

## TP N° 65

# Formulation d'un explosif par plan d'expériences

Au moyen de plans d'expériences, ce TP recherche un compromis entre efficacité et sécurité dans la formulation d'un explosif performant mais peu sensible.

Il reprend l'exemple traité dans l'article cité en référence<sup>1</sup>, rappelé dans le tableau ci-dessous.

Celui-ci donne les résultats de 12 expériences, en termes de vitesse de détonation (D) et critère de sensibilité (CS), réalisées en jouant sur 4 facteurs normés entre -1 et 1.

		Modalités :				2	
		min :	0%	4%	8%	TNMA	
		max :	50%	10%	20%	TNT	
D	CS	X <sub>0</sub>	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	
1	7248	100,6	1	0	0	0	-1
2	7141	104,4	1	0	0	0	1
3	7241	93,3	1	1	0	0	1
4	6999	84,3	1	0,5	0,866	0	-1
5	7202	101,7	1	0,5	0,289	0,816	1
6	7206	112	1	-1	0	0	-1
7	7421	122,3	1	-0,5	-0,866	0	1
8	7174	106,5	1	-0,5	-0,289	-0,816	1
9	7516	106,5	1	0,5	-0,866	0	-1
10	6995	86,8	1	0	0,577	-0,816	-1
11	6892	98,6	1	-0,5	0,866	0	1
12	7501	116,3	1	0	-0,577	0,816	-1

$$X = (2x - \max - \min) / (\max - \min)$$

X1 : proportion de HMX/NTO  
 X2 : proportion de cire  
 X3 : proportion d'aluminium  
 X3 : remplacement du TNT par du TNMA

### 1 – Trouver les courbes de réponse de la vitesse de détonation (D) et du critère de sensibilité (CS).

Les courbes seront ici modélisées par des polynômes de degré 2 sans tenir compte des termes croisés de degré 2 et les résultats seront donnés avec un intervalle de confiance à 60 % en considérant que l'écart type des erreurs des mesures est égale à 10 fois leur résolution.

### 2 – Trouver la composition optimale présentant une sensibilité inférieure à 90.

### 3 – Montrer que la planification qui a été choisie pour les essais n'est pas optimale en termes de précision des résultats.

<sup>1</sup> M. Vaullerin, P. Morand, A. Espagnacq and H. L. Morin-Allory, *Analisis* 26, 291-293 (1998) EDP Sciences, Wiley-VCH 1998 : <http://analisi.edpsciences.org/articles/analisi/pdf/1998/08/s070898.pdf>

# 1 - Courbes de réponse pour la vitesse de détonation (D) et le critère de sensibilité (CS)

La normalisation préalable des facteurs n'était pas obligatoire mais est issue de l'exemple traité.

Le modèle polynomial choisi est de type  $y = p_0 + p_1 X_1 + p_2 X_2 + p_3 X_3 + p_4 X_4 + p_5 X_1^2 + p_6 X_2^2 + p_7 X_3^2 + \epsilon$ .

Le terme  $p_8$  est nul puisque  $X_4^2 = 1$ .

La figure 1 donne la courbe de réponse pour la détonation et la figure 2 celle du critère de sensibilité après traitement par l'outil Gencab (la ligne  $X_4^2$  a été préalablement supprimée et le nom Nb\_facteurs a été réduit de 8 à 7).

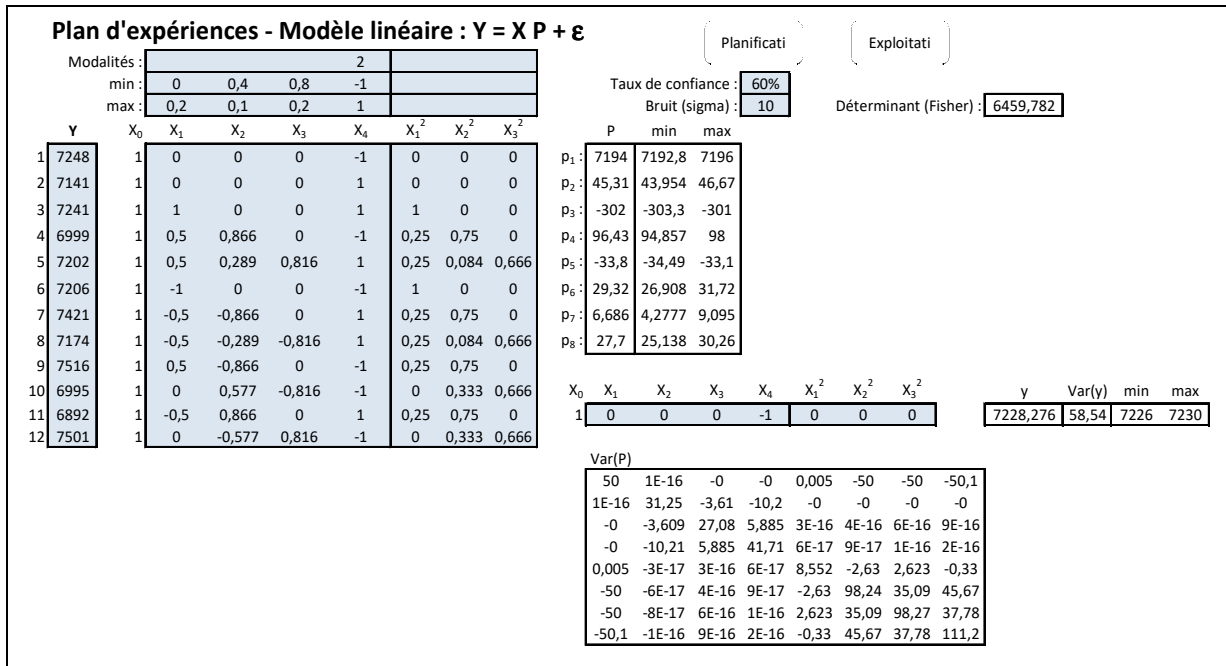


Figure 1 : Courbe de réponse de la détonation

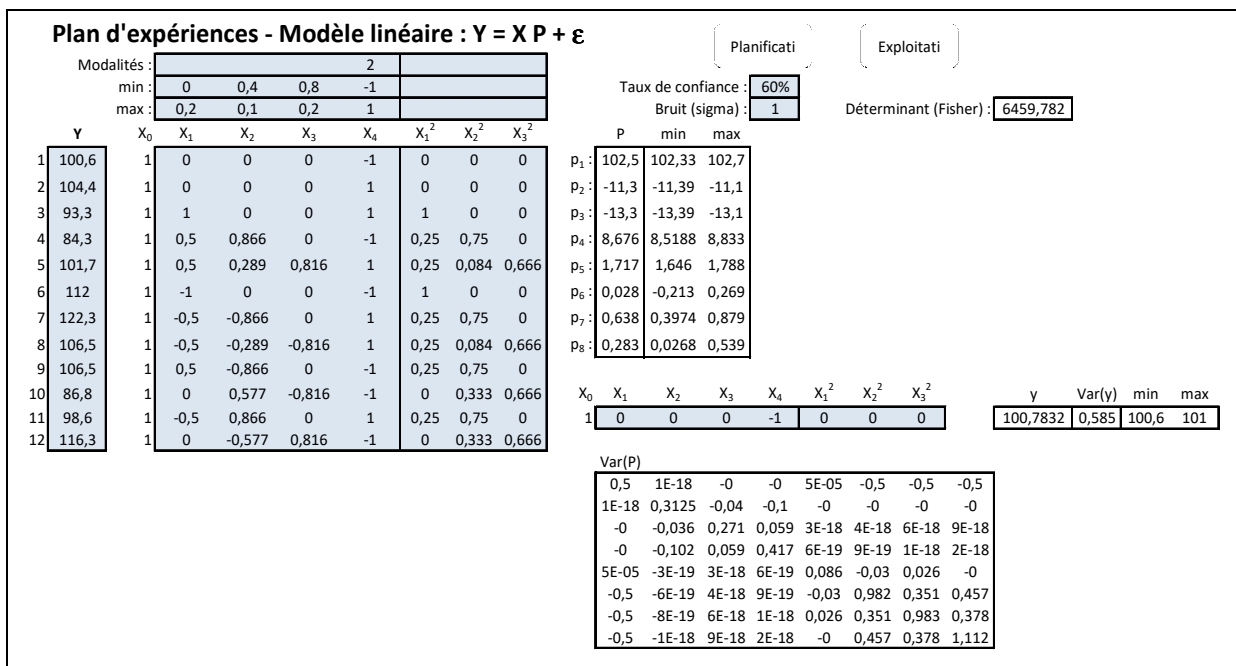


Figure 2 : Courbe de réponse du critère de sensibilité

Les coefficients du polynôme sont calculés par résolution du système d'équations linéaires :

$$P = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Cette estimation est de type moindres carrés.

La matrice de variance-covariance des coefficients (inverse de la matrice de Fisher) a pour expression :

$$\sigma^2 (X^T X)^{-1} \text{ avec } \sigma \text{ l'écart type des erreurs de mesure}$$

Des intervalles de confiance sur les paramètres et sur le résultat sont alors calculés par la méthode de Wald (le modèle polynomial choisi est supposé parfait).

## 2 – Composition optimale présentant une sensibilité inférieure à 90

Présentée en figure 4, la formulation optimale est obtenue par maximisation de la détonation sous contrainte de sensibilité, à partir des expressions polynomiales de la détonation et du critère de sensibilité obtenues précédemment. La tenue du critère de sensibilité ne grève ici que de 4 % la performance maximale de détonation.

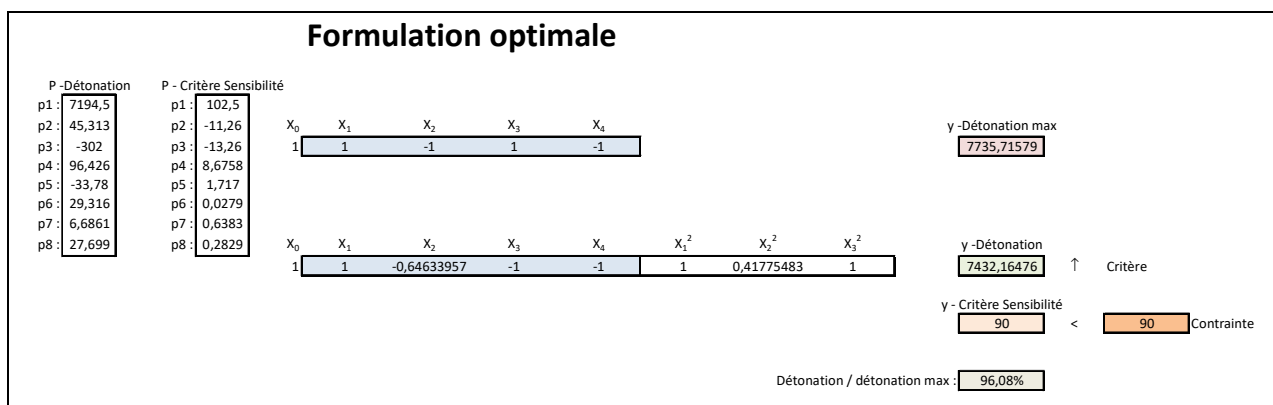


Figure 4 : Formulation optimale

## 3 – Planification optimale des essais

La figure 5 présente une planification d'essais obtenue par la méthode D-optimale.

Cette méthode cherche à estimer les paramètres du modèle avec la plus grande précision en maximisant le déterminant de la matrice de Fisher afin de minimiser la variance des estimateurs.

La valeur obtenue du déterminant est alors sensiblement supérieure à celle des essais réalisés (988088 au lieu de 6459), qui ont été apparemment définis au moyen de l'algorithme de Fedorov<sup>2</sup>.

La planification peut être également optimisée selon un autre critère. Ainsi, la méthode de maximisation des distances minimales présentée en figure 6 cherche à rendre le modèle robuste aux diverses configurations de valeurs des facteurs. Elle consiste à occuper l'espace des configurations possibles de manière homogène.

<sup>2</sup> Fedorov, V. V. Theory of Optimal Experiments, Traduction anglaise de Studden, W. J.; Klimo, M.; Academic Press, New York, 1972.

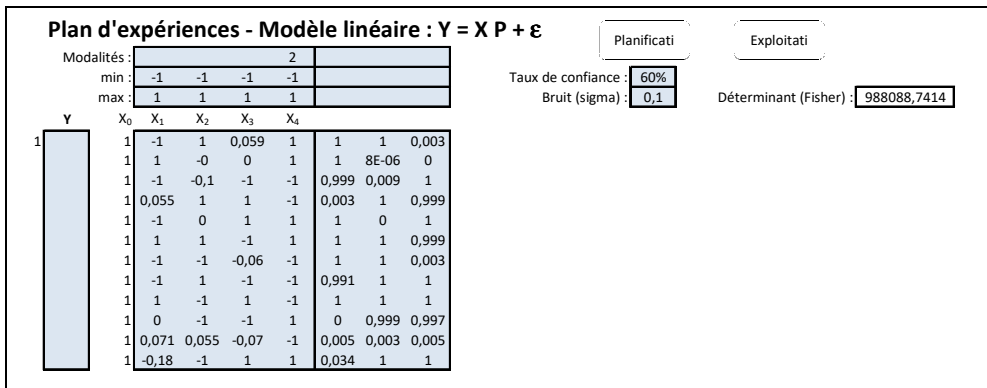


Figure 5 : Planification optimale (D-optimalité)

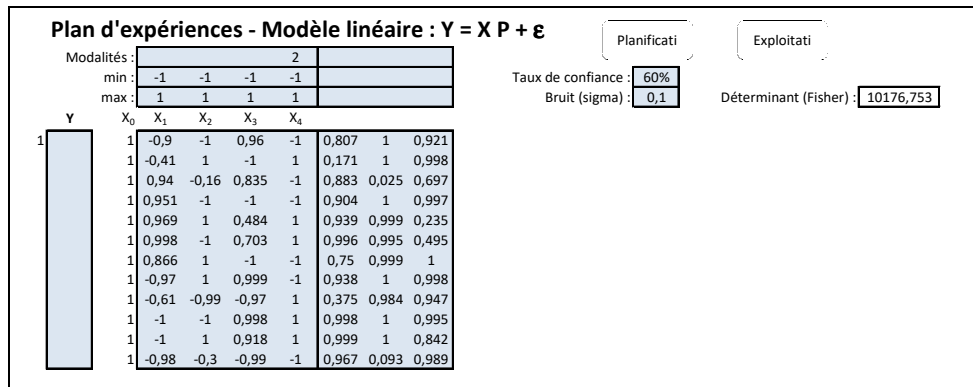


Figure 6 : Planification optimale (maximisation des distances minimales)