

Conception optimale d'expérience par algorithmes génétiques pour l'estimation de paramètres thermophysiques

Emmanuel RUFFIO, Daniel PETIT, Didier SAURY

Laboratoire d'Etudes Thermiques, U.M.R. C.N.R.S. 6608, Université de Poitiers, ENSMA, Téléport 2, 1 avenue Clément Ader, B.P. 40109, 86961 Futuroscope Cedex, France

Résumé – Cette étude porte sur la conception d'expérience en vue d'optimiser une estimation de paramètres thermophysiques par méthodes inverses. Il s'agit de déterminer les conditions expérimentales (position des thermocouples) minimisant l'incertitude des paramètres lors de leur estimation. On quantifie ces incertitudes à l'aide de critères qui seront minimisés par algorithmes génétiques.

Nomenclature

y	Vecteur des sorties du modèle direct	D	Critère d'optimalité D
y^*	Vecteur des mesures (dim M)	N	Nombre d'individus
M	Nombre total de mesures	X	Matrice des sensibilités
σ_m	Ecart-type du bruit de mesure	C	Capacité thermique volumique
β	Vecteur des paramètres à estimer (dim Q)	λ	Conductivité thermique
P	Vecteur des paramètres de l'expérience		

1. Introduction

L'identification de paramètres par méthodes inverses est souvent utilisée pour estimer les propriétés thermophysiques de matériaux. L'utilisation de plus en plus fréquente de matériaux anisotropes rend ces méthodes particulièrement intéressantes puisqu'elles s'adaptent à toutes situations. Certaines considèrent les paramètres thermophysiques indépendants de la température [1 ; 2], d'autres prennent en compte une dépendance linéaire [3] ou encore quadratique [4 ; 5]. Certaines expériences se font sous vide de façon à maîtriser davantage les conditions limites [6].

La conception optimale d'expérience permet d'améliorer la précision de l'estimation de paramètres. Si l'optimisation se fait « facilement » de façon graphique lorsque le nombre de paramètres est faible [1 ; 7 ; 8], elle atteint rapidement ses limites lorsque le nombre de paramètres augmente. Pour un nombre élevé de paramètres, la mise en œuvre d'algorithmes génétiques s'avère être une solution efficace.

2. L'estimation de paramètres

Le principe de l'estimation de paramètres repose sur la détermination de Q paramètres, représentatifs du système étudié (propriétés thermophysiques, conditions limites, etc...), contenus dans un vecteur β , à partir de M mesures y^* . La détermination de ce vecteur paramètre repose sur la minimisation de l'estimateur de Gauss-Markov $J(\beta)$ construit à partir des mesures y^* , issues d'une expérience (réelle ou simulée), et des valeurs $y(\beta)$ issues de sa modélisation. En pratique, chaque mesure y_i^* est soumise à une incertitude que l'on modélise généralement par un bruit normal additif d'écart-type σ_i . M étant le nombre total de mesures (spatiales et temporelles), on a alors [9]:

$$J(\beta) = \sum_{i=1}^M \left(\frac{y_i(\beta) - y_i^*}{\sigma_i} \right)^2 \quad (1)$$

L'estimation consiste alors à trouver le minimum de $J(\beta)$, noté $\hat{\beta}$ tel que:

$$\hat{\beta} = \arg [\min(J(\beta))] \quad (2)$$

La qualité de l'estimation dépend fortement de la stabilité de cette solution vis-à-vis des erreurs de mesures contenues dans y^* . Ceci peut se quantifier grâce à la matrice de variance-covariance donné par :

$$V = \text{cov}(\hat{\beta}) = \begin{pmatrix} \text{var}(\hat{\beta}_1) & \text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) & \cdots & \text{cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_Q) \\ & \text{var}(\hat{\beta}_2) & \cdots & \text{cov}(\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_Q) \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{sym} & & & \text{var}(\hat{\beta}_Q) \end{pmatrix} \quad (3)$$

Dans le cas d'un problème linéaire, on a :

$$V = \sigma_m^2 [X^T X]^{-1} \quad (4)$$

avec σ_m l'écart-type du bruit de mesure supposé identique pour toutes les mesures y_i^* et $X(\beta)$ la matrice des sensibilités (de dimension $M \times Q$) définie par :

$$(X_{i,j}) = \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j}(\beta) \quad (5)$$

Même lorsque le problème est non linéaire, on peut utiliser la relation (4) au voisinage de la solution $\hat{\beta}$ pour obtenir l'écart-type de l'erreur sur chaque paramètre :

$$\sigma_{\beta_i} = \sigma_m \sqrt{\left\{ [X(\hat{\beta})^T X(\hat{\beta})]^{-1} \right\}_{ii}} \quad (6)$$

La qualité de l'estimation consiste donc à obtenir un écart-type aussi faible que possible sur chaque paramètre solution. Minimiser les écart-types σ_{β_i} revient finalement à minimiser les termes diagonaux de la matrice $[X(\hat{\beta})^T X(\hat{\beta})]^{-1}$, ce qui est l'objectif de la conception optimale d'expérience.

3. Conception optimale d'expérience

La conception optimale d'expérience est donc une étape qui précède l'estimation de paramètres. L'objectif est d'améliorer la matrice de variance-covariance, ce qui est généralement réalisé en optimisant des critères construits à partir de la matrice des sensibilités. Les plus fréquemment utilisés dans la littérature [1 ; 7 ; 8 ; 10] sont les critères E (basé sur le conditionnement de la matrice $X^T X$, $\text{cond}(X^T X) \in [1; \infty[$) et D (basé sur le déterminant de la matrice $X^T X$, $\det(X^T X) \in [0; \infty[$).

Dans cette étude, le critère D a été utilisé pour la conception d'expérience. Ce critère dépend de la matrice des sensibilités X et donc des paramètres β à identifier et des paramètres expérimentaux P (position des capteurs, type et durée des excitations...) à optimiser. Ainsi :

$$D = f(P, \beta) \quad (7)$$

On cherche le vecteur \hat{P} qui maximise le critère D ce qui nécessite de fixer β , disons β^0 . Une des conditions nécessaires pour concevoir une expérience est donc de connaître de façon approchée les paramètres β à estimer. On a finalement :

$$\hat{P}(\beta^0) = \arg [\max_P \{D(P, \beta^0)\}] \quad (8)$$

On est face à un autre problème d'optimisation. Une étude a montré [10] la difficulté de ce problème d'optimisation à cause de la présence fréquente de minima locaux. Aussi, une méthode de type gradient n'est pas satisfaisante et une méthode d'optimisation dite

« globale » s'impose. C'est pourquoi les algorithmes génétiques ont été utilisés dans cette étude.

4. Les algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques [11 ; 12] sont des méthodes d'optimisation inspirées de la théorie de l'évolution darwinienne et notamment des mécanismes de sélection naturelle mis en évidence depuis le 19^{ème} siècle. Ils sont inclus dans une famille plus vaste appelée « algorithmes évolutionnaires », dont une partie est incluse dans l'ensemble des « métaheuristiques ».

Une bonne méthode d'optimisation doit satisfaire deux objectifs antagonistes : la capacité d'exploration de l'espace des solutions (propriété d'ergodicité) et l'exploitation des meilleures solutions trouvées.

Soit $D(P)$ la fonctionnelle à optimiser et P le vecteur des paramètres. L'algorithme travaille sur une population de N individus (appelés aussi « chromosomes ») caractérisés chacun par des gènes (les composantes du vecteur P). Trouver le vecteur optimal \hat{P} consiste alors à déterminer l'individu le plus performant au sens de la fonctionnelle. Les générations se succèdent en favorisant les individus les plus performants, jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit satisfait.

Le passage d'une génération à l'autre est effectué par l'intermédiaire d' « opérateurs » que l'on classe en plusieurs catégories. Leurs actions sont représentées sur la figure 1 qui contient de façon schématique les différentes étapes d'une itération de l'algorithme :

- 1) Evaluation de la performance (fonctionnelle) de chaque individu de la génération G_m .
- 2) L'opérateur de sélection calcule la probabilité d'un individu, à partir de sa performance, de participer à la phase de croisement.
- 3) L'opérateur de croisement est appliqué un certain nombre de fois sur des couples d'individus déterminés aléatoirement pour former une population temporaire G'_m .
- 4) L'opérateur de mutation permet d'éviter une uniformisation trop précoce des génotypes en modifiant, avec une probabilité donnée, la valeur d'un gène d'un individu de G'_m .
- 5) Enfin, l'opérateur de remplacement définit la façon de former la génération suivante G_{m+1} à partir G_m et G'_m .

Les algorithmes génétiques sont dit « stochastiques » puisqu'un générateur de nombres aléatoires est indispensable à l'initialisation et aux étapes 2, 3 et 4 (pour les opérateurs). On les qualifie également « d'ordre 0 » puisqu'il n'est pas nécessaire de calculer le gradient de la fonctionnelle. Ils s'avèrent de plus particulièrement adaptés au calcul parallèle.

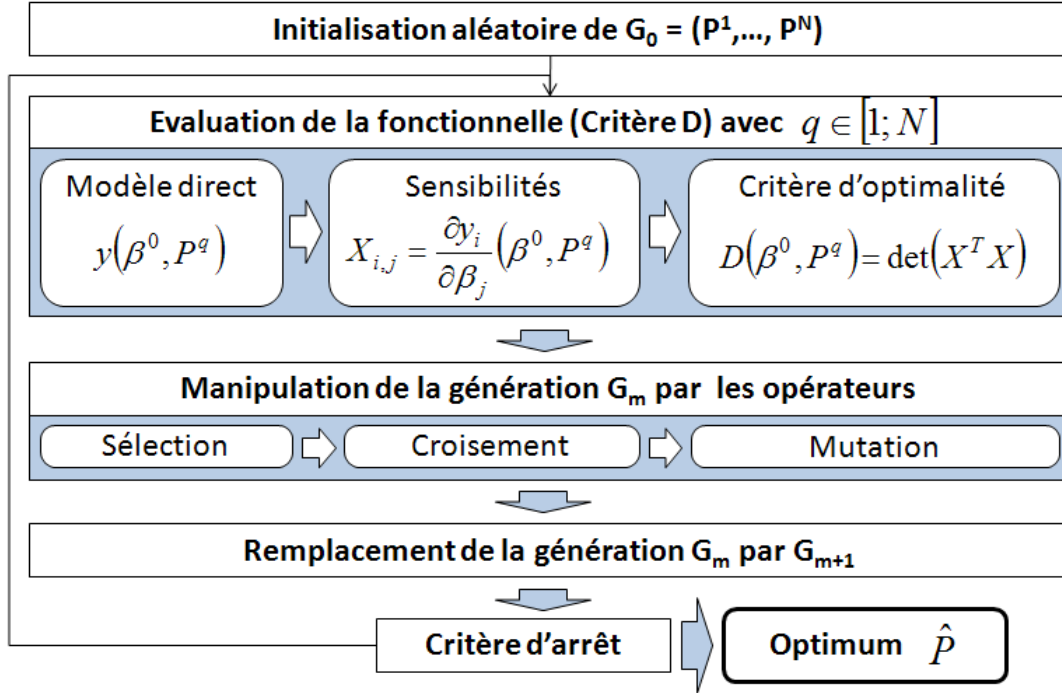
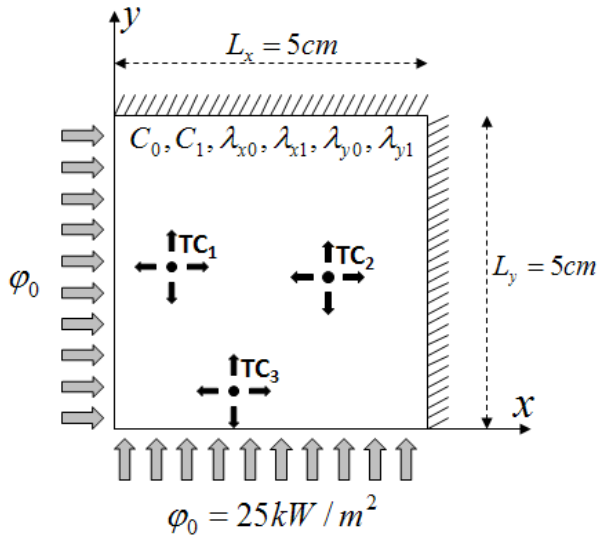


Figure 1 : Schéma de fonctionnement de l'algorithme génétique utilisé dans cette étude

5. Application

Cet exemple est inspiré des travaux de Sawaf et al. [3]. On considère un matériau orthotrope de dimensions $L_x \times L_y$. Soit $\lambda_x(T)$ et $\lambda_y(T)$ la conductivité thermique suivant x et y . Soit $C(T)$ la capacité thermique volumique du matériau. L'échantillon est initialement à la température $T_0 = 20^\circ\text{C}$. A $t=0$, les faces $x = 0$ et $y = 0$ sont soumises à un échelon de densité de flux $\varphi_0 = 25 \text{ kW/m}^2$, les deux autres faces sont supposées isolées. L'expérience dure 2 min . Les capteurs (simulation de thermocouples) effectuent une mesure par seconde.



Les équations régissant le système sont:

$$\begin{aligned}
 C(T) \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_x(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_y(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\
 \begin{cases} -\lambda_x(T) \frac{\partial T}{\partial x} (x = 0) = \varphi_0 \\ -\lambda_y(T) \frac{\partial T}{\partial y} (y = 0) = \varphi_0 \end{cases} & \quad \begin{cases} -\lambda_x(T) \frac{\partial T}{\partial x} (x = L_x) = 0 \\ -\lambda_y(T) \frac{\partial T}{\partial y} (y = L_y) = 0 \end{cases} \quad (9)
 \end{aligned}$$

Dans la gamme de température considérée, les propriétés thermophysiques du matériau dépendent linéairement de la température:

$$\begin{cases} \lambda_x(T) = \lambda_{x0} + \lambda_{x1}T \\ \lambda_y(T) = \lambda_{y0} + \lambda_{y1}T \\ C(T) = C_0 + C_1T \end{cases} \quad (10)$$

L'estimation de paramètres portera sur l'estimation du vecteur $\beta = (\lambda_{x0}; \lambda_{x1}; \lambda_{y0}; \lambda_{y1}; C_0; C_1)$

La conception d'expérience consiste ici à déterminer la position optimale de 3 thermocouples TC₁, TC₂ et TC₃ c'est à dire celle qui maximise le critère D. L'optimisation des paramètres de l'expérience $P = (X_{TC1}; Y_{TC1}; X_{TC2}; Y_{TC2}; X_{TC3}; Y_{TC3})$ nécessite à ce stade de fixer les valeurs des paramètres β avec une approximation β^0 des paramètres réels β^r inconnus en pratique:

	Paramètres approximés β^0	Paramètres réels β^r
$\lambda_x(T)$	$0,5 + 0,1 \cdot 10^{-3} T$	$0,608 + 0,13 \cdot 10^{-3} T$
$\lambda_y(T)$	$5,0 + 6,0 \cdot 10^{-3} T$	$4,75 + 7,3 \cdot 10^{-3} T$
$C(T)$	$(1,8 + 3,0 \cdot 10^{-3} T) \cdot 10^6$	$(1,7 + 2,61 \cdot 10^{-3} T) \cdot 10^6$

Tableau 1: Valeur des paramètres estimés et réels

Introduisons $(\sigma_{x0}, \sigma_{x1}, \sigma_{y0}, \sigma_{y1}, \sigma_0, \sigma_1)$ les écarts-types de l'erreur d'estimation sur chaque paramètre et σ_m le bruit de mesure. Nous présentons dans le tableau 2 l'ensemble des résultats obtenus comprenant les positions optimales des capteurs, les écarts types et la valeur du critère D correspondants.

Paramètres		Unités/ Facteurs	3 thermocouples : 3TCs			2 TCs	4 TCs
			Sawaf et al. [3]	Optimale $\beta = \beta^0$	Réelle $\beta = \beta^r$		
$(X_{TC1}; Y_{TC1})$	cm	0; 0	0,25; 1,75	0,25; 1,75	0,25; 0,00	0,00; 2,00	
$(X_{TC2}; Y_{TC2})$	cm	2; 0	0,50; 0,00	0,50; 0,00	0,00; 4,25	0,00; 0,00	
$(X_{TC3}; Y_{TC3})$	cm	0; 2	0,00; 0,75	0,00; 0,75	-	0,50; 0,00	
$(X_{TC4}; Y_{TC4})$	cm	-	-	-	-	0,25; 1,75	
Critère D		10^{25}	12	1420	675	0,157	35650
Critère E		10^3	61	15	12	527	8,6
Erreurs relatives	$\sigma_{x0}/\lambda_{x0}^0$	%	$1,5 \cdot \sigma_m$	$0,70 \cdot \sigma_m$	$0,74 \cdot \sigma_m$	$1,7 \cdot \sigma_m$	$0,51 \cdot \sigma_m$
	$\sigma_{x1}/\lambda_{x1}^0$	%	$61 \cdot \sigma_m$	$16 \cdot \sigma_m$	$16 \cdot \sigma_m$	$87 \cdot \sigma_m$	$13 \cdot \sigma_m$
	$\sigma_{y0}/\lambda_{y0}^0$	%	$1,3 \cdot \sigma_m$	$1,5 \cdot \sigma_m$	$1,6 \cdot \sigma_m$	$6,0 \cdot \sigma_m$	$1,1 \cdot \sigma_m$
	$\sigma_{y1}/\lambda_{y1}^0$	%	$5,9 \cdot \sigma_m$	$9,1 \cdot \sigma_m$	$7,2 \cdot \sigma_m$	$54 \cdot \sigma_m$	$5,1 \cdot \sigma_m$
	σ_0/C_0^0	%	$1,6 \cdot \sigma_m$	$0,43 \cdot \sigma_m$	$0,44 \cdot \sigma_m$	$2,2 \cdot \sigma_m$	$0,4 \cdot \sigma_m$
	σ_1/C_1^0	%	$16 \cdot \sigma_m$	$2,2 \cdot \sigma_m$	$2,5 \cdot \sigma_m$	$17 \cdot \sigma_m$	$2,0 \cdot \sigma_m$

Tableau 2: Expériences optimales suivant le nombre de thermocouples et le critère utilisé

La colonne « optimale » (en gris sur la figure) permet de voir l'amélioration des résultats par rapport aux 3 positions utilisées par Sawaf et al. [3]. Pour cette position optimale, les écarts types, calculés avec les paramètres réels β^r (colonne « réelle »), restent voisins de ceux obtenus avec β^0 . Notons que le critère D varie d'un facteur 2 selon que l'on utilise β^0 ou β^r , mais ce résultat ne se « propage pas » aussi fortement sur les écarts types.

Nous montrons également l'étude faite avec 2 thermocouples où l'on peut voir la dégradation de l'information (mais cependant la faisabilité de l'estimation) par rapport au cas à 3 thermocouples. Enfin, une étude avec 4 thermocouples montre une amélioration légère de la qualité des résultats.

A titre indicatif, la valeur du critère E pour chaque cas est présentée. On constate qu'en général, une amélioration du critère D engendre une amélioration du critère E. Cependant, ceci n'est pas systématique : si on compare la situation « optimale » à la situation « réelle », le critère E s'améliore alors que le critère D se dégrade.

6. Conclusion

Une méthode de conception optimale d'expérience utilisant des algorithmes génétiques a été développée afin d'anticiper la meilleure façon d'implanter des thermocouples sur une expérimentation, en vue de l'estimation de paramètres thermophysiques. Par rapport à une étude préalable, on a mis en évidence qu'une implantation différente de 3 thermocouples peut apporter une amélioration significative sur la précision théorique des paramètres estimés.

Il est nécessaire de mener la conception optimale de l'expérience d'après une valeur a priori β^0 de la solution β^r . Le travail d'estimation de paramètres intervient ensuite. Après l'identification des paramètres, il faut évidemment recalculer la matrice de covariance sur l'optimum trouvé. La conception optimale est d'autant plus efficace que les nouveaux écart types calculés sont du même ordre de grandeur que dans la phase de conception.

L'utilisation de méthodes globales, telles que les algorithmes génétiques, doit permettre également d'intégrer dans le critère d'optimalité, l'influence d'autres paramètres tels que la forme des excitations thermiques, la durée de l'expérience, la fréquence d'acquisition des mesures, sans que le nombre de paramètres soit un obstacle à l'optimisation. Par rapport à des méthodes classiques de descente, ce type de méthodes est simple à mettre en œuvre (pas de calcul de gradient, ni de Hessien) et elle permet d'éviter (le plus possible) de tomber dans des minima locaux. Par contre, elle nécessite de longs temps de calcul, mais qui sont parfaitement compatibles avec le développement des ordinateurs et du calcul parallèle.

Références

- [1] F. Mzali, L. Sassi, A. Jemni, S. BenNasrallah, D. Petit. Optimal experiment design for the identification of thermo-physical properties of orthotropic solids. *Inverse problems in Engineering*. Avril 2004, Vol. 12, 2, pp. 193-209
- [2] K. J. Dowding, J. V. Beck, B. F. Blackwell. Estimation of directional-dependent thermal properties in a carbon-carbon composite. *Int. J. of Heat Mass Transfer*. 1996, Vol. 39, 15, pp. 3157-3164
- [3] B. Sawaf, M. N. Özisik, Y. Jarny. An inverse analysis to estimate linearly temperature dependent thermal conductivity components and heat capacity of an orthotropic medium. *International Journal of Heat Mass Transfer*. 1995, Vol. 38, 16, pp. 3005-3010
- [4] Sun K. Kim, Bup Sung Jung, Hee June Kim, Woo Il Lee. Inverse estimation of thermophysical properties for anisotropic composite. *Experimental Thermal and Fluid Science*. 2003, Vol. 27, pp. 697-704
- [5] K. J. Dowding, J. V. Beck, B. F. Blackwell. Estimating temperature-dependent thermal properties. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 1999, Vol. 13, 3
- [6] R.D. Sweeting, X.L. Liu. Measurement of thermal conductivity for fibre-reinforced composite. *Composites Part A: applied science and manufacturing*. 2004, Vol. 35
- [7] R. Taktak, J. V. Beck, E. P. Scott. Optimal experimental design for estimating thermal properties of composite materials. *Int. J. of Heat Mass Transfer*. 1993, Vol. 36, 12, pp. 2977-2986
- [8] *Design of experiments to estimate temperature dependent thermal properties*. K. J. Dowding, B. F. Blackwell. Port Ludlow, WA, USA, 1999. Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice. 3rd Int. Conference on Inverse Problems in Engineering.
- [9] M. Necati Özisik, Helcio R. B. Orlande. *Inverse heat transfer*. New York : Taylor & Francis, 2000. pp. 14-15,30-31,97-98,102. 1-56032-838-X
- [10] A. F. Emery, T. D. Fadale. Design of Experiments Using Uncertainty Information. *Journal of Heat Transfer*. 1996, Vol. 118, 3, pp. 532-538
- [11] J. Dréo, A. Pérowski, P. Siarry, E. Taillard. *Métaheuristiques pour l'optimisation difficile*. Paris : Editions Eyrolles, 2003. p. 70. 2-212-11368-4
- [12] Renders, J-M. *Algorithmes génétiques et réseaux de neurones*. Ed. Hermès, 1995. 2-86601-467-7
- [13] R. C. Aster, B. Borchers, C. H. Thurber. *Parameter estimation and inverse problems*. : Elsevier Academic Press, 2005. pp. 21,24. 0-12-065604-3