



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

*Liberté
Égalité
Fraternité*

Etudiant : Hugo LANCERY

Tuteur pédagogique : Guillaume RIOLAND

15/02/2024 – 15/08/2024

RAPPORT DE STAGE



CNES
DTN/QE/LE
Laboratoire et Expertise

IPSA
ELSS
Ecole d'ingénieur aérospatiale



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document

Date : 14/08/2024

Edition : 1, Révision : 0

Simulation et prédiction du dégazage de matériaux en environnement spatial

CNES Toulouse, département QE/LE, Laboratoire et Expertise,
Auteur : Hugo Lancery
Tuteur entreprise : Guillaume Rioland / Tuteur pédagogique : Josselin Desmars

15/07/2024



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document

Date : 14/08/2024

Edition : 1, Révision : 0



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Remerciements

Cher tuteur de stage Guillaume Rioland et cher encadrant Desmars Josselin,

Je tiens à exprimer ma sincère gratitude pour l'opportunité qui m'a été offerte de réaliser mon stage au sein de CNES au cours de ces derniers mois. Cette expérience a été pour moi une étape fondamentale dans mon parcours académique et professionnel, et je souhaite vous adresser mes plus chaleureux remerciements. Tout au long de ce stage, j'ai eu l'occasion d'explorer, d'apprendre et d'approfondir mes connaissances au sein d'un environnement stimulant et accueillant.

Je tiens également à exprimer ma gratitude envers l'ensemble des équipes de la DTN/QE/LE Laboratoire et Expertise notamment avec mon tuteur de stage, les doctorants et les stagiaires avec qui j'ai pu passer ces 6 mois. Votre accueil chaleureux, votre patience, et votre disponibilité ont grandement facilité mon intégration au sein de l'entreprise. J'ai pu observer comment la collaboration et le professionnalisme sont au cœur de la réussite du CNES et c'est une leçon que j'emporterai avec moi tout au long de ma carrière.

Ce stage a été bien plus qu'une simple expérience professionnelle. Il m'a permis de mettre en pratique les connaissances acquises au cours de mon parcours scolaire, de développer des compétences spécifiques à mon domaine d'études, et de me familiariser avec les défis du monde du travail. Les projets auxquels j'ai participé et les responsabilités qui m'ont été confiés resteront une expérience personnelle unique.

Enfin, je tiens à exprimer ma reconnaissance envers le CNES pour avoir facilité cette opportunité de stage.

Votre engagement envers l'éducation et l'employabilité des étudiants est inestimable.

Je suis impatient de mettre en pratique les enseignements que j'ai tirés de ce stage dans ma future carrière, et je suis convaincu que cette expérience m'aidera à atteindre mes objectifs professionnels.

Encore une fois, merci pour cette opportunité unique et pour votre précieux soutien tout au long de ce stage.

J'espère avoir l'occasion de collaborer à nouveau avec vous à l'avenir.



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document

Date : 14/08/2024

Edition : 1, Révision : 0



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Table des matières

Table des matières	7
Table des Figures.....	9
Abréviation	12
1. Histoire.....	13
2. Son rôle et sa stratégie.....	14
2.1. Ariane	14
2.2. Recherche et innovation.....	14
2.3. Observation	15
2.4. Télécommunication.....	15
2.5. Défense.....	16
2.6. Accompagnement	16
2.7. Implantations.....	17
2.7.1. Paris les Halles - Siège social.....	17
2.7.2. Paris Daumesnil - Direction des lanceurs	17
2.7.3. Toulouse - Véhicules et systèmes orbitaux	17
2.7.4. Kourou - Port spatial de l'Europe	17
3. Le Centre Spatial Toulousain (CST).....	18
3.1. Activités.....	18
3.2. La sous-direction DTN/QE/LE	18
3.3. La plateforme contamination.....	19
4. Introduction du sujet.....	21
4.1. Contexte	21
4.2. Définitions	21
4.3. Matériaux étudiés	22
5. Construction du logiciel « LPVB5E » sous python.....	23
5.1. Contexte	23
5.2. Logiciel « LPVB5E ».....	23
5.3. Logiciel « LPPY5E »	23
5.3.1. Support	23
5.3.2. Fonctionnement	23
5.3.3. Processus du logiciel.....	24
5.3.4. Décomposition du logiciel	25
5.4. Aperçu de l'interface	26
6. Etude du dégazage avec la méthode de l'Eau	27



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

6.1.	Application du fitting.....	27
6.2.	Conclusion	28
7.	<i>Etude du dégazage avec la méthode par décomposition</i>	<i>29</i>
7.1.	Prédiction de la courbe.....	29
7.2.	Application du fitting.....	30
8.	<i>Etude du dégazage par la recherche d'une nouvelle méthode</i>	<i>31</i>
8.1.	Introduction	31
8.2.	Déroulement de la recherche.....	31
8.2.1.	Etude du dégazage dominé par la désorption.....	32
8.2.2.	Etude du dégazage avec $\alpha \log(t)$	33
8.2.3.	Simplification du système et méthode finale	35
8.3.	Création d'un logiciel.....	36
8.3.1.	Support	36
8.3.2.	Processus du logiciel.....	36
8.3.3.	Aperçu de l'interface	36
9.	<i>Prédiction du dégazage basé sur une cinétique à palier</i>	<i>37</i>
9.1.	Correction des paliers de la cinétique.....	37
9.2.	Conclusion	39
10.	<i>Etude de l'ODE de la diffusion par la méthode des différences finies</i>	<i>40</i>
10.1.	Approximation finie.....	40
11.	<i>Résolution d'une ODE par réseau de neurones.....</i>	<i>42</i>
11.1.	Physical Information Neural Network (PINN).....	42
11.1.1.	Définition du système.....	42
11.1.2.	Minimisation de l'erreur.....	42
11.1.3.	Résultats	43
12.	<i>Conclusion</i>	<i>44</i>
	<i>Bibliographie</i>	<i>45</i>



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Table des Figures

Figure 1 Entrée Nord CNES Toulouse	13
Figure 2 Famille des lanceurs Ariane	14
Figure 3 Strato-Science 2023 – CNES/ASC	15
Figure 6 Instrument IASI-C à bord de Metop-C	15
Figure 6 CFOSAT et SWOT	15
Figure 6 Stratéole-2	15
Figure 7 ANGELS nanosatellite	16
Figure 8 Système de positionnement Galileo	16
Figure 9 Prototypage de la Charge Utile (CU) YODA	16
Figure 10 Schéma du fonctionnement de la contamination	21
Figure 11 Illustration mathématique du fonctionnement du dégazage	22
Figure 12 IHM pour l'approximation	26
Figure 13 IHM pour la prédiction d'un scénario	26
Figure 14 Recherche du coefficient de diffusion initial avec le coefficient directeur de la première partie linéaire de la courbe sur la racine du temps	27
Figure 15 Fitting de la méthode de l'eau étendue pour toutes températures sur le matériau EC9323	28
Figure 16 Comparaison de la cinétique de dégazage de la colle EC9323 à 60°C avec les fonctions caractéristiques à gauche, la figure à droite représente le résultat du fitting avec la méthode du CERN	30
Figure 17 Caractérisation des comportements de la courbe de dégazage	31
Figure 18 Comparaison des différents modèles d'approximation sur le matériau EC9323-2 à 60°C	32
Figure 19 Analyse de l'évolution d'alpha en fonction du coefficient directeur de la dernière partie linéaire logarithmique de la courbe	33
Figure 20 Comparaison des méthodes par matériau (EC9323, M213B, RT745) pour une même température 100°C	34
Figure 21 Comparaison des méthodes par températures pour le matériau EC9323	34
Figure 22 Démonstration de la nouvelle méthode sur l'ensemble des données disponible long-terme EC9323-2 50/60/85/100°C et EC2216 50°C avec la prise en compte pour la méthode uniquement des premières 24h de dégazage des données	35
Figure 23 Interface du logiciel Pre10	36
Figure 24 Cinétique de dégazage à paliers de 24h et 25°C par 25°C	37
Figure 25 Comparaison entre les cinétiques de dégazage isotherme et à paliers	37
Figure 26 Comparaison entre les cinétiques de dégazage isotherme tronquées et à paliers	37

Figure 27 Superposition des courbes isothermes et des paliers de la cinétique corrigés.....	38
Figure 28 Détail de la correction appliquée au palier à 50°C de l'EC9323-2	38
Figure 29 Comparaison du résultat final avec la méthode du CERN et de l'eau pour l'EC9232-2 à 50°C	39
Figure 30 Résultat de la simulation numérique du phénomène de diffusion par la méthode des différences finies	41
Figure 31 Résultat de la simulation du phénomène de la désorption de l'eau par un PINN	43

Résumé

Ce rapport décrit mes travaux effectués durant mes 6 mois de stage de février à août 2024 au sein du CNES à Toulouse. La problématique est la simulation et prédiction du dégazage d'un matériau en environnement spatial. Ce stage se décompose en 4 grandes parties :

- ✚ Analyse et reconstruction d'un logiciel de simulation et de prédiction LPVB5E
- ✚ Etude du dégazage avec la méthode de diffusion de l'eau
- ✚ Etude du dégazage avec la méthode proposée par le CERN
- ✚ Etude de la désorption couplée à la diffusion au long terme

Abstract

This report describes the work I carried out during my 6-month internship from February to August 2024 at CNES in Toulouse. The problem is the simulation and prediction of the outgassing phenomena of a material in a space environment. This internship is divided into 4 main parts :

- ✚ Analysis and reconstruction of a simulation and prediction software LPVB5E
- ✚ Study of outgassing phenomena using the water diffusion method
- ✚ Study of outgassing phenomena using the method proposed by CERN
- ✚ Study of desorption phenomena coupled to long-term diffusion



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Abréviation

CNES : Centre National d'Etudes Spatiales
CST : Centre Spatial de Toulouse
ECSS : European Cooperation for Space Standardization
LE : Laboratoire et Expertise
PINN : Physical Informed Neural network
RML : Recovered Mass Loss
TML : Total Mass Loss
WVR : Water Vapour Regain

1. Histoire

Le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) a été créé en 1961 par le gouvernement du Général De Gaulle. Il s'agit d'un Établissement Public à Caractère Industriel et Commercial (EPIC) qui a pour objectif de proposer au gouvernement une politique spatiale de la France au sein de l'Europe et de la mettre en œuvre. Le CNES est placé sous la tutelle de différentes institutions et notamment le ministère de l'Enseignement supérieur, le ministère de la Recherche et de l'innovation, ou encore le ministère des Armées.

Aujourd'hui, le CNES travaille en étroite collaboration avec les grandes industries spatiales françaises mais aussi avec de grands groupes et agences internationales. Sous l'expertise du CNES, en coopération avec d'autres entreprises, de nombreux projets ont pu émerger.

On peut notamment citer plusieurs fusées, allant du lanceur Europa en 1964, au lanceur Ariane 6, dont l'aménagement de la base de lancement est confié au CNES. Mais également une flotte de satellites scientifiques et d'observation de la terre comme les Sentinel-2, 3 et 6, ainsi que différents instruments et notamment Supercam, la caméra d'observation des roches martiennes, embarquée sur le rover Persévérance, présent sur Mars depuis février 2021.



Figure 1 Entrée Nord CNES Toulouse



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

2. Son rôle et sa stratégie

Avec près de 2400 collaborateurs, un budget de 2.335 milliards d'euros et 4 centres, le CNES est un acteur majeur de l'industrie spatiale mondiale. Il propose aux pouvoirs publics la politique spatiale de la France et la met en œuvre dans 5 grands domaines stratégiques :






-  Ariane
-  Sciences
-  Observation
-  Télécommunications
-  Défense.



Figure 2 Famille des lanceurs Ariane

2.1. Ariane

Garantir l'accès à l'espace est essentiel pour maintenir une politique spatiale cohérente et pouvoir être un acteur majeur international. Le CNES, et donc la France, ont su se distinguer au rang de troisième puissance mondiale des pays ayant un accès indépendant à l'espace, depuis 1965. Cette distinction a vu le jour grâce au développement d'une famille de lanceurs Ariane, au service de l'Europe, et d'un site de lancement basé en Guyane, le Centre Spatial Guyanais (CSG).

2.2. Recherche et innovation

L'exploration spatiale a des dimensions à la fois scientifiques et stratégiques. Le CNES apporte à ses partenaires un savoir-faire technologique, acquis par plus d'un demi-siècle d'expérience en exploration spatiale et en systèmes spatiaux. Il étudie, développe et met en œuvre également des systèmes aérostatiques.



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document

Date : 14/08/2024

Edition : 1, Révision : 0

Le ballon, capable d'évoluer durablement dans l'atmosphère, tient une place particulière parmi les outils de la recherche scientifique dans divers domaines pour lesquels il permet de préparer ou de compléter les expériences sur satellites et celles effectuées à partir du sol ou des avions. De par ses centres de recherche, le CNES repousse donc sans cesse les limites de la connaissance humaine dans l'atmosphère et l'Univers.



Figure 3 Strato-Science 2023 – CNES/ASC

2.3. Observation

La crise climatique actuelle nous oblige à surveiller notre système terrestre dans sa globalité, depuis l'espace. Le CNES contribue, une fois de plus, à la compréhension de notre environnement avec une large flotte de satellites d'observation de la Terre. Parmi ses domaines d'expertise, on peut notamment citer la météorologie, l'océanographie, ou encore l'altimétrie. L'observation ne s'arrêtant pas à notre simple planète, le CNES développe également des instruments permettant par exemple de regarder d'autres étoiles, d'autres planètes ou encore de scruter l'univers lointain.



Figure 6 Instrument IASI-C à bord de Metop-C



Figure 6 CFOSAT et SWOT



Figure 6 Stratéo-2

2.4. Télécommunication

Les satellites jouent un rôle irremplaçable pour les télécommunications à haut débit, la localisation, la collecte de données environnementales, la recherche et le sauvetage. Avec les acteurs de la filière, le CNES développe sans cesse de nouvelles innovations qui permettent de véritables ruptures technologiques ou commerciales dans le domaine des télécommunications et de la diffusion TV. Son rôle sera d'autant plus accru ces prochaines années, avec le projet de constellation de satellites de télécommunication européen.



Figure 8 Système de positionnement Galileo



Figure 7 ANGELS nanosatellite

2.5. Défense

L'observation optique à très haute résolution, l'écoute, les télécommunications hautement sécurisées, la surveillance de l'espace contribuent à la paix et à la sécurité des citoyens. Le CNES joue un rôle majeur dans la mise en œuvre de la stratégie spatiale de Défense qui contribue à la sécurité et à l'indépendance de la France. En plus d'anciens satellites comme le système Hélios, de nouveaux programmes de dernière génération, développés pour le ministère des Armées, renforcent la position de la France parmi les leaders mondiaux dans ce domaine.

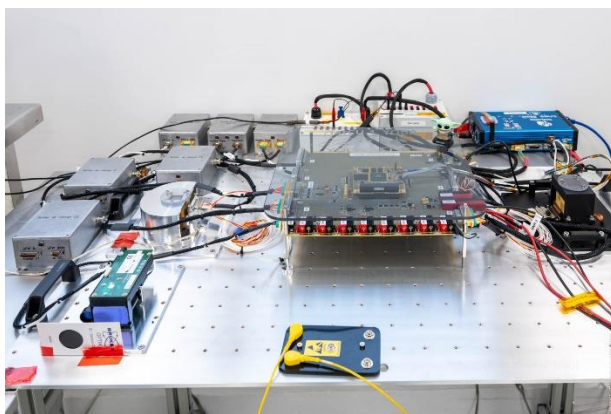


Figure 9 Prototypage de la Charge Utile (CU) YODA

2.6. Accompagnement

La politique actuelle de la France, plonge le secteur économique dans un nouvel écosystème appelé "French Tech". Un écosystème unique qui réunit des startups, mais aussi des investisseurs, des décideurs et des community builders. Afin de s'intégrer dans cette nouvelle politique "New Space", le CNES a dernièrement fondé "Connect By Cnes", une entreprise visant à accompagner les startups ainsi que les idées qui participent au développement de l'industrie spatiale française.



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

2.7. Implantations

2.7.1. Paris les Halles - Siège social

Les opérations administratives du CNES sont dirigées depuis le siège du CNES à Paris. Les administrateurs du siège, en collaboration avec les ministères de tutelle, établissent et promeuvent la politique du CNES. Ils définissent également les orientations stratégiques des centres techniques de l'agence et ses relations avec les partenaires extérieurs.

2.7.2. Paris Daumesnil - Direction des lanceurs

La Direction des lanceurs (DLA) dirige tous les développements du programme Ariane, sous contrat avec l'Agence Spatiale Européenne (ESA). Elle assure une supervision constante du lanceur, de la production à la commercialisation et au lancement, par l'intermédiaire d'Arianespace. La DLA mène également des recherches sur de nouveaux concepts de lanceurs et de systèmes de propulsion avancés.

2.7.3. Toulouse - Véhicules et systèmes orbitaux

Le Centre Spatial Toulousain (CST) est un site clé pour la recherche spatiale ; il développe des systèmes spatiaux complets avec ses partenaires industriels et scientifiques, jusqu'à leur mise en service opérationnel. Le CST participe à des projets scientifiques et d'instrumentation, et dirige des programmes de recherche et d'application. Il mène également des opérations de positionnement par satellite. Il est le plus grand centre des quatre avec presque six fois plus d'employés.

2.7.4. Kourou - Port spatial de l'Europe

Le Centre spatial guyanais (CSG) est dédié au programme européen de lanceurs. Il coordonne toutes les ressources nécessaires aux infrastructures de lancement : préparation des lanceurs et des charges utiles, contrôle des opérations de lancement, etc. Le site a été choisi en 1967 pour sa proximité à l'océan Atlantique et surtout pour sa situation à 5° au nord de l'équateur, idéale pour le lancement de satellites géostationnaires.



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

3. Le Centre Spatial Toulousain (CST)

L'ouverture du CST en 1968 est le résultat de la décentralisation des industries françaises de haute technologie de la région parisienne vers la province. Il est implanté au cœur du campus aérospatial de Toulouse, proche des acteurs et coopérateurs du spatial. S'étendant sur plus de 56 hectares, il comprend de nombreux services permettant de développer, de contrôler et d'exploiter des systèmes spatiaux. Ses 1800 employés imaginent le spatial de demain à grand renfort d'innovation et de créativité.

3.1. Activités

La direction des systèmes orbitaux (DSO) a pour mission, dans son domaine de compétences qui couvre les systèmes orbitaux et les systèmes ballons, d'effectuer les actions suivantes :

- ✚ Mener les projets de systèmes orbitaux et systèmes ballons
- ✚ Participer à l'élaboration et l'application du programme de recherche et technologie (R&T)
- ✚ Participer à l'élaboration de la programmation du CNES
- ✚ Mener des actions d'expertise
- ✚ Participer à l'élaboration et l'exécution des accords de coopération,
- ✚ Apporter son soutien et son savoir-faire propre aux disciplines spatiales, aux laboratoires scientifiques.

3.2. La sous-direction DTN/QE/LE

L'Assurance Qualité a pour mission d'identifier, d'apprécier, de limiter et de gérer les risques de défaillance des équipements spatiaux avant et pendant leur cycle de vie, afin d'assurer la qualité des projets. Le Laboratoire d'Expertise (LE) est dédié aux technologies spatiales (composants de satellites, sous-systèmes, systèmes embarqués, ...) et comporte quatre grandes plateformes :

- ✚ Analyse électronique : étude de composants EEE (électrique, électronique et électromécanique) dans les domaines de la caractérisation électrique et de la localisation de défauts.
- ✚ Analyse technologique : joue un rôle majeur dans le développement de micro et nanotechnologies, spécialement en termes de caractérisation et de fiabilité.
- ✚ Caractérisation matériaux : caractérisation mécanique des matériaux (composites, polymères, métaux, céramiques) utilisés dans le cadre du spatial.



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

3.3. La plateforme contamination

Durant mes 6 mois de stage, j'ai pu évoluer dans ce service qui s'intéresse aux processus de contamination dans le domaine du spatial. Il a pour objectif d'étudier les phénomènes de dégazage par la simulation et la prédiction. Le pôle contamination mène de nombreuses activités de R&T avec des partenaires comme l'ESA ou la JAXA (agence spatiale japonaise). Ancré dans le domaine de la chimie et des matériaux, le travail de cette plateforme est axé sur deux activités :

R&T :

- ✚ Mise en œuvre et exploitation d'expériences de cinétiques sous vide thermique (dégazage, dépôt et réémission des contaminants)
- ✚ Étude des effets optiques de la contamination sous vide à température cryogénique
- ✚ Mise au point de nouvelles méthodes expérimentales afin de trouver des lois pour simuler la réalité physique des phénomènes de dégazage
- ✚ Développement de logiciels d'acquisition et de traitement de données
- ✚ Mise en œuvre et exploitation d'essais par maquettage afin de valider des logiciels de modélisation de la contamination

Expertise :

- ✚ Caractérisation et analyse moléculaire des dépôts
- ✚ Conseils sur le choix des matériaux dans le spatial
- ✚ Conseils sur les moyens de décontamination et de stockage des systèmes spatiaux



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

*Liberté
Égalité
Fraternité*



**Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR**

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Nomenclature

h	Epaisseur	m
D	Coefficient de diffusion	$m^2.s^{-1}$
D_0	Coefficient de diffusion initiale	$m^2.s^{-1}$
μ	Masse totale perdue	%
τ	Constante de temps	s
q	Taux de dégazage	$mol.m^{-2}.s^{-2}$
μ_0	Masse initiale totale perdue	%
μ_m	Masse totale à l'équilibre perdue	%
α	Coefficient directeur logarithmique de μ à long terme	/
n	Nombre d'espèces chimiques	/
A	Constante d'Arrhénius	s
R	Constante universelle des gaz parfaits	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
T	Température	$^{\circ}C$
a	Multiplicité d'une espèce chimique	/
b	Coefficient	/
C	Concentration	$mol.m^{-3}$
E_A	Energie d'activation molaire	KJ/mol
t	Temps	s

4. Introduction du sujet

4.1. Contexte

Dans un contexte toujours plus compétitif, le développement de l'activité spatiale et la précision grandissante des différentes missions, système et outils, introduisent l'enjeu de la contamination. En effet, un niveau de propreté est requis voir indispensable selon la sensibilité des équipements spatiaux utilisé impliquant la bonne compréhension des différents phénomènes physiques de la contamination.

Pour exemple Gaia à vue ses systèmes optiques perturbés et Hubble d'une perte de transmission due à la contamination.

4.2. Définitions

Le contaminant est défini par toute matière étrangère ayant un temps de résidence suffisamment long sur une surface ou dans un environnement fonctionnel pour en dégrader les performances ou la durée de vie.

La contamination se décompose en deux groupes :

- ✚ La contamination particulaire caractérisant le dépôt visible de particules, fibres, copeaux ($mm - \mu m$) essentiellement présent lors des opérations au sol.
- ✚ La contamination moléculaire résultant de l'accumulation de monocouches de molécules ($10 - 100nm$) essentiellement en vol mais aussi au sol

Le phénomène de contamination se décompose en 4 parties, comme illustré sur la Figure 10. La diffusion caractérisée par la seconde loi de Fick, la désorption caractérisée par la loi d'Arrhenius, le transport et l'absorption. Ce stage comportera l'étude de la diffusion et de la désorption exclusivement.

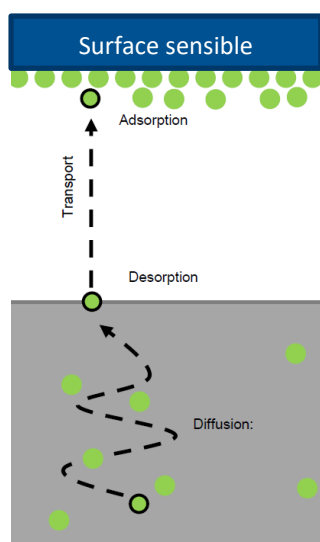


Figure 10 Schéma du fonctionnement de la contamination



La diffusion couplée à la désorption représente le phénomène du dégazage qui est le sujet d'étude de ce stage. Afin de pouvoir comprendre, approximer et prédire le comportement de ses phénomènes, ce stage se penche sur ces questions et essaie d'y répondre. Cela permettra d'anticiper le dégazage d'un matériau et permettre une meilleure planification de la mission spatiale. Allonger la durée de vie et éviter toutes perturbations sont les principaux enjeux de ce sujet passionnant. Aujourd'hui aucun modèle de simulation ne prend en compte le phénomène de diffusion résultant par une divergence à très long terme de la prédiction du dégazage. L'objectif est donc d'étudier les méthodes déjà existantes et d'en conclure par une nouvelle méthode permettant de prendre en compte tous les aspects du dégazage en restant dans une simplicité de simulation numérique.

Pour une meilleure compréhension du sujet, la Figure 11 représente l'application mathématique du dégazage.

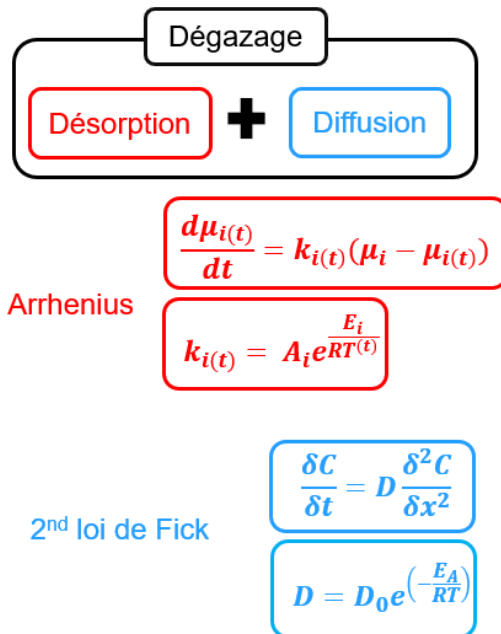


Figure 11 Illustration mathématique du fonctionnement du dégazage

4.3. Matériaux étudiés

Les matériaux utilisés au cours de ce stage sont listés dans le Tableau 1, ces matériaux sont fréquemment utilisés dans l'industrie spatiale :

Type	Matrice	Epaisseur
EC9323	Epoxy	0.0012
EC2216	Epoxy	0.0012
M213B	Vernis	0.0010
RT745	Epoxy	0.0020

Tableau 1 Matériau utilisé durant le stage



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

5. Construction du logiciel « LPVB5E » sous python

5.1. Contexte

L'objectif de cette partie est de proposer une nouvelle version sous python du logiciel déjà existant « LPVB5E » utilisé par le CNES, écrit avec Visual Basic. Cette partie du stage vise à donner une meilleure pérennité des algorithmes et codes utilisés par le logiciel avec Python et d'en permettre une meilleure compréhension tout en me permettant d'acquérir des notions clés pour la compréhension de la physique sous-jacente du dégazage. Cette partie du stage s'appuie sur l'article des normes (ECSS 2011) décrivant la méthode d'approximation des paliers d'une cinétique de dégazage du CNES et de l'ESA.

5.2. Logiciel « LPVB5E »

Le logiciel « LPVB5E » permet l'approximation du dégazage de chaque palier d'une cinétique de dégazage et la prédiction d'un scénario de dégazage choisi par l'utilisateur. Pour cela le logiciel effectue par la convergence de l'algorithme des moindres carrés un fitting de la courbe du palier. Ce fitting permet de récupérer les différents coefficients correspondant à chaque palier considérant une espèce chimique dégazée par palier avec une volatilité décroissante.

$$\mu_{CNES}^{(t)} = \sum_{i=1}^n \int_{t_0}^t (\mu_i - \mu_i^{(t)}) (1 - e^{-dt k_i^{(t)}})$$

Équation 1

Une fois tous les coefficients optimaux trouvés par le fitting, il est possible de prédire par extrapolation le comportement du dégazage du matériau en question pour une température et une plage de temps données. Cela permet d'éviter de réaliser à nouveau une expérience et d'avoir une première impression du comportement du dégazage.

5.3. Logiciel « LPPY5E »

5.3.1. Support

L'interface repose sur la bibliothèque python [PyQt5](#) sous License [GPL v3](#) permettant de créer une interface homme machine. L'entièreté du projet et les anciennes versions du projet sont disponibles sur le Dépôt privé (nécessite une demande d'accès) [GitHub](#).

5.3.2. Fonctionnement

Le logiciel « LPPY5E » codé en Python et HTML permet l'approximation du dégazage de chaque palier d'une cinétique de dégazage et d'en récupérer ses paramètres caractéristiques. Le logiciel permet l'utilisation de la méthode du CNES donnée par l'Équation 1 déjà utilisé avec « LPVB5E » et aussi la méthode de l'ESA donnée par l'Équation 2 qui, de la même manière, permet d'approximer le dégazage en considérant n espèces dégazées.

$$\mu_{ESA}^{(t)} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=1}^n \mu_{ij} (1 - e^{-\frac{t}{\tau_{ij}}})$$

Équation 2

Tout comme sur « LPVB5E », le logiciel « LPPY5E » permet à l'utilisateur de créer un scénario et de prédire les courbes de dégazages d'un scénario. Il utilise de la même manière que pour « LPVB5E » les coefficients optimaux du fitting, avec en plus ici le choix pour une nouvelle méthode de l'ESA.

La partie approximation commence par l'ouverture du fichier Excel (xlsx, xls) contenant les données expérimentales depuis l'onglet « Fichier » puis « Ouvrir » dans le menu. Si le format correspond à celui demandé par le logiciel (message box), le graphique des données sélectionnées s'affichera alors automatiquement dans l'onglet « Prédiction 2D ». Cependant, les données doivent être complètes et ne pas contenir de valeurs nulles au risque de provoquer une mauvaise interprétation des données. L'utilisateur peut alors choisir la méthode pour approximer les paramètres physiques de ses données, dans l'onglet « Paramètres ». Puis lancer le calcul en cliquant sur le bouton « Calculer ». Une fois le fitting terminé, les paramètres de chaque palier sont mis à jour avec les valeurs optimales trouvées par l'algorithme.

Par la suite, la partie prédiction commence par le choix de l'utilisateur sur le nombre de paliers que la prédiction comportera, puis sur la méthode qui sera utilisée dans l'onglet « Simulation Dégazage ». Après avoir configuré le tableau en dessous de l'onglet, l'utilisateur peut alors lancer le calcul de la prédiction en cliquant sur le bouton « Calculer ». Le résultat apparaîtra dans la fenêtre de l'onglet « Simulation 2D ».

Le logiciel permet également à l'utilisateur d'enregistrer les résultats obtenus pour l'approximation ainsi que pour la prédiction du scénario désiré.

5.3.3. Processus du logiciel

Le fichier sélectionné par l'utilisateur est converti par la bibliothèque Pandas dans un DataFrame contenant les différentes colonnes du fichier Excel. Ce DataFrame est ensuite trié et réarrangé pour permettre une utilisation des données plus fluide et intelligible. Les différentes méthodes se répartissent en différentes Class Python distinctes appelées suivant le choix de l'utilisateur sur l'interface.

Une fois la méthode choisie s'en suit son initialisation. L'algorithme du CNES est très sensible à sa paramétrisation initiale, ce qui peut amener l'algorithme du gradient à converger vers un minimum local et ne pas trouver la solution optimale. Pour s'assurer du bon fonctionnement les paramètres initiaux suivants, Tableau 2 et, Tableau 3 ont été testé sur une multitude de données :

Paramètres initiaux CNES	$i \in \llbracket 1, n \rrbracket$
E_i	$1500i + 500$
A_i	$i10^i + 0.001$
μ_i	0.8

Tableau 2 Paramètres initiaux utilisés pour la méthode de caractérisation du dégazage par le CNES

La méthode de l'ESA, elle ne requiert pas une telle précision pour l'initialisation. Ce phénomène peut être expliqué par la très bonne convergence de l'algorithme du au grand nombre de paramètres variables utilisés.

Paramètres initiaux ESA	$i \in \llbracket 1, n \rrbracket$
τ_i^j	$[0.5, \dots, 0.5, 0.5]$
μ_i^j	$[0.002, \dots, 0.002, 0.002]$

Tableau 3 Paramètres initiaux utilisés pour la méthode de caractérisation du dégazage par l'ESA-ESTEC

Le DataFrame se voit alors mis à jour à nouveau après le fitting avec l'ajout des nouveaux paramètres initiaux, paramètres optimaux et des vecteurs arrays des différents résultats obtenus.



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

5.3.4. Décomposition du logiciel

La structure sous-jacente du logiciel se décompose de la manière suivante.

LPPY5E

```
|
|- - Logo # Dossier racine des images
|   |
|   |- - logo.ico
|   |
|   |- - logo.png
|   |
|   \- - splash.jpg # Image du logo au démarrage du logiciel
|- - Ui # Dossier racine de l'interface graphique
|   |
|   \- - window.ui # Code HTML de l'interface
|- - app.py # Code Python de l'interface
|- - data_mix.py # Code Python de la mise en forme des données
|- - main.py # Code Python pour l'exécution du programme
|- - resolution_CNES.py # Code Python contenant la Class de résolution CNES
|- - resolution_CNES-M.py # Code Python contenant la Class de résolution matricielle CNES
|- - resolution_ESA.py # Code Python contenant la Class de résolution ESA
|- - resolution_ONERA.py # Code Python contenant la Class de résolution ONERA
```



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

5.4. Aperçu de l'interface

L'interface du logiciel a été réalisé avec le module Python PyQt 5.1, la Figure 12 et Figure 13 en donnent un aperçu.

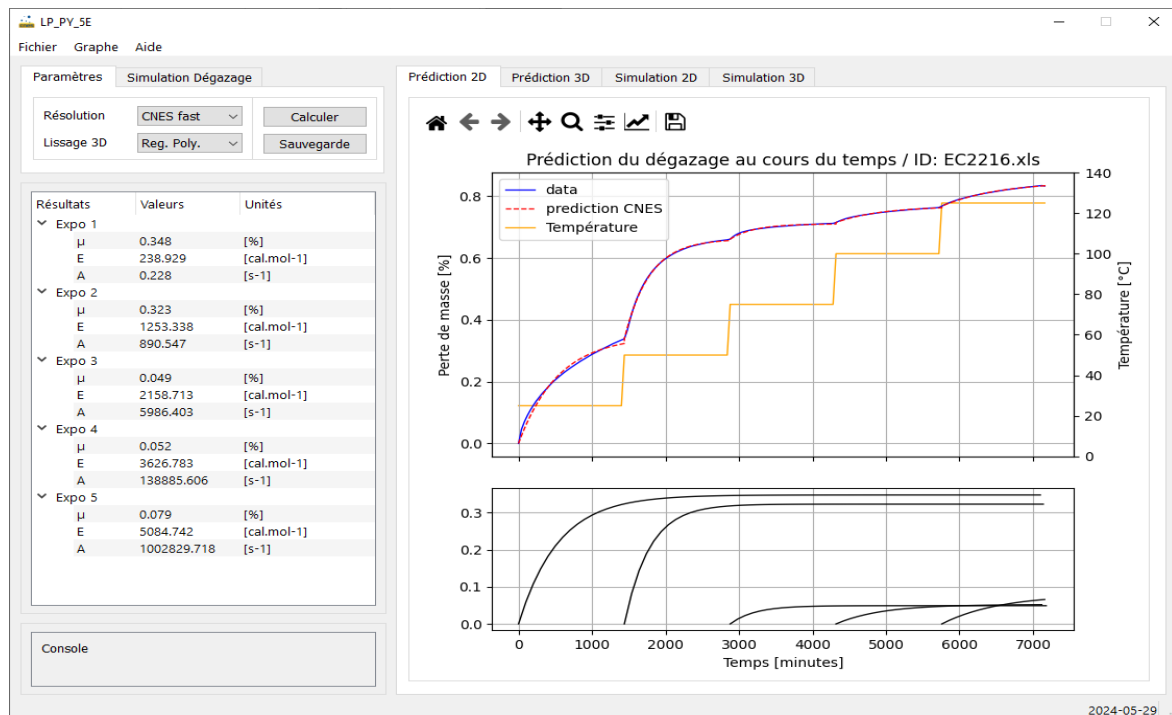


Figure 12 IHM pour l'approximation

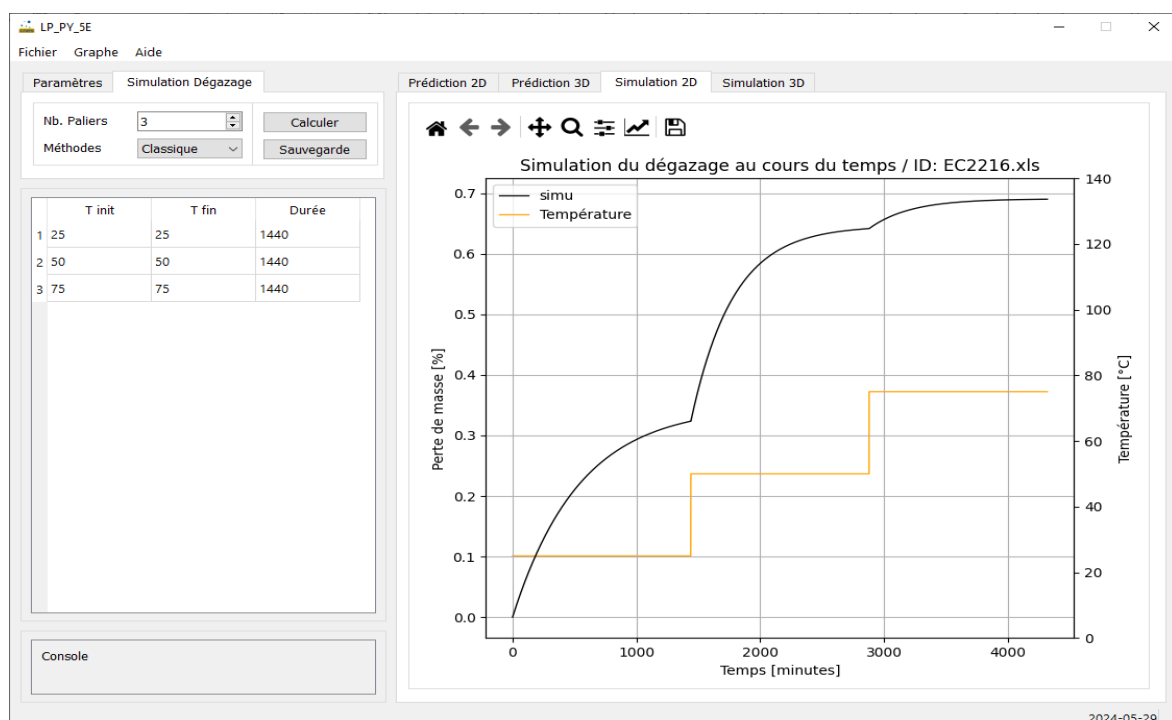


Figure 13 IHM pour la prédiction d'un scénario



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

6. Etude du dégazage avec la méthode de l'Eau

Le phénomène de dégazage est décrit par l'Équation 3 de la seconde loi de Fick :

$$\frac{\delta C}{\delta t} = D \frac{\delta^2 C}{\delta x^2}$$

Équation 3

Avec des conditions aux limites décrivant l'exposition au vide, d'après (Shen 1976), la solution de l'Équation 3 peut être décrites à la surface sous l'hypothèse d'un milieu semi-infini par :

$$\mu^{(t)} = \mu_0 \left(1 - e^{-7.3 \left(\frac{Dt}{h^2} \right)^{0.75}} \right)$$

Équation 4

On retrouve alors l'expression d'une exponentielle qui va permettre de caractériser le dégazage d'une seule espèce chimique d'un matériau. Dans le cadre du stage, l'objectif étant d'étudier le phénomène de dégazage dans sa globalité, j'ai essayé d'appliquer cette méthode à tout type de matériau, température et durée d'expérience. A première vue cette méthode tend à l'infini vers une constante, ce qui diverge du réel comportement du dégazage qui n'est pas constant et continue d'augmenter, entretenu par la diffusion. Cette équation a donc pour cette raison été utilisée pour l'étude de la désorption qui est le phénomène prédominant à court terme.

6.1. Application du fitting

L'utilisation du fitting implique la méthode des moindres carrées et nécessite donc une initialisation rigoureuse pour s'assurer de la convergence de l'algorithme. Pour cela une méthode est décrite dans l'article (Shen 1976) permettant de trouver l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion de l'équation.

Le coefficient de diffusion peut être calculé grâce au coefficient directeur de la première partie linéaire de la courbe de dégazage sur sa racine du temps :

$$D = \pi \left(\frac{h}{4\mu_m} \right)^2 \left(\frac{\Delta M_t}{\Delta \sqrt{t}} \right)^2$$

Équation 5

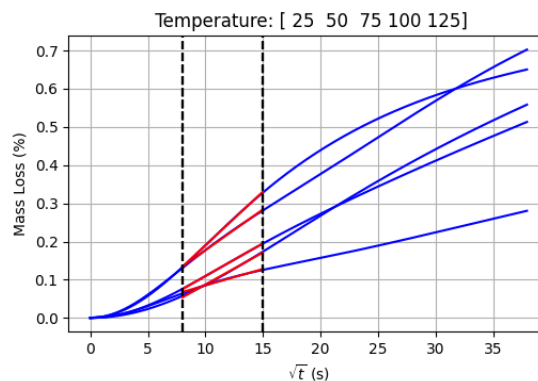


Figure 14 Recherche du coefficient de diffusion initial avec le coefficient directeur de la première partie linéaire de la courbe sur la racine du temps



Une fois les paramètres initiaux trouvés, le fitting de l'Équation 4 avec la courbe de la cinétique de dégazage peut être effectué. Cela nous donne par exemple en résultat pour la colle EC9323 la Figure 15 et Tableau 4 :

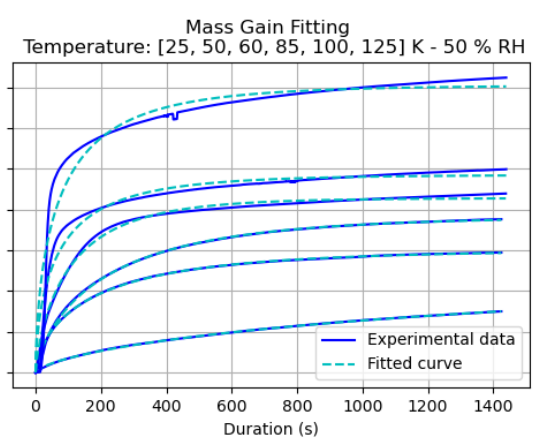


Figure 15 Fitting de la méthode de l'eau étendue pour toutes températures sur le matériau EC9323

Température	μ_0	D_x
25°C	0.75	$3.925e^{-10}$
50°C	1.47	$1.215e^{-9}$
60°C	1.88	$1.360e^{-9}$
85°C	2.19	$2.127e^{-9}$
100°C	2.49	$1.405e^{-8}$
125°C	3.61	$5.240e^{-8}$

Tableau 4 Résultats du fitting de la figure 15

6.2. Conclusion

L'application de cette méthode sur une généralité de cinétique permet d'en comprendre ses limites. En effet, cette méthode caractérise parfaitement le dégazage en considérant l'eau pour seule espèce chimique. Cependant l'accumulation de plusieurs espèces chimiques lors du dégazage ainsi que l'ajout du phénomène constant de la diffusion rendent la convergence du fitting compliquée. On obtient tout de même des paramètres cohérents d'un bon ordre de grandeur correspondant à la température et l'épaisseur du matériau. Une manière d'obtenir un meilleur fitting pourrait être l'utilisation d'un système composé de fonctions partiel décrivant chaque partie unique de la courbe, permettant une meilleure flexibilité du fitting pour des températures plus élevées ou pour une durée totale de la cinétique plus longue. Cela nous emmène à la partie suivante.



**RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE**

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

7. Etude du dégazage avec la méthode par décomposition

7.1. Prédiction de la courbe

Comme précédemment évoqué le phénomène de dégazage est décrit par l'Équation 6 de la seconde loi de Fick :

$$\frac{\delta C}{\delta t} = D \frac{\delta^2 C}{\delta x^2}$$

Équation 6

Avec des conditions aux limites décrivant l'exposition au vide, d'après (CERN 2021).

La solution de l'Équation 6 peut être décrite à la surface sous l'hypothèse d'un milieu semi-infini par :

$$q = \frac{4D}{h} C_0 \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\frac{(2i+1)^2 \pi^2 D t}{h^2}}$$

Équation 7

D'après (CERN 2021), l'équation 7 peut être approximée suivant un modèle divisé en 2 fonctions caractérisé par l'Équation 8.

$$q_{face}(t) = \begin{cases} \frac{4D}{h} C_0 \sqrt{\frac{\pi \tau}{16t}}, & t_{[0; \frac{\tau}{2}]} \\ \frac{4D}{h} C_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, & t_{[\frac{\tau}{2}; 3\tau]} \end{cases}$$

Équation 8

Ce système se décompose en 2 parties pour caractériser le taux de dégazage pour chaque partie de la courbe. Cependant, nous étudions la variation de la masse totale perdue du matériau. Pour cela une intégration du système de l'Équation 8 est nécessaire pour notre étude de cas, donnant en résultat l'Équation 9.

$$f_{TML}(t) = h^{-1} \int q_{face}(t) dt$$

$$f_{TML}(t) = \begin{cases} \frac{2J_0 C_0}{h} \sqrt{\frac{h^2 t}{\pi D}}, & t_{[0; \tau]} \\ \frac{4J_0 C_0 h}{\pi^2 D} (1 - e^{-\frac{t \pi^2 D}{h^2}}), & t_{[\tau; 6\tau]} \end{cases}$$

Équation 9

$$J_0 = \frac{D}{h}, \quad \tau = \frac{h^2}{\pi^2 D_0}$$

On retrouve dans le système de l'Équation 9, une première partie de la forme de \sqrt{t} et une seconde partie de la forme $1 - e^{-t}$, ce qui correspond fidèlement à la courbe de dégazage d'après la Figure 16. La méthode proposée par (CERN 2021) donne une 3^{ème} fonction pour l'approximation du dégazage à long-terme lorsque la diffusion est dominante. Cependant, l'intégration de cette fonction dans le modèle de cette partie n'est pas mentionnée dû à une convergence impossible des paramètres physique utilisés.

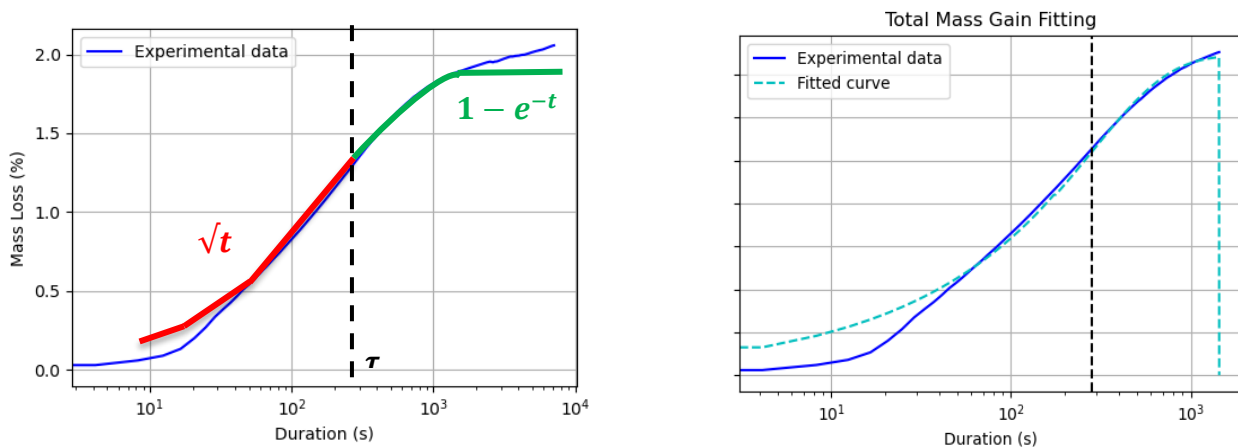


Figure 16 Comparaison de la cinétique de dégazage de la colle EC9323 à 60°C avec les fonctions caractéristiques à gauche, la figure à droite représente le résultat du fitting avec la méthode du CERN.

7.2. Application du fitting

L'utilisation du fitting implique la méthode des moindres carrés et nécessite donc une initialisation rigoureuse pour s'assurer de la convergence de l'algorithme. Pour cela une méthode est décrite dans (Shen 1976) permettant de trouver l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion de l'équation.

Pour donner suite à l'initialisation, le fitting de la courbe s'exécute en même temps pour les deux fonctions du système ainsi que pour $\tau = \frac{h^2}{\pi^2 D_0}$ la limite entre les deux fonctions. On remarque très rapidement tout comme la méthode de l'eau une divergence au long terme causée par le phénomène de diffusion s'ajoutant continuellement à la désorption. Toutefois, l'approximation de la courbe est très bonne pour tout type de matériaux et températures tant que la désorption reste le phénomène principal du dégazage. Cela nous emmène à chercher une nouvelle méthode qui prendrait en compte le dégazage dans sa globalité avec la diffusion et la désorption.

8. Etude du dégazage par la recherche d'une nouvelle méthode

Dans le cadre de ce stage, il est apparu assez rapidement l'absence d'un modèle simple permettant de caractériser le dégazage sur une très longue période, ce qui est pourtant cruciale pour une mission spatiale. Effectivement, permettre d'anticiper et de prédire le comportement du dégazage à long terme d'un matériau est une problématique qui peut avoir de grosse conséquence. C'est donc dans cet objectif que s'inscrit cette partie.

8.1. Introduction

Cette partie du stage s'étale sur une période d'environ 3 mois et se caractérise par l'utilisation de nombreuses méthodes déjà existantes, améliorées et/ou nouvelles. Par l'étude de la comparaison et de la combinaison de certaines méthodes, mes résultats ont fini par converger vers une toute nouvelle méthode.

Voici le cheminement que j'ai suivi tout au long de cette période.

8.2. Déroulement de la recherche

En se basant sur les deux dernières études, l'objectif fut premièrement de décomposer le phénomène du dégazage en 3 grandes parties présentées sur la Figure 17.

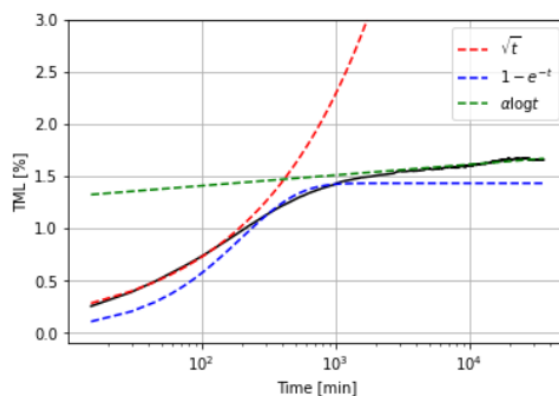


Figure 17 Caractérisation des comportements de la courbe de dégazage

On remarque alors dans un premier temps la fonction \sqrt{t} caractérisant le début du dégazage, période durant laquelle la température varie jusqu'à la valeur souhaitée durant l'expérience. Dans un second temps la fonction $1 - e^{-t}$ représente le dégazage ayant la désorption pour phénomène dominant à ce stade de l'expérience. Puis finalement la fonction $\alpha \log(t)$ caractérisant le dégazage ayant la diffusion pour phénomène dominant



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

8.2.1. Etude du dégazage dominé par la désorption

Tout d'abord mon objectif fut de trouver la meilleure méthode permettant d'approximer n'importe quel matériau à n'importe quelle température lorsque le dégazage est principalement dicté par la désorption. Pour cela j'ai réutilisé la méthode de l'eau en modifiant les coefficients « a » et « b » pour prendre en compte plusieurs espèces chimiques et la méthode par décomposition du CERN.

Les deux méthodes sont données par l'Équation 10 et l'Équation 11 :

$$f_{eau} : \mu^{(t)} = \mu_0 \left(1 - e^{a \left(\frac{Dt}{h^2} \right)^b} \right)$$

Équation 10

$$f_{cern} : \begin{cases} \frac{2J_0 C_0}{h} \sqrt{\frac{h^2 t}{\pi D}}, & t_{[0; \tau[} \\ \frac{4J_0 C_0 h}{\pi^2 D} \left(1 - e^{-\frac{t \pi^2 D}{h^2}} \right), & t_{[\tau; 6\tau[} \end{cases}$$

Équation 11

Je compare ici les fonctions f_{eau} , f_{cern} , $f_{cern opti}$.

La différence entre f_{cern} et $f_{cern opti}$ repose sur la valeur de $\tau = \frac{h^2}{\pi^2 D_0}$ qui est optimisée pendant le fitting. Le résultat du fitting est donné par la Figure 18.

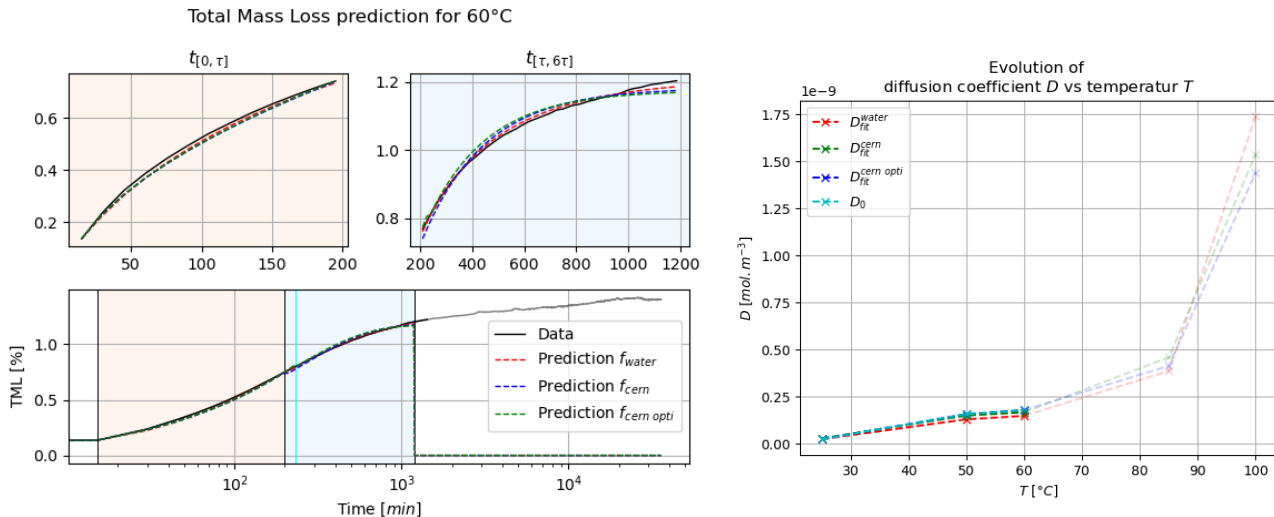


Figure 18 Comparaison des différents modèles d'approximation sur le matériau EC9323-2 à 60°C

Il apparait rapidement que la méthode de l'eau modifiée semble plus efficace et robuste que la méthode par décomposition du CERN. J'ai donc décidé de partir sur cette méthode pour la caractérisation du dégazage lorsque la désorption domine. Cependant pour valider cette décision j'ai tout de même étudié la combinaison de la méthode par décomposition du CERN avec $a \log(t)$.



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document

Date : 14/08/2024

Edition : 1, Révision : 0

8.2.2. Etude du dégazage avec $\alpha \log(t)$

En couplant les méthodes de la section précédente et une fonction $\alpha \log(t)$ à déterminer, on peut approximer la courbe de dégazage sur toute sa période. L'objectif étant de voir quelles méthodes combinées ensemble fonctionnent le mieux en fonction de l'expression du coefficient α .

La 3^{ème} partie de la courbe de dégazage (droite verte sur la Figure 18) est proportionnelle à $\alpha \log(t)$.

En partant de l'approximation du coefficient de diffusion proposé par (Shen 1976), α peut-être exprimé par l'Équation 12.

$$\alpha(D_0) = \sqrt{\frac{D_0}{\left(\frac{h}{4\mu_0}\right)^2 \pi}}$$

Équation 12

La deuxième approche consiste à calculer le coefficient α une fois la courbe approximée. α peut-être exprimé par l'Équation 13.

$$\alpha(D_{fit}) = \sqrt{\frac{D_{fit}}{\left(\frac{h}{4\mu_{fit}}\right)^2 \pi}}$$

Équation 13

Enfin, une dernière approche pourrait être l'utilisation d'une régression linéaire sur la fin de la courbe aux environs de 1440 min (24h). On obtient en sorti une fonction $\alpha(\gamma_T)$ en fonction de la température d'après la Figure 19. On limitera cette étude à 85°C pour éviter de prendre en compte les cas de divergences du fitting.

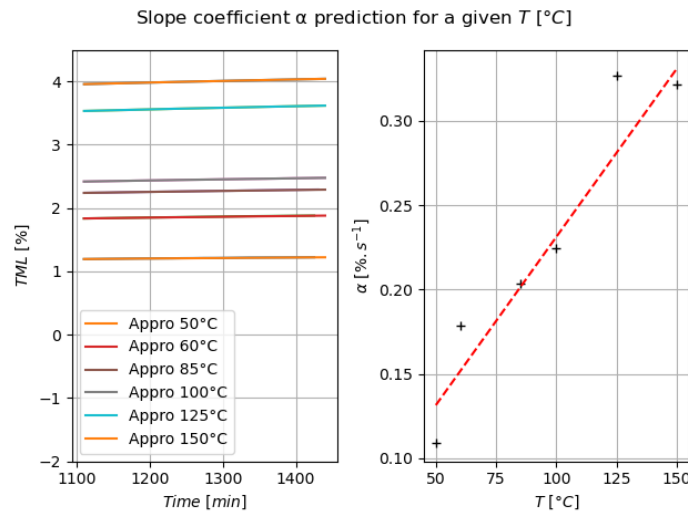


Figure 19 Analyse de l'évolution d' α en fonction du coefficient directeur de la dernière partie linéaire logarithmique de la courbe



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Les systèmes étudiés finaux sont donnés par l'Équation 14 et Équation 15 :

$$f_{cern} : \begin{cases} \frac{2J_0 C_0}{h} \sqrt{\frac{h^2 t}{\pi D}}, & t_{[0; \tau[} \\ \frac{4J_0 C_0 h}{\pi^2 D} (1 - e^{-\frac{t \pi^2 D}{h^2}}), & t_{[\tau; 6\tau[} \\ \alpha \log(t), & t_{[6\tau; t_{max}]} \end{cases}$$

Équation 14

$$f_{eau} : \begin{cases} \mu_0 \left(1 - e^{a \left(\frac{Dt}{h^2}\right)^b}\right), & t_{[\tau; 6\tau[} \\ \alpha \log(t), & t_{[6\tau; t_{max}]} \end{cases}$$

Équation 15

La Figure 20 et Figure 21 montrent la différence entre les différentes nouvelles méthodes :

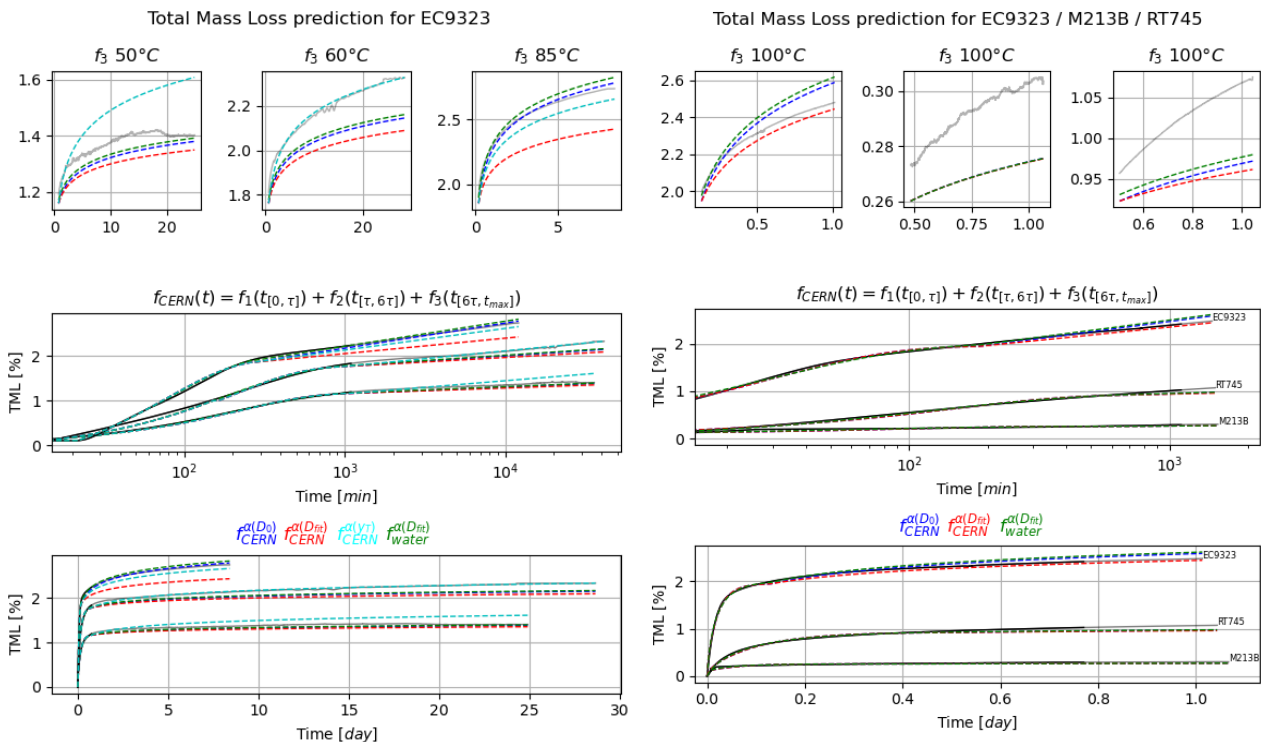


Figure 21 Comparaison des méthodes par températures pour le matériau EC9323

Figure 20 Comparaison des méthodes par matériau (EC9323, M213B, RT745) pour une même température 100°C

D'après la Figure 20 et Figure 21 toutes les méthodes ont des résultats équivalents avec une erreur de ~5%. Cependant, le système f_{eau} donne des résultats légèrement plus fiables notamment lorsque les données utilisées sont polluées par du bruit. En plus, il va être préférable d'utiliser la méthode de l'eau modifiée car sa représentation est physiquement plus juste, car cette méthode prend en compte uniquement le dégazage d'une espèce chimique s'agissant à court terme de la désorption de l'eau.



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

8.2.3. Simplification du système et méthode finale

Pour éviter l'erreur de $\sim 5\%$ et avoir un meilleur résultat, il est possible de combiner l'équation $a \log(t)$ avec la méthode modifiée de l'eau en les additionnant. Par ce procédé on permet au fitting de trouver les paramètres optimaux avec la prise en compte du phénomène de diffusion. On gagne alors en précision mais on perd en même temps le véritable sens physique de la fonction, qui donne en sortie des coefficients légèrement différents mais avec un même ordre de grandeur.

La constante de temps séparant les deux fonctions τ se calcule à partir de l'épaisseur du matériau, du coefficient de diffusion et de la multiplicité d'espèces chimiques dégazées $\tau = \frac{3h^2}{aD}$.

Cette relation s'inspire du τ décrit dans (CERN 2021).

Définissons aussi la concentration massique à l'équilibre saturé $\mu_m = \frac{4\mu_0}{\pi^2}$.

Le système final est donné par l'Équation 16 :

$$\begin{cases} \mu_0 \left(1 - e^{a \left(\frac{Dt}{h^2} \right)^b} \right), & t_{[0; \tau[} \\ \mu_0 \left(1 - e^{a \left(\frac{Dt}{h^2} \right)^b} \right) + \sqrt{\frac{D}{\left(\frac{h}{4\mu_m} \right)^2 \pi}} \log(t), & t_{[\tau; 6\tau[} \end{cases}$$

Équation 16

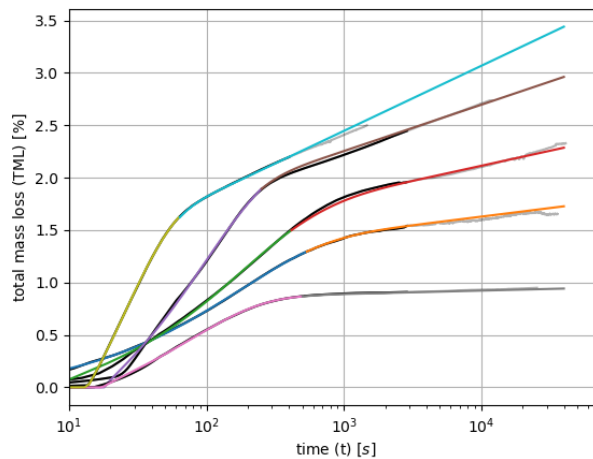


Figure 22 Démonstration de la nouvelle méthode sur l'ensemble des données disponible long-terme EC9323-2 50/60/85/100°C et EC2216 50°C avec la prise en compte pour la méthode uniquement des premières 24h de dégazage des données

On remarque d'après la Figure 22 que la méthode marche parfaitement pour tout le jeu de donnée, sous le respect d'une condition. Le jeu de données d'entrainements d'entrées doit être longue d'un minimum de 4τ . Dans l'exemple si dessus 24h de données suffisent à prédire fidèlement 1 mois de dégazage.

Grâce à cette approche on approxime les coefficients physiques du phénomène de dégazage avec la première fonction puis on prédit indépendamment la courbe avec la deuxième fonction du système, équation 16.

8.3. Création d'un logiciel

8.3.1. Support

L'interface repose sur la bibliothèque python [PyQt5](#) sous License [GPL v3](#) permettant de créer une interface homme machine.

8.3.2. Processus du logiciel

Le fichier sélectionné par l'utilisateur est converti par la bibliothèque Pandas dans un DataFrame contenant les différentes colonnes du fichier Excel. Ce DataFrame est ensuite trié et réarrangé pour permettre une utilisation des données plus fluide et intelligible. Les différentes méthodes se répartissent en différentes Class Python distinct appelée suivant le choix de l'utilisateur sur l'interface. Une fois les paramètres entrés par l'utilisateur, le bouton « Valider » permet de lancer l'algorithme de fitting sur la courbe cinétique. L'utilisateur peut modifier les différents paramètres de l'algorithme en temps réel pour mieux calibrer le fitting en réponse à une mauvaise convergence de l'algorithme. Pour terminer, l'utilisateur à la possibilité d'enregistrer les résultats sous la forme d'un fichier Excel.

8.3.3. Aperçu de l'interface

L'interface du logiciel est donnée par la Figure 23.

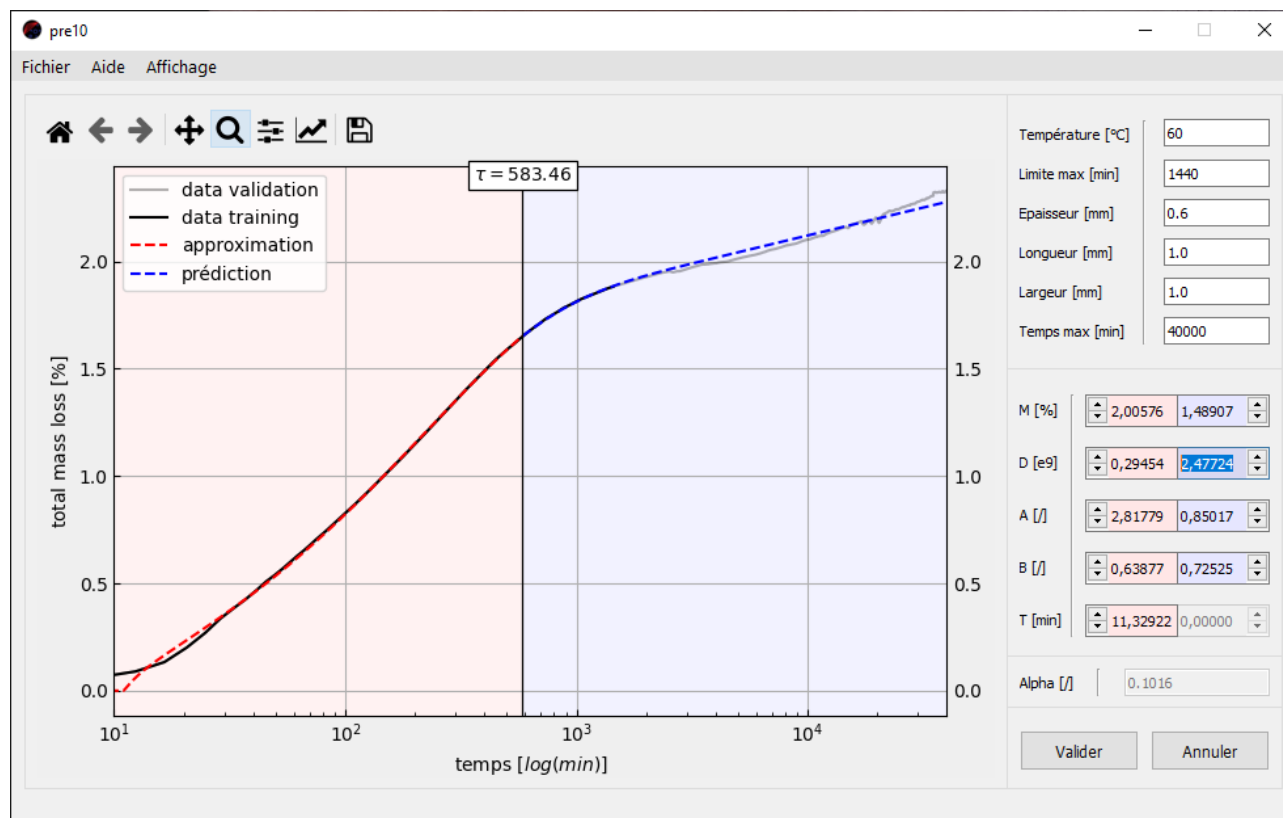


Figure 23 Interface du logiciel Pre10

9. Prédiction du dégazage basé sur une cinétique à palier

L'objectif est de prédire notamment sur une longue période le dégazage d'un matériau grâce à ses données de cinétique. En utilisant les méthodes précédemment évoquées il est possible d'appliquer la méthode de prédiction pour une température donnée en se basant sur le palier de dégazage correspondant. En découpant et récupérant chaque palier, Nous verrons dans cette partie comment il peut être possible d'adapter les données d'un palier pour se rapprocher d'une courbe isotherme. La Figure 24 représente une cinétique de dégazage de la colle EC9323 par paliers de 25°C.

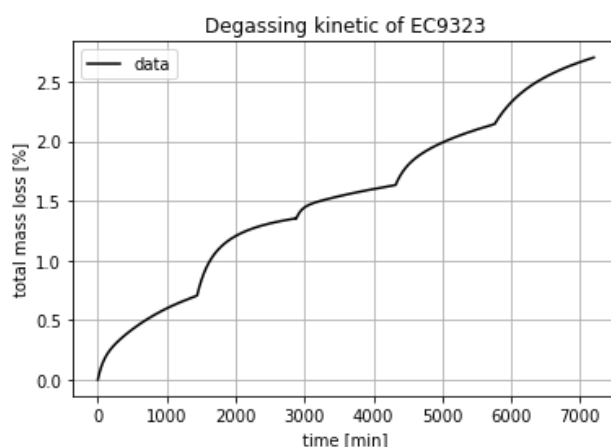


Figure 24 Cinétique de dégazage à paliers de 24h et 25°C par 25°C

9.1. Correction des paliers de la cinétique

Le dégazage à long terme est caractérisé par une courbe linéaire logarithmique, il nous faut donc trouver le coefficient directeur et la valeur de l'abscisse initiale. Cependant, la méthode par décomposition du CERN ne peut pas être appliquée directement sur les données brutes car ce ne sont pas de véritables isothermes et donc le dégazage de chaque palier est influencé par les précédents. Pour cela il va falloir appliquer plusieurs corrections pour essayer de se rapprocher au maximum d'un jeu de données exploitable par l'algorithme.

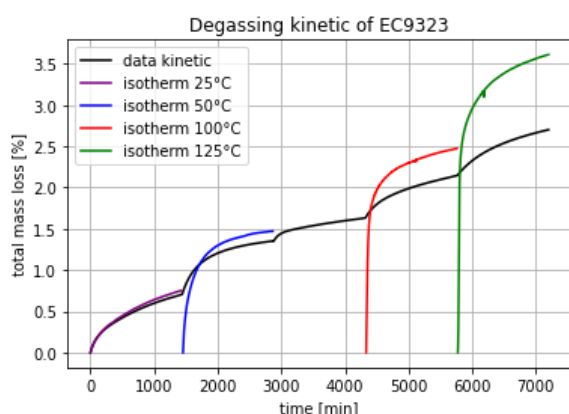


Figure 25 Comparaison entre les cinétiques de dégazage isotherme et à paliers

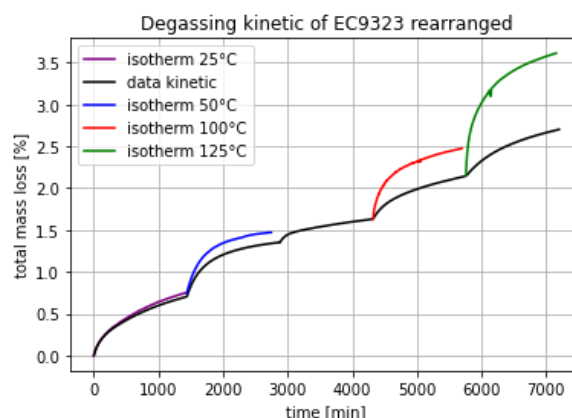


Figure 26 Comparaison entre les cinétiques de dégazage isotherme tronquées et à paliers

En effectuant un décalage en temps et un décalage de l'abscisse, les paliers se superposent avec les courbes isothermes. Toutefois, du au décalage de l'abscisse, une discontinuité des données émerge comme illustré sur



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

la Figure 28 au début de la courbe. Il est possible de faire une extrapolation polynomiale pour résoudre le problème. Il devient alors possible d'appliquer les différents algorithmes vus au préalable dans ce rapport.

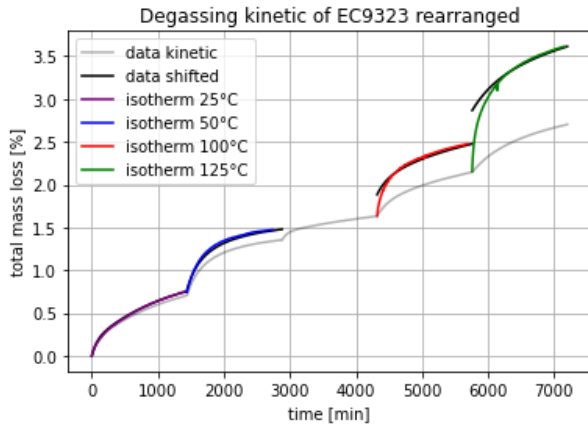


Figure 27 Superposition des courbes isothermes et des paliers de la cinétique corrigés

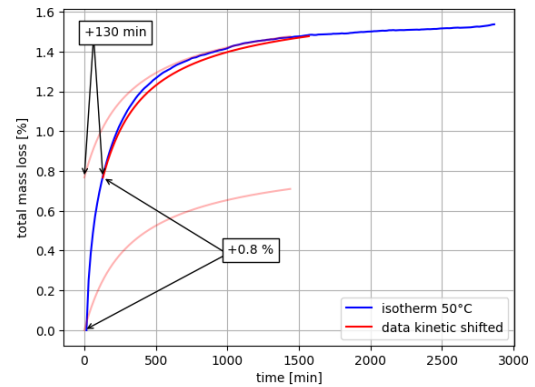


Figure 28 Détail de la correction appliquée au palier à 50°C de l'EC9323-2

La figure de gauche montre une simple correction de l'abscisse en ajoutant l'écart maximal entre le palier et la courbe isotherme. Il ne s'agit que d'une visualisation de la généralisation de la correction sur la courbe des paliers et ne représente pas la véritable correction dont il est question. Chaque palier se voit attribuer une correction qui lui est propre comme montré dans la Figure 28.

Pour cette raison il est donc difficile de généraliser les corrections pour chaque palier et pour des matériaux et scénario de température différentes (EC9323 vs EC2216) et ([25,50,75,100,125°C] vs [10,35,60,85,110°C])

9.2. Conclusion

Basée uniquement sur les 1440 min de données du palier, on trouve une solution précise de la prédiction similaire à la méthode originelle sur isotherme, ce qui est très intéressant et permet d'affirmer qu'un palier de cinétique peut être utilisé pour la prédiction du dégazage isotherme d'un matériau. Cependant, cette méthode sur cinétique ne peut être complètement vérifiée dû au manque de données long-terme disponibles.

La Figure 29 démontre le résultat obtenu.

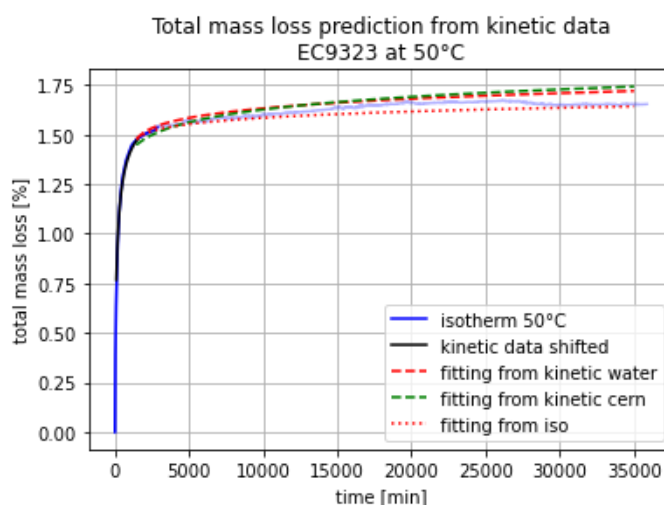


Figure 29 Comparaison du résultat final avec la méthode du CERN et de l'eau pour l'EC9323-2 à 50°C

Pour une meilleure prédiction, il pourrait être judicieux d'utiliser et de comparer les différents paramètres liés au dégazage tel que le coefficient de diffusion, l'énergie d'activation, etc. L'étude ci-dessus prend en compte chaque palier de manière indépendante, une seconde approche pourrait se baser sur la somme des paliers jusqu'à la température étudiée en question. Il serait alors possible d'utiliser le logiciel LPPY5E pour la création d'un scénario comportant uniquement une cinétique isotherme à la température étudiée.



10. Etude de l'ODE de la diffusion par la méthode des différences finies

Dans le cadre de l'étude du dégazage, il est intéressant d'étudier le phénomène et ses caractéristiques physiques par l'une des méthodes de modélisation les plus utilisées de la science moderne, la méthode des différences finies. En effet, cette partie du stage consiste à étudier les différents aspects du dégazage notamment de la diffusion. On a pu voir dans la méthode modifiée de l'eau, de nouveau coefficient apparaitre, tel que « a » la multiplicité d'espèces chimiques dégazé et « b » le comportement du début du dégazage. Il pourrait être envisageable d'utiliser la méthode des différence finies et caractériser le paramètre « a » pour permettre par exemple une initialisation de la méthode de l'eau modifiée plus fiable.

Pour cela nous allons résoudre l'équation différentielle de la seconde loi de Fick.

10.1. Approximation finie

Comme précédemment évoqué le phénomène de dégazage est décrit par la seconde loi de Fick :

$$\frac{\delta c}{\delta t} = D \frac{\delta^2 c}{\delta x^2}$$

On étudiera la seconde loi de Fick sur le domaine suivant $\Omega_t = [0, t_{max}]$ et $\Omega_x = [0, x_{max}]$, Équation 17 :

$$\begin{cases} \frac{\delta c}{\delta t} = D \frac{\delta^2 c}{\delta x^2} & t \in \Omega_t & x \in \Omega_x \\ c = \frac{1}{1 + e^{-\theta}} & t \in \Omega_t & x = 0 \\ c = 0 & t \in \Omega_t & x = x_{max} \\ c = 0 & t = 0 & x \in \Omega_x \end{cases}$$

Équation 17

Par l'utilisation des méthodes de Taylor l'équation peut être approximé suivant l'Équation 18 :

$$\Leftrightarrow \frac{\left(\frac{3}{2}c_{j+1} - 2c_j + \frac{1}{2}c_{j-1}\right)}{\Delta t} - D \frac{(c_{j+1} - 2c_j + c_{j-1}))}{\Delta x^2} = 0$$

Équation 18

On cherche c_j^1 :

$$\begin{aligned} c(x_j, \Delta t) &= c(x_j, \Delta t) \\ &= c(x_j, 0) + \Delta t \frac{\delta c}{\delta t}(x_j, 0) \\ &= c_0(x_j) + \Delta t v_0(x) \\ &= c_0(x_j) + D \frac{\delta^2 c}{\delta x^2} \Delta t \\ &= c_0(x_j) + D \Delta t \frac{(c_{j+1}^0 - 2c_j^0 + c_{j-1}^0)}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

$$= c_0(x_j) - \Phi \left(A \cdot c_0(x) + \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta(0) \end{pmatrix} \right)$$

$$A = M_{Laplace} \quad \Phi = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \frac{3}{2} + 2\Phi & -\Phi & 0 & \dots & 0 \\ -\Phi & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\Phi \\ 0 & \dots & 0 & -\Phi & \frac{3}{2} + 2\Phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{n+1} \\ c_2^{n+1} \\ \vdots \\ c_{M-1}^{n+1} \end{pmatrix} - \Phi \begin{pmatrix} c_0^{n+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ c_M^{n+1} \end{pmatrix} - 2c_j^n + \frac{1}{2}c_j^{n-1} = 0$$

$$\Leftrightarrow BC^{n+1} - \Phi C_L - 2I_m C^n + \frac{1}{2}I_m C^{n-1} = 0$$

$$\Leftrightarrow BC^{n+1} = 2I_m C^n - \frac{1}{2}I_m C^{n-1} + \Phi C_L$$

$$\Leftrightarrow C^{n+1} = B^{-1}I_m C^n - B^{-1}DC^{n-1} + B^{-1}\Phi C_L$$

Équation 19

Nous avons alors une définition de C_j^{n+1} et C_j^{n+2} pour la suite à itérer et C_L pour les conditions limites. Le gradient à pas constant permet alors de résoudre le système en convergeant vers le minimum. La Figure 30 présente le résultat de la simulation de la diffusion évoqué par le système Équation 17.

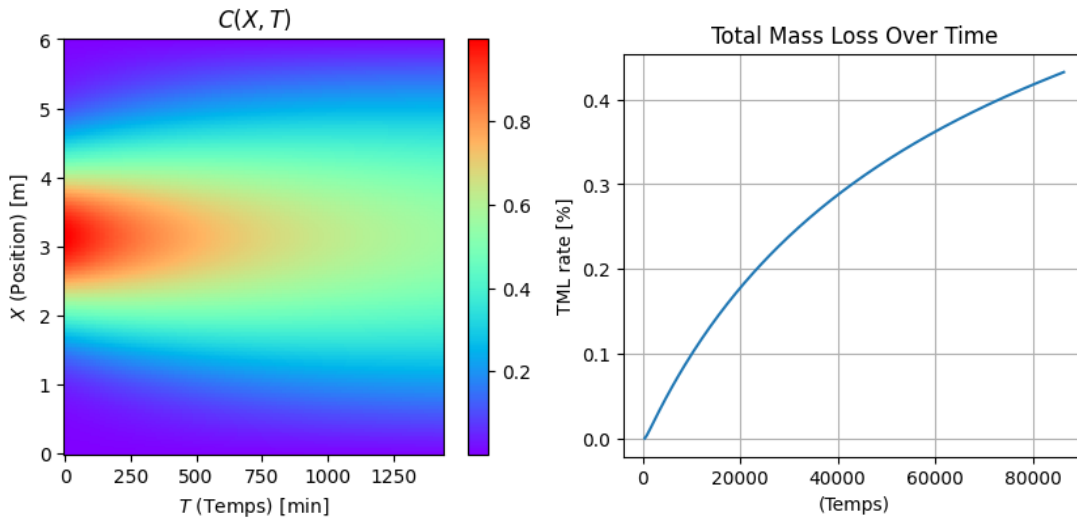


Figure 30 Résultat de la simulation numérique du phénomène de diffusion par la méthode des différences finies

11. Résolution d'une ODE par réseau de neurones

Avec le même objectif que la méthode des différences finies, ce chapitre porte sur la résolution de l'équation différentielle ordinaire de la seconde loi de Fick. Il vise à premièrement caractériser le phénomène de diffusion du dégazage, ainsi qu'à vérifier les résultats mutuels entre la méthode par différences finies et réseau de neurones. L'utilisation d'un réseau de neurones permet un gain de temps considérable comparé à la méthode des différences finies. En effet, une fois entraîné le réseau de neurones permet la résolution de l'équation avec des conditions initiales différentes à l'inverse de la méthode des différences finies obligée de recalculer le résultat.

11.1. Physical Information Neural Network (PINN)

Contrairement à un réseau de neurones classique entraîné à prédire une fonction sur un domaine défini en temps et espace avec d'énorme quantité de données, dans un PINN, un réseau très dense de neurones est utilisé avec des conditions aux limites et initiales connues (Raissi 2019).

11.1.1. Définition du système

On étudiera la seconde loi de Fick sur le domaine suivant $\Omega_t = [0, t_{max}]$ et $\Omega_x = [0, x_{max}]$, Équation 20 :

$$\begin{cases} \frac{\delta c}{\delta t} = D \frac{\delta^2 c}{\delta x^2} & t \in \Omega_t & x \in \Omega_x \\ c = \frac{1}{1 + e^{-\theta}} & t \in \Omega_t & x = 0 \\ c = 0 & t \in \Omega_t & x = x_{max} \\ c = 0 & t = 0 & x \in \Omega_x \end{cases}$$

Équation 20

11.1.2. Minimisation de l'erreur

L'optimisation du PINN cherche à minimiser la combinaison des différentes erreurs quadratique moyenne (*MSE*) Équation 21 d'après l'Équation 22 et l'Équation 23 :

$$\mathcal{L} = \lambda_1 MSE_f + \lambda_2 MSE_{surf} + \lambda_3 MSE_{out}$$

Équation 21

On retrouve λ un hyper-paramètre utilisé et entraîné pour balancer le poids de chaque *MSE*.

La première *MSE_f* représente l'erreur de la fonction d'après l'Équation 22 :

$$MSE_f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\delta c_i}{\delta t_i} - D \frac{\delta^2 c}{\delta x^2} \right)^2$$

Équation 22

La deuxième et troisième *MSE_{surf}*, *MSE_{out}* représentent l'erreur des conditions limites Équation 23:

$$MSE_{surf} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (c_i - c(0, t))^2, \quad MSE_{out} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\delta c_i}{\delta x_i} \right)^2$$

Équation 23



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

11.1.3. Résultats

Il existe plusieurs manières de guider le réseau de neurones vers la résolution de l'ODE, à gauche l'évaluation aléatoire de points de l'espace de résolution et à droite l'évaluation régulière de points de l'espace de résolution. Les résultats obtenus sont très prometteurs et concordent avec ceux obtenues par la méthode des différences finies. Cette méthode pourrait permettre un gain de temps et de calculs considérable, de même il serait envisageable en tant qu'ouverture, l'étude de la diffusion pour des scénarios bien plus complexes.

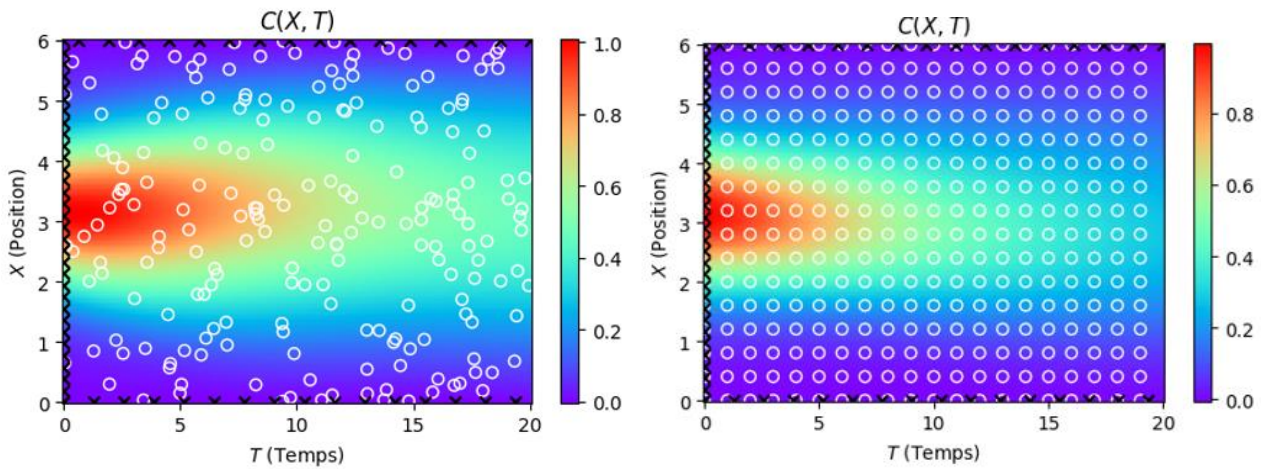


Figure 31 Résultat de la simulation du phénomène de la désorption de l'eau par un PINN



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

12. Conclusion

La prédiction du dégazage d'un matériau est simulée par l'approximation de la désorption par la loi d'Arrhenius, cependant comme vue durant ce rapport cette méthodologie diverge au long terme induit par l'absence de la prise en compte du phénomène de diffusion. Le CNES possède des données uniques au monde de dégazages à long terme d'environ 1 mois. Ces données ont permis de vérifier et valider un tout nouveau modèle permettant de simuler et prédire le dégazage dans sa totalité à long terme ce qui est une première mondiale.

Ce stage s'est conclu par l'étude et la conception de deux logiciels fonctionnels destinés aux groupes de contamination « LPPY5E » et « PRE10 ». Le premier logiciel est dédié à l'approximation et à la simulation du dégazage selon une cinétique à paliers, en s'appuyant sur l'équation d'Arrhenius. Le second logiciel se concentre sur l'approximation et la prédiction d'une courbe de dégazage isotherme, en intégrant à la fois la désorption, modélisée par la loi d'Arrhenius, et la diffusion, décrite par la seconde loi de Fick. Ces outils combinent des méthodes internes et externes au CNES, tout en introduisant une nouvelle approche innovante qui permet de prédire sur plusieurs années le dégazage d'un matériau en environnement spatial, en se basant uniquement sur 24 heures de données initiales.

Le développement du logiciel « PRE10 » repose sur une étude préliminaire de la méthode de l'eau, optimisée par l'introduction de deux nouveaux coefficients, « a » et « b », pour modéliser la désorption de diverses espèces chimiques. Cette optimisation simplifie et améliore la précision de la caractérisation du dégazage à court terme, ce qui permet de mieux approximer et prédire le comportement du dégazage à long terme, où le phénomène de diffusion devient prépondérant.

Les objectifs de ce stage ayant été atteints, deux modèles de simulation de la diffusion ont été développés, ouvrant ainsi de nouvelles perspectives. Ces modèles incluent un réseau de neurones innovant ainsi que l'application de la méthode des différences finies pour la résolution d'une équation différentielle. Ces outils pourraient s'avérer précieux pour la poursuite des études sur le dégazage.

Dans la suite de ce travail, il serait pertinent d'ajuster le modèle de prédiction à long terme afin de mieux caractériser physiquement les coefficients de l'équation. Le nouveau banc de tests pourrait être utilisé pour caractériser les espèces chimiques dégazées, et le logiciel « LPPY5E » pourrait servir à affiner les prédictions de dégazage en se basant sur l'analyse des cinétiques à paliers. Par ailleurs, une étude plus approfondie de la nouvelle méthode, testée sur de nouveaux matériaux et à différentes températures, permettrait d'enrichir les fonctions par décomposition. En poursuivant ces recherches, on pourrait également envisager de développer une méthode qui généralise les prédictions à court et long terme de la désorption d'un matériau. Enfin, l'ajout de nouvelles caractéristiques physiques, telles qu'une modélisation en 3D et la prise en compte des perturbations extérieures comme les rayonnements, renforcerait encore la pertinence des modèles. Le développement du réseau de neurones pourrait également s'étendre à des scénarios plus complexes, ouvrant la voie à de nouvelles avancées dans ce domaine.

Ce stage de 6 mois au sein du groupe contamination dans le service DTN/QE/LE m'a permis de m'ouvrir un tout nouveau champ de possibilité professionnel et personnel. J'ai pu découvrir un aspect de la science qui m'était méconnue, partager et interagir avec des experts et acquérir un savoir unique. J'ai pu au cours des 6 derniers mois développer et étudier de nouvelles méthodes de prédiction du dégazage, coder des simulations/prédictions numériques et utiliser des concepts mathématiques révolutionnaires passionnants. Ce stage m'a apporté une nouvelle vision sur la manière dont les missions spatiales sont menées au sein du CNES et la contribution que chacun peut y avoir.

Ce fut une expérience enrichissante et je suis fier du travail réalisé tout au long de ce stage grâce à l'accompagnement de mon tuteur Mr Rioland Guillaume.



RÉPUBLIQUE
FRANÇAISE

Liberté
Égalité
Fraternité



Direction DTN
Sous-Direction QE
Service LE
RAPPORT STAGE INGENIEUR

Réf : Référence document
Date : 14/08/2024
Edition : 1, Révision : 0

Bibliographie

- CERN. «Outgassing rates of PEEK, Kapton and Vespel foils.» 2021.
- Chen, Haotian. «Predicting Voltammetry Using Physics-Informed Neural Networks.» *The journal of physical chemistry letters*, 2022.
- ECSS. *Kinetic of materials for space*. Space Product Assurance, 2011.
- ESA-ESTEC. «Dynamic outgassing test of EC9323-2b/a black epoxy adhesive.» Noordwijk, 2013.
- G.R.Longhurst. «TMAP7 User Manual.» Idaho, 2008.
- Quentin, Dollon. «Etude de la cinétique de Dégazage des Matériaux Polymères en Milieu Spatial.» Toulouse, 2017.
- Raissi, M. «Physical Informed Neural Networks : A deep learning framework for solving forward and inverse involving non linear partial differential equation.» *Journal of computational physics*, 2019: 686-707.
- Shen, Chi-Hung. «Moisture Absorption and Desorption of Composite Materials.» *Journal of Composite Materials*, 1976.