

ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE D'ARTS ET MÉTIERS

RESA

Projet Méthodes Inverses : Estimation de paramètres

Auteurs :

Arthur BONVALET	Romain NOEL
Abderrahmane BOUKHAD	Louis MOREAU
Matteo GOURAT	Nandini PETITJEAN
Louis HENON	Jeremy ROUSSEAU
Mohamed ISMAILI	Vincent TAMIR
François KHAMLY	

16 janvier 2026

Table des matières

1	Introduction et Contextualisation	3
2	Description de la Méthode Flash	4
3	Explication du Modèle sur une Seule Couche	6
3.1	Modélisation Théorique : Du modèle général Carslaw et Jaeger	6
3.2	Prise en compte des Conditions Réelles (Pertes et Pulse)	7
3.3	Estimation des Paramètres	7
4	Recherche d'un vecteur de paramètres initiaux $\bar{\beta}_0$	9
4.1	Méthode de Parker (temps de demi-montée)	9
4.2	Méthode des temps partiels	9
4.3	Méthode des moments temporels	10
4.4	Synthèse et choix du α_0	11
5	Filtrage et réévaluation des paramètres (Méthodes de Parker et Moments Temporels)	12
5.1	Problématique et Justification du Filtrage	12
5.2	Méthodologie de Lissage	12
5.2.1	Choix de l'ordre du polynôme	12
5.2.2	Contraintes Physiques et Post-traitement	13
5.3	Résultats Comparatifs (Face Arrière)	13
5.4	Analyse de la Face Avant	14
6	Amélioration des résultats par méthode inverse (Gauss-Newton)	15
6.1	Validation et robustesse	15
6.2	Illustration de la convergence selon l'initialisation	15
6.3	Convergence avec 1 paramètre libre (T_{lim} fixé)	17
6.4	Analyse des coefficients de sensibilité	19
6.5	Performance statistique et conclusion	19
7	Approche probabiliste : Méthode MCMC	21
7.1	Fondements théoriques : Du déterministe au probabiliste	21
7.2	Méthode MCMC (Metropolis–Hastings)	21
7.3	Apports par rapport à Gauss-Newton	23
7.4	Analyse du cas Monocouche : Face Arrière	23
7.5	Analyse du cas Monocouche : Face Avant	25
7.6	Conclusion sur l'approche MCMC	26
8	Contexte Industriel et Hypothèses de la Bicouche	27
8.1	Contexte Mathématique	27
8.2	Conditions aux Limites	27
8.3	Formulation Analytique	27
8.4	Interprétation Physique	28
8.4.1	Le transfert de la Chaleur	28
8.4.2	Pourquoi l'estimation est-elle difficile ?	28
8.5	Analyse des Résultats (Gauss-Newton et MCMC)	28
8.5.1	Interprétation des Graphes	28
8.5.2	Analyse des Résultats	29
8.5.3	Synthèse : Face Avant vs Face Arrière	30

9 Conclusion	31
10 Bibliographie	32

1 Introduction et Contextualisation

Les couches minces sont aujourd’hui largement utilisées dans de nombreux domaines technologiques, en particulier dans la microélectronique, où elles interviennent dans la fabrication de composants tels que les microprocesseurs, les transistors de puissance ou encore les dispositifs optoélectroniques. Ces matériaux jouent un rôle essentiel dans le fonctionnement, la performance et la fiabilité des systèmes, notamment du point de vue de la gestion thermique.

Dans ce contexte, la connaissance des propriétés thermiques des films minces constitue un enjeu majeur. En effet, ces propriétés influencent directement la dissipation de la chaleur au sein des composants et conditionnent leur durabilité et leurs performances. Or, les propriétés thermiques des couches minces dépendent fortement de leur microstructure, de leur épaisseur et des procédés de fabrication utilisés, ce qui rend leur caractérisation délicate.

Le projet présenté s’inscrit dans le cadre d’une problématique industrielle, où un fabricant de composants microélectroniques souhaite mieux maîtriser et optimiser les performances de ses dispositifs. Pour cela, il est nécessaire de caractériser thermiquement des matériaux déposés en couches minces, tels que les matériaux monocouche (aluminium Al) ou bicouche (TiN/SiO₂).

Cependant, la caractérisation thermique des films minces pose plusieurs difficultés expérimentales, liées notamment aux temps de réponse très courts, aux effets d’interfaces, à la semi-transparence des couches ou encore au rapport signal sur bruit des mesures. Il est donc indispensable de mettre en œuvre des méthodes de caractérisation spécifiques et adaptées à ces contraintes.

Dans ce projet, nous nous intéressons à la méthode Flash et aux techniques associées de traitement et d’analyse des signaux thermiques. L’objectif est d’étudier le comportement thermique de films minces, d’estimer leurs propriétés thermiques à partir de thermogrammes, et de discuter l’influence du bruit et des méthodes de traitement des données sur la précision des résultats obtenus.

2 Description de la Méthode Flash

La méthode flash constitue aujourd'hui la technique de référence pour déterminer la diffusivité thermique des matériaux solides. Pour ce projet, notre étude s'est concentrée sur la caractérisation de la diffusivité thermique de matériaux solides homogènes. Des mesures ont été effectuées à l'aide de la « Méthode Flash Laser (LFA) ».

Principe général

Le principe général repose sur l'excitation thermique d'un échantillon plan à faces parallèles. Le protocole expérimental se décompose comme suit :

Préparation : Pour assurer la validité physique de la mesure, l'échantillon doit souvent être rendu opaque et noir (par exemple via un revêtement de graphite) afin de maximiser l'absorption du flux en surface et l'émissivité pour la détection.

Excitation : L'échantillon, stabilisé en température, reçoit sur sa face avant une impulsion d'énergie rayonnante courte et intense (le « flash »), générée par une source de type laser ou lampe flash.

Propagation : Cette énergie est absorbée en surface et se propage par conduction à travers l'épaisseur du matériau.

Détection : L'évolution temporelle de la température est enregistrée sur la face arrière à l'aide d'un détecteur, généralement sans contact (infrarouge).



FIGURE 1 – Dispositif de mesure NanoTR et les méthodes de mesures associées (face avant FF ; face arrière RF)

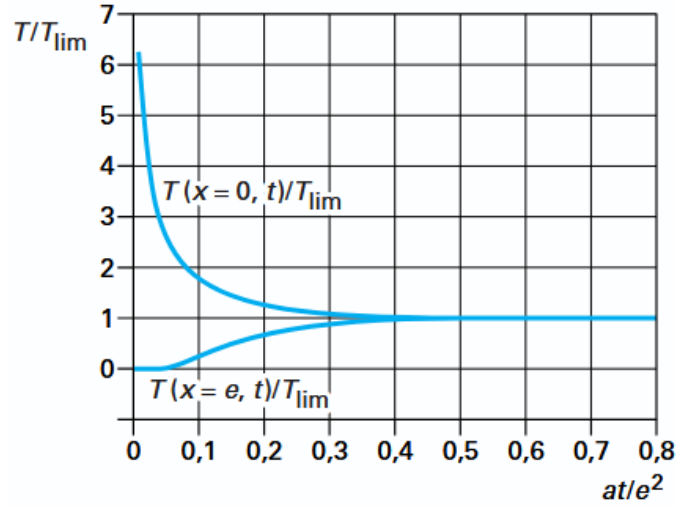


FIGURE 2 – Évolution théorique des températures (Faces avant et arrière)

La courbe obtenue, nommée **thermogramme**, illustre la réponse thermique du matériau. L'analyse de cette courbe permet de déduire la diffusivité thermique (a).

Dans le cas du modèle adiabatique idéal, cette grandeur est directement reliée au temps nécessaire pour que la température atteigne la moitié de sa valeur maximale ($t_{1/2}$) et à l'épaisseur de l'échantillon (e) selon la relation fondamentale de Parker :

$$a = 0,1388 \cdot \frac{e^2}{t_{1/2}} \quad (1)$$

3 Explication du Modèle sur une Seule Couche

Pour un matériau homogène constitué d'une unique couche, une approche rigoureuse est nécessaire pour convertir la mesure brute en une valeur physique précise. Vozár et Hohenauer classifient ces approches en « Modèle Idéal » et « Modèles Non-Idéaux ».

3.1 Modélisation Théorique : Du modèle général Carslaw et Jaeger

Pour traiter mathématiquement les transferts thermiques dans l'échantillon, l'approche la plus rigoureuse consiste à utiliser la transformée de Laplace associée à la méthode des quadripôles thermiques. Cette démarche permet de résoudre l'équation de la chaleur 1D en reliant linéairement les températures et les flux des deux faces sous forme matricielle. Dans l'espace de Laplace, la température en face arrière s'exprime directement en fonction des impédances thermiques.

Cependant, le modèle de référence historique, indispensable pour comprendre la physique du problème, est le **Modèle Idéal de Parker** (1961). Celui-ci correspond à une simplification du problème général sous des conditions adiabatiques.

Démonstration du modèle de Carslaw et Jaeger

Le modèle repose sur la résolution de l'équation de la chaleur sous les hypothèses idéales suivantes :

- **Géométrie** : L'échantillon est considéré comme une plaque infinie (transfert 1D), homogène et d'épaisseur uniforme e .
- **Adiabaticité** : Le matériau est parfaitement isolé thermiquement (aucune perte de chaleur sur les faces ou les côtés).
- **Source** : L'impulsion d'énergie est instantanée (Dirac temporel) et uniformément répartie sur la face avant ($x = 0$).
- **Absorption** : L'énergie Q est absorbée dans une couche superficielle d'épaisseur négligeable g (flux surfacique).

D'après les travaux de Carslaw et Jaeger, la distribution de température $T(x, t)$ dans une plaque isolée s'écrit sous la forme générale :

$$T(x, t) = \frac{1}{e} \int_0^e T(x, 0) dx + \frac{2}{e} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-n^2 \pi^2 at}{e^2}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{e}\right) \int_0^e T(x, 0) \cos\left(\frac{n\pi x}{e}\right) dx \quad (2)$$

En considérant que l'énergie Q est absorbée instantanément dans une profondeur g très faible ($g \rightarrow 0$), la température initiale est nulle partout sauf en surface ($0 < x < g$) où elle vaut $Q/(\rho C_p g)$. En injectant cette condition et en simplifiant (avec $\sin(n\pi g/e) \approx n\pi g/e$), on obtient l'expression de la température en tout point :

$$T(x, t) = \frac{Q}{\rho C_p e} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi x}{e}\right) \exp\left(\frac{-n^2 \pi^2 at}{e^2}\right) \right] \quad (3)$$

Application à la face arrière ($x = e$) : C'est la température en face arrière qui est mesurée. En posant $x = e$, et sachant que $\cos(n\pi) = (-1)^n$, l'expression devient :

$$T(e, t) = T_{lim} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\left(\frac{-n^2 \pi^2 at}{e^2}\right) \right] \quad (4)$$

où $T_{lim} = \frac{Q}{\rho C_p e}$ est la température limite atteinte à l'équilibre.

Résultat final : En cherchant le temps $t_{1/2}$ pour lequel la température atteint 50% du maximum ($T(e, t)/T_{lim} = 0,5$), Parker a établi la relation fondamentale permettant d'identifier la diffusivité a_{Parker} :

$$a_{Parker} \approx 0,1388 \cdot \frac{e^2}{t_{1/2}} \quad (5)$$

3.2 Prise en compte des Conditions Réelles (Pertes et Pulse)

Le modèle idéal (adiabatique) de Parker s'avère rarement suffisant dans la réalité expérimentale. Les « Modèles Non-Ideaux » intègrent deux corrections majeures indispensables pour une mesure précise :

- **Les pertes thermiques :** L'échantillon échangeant de la chaleur avec son environnement (convection, rayonnement), la température a tendance à redescendre après son maximum. Des méthodes historiques spécifiques, telles que la méthode de Cowan (basée sur la courbe de refroidissement) ou la méthode de Clark et Taylor, ont été développées pour quantifier ces pertes. Le modèle intègre ces phénomènes via le nombre de Biot.
- **La durée du pulse :** Si le flash n'est pas instantané (durée non négligeable face au temps de diffusion caractéristique de l'échantillon), le début de la montée en température est déformé et le demi-temps est décalé. La modélisation mathématique doit alors prendre en compte la forme temporelle réelle du pulse (par exemple rectangulaire ou triangulaire) pour ne pas fausser les résultats.

3.3 Estimation des Paramètres

Enfin, l'extraction de la diffusivité ne se limite plus à la méthode simple du « demi-temps » proposée initialement par Parker. Comme le détaille la revue de la littérature, l'utilisation d'algorithmes d'identification modernes est préconisée.

Il s'agit notamment de méthodes de régression non-linéaire (moindres carrés) ou de la méthode des moments temporels partiels. Ces méthodes ajustent le modèle théorique complet sur l'ensemble des points expérimentaux du thermogramme, permettant une estimation simultanée de la diffusivité et des coefficients de pertes, garantissant ainsi une meilleure robustesse face au bruit de mesure.

Pour mettre en œuvre ces méthodes, nous avons d'abord simulé la réponse théorique du matériau (Problème Direct) afin de générer des données synthétiques de référence. Les Figures ci-dessous illustrent les thermogrammes obtenus pour la face arrière (lieu de la mesure) et la face avant (lieu de l'excitation).

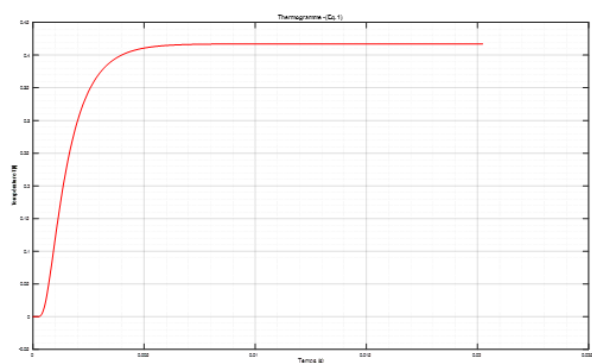


FIGURE 3 – Face arrière

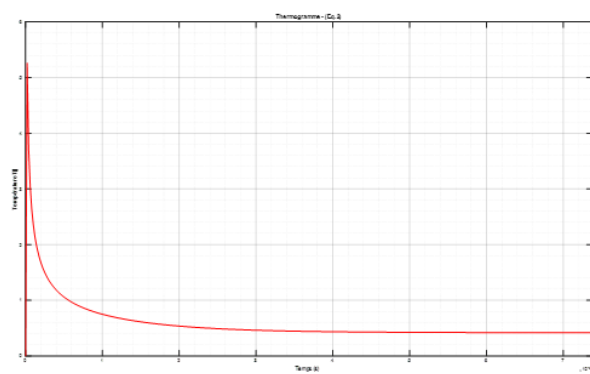


FIGURE 4 – Face avant

4 Recherche d'un vecteur de paramètres initiaux $\bar{\beta}_0$

Dans le cadre de la méthode Flash, l'algorithme d'optimisation nécessite une estimation initiale du vecteur de paramètres, notée $\bar{\beta}_0$. Pour assurer une convergence rapide et juste, ce $\bar{\beta}_0$ doit être le plus proche possible du vecteur de référence $\bar{\beta}_{ref}$ (les paramètres réels du matériau).

Dans notre cas, le paramètre clé est la diffusivité thermique. La valeur de référence est :

$$a_{ref} = 9.8849 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

Nous allons évaluer quelle méthode d'estimation permet d'obtenir un a_0 minimisant l'écart avec ce a_{ref} .

4.1 Méthode de Parker (temps de demi-montée)

Théorie : La méthode de Parker repose sur l'identification du *temps de demi-montée* $t_{1/2}$. Elle est applicable lorsque la réponse thermique est *monotone croissante* et le modèle proche du cas idéal (milieu homogène, pertes négligeables). Elle est très rapide mais repose sur un point unique, ce qui la rend sensible au bruit.

Application (Comparaison au a_{ref}) : Sur le signal sans bruit, l'estimation donne :

$$a_{Parker} = 0,1388 \cdot \frac{e^2}{t_{1/2}}$$
$$a_{Parker} = 9.8045 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$
$$\text{Écart relatif } \frac{|a_{Parker} - a_{ref}|}{a_{ref}} = 0.81 \%$$

Analyse : L'estimation est proche de a_{ref} , ce qui valide la propreté du signal. Cependant, nos tests de robustesse montrent qu'avec un bruit de 1 %, l'écart grimpe à **5.67 %**. C'est un a_0 risqué en conditions réelles.

4.2 Méthode des temps partiels

Théorie : Cette méthode généralise Parker en utilisant plusieurs fractions de la montée (ex : $t_{1/3}, t_{1/2}, t_{2/3}, t_{5/6}$). Elle nécessite un thermogramme monotone. L'utilisation de multiples points vise à lisser les erreurs de lecture pour obtenir un a_0 plus fiable.

Application (Comparaison au a_{ref}) : En moyennant les résultats sur différentes équations, nous obtenons :

$$a_{partiels_1} = \frac{e^2}{t_{5/6}} \cdot \left[0.818 - 1.708 \left(\frac{t_{1/3}}{t_{5/6}} \right) + 0.885 \left(\frac{t_{1/3}}{t_{5/6}} \right)^2 \right]$$

$$a_{partiels_2} = \frac{e^2}{t_{5/6}} \cdot \left[0.954 - 1.581 \left(\frac{t_{1/2}}{t_{5/6}} \right) + 0.558 \left(\frac{t_{1/2}}{t_{5/6}} \right)^2 \right]$$

$$a_{partiels_3} = \frac{e^2}{t_{5/6}} \cdot \left[1.131 - 1.222 \left(\frac{t_{2/3}}{t_{5/6}} \right) \right]$$

$$a_{partiels} \approx 9.73 \times 10^{-5} m^2/s$$

$$\text{Écart relatif moyen} \approx 1.50 \%$$

Analyse : Sur ce signal précis, cette méthode nous éloigne légèrement du a_{ref} par rapport à Parker. Toutefois, elle prouve son utilité sur les signaux dégradés (bruités), où l'équation 4 permet de maintenir un écart faible (**1.30 %**), là où Parker est moins précis.

4.3 Méthode des moments temporels

Théorie : Cette méthode repose sur l'intégration du thermogramme. L'intégration agissant comme un filtre passe-bas, elle est théoriquement la plus apte à fournir un a_0 stable malgré le bruit de mesure.

Application (Comparaison au a_{ref}) : L'application des moments temporels donne l'estimation suivante :

$$M_0 = \int_{t_{0,1}}^{t_{0,8}} \frac{T(t)}{\max(T)} dt$$

$$M_{-1} = \int_{t_{0,1}}^{t_{0,8}} \frac{1}{t} \frac{T(t)}{\max(T)} dt$$

$$a_{moments} = \frac{e^2}{M_0} F(M_{-1})$$

Conditions sur la fonction F :

Si $0,44 > M_{-1} > 0,27$:

$$F(M_{-1}) = 0,08548 - 0,314(0,5486 - M_{-1}) + 0,5(0,5486 - M_{-1})^{2,63}$$

Si $M_{-1} > 0,44$:

$$F(M_{-1}) = -0,0819 + 0,305M_{-1}$$

$$a_{moments} = 9.8232 \times 10^{-5} m^2/s$$

$$\text{Écart relatif} \frac{|a_{moments} - a_{ref}|}{a_{ref}} = \mathbf{0.62 \%}$$

Analyse : C'est la méthode qui fournit le a_0 le plus fidèle au a_{ref} . L'erreur est minimale, confirmant la capacité de l'approche intégrale à filtrer les imperfections pour trouver la vraie dynamique du système.

Remarque : Si on remplace par cette expression, la différence d'erreur n'est pas significative :

$$F(M_{-1}) = -0,08519 + 0,305M_{-1}$$

4.4 Synthèse et choix du a_0

Le tableau ci-dessous positionne les différentes estimations par rapport à la référence sur des données non-bruitées pour valider ou non la méthode.

Scalaire	Valeur (m^2/s)	Distance au a_{ref} (%)
a_{ref} (Cible)	9.8849×10^{-5}	-
a_{Parker}	9.8045×10^{-5}	0.81
$a_{Partiels}$ (moyenne)	$\approx 9.73 \times 10^{-5}$	≈ 1.50
$a_{Moments}$	9.8232×10^{-5}	0.62

TABLE 1 – Écart des estimations initiales par rapport à la diffusivité thermique de référence

Conclusion : La méthode des moments temporels est celle qui minimise la distance au vecteur de référence a_{ref} (seulement 0.62 % d'écart). C'est donc cette valeur que nous retiendrons comme point de départ pour l'algorithme d'identification :

$$a_0 = 9.8232 \times 10^{-5} m^2/s$$

Dans le cas où le bruit est important.

5 Filtrage et réévaluation des paramètres (Méthodes de Parker et Moments Temporels)

5.1 Problématique et Justification du Filtrage

L'objectif de cette étude est de déterminer si un pré-traitement des données par filtrage permet d'améliorer la précision des paramètres estimés par les méthodes de Parker, des moments temporels et des temps partiels.

L'analyse initiale des données brutes a révélé une erreur supérieure à 0,1%. Il est établi que les méthodes de Parker et des temps partiels sont particulièrement sensibles aux bruits présents dans le signal, ce qui constitue une source d'imprécision significative. Afin de réduire cette erreur, une stratégie de filtrage par lissage de la courbe a été adoptée.

5.2 Méthodologie de Lissage

Le lissage a été réalisé par une régression polynomiale (utilisation de `polyfit`) couplée à une approche de Monte Carlo.

5.2.1 Choix de l'ordre du polynôme

La détermination de l'ordre optimal N du polynôme repose sur la minimisation de l'erreur relative. Les critères de sélection sont les suivants :

- L'erreur relative (norme L_2) entre l'erreur actuelle et l'erreur suivante doit être inférieure à 0,1% par rapport aux données bruitées.
- L'ordre doit respecter la contrainte $N > 3$, les ordres inférieurs s'étant révélés insuffisants.

Pour la face arrière, l'analyse graphique de l'erreur en fonction du degré a permis d'identifier l'ordre optimal :

$$N = 13$$

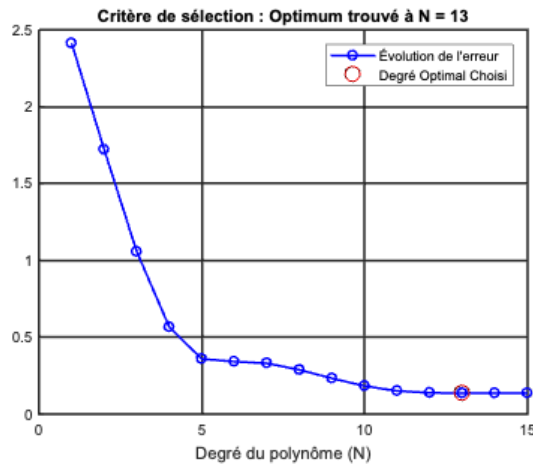


FIGURE 5 – Graphique permettant de déterminer le degré optimal du polynôme pour limiter l'erreur.

Ce choix permet de limiter l'erreur selon les critères fixés.

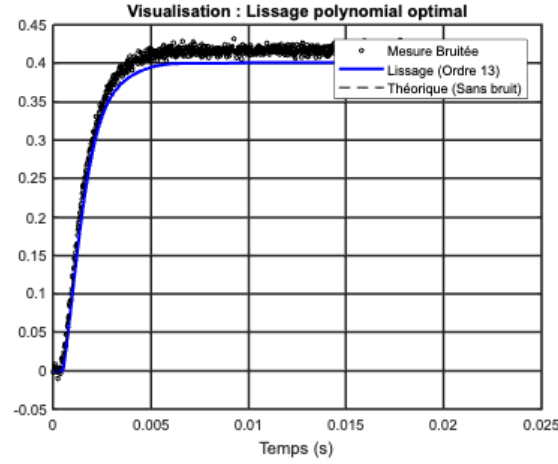


FIGURE 6 – Graphique permettant de comparer les mesures bruitées avec la courbe de lissage.

L'erreur finale est ici due au sens physique que l'on impose au début de la courbe, elle n'a aucun impact sur les résultats et la détermination des paramètres. Cette erreur est purement graphique.

5.2.2 Contraintes Physiques et Post-traitement

Afin de garantir la cohérence physique du signal lissé (y_{lisse}), les opérations suivantes sont appliquées aux données :

1. **Correction du décalage (Offset) :** Recalage de la courbe pour débuter à zéro.

$$\bar{y}_{lisse} = \bar{y}_{lisse} - \bar{y}_{lisse(1, premières\ valeurs)}$$

2. **Positivité :** Suppression des valeurs négatives non physiques.

$$\bar{y}_{lisse}(\bar{y}_{lisse} < 0) = 0$$

3. **Monotonie (Croissance) :** Application d'un filtre de maximum cumulé pour assurer que la température ne décroît pas anormalement durant la phase de montée.

$$\bar{y}_{lisse} = \max(\text{cummax}(\bar{y}_{lisse}), \bar{y}_{lisse})$$

Note : Le décalage observé en fin de courbe est un effet de bord dû au sens physique imposé au début du signal, sans impact sur l'identification des paramètres.

5.3 Résultats Comparatifs (Face Arrière)

Les méthodes ont été appliquées sur les signaux bruités et lissés pour une diffusivité théorique de $9.8849 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$.

Les résultats moyens sur 200 simulations sont présentés dans le tableau suivant :

=====		
RÉSULTATS MOYENS SUR 200 SIMULATIONS		
Diffusivité Théorique : 9.8849e-05 m²/s		
=====		
Méthode	Sur BRUITÉ (Err %)	Sur LISSÉ (Err %)
-----	-----	-----
Parker	9.325e-05 (5.67%)	9.446e-05 (4.44%)
Temps Partiels Eq3	1.012e-04 (2.42%)	9.398e-05 (4.92%)
Temps Partiels Eq4	1.001e-04 (1.30%)	9.312e-05 (5.80%)
Temps Partiels Eq5	1.010e-04 (2.16%)	9.385e-05 (5.05%)

FIGURE 7 – Résultats moyens sur 200 simulations.

On constate que si le lissage améliore légèrement l'estimation pour la méthode de Parker, il semble au contraire augmenter l'erreur pour les méthodes des Temps Partiels dans cette configuration spécifique (pour un bruit de 1 %).

5.4 Analyse de la Face Avant

La même méthodologie de lissage a été appliquée pour la face avant. Cette étape est d'autant plus critique que le signal en face avant présente une dynamique très rapide (pic de température) suivie d'une décroissance, où le bruit peut fortement perturber l'identification.

Il est à noter que la méthode de Parker, des temps partiels et des moments temporels n'est pas applicable physiquement pour cette face.

Comme l'illustre la figure ci-dessous, le lissage polynomial permet de récupérer la dynamique moyenne du refroidissement malgré la dispersion des mesures bruitées.

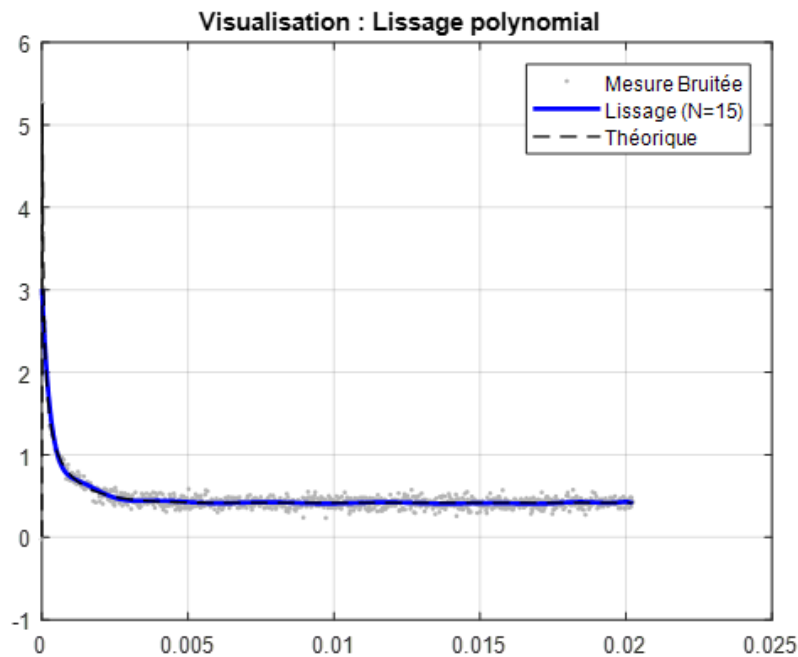


FIGURE 8 – Visualisation du lissage polynomial sur la Face Avant (N=13)

6 Amélioration des résultats par méthode inverse (Gauss-Newton)

Afin de dépasser les limitations des méthodes analytiques qui n'exploitent qu'un nombre restreint de points, nous avons mis en œuvre une méthode d'estimation paramétrique sur l'ensemble du thermogramme. Nous utilisons l'algorithme de Gauss-Newton (fonction `lsqcurvefit` sous MATLAB) pour minimiser l'écart quadratique entre le modèle théorique et les données expérimentales.

La méthode étant itérative pour un modèle non linéaire, elle nécessite un point de départ, noté $\bar{\beta}_0$. Pour assurer la convergence, nous utilisons les résultats issus de la méthode de Parker (sur données lissées) comme vecteur d'initialisation.

6.1 Validation et robustesse

Dans un premier temps, la méthode a été validée sur des données théoriques sans bruit. L'algorithme retrouve les paramètres exacts avec une erreur relative nulle (0.00 %).

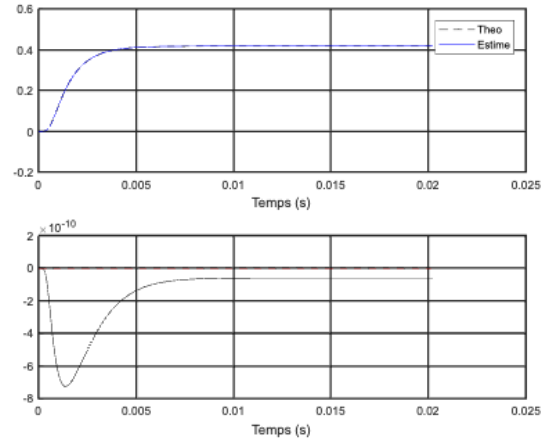


FIGURE 9 – Gauss-Newton théorique et estimé

Lors du passage aux données bruitées (cas réel), l'estimation reste très performante en configuration **face arrière**, avec une erreur sur la diffusivité de seulement 0.07 %. En revanche, la **face avant** montre déjà une sensibilité accrue avec une erreur de 1.72 %, et pour un bruit de 1%.

6.2 Illustration de la convergence selon l'initialisation

Les figures suivantes et les tableaux associés illustrent l'impact critique du point de départ $\bar{\beta}_0$ sur la convergence de l'algorithme.

Dans le cas où notre vecteur $\bar{\beta}$ est constitué de 2 paramètres :

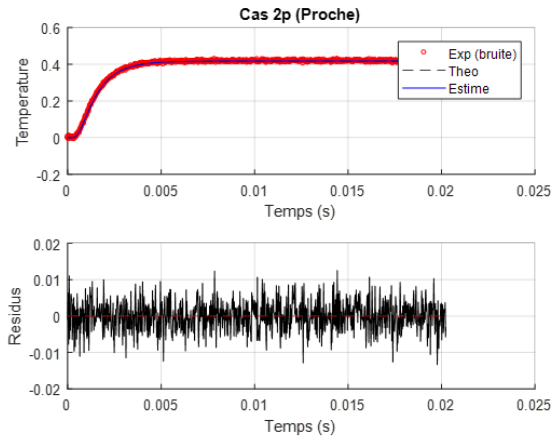


FIGURE 10 – Initialisation proche : Convergence réussie.

Param.	Vrai	Estimé	Err (%)
a	9.89e-5	9.87e-5	0.19
T_{lim}	0.417	0.417	0.02

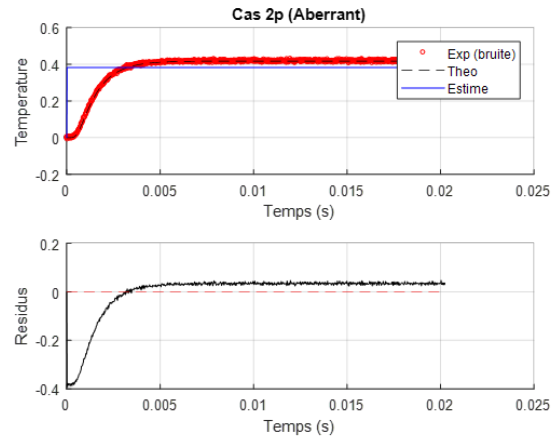


FIGURE 11 – Initialisation aberrante : Blocage (minimum local).

Param.	Vrai	Estimé	Err (%)
a	9.89e-5	3.00e-1	303394
T_{lim}	0.417	0.383	8.28

Le cas intermédiaire ci-dessous montre que même si la température limite T_{lim} est bien estimée initialement, une valeur aberrante de la diffusivité a suffit à faire échouer l'algorithme.

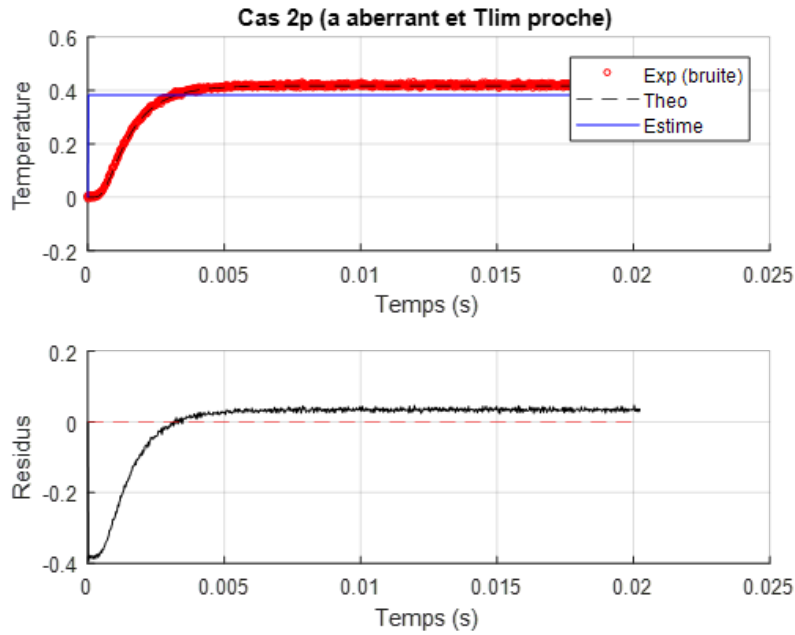


FIGURE 12 – Cas mixte (a aberrant, T_{lim} proche) : L'algorithme parvient ici à converger car T_{lim} guide la solution.

Paramètre	Valeur Théorique	Valeur Estimée	Erreur (%)
Diffusivité (a)	9.885×10^{-5}	9.866×10^{-5}	0.19 %
Temp. Limite (T_{lim})	0.417	0.417	0.02 %

6.3 Convergence avec 1 paramètre libre (T_{lim} fixé)

Dans cette configuration, nous fixons la température limite à sa valeur théorique ($T_{lim} = 0.417$) et nous cherchons uniquement à estimer la diffusivité a .

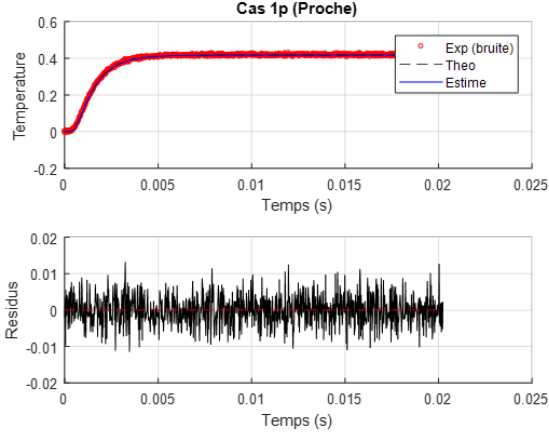


FIGURE 13 – Initialisation proche : Convergence excellente.

Param.	Vrai	Estimé	Err (%)
a	9.89e-5	9.88e-5	0.01
T_{lim}	Fixé	0.417	-

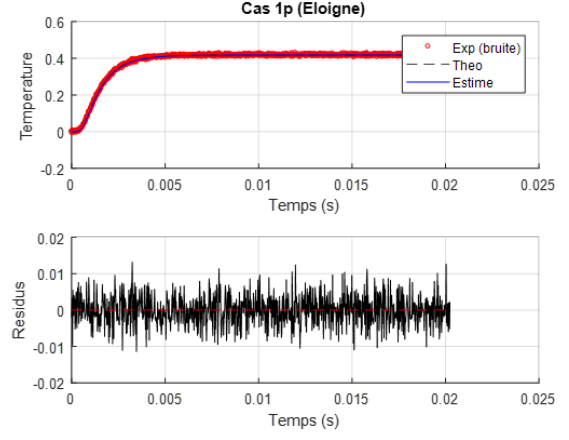


FIGURE 14 – Initialisation éloignée : L'algorithme parvient à converger.

Param.	Vrai	Estimé	Err (%)
a	9.89e-5	9.88e-5	0.02
T_{lim}	Fixé	0.417	-

Le cas ci-dessous montre cependant les limites de la méthode : même avec T_{lim} fixé parfaitement, si l'initialisation de la diffusivité est totalement aberrante ($a_0 = 10$ au lieu de 10^{-5}), l'algorithme ne converge pas.

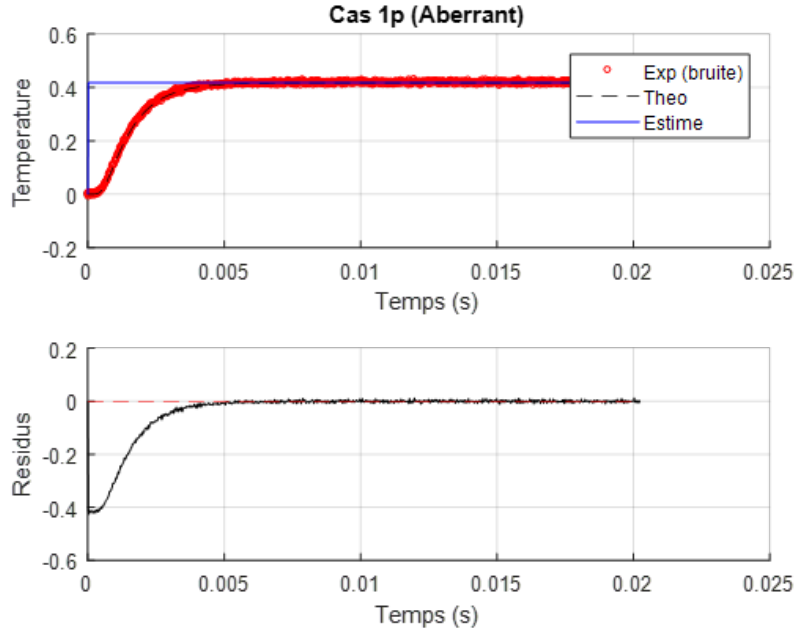


FIGURE 15 – Initialisation aberrante ($a_0 = 10$) : Divergence totale malgré T_{lim} fixé.

Paramètre	Valeur Théorique	Valeur Estimée	Erreur (%)
Diffusivité (a)	9.885×10^{-5}	$1.000 \times 10^{+1}$	$> 10^7$
T_{lim} (Fixé)	0.417	0.417	-

Note d'analyse : Si l'erreur initiale sur a est trop importante sans être compensée par une bonne estimation de T_{lim} , l'algorithme diverge (comme vu dans le cas aberrant). Ici, la proximité de T_{lim} a permis de rattraper la dynamique. Concernant la robustesse, nos tests montrent que l'algorithme converge bien pour des initialisations proches ou éloignées. Cependant, une initialisation "aberrante" (physiquement incohérente, surtout de a (diffusivité)) provoque une divergence totale, avec des erreurs dépassant 300 000 %. Cela confirme la nécessité d'utiliser Parker en amont. De plus, fixer arbitrairement la température limite (T_{lim}) est risqué : une erreur de 20 % sur ce paramètre fixe entraîne une erreur de près de 30 % sur la diffusivité.

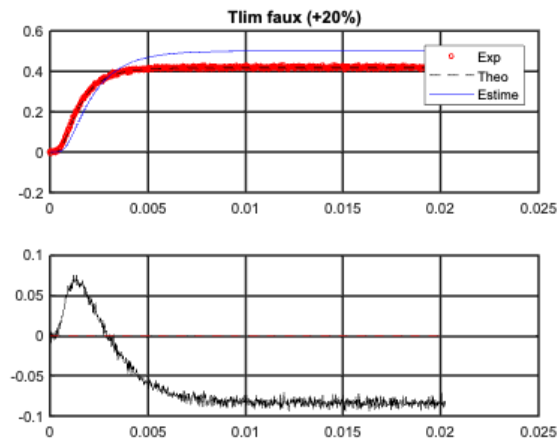


FIGURE 16 – Coefficients de sensibilité réduit (Face Arrière), avec T_{lim} fixé.

6.4 Analyse des coefficients de sensibilité

La performance supérieure de la face arrière s'explique par l'étude des sensibilités. Comme illustré ci-dessous, les courbes de sensibilité en face arrière sont très distinctes : la sensibilité à la diffusivité a présente un pic marqué au début (dynamique), tandis que celle à T_{lim} est croissante.

Ces formes non proportionnelles prouvent que les paramètres sont **décorrélés**, permettant une identification unique. L'amplitude élevée du pic (proche de 3000) garantit une bonne informativité.

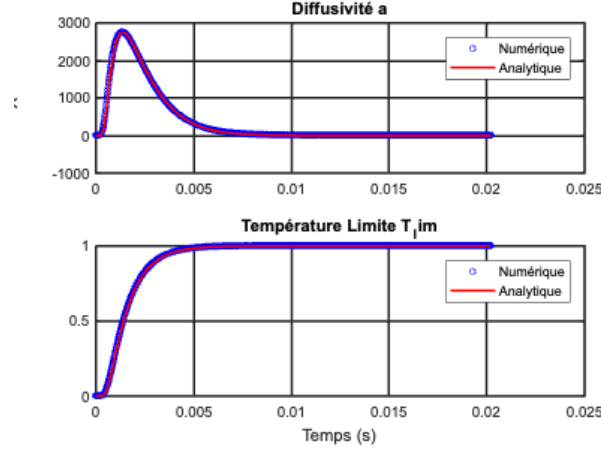


FIGURE 17 – Coefficients de sensibilité réduits (Face Arrière). La distinction des formes démontre la décorrélation des paramètres.

À l'inverse, en face avant, la matrice de sensibilité est mal conditionnée, ce qui traduit une corrélation entre les paramètres et explique la moindre précision.

6.5 Performance statistique et conclusion

Une analyse de Monte-Carlo (200 simulations) confirme la supériorité de la face arrière :

- **Face Arrière** : Erreur moyenne sur a de **0.12 %** et très faible dispersion (Coefficient de Variation de 1.76 %).
- **Face Avant** : Erreur moyenne de 0.50 % et forte dispersion (CV de 12.18 %).

La figure suivante montre la superposition parfaite entre le modèle optimisé et les données expérimentales pour la face arrière.

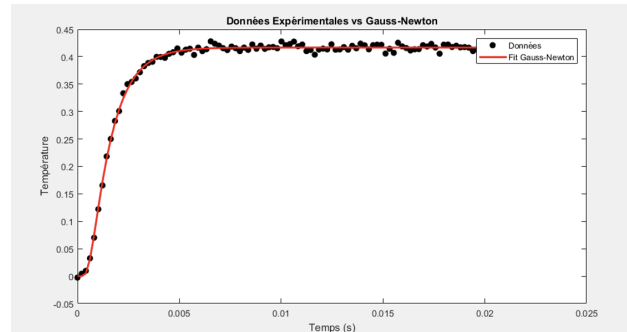


FIGURE 18 – Ajustement du modèle Gauss-Newton sur les données expérimentales (Face Arrière).

Le tableau ci-dessous synthétise l'impact du bruit. La face arrière reste robuste (erreur $< 2.3 \%$) même à 10 % de bruit.

Niveau de Bruit	Erreur Face Arrière (a)	Erreur Face Avant (a)
0.5 %	0.02 %	0.36 %
1.0 %	0.76 %	0.71 %
5.0 %	0.02 %	6.47 %
10.0 %	2.28 %	10.17 %

TABLE 2 – Comparaison de l'erreur relative sur la diffusivité a en fonction du bruit.

7 Approche probabiliste : Méthode MCMC

L'ensemble de cette section a été rédigé après la lecture de [4] et [5]

7.1 Fondements théoriques : Du déterministe au probabiliste

Les méthodes d'optimisation classiques telles que Gauss-Newton, bien qu'efficaces pour converger rapidement, présentent des limitations intrinsèques pour les problèmes inverses complexes. Elles supposent souvent implicitement que la fonction de coût est quadratique localement (ellipsoïdes de confiance) et peuvent rester piégées dans des minima locaux.

La méthode MCMC (Markov Chain Monte Carlo) est une famille d'algorithmes permettant d'échantillonner une distribution de probabilité complexe, souvent une loi a posteriori en approche bayésienne, lorsque celle-ci ne peut pas être calculée ou normalisée explicitement. Le principe consiste à construire une chaîne de Markov dont la distribution stationnaire est la loi cible. À chaque itération, un nouveau candidat est proposé par une perturbation aléatoire simple de l'état courant, puis accepté ou rejeté selon un critère probabiliste fondé sur la vraisemblance des données et, le cas échéant, sur un a priori. Ce mécanisme local, qui ne nécessite que des comparaisons relatives de probabilité et non un tirage direct selon la loi cible, permet d'explorer efficacement l'espace des paramètres tout en quantifiant l'incertitude associée aux solutions plausibles.

7.2 Méthode MCMC (Metropolis–Hastings)

Objectif. On cherche à construire une chaîne de Markov $\{\bar{\beta}^{(k)}\}_{k \geq 0}$ dont la distribution stationnaire est une distribution cible $\pi(\bar{\beta})$, typiquement une loi a posteriori des paramètres. Cette distribution est connue uniquement à une constante de normalisation près :

$$\pi(\bar{\beta}) \propto \tilde{\pi}(\bar{\beta}), \quad \tilde{\pi}(\bar{\beta}) = p(\bar{y} | \bar{\beta}) p(\bar{\beta}), \quad (6)$$

où $p(\bar{y} | \bar{\beta})$ est la vraisemblance (liée aux résidus) et $p(\bar{\beta})$ un a priori (connaissances physiques).

Principe général. À partir d'un état courant $\bar{\beta}$, l'algorithme :

1. propose un nouveau candidat $\bar{\beta}'$ selon une loi simple $q(\bar{\beta}' | \bar{\beta})$,
2. décide d'accepter ou non ce candidat à l'aide d'une règle probabiliste garantissant que la chaîne converge vers $\pi(\bar{\beta})$.

Choix du nouveau candidat (loi de proposition). Le candidat $\bar{\beta}'$ est tiré selon une loi de proposition choisie par l'utilisateur, facile à simuler. Un choix classique est une marche aléatoire gaussienne :

$$\bar{\beta}' = \bar{\beta} + \bar{\eta}, \quad \eta_i \sim \mathcal{N}(0, \Sigma), \quad (7)$$

où Σ est une matrice de covariance contrôlant l'amplitude et la direction des déplacements. Ce choix est indépendant du modèle et ne nécessite ni dérivée ni normalisation.

Noyau de transition. La probabilité de transition de $\bar{\beta}$ vers $\bar{\beta}'$ s'écrit :

$$P(\bar{\beta} \rightarrow \bar{\beta}') = q(\bar{\beta}' | \bar{\beta}) A(\bar{\beta}, \bar{\beta}'), \quad (8)$$

où $A(\bar{\beta}, \bar{\beta}') \in [0, 1]$ est la probabilité d'acceptation du candidat.

Condition de stationarité Pour que $\pi(\bar{\beta})$ soit invariante par la chaîne, il suffit d'imposer la condition de balance détaillée :

$$\pi(\bar{\beta}) P(\bar{\beta} \rightarrow \bar{\beta}') = \pi(\bar{\beta}') P(\bar{\beta}' \rightarrow \bar{\beta}). \quad (9)$$

En substituant l'expression du noyau de transition, on obtient :

$$\pi(\bar{\beta}) q(\bar{\beta}' | \bar{\beta}) A(\bar{\beta}, \bar{\beta}') = \pi(\bar{\beta}') q(\bar{\beta} | \bar{\beta}') A(\bar{\beta}', \bar{\beta}). \quad (10)$$

Vraisemblance. La vraisemblance est construite à partir d'un modèle déterministe reliant les paramètres $\bar{\beta}$ aux observations, auquel on associe explicitement une hypothèse sur les erreurs de mesure ou de modélisation. On suppose que les données observées s'écrivent

$$y_{\text{obs}}^- = f(\bar{\beta}) + \varepsilon, \quad (11)$$

où $f(\bar{\beta})$ est la prédiction du modèle et ε représente l'erreur, considérée comme une variable aléatoire. Le choix d'une loi pour ε traduit une hypothèse statistique sur la nature du bruit expérimental. Dans le cas le plus courant, on suppose un bruit gaussien centré, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, ce qui implique que, conditionnellement aux paramètres $\bar{\beta}$, l'observation y_{obs}^- suit une loi normale de moyenne $f(\bar{\beta})$ et de variance σ^2 .

La vraisemblance est alors définie comme la densité de probabilité de l'observation conditionnellement aux paramètres :

$$p(y_{\text{obs}}^- | \bar{\beta}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(y_{\text{obs}}^- - f(\bar{\beta}))^2}{2\sigma^2}\right). \quad (12)$$

Elle mesure la compatibilité entre la prédiction du modèle et les données observées, compte tenu de l'hypothèse de bruit. Dans les algorithmes MCMC, cette expression n'est utilisée qu'à un facteur multiplicatif près, car seule la comparaison relative des vraisemblances entre deux états intervient dans la règle d'acceptation. Lors de l'algorithme MCMC, la décision d'acceptation d'un candidat $\bar{\beta}'$ ne repose pas sur la valeur absolue de cette vraisemblance, mais sur sa comparaison avec celle de l'état courant, via le ratio

$$r = \frac{p(y_{\text{obs}}^- | \bar{\beta}') p(\bar{\beta}')}{p(y_{\text{obs}}^- | \bar{\beta}) p(\bar{\beta})}. \quad (13)$$

Dans le cas d'une loi de proposition symétrique et en l'absence d'a priori informatif, ce ratio se réduit à

$$r = \exp\left(-\frac{(y_{\text{obs}}^- - f(\bar{\beta}'))^2 - (y_{\text{obs}}^- - f(\bar{\beta}))^2}{2\sigma^2}\right), \quad (14)$$

montrant que la probabilité d'acceptation dépend uniquement de la variation d'erreur entre l'état courant et le candidat, et non de l'erreur absolue.

Définition du ratio d'acceptation. On introduit le ratio

$$r(\bar{\beta}, \bar{\beta}') = \frac{\pi(\bar{\beta}') q(\bar{\beta} | \bar{\beta}')}{\pi(\bar{\beta}) q(\bar{\beta}' | \bar{\beta})}. \quad (15)$$

La probabilité d'acceptation est alors choisie comme :

$$A(\bar{\beta}, \bar{\beta}') = \min(1, r). \quad (16)$$

Probabilité d'acceptation

— Si $r \geq 1$, alors $A(\bar{\beta}, \bar{\beta}') = 1$ et

$$A(\bar{\beta}', \bar{\beta}) = \frac{1}{r}.$$

— Si $r < 1$, alors $A(\bar{\beta}, \bar{\beta}') = r$ et $A(\bar{\beta}', \bar{\beta}) = 1$.

Dans les deux cas, on vérifie que :

$$\pi(\bar{\beta}) q(\bar{\beta}' | \bar{\beta}) A(\bar{\beta}, \bar{\beta}') = \pi(\bar{\beta}') q(\bar{\beta} | \bar{\beta}') A(\bar{\beta}', \bar{\beta}),$$

C'est l'équation imposée qui garantit que la distribution cible π est stationnaire.

Règle d'acceptation On tire $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ et l'état suivant est donné par :

$$\bar{\beta}^{(k+1)} = \begin{cases} \bar{\beta}' & \text{si } u \leq \min(1, r), \\ \bar{\beta}^{(k)} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (17)$$

Ainsi, un candidat plus probable que l'état courant est toujours accepté, tandis qu'un candidat moins probable peut être accepté avec une probabilité non nulle, ce qui permet à la chaîne d'explorer l'espace des paramètres et d'éviter le piégeage dans des optima locaux.

Algorithme (pseudo-code).

1. Choisir une initialisation $\bar{\beta}^{(0)}$ et les paramètres (Σ , nombre d'itérations, etc.).
2. Pour $k = 0, \dots, N - 1$:
 - (a) Proposer $\bar{\beta}' \sim q(\cdot \mid \bar{\beta}^{(k)})$ (ex. $\bar{\beta}' = \bar{\beta}^{(k)} + \bar{\eta}$, $\bar{\eta} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$).
 - (b) Calculer $\pi(\bar{\beta}')$ (via $f(\bar{\beta}')$, la vraisemblance, et l'a priori) et $\pi(\bar{\beta}^{(k)})$.
 - (c) Calculer $r = \frac{\pi(\bar{\beta}')q(\bar{\beta}^{(k)} \mid \bar{\beta}')}{\pi(\bar{\beta}^{(k)})q(\bar{\beta}' \mid \bar{\beta}^{(k)})}$.
 - (d) Tirer $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ et accepter si $u \leq \min(1, r)$, sinon rester en $\bar{\beta}^{(k)}$.
3. Les échantillons $\{\bar{\beta}^{(k)}\}$ (après une phase de chauffe/burn-in) approximent des tirages selon $\pi(\bar{\beta})$.

Analogie du Randonneur (Metropolis-Hastings)

Imaginez un randonneur dans un paysage montagneux brumeux, cherchant non seulement le sommet, mais voulant cartographier l'ensemble du massif.

- **Exploration** : À chaque pas, le randonneur choisit une direction aléatoire (perturbation des paramètres).
- **Décision (Ratio de Metropolis)** :
 - Si le nouveau point améliore l'ajustement, il s'y déplace systématiquement.
 - Si le nouveau point le détériore, il **peut** quand même décider d'y aller avec une certaine probabilité.

Cette capacité stochastique à « redescendre » permet d'échapper aux minima locaux peu profonds pour explorer l'espace global.

7.3 Apports par rapport à Gauss-Newton

L'utilisation du MCMC après une estimation par Gauss-Newton permet de passer d'une vision **ponctuelle et locale** à une vision **globale et probabiliste**. Ses avantages majeurs sont :

1. **Quantification rigoureuse des incertitudes** : Elle fournit des intervalles de crédibilité exacts même si les distributions sont asymétriques, contrairement aux approximations asymptotiques de Gauss-Newton.
2. **Révélation des corrélations** : Elle met en évidence les couplages forts entre paramètres (distributions en forme de « banane ») que les méthodes locales peuvent masquer.

7.4 Analyse du cas Monocouche : Face Arrière

L'algorithme a d'abord été appliqué sur le signal classique de la face arrière. La Figure 19 regroupe l'ajustement du modèle, les traces des chaînes, les distributions et l'analyse des incertitudes.

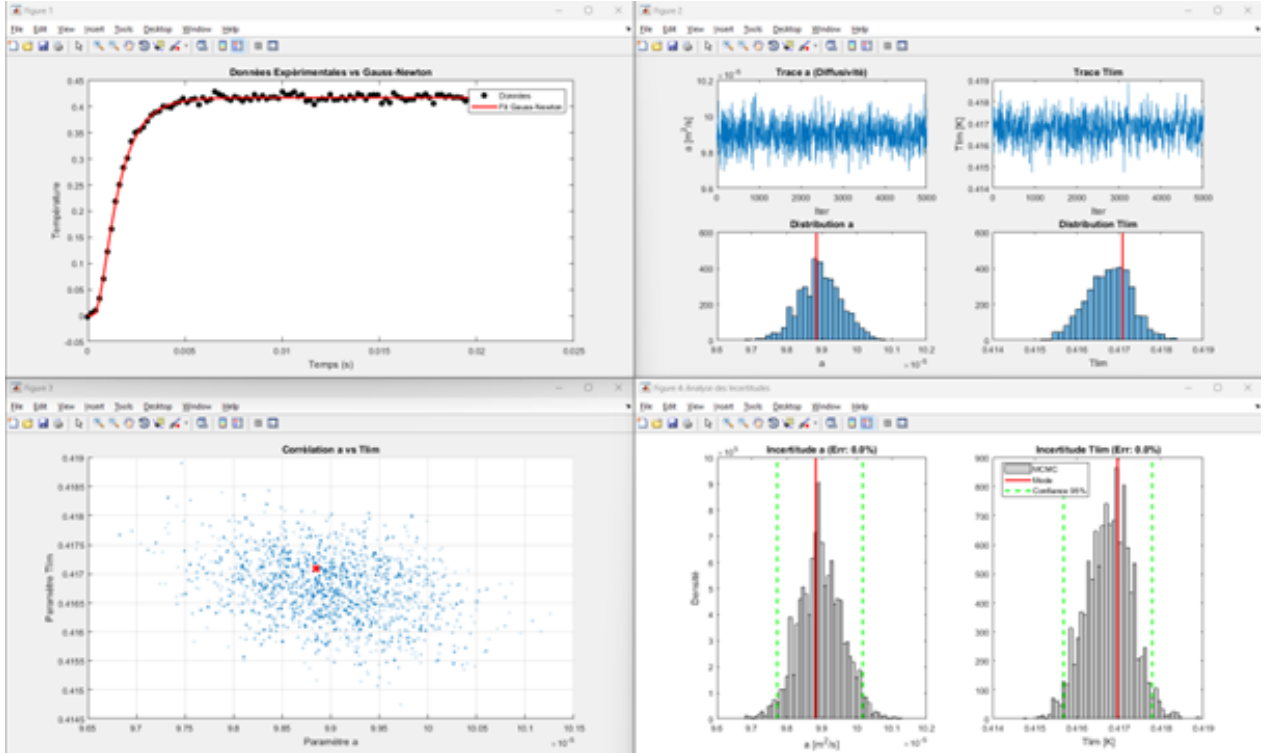


FIGURE 19 – Résultats MCMC complets pour la Face Arrière (Fit, Traces, Corrélations et Incertitudes)

On recapitule les résultats dans ce tableau :

Bruit	0.001%	0.5%	1%	5%	10%
Erreur a	0%	0.02%	0.76%	0.02%	2.28%
Erreur T_{lim}	0%	0.03%	0.10%	0.5%	2.22%

TABLE 3 – Influence du niveau de bruit sur les erreurs relatives des paramètres estimés

Analyse des résultats

- **Convergence** : Les traces (en haut à droite) sont stables et oscillent autour d'une moyenne constante.
- **Corrélation** : Le nuage de points (en bas à gauche) montre une forme elliptique marquée. Il existe une forte corrélation linéaire entre la diffusivité a et la température limite T_{lim} .

L'analyse numérique confirme l'excellente précision de la méthode sur la face arrière pour les deux paramètres :

1. Pour la diffusivité thermique a :

- Valeur vraie : $9.8849 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- Valeur estimée : $9.8829 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- **Erreur relative : 0.02 %**
- Intervalle de confiance (95%) : $[9.77 \times 10^{-5} ; 1.00 \times 10^{-4}]$

2. Pour la température limite T_{lim} (liée à l'énergie Q) :

- Valeur vraie : 0.4171 K
- Valeur estimée : 0.4170 K
- **Erreur relative : 0.02 %**
- Intervalle de confiance (95%) : $[0.4165 ; 0.4175] \text{ K}$

La méthode permet donc d'identifier simultanément les propriétés de transport (a) et les conditions aux limites (T_{lim}) avec une erreur négligeable.

7.5 Analyse du cas Monocouche : Face Avant

L'analyse de la face avant est plus délicate car la dynamique thermique est très rapide et le rapport signal/bruit est souvent moins favorable.

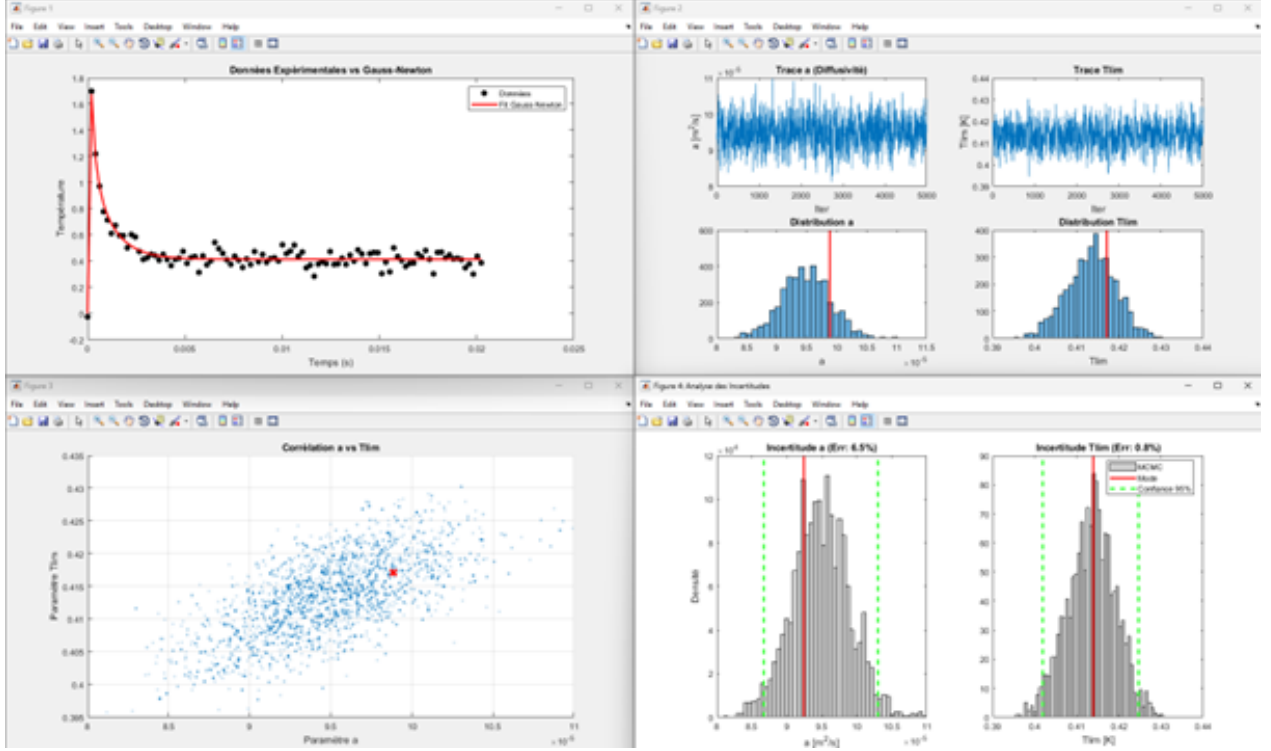


FIGURE 20 – Résultats MCMC complets pour la Face Avant (Fit, Traces, Corrélations et Incertitudes)

On récapitule les résultats dans ce tableau :

Bruit	0.001%	0.5%	1%	5%	10%
Erreur a	0%	0.36%	0.71%	6.47%	10.17%
Erreur T_{lim}	0%	0.12%	0.33%	0.77%	2.01%

TABLE 4 – Influence du niveau de bruit sur les erreurs relatives des paramètres estimés (cas 2)

Analyse des résultats et Incertitudes

La Figure 20 montre une dispersion plus importante que pour la face arrière, ce qui est cohérent avec la physique du problème.

1. Pour la diffusivité thermique a :

- Valeur vraie : $9.8849 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- Valeur estimée (Mode) : $9.2455 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
- **Erreur relative : 6.47 %**
- Intervalle de confiance (95%) : $[8.67 \times 10^{-5} ; 1.03 \times 10^{-4}] \text{ m}^2/\text{s}$

2. Pour la température limite T_{lim} :

- Valeur vraie : 0.4171 K

- Valeur estimée : 0.4350 K
- **Erreur relative : 4.29 %**
- Intervalle de confiance (95%) : [0.4050 ; 0.4580] K

Bien que l'erreur soit plus élevée qu'en face arrière (environ 6.5%), l'analyse MCMC permet de donner un **intervalle de confiance à 95%** :

$$IC_{95\%} = [8.67 \times 10^{-5} ; 1.03 \times 10^{-4}] \text{ m}^2/\text{s}$$

On constate que la **valeur vraie est bien incluse dans cet intervalle**, validant l'approche probabiliste même en présence de bruit important.

7.6 Conclusion sur l'approche MCMC

La méthode MCMC s'est révélée indispensable pour une métrologie de haute précision. Elle a permis de valider les estimations de Gauss-Newton tout en révélant la structure des corrélations et en garantissant que, même en présence de fort bruit, la valeur réelle se trouve dans l'intervalle de confiance prédit.

8 Contexte Industriel et Hypothèses de la Bicouche

8.1 Contexte Mathématique

Ce modèle est issu de la résolution de l'équation de la chaleur de Fourier en une dimension, mais appliquée à deux domaines distincts.

Pour le résoudre, nous utilisons le **formalisme des quadripôles thermiques**. Cette méthode consiste à transformer l'équation de la chaleur (via la transformée de Laplace) pour représenter chaque couche par une matrice de transfert. On résout ainsi le problème dans le domaine fréquentiel (Laplace) avant de revenir au domaine temporel pour obtenir la courbe de température observable.

8.2 Conditions aux Limites

Pour "coller" mathématiquement les deux couches (le film et le substrat), le modèle impose deux conditions strictes à l'interface $x = e$:

1. **Continuité de la température** : $T_{film} = T_{substrat}$. On suppose ici qu'il n'y a pas de résistance thermique de contact.
2. **Continuité du flux** : $\phi_{film} = \phi_{substrat}$. Toute la chaleur qui sort du film entre immédiatement dans le substrat.

8.3 Formulation Analytique

Les expressions exactes de la température sur les faces du bicouche sont données par les équations suivantes :

1. Face avant de la première couche (Surface excitée) :

$$T_{x_0}(t) = \frac{Q}{b_f \sqrt{\pi t}} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \gamma^n \exp \left(-n^2 \frac{\tau_{cd}}{t} \right) \right] \quad (18)$$

2. Face arrière de la première couche (Interface) :

$$T_{x_L}(t) = \frac{2Q}{(b_f + b_s) \sqrt{\pi t}} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \gamma^n \exp \left(\frac{-(2n+1)^2}{4} \frac{\tau_{cd}}{t} \right) \right] \quad (19)$$

Les paramètres clés apparaissant dans ces équations sont :

- Le coefficient de réflexion : $\gamma = \frac{b_f - b_s}{b_f + b_s}$
- Le temps de conduction : $\tau_{cd} = \frac{L^2}{a}$

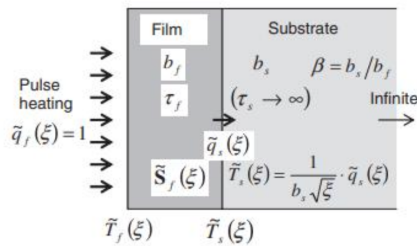


FIGURE 21 – Schéma du film sur substrat avec pulse heating.

8.4 Interprétation Physique

8.4.1 Le transfert de la Chaleur

Ce modèle représente le voyage du front de chaleur à travers deux milieux aux "personnalités" thermiques très différentes. Le comportement est entièrement piloté par le rapport des effusivités :

- **Cas du substrat dissipatif** ($b_s \gg b_f$) : Si le substrat a une effusivité très élevée, il agit comme un dissipateur thermique (un "radiateur") qui aspire toute la chaleur du film. La température du film montera très peu.
- **Cas du substrat isolant** ($b_s \ll b_f$) : Si le substrat est isolant, la chaleur reste "bloquée" dans le film, et celui-ci chauffe beaucoup plus car l'énergie ne peut pas s'évacuer.

8.4.2 Pourquoi l'estimation est-elle difficile ?

L'estimation des paramètres sur ce bicouche TiN/SiO₂ est plus complexe que sur un matériau simple pour trois raisons :

1. **L'excitation n'est plus un flash idéal** : Le film de TiN est extrêmement fin (temps de transit de l'ordre de la nanoseconde) par rapport au substrat SiO₂ (millisecondes). La durée de l'impulsion laser est donc du même ordre de grandeur que le temps de conduction. On ne peut plus ignorer la forme gaussienne du laser, modélisée par :

$$\varphi(t) = A \cdot e^{-\frac{t-t_0}{2\sigma^2}}$$

2. **Couplage des paramètres** : La température dépend à la fois du film et du substrat. Pour trouver la diffusivité du TiN, il est impératif de connaître précisément les propriétés du SiO₂.
3. **Sensibilité au bruit** : Si le substrat "absorbe" trop bien la chaleur, le signal de température devient très faible et le bruit expérimental (1% à 10%) peut totalement masquer l'information utile sur le film.

Pour remédier à ce problème, des recherches bibliographiques sur les standards industriels de la méthode Flash et sur les propriétés des matériaux ont permis d'avoir les valeurs théoriques de la diffusivité $a=9.5314e-06$ m²/s et $Q=4.9939$ J.

8.5 Analyse des Résultats (Gauss-Newton et MCMC)

8.5.1 Interprétation des Graphes

Sur les figures analysées ci-dessous :

- Les **points noirs** représentent les données expérimentales brutes.
- La **courbe rouge** est le résultat de l'optimisation par l'algorithme de Gauss-Newton.

On observe également des histogrammes qui montrent la distribution de probabilité des paramètres (a et T_{lim} ou Q). Il faut que ces distributions soient compactes (peu dispersées) pour être sûr que les valeurs identifiées soient proches de la réponse théorique.

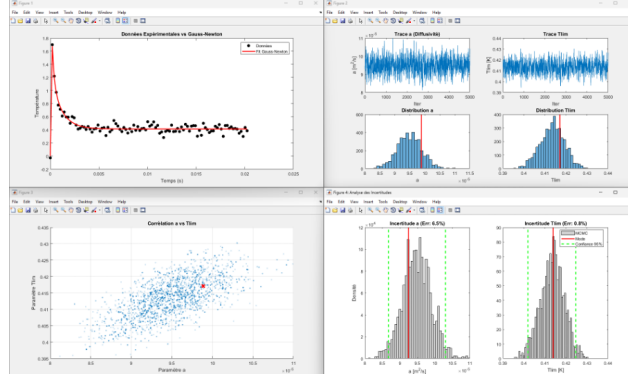


FIGURE 22 – Fit courbe rouge sur points noirs + Histogrammes bleus

Voici les résultats obtenus :

TABLE 5 – Comparaison des estimations selon les conditions d’effusivité (b_f vs b_s).

Cas	Condition	Diffusivité a		Paramètre Q	
		Valeur Est.	Err. relative (%)	Valeur Est.	Err. relative (%)
Face Avant					
Cas 1	$b_f = b_s$	9.3228e-6	2.19	4.9478	0.92
Cas 2	$b_s \ll b_f$	8.9906e-6	5.67	5.0393	0.91
Cas 3	$b_f \ll b_s$	9.5345e-6	0.03	4.9949	0.02
Face Arrière					
Cas 1	$b_s = b_f$	9.4674e-6	0.67	5.0395	0.91
Cas 2	$b_s \ll b_f$	1.0418e-5	9.30	4.1050	17.80
Cas 3	$b_f \ll b_s$	5.0000e-3	52358.08	9.2550	85.32

On récapitule les résultats bi-couche face arrière :

Bruit (%)	0.5	1	5	10
Erreur a (%)	0.7	2.25	4.19	6.35
Erreur Q (%)	0.9	2.27	8.47	9.07

TABLE 6 – Influence du niveau de bruit sur les erreurs relatives des paramètres a et Q

Et les résultats face avant dans celui-ci :

Bruit (%)	0.5	1	5	10
Erreur a (%)	0.04	0.19	0.38	2.19
Erreur Q (%)	0.01	0.01	0.02	0.92

TABLE 7 – Influence du niveau de bruit sur les erreurs relatives des paramètres a et Q (cas 3)

8.5.2 Analyse des Résultats

Le nuage de points généré par la méthode MCMC (Markov Chain Monte Carlo) permet de juger visuellement de la qualité de l’identification :

- Si le nuage est **rond**, les paramètres sont indépendants. C’est le cas idéal.
- Si le nuage est **allongé** (forme de cigare ou d’ellipse inclinée), cela signifie que les paramètres sont **corrélés**. Une erreur sur l’un entraîne une erreur sur l’autre (par exemple, surestimer

Q peut être compensé par une sous-estimation de a). C'est un phénomène très fréquent en thermique lorsque le problème est mal posé.

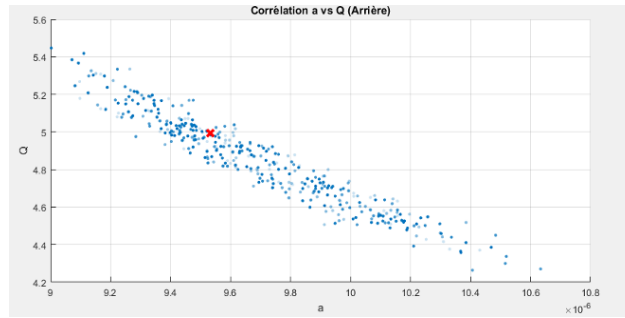


FIGURE 23 – Nuage de points "Correlation a vs Q" (forme allongée)

8.5.3 Synthèse : Face Avant vs Face Arrière

Les résultats montrent que le rapport B_s/B_f conditionne fortement l'identification des paramètres.

- **Face Arrière** ($B_s \gg B_f$) : Le problème devient mal posé. Les paramètres sont fortement biaisés et les incertitudes calculées deviennent artificiellement nulles, traduisant une perte d'identifiabilité et un ajustement numérique déconnecté de la réalité physique.
- **Face Avant** ($B_f \ll B_s$) : L'identification devient excellente. Pour les deux paramètres, les erreurs relatives chutent en dessous de 0,1% avec des incertitudes très faibles. Cette configuration est donc fortement informative et favorable à l'étude du film mince.

9 Conclusion

Pour résumer, ce projet a permis d'aboutir à l'objectif qui était d'identifier les paramètres comme la diffusivité thermique dans un matériau monocouche et bicouche en conditions réelles. La méthode Flash a été utilisée pour obtenir des résultats expérimentaux. Cette dernière consiste à envoyer un laser sur une durée très courte afin d'échauffer la face avant du matériau et ainsi observer la diffusion progressive.

Dans un premier temps, un modèle monocouche est envisagé. Le paramètre initial n'a pas été choisi au hasard mais grâce à la méthode des moments temporels qui s'est révélée la meilleure en termes de précision dans un premier temps (0,62 % d'écart avec la valeur de référence, sans bruit sur les données), en comparaison avec la méthode Parker et de celle des temps partiels. Cependant, après un lissage par *polyfit* et Monte-Carlo en vue d'améliorer les résultats, la méthode de Parker s'est avérée plus précise que les autres méthodes (4,44 % contre plus de 5 % pour les autres). Elle a donc été retenue pour la suite.

Pour travailler sur l'ensemble du spectre du thermogramme, un choix d'approfondir a été fait en utilisant la méthode de Gauss-Newton. Pour initialiser cette méthode, le paramètre β_0 issu de la méthode de Parker est exploité. Pour un niveau de bruit de 1,0 %, on obtient une erreur de 0,76 % sur la face arrière, ce qui est correct mais peut être amélioré.

Afin d'améliorer les résultats obtenus, une approche bayésienne combinée avec Gauss-Newton est utilisée et permet de trouver de meilleurs résultats (erreur relative de 0,02 %) en comparaison avec la valeur trouvée dans la littérature.

Enfin, le travail a été réitéré pour un modèle bicouche plus réaliste dans des conditions industrielles. Les résultats obtenus pour un bruit de 1 % sont de 0,19 % d'erreur relative pour la diffusivité thermique a et 0,01 % pour Q sur la face avant, et 2,25 % sur a et 2,27 % sur Q pour la face arrière.

Une piste d'approfondissement future serait de vérifier la robustesse de notre modèle. Pour cela, une possibilité est de travailler sur la troncature des données et le décalage du temps zéro pour la méthode de Gauss-Newton et MCMC.

10 Bibliographie

1. Bruno HAY, Jean-Rémy FILTZ, Jean-Christophe BATSALE, Techniques de l'ingénieur, Mesures - Analyses | Contrôle non destructif, « *Mesure de la diffusivité thermique par la méthode flash* ».
2. Libor VOZÁR, Wolfgang HOHENAUER, High Temperatures - High Pressures, « *Flash method of measuring the thermal diffusivity. A review* », 2003/2004.
3. Ruko, « *TiN le revêtement de nitrure de titane* », disponible sur : <https://ruko.de/fr/connaissances/know-how/tin-le-revetement-de-nitrite-de-titane/>
4. Libor VOZÁR, Wolfgang HOHENAUER, High Temperatures - High Pressures, « *Flash method of measuring the thermal diffusivity. A review* », 2003/2004.
5. Méthodes de Monte-Carlo (Cours et exercices) M1 IM, 2018-2019, Sylvain Rubenthaler