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial L_0^i} \delta L_0^i = \lambda^5 \left(\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T^i}\right) - 1\right) \bar{L}_0^i \delta L_0^i + (\exp(-hK^i) - 1) \bar{L}^i \delta L_0^i. \tag{81}$$

Les multiplicateurs associés aux lois de Planck (73) pour $i = 1, \ldots, N_i$ sont donc donnés par

$$\bar{L}_0^i = \frac{L_0^i}{c_1}(1 - \exp(-hK^i))\bar{L}^i. \tag{82}$$

Puis, nous différentions par rapport aux luminances,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial L^i}\delta L^i = \delta_{iN_i}\delta L^{N_i} + \bar{L}^i \delta L^i - (1 - \delta_{iN_i})\exp(-hK^{i+1})\bar{L}^{i+1}\delta L^i, \tag{83}$$

où δ_{iN_i} est le symbole de Kronecker valant 1 si $i = N_i$ et 0 sinon. Les multiplicateurs associés aux équations de transfert radiatif (74) sont donc donnés par

$$\bar{L}^{N_i} = -1 \tag{84}$$

$$\bar{L}^i = \exp(-hK^i)\bar{L}^{i+1}, \qquad \text{pour } i = N_i - 1, \ldots, 1. \tag{85}$$

Si nous posons

$$\bar{L}^{N_i+1} = -1 \quad \text{et} \quad K^{N_i+1} = 0, \tag{86}$$

il vient simplement

$$\bar{L}^i = \exp(-hK^i)\bar{L}^{i+1}, \qquad \text{pour } i = N_i, \ldots, 1. \tag{87}$$

Et enfin, nous différentions par rapport aux paramètres et les dérivées pour $i = 1, \ldots, N_i$ sont alors données par

$$\frac{\partial L^{N_i}}{\partial T^i} = -c_2\lambda^4 \exp\left(\frac{c_2}{\lambda T^i}\right)\frac{L_0^i \bar{L}_0^i}{{T^i}^2} \tag{88}$$

$$\frac{\partial L^{N_i}}{\partial K^i} = h\exp(-hK^i)(L^{i-1} - L_0^i)\bar{L}^i. \tag{89}$$

Le schéma adjoint donnant les dérivées de la luminance par rapport à la température et au coefficient d'absorption est donc défini par les équations (82), (86), (87), (88) et (89).

1.4.3 Luminances

Les luminances théoriques correspondent aux profils théoriques de température (Figure 5) et de coefficient d'absorption monochromatique (Figure 13) pour les quatre cas du marché, elles sont représentées sur la Figure 16. Les courbes reflètent les différences relevées entre les deux tables d'interpolation du coefficient d'absorption : une tendance à se rapprocher plus vite de la luminance du corps noir pour la table régulière, sauf pour les deux premiers détecteurs, puisque les températures d'intérêt sont essentiellement dans la zone inconnue où les tables diffèrent. Les oscillations plus ou moins marquées dans les cas 2 et 3 sont dues au fait que, pour les profils théoriques, les pics précédent la détente se situent sur une droite qui est approchée dans le domaine espace-temps par une courbe en escaliers, et donc que la valeur maximale du pic fluctue plus ou moins. Augmenter la résolution spatiale pour la résolution de la loi de conservation, ce qui revient, à CFL fixe, à également augmenter la résolution temporelle, permet contrôler ces oscillations parasites.

Sur la Figure 17 sont représentées les luminances modélisées correspondant aux profils modélisés de température (Figure 11) et de coefficient d'absorption (Figure 14) pour les quatre cas du marché. Ces courbes de luminances présentent de fortes oscillations qui sont d'autant plus marquées que les coefficient d'absorption mis en jeu sont élevés (correspondant aux premiers détecteurs, voir Table 2). Si nous regardons de près les profils de température dans le cas 1 sur la Figure 18 (à gauche), correspondant à un zoom de la Figure 11 (en haut à gauche), nous observons que le front de température n'est pas vertical à tous les instants, en particulier lorsqu'il passe dans l'intervalle 8–12 mm. En conséquence, les coefficients d'absorption pour le premier détecteur obtenus par interpolation présentent deux énormes pics dans cette zone (à droite). Encore une fois, augmenter la résolution spatiale permet de réduire l'ampleur du phénomène, mais à un coût en temps de calcul non négligeable...

L'utilisation d'un schéma plus robuste pour la résolution de la loi de conservation scalaire devrait permettre de solutionner ces problèmes, mais il faudrait alors s'attaquer à la dérivation de ce schéma, forcément plus complexe, ce qui demanderait de nouveaux développements.

Cela suggère donc que la table régulière, a priori plus satisfaisante d'un point de vue physique, l'est beaucoup moins du point de vue numérique. Nous pouvons donc nous attendre à des sensibilité artificiellement renforcées avec cette table.

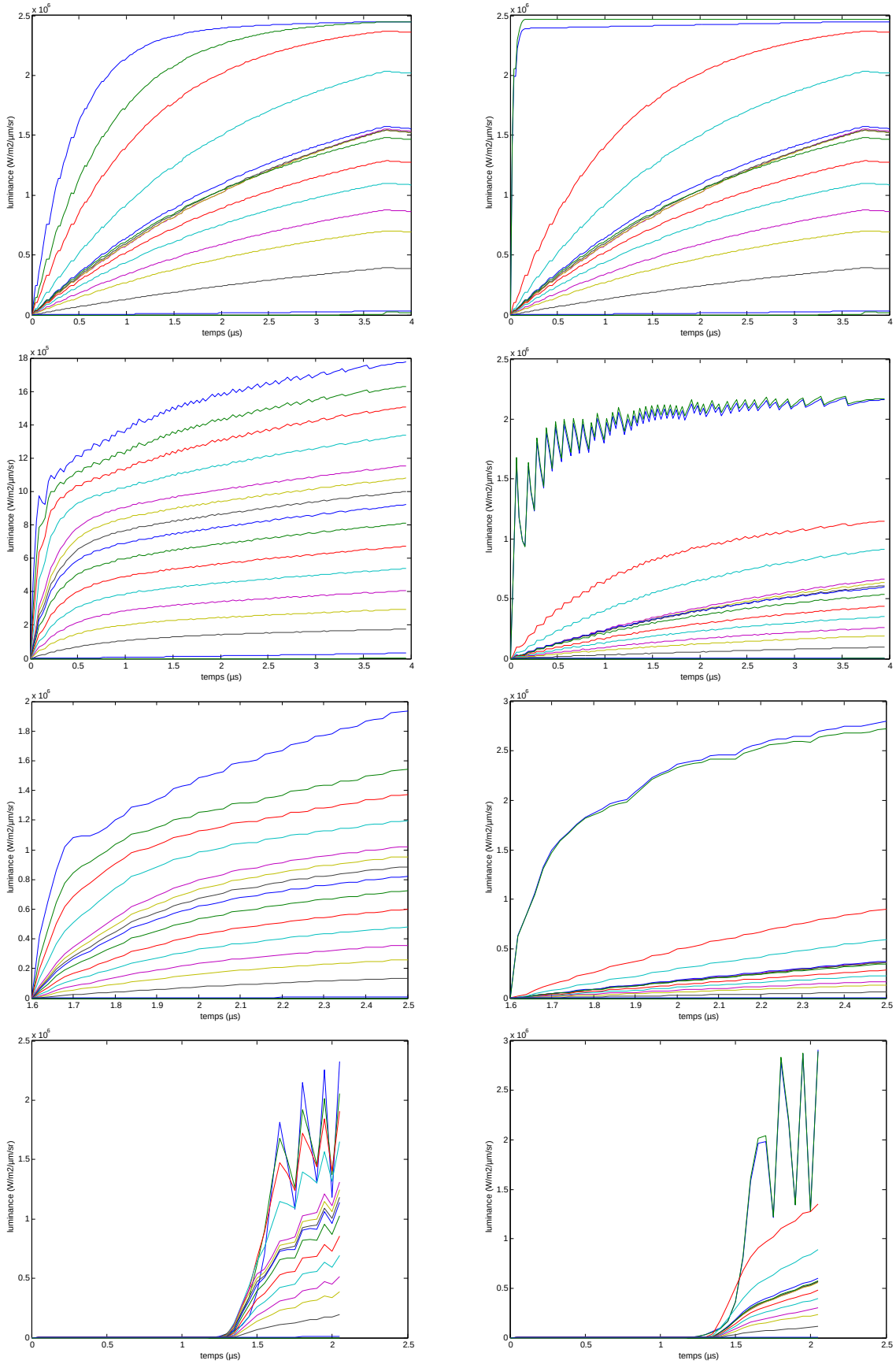

FIG. 16 – *Luminances pour les 16 longueurs d'onde calculées à partir des profils théoriques de la Figure 5. De haut en bas, les quatre cas du marché, à gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

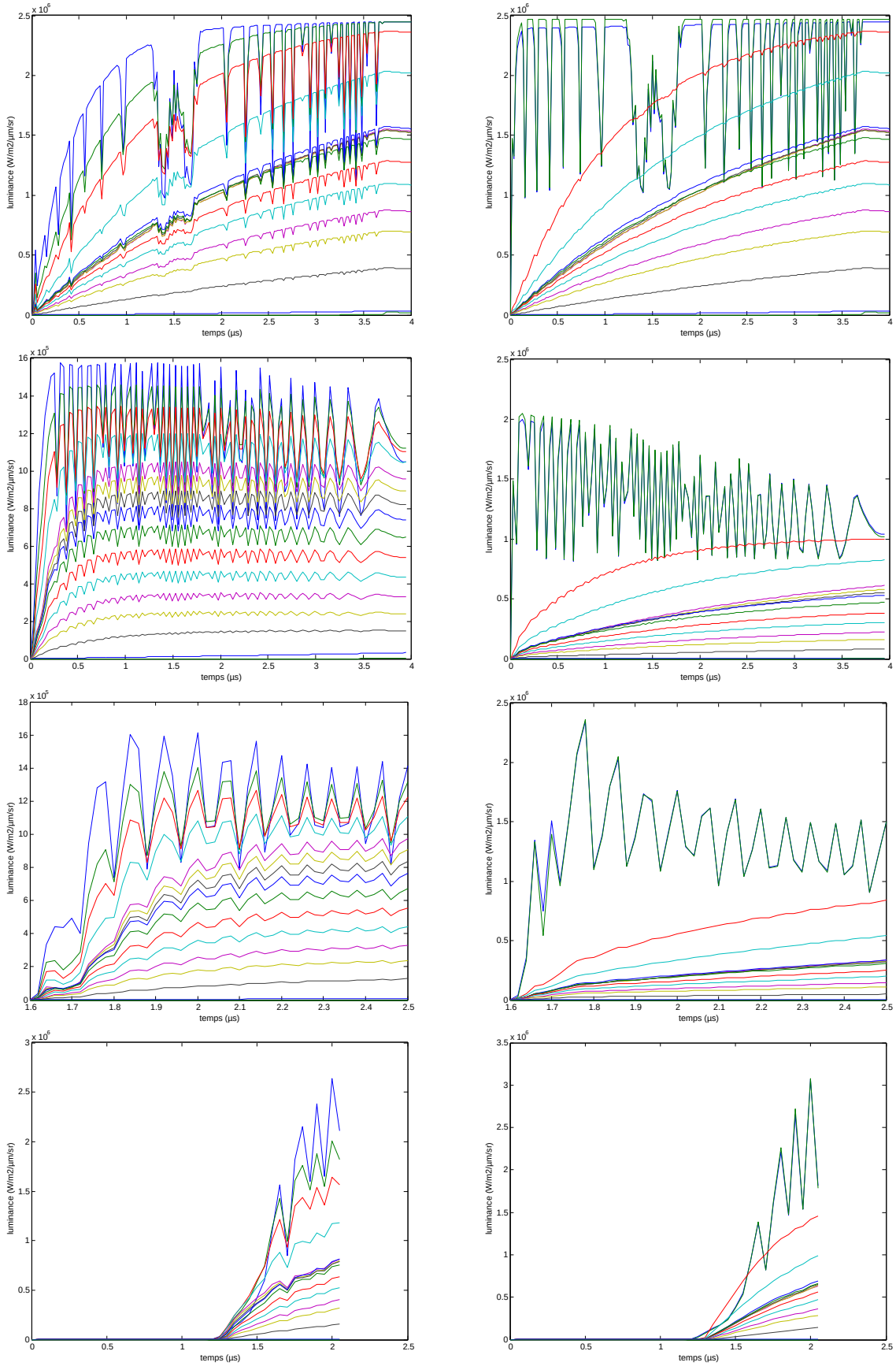

FIG. 17 – *Luminances pour les 16 longueurs d'onde calculées à partir des profils modélisés de la Figure 11. De haut en bas, les quatre cas du marché, à gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

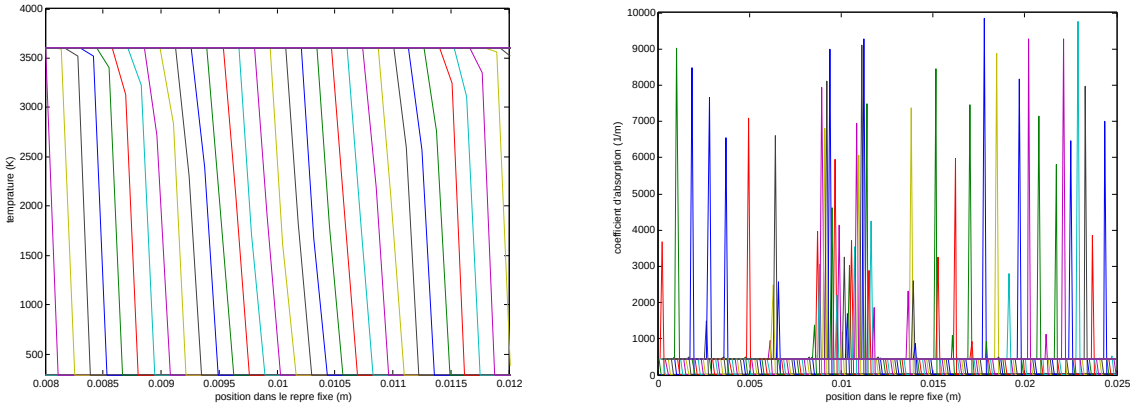

FIG. 18 – *Profils modélisés complets de température (à gauche) et de coefficient d'absorption monochromatique pour le premier détecteur (à droite) dans le cas 1, pour la table régulière.*

Toujours est-il que la normalisation des luminances va un peu gommer ces effets parasites, en favorisant des longueurs d'onde moins soumises au problème. Il est également à noter que les différences entre luminances issues des profils théoriques et modélisés sont bien moindres dans le cas 4, révélant par là une difficulté, insoupçonnée au départ, pour les trois premiers cas par rapport au quatrième (qui comporte bien d'autres difficultés).

1.5 Normalisation des luminances

Étant données des luminances mesurées $L^{\text{mes}} = (L_j^{\text{mes},k})$ et des luminances calculées $L^{\text{cal}} = (L_j^{\text{cal},k})$, l'écart des moindres carrés pondérés est

$$J(L^{\text{cal}}) = \sum_{k,j} \left(\frac{L_j^{\text{mes},k} - l_j^{\text{cal},k}}{\sigma_j^k} \right)^2 \tag{90}$$

où l'incertitude est donnée par $\sigma_j^k = L_j^{\text{mes},k} \varepsilon_j^{\text{mes}} + \sigma_j^{\text{bruit}}$ où ε^{mes} est l'erreur relative de mesure et σ^{bruit} le niveau de bruit. Nous préférons plutôt utiliser le critère normalisé

$$j(L^{\text{cal}}) = \frac{J(L^{\text{cal}})}{J(0)} \tag{91}$$

qui permet de définir le pourcentage de mesures expliquées par

$$P(L^{\text{cal}}) = 100(1 - \sqrt{j(L^{\text{cal}})}). \tag{92}$$

Il est équivalent de considérer la norme euclidienne classique et de pré-multiplier les luminances (mesurées et calculées) par le poids

$$W_j^k = \frac{1}{\sigma_j^k} \frac{1}{\left(\sum_{k,j} \left(\frac{L_j^{\text{mes},k}}{\sigma_j^k} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad k = 1, \ldots, N_k, j = 1, \ldots, N_j. \tag{93}$$

Ainsi, les luminances normalisées sont calculées par

$$l^{\text{cal}} = W L^{\text{cal}}. \tag{94}$$

Et le critère des moindres carrés est alors simplement exprimé par

$$j(l^{\text{cal}}) = \| l^{\text{mes}} - l^{\text{cal}} \|^2 \tag{95}$$

où $l^{\text{mes}} = W L^{\text{mes}}$ sont les luminances mesurées normalisées. La dimension de la luminance l^{cal} est $N_k N_j$.

Les luminances normalisées, qui sont les courbes à reproduire en norme euclidienne pour l'inversion, sont représentées dans la Figure 19 pour les profils théoriques et dans la Figure 20 pour les profils modélisés. Il faut noter l'effet de cette normalisation sur les deux premiers détecteurs qui ne seront donc que très faiblements pris en compte lors de l'inversion.

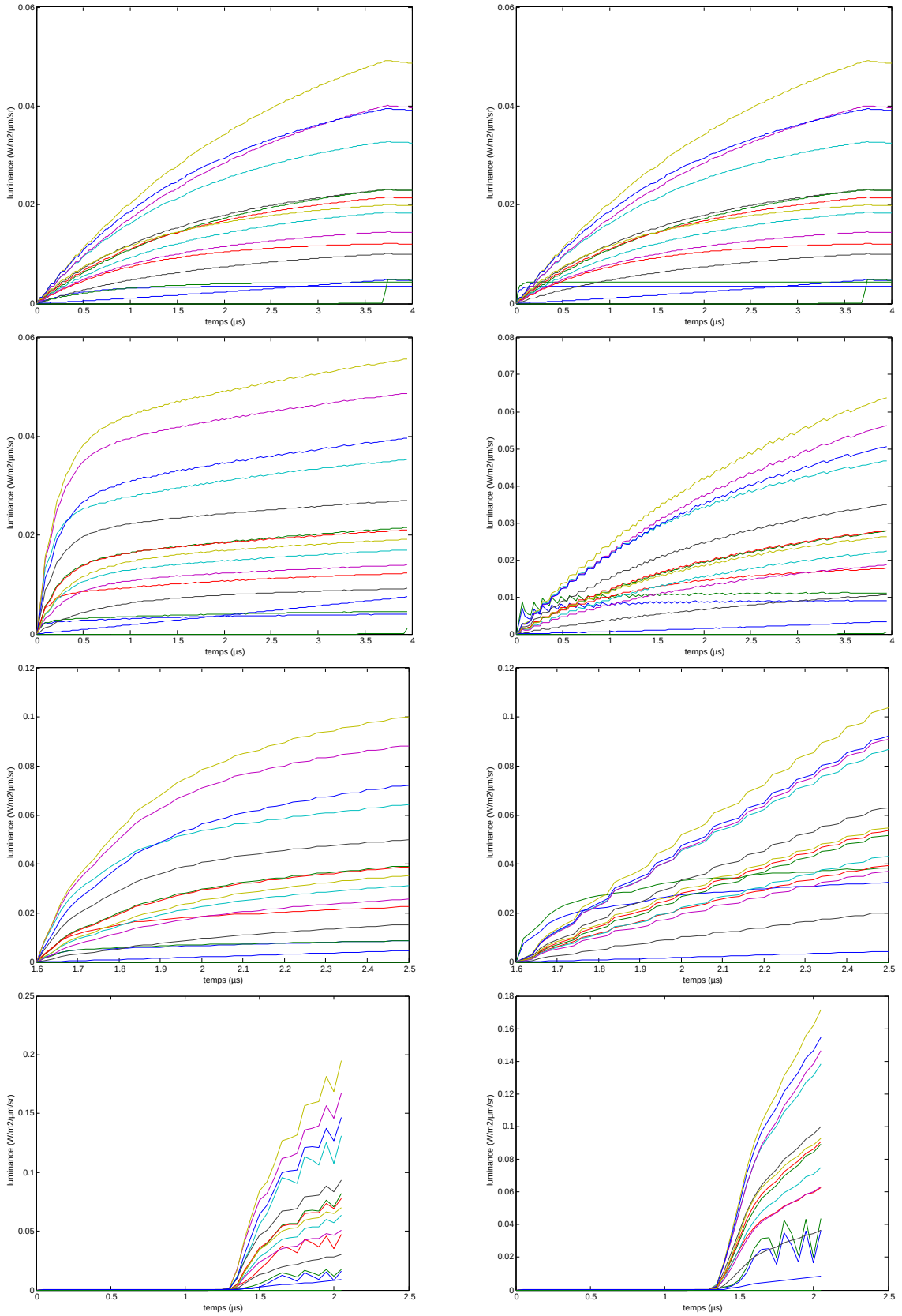

FIG. 19 – *Luminances normalisées pour les 16 longueurs d'onde calculées à partir des profils théoriques de la Figure 5. De haut en bas, les quatre cas du marché, à gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

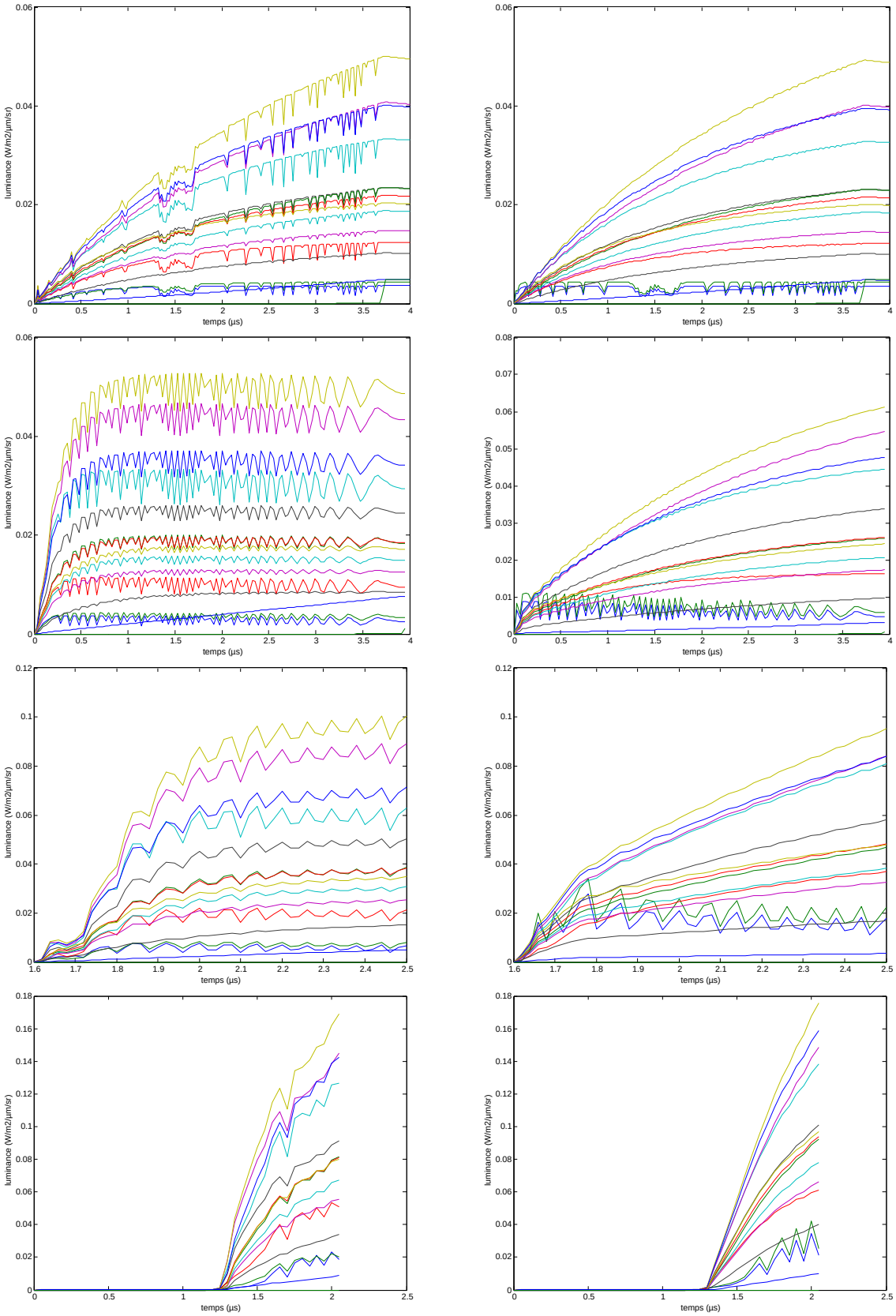

FIG. 20 – *Luminances normalisées pour les 16 longueurs d'onde calculées à partir des profils modélisés de la Figure 11. De haut en bas, les quatre cas du marché, à gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

La longueur d'onde menant aux luminances normalisées les plus élevées est la sixième, pour laquelle tous les coefficients d'absorption sont représentés.

Il faut également noter l'effet lissant sur les oscillations dans le cas des profils modélisés. La table maximale d'interpolation se révélant plus satisfaisante de ce point de vue (par contre, elle ne favorise pas la sensibilité à la température dans la gamme 1500–3500 K).

Finalement, nous remarquerons que les oscillations parasites dans le cas de l'utilisation de la table régulière sont d'amplitude comparable au bruit décrit par le CEG dans la Table 1 (voir les mesures bruitées sur la Figure 21).

1.6 Trois niveaux de paramétrisation du problème

Si X regroupe les paramètres de température et de coefficient d'absorption, nous notons $\mathcal{F}$ la fonction qui à X associe les luminances normalisées l^{cal}.

La paramétrisation du problème est matérialisé par la routine d'initialisation `initX` et par les routines `TKdeX` et `lcaldeX` correspondant à la fonction $\mathcal{F}$.

Pour la paramétrisation de premier niveau,

$$X = (t, k), \tag{96}$$

$$\mathcal{F}(X) = WF(T_{\mathrm{ref}}t, K_{\mathrm{ref}}k), \tag{97}$$

$$\mathcal{F}'(X) = W \begin{pmatrix} F'_T & F'_K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{\mathrm{ref}} & 0 \\ 0 & K_{\mathrm{ref}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} WF'_T T_{\mathrm{ref}} & WF'_K K_{\mathrm{ref}} \end{pmatrix}. \tag{98}$$

Pour les paramétrisations de deuxième niveau,

$$X = (t, m_k), \tag{99}$$

$$\mathcal{F}(X) = WF(T_{\mathrm{ref}}t, K_{\mathrm{ref}}\varphi_k(t, m_k)) \tag{100}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}'(X) &= W \begin{pmatrix} F'_T & F'_K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{\mathrm{ref}} & 0 \\ 0 & K_{\mathrm{ref}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{Id} & 0 \\ \varphi'_{k,t} & \varphi'_{k,m_k} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} W(F'_T T_{\mathrm{ref}} + F'_K K_{\mathrm{ref}}\varphi'_{k,t}) & WF'_K K_{\mathrm{ref}}\varphi'_{k,m_k} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{101}$$

Et enfin, pour les paramétrisations de troisième niveau,

$$X = (m_t, m_k), \tag{102}$$

$$\mathcal{F}(X) = WF(T_{\mathrm{ref}}\varphi_t(m_t, K_{\mathrm{ref}}\varphi_k(\varphi_t(m_t), m_k)) \tag{103}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}'(X) &= W \begin{pmatrix} F'_T & F'_K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{\mathrm{ref}} & 0 \\ 0 & K_{\mathrm{ref}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{Id} & 0 \\ \varphi'_{k,t} & \varphi'_{k,m_k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi'_t & 0 \\ 0 & \mathrm{Id} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} W(F'_T T_{\mathrm{ref}} + F'_K K_{\mathrm{ref}}\varphi'_{k,t})\varphi'_t & WF'_K K_{\mathrm{ref}}\varphi'_{k,m_k} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{104}$$

Dans chaque cas, nous avons donc sept paramétrisations possibles : une de niveau 1, trois de niveau 2 et également trois de niveau 3. Les paramétrisations de niveau 2 et 3 sont qualifiées de complète, tensorielle ou scalaire suivant la paramétrisation réduite du coefficient d'absorption retenue.

1.7 Validation des dérivées

Pour chacune des étapes de la paramétrisation du problème, la programmation des dérivées est validée par test aux différences finies. Nous observons en général entre 6 et 8 décimales communes entre calcul analytique et calcul par différences finies (MATLAB calcule en double précision). Cela nous conforte dans l'idée qu'il ne reste plus d'erreur dans les codes dérivés.

Il est à noter que certaines parties n'étant pas différentiables en quelques points isolés (tels les nœuds de l'interpolation linéaire $\hat{t}$ ou le point de rupture de pente de la condition à la limite à gauche u_{g3}), le test peut s'avérer négatif en certaines occasions.

Soit $\mathcal{F}$ une fonction différentiable de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^p$. Étant données une direction K dans $\mathbb{R}^p$ et une direction H dans $\mathbb{R}^n$, la matrice jacobienne $\mathcal{F}'(X_0)$ vérifie

$$\langle \mathcal{F}'(X_0)H, K\rangle_p = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \Big(\langle \mathcal{F}(X_0 + \varepsilon H), K\rangle_p - \langle \mathcal{F}(X_0), K\rangle_p \Big) \tag{105}$$

(dérivée directionnelle de la fonction $X \longmapsto \langle \mathcal{F}(X), K \rangle_p$ dans la direction H).

Le test aux différences finies compare des estimations des deux termes de cette égalité. Le calcul numérique étant effectué en arithmétique flottante, lorsque ε tend vers 0, le taux d'accroissement se rapproche d'abord de la limite, puis s'en éloigne en raison des erreurs d'arrondi. À une précision donnée, nous relevons le nombre de décimales communes entre le calcul analytique et l'estimation de la limite. Si ce nombre augmente avec la précision du calcul, par exemple lorsque l'on passe de la double précision à la quadruple, alors le test est déclaré positif (la simple précision ne donnant en général que des résultats très médiocres).

Avec MATLAB, seule la double précision est accessible. Nous avons donc élaboré un test plus simple, mais moins fiable. La vitesse de convergence étant fixée (par exemple, diminution d'un facteur 100 du pas d'accroissement à chaque calcul), si tous les chiffres de ce taux d'accroissement ayant convergés (soulignés) sont communs au calcul analytique (en bleu), ce dernier et jugé correct et le test est déclaré positif (voir le Tableau 3 pour un exemple avec la paramétrisation de niveau 3 dans le cas 4, configuration la plus difficile).

analytique	749491,34902144293
10^{-5}	325245,71871091198
10^{-7}	748250,13176968344
10^{-9}	749484,34460195666
10^{-11}	749491,22642251966
10^{-13}	749491,35933679761
10^{-15}	748590,18167862482

TAB. 3 – *Vérification de la programmation de la matrice jacobienne pour la paramétrisation scalaire de niveau 3 dans le cas 4. La première ligne donne le calcul analytique effectué par le programme et les lignes suivantes donnent la convergence de la limite du taux d'accroissement pour des pas normalisés. Ici, il y a au maximum 7 chiffres communs entre les deux calculs (en bleu) alors que la limite n'en a fait converger que 6 (soulignés). Le test est positif.*

2 Problème inverse

Le problème direct ayant été détaillé au chapitre précédent, nous présentons maintenant les conditions dans lesquelles nous abordons le problème inverse : dans chaque cas du marché, quelles sont les mesures de luminances que nous allons essayer de reproduire, quels sont les points initiaux que nous envisageons et quels sont les points "finaux" que nous espérons ?

2.1 Mesures à inverser

Pour chacun des cas, nous considérons trois jeux de mesures synthétiques de luminances normalisées. Les mesures, dites "exactes", sont calculées pour les profils théoriques de la Figure 5. Elles correspondent à la paramétrisation de niveau 1, et sont représentées sur la Figure 19. Les mesures, dites "bruitées", sont calculées à partir des mesures exactes par ajout d'un bruit suivant les spécifications du CEG (d'après le Tableau 1), elles sont représentées sur la Figure 21. Et enfin les mesures, dites "modélisées", sont calculées à partir des profils modélisés de la Figure 11. Elles correspondent à la paramétrisation complète de niveau 3, et sont représentées sur la Figure 20.

Les mesures modélisées sont, par nature, dans l'image du modèle direct ; par contre, les mesures exactes comportent un bruit de modélisation lié à la paramétrisation imparfaite des profils de température théoriques. Ce bruit de modélisation a une amplitude de l'ordre de celle du bruit blanc utilisé pour bruiter les mesures exactes ; cependant, il est corrélé au signal, et donc plus délicat pour l'inversion. Tant que nous n'inversons pas de mesures réelles, ou issues d'un autre modèle, il n'y a pas de bruit de modélisation lié à la paramétrisation des coefficients d'absorption monochromatique.

2.2 Points initiaux

Dans chaque cas, afin d'évaluer la largeur du domaine d'attraction du minimum global, nous envisageons deux points initiaux correspondant à des profils de température (largement) sous-évalués et sur-évalués, ainsi qu'un troisième, plus proche de la solution. Les composantes des paramètres de température et de coefficient d'absorption monochromatique sont décrites dans les Tableaux 4 à 7 et les profils correspondants ainsi que la table d'interpolation sont représentés sur les Figures 22 à 28. Dans les Tableaux, l'expression $\hat{K}_{\text{vrai}}$ représente la "vraie" table d'interpolation régulière ou maximale et $\hat{K}_{\text{in}}$ représente la "fausse" table estimée par produit tensoriel à partir des moyennes de la vraie dans chaque direction (température et longueur d'onde), elle est en plus affectée d'un coefficient d'amplitude différent de 1.

L'idée est d'essayer d'abord de reproduire les mesures exactes en initiant la minimisation du critère des moindres carrés à l'un des deux premiers points initiaux (éloignés). Le point recherché est alors la projection des profils théoriques sur l'espace des profils modélisés, il n'est pas connu, mais approché par le point qualifié de "vrai" dans la suite. En cas de succès, l'inversion des mesures bruitées est tentée, le point recherché étant le même que précédemment. En cas d'échec, l'inversion des mesures modélisées est abordée, à partir du point initial plus proche, et le point recherché est cette fois-ci connu, puisqu'il s'agit exactement du "vrai" point, ayant servi à produire les mesures modélisées.

	vrai	sous-évalué	sur-évalué	proche	min	max
T_D (K)	3600	3000	4500	3800	3000	4500
$\hat{K}$ (1/m)	$\hat{K}_{\text{vrai}}$	$0.5\hat{K}_{\text{in}}$	$0.5\hat{K}_{\text{in}}$	$0.8\hat{K}_{\text{in}}$	0	10000

TAB. 4 – *Valeurs non normalisées des composantes des paramètres de température et de coefficient d'absorption pour le "vrai" point recherché, pour les trois points initiaux et pour les bornes de l'optimisation dans le cas 1. Les profils correspondants sont regroupés sur la Figure 22.*

	vrai	sous-évalué	sur-évalué	proche	min	max
T_D (K)	3530	3250	4500	3700	3250	4500
T_{Sout} (K)	3000	2500	3250	3200	2500	3250
τ_3 (μs)	0,4	0,05	2	0,6	0	1
$\hat{K}$ (1/m)	$\hat{K}_{\text{vrai}}$	$2\hat{K}_{\text{in}}$	$0.2\hat{K}_{\text{in}}$	$0.8\hat{K}_{\text{in}}$	0	10000

TAB. 5 – *Valeurs non normalisées des composantes des paramètres de température et de coefficient d'absorption pour le "vrai" point recherché, pour les trois points initiaux et pour les bornes de l'optimisation dans le cas 2. Les profils correspondants sont regroupés sur la Figure 24.*

	vrai	sous-évalué	sur-évalué	proche	min	max
T_{SD} (K)	4650	3500	5000	4800	3500	5000
D_{SD} (m/s)	8290	7000	9000	8500	7000	9000
T_{Sout} (K)	3000	2500	3500	3200	2500	3500
τ_3 (μs)	0,25	0,05	2	0,5	0	1
T_S (K)	1336	1000	1500	1400	1000	1500
$\hat{K}$ (1/m)	$\hat{K}_{\text{vrai}}$	$0.5\hat{K}_{\text{in}}$	$0.5\hat{K}_{\text{in}}$	$0.8\hat{K}_{\text{in}}$	0	10000

TAB. 6 – *Valeurs non normalisées des composantes des paramètres de température et de coefficient d'absorption pour le "vrai" point recherché, pour les trois points initiaux et pour les bornes de l'optimisation dans le cas 3. Les profils correspondants sont regroupés sur la Figure 26.*

	vrai	sous-évalué	sur-évalué	proche	min	max
T_{SD} (K)	4050	3750	4500	4100	3750	4500
D_{SD} (m/s)	8980	8000	10000	8700	8000	10000
T_{Sout} (K)	3400	3000	3750	3500	3000	3750
T_S (K)	1100	1000	1500	1200	1000	1500
c_g	12	16	2	11	2	16
τ_3 (μs)	1,35	1,8	0,1	1,4	0	2
c_2	10	16	2	9	2	16
c_3	6	16	2	7	2	16
g_M (1/μs)	0,45	0	10	0,3	0	$+\infty$
$\hat{K}$ (1/m)	$\hat{K}_{\text{vrai}}$	$0.8\hat{K}_{\text{in}}$	$0.8\hat{K}_{\text{in}}$	$0.8\hat{K}_{\text{in}}$	0	10000

TAB. 7 – *Valeurs non normalisées des composantes des paramètres de température et de coefficient d'absorption pour le "vrai" point recherché, pour les trois points initiaux et pour les bornes de l'optimisation dans le cas 4. Les profils correspondants sont regroupés sur la Figure 28.*

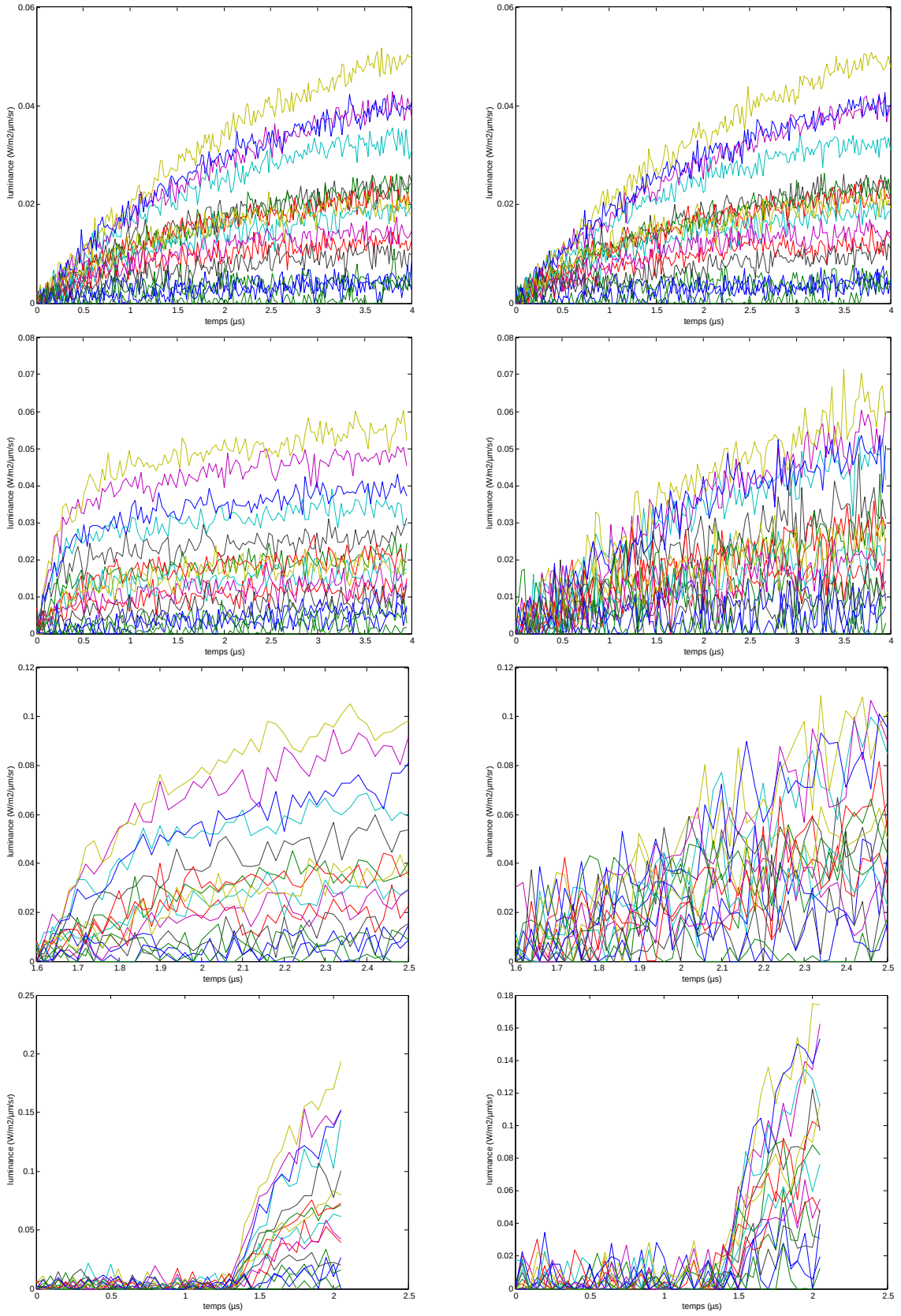

FIG. 21 – *Mesures bruitées. De haut en bas, les quatre cas du marché, à gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

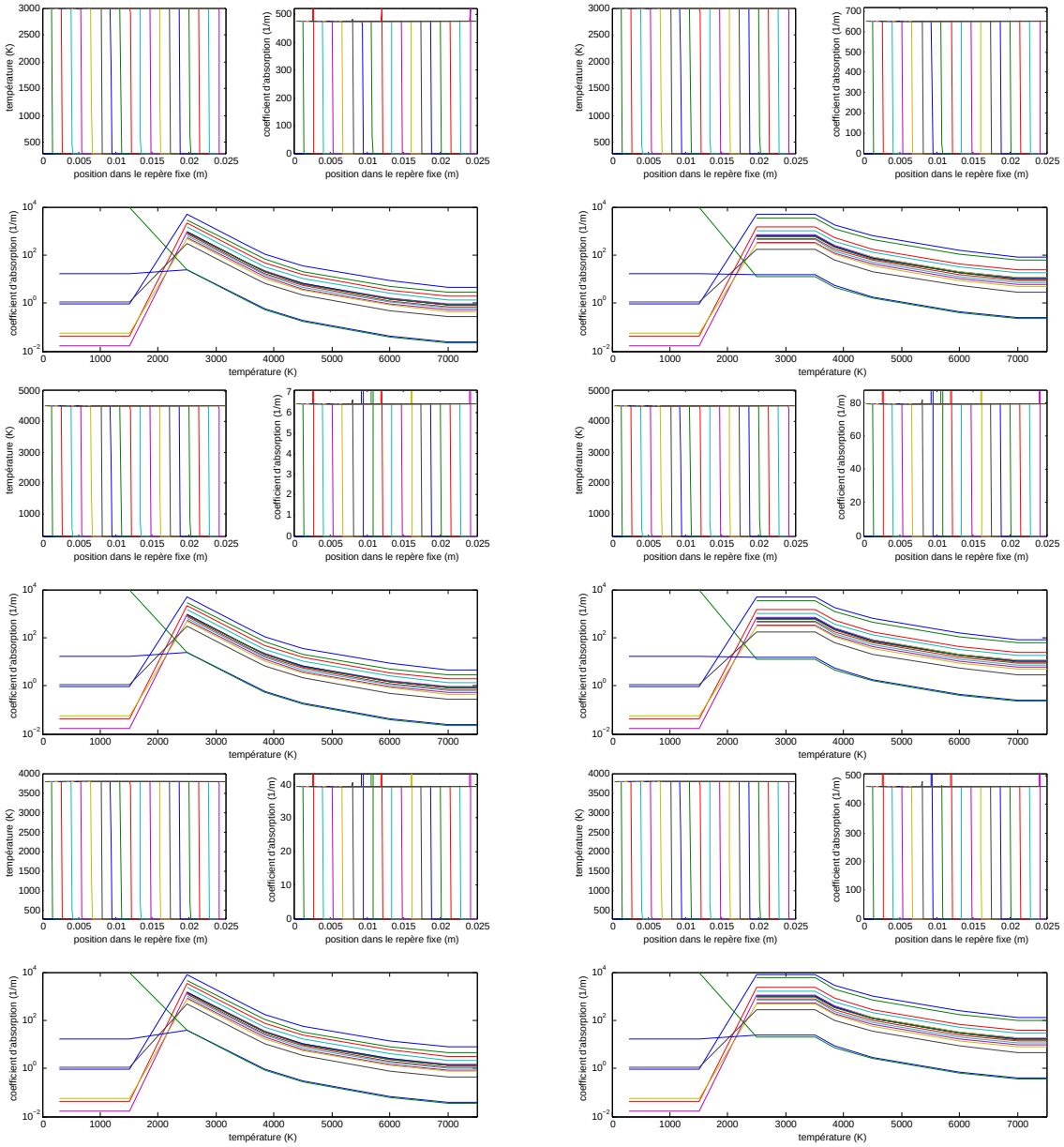

FIG. 22 – *Points initiaux pour l'inversion dans le cas 1 correspondant aux valeurs du Tableau 22. De haut en bas, les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

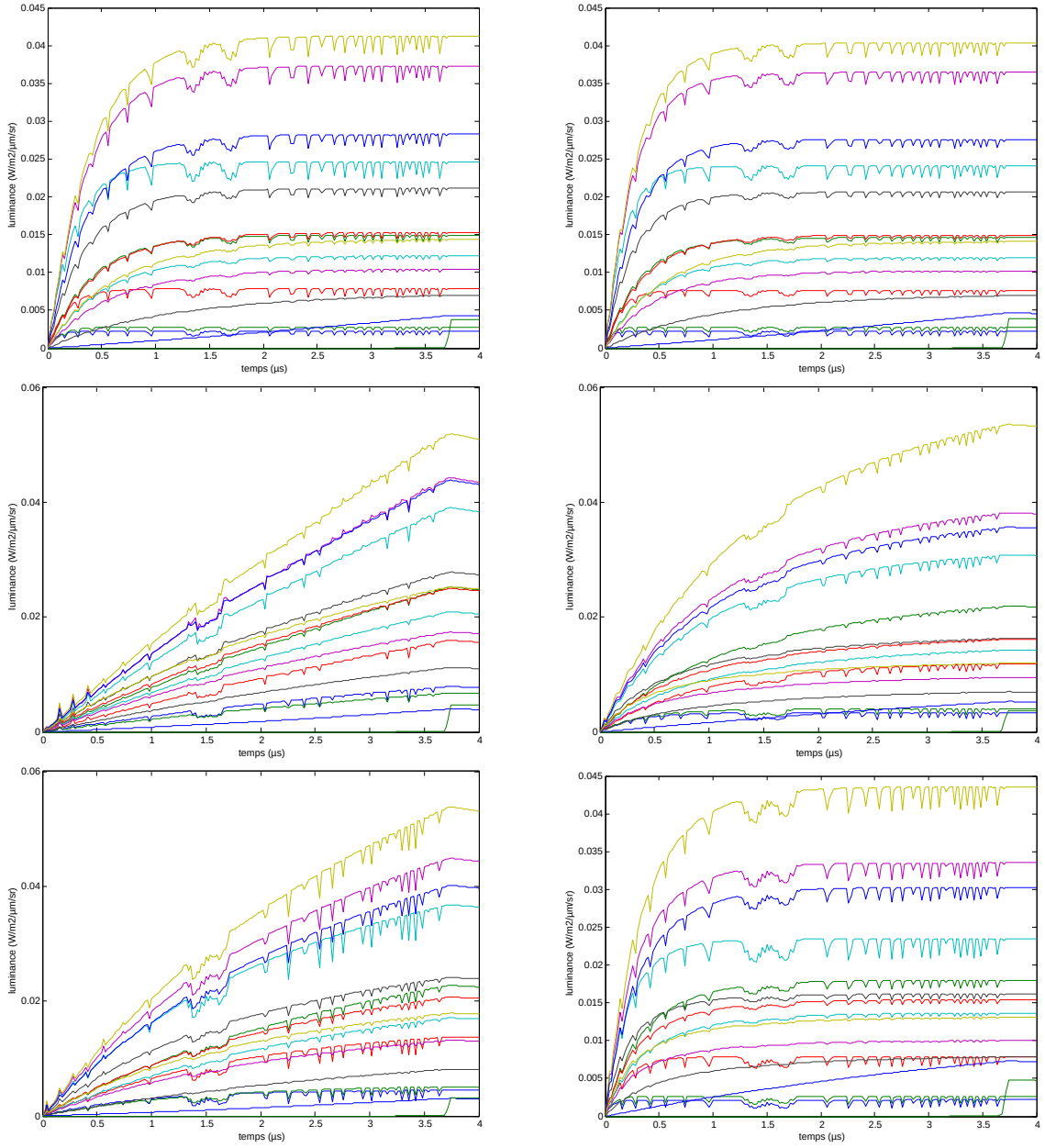

FIG. 23 – *Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 1 correspondant aux valeurs du Tableau 22. De haut en bas, avec les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

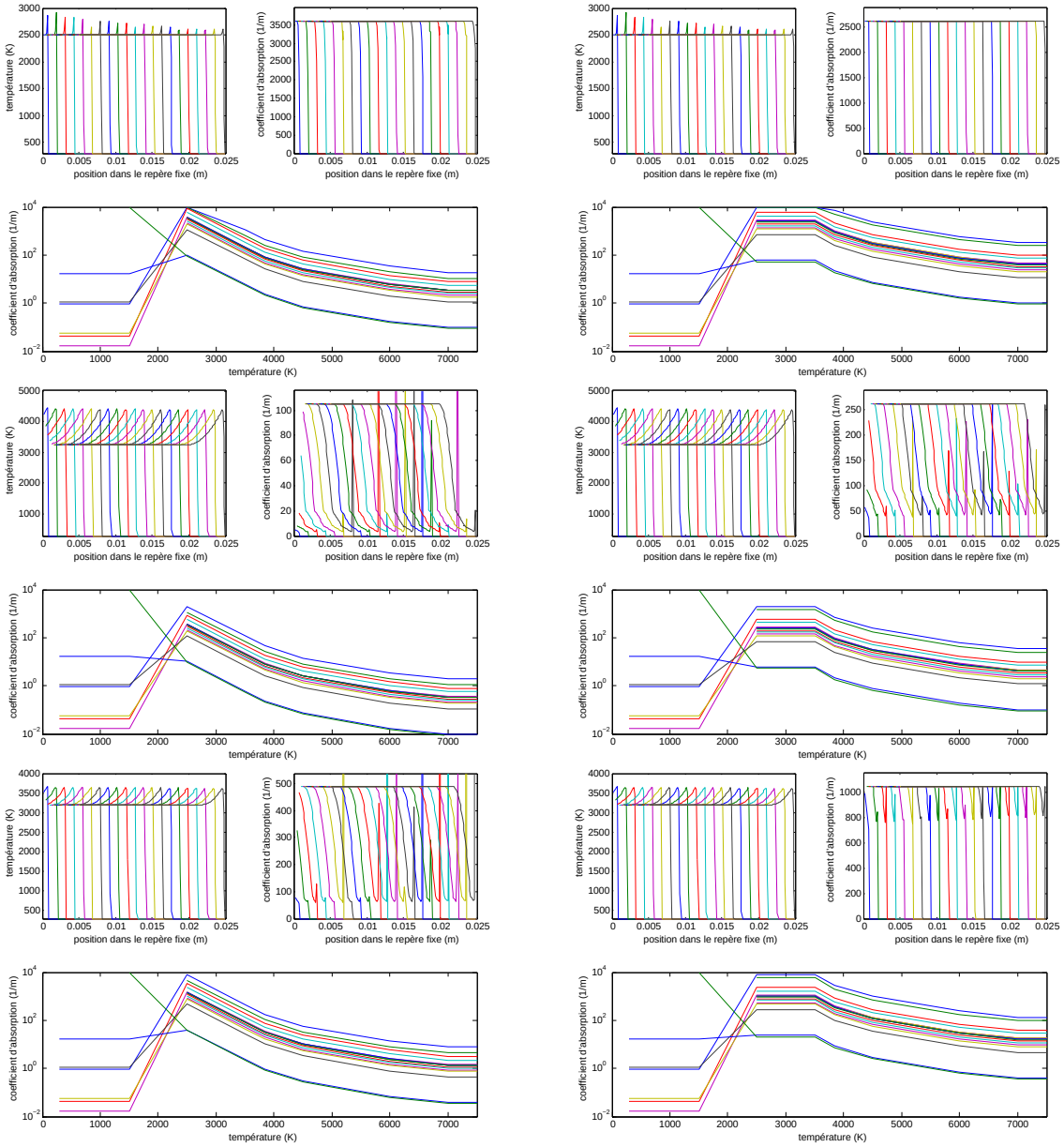

FIG. 24 – *Points initiaux pour l'inversion dans le cas 2 correspondant aux valeurs du Tableau 5. De haut en bas, les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

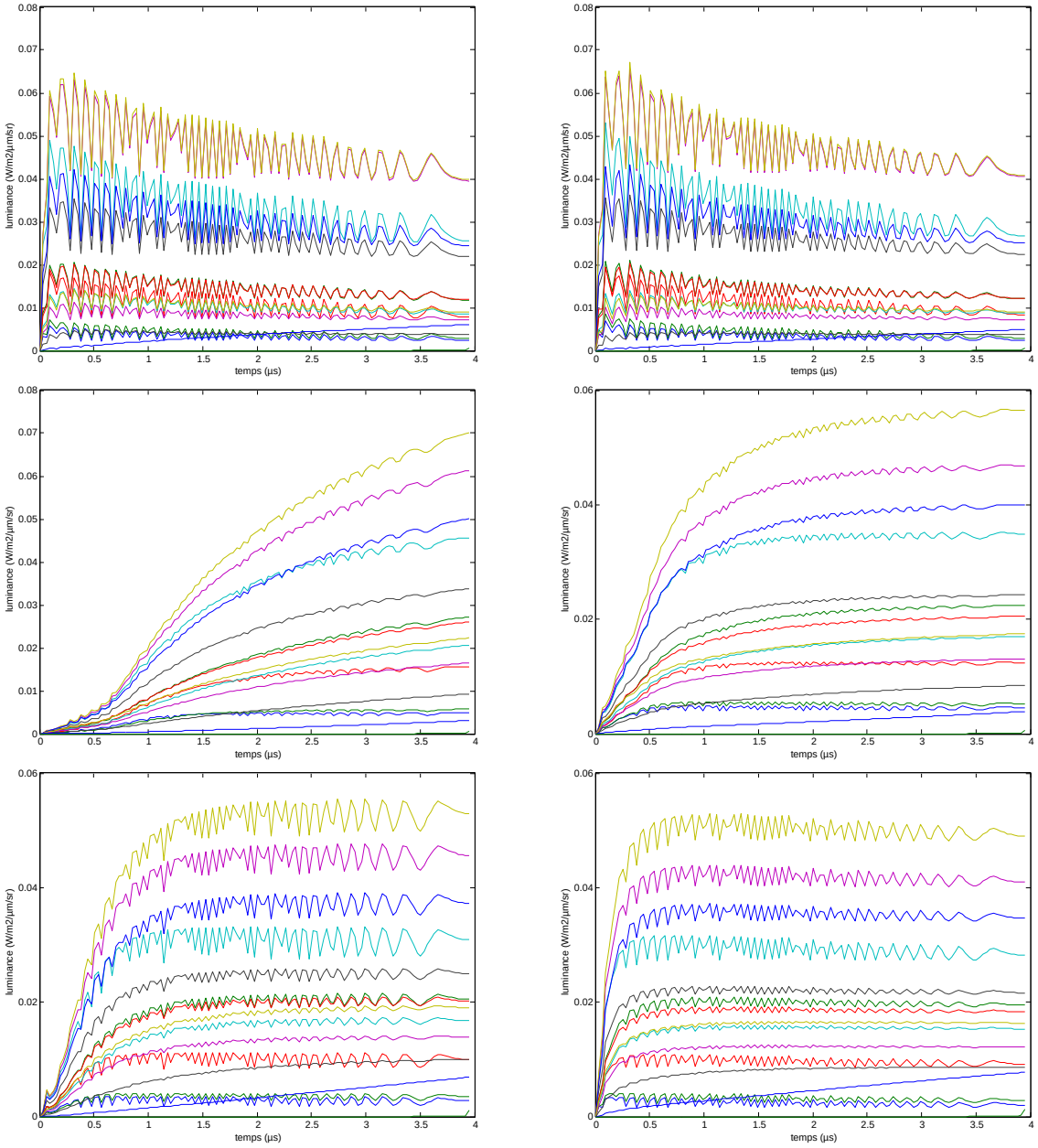

FIG. 25 – *Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 2 correspondant aux valeurs du Tableau 5. De haut en bas, avec les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

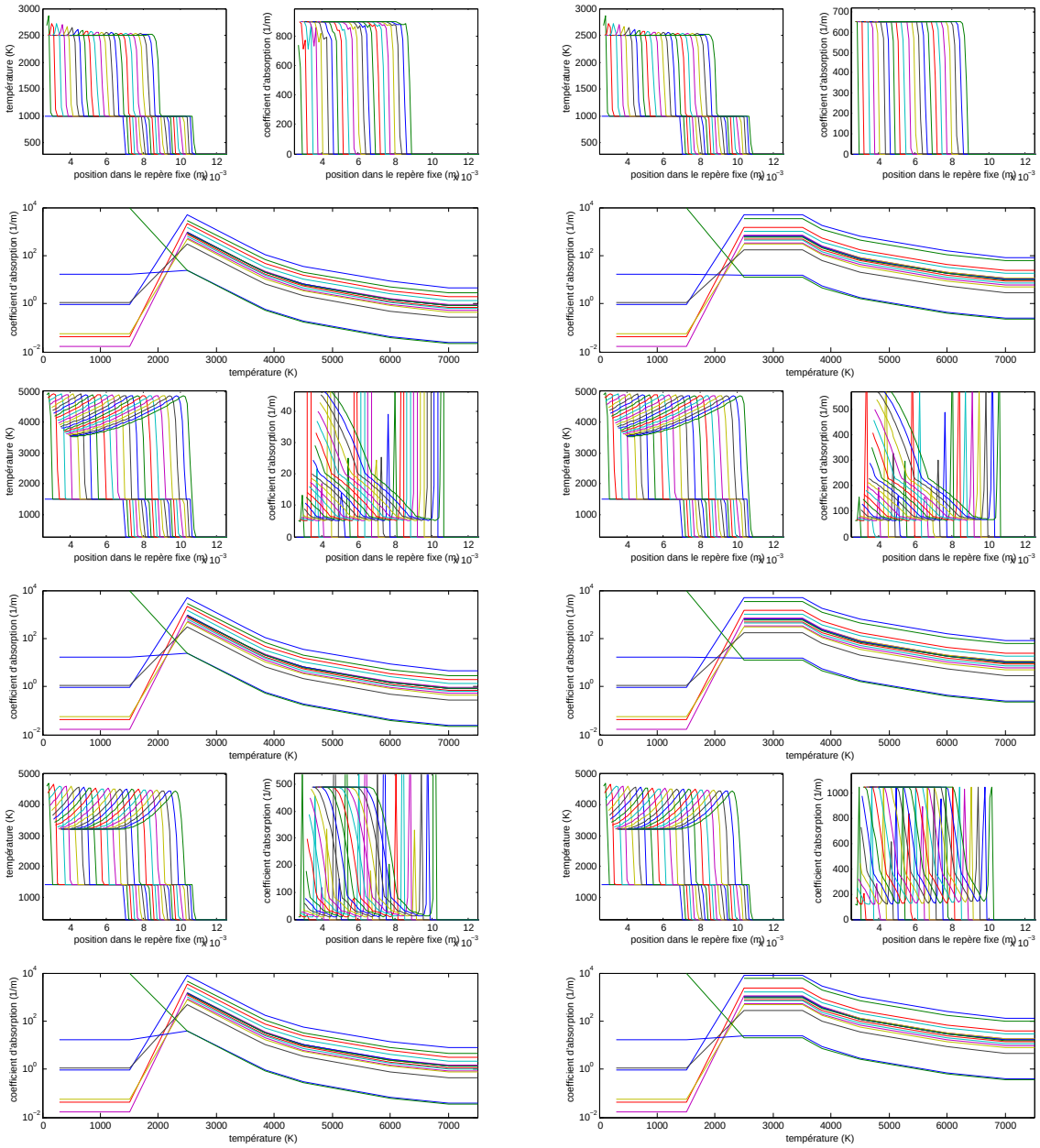

FIG. 26 – *Points initiaux pour l'inversion dans le cas 3 correspondant aux valeurs du Tableau 6. De haut en bas, les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

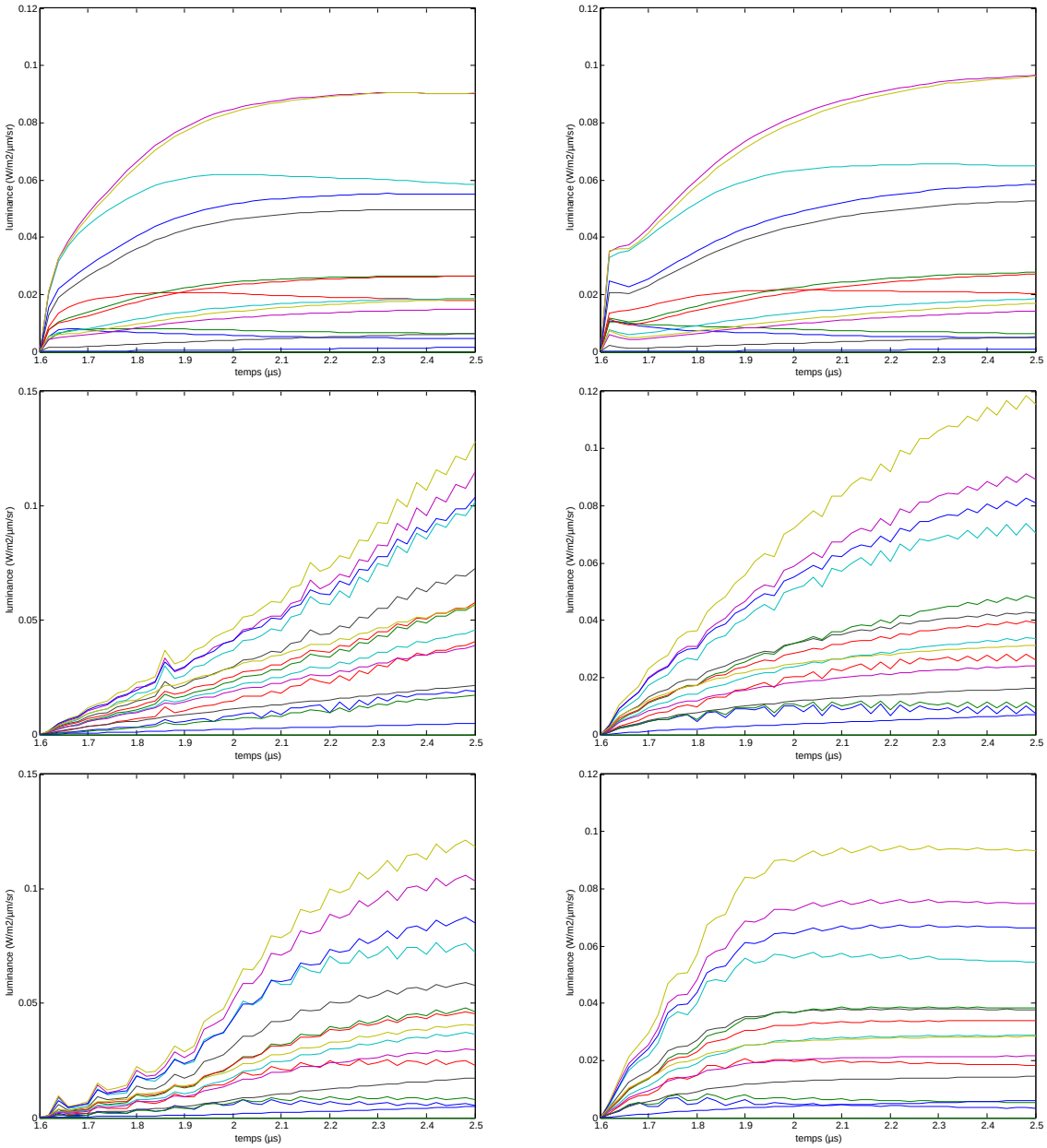

FIG. 27 – *Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 3 correspondant aux valeurs du Tableau 6. De haut en bas, avec les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

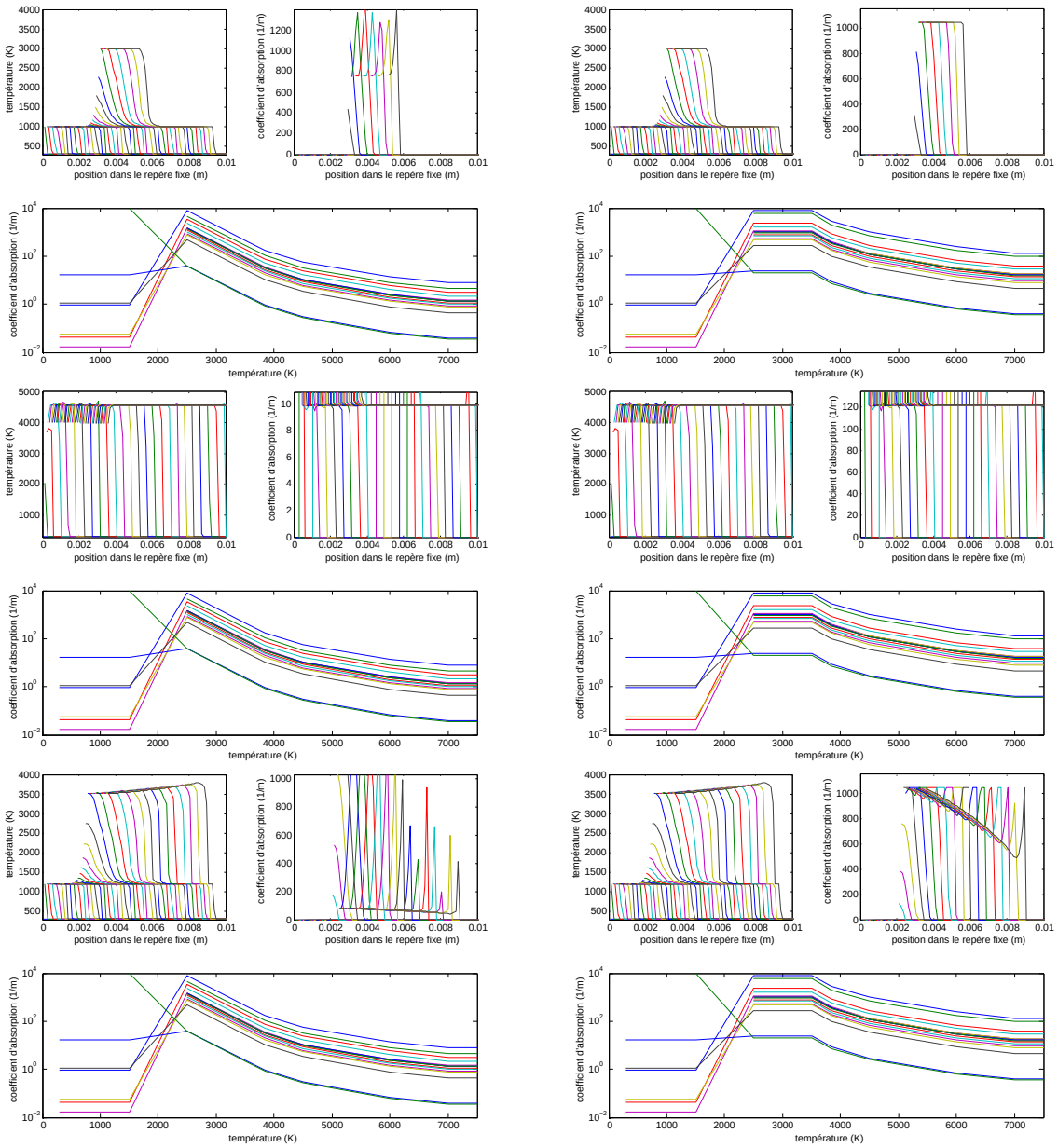

FIG. 28 – *Points initiaux pour l'inversion dans le cas 4 correspondant aux valeurs du Tableau 7. De haut en bas, les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

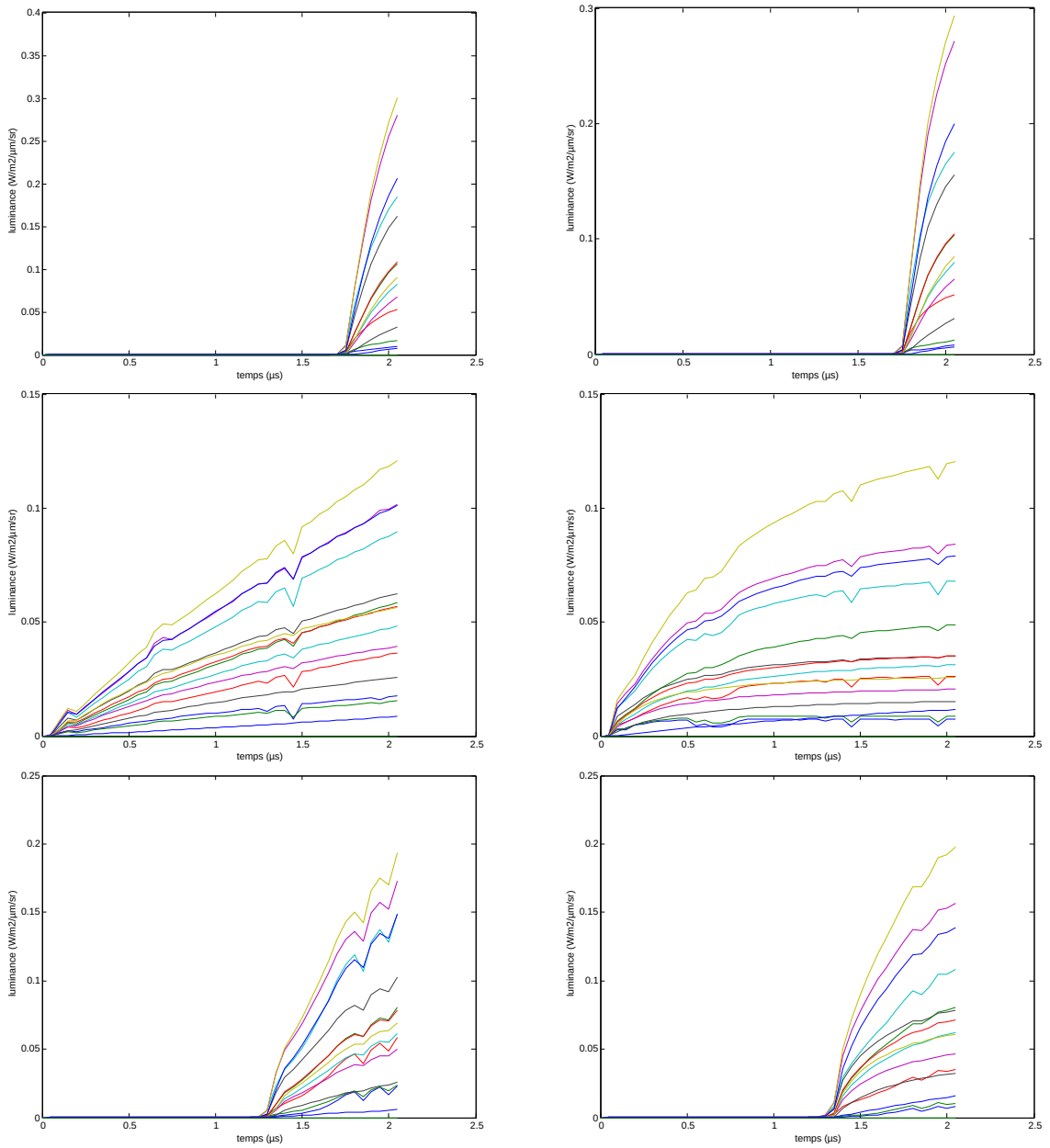

FIG. 29 – *Mesures initiales pour l'inversion dans le cas 4 correspondant aux valeurs du Tableau 7. De haut en bas, avec les points sous- et sur-évalués, et le point proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

3 Analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité de la modélisation $\mathcal{F}$ par rapport aux paramètres X permet d'évaluer la quantité d'information que les mesures de luminances recèlent sur les paramètres physiques recherchés que sont la température et le coefficient d'absorption monochromatique. Cette analyse se réalise en deux étapes.

La première procède de la décomposition en valeurs singulières de la matrice jacobienne des dérivées ($\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial X}$). Les valeurs singulières sont une généralisation de la notion de valeur propre pour les matrices rectangulaires pour lesquelles l'espace de départ et celui d'arrivée sont distincts, par exemple voir [2]. Reposant sur une approximation linéaire, cette décomposition ne donne qu'une indication locale sur le comportement de la fonction à inverser ; les vecteurs singuliers donnent les directions principales du système. Dans le cas de mesures synthétiques, ce comportement peut être analysé au vrai point, puisqu'il est connu. Pour des mesures réelles, il faut se contenter du comportement au point initial, qui peut être d'autant plus différent de celui au point recherché que le problème est non-linéaire.

La seconde correspond au tracé du critère des moindres carrés sur un segment joignant le point initial au vrai point. Cette courbe donne une indication globale du comportement de la fonction sur le segment. Cette indication reste partielle, car elle ne représente qu'une seule direction dans un espace de plus grande dimension (de 2 à quelques dizaines). L'absence de minima locaux est plutôt bon signe, car elle indique qu'il existe au moins un chemin permettant de rallier le vrai point en minimisant le critère à partir du point initial. Bien sûr, cette étude globale n'est possible qu'avec des mesures synthétiques, puisqu'il faut connaître le vrai point.

3.1 Analyse locale

3.2 Décomposition en valeurs singulières

La décomposition en valeurs singulières permet d'écrire toute matrice A de n lignes et m colonnes sous la forme

$$A = USV^T \tag{106}$$

où U et V sont des matrices carrées unitaires respectivement d'ordre n et m, et S une matrice diagonale de n lignes et m colonnes dont les éléments sont classés par ordre décroissants (il y en a au plus $\min(n, m)$ non nulles).

Les premiers vecteurs singuliers dans l'espace de départ (colonnes de V) sont associés aux valeurs singulières les plus grandes. Ils donnent les directions de cet espace de départ permettant la plus grande action de la matrice A, cette action étant caractérisée par les vecteurs singuliers dans l'espace d'arrivée (colonnes de U). Plus la décroissance des valeurs singulières est lente, plus la matrice A est sensible à un grand nombre de directions indépendantes dans l'espace de départ.

Si A est la matrice jacobienne des dérivées d'une fonction, alors, étant donné un niveau de bruit sur des mesures de la sortie de cette fonction, le nombre de valeurs singulières normalisées (par la première) supérieures à ce niveau de bruit donne le nombre maximum de coefficients indépendants de l'entrée de la fonction que l'on peut espérer estimer de façon stable à partir des mesures de la sortie.

3.2.1 Les cas du marché

Dans les quatre cas du marché, nous avons d'abord procédé à la décomposition en valeurs singulières de la matrice jacobienne ($\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial X}$) pour les sept paramétrisations au vrai point. La comparaison de la décroissance des valeurs singulières pour les différentes paramétrisations donne un indicateur de leur bonne adaptation ou non au problème : une plus forte décroissance révèle une paramétrisation menant à une sous-représentation du problème, donc inadaptée. Cette étude est menée pour les deux tables d'interpolation des coefficients d'absorption.

Pour les paramétrisations de niveau 1 et 2 (représentations fines de la température et/ou du coefficient d'absorption), la dimension reste conséquente, ce qui nous oblige à représenter la matrice jacobienne sous forme creuse et à n'en évaluer que quelques valeurs singulières par une méthode itérative (routine `svds` de MATLAB). Il est à noter que pour la paramétrisation de niveau 1, le temps de calcul de la décomposition explose lorsque l'on se rapproche des dimensions correspondant au cas 1 ($N_k = 201$, $N_i = 200$ et $N_j = 16$). Les résultats pourraient ne pas être très fiables pour ce cas limite des possibilités de MATLAB sur une machine à 512 Mo de mémoire. Pour les paramétrisations de niveau 3, par contre, la dimension reste très raisonnable (de l'ordre de 2 à quelques dizaines) et nous pouvons alors faire la décomposition complète (routine `svd`).

Ensuite, nous donnons le détail des premiers éléments singuliers (les valeurs singulières dans un rapport 1000 avec la première et les 12 premiers vecteurs singuliers dans l'espace des paramètres et dans celui des mesures)

pour les sept paramétrisations au vrai point, puis pour la seule paramétrisation complète de niveau 3 aux trois points initiaux. Et ce, pour les deux tables d'interpolation et dans les quatre cas du marché.

Nous remarquons que pour les paramétrisations réduites (donc de faible dimension), les premiers vecteurs singuliers dans l'espace des paramètres sont généralement parallèles aux axes : ils pointent dans la direction d'une composante précise. En effet, les vecteurs singuliers formant une base orthonormée, une composante proche de 1 signifie que toutes les autres sont négligeables. Ce fait n'est bien sûr pas garanti par la décomposition en valeurs singulière en général, mais simplifie l'interprétation physique de ces vecteurs singuliers.

Contenu informatif des mesures sur les paramètres physiques La première remarque générale est que les mesures de luminance contiennent relativement beaucoup d'information sur les paramètres physiques (température et coefficients d'absorption). En effet, les 20 premières valeurs singulières pour la paramétrisation de niveau 1 (paramétrisations fines de T et K) sont pratiquement égales dans les trois premiers cas (courbes noires des Figures 30, 35 et 40), et elles restent dans un rapport 10 pour le quatrième cas (courbes noires de la Figure 45). Rappelons que la dimension du paramètre de niveau 1 est $N_k N_i(N_j + 1)$, et que celle des mesures est $N_k N_j$.

Dans les cas 1 et 2, ces premières valeurs singulières sont associées à des vecteurs singuliers dans l'espace des paramètres surtout dirigés vers les composantes de température (Figures 31 et 36). Une meilleure répartition de la sensibilité de la modélisation sur les composantes des deux paramètres physiques que celle pour la normalisation par les valeurs de référence aurait été préférable, mais n'a pas été détectée à temps.

Dans les cas 3 et 4, pour lesquels le nombre d'instants de mesures N_k est significativement plus petit (une quarantaine contre une centaine ou même deux cents dans le premier cas), on assiste à un rééquilibrage des sensibilités, sauf avec la table régulière dans le cas 4 où la température reste la plus sensible (Figures 41 et 46).

Paramétrisation réduite du coefficient d'absorption Ensuite, nous notons que les paramétrisations réduites du coefficient d'absorption (niveau 2) ne font perdre que très peu de sensibilité, au regard du gain en dimension d'un facteur d'au moins $N_k N_i / N_l$, soit quelques milliers (courbes bleu foncé, vertes et rouges des Figures 30, 35, 40 et 45). Et ce, d'autant plus que les composantes liées au coefficient d'absorption reprennent le dessus pour la sensibilité de la modélisation (sauf, bien sûr, pour la paramétrisation scalaire, pour laquelle le déséquilibre de dimension est en faveur de la température de façon écrasante, Figures 32, 37, 42 et 47). Les quelques cas pour lesquels la sensibilité reste très forte (les courbes rouges ou éventuellement bleu foncé des Figures 30, 35, 40 ou 45 se trouvent très proches des courbes noires) correspondent aux cas où la température reste la plus sensible (et est toujours de grande dimension).

L'interpolation linéaire sur quelques nœuds de température (étant données les valeurs de température des profils, les deux derniers nœuds n'ont qu'une influence négligeable, et auraient pus être supprimés) est donc, du point de vue de la sensibilité de la modélisation, une manière correcte de procéder.

Il est intéressant de remarquer que la paramétrisation tensorielle n'est responsable que d'une faible perte de sensibilité, au regard du gain d'un facteur 4 sur la dimension du paramètre de coefficient d'absorption (courbes bleu foncé et vertes des Figures 30, 35, 40 et 45). Encore une fois, cela souligne le caractère judicieux de ce choix.

Par contre, la paramétrisation scalaire ne sera vraiment intéressante que si l'on arrive à renforcer la sensibilité par rapport à la seule composante liée au coefficient d'absorption qu'est le facteur d'amplitude de la table d'interpolation.

Paramétrisation réduite de la température D'un point de vue général, la paramétrisation réduite de la température (adaptée à chaque cas du marché), ne fait pas trop perdre non plus de sensibilité, surtout compte tenu du fait que la dimension est encore divisée par un facteur de quelques milliers.

Pour la paramétrisation scalaire de niveau 2, il faut en effet modérer sa très bonne sensibilité par la seule influence des composantes de température, et celle de niveau 3, de dimension très réduite (de 2 à 10 suivant le cas), révèle toujours jusqu'à 2, 4 ou 6 valeurs singulières dans un facteurs 1000 avec la plus grande (comparer les courbes rouges, aux courbes roses des Figures 30, 35, 40 et 45).

Dans le cas de la paramétrisation tensorielle, il est remarquable que celles de niveau 2 et 3 montrent quasiment la même décroissance des valeurs singulières dans les cas 1, 2 et 3 (comparer les courbes vertes aux courbes jaunes des Figures 30, 35 et 40). Cela montre que les paramètres de température retenus, liés aux caractéristiques principales des profils à modéliser, sont les plus sensibles. Dans le quatrième cas, la conclusion est plus mitigée, révélant qu'il faille sans doute encore y travailler...

La paramétrisation complète de niveau 2 montre le même défaut d'une trop grande sensibilité par rapport aux composantes de température que la scalaire dans les cas 2, 3 et 4, cependant, celle de niveau 3 conserve néanmoins un nombre de valeurs singulières dans un facteur 1000 avec la première supérieur à une dizaine (pour une dimension de l'ordre de la centaine).

Détail des éléments singuliers pour la paramétrisation complète de niveau 3 Il est maintenant intéressant de détailler les directions dans lesquelles pointent les premiers vecteurs singuliers de l'espace des paramètres pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans chaque cas afin de prédire quelles composantes ont des chances d'être retrouvées.

Pour le cas 1, il n'y a qu'une seule composante pour le paramètre de température, la valeur du front T_D.

Cette valeur du front est toujours associée à la première valeur singulière, sauf pour la paramétrisation tensorielle pour laquelle elle est associée à la troisième ou à la quatrième, suivant la table utilisée (Figure 33).

Cela signifie que la valeur du front T_D est le paramètre principal du système.

Pour le cas 2, la dimension du paramètre de température est 3, et ses composantes sont la valeur du front T_D, celle après la détente T_{Sout} et le délai entre les deux τ_3.

Nous remarquons principalement que les composantes T_{Sout}, T_D et τ_3 sont souvent classées aux premières places dans cet ordre (il y a aussi les composantes du paramètre de coefficient d'absorption) pour la table régulière, et que les directions des premiers vecteurs singuliers ne sont pas du tout parallèles aux axes avec la table maximale (Figure 38). Cependant, les composantes de température restent également associées aux places de tête pour cette table.

Encore une fois, la température soutenue T_{Sout} (visuellement, la caractéristique principale des profils) est le paramètre principal du système.

Dans le troisième cas, la dimension du paramètre de température est égale à 5. Ses composantes sont la valeur du front principal T_{SD}, sa vitesse D_{SD}, la valeur soutenue T_{Sout}, le délai τ_3 et la valeur du front secondaire T_S.

Pour la table régulière, le tiercé gagnant de la sensibilité est D_{SD}, T_{Sout} et τ_3, T_S et T_{SD} prenant les deux places suivantes, sauf pour la paramétrisation tensorielle (Figure 43). La très bonne sensibilité par rapport à la vitesse du front principal s'explique simplement par la présence de nombreuses oscillations dans les luminances dont la position temporelle est bien évidemment modifiée par cette vitesse. Cela est plutôt mauvais signe quant à la recherche de ce paramètre, car notre expérience de l'inversion sismique, qui fait appel à la propagation d'ondes, nous fait soupçonner la présence de nombreux minima locaux. Il est à prévoir que sans la présence de ces oscillations parasites, la sensibilité à la vitesse D_{SD} serait bien moindre. Comme dans le cas précédent, l'usage de la table maximale à tendance à plus mélanger l'influence des différentes composantes. Cependant, les trois places de tête sont toujours occupées par des vecteurs pointant globalement vers les composantes τ_3, D_{SD} et T_{Sout}.

Dans ce cas, les paramètres principaux du système sont la vitesse du front principal D_{SD} et la valeur soutenue T_{Sout}, et dans une moindre mesure, le délai τ_3.

Pour le quatrième et dernier cas, la dimension du paramètre de température s'élève à 9 ; les composantes sont la valeur du front principal T_{SD}, sa vitesse D_{SD}, la valeur soutenue T_{Sout}, la valeur du front secondaire T_S, la courbure de la condition à la limite à gauche c_g, le délai τ_3, les courbures du terme source c_2 et c_3 et l'amplitude du terme source g_M.

Les premières valeurs singulières sont associées au délai τ_3, puis à la valeur soutenue T_{Sout} et à la vitesse D_{SD}, viennent enfin la valeur du front principal T_{SD} et, pour la paramétrisation scalaire, la valeur du front secondaire T_S et l'amplitude du terme source g_M. Les courbures c_g, c_2 et c_3 ne semblent donc pas être des paramètres judicieusement choisis, puisque les mesures leur sont insensibles.

Les paramètres principaux du système sont, dans ce cas, le délai τ_3 et la valeur soutenue T_{Sout}, et dans une moindre mesure, la vitesse du front principal D_{SD}.

Pour les différents points initiaux envisagés pour l'inversion (Figures 34, 39, 44 et 49), les différences marquantes sont que, dans tous les cas, la sensibilité diminue fortement pour le premier point initial (sous-évalué), et que par contre, dans les cas 2 et 3, la sensibilité augmente fortement pour le deuxième point initial (sur-évalué), obtenant jusqu'à une soixantaine de valeurs singulières dans un rapport 1000 avec la première dans le cas 3. Pour le quatrième cas, la chute est, au contraire, sévère pour ce même point initial sur-évalué, la seconde valeur propre étant déjà largement au-delà du rapport 1000 avec la première !

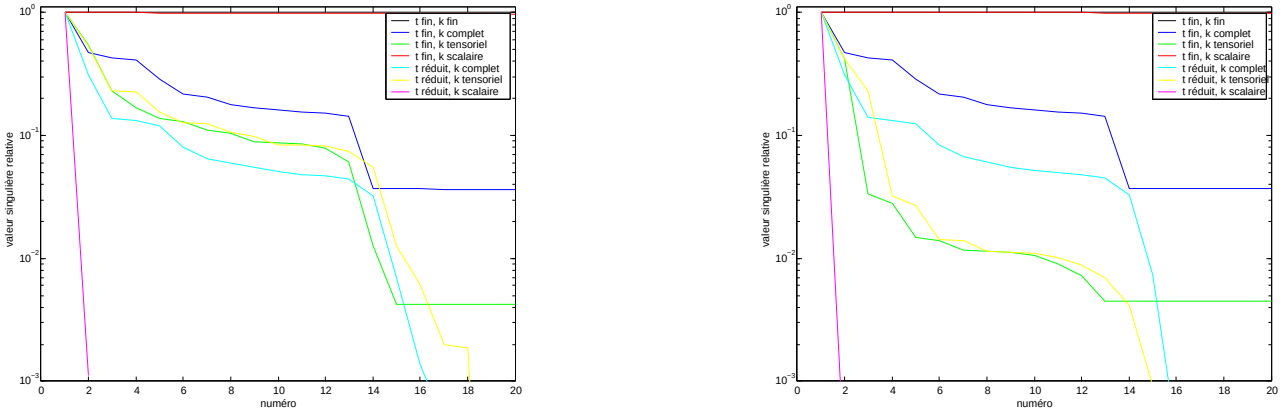

FIG. 30 – *Valeurs singulières de la matrice jacobienne au vrai point pour les sept paramétrisations dans le cas 1. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

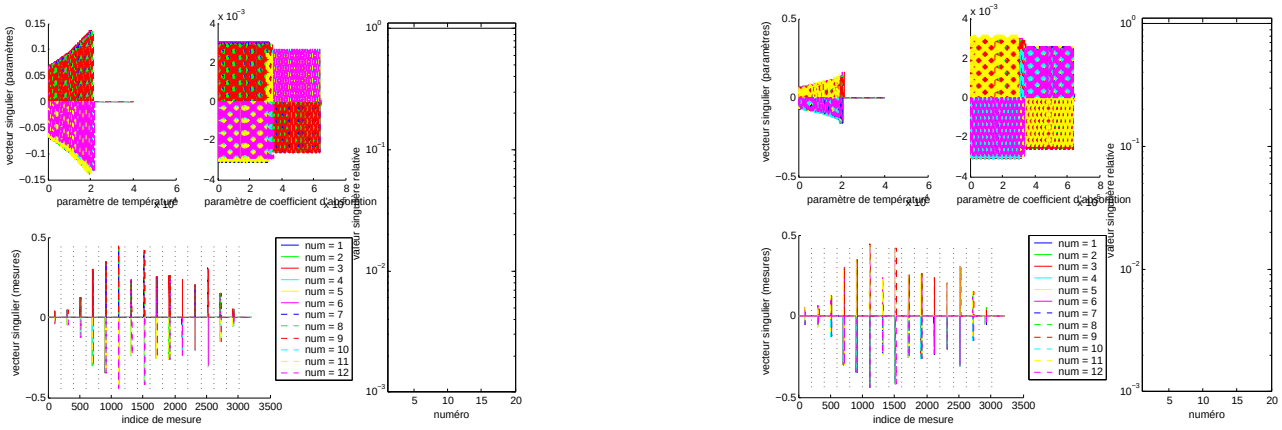

FIG. 31 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour la paramétrisation de niveau 1 dans le cas 1. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

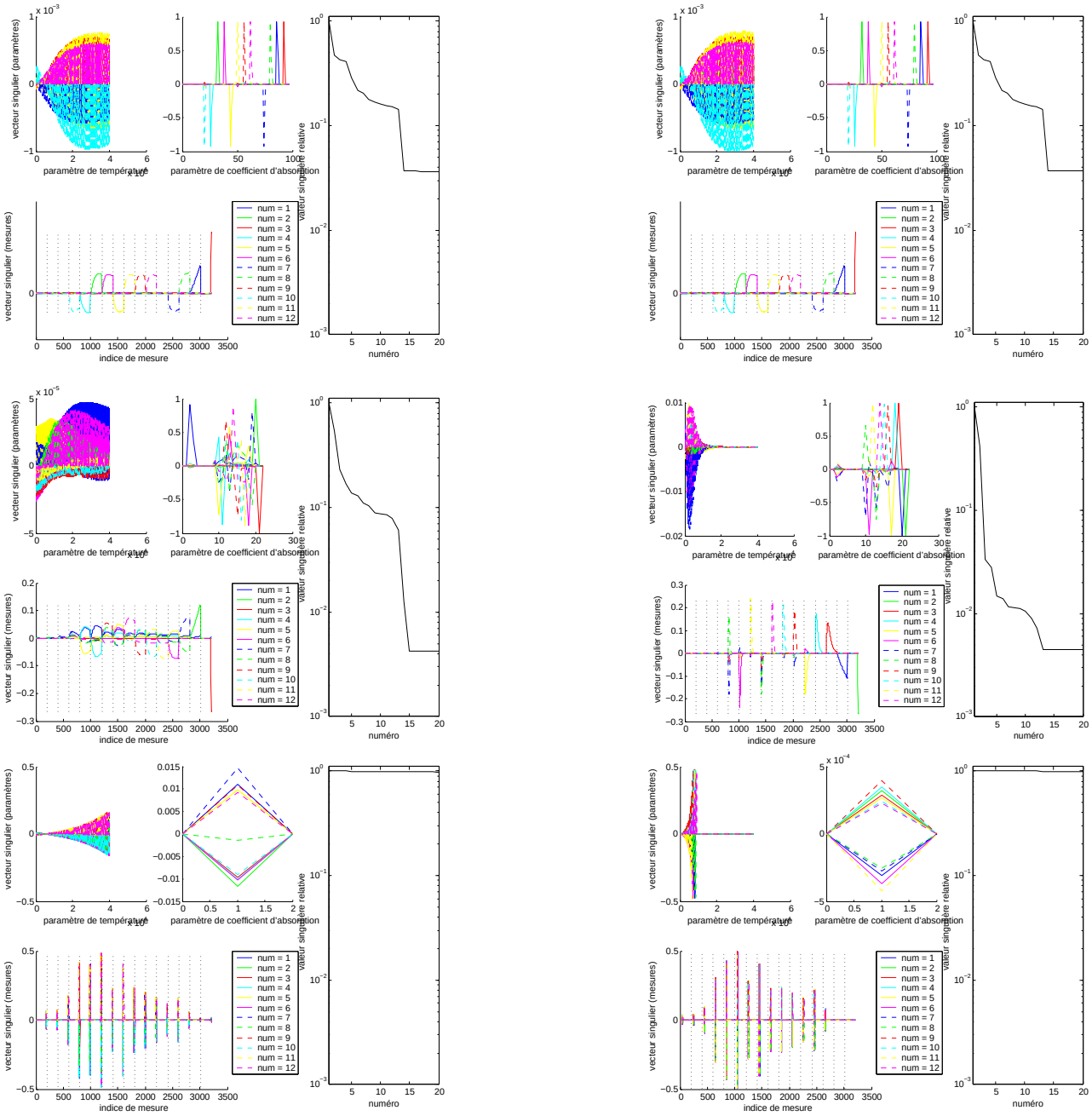

FIG. 32 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 1. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

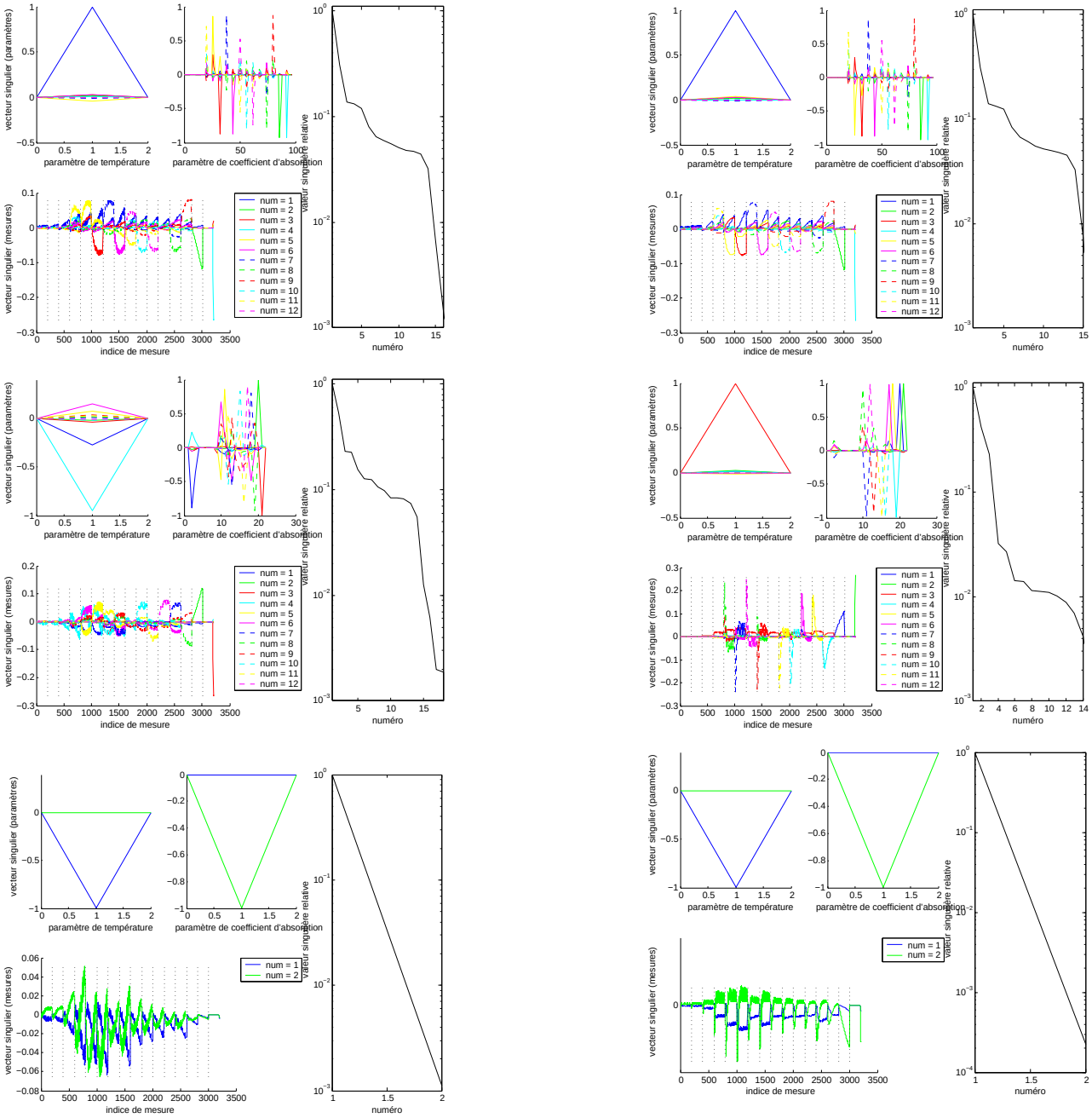

FIG. 33 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 1. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

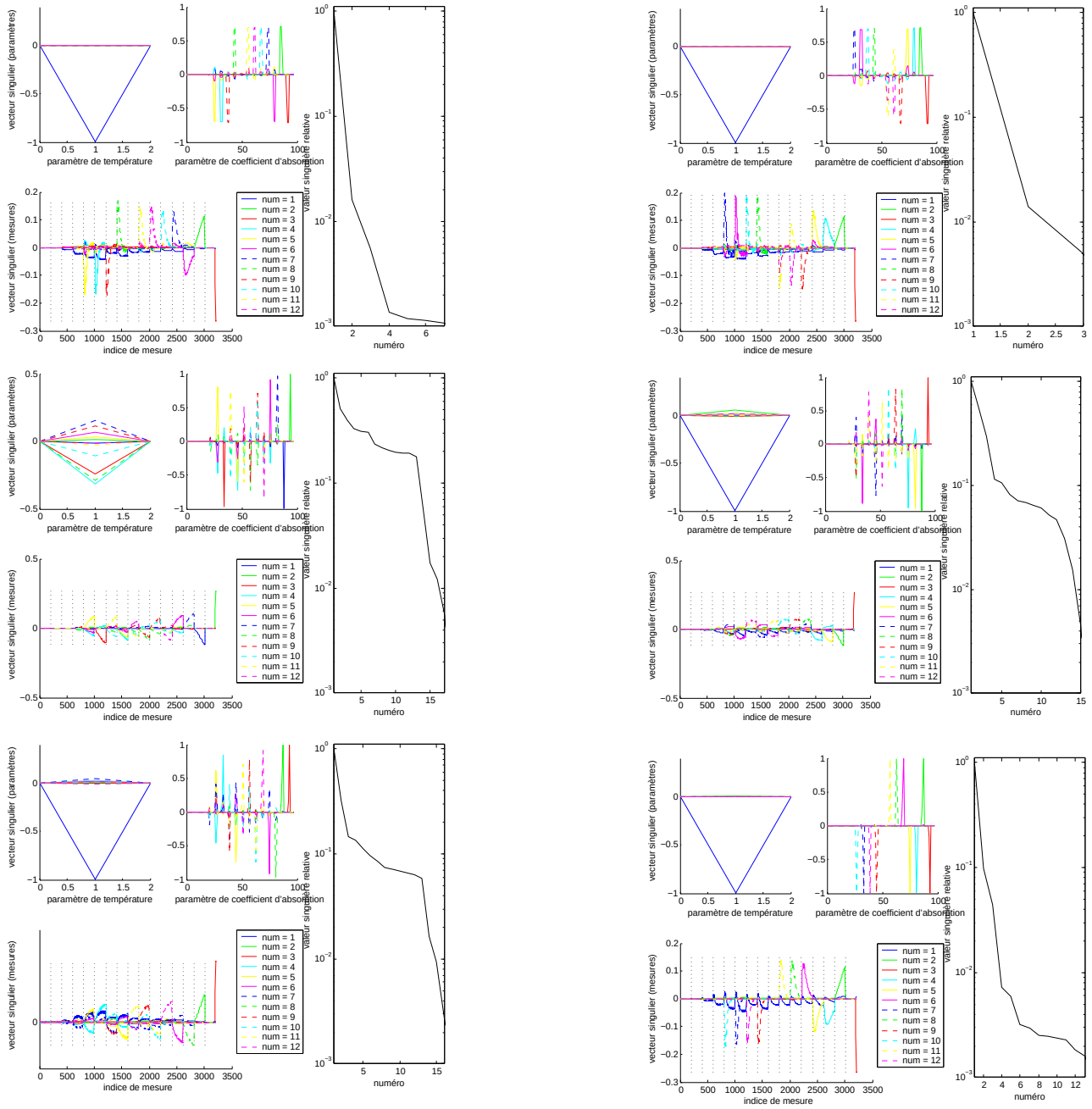

FIG. 34 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 1. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et plus proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

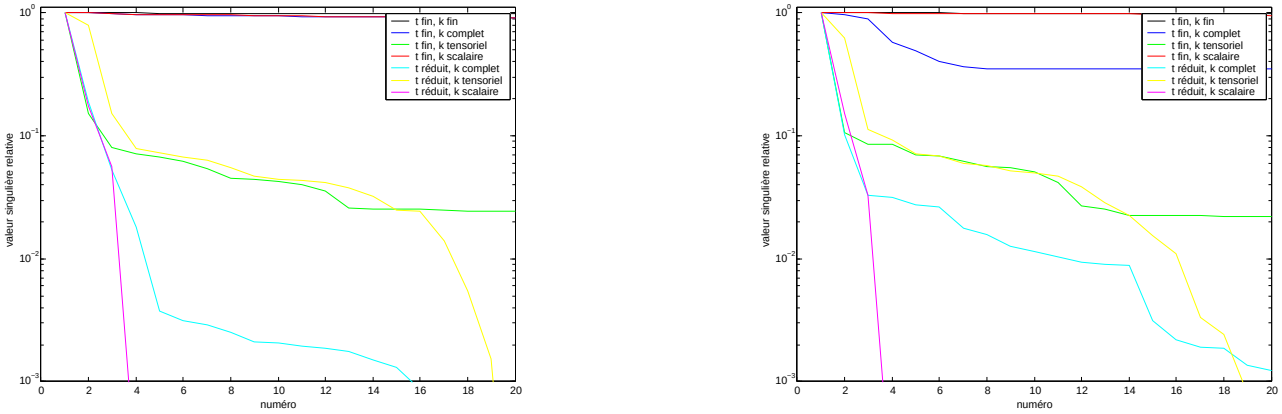

FIG. 35 – *Valeurs singulières de la matrice jacobienne au vrai point pour les sept paramétrisations dans le cas 2. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

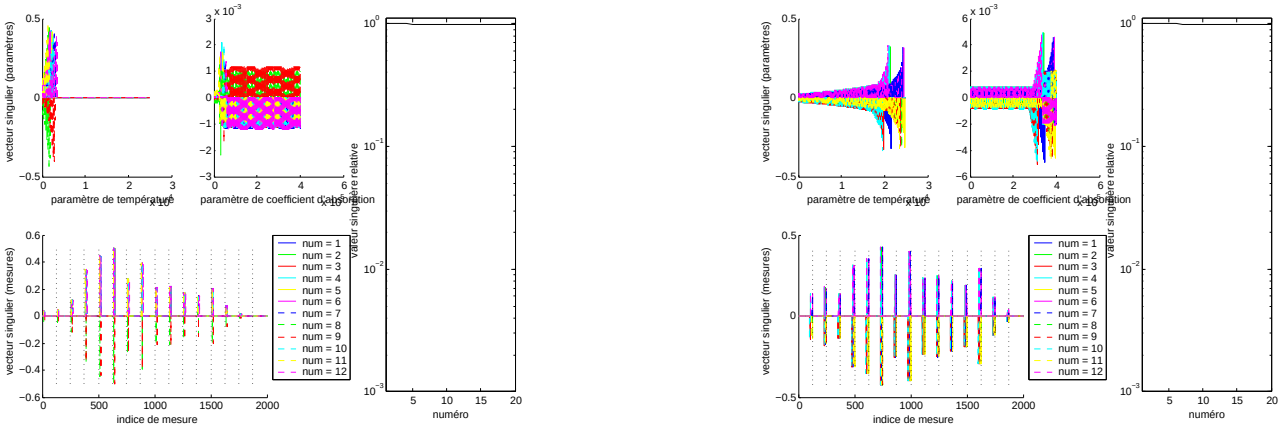

FIG. 36 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour la paramétrisation de niveau 1 dans le cas 2. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

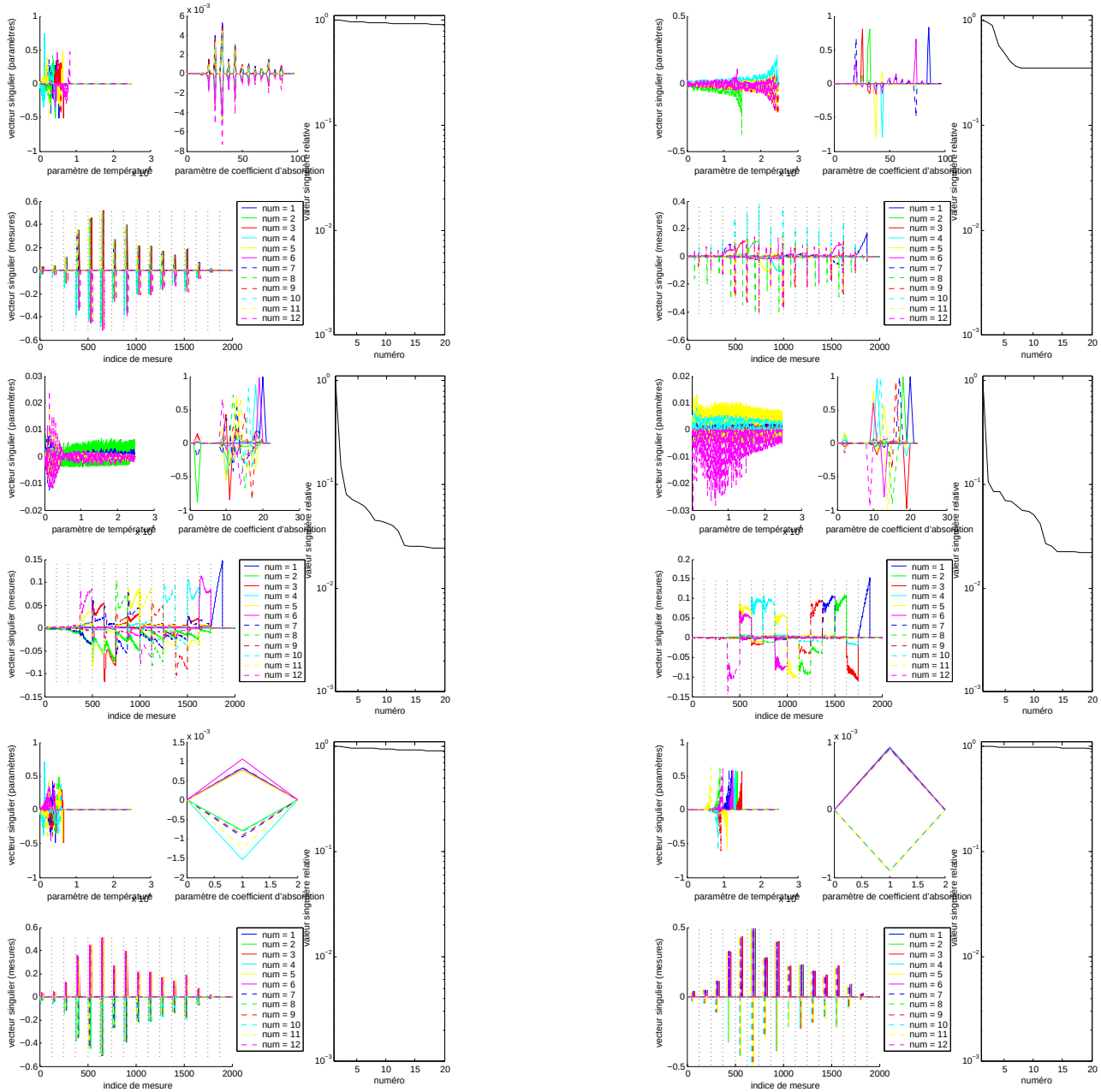

FIG. 37 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 2. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

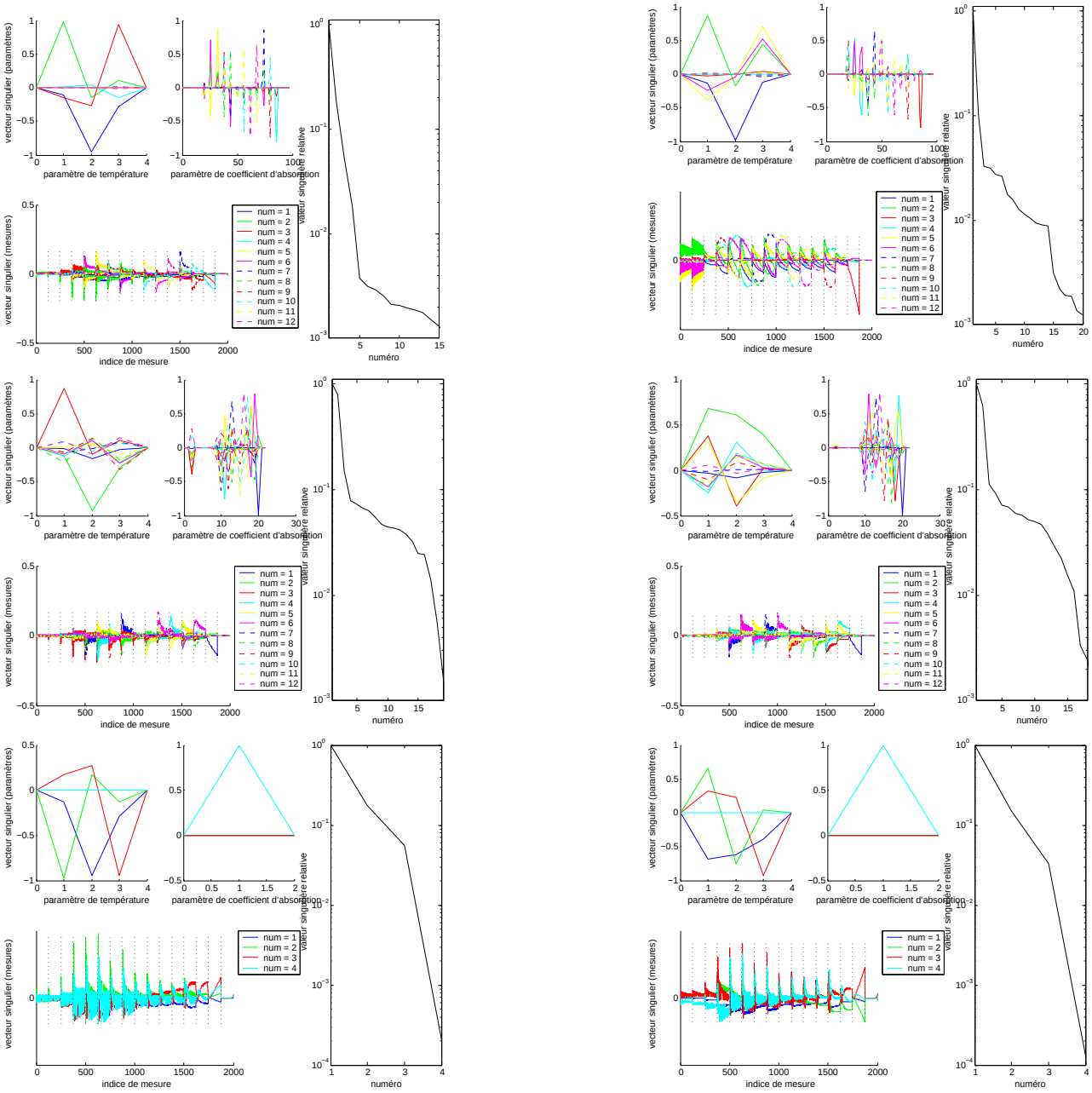

FIG. 38 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 2. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

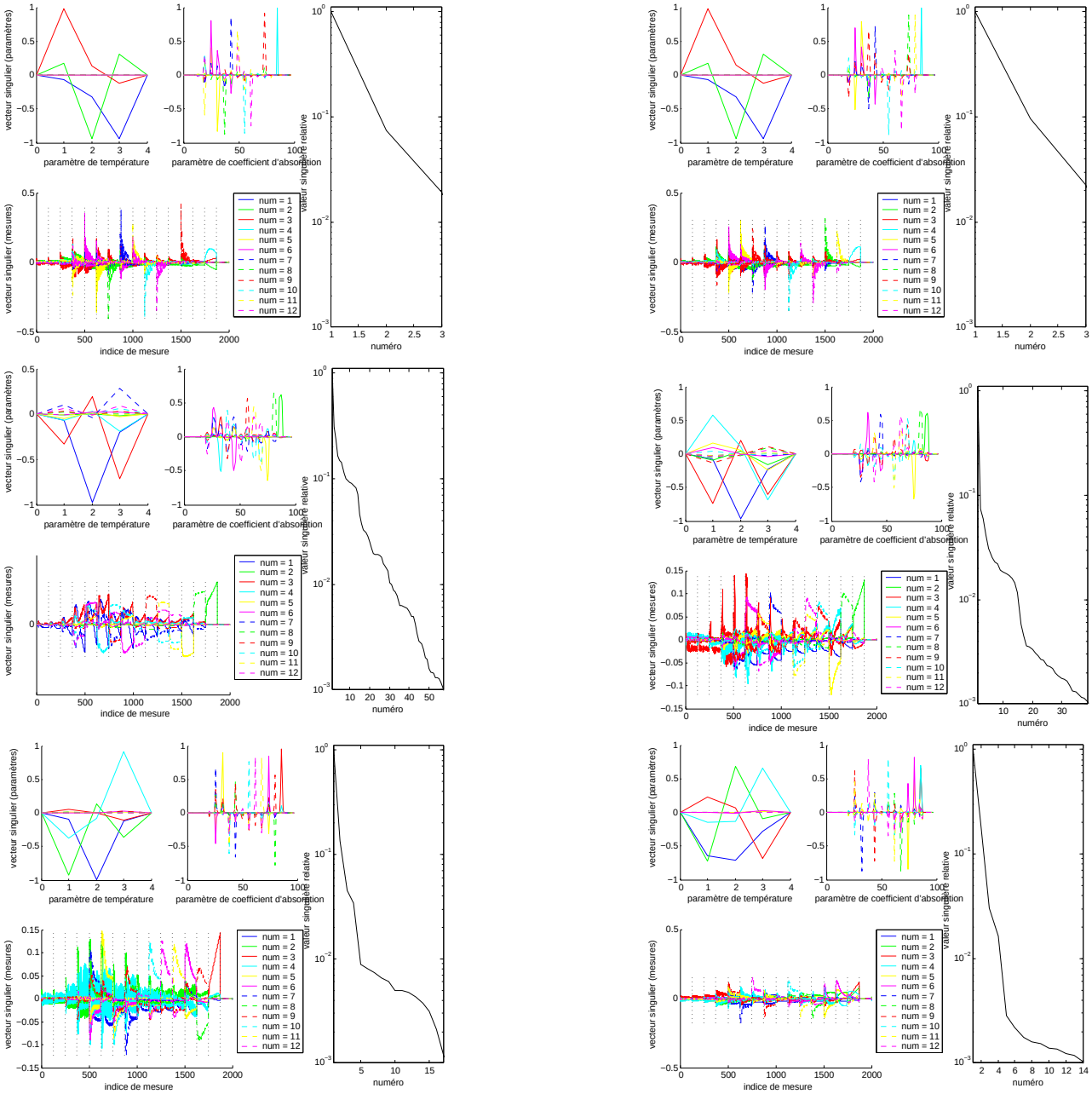

FIG. 39 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 2. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et plus proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

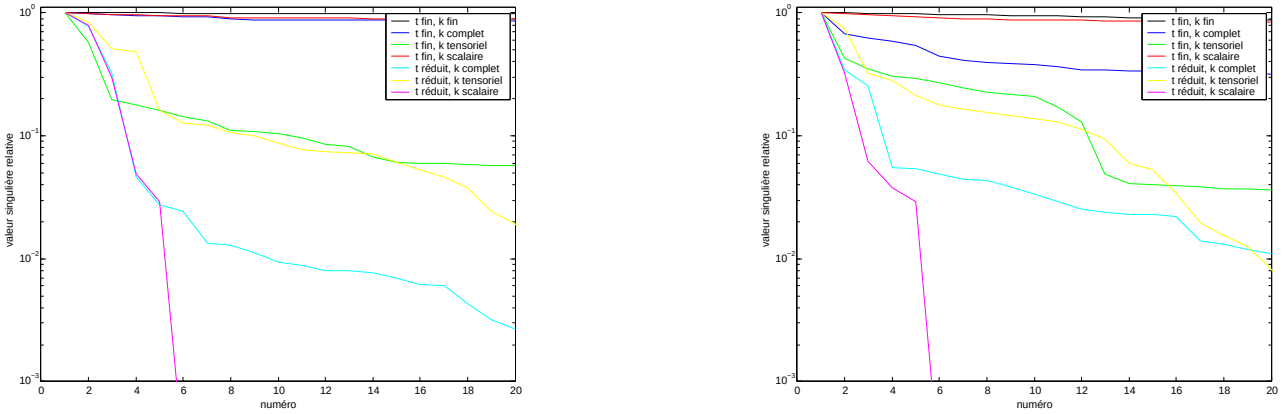

FIG. 40 – *Valeurs singulières de la matrice jacobienne au vrai point pour les sept paramétrisations dans le cas 3. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

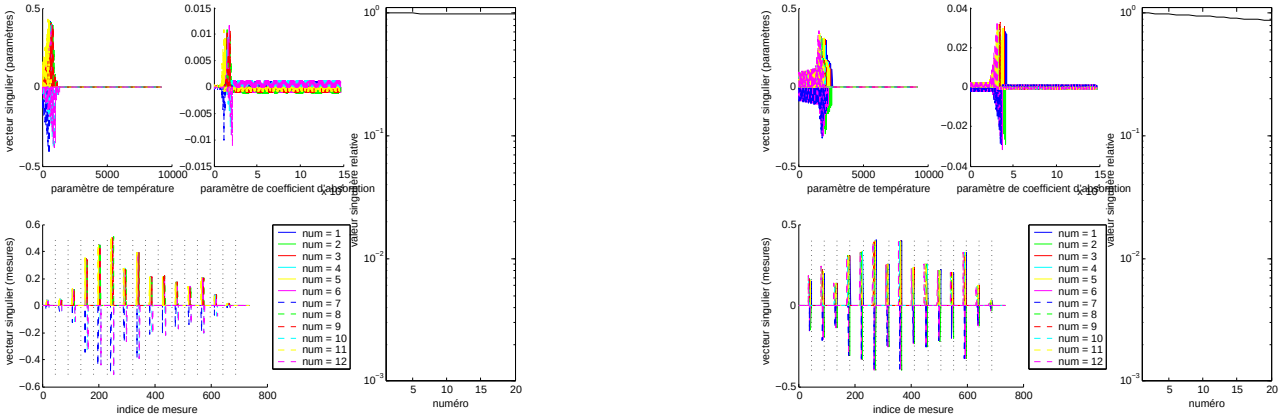

FIG. 41 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour la paramétrisation de niveau 1 dans le cas 3. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

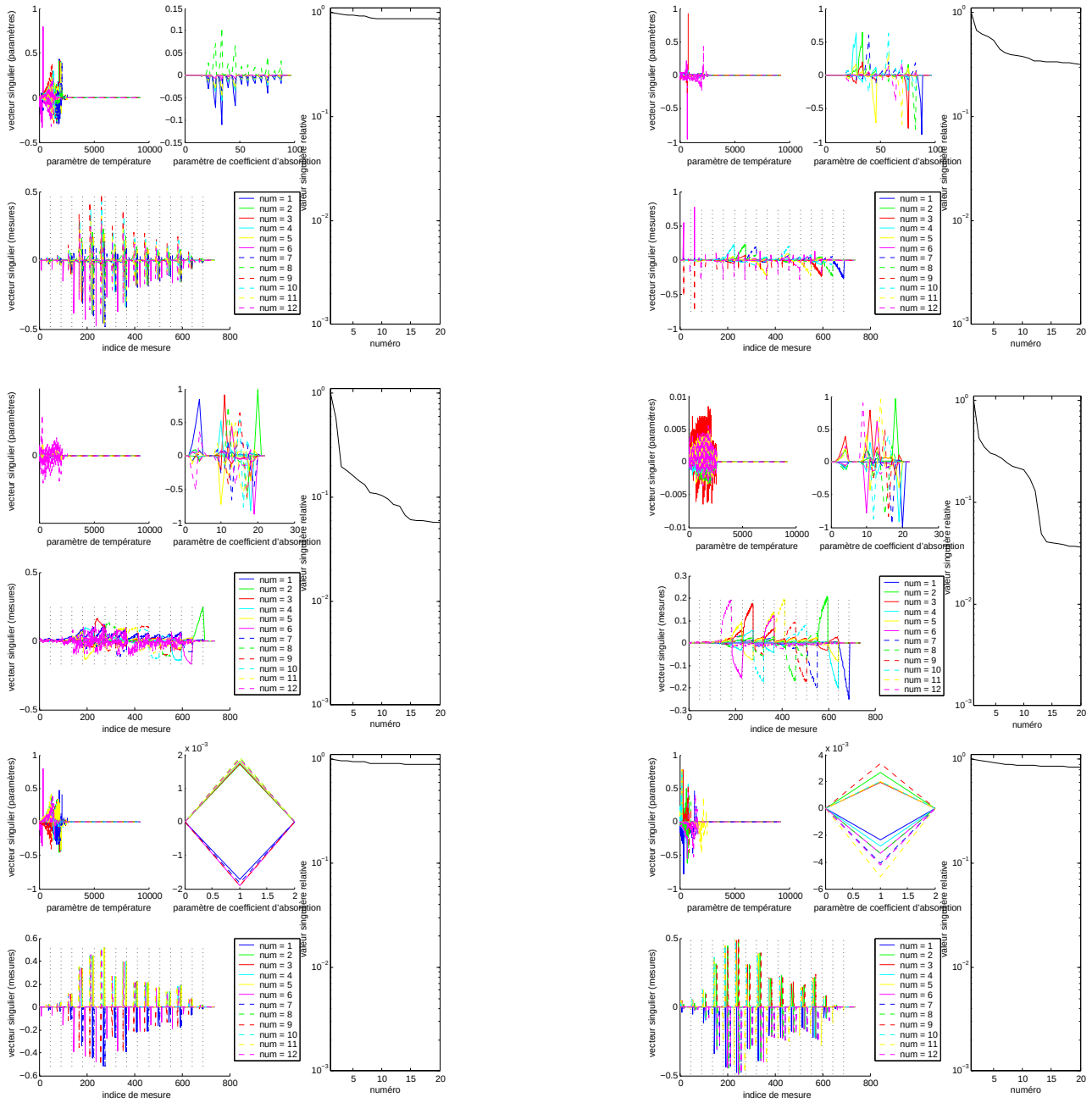

FIG. 42 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 3. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

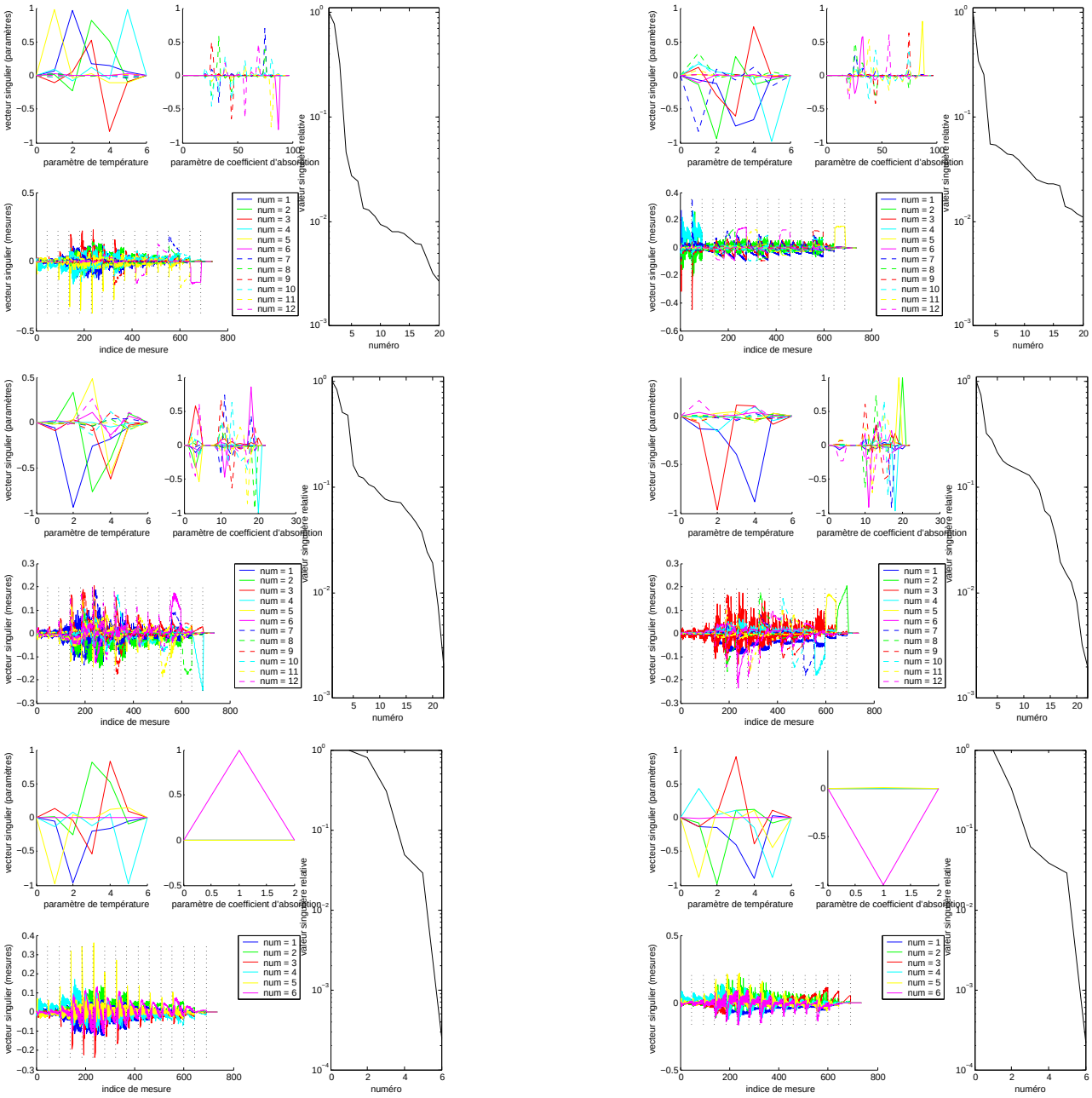

FIG. 43 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 3. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

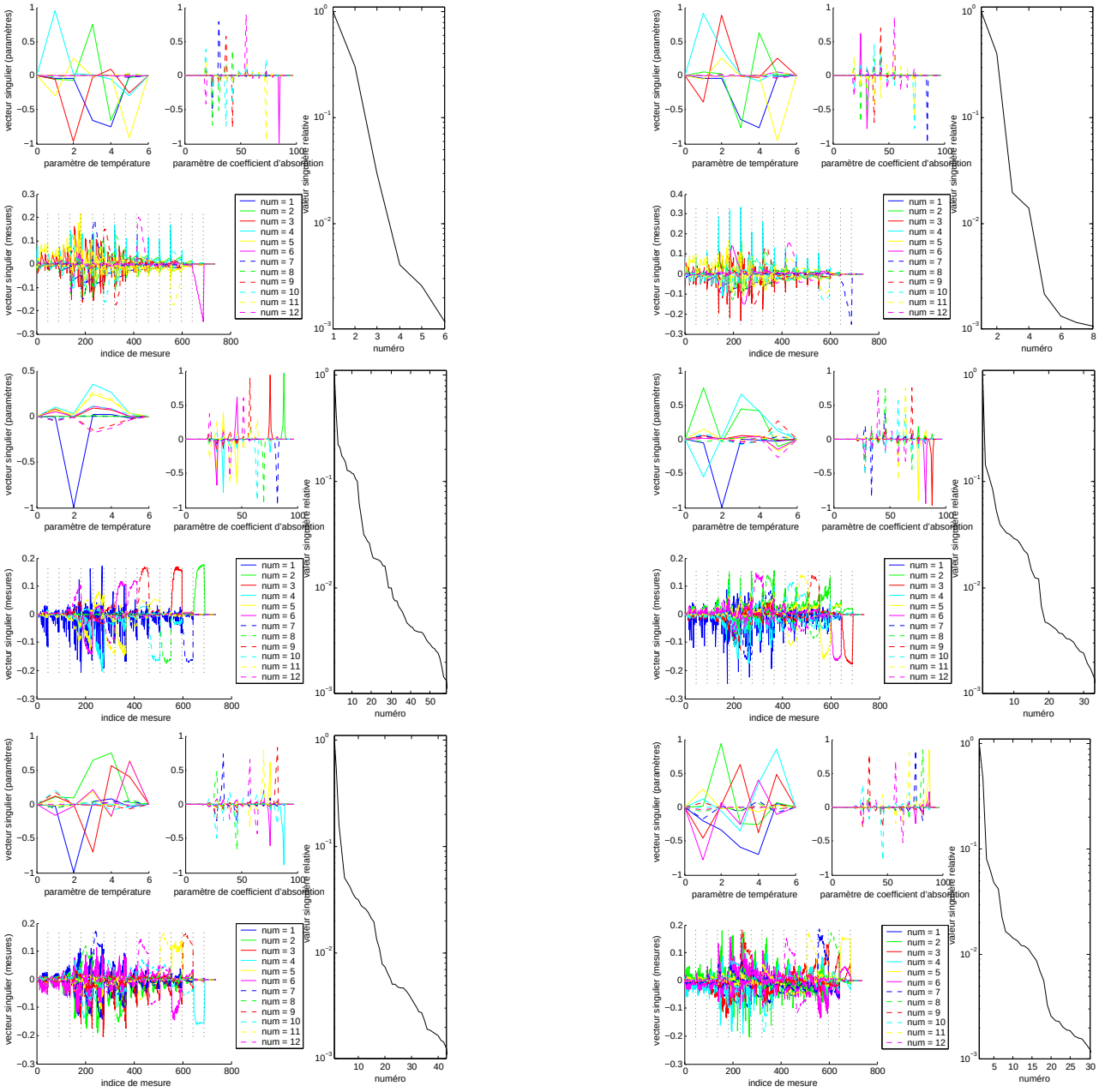

FIG. 44 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 3. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et plus proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

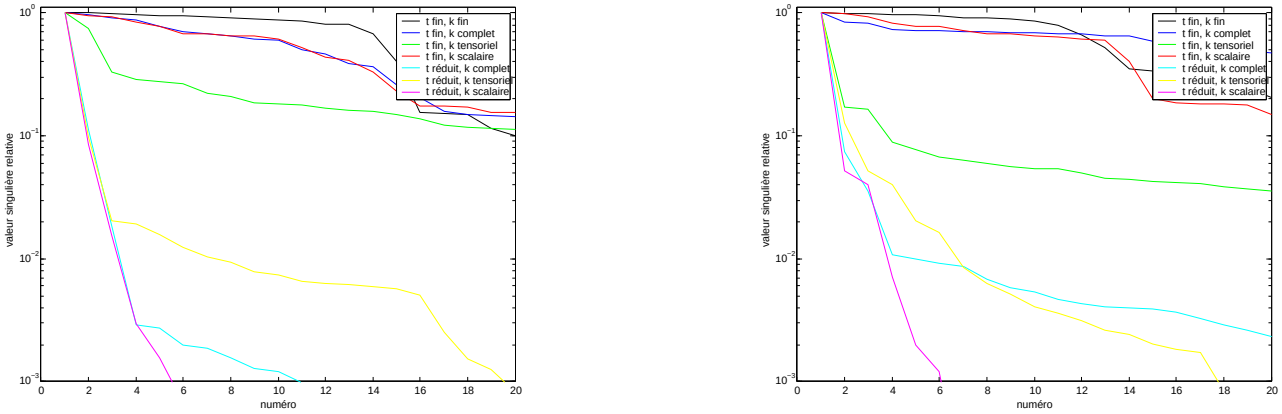

FIG. 45 – *Valeurs singulières de la matrice jacobienne au vrai point pour les sept paramétrisations dans le cas 4. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

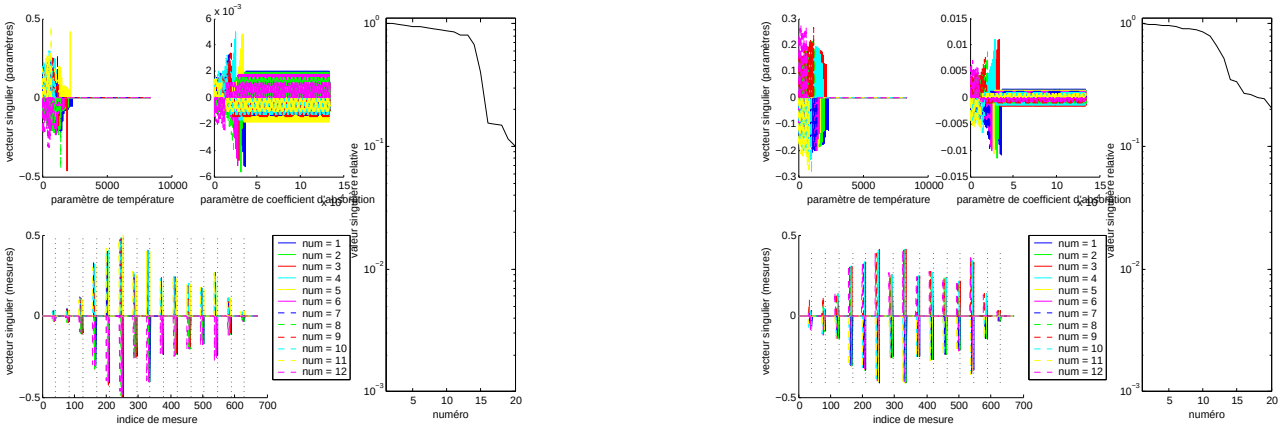

FIG. 46 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour la paramétrisation de niveau 1 dans le cas 4. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

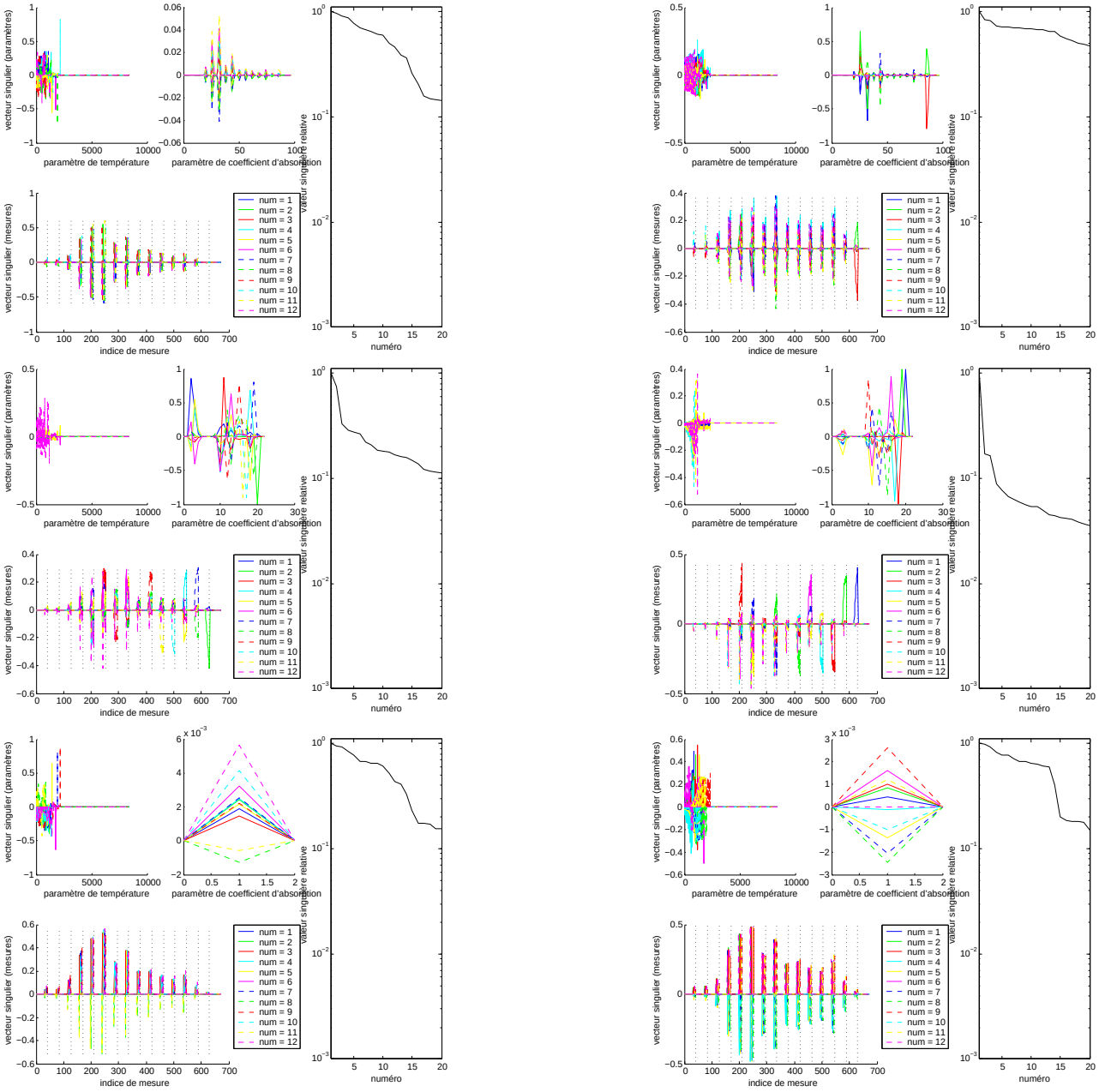

FIG. 47 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 2 dans le cas 4. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

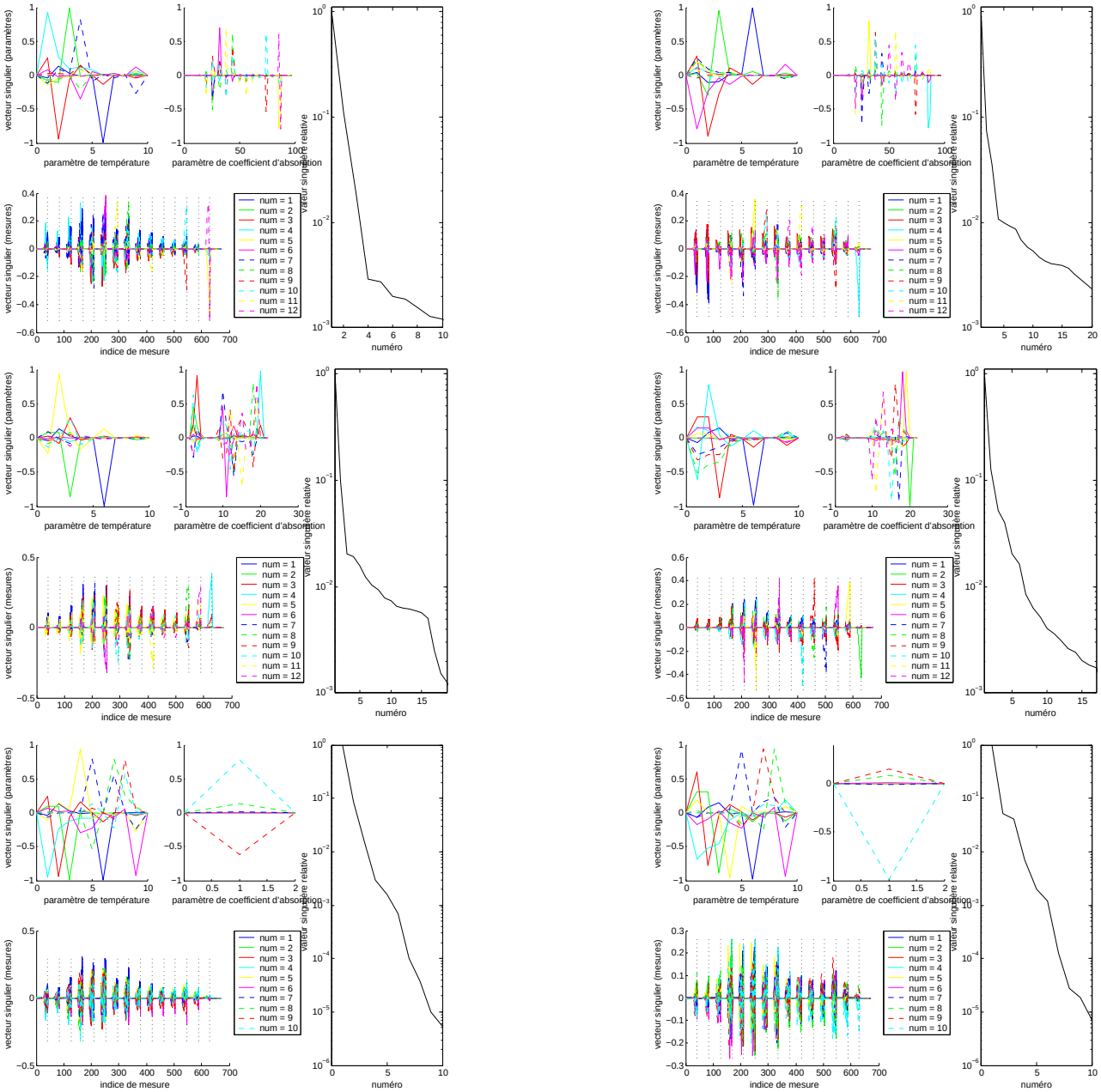

FIG. 48 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne au vrai point pour les paramétrisations de niveau 3 dans le cas 4. De haut en bas, pour les paramétrisations complète, tensorielle et scalaire. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

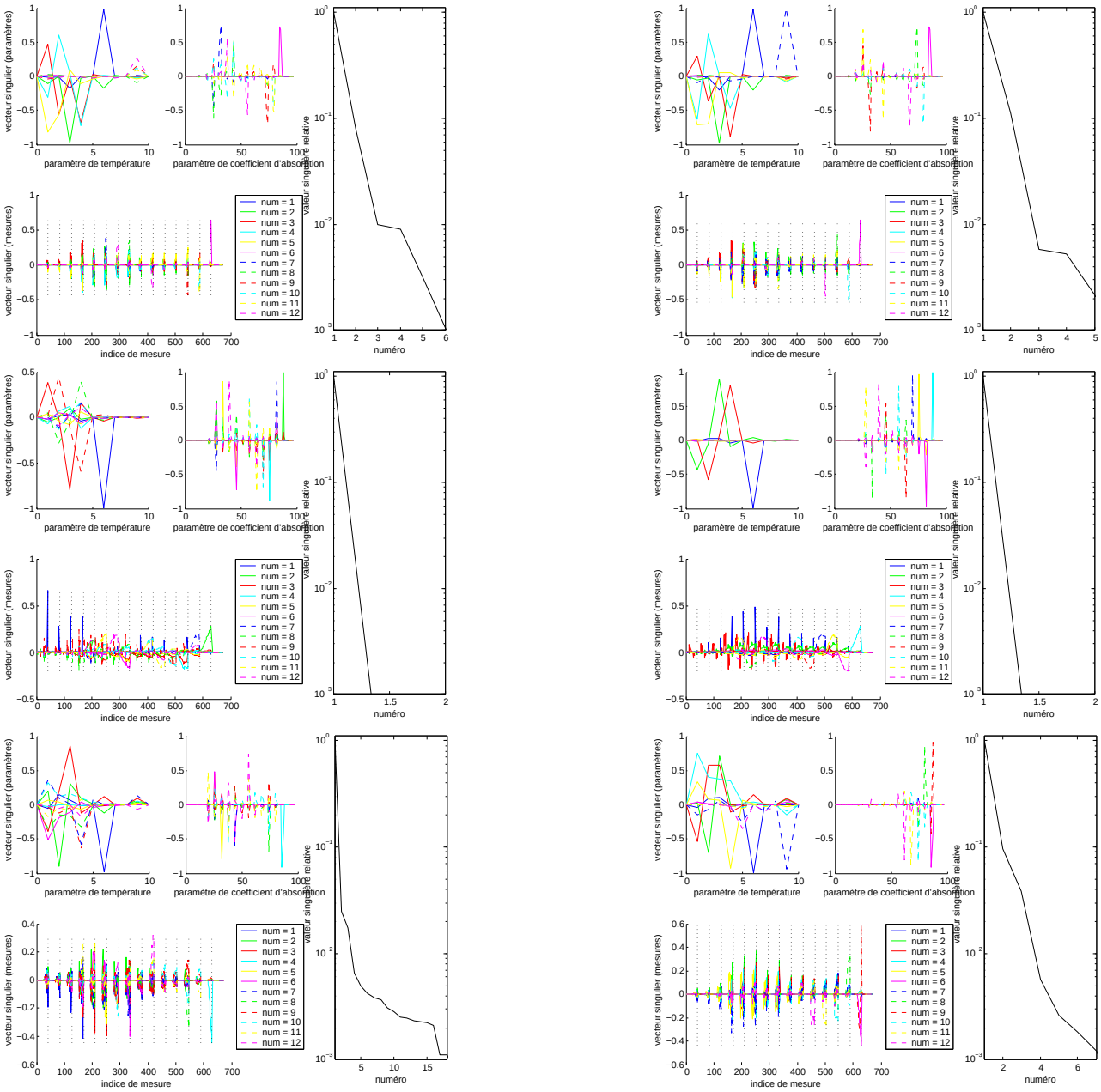

FIG. 49 – *Éléments singuliers de la matrice jacobienne pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 4. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et plus proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

3.3 Un indicateur global

3.3.1 Tracés du critère des moindres carrés sur un segment

L'analyse de sensibilité repose sur une linéarisation du problème. Elle ne renseigne donc que sur le comportement local de la fonction à inverser. En aucun cas une bonne sensibilité ne garantit que l'on puisse converger vers la solution du problème des moindres carrés par une technique locale de type gradient sans rencontrer de minimum local. La non-linéarité sous-jacente ne peut-être appréhendée que par la mise en œuvre d'un algorithme de minimisation. Cependant, le tracé du critère des moindres carrés sur un segment reliant le point initial à la solution est un indicateur sur la non-linéarité du problème. Bien sûr, cela n'est envisageable que pour des mesures synthétiques.

Afin de détailler le comportement au fond de la vallée du minimum global si celle-ci est étroite, le tracé sur le segment est raffiné au voisinage du vrai point. Les tracés sont représentés en échelle normalisée : le 0 correspond au point initial et 1 au vrai point. Les deux intervalles normalisés $[0; 0,9]$ et $[0,9; 1,1]$ sont découpés en 16 sous-intervalles chacuns.

3.3.2 Les cas du marché

Dans les quatre cas du marché, nous avons tracé le critère des moindres carrés sur les segments joignant les points initiaux au vrai point pour les paramétrisations de niveau 1, complètes de niveau 2 et 3, cette dernière étant également considérée pour les mesures bruitées et modélisées. Au vrai point, le critère est nul pour les mesures exactes avec les paramétrisations de niveau 1 et 2 (car les profils théoriques de température sont alors pris en compte), et il est également nul pour les mesures modélisées avec la paramétrisation de niveau 3 (par construction). Cette étude est menée pour les deux tables d'interpolation des coefficients d'absorption.

Ensuite, nous donnons montrons également le tracé du critère lorsque les différentes composantes du paramètres varient séparément, les autres étant fixées à leur vraie valeur (pour la seule paramétrisation complète de niveau 3), afin d'illustrer la sensibilité globale par rapport à chaque composante.

Dans le cas 1, et surtout pour la table régulière, les paramétrisations réduites semblent convexifier le critère des moindres carrés (comparer les courbes bleu foncé de la Figure 50 aux autres courbes). Cela ne semble pas fonctionner avec la table maximale pour le point initial sous-évalué. Ainsi, le vrai point devrait être atteignable en partant du point initial sous-évalué avec la table régulière et en partant du point initial sur-évalué avec la table maximale. Les données bruitées ne semblent pas poser de problème particulier. Pour ce premier cas, le bruit de modélisation est réduit à environ 5%, soit a peu près autant que le bruit des mesures bruitées (environ 90% des mesures bruitées sont dans l'image de la modélisation, donc explicables, alors que 95% des mesures exactes le sont).

Au vu des tracés de la Figure 51, il apparaît clairement que c'est la recherche de la valeur du front T_D qui pose problème avec la table régulière en partant du point sur-évalué. Et ce, bien que la sensibilité soit la meilleure au voisinage de la solution ! Avec la table maximale en partant du point sous-évalué, c'est la seule recherche conjointe des composantes de température et de coefficient d'absorption qui suggère la présence d'un minimum local ; il devrait donc exister un chemin le contournant...

Dans le cas 2, à moins de la présence de minima locaux hors de la fenêtre représentée, l'inversion avec la paramétrisation de niveau 3 devrait fonctionner pour la table régulière à partir du point sous-évalué, et pour la table maximale à partir du point sur-évalué (Figure 52). La paramétrisation de niveau 1, à partir du point sur-évalué, se révèle passer par un énorme maximum local au premier cinquième du segment de valeur environ 17 ; le maximum local est encore présent pour la paramétrisation de niveau 2, mais il disparaît avec celle de niveau 3. Le point initial proche semble ne pas poser de problème particulier, tout comme l'emploi des mesures bruitées. Pour ce deuxième cas, le bruit de modélisation s'élève à environ 13%, bien au-delà des 5% de bruit des mesures bruitées (environ 84% des mesures bruitées sont dans l'image de la modélisation, alors que 87% des mesures exactes le sont).

La Figure 53 montre les variations globales pour chaque composante à partir du point initial proche pour les mesures exactes et modélisées. Il semblerait que seule la vraie valeur soutenue T_{Sout} soit atteignable à partir du point initial proche pour les mesures exactes, les deux autres présentant une sensibilité globale faible, et une valeur optimale éloignée de la "vraie" valeur. Pour les mesures modélisées, il ne semble plus y avoir de problèmes.

Dans le cas 3, la paramétrisation de niveau 3 devrait permettre de retrouver le vrai point à partir des trois points initiaux, tout au moins avec la table régulière (Figure 54), même pour les mesures bruitées. Pour ce

troisième cas, le bruit de modélisation s'élève à environ 14%, toujours au-delà des 5% de bruit des mesures bruitées (environ 83% des mesures bruitées sont dans l'image de la modélisation, alors que 86% des mesures exactes le sont).

Cependant, l'étude composante par composante (Figure 55) montre qu'avec la table régulière, il semble, d'une part, beaucoup plus facile de retrouver le délai τ_3 et la valeur soutenue T_{Sout}, et d'autre part, impossible de retrouver la vitesse du front principal D_{SD} en raison de nombreux minima locaux (bien que la sensibilité par rapport à cette composante soit très bonne au départ comme à l'arrivée). Pour les mesures modélisées, seul subsiste le problème de minima locaux pour la vitesse D_{SD}, les valeurs du front principal T_{SD} et du front secondaire T_S restant de sensibilité faible.

Dans le cas 4, le critère semble beaucoup plus régulier avec la table maximale qu'avec la table régulière (Figure 56). Cela est vraisemblablement lié à la trop forte instabilité de la paramétrisation dans ce cas, la table régulière donnant beaucoup plus d'importance aux température dans la gamme 1500–3500 K. Par contre, pour la table maximale, le critère présente un maximum local bien marqué (en dehors de la fenêtre du graphique pour les points initiaux sur-évalué et proche). Avec la table régulière, de nombreux petits minima locaux seront sans doute source de problème pour l'inversion. Il est également intéressant de noter que sur le segment joignant le point initial sur-évalué au vrai point avec la table régulière, légèrement au-delà du vrai point se trouve une bien meilleure solution.

l'étude composante par composante (Figure 57) montre une forte disparité entre les sensibilités des paramètres de température et ceux de coefficient d'absorption avec la table maximale. Avec la table régulière, nous observons de nombreux minima locaux pour la vitesse du front principal D_{SD} et les caractéristiques de la condition à la limite à gauche, courbure c_g et délai τ_3, ainsi qu'un seul maximum local pour la valeur du front principal T_{SD}. Toutes les autres composantes devraient pouvoir être retrouvées, la valeur soutenue T_{Sout}, la valeur du front secondaire T_S et les caractéristiques du terme source, les courbures c_2 et c_3 et l'amplitude g_M.

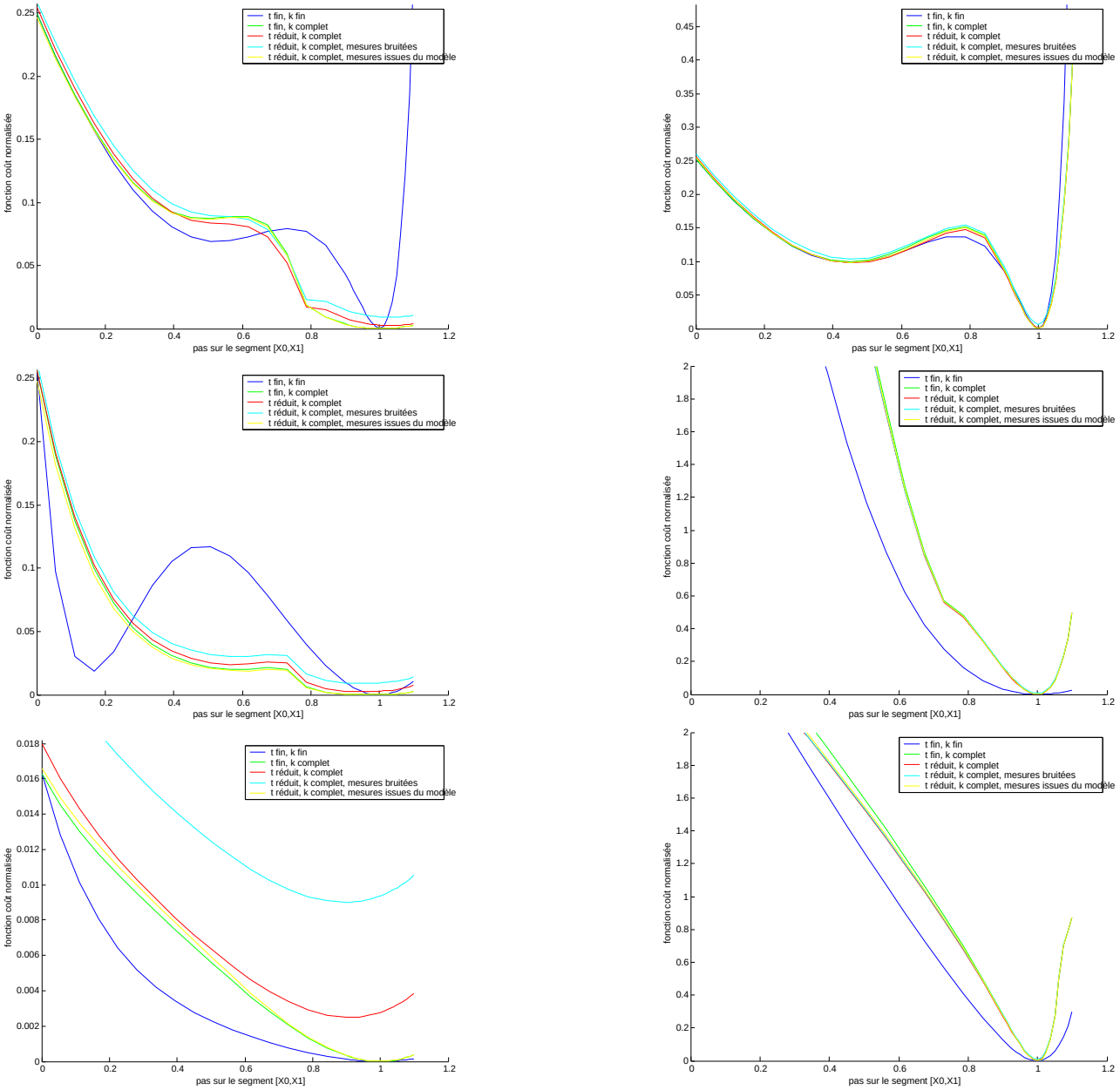

FIG. 50 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial au vrai point pour différentes paramétrisations dans le cas 1. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

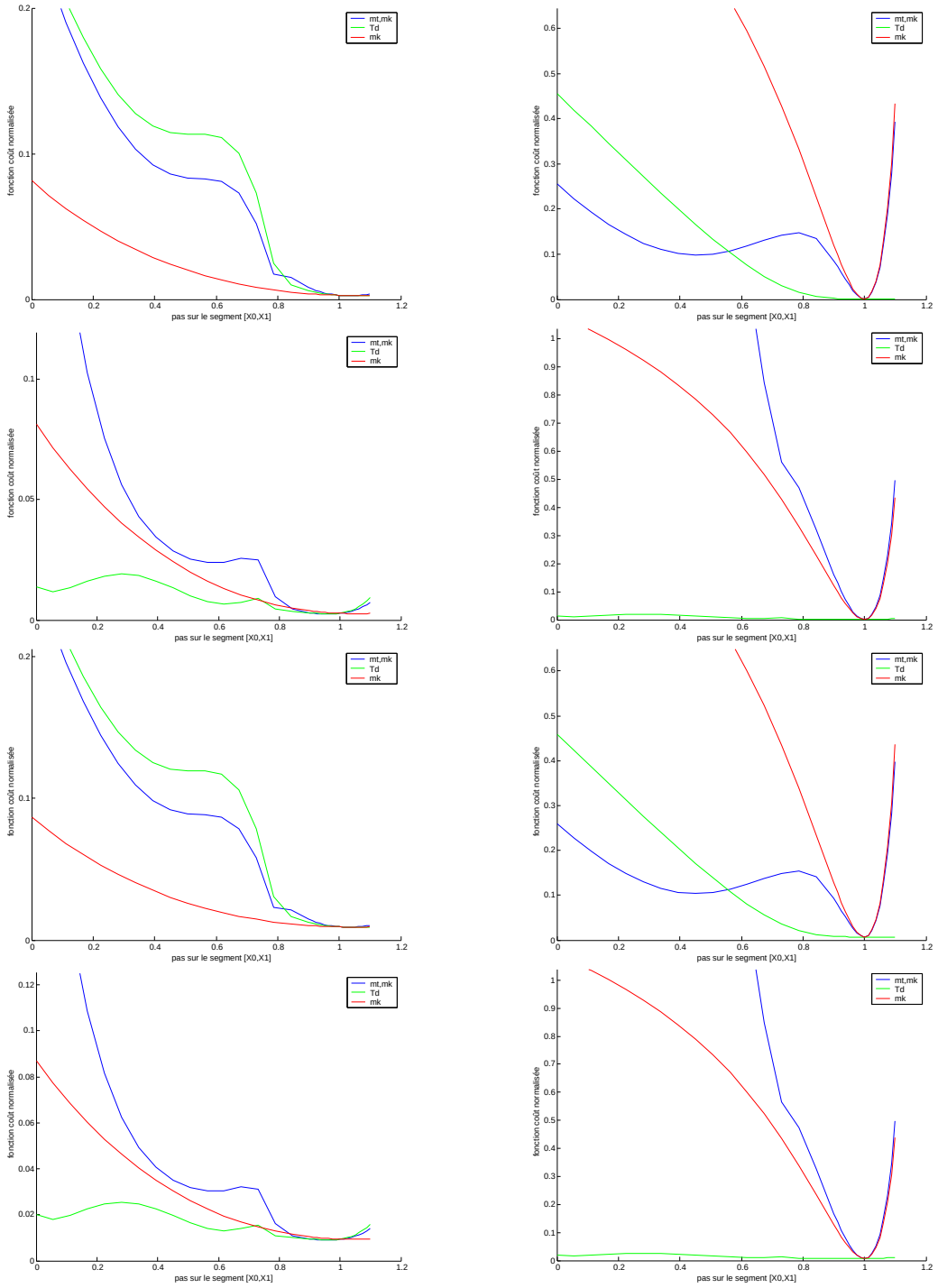

FIG. 51 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial au vrai point pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 1, les composantes du paramètre variant successivement. De haut en bas, pour les mesures exactes puis bruitées, pour les points initiaux sous-évalué et sur-évalué. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

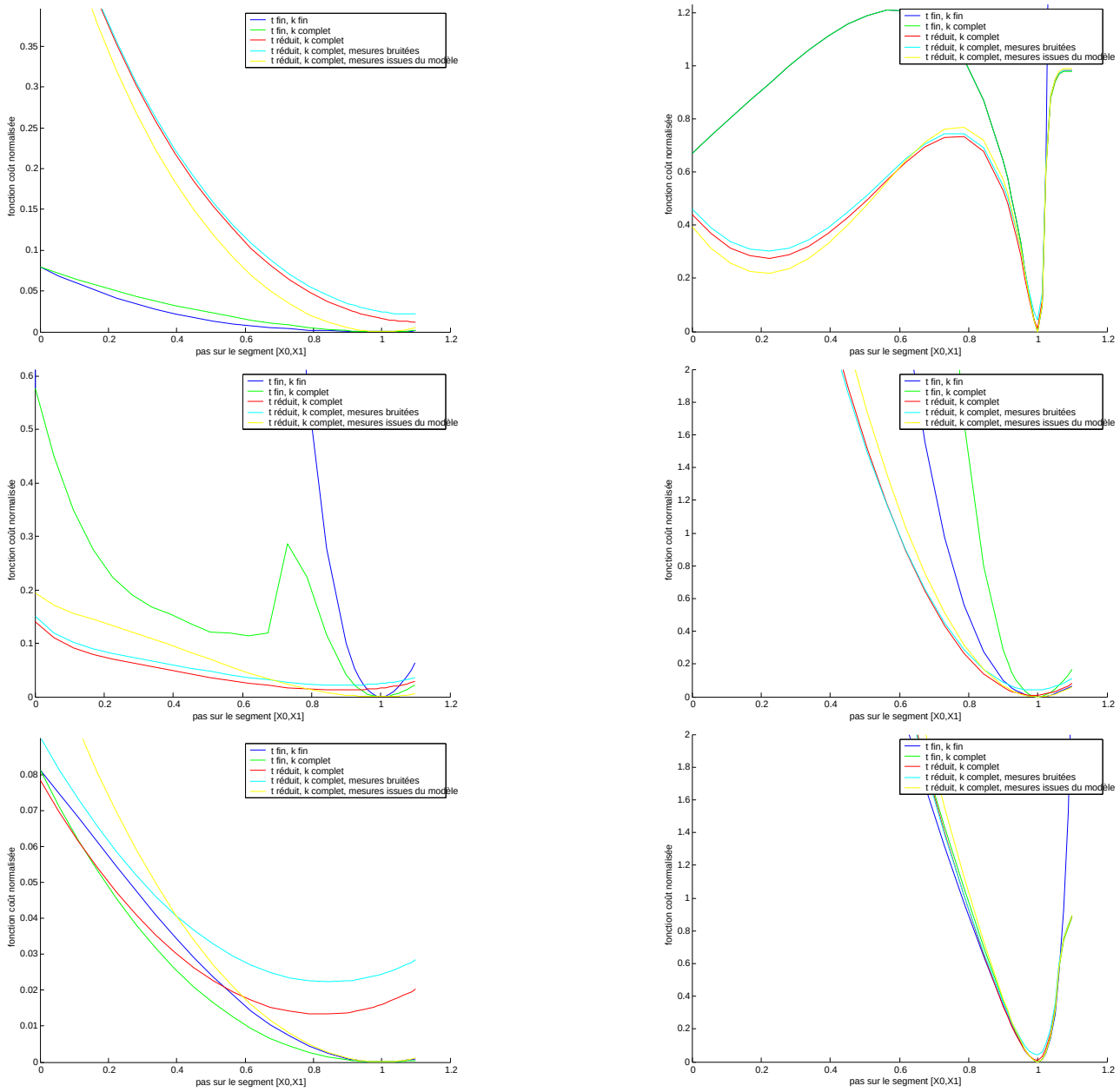

FIG. 52 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial au vrai point pour différentes paramétrisations dans le cas 2. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

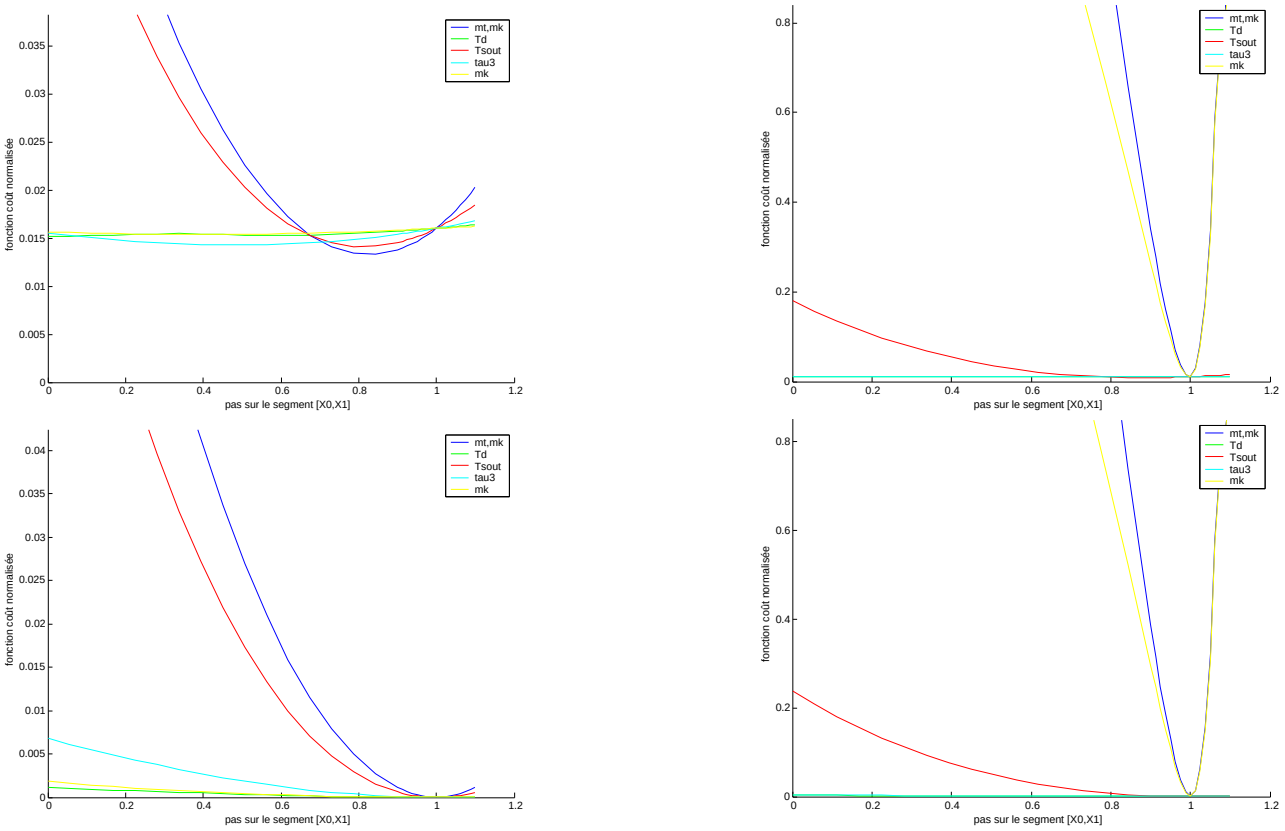

FIG. 53 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial proche au vrai point pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 2, les composantes du paramètre variant successivement. En haut, pour les mesures exactes, et en bas, pour les mesures modélisées. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

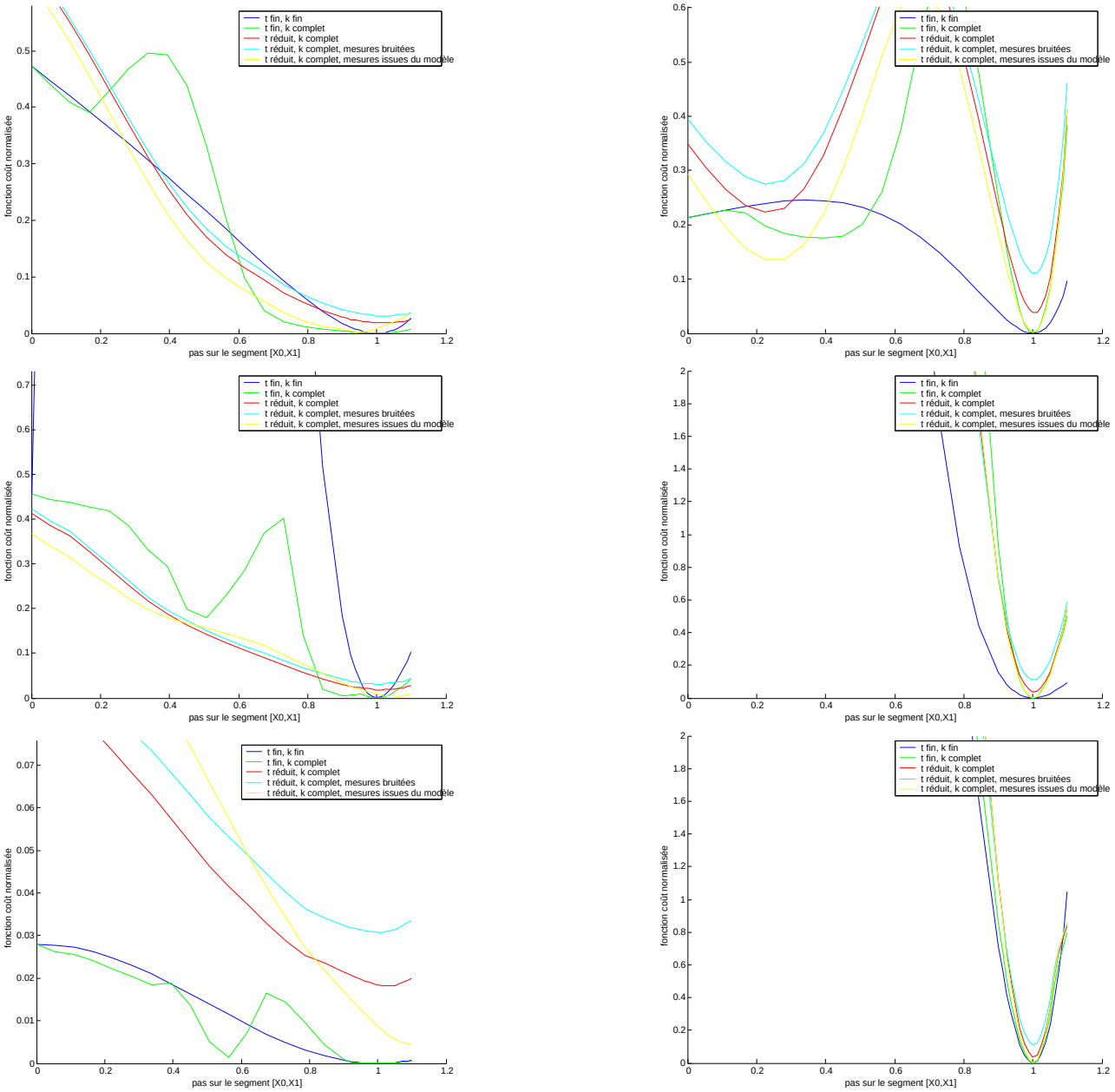

FIG. 54 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial au vrai point pour différentes paramétrisations dans le cas 3. De haut en bas, pour les points initiaux sous-évalué, sur-évalué et proche. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

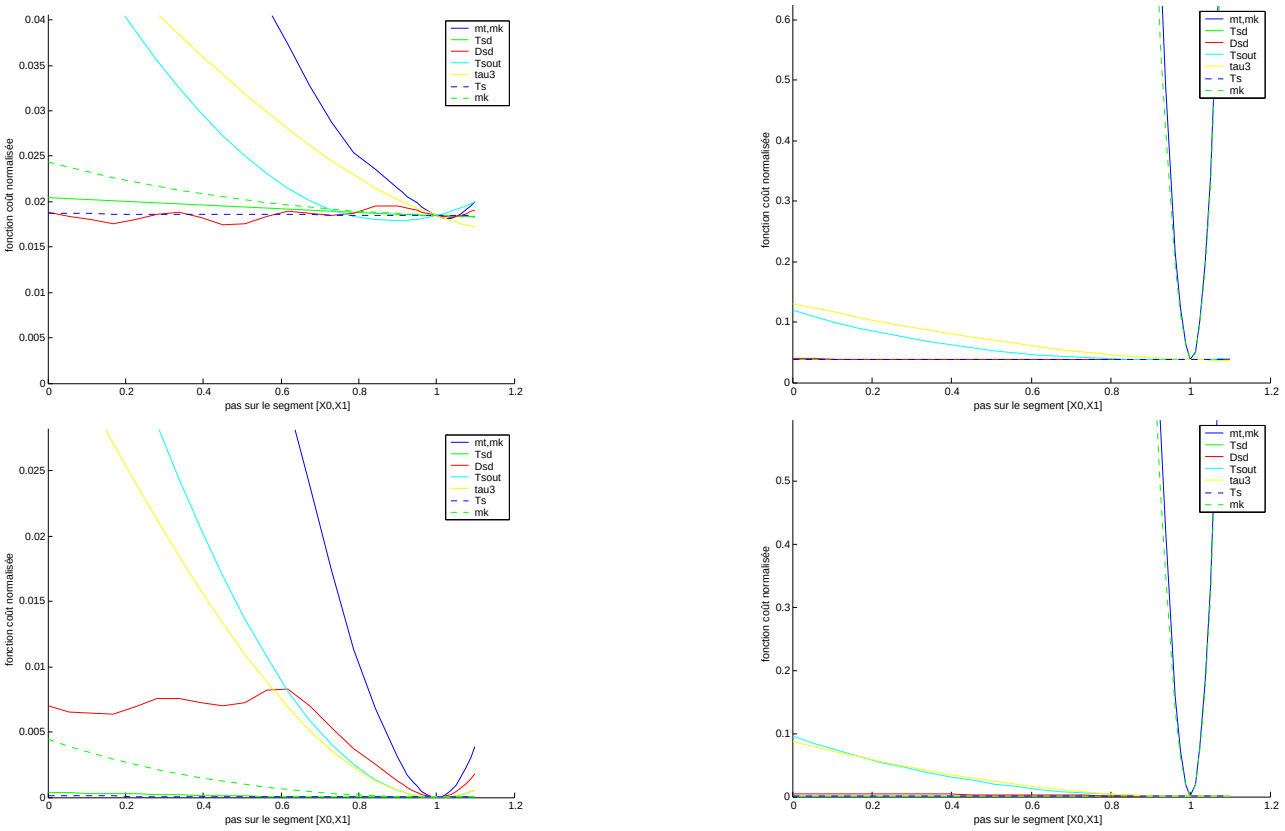

FIG. 55 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial proche au vrai point pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 3, les composantes du paramètre variant successivement. En haut, pour les mesures exactes, et en bas, pour les mesures modélisées. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

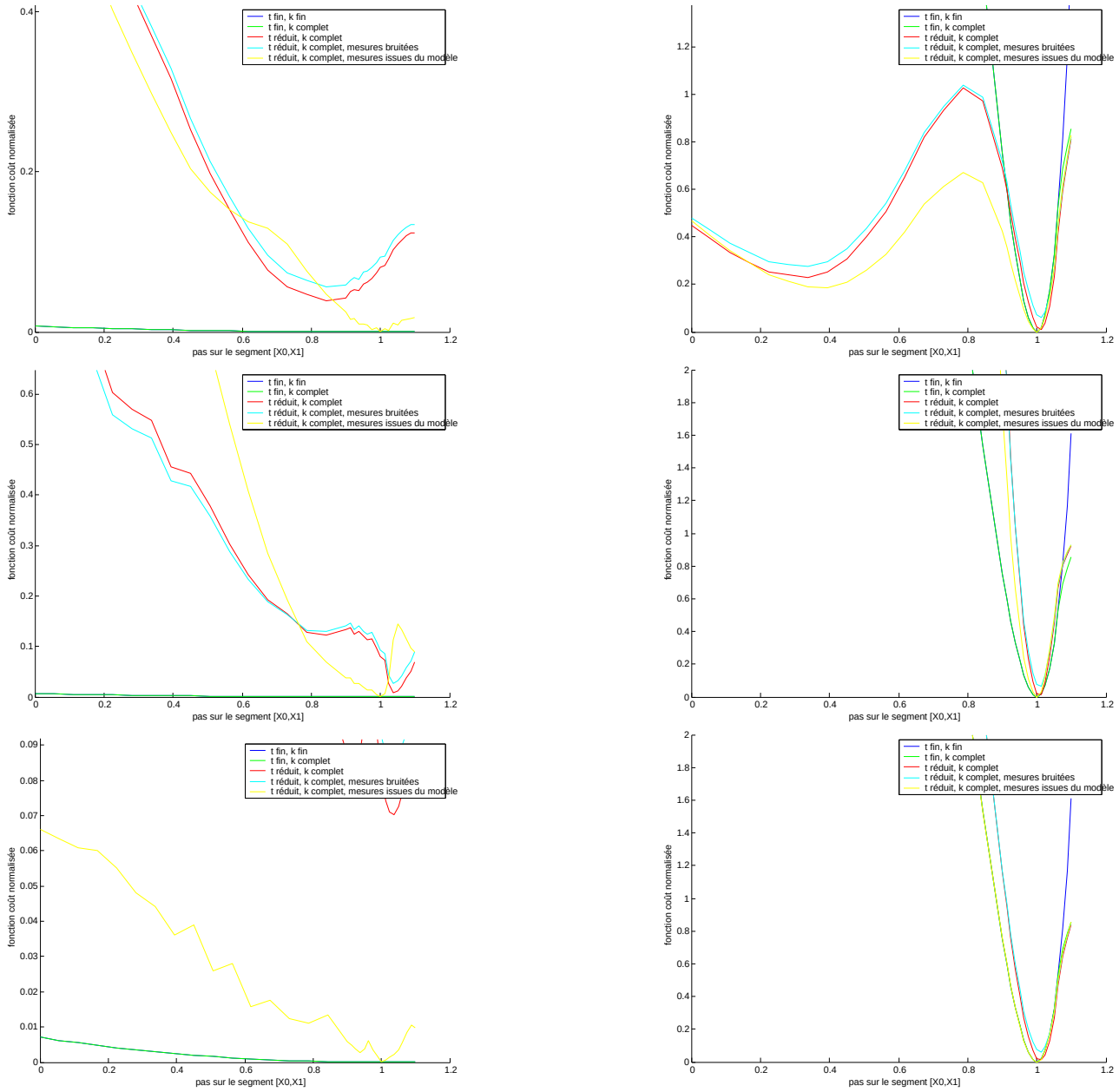

FIG. 56 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial au vrai point pour différentes paramétrisations dans le cas 4. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

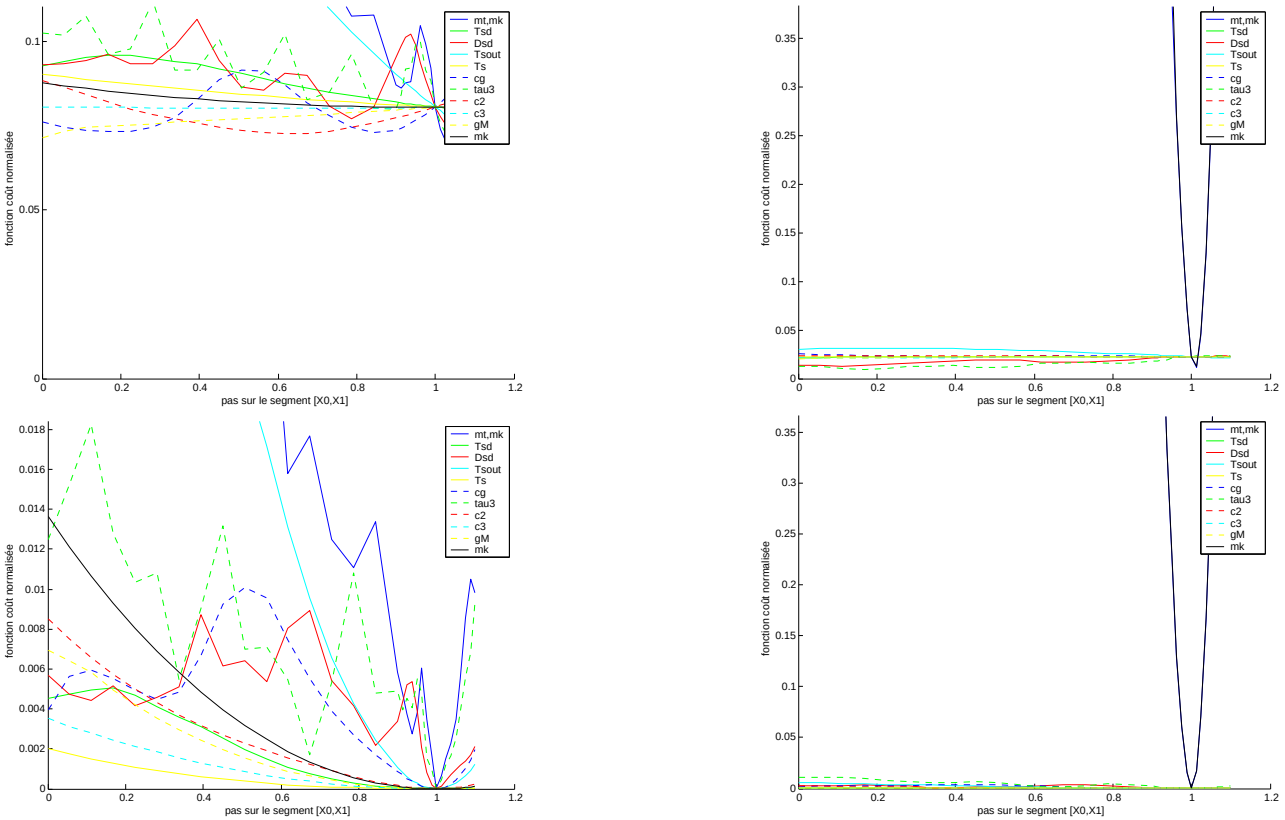

FIG. 57 – *Tracé du critère des moindres carrés sur le segment joignant le point initial proche au vrai point pour la paramétrisation complète de niveau 3 dans le cas 4, les composantes du paramètre variant successivement. En haut, pour les mesures exactes, et en bas, pour les mesures issues du modèle. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

4 Inversion

La mise en œuvre d'un algorithme de minimisation est l'étape ultime de l'étude d'un problème inverse. Elle permet d'affiner les conclusions de l'analyse de sensibilité : est-il vraiment possible de retrouver telle composante ? n'y a-t-il pas moyen d'emprunter un chemin contournant tel minimum local apparent ? Elle prend en compte toutes les non-linéarités du problème, tout au moins celles de la modélisation directe...

4.1 Algorithme de minimisation

Nous avons choisi la routine `lsqcurvefit` de MATLAB. Elle correspond à un algorithme de minimisation par région de confiance avec prise en compte de contraintes de bornes adapté aux problèmes de moindres carrés. Les seuls paramètres à régler sont les critères d'arrêt : le nombre maximum d'itérations, le nombre maximum d'évaluations du critère, la variation minimale du critère et la variation minimale du paramètre. Nous les avons respectivement fixés à 30, 60, 10^{-6} et 10^{-4}. En pratique, c'est surtout la tolérance sur la fonction qui provoque l'arrêt, généralement en correspondant de plus à la détection d'un minimum.

Cet algorithme à mémoire limitée est dédié aux problèmes de grande taille, donc tout particulièrement adapté aux paramétrisations de niveau 1 et 2, cependant, par manque de temps, nous n'avons fait tourner l'inversion que pour les paramétrisations de niveau 3 (avec les paramétrisations réduites de la température et du coefficient d'absorption).

4.2 Stratégies d'optimisation

Étant donné que le paramètre à optimiser est de dimension non réduite à 1, et que, de plus, ses composantes correspondent à des grandeurs physiques totalement différentes (température, coefficient d'absorption, délai, vitesse, etc.), de sensibilité également différentes, se pose la question de la stratégie d'optimisation : comment recherchons-nous toutes ces composantes ? toutes à la fois ? une par une ? dans quel ordre ?

Par manque de temps, nous n'avons testé que deux stratégies tirant parti des paramétrisations réduites du coefficient d'absorption.

La première est qualifiée de "directe", elle correspond à la recherche simultanée des composantes de température m_t et de coefficient d'absorption m_k, ces dernières correspondant à la paramétrisation complète (toute la table d'interpolation est recherchée).

La seconde, dite "hiérarchique", correspond également à la recherche simultanée des composantes de température m_t et de coefficient d'absorption m_k mais avec ouverture progressive de ces derniers degrés de liberté : d'abord le facteur d'amplitude, pour une forme a priori de la table (paramétrisation scalaire), puis les valeurs normalisées de la première colonne et de la première ligne de la table, les autres valeurs étant estimée par produit tensoriel (paramétrisation tensorielle), et enfin toute la table (paramétrisation complète). Pour cette seconde stratégie, un maximum de 10 itérations par paramétrisation a été octroyé, garantissant un effort maximum comparable à celui pour la première stratégie.

Les stratégies du type de la seconde sont connues pour être plus stables en présence de bruit : elles convergent généralement vers une solution plus régulière en suivant l'adage selon lequel il n'est pas utile (et même nuisible) de rechercher des détails d'une solution alors que l'on en est encore très éloigné.

4.3 Les cas du marché

Pour le cas le plus simple de la détonation autonome stationnaire soutenue (cas 1), nous avons comparé les deux stratégies pour l'inversion en partant des deux points initiaux lointains (sous-évalué et sur-évalué) en utilisant les mesures exactes et bruitées, avec les deux tables d'interpolation. Les comptes-rendus de ces 16 expériences sont donnés dans le Tableau 8. L'analyse de sensibilité au chapitre précédent semblait indiquer que l'inversion allait bien se passer dans ces 16 configurations.

La stratégie hiérarchique donne généralement de meilleurs résultats que la stratégie directe, sauf pour les mesures exactes à partir du point initial sous-évalué avec la table régulière ! Avec cette stratégie, la température du front de détonation T_D est parfaitement retrouvée pour les deux points initiaux avec la table maximale que ce soit en utilisant les mesures exactes ou bruitées. Avec la table régulière, les résultats sont mauvais, sauf à partir du point initial sous-évalué en utilisant les mesures bruitées !

Mis à part trois résultats étonnants (où la stratégie directe se révèle plus efficace que la stratégie hiérarchique, ou bien où les résultats sont meilleurs en utilisant les mesures bruitées que les mesures exactes), nous concluons

pour ce cas que la température du front de détonation est parfaitement déterminée avec la table maximale en utilisant la stratégie hiérarchique.

Dans le cas de la détonation suivie d'une détente des produits issus de la décomposition du NM (cas 2), nous avons d'abord comparé les deux stratégies pour l'inversion en partant du point initial proche en utilisant les mesures exactes et modélisées, avec les deux tables d'interpolation ; puis nous avons essayé de rechercher séparément les composantes du paramètre de température, les autres étant fixées à leur vraie valeur, en n'utilisant que les mesures modélisées, avec les deux tables. Les comptes-rendus de ces 14 expériences sont donnés dans le Tableau 9, les résultats pour l'inversion des mesures exactes sont regroupés sur la Figure 58 et ceux pour les mesures modélisées sont sur la Figure 59.

Cette fois-ci, il ne semble pas y avoir d'avantage marqué à utiliser une stratégie plutôt que l'autre (bien sûr, la comparaison n'a de sens que si l'on recherche les composantes du paramètre de coefficient d'absorption). Concernant l'inversion des mesures exactes à partir du point initial proche, il apparaît que seule la température soutenue T_{Sout} est accessible, si l'on utilise la stratégie hiérarchique avec la table régulière, les autres composantes n'étant pas atteignables.

Pour l'inversion des mesures modélisées, toutes les composantes sont parfaitement retrouvées avec la table régulière, alors qu'avec la table maximale, il faut les rechercher une par une pour les retrouver toutes parfaitement. La température maximale, encore une fois, étant néanmoins retrouvé dans tous les cas.

Nous concluons donc, dans ce cas, que le bruit de modélisation dû à la paramétrisation réduite de la température est trop important pour permettre de retrouver les trois caractéristiques des profils, cependant, la température soutenue T_{Sout} reste toujours accessible, et elles le sont toutes les trois en l'absence de bruit avec la table régulière.

Pour le cas de la superdétonation simplifiée (cas 3), nous avons également comparé les deux stratégies pour l'inversion en partant du point initial proche en utilisant les mesures exactes et modélisées, avec les deux tables d'interpolation ; puis nous avons essayé de rechercher séparément les composantes du paramètre de température, les autres étant fixées à leur vraie valeur, en n'utilisant que les mesures modélisées, avec les deux tables. Les comptes-rendus de ces 18 expériences sont donnés dans le Tableau 10, les résultats pour l'inversion des mesures exactes sont regroupés sur la Figure 60 et ceux pour les mesures modélisées sont sur la Figure 61.

La stratégie directe se montre cette fois-ci plutôt perturbée avec la table maximale (Figures 60 et 61, en bas à droite).

Lors de l'inversion des mesures exactes à partir du point initial proche, la température soutenue T_{Sout} n'a été approchée que pour la stratégie directe avec la table régulière, toutes les autres composantes n'étant pas du tout retrouvées.

Concernant les mesures modélisées, la température soutenue T_{Sout} et le délai τ_3 semblent accessibles par la stratégie hiérarchique avec les deux tables, ainsi que par la stratégie directe avec la table régulière qui donne de plus la vitesse du front de superdétonation D_{SD} (malgré la présence possible de minima locaux). Lorsqu'elles sont recherchées séparément, les cinq composantes du paramètre de température sont parfaitement retrouvées avec les deux tables, sauf pour la vitesse du front de superdétonation D_{SD} avec la table régulière !

Nous concluons donc pour ce troisième cas que le bruit de modélisation est encore plus important que dans le cas précédent, et que la température soutenue T_{Sout} n'est même plus toujours retrouvée. En l'absence de bruit, la température soutenue T_{Sout} et le délai τ_3 sont accessibles, et les composantes le sont toutes si elles sont recherchées une par une, sauf la vitesse du front de superdétonation D_{SD}, qui est associée à de nombreux minima locaux qu'il est difficile de contourner.

Pour le cas générique (cas 4), nous avons d'abord essayé d'améliorer les profils modélisés en inversant les mesures exactes à partir du vrai point en supposant que la table d'interpolation était connue (la stratégie hiérarchique n'a alors pas de sens), avec les deux tables. Ensuite, nous avons comparé les deux stratégies pour l'inversion des mesures modélisées en partant du point initial proche, avec les deux tables d'interpolation ; puis nous avons essayé de rechercher séparément les composantes du paramètre de température, les autres étant fixées à leur vraie valeur, en n'utilisant que les mesures modélisées, avec les deux tables. Les comptes-rendus de ces 24 expériences sont donnés dans les Tableaux 11 et 12, les résultats pour l'inversion des mesures exactes sont regroupés sur la Figure 62 et ceux pour les mesures modélisées sont sur la Figure 63.

N'ayant pas réussi à bien modéliser les profils théoriques dans ce cas (en particulier pour la détente), nous avons d'abord essayé de minimiser directement l'erreur des moindres carrés sur les profils eux-mêmes en partant des vrais profils, sans succès. Ensuite, nous avons essayé d'améliorer ces vrais profils en inversant les mesures exactes, toujours sans succès notable.

Concernant les mesures modélisées, nous sommes arrivés à nous rapprocher de la seule température soutenue T_{Sout}, et uniquement pour la stratégie directe avec la table maximale. Si les neuf composantes du paramètre de température sont recherchées une par une, les autres étant connues, que ce soit pour une table ou l'autre, nous ne retrouvons parfaitement que les température soutenue T_{Sout} et du front secondaire T_S, ainsi que les caractéristiques du terme source c_2, c_3 et g_M, en accord avec l'analyse de sensibilité.

mesures	table	point initial	stratégie				vrai point
			hiérarchique			directe	
exactes	régulière	$T_D = 3000$ (49,6%)	4039 (87,8%)	3849 (92,4%)	3850 (93%)	3597 (99,6%)	3600 (94,7%)
		$T_D = 4500$ (49,2%)	4500 (87,4%)	4499 (89,4%)	4499 (89,9%)	4499 (90,4%)	3600 (94,7%)
	maximale	$T_D = 3000$ (49,4%)	3600 (82,8%)	3599 (98,4%)	3599 (99,5%)	3510 (96,6%)	3600 (98,1%)
		$T_D = 4500$ (-171%)	3780 (83,8%)	3598 (98,4%)	3599 (99,5%)	3549 (97,4%)	3600 (98,1%)
bruitées	régulière	$T_D = 3000$ (49%)	3844 (85%)	3675 (90,9%)	3601 (91,8%)	3600 (91,8%)	3600 (90,3%)
		$T_D = 4500$ (48,7%)	4500 (85,1%)	4499 (86,7%)	4499 (86,7%)	4499 (85,1%)	3600 (90,3%)
	maximale	$T_D = 3000$ (49%)	3596 (81,1%)	3600 (91,9%)	3600 (92%)	3599 (92%)	3600 (91,8%)
		$T_D = 4500$ (-171%)	3777 (81,9%)	3600 (91,9%)	3601 (92%)	3379 (81,1%)	3600 (91,8%)

TAB. 8 – *Comptes rendus pour l'inversion des mesures exactes et bruitées dans le cas 1, avec les tables régulière et maximale à partir des points initiaux sous-évalué et sur-évalué pour les deux stratégies hiérarchique et directe. Le vrai point, servant à calculer les mesures modélisées, est rappelé.*

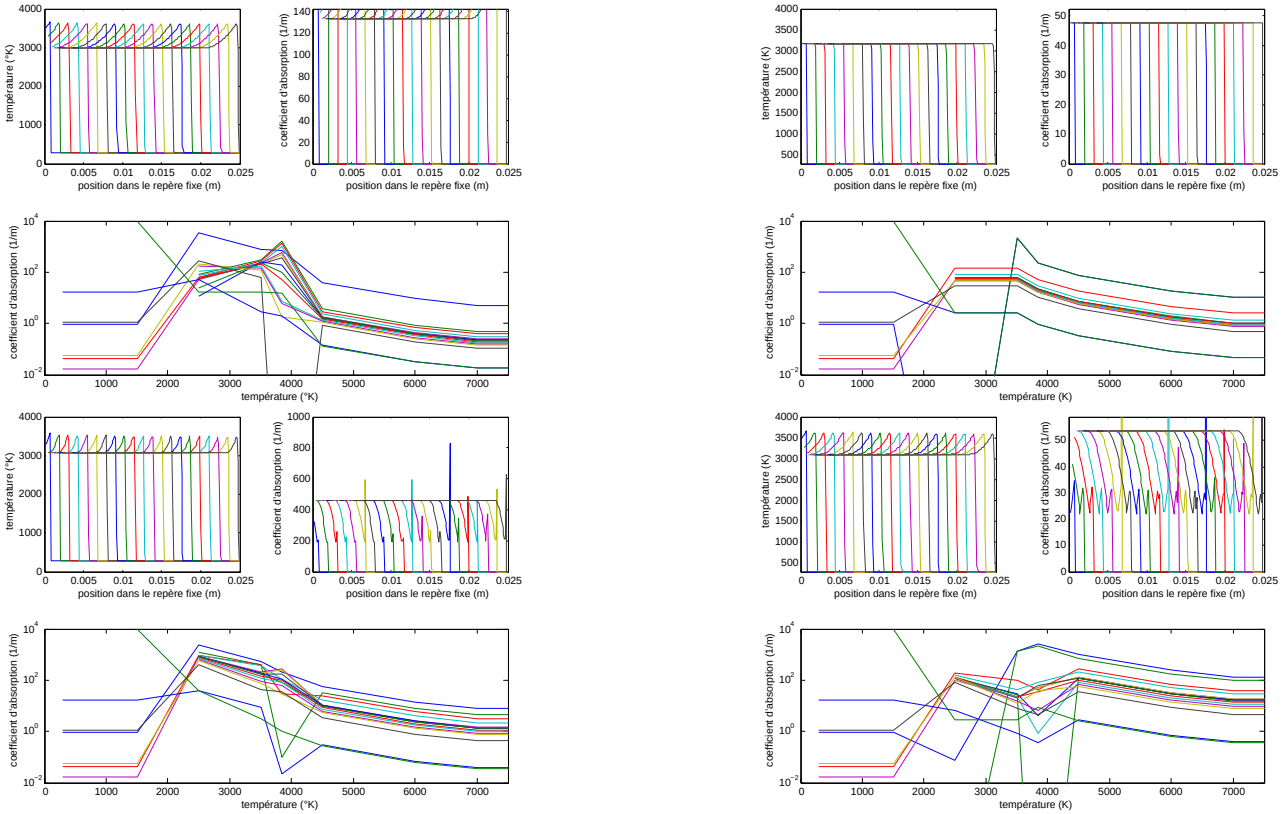

FIG. 58 – *Résultats d'inversion des mesures exactes dans le cas 2, ils sont à comparer aux profils initiaux de la Figure 24 et aux profils théoriques des Figures 5 et 13. En haut, pour la stratégie hiérarchique, et en bas, pour la stratégie directe. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

mesures	table	point initial	stratégie				vrai point
			hiérarchique			directe	
exactes	régulière	$T_D = 3700$	3309	3651	3682	3635	3530
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	3132	2989	2984	3079	3000
		$\tau_3 = 0{,}6$ (49,6%)	0,36 (87,8%)	0,68 (92,4%)	0,89 (93%)	0,3 (90%)	0,4 (87,3%)
	maximale	$T_D = 3700$	3403	3403	3403	3682	3530
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	3044	3165	3170	3104	3000
		$\tau_3 = 0{,}6$ (-198%)	0,00 (81,4%)	0,00 (93,2%)	0,00 (93,7%)	0,64 (97,9%)	0,4 (89,6%)
modélisées	régulière	$T_D = 3700$	3536	3531	3530	3530	3530
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	3020	3003	3000	3000	3000
		$\tau_3 = 0{,}6$ (65,5%)	0,35 (98,8%)	0,39 (99,7%)	0,4 (100%)	0,4 (100%)	0,4 (100%)
		$T_D = 3700$ (96,6%)	–	–	–	3530 (100%)	3530 (100%)
		$T_{\text{Sout}} = 3200$ (71,1%)	–	–	–	3000 (100%)	3000 (100%)
		$\tau_3 = 0{,}6$ (91,8%)	–	–	–	0,4 (100%)	0,4 (100%)
	maximale	$T_D = 3700$	3250	3250	3250	3608	3530
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	2973	2991	2998	2969	3000
		$\tau_3 = 0{,}6$ (-213%)	0,00 (82,2%)	0,00 (93,8%)	0,00 (94,2%)	0,25 (98%)	0,4 (100%)
		$T_D = 3700$ (94,5%)	–	–	–	3530 (100%)	3530 (100%)
		$T_{\text{Sout}} = 3200$ (51,3%)	–	–	–	3000 (100%)	3000 (100%)
		$\tau_3 = 0{,}6$ (93,4%)	–	–	–	0,4 (100%)	0,4 (100%)

TAB. 9 – *Comptes rendus pour l'inversion des mesures exactes et modélisées dans le cas 2, avec les tables régulière et maximale à partir du point initial proche pour les deux stratégies hiérarchique et directe, puis pour l'inversion des seules mesures modélisées pour la seule stratégie directe en ne recherchant qu'une seule composante du paramètre de température* $m_t = (T_D, T_{\text{Sout}}, \tau_3)$ *à la fois, les deux autres étant fixées à leur vraie valeur. Le vrai point, servant à calculer les mesures modélisées, est rappelé.*

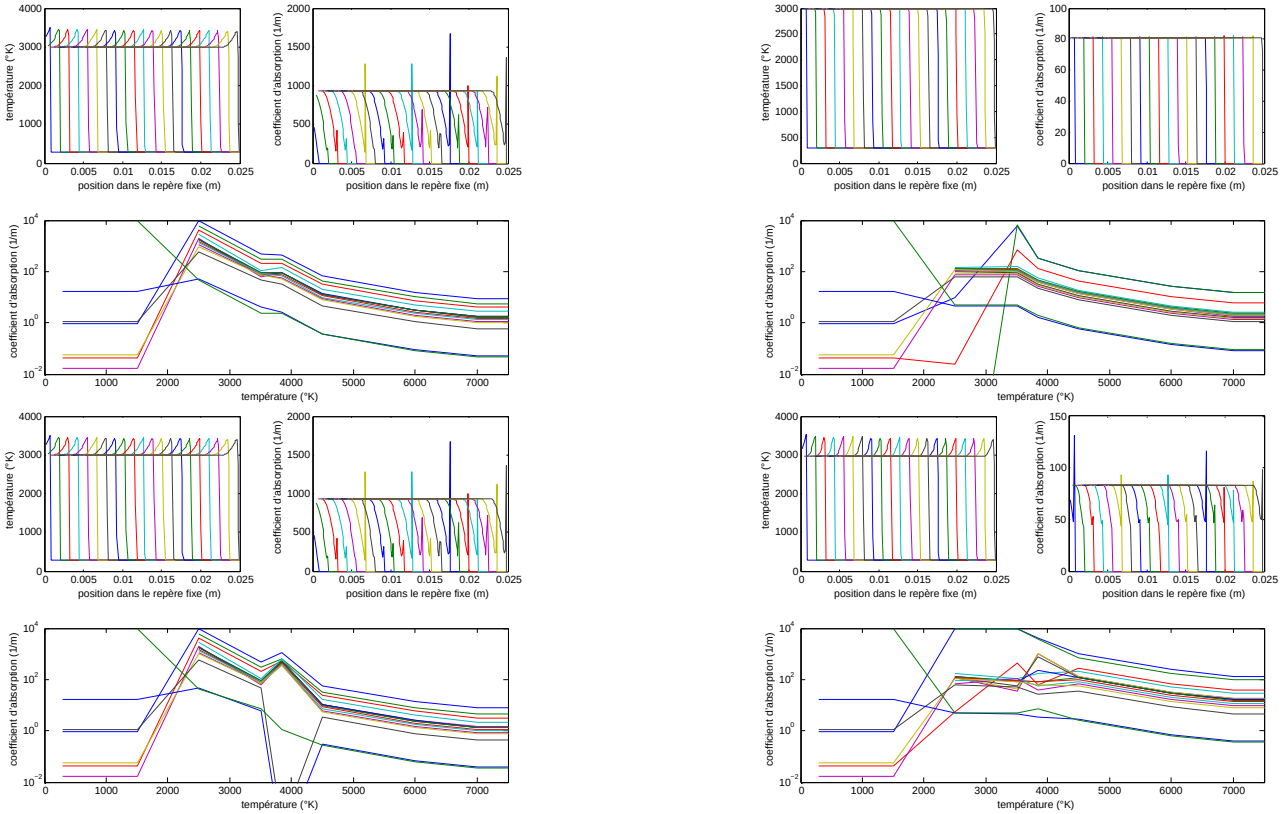

FIG. 59 – *Résultats d'inversion des mesures modélisées dans le cas 2, ils sont à comparer aux profils initiaux de la Figure 24 et aux vrais profils des Figures 11 et 14. En haut, pour la stratégie hiérarchique, et en bas, pour la stratégie directe. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

mesures	table	point initial	stratégie				vrai point
			hiérarchique			directe	
exactes	régulière	$T_{SD} = 4800$	3500	3603	3603	4743	4650
		$D_{SD} = 8500$	8600	8640	8600	8430	8290
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	3232	3195	3202	2948	3000
		$\tau_3 = 0{,}5$	0,01	0,00	0,00	0,34	0,25
		$T_S = 1400$ (70,5%)	1158 (95,2%)	1012 (95,7%)	1500 (97,4%)	1404 (93,6%)	1336 (86,4%)
	maximale	$T_{SD} = 4800$	4916	4786	4785	4998	4650
		$D_{SD} = 8500$	7710	7810	7830	7970	8290
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	3070	3385	3403	2846	3000
		$\tau_3 = 0{,}5$	0,36	0,46	0,46	0,12	0,25
		$T_S = 1400$ (-636%)	1002 (75,3%)	1000 (94,5%)	1022 (98,1%)	1456 (89,5%)	1336 (80,5%)
modélisées	régulière	$T_{SD} = 4800$	4066	4013	3984	4849	4650
		$D_{SD} = 8500$	8540	8550	8550	8270	8290
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	2982	2953	2961	2961	3000
		$\tau_3 = 0{,}5$	0,31	0,35	0,27	0,27	0,25
		$T_S = 1400$ (68,5%)	1500 (93,5%)	1500 (94,6%)	1392 (94,7%)	1392 (99,2%)	1336 (100%)
		$T_{SD} = 4800$ (98,1%)	–	–	–	4650 (100%)	4650 (100%)
		$D_{SD} = 8500$ (92,9%)	–	–	–	8490 (93%)	8290 (100%)
		$T_{\text{Sout}} = 3200$ (78,9%)	–	–	–	3000 (100%)	3000 (100%)
		$\tau_3 = 0{,}5$ (80,1%)	–	–	–	0,25 (100%)	0,25 (100%)
		$T_S = 1400$ (99%)	–	–	–	1336 (100%)	1336 (100%)
	maximale	$T_{SD} = 4800$	4990	4057	4058	4841	4650
		$D_{SD} = 8500$	7170	7230	7260	7980	8290
		$T_{\text{Sout}} = 3200$	2746	2995	2988	2546	3000
		$\tau_3 = 0{,}5$	0,30	0,22	0,23	0,05	0,25
		$T_S = 1400$ (-652%)	1482 (78,6%)	1500 (95,2%)	1500 (95,6%)	1498 (46%)	1336 (100%)
		$T_{SD} = 4800$ (98,3%)	–	–	–	4650 (100%)	4650 (100%)
		$D_{SD} = 8500$ (93,5%)	–	–	–	8290 (100%)	8290 (100%)
		$T_{\text{Sout}} = 3200$ (69,1%)	–	–	–	3000 (100%)	3000 (100%)
		$\tau_3 = 0{,}5$ (70,1%)	–	–	–	0,25 (100%)	0,25 (100%)
		$T_S = 1400$ (99,3%)	–	–	–	1336 (100%)	1336 (100%)

TAB. 10 – *Comptes rendus pour l'inversion des mesures exactes et modélisées dans le cas 3, avec les tables régulière et maximale à partir du point initial proche pour les deux stratégies hiérarchique et directe, puis pour l'inversion des seules mesures modélisées pour la seule stratégie directe en ne recherchant qu'une seule composante du paramètre de température* $m_t = (T_{SD}, D_{SD}, T_{\text{Sout}}, \tau_3, T_S)$ *à la fois, les quatre autres étant fixées à leur vraie valeur. Le vrai point, servant à calculer les mesures modélisées, est rappelé.*

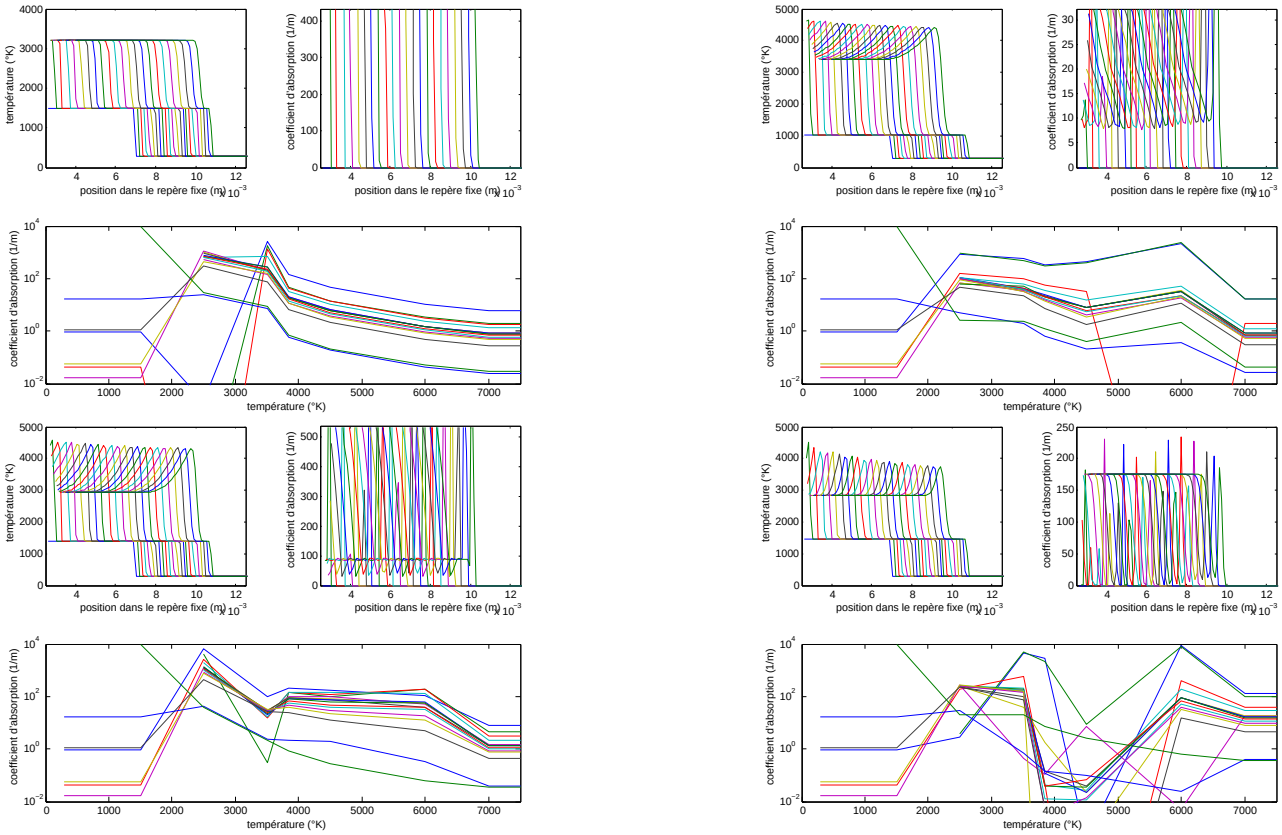

FIG. 60 – *Résultats d'inversion des mesures exactes dans le cas 3, ils sont à comparer aux profils initiaux de la Figure 26 et aux profils théoriques des Figures 5 et 13. En haut, pour la stratégie hiérarchique, et en bas, pour la stratégie directe. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

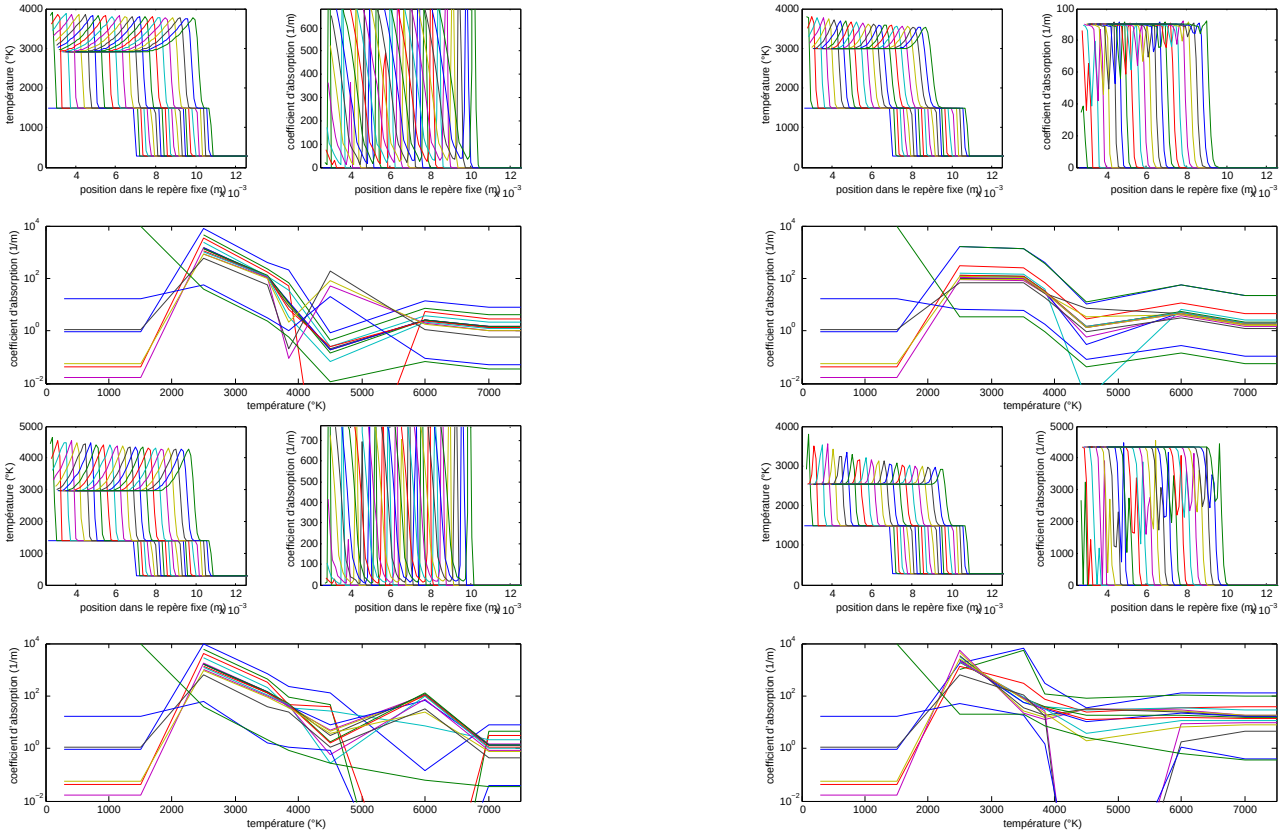

FIG. 61 – *Résultats d'inversion des mesures modélisées dans le cas 3, ils sont à comparer aux profils initiaux de la Figure 26 et aux vrais profils des Figures 11 et 14. En haut, pour la stratégie hiérarchique, et en bas, pour la stratégie directe. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

point initial = vrai point	stratégie directe
$T_{SD} = 4050$	4055
$D_{SD} = 8980$	8990
$T_{\text{Sout}} = 3400$	3320
$T_S = 1100$	1105
$c_g = 12$	12
$\tau_3 = 1{,}35$	1,34
$c_2 = 10$	10
$c_3 = 6$	6,0
$g_M = 0{,}45$ (71,6%)	0,43 (89,4%)
$T_{SD} = 4050$	4006
$D_{SD} = 8980$	9030
$T_{\text{Sout}} = 3400$	3282
$T_S = 1100$	1053
$c_g = 12$	12
$\tau_3 = 1{,}35$	1,35
$c_2 = 10$	10,0
$c_3 = 6$	5,9
$g_M = 0{,}45$ (85%)	0,49 (89,9%)

TAB. 11 – *Comptes rendus pour l'inversion des mesures exactes dans le cas 4, avec les tables régulière (en haut et maximale (en bas) à partir du vrai point pour la seule stratégie directe.*

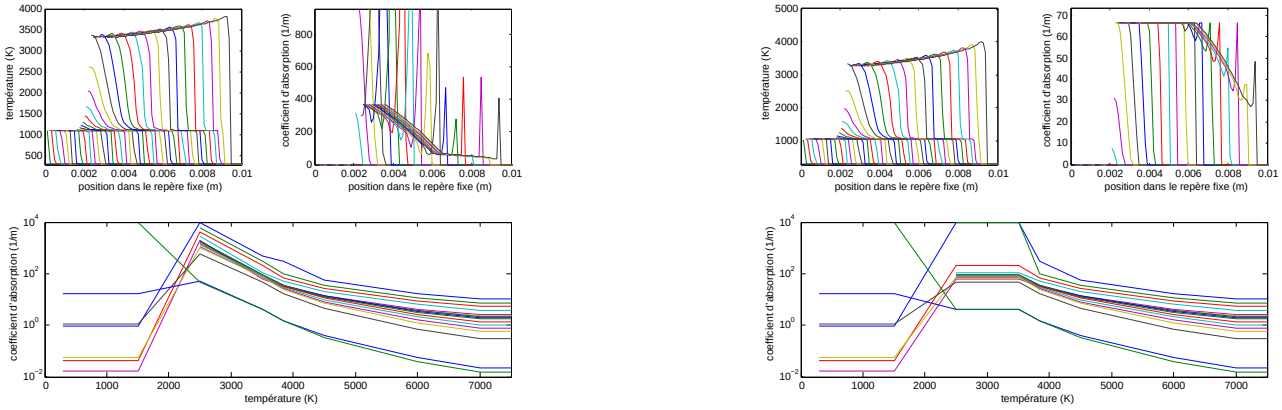

FIG. 62 – *Résultats d'inversion des mesures exactes dans le cas 4, ils sont à comparer aux vrais profils des Figures 11 et 14 et aux profils théoriques des Figures 5 et 13. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

point initial	stratégie				vrai point
	hiérarchique			directe	
$T_{SD} = 4100$	4072	4096	4101	4097	4050
$D_{SD} = 8700$	8700	8690	8690	8700	8980
$T_{\text{Sout}} = 3500$	3628	3654	3666	3502	3400
$T_S = 1200$	1255	1268	1272	1209	1100
$c_g = 11$	10,6	10,7	10,7	11	12
$\tau_3 = 1{,}4$	1,43	1,43	1,43	1,4	1,35
$c_2 = 9$	7,7	7,6	7,6	9,0	10
$c_3 = 7$	7,8	7,7	7,7	7	6
$g_M = 0{,}3$ (74,3%)	0,00 (81,4%)	0,11 (87,9%)	0,10 (88,2%)	0,30 (82,2%)	0,45 (100%)
$T_{SD} = 4100$ (93,3%)	–	–	–	4125 (94,8%)	4050 (100%)
$D_{SD} = 8700$ (92,5%)	–	–	–	8700 (92,5%)	8980 (100%)
$T_{\text{Sout}} = 3500$ (75,6%)	–	–	–	3400 (100%)	3400 (100%)
$T_S = 1200$ (95,5%)	–	–	–	1100 (100%)	1100 (100%)
$c_g = 11$ (93,7%)	–	–	–	10,9 (94,8%)	12 (100%)
$\tau_3 = 1{,}4$ (88,8%)	–	–	–	1,4 (88,8%)	1,35 (100%)
$c_2 = 9$ (90,8%)	–	–	–	10 (100%)	10 (100%)
$c_3 = 7$ (94,1%)	–	–	–	6 (100%)	6 (100%)
$g_M = 0{,}3$ (91,7%)	–	–	–	0,45 (100%)	0,45 (100%)
$T_{SD} = 4100$	4132	3908	3908	4155	4050
$D_{SD} = 8700$	8860	8710	8710	8880	8980
$T_{\text{Sout}} = 3500$	3217	3204	3204	3431	3400
$T_S = 1200$	1478	1334	1334	1222	1100
$c_g = 11$	5,0	4,7	4,7	9,8	12
$\tau_3 = 1{,}4$	1,63	1,55	1,55	1,57	1,35
$c_2 = 9$	7,6	7,4	7,4	7,9	10
$c_3 = 7$	7,8	8	8	7,1	6
$g_M = 0{,}3$ (-177%)	0,05 (70,6%)	0,27 (82,1%)	0,27 (82,1%)	0,27 (-19%)	0,45 (100%)
$T_{SD} = 4100$ (98,5%)	–	–	–	4102 (98,5%)	4050 (100%)
$D_{SD} = 8700$ (95,1%)	–	–	–	8690 (95,3%)	8980 (100%)
$T_{\text{Sout}} = 3500$ (92,4%)	–	–	–	3400 (100%)	3400 (100%)
$T_S = 1200$ (98,9%)	–	–	–	1101 (100%)	1100 (100%)
$c_g = 11$ (95,7%)	0,01	0,00	0,00	10,9 (96,5%)	12 (100%)
$\tau_3 = 1{,}4$ (89,6%)	–	–	–	1,4 (89,8%)	1,35 (100%)
$c_2 = 9$ (94,6%)	0,01	0,00	0,00	10 (100%)	10 (100%)
$c_3 = 7$ (97,9%)	0,01	0,00	0,00	6 (100%)	6 (100%)
$g_M = 0{,}3$ (96,9%)	0,01	0,00	0,00	0,45 (100%)	0,45 (100%)

TAB. 12 – *Comptes rendus pour l'inversion des mesures modélisées dans le cas 4, avec les tables régulière (en haut) et maximale (en bas) à partir du point initial proche pour les deux stratégies hiérarchique et directe, puis en ne recherchant qu'une seule composante du paramètre de température* $m_t = (T_{SD}, D_{SD}, T_{\text{Sout}}, T_S, c_g\tau_3, c_2, c_3, g_M)$ *à la fois, les huit autres étant fixées à leur vraie valeur. Le vrai point, servant à calculer les mesures modélisées, est rappelé.*

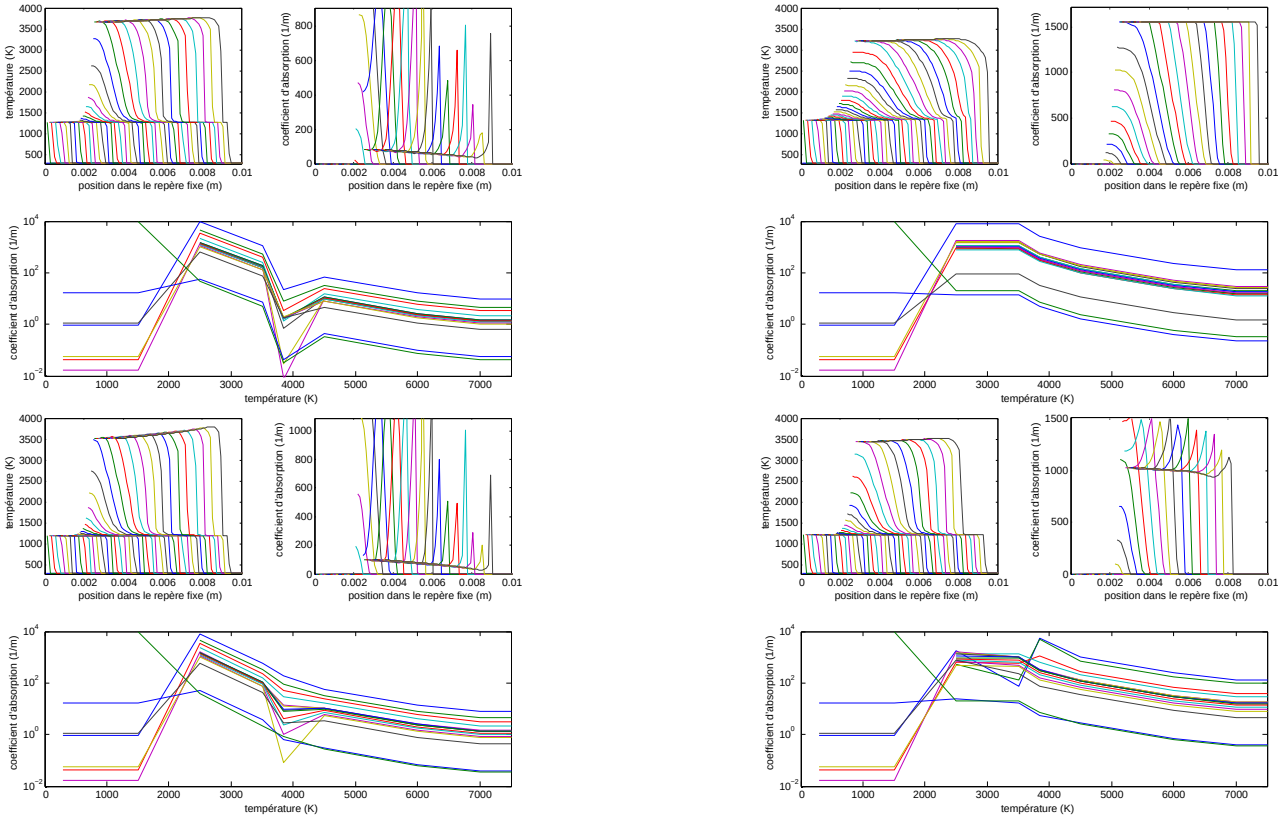

FIG. 63 – *Résultats d'inversion des mesures modélisées dans le cas 4, ils sont à comparer aux profils initiaux de la Figure 28 et aux vrais profils des Figures 11 et 14. En haut, pour la stratégie hiérarchique, et en bas, pour la stratégie directe. À gauche, avec la table régulière, et à droite, avec la table maximale.*

Conclusions et perspectives

Le marché a porté sur l'étude du problème inverse pour la détermination de profils de température dans une cellule contenant un explosif liquide (nitrométhane) à partir de mesures de la luminance du rayonnement émis au cours de la détonation. Les modèles classiques de détonation suggéraient l'étude de quatre cas tests correspondant successivement à :

- la détonation autonome stationnaire soutenue,
- la détonation stationnaire avec détente des produits issus de la détonation,
- la superdétonation simplifiée,
- un cas générique issu d'une simulation numérique de l'hydrodynamique radiative.

Nous avons étudié ce problème inverse en trois étapes : la paramétrisation, pour réduire la dimension, l'analyse de sensibilité, pour choisir une paramétrisation pertinente, et enfin l'inversion proprement dite.

Le problème a d'abord été formalisé comme modélisation directe du calcul des luminances, pour chaque instant de mesure et pour chaque longueur d'onde du dispositif de mesure, par la résolution de l'équation du transfert radiatif sous forme différentielle à partir des profils de température et de coefficient d'absorption monochromatique représentés sur une grille spatiale fine. Le problème étant largement sous-déterminé sous cette forme, nous avons proposé des paramétrisations réduites des quantités physiques.

Nous avons d'abord remarqué que les profils présentaient une succession de plateaux. Le coefficient d'absorption, qui dépend a priori de l'espace, ne dépend en fait que de la seule température (qui, elle, dépend du temps). Nous avons donc proposé de paramétrer ce coefficient d'absorption par interpolation linéaire aux nœuds d'une table de coefficients pour quelques températures. Cela nous a permis de réduire la dimension du paramètre de coefficient d'absorption d'un facteur de quelques milliers ! Les modèles permettant de définir les entrées de la table d'interpolation à partir de mesures expérimentales n'étant pas valables pour les températures qui nous intéressaient, la difficulté a donc résidé dans le choix des degrés de liberté pour le coefficient d'absorption dans la gamme 1500-3500 K. Nous avons testé l'usage de deux tables extrapolées à partir de la table incomplète fournie par le CEG : la table régulière, obtenue par prolongement linéaire, et la table maximale, obtenue par prolongement constant. La première garantit une bonne sensibilité à la température dans la gamme prolongée, mais la seconde permet de gommer les imperfections de la paramétrisation de la température mise en œuvre (sources d'oscillations importantes dans les luminances calculées par le modèle).

Le choix de la paramétrisation réduite de la température a reposé ensuite sur la remarque suivant laquelle, pour ce problème, les profils de température présentaient des fronts qui avançaient à diverses vitesses et éventuellement apparaissaient au cours du temps. De tels profils pouvant être vus comme solutions d'une loi de conservation scalaire, nous avons proposé de paramétrer la température par une telle équation hyperbolique de réaction/advection ; les degrés de liberté étant les caractéristiques principales de la condition initiale, de la condition à la limite à gauche et des fonctions intervenant dans les termes d'advection et de réaction. Cela nous a également permis de gagner un facteur de quelques milliers sur la dimension du paramètre de température ! Gardant à l'esprit que nous devions dériver cette paramétrisation (pour les besoins de l'analyse de sensibilité et de l'inversion), nous avons choisi le schéma numérique le plus simple pour résoudre la loi de conservation (de type Godunov, sans limiteur de pente). La diffusion numérique intrinsèque à ce schéma du premier ordre pouvant être contrôlée par l'augmentation de la résolution spatiale, l'utilisation d'une CFL sous-optimale et le "creusement" de la fonction du terme de transport sous sa sécante. Cependant, la paramétrisation réduite du coefficient d'absorption par interpolation s'est révélée exacerber le faible lissage dû à la diffusion numérique résiduelle ; étant ainsi à l'origine de forte oscillations d'amplitude de l'ordre de celle du bruit de mesure (mais ce bruit de modélisation étant corrélé, il est beaucoup plus méchant pour l'inversion). Cela a donc partiellement faussé l'analyse de sensibilité en développant, par exemple, l'influence de la vitesse du front principal.

Les dérivées des différents modules de la modélisation directe ont été validées par test aux différences finies, donnant ainsi un signe fort sur la justesse de leur implémentation.

L'analyse de sensibilité a été menée pour la modélisation directe complète intégrant les paramétrisations réduites des quantités physiques, la résolution de l'équation de transfert radiatif ainsi que la pondération de chaque mesure de façon inversement proportionnelle à une estimation de l'incertitude fournie par le CEG.

Cette analyse a comporté deux aspects. D'une part, l'analyse locale par décomposition en valeurs singulières de la matrice jacobienne des dérivées de la modélisation directe, qui a permis d'identifier les directions

principales du système. Et d'autre part, le tracé du critère des moindres carrés sur un segment joignant le point initial à une approximation du point optimal (qui n'est connu de façon exacte que pour des mesures de luminances synthétiques issues précisément de la modélisation directe complète) qui donne une indication sur le comportement global de la modélisation.

La conclusion principale de cette étude est que les paramétrisations proposées sont globalement plutôt pertinentes puisque, compte tenu de la très forte diminution de la dimension, le modèle conserve une bonne sensibilité par rapport aux degrés de liberté restants. Cela signifie que les paramétrisations réduites n'oublient pas de caractéristique importante des profils de température et de coefficient d'absorption monochromatique, et donc que la majeure partie de l'information contenue dans les mesures de luminances est accessible pour l'inversion. Nous avons même relevé, dans certains cas, une convexification du critère qui favorise l'inversion par technique locale de type descente.

Plus précisément, l'analyse a révélé (confirmé ?) que les mesures de luminance étaient généralement surtout sensibles à la valeur du plateau principal (valeur maximale dans le cas 1, valeur soutenue dans les trois autres cas). En présence de superdétonation (cas 3 et 4), la vitesse du front principal est inconnue et elle a également une très forte influence sur les mesures. Cette forte sensibilité est artificielle, elle est lié à la présence, artificielle, d'oscillations parasites dans les mesures de luminances. D'un point de vue global, cela est associé à la présence de nombreux minima locaux pour le critère à minimiser. Pour le cas générique (cas 4), la plus forte sensibilité est associée au délai d'apparition de la superdétonation. Cela signifie, qu'en présence de bruit, il y a peu de chance de pouvoir retrouver les autres caractéristiques des profils de température.

L'inversion a été réalisée par la minimisation de l'erreur des moindres carrés entre les mesures de luminance calculées par le modèle et les mesures à reproduire (qui peuvent également avoir été calculées numériquement). L'algorithme d'optimisation, intégré à la boîte à outils "optimisation" de MATLAB, est de type région de confiance avec gestion de contraintes de bornes.

Les résultats numériques d'inversion confirment les conclusions de l'analyse de sensibilité. En présence de bruit, il n'est pas raisonnable d'espérer retrouver plus que la valeur du plateau principal de température (tout au moins avec le modèle actuel). Par contre, pour des mesures non bruitées (donc dans l'image de la modélisation), il est possible de retrouver chaque composante séparément (les autres étant connues) à partir d'une estimation initiale pas trop éloignée, ce qui est tout de même plutôt encourageant, et même de les retrouver globalement dans les cas simples 1 et 2.

L'étude confirme également, qu'en cas de difficultés, une stratégie d'optimisation ouvrant progressivement les degrés de liberté produit une solution plus régulière que s'ils sont tous ouverts dès le début. Cela a été vérifié avec la recherche de la table d'interpolation pour laquelle la stratégie hiérarchique a consisté à rechercher d'abord un facteur d'amplitude pour une forme a priori de la table ; puis à estimer cette forme en séparant les deux directions (de température et de longueur d'onde), les autres valeurs étant déterminées par produit tensoriel ; et enfin à rechercher tous les détails de la table.

Les développements futurs devront au moins inclure la régularisation de la résolution de la loi de conservation scalaire, par exemple, par l'emploi d'un schéma numérique d'ordre plus élevé (mais qui sera plus difficile à dériver), ainsi qu'une réflexion conjointe avec le CEG sur la meilleure (moins mauvaise ?) façon de définir la table d'interpolation.

À plus long terme, la prise en compte du modèle plus sophistiqué (hydrodynamique radiative) ayant servi à produire les profils de température du cas générique (cas 4) est sans doute la meilleure alternative pour la paramétrisation de la température ; la loi de conservation scalaire pouvant s'en révéler être une approximation.

Références

[1] A. G. Kulikovskii , N. V. Pogorelov , A. Y. Semenov. *Mathematical aspects of numerical solution of hyperbolic systems.* Number 118 in Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics. Chapman & Hall/CRC, 2001.

[2] Ake Björck. *Numerical methods for least squares problems.* SIAM, 1996.

[3] P. D. Lax. *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves.* Number 11 in CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics. SIAM, 2nd edition, 1984.

[4] R. J. Le Veque. *Numerical methods for conservation laws.* Lectures in Mathematics: ETH Zürich. Birkhäuser, 2nd edition, 1992.

Unité de recherche INRIA Rocquencourt
Domaine de Voluceau - Rocquencourt - BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Lorraine : LORIA, Technopôle de Nancy-Brabois - Campus scientifique
615, rue du Jardin Botanique - BP 101 - 54602 Villers-lès-Nancy Cedex (France)
Unité de recherche INRIA Rennes : IRISA, Campus universitaire de Beaulieu - 35042 Rennes Cedex (France)
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes : 655, avenue de l'Europe - 38330 Montbonnot-St-Martin (France)
Unité de recherche INRIA Sophia Antipolis : 2004, route des Lucioles - BP 93 - 06902 Sophia Antipolis Cedex (France)

Éditeur
INRIA - Domaine de Voluceau - Rocquencourt, BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)
http://www.inria.fr
ISSN 0249-6399