

TP N° 62

Plan d'expériences relatif à un mélange

L'objet de ce TP est d'optimiser la planification d'expériences dont le domaine expérimental est soumis à des contraintes multiples, puis d'exploiter leurs résultats afin d'obtenir leurs conditions optimales.

Combinant un plan d'expériences et de mélange, il constitue un exemple d'application du logiciel d'optimisation Gencab.

Un nouveau carburant doit être développé à partir de 3 constituants mélangés à une certaine température (X_1 entre 20 et 50°) dans des proportions inconnues (X_2, X_3, X_4).

Le mélange est contraint par des haute et basse teneurs interdites, pour des raisons de sécurité, et des contraintes relationnelles, résultant d'une analyse des équations chimiques, doivent être respectées. Ces dernières sont de type rapport ou addition constant de certaines proportions.

$$X_2 \geq 0,1 \quad X_3 \leq 0,9 \quad 0,5 \leq X_2/X_4 \leq 1,5 \quad 0,5 \leq X_3+X_4 \leq 0,8 \quad (1 = 100\%)$$

1 – Faire le choix d'un modèle linéaire, en se limitant à une dizaine d'expériences pour des raisons de coût, et représenter graphiquement les diverses contraintes.

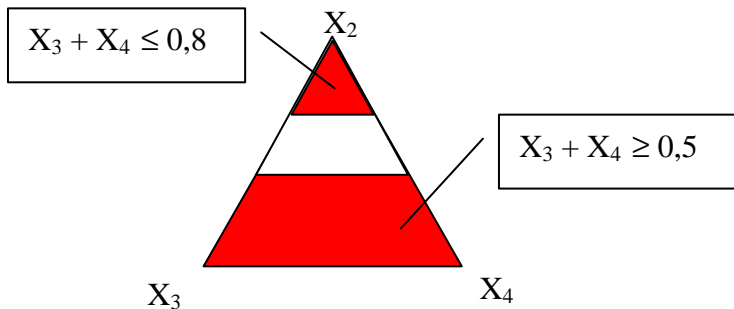
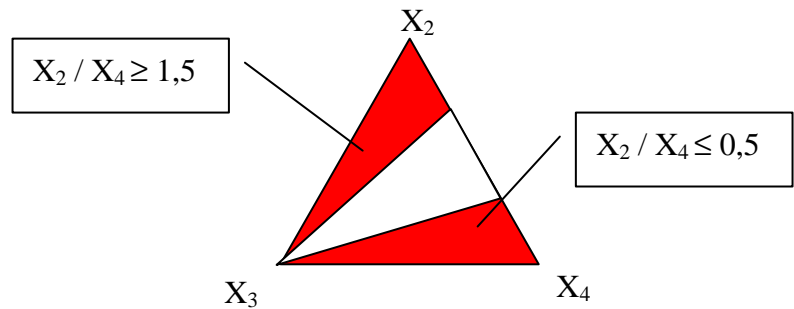
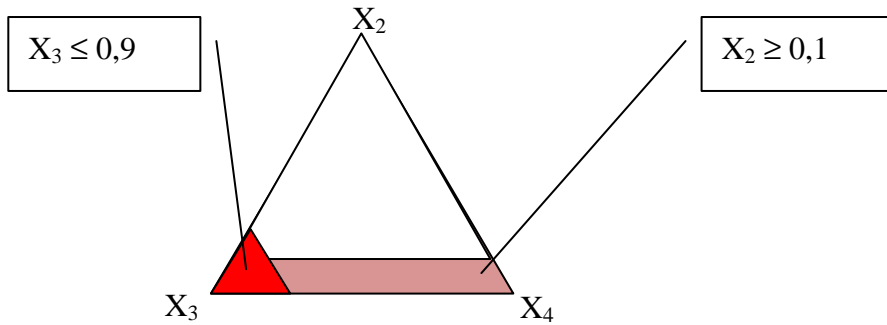
2 – Optimiser la planification des expériences par la méthode D-optimale.

3 – Trouver les conditions optimales, à partir de résultats des expériences.

1 – Choix du modèle et représentation graphique des contraintes

La limitation à une dizaine d'expériences limite la complexité du modèle à une dizaine de paramètres, tel qu'un modèle linéaire à 4 facteurs du second degré, limité aux termes croisés et sans valeur a_0 ($4 + C_4^2 = 10$).

En considérant que les produits à l'état pur sont les sommets d'un triangle équilatéral, les contraintes de mélange entre les 3 constituants peuvent se représenter graphiquement de la manière suivante :



Par ailleurs, $X_4 = 1 - (X_2 + X_3) \geq 0$

2 – Planification optimale des essais

La méthode D-optimale consiste à maximiser le déterminant de la matrice d'information de Fisher (inverse de la matrice de variance covariance) afin de minimiser la variance des estimateurs et donc de maximiser la précision des résultats.

Pour un modèle linéaire, la matrice de Fisher a pour expression $1/\sigma^2 X^T X$ en considérant un bruit de mesure uniforme (voir TP n°61).

Mise en œuvre par l'outil Gencab ci-après, cette méthode permet de définir les conditions optimales des dix essais en tenant compte des diverses contraintes.

Plan d'expériences - Mélange

	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄				
min :	20	0	0	0				
max :	50	1	1	1				

Y	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄						
1	23	0,299	0,161	0,54	6,877	3,707	12,41	0,048	0,161	0,087
	23,57	0,277	0,52	0,202	6,532	12,26	4,77	0,144	0,056	0,105
	37,51	0,368	0,008	0,625	13,79	0,295	23,42	0,003	0,23	0,005
	28,8	0,291	0,359	0,35	8,377	10,34	10,08	0,104	0,102	0,126
	21,08	0,5	0,158	0,342	10,53	3,335	7,206	0,079	0,171	0,054
	24,29	0,227	0,477	0,295	5,516	11,6	7,177	0,108	0,067	0,141
	47,31	0,23	0,602	0,168	10,89	28,47	7,948	0,139	0,039	0,101
	41,71	0,205	0,438	0,357	8,532	18,28	14,9	0,09	0,073	0,157
	33,32	0,402	0,079	0,52	13,38	2,621	17,32	0,032	0,209	0,041
	39,42	0,498	0,167	0,335	19,61	6,587	13,22	0,083	0,167	0,056
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0
				1	0	0	0	0	0	0

min :	0,2	0,17
max :	0,6	

Planificati
Exploitati

Taux de confiance :	60%
Bruit (sigma) :	0,1
Déterminant (Fisher) :	1,3222E-17

X ₂ /X ₄	X ₃ +X ₄
0,554	0,701
1,369	0,723
0,589	0,632
0,831	0,709
1,462	0,5
0,769	0,773
1,37	0,77
0,573	0,795
0,772	0,598
1,484	0,502

	0,55	0,5
	1,48	0,8

$$X_2 \geq 0,1 \quad X_3 \leq 0,9 \quad X_4 = 1 - (X_2 + X_3) \geq 0 \quad 0,5 \leq X_2/X_4 \leq 1,5 \quad 0,5 \leq X_3 + X_4 \leq 0,8$$



Plannification optimale

Fichier Excel disponible par double clic sur l'icône :

3 – Recherche des conditions optimales

Après avoir acquis les résultats des expériences, l'optimisation consiste à rechercher le résultat optimal (valeur max dans cet exemple) respectant les contraintes. Celui-ci est obtenu à partir du modèle linéaire dont la résolution s'effectue de manière analytique par résolution du système d'équations linéaires : $P = (X^T X)^{-1} X^T Y$ (voir TP n° 61).

Dans l'exemple traité ci-après, le résultat est donné avec un intervalle de confiance en considérant un bruit de mesure d'environ 1% de la plus grande valeur.

Ce résultat obtenu à partir du modèle s'avère moins bon que celui de certaines des expériences réalisées (192,9 au lieu de 242). Une nouvelle expérience menée dans les conditions optimales trouvées pourrait cependant donner un meilleur résultat car ses conditions s'avèrent relativement proches de celles de l'expérience ayant donné jusqu'alors le meilleur résultat.

Plan d'expériences - Mélange

min :	20	0	0	0
max :	50	1	1	1

Planificati

Exploitati

Taux de confiance :

Bruit (sigma) :

Déterminant (Fisher) :

Y	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄
1 118	23	0,3	0,16	0,54
2 123	23,6	0,28	0,52	0,2
3 192	37,5	0,37	0,01	0,62
4 152	28,8	0,29	0,36	0,35
5 110	21,1	0,5	0,16	0,34
6 126	24,3	0,23	0,48	0,3
7 242	47,3	0,23	0,6	0,17
8 213	41,7	0,2	0,44	0,36
9 172	33,3	0,4	0,08	0,52
10 200	39,4	0,5	0,17	0,34

P	min	max
a ₁ : -1,031	#####	2E+05
a ₂ : -60	-76,2	-43,9
a ₃ : 25,52	16,68	34,36
a ₄ : -75,6	-88,7	-62,5
a ₅ : 1,298	#####	2E+05
a ₆ : 2,179	#####	2E+05
a ₇ : 3,302	#####	2E+05
a ₈ : 190,2	150,5	229,9
a ₉ : 304,5	247,4	361,6
a ₁₀ : 56,89	42,46	71,31

X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	y	Var(y)	min	max		
50	0,2	0,594	0,206	10	29,69	10,31	0,119	0,041	0,122

X₂/X₄ : 0,97 X₃+X₄ : 0,8

Var(P)

4E+11	7,001	1,047	5,944	#####	#####	#####	-11,2	-26,7	-5,55
-3,5	3691	628,1	2317	-2,16	-0,21	8,848	-5614	#####	-2503
-0,73	628,1	1103	300,4	10,2	-5,97	-8,52	-4412	-1378	-323
-2,97	2317	300,4	2415	12,38	0,083	-5,6	-3345	-9806	-2238
#####	-12,7	8,422	3,465	4E+11	4E+11	4E+11	-23,8	19,2	5,399
#####	-10,7	-7,75	-8,83	4E+11	4E+11	4E+11	32,67	41,89	8,759
#####	-1,66	-10,3	-14,5	4E+11	4E+11	4E+11	50,13	24,1	4,817
5,129	-5614	-4412	-3345	-40,1	16,38	33,85	22251	15877	2654
13,24	#####	-1378	-9806	-20,8	1,908	-15,9	15877	46025	9880
3,031	-2503	-323	-2238	-3,18	0,175	-3,77	2654	9880	2937



Exploitation

Fichier Excel disponible par double clic sur l'icône

: