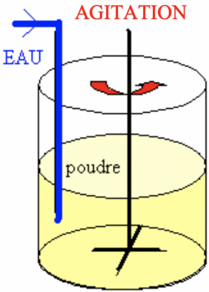
Les plans d'expériences classiques

Celine Helbert

Plan

On s'intéresse à la fabrication de granules de type homéopathique. Le procédé s'effectue à partir d'une poudre qu'on humidifie. L'agitation de la pate va créer des agglomérats. Sous l'effet de l'humidité, de l'agitation et de la température au sein du granulateur, il se forme des agglomérats appelés granules. Le temps de repos permet aux agglomérats de finir leur grossissement. A la fin du processus, on vide le récipient et on récupère la distribution en taille des granules. On s'intéressera dans ce qui suit à la taille moyenne des granules.



Le principe de fabrication repose donc sur les éléments suivants :

- taux de remplissage du granulateur (quantité de poudre introduite initialement, en %),
- débit d'eau à introduire dans le granulateur (en $mm^3 s^{-1}$),
- le temps de mouillage (en s),
- la température de maintien (C),
- la vitesse d'agitation de la pale (en $toursmn^{-1}$),
- le temps d'agitation (en s),
- le temps de repos (en s).

L'impact de ces différents **facteurs** n'a jamais été étudié. Les valeurs prises habituellement sont données dans le tableau ci-dessous. Les résultats en terme de granulométrie sont bien différents selon les conditions opératoires utilisées.

Facteurs	min	moyenne	max	unité
débit d'eau	30	60	90	mm3 s-1
température de maintien	20	25	30	°C
taux de remplissage	0,74	0,78	0,82	%
temps de mouillage	200	500	800	s
temps de repos	0	200	400	s
vitesse agitation	148	248	348	tours mn-1
temps d'agitation	3000	4000	5000	s

Problématique :

- quels sont les paramètres les plus influents dans la plage de variation donnée ?
- comment calibrer le processus de fabrication de sorte que la taille moyenne des granules $\mu_0 = 2400\mu m$?

Problématique :

- quels sont les paramètres les plus influents dans la plage de variation donnée ?
- comment calibrer le processus de fabrication de sorte que la taille moyenne des granules $\mu_0 = 2400 \mu m$?

Utiliser des essais pour répondre à la problématique : quels essais ?

Dans cet exemple les **plans d'expériences** vont permettre de :

- Identifier les facteurs réellement influents donc réduire la taille du domaine d'exploration (**Plans de criblage**).
- Prédire la taille moyenne sur l'ensemble du domaine (**Plans de surface de réponse**). On peut ensuite optimiser (trouver les conditions telles que la sortie soit minimale) ou inverser (trouver les conditions telles que la sortie respecte une contrainte - ici une contrainte d'égalité).

Dans cet exemple les **plans d'expériences** vont permettre de :

- Identifier les facteurs réellement influents donc réduire la taille du domaine d'exploration (**Plans de criblage**).
- Prédire la taille moyenne sur l'ensemble du domaine (**Plans de surface de réponse**). On peut ensuite optimiser (trouver les conditions telles que la sortie soit minimale) ou inverser (trouver les conditions telles que la sortie respecte une contrainte - ici une contrainte d'égalité).

On ne parle de plans d'expériences que dans le contexte où les facteurs sont contrôlés et où le nombre d'essais est limité.

Plan

Objectif de ces plans :

- Détecter les facteurs influents (criblage / screening) parmi un grand nombre de facteurs,
- Hierarchiser les facteurs du plus influent au moins influent.

Points importants :

- Hypothèse : on se place dans le cas d'**un modèle de régression de degré 1 avec ou sans interaction**,
- On souhaite construire un plan tel qu'il n'y ait pas de problème d'interprétation des tests de students (plans orthogonaux) $=>$ les effets des facteurs seront estimés indépendamment les uns des autres.

Exemple

On veut construire un plan pour estimer le modèle à 1 facteur quantitatif A : $Y = \beta_0 + \beta_1 A + \epsilon$, A appartenant à $[-1, 1]$ à n expériences (n pair). Où choisir ces expériences de sorte que :

1. les paramètres du modèle soient estimés sans corrélation
2. la variance de l'effet du facteur A soit minimale.

Exemple

On veut construire un plan à 4 expériences pour étudier l'influence de 2 facteurs quantitatifs appartenant à $[-1, 1]$. Où choisir ces expériences ?

Les plans d'expérience factoriels complets ou fractionnaires permettent de traiter un nombre p quelconque de facteurs à 2 niveaux (facteur quantitatif) ou 2 modalités (facteur qualitatif).

Sans contraintes sur le domaine, les expériences à réaliser le sont pour les niveaux -1 et 1. Pour avoir l'orthogonalité, n doit être pair (orthogonalité avec la première colonne) et le plan doit être équilibré.

Il consiste à effectuer les 2^p expériences possibles. Il est orthogonal. La matrice d'expériences pour le plan complet avec $p = 3$ est la suivante.

essai	A	B	C
1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1
3	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1
4	-1	-1	+1
6	+1	-1	+1
7	-1	+1	+1
8	+1	+1	+1

La matrice **X** s'obtient en lui rajoutant la colonne de 1.
On peut remarquer que le modèle ne dépend que de 4 paramètres plus la variance et que l'on dispose de 8 essais. Cela permet d'estimer les facteurs d'interaction A*B, A*C et B*C. La matrice associée à ce modèle s'obtient en rajoutant les colonnes obtenues par produit.

essai	A	B	C	A*B	A*C	B*C
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1
2	+1	-1	-1	-1	-1	+1
3	-1	+1	-1	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1	+1	-1	-1
4	-1	-1	+1	+1	-1	-1
6	+1	-1	+1	-1	+1	-1
7	-1	+1	+1	-1	-1	+1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1

On ne peut pas rajouter l'interaction triple car il n'y aura plus assez d'essais pour estimer tous les paramètres.

Pour 4 facteurs, le plan complet demande 16 essais. Mais puisque la colonne A*B du plan à 3 facteurs est orthogonale à toutes les autres, on peut lui attribuer un autre facteur D. On perd par contre la possibilité d'estimer l'interaction A*B car elle est confondue avec D. On obtient un plan 2^{4-1}. D'autres choix sont possibles.

On peut généraliser

Définition

On appellera plan 2^{p-q} un plan comprenant 2^{p-q} unités pour p facteurs à deux niveaux. On peut construire un tel plan en construisant un plan factoriel complet pour $(p-q)$ facteurs et on définit les autres facteurs en fonction des $(p-q)$ par produit uniquement.
On appelle clef du plan l'ensemble de q relations que l'on exprime sous la forme 1=... (F=A.B, s'écrit F.A.B=1).

Exemple

Considérons le plan 2^{5-2} pour 5 facteurs A,B,C,D et E avec A,B,C comme facteur de base et la clef : D=AB et E=AC.

$$1 = ADB = ACE = DCBE$$

Il y a 4 effets confondus. L'alias de A est

$$A = DB = CE = ABCDE$$

Il y a confusion entre le facteur A et les interactions D*B et C*E.

Exemple

Un plan d'expériences a été réalisé selon la matrice suivante

essai	A	B	C	D	Y		
1	-1	-1	-1	-1	45	1	
2	+1	-1	-1	1	100	-1	-1
3	-1	+1	-1	1	45	1	-1
4	+1	+1	-1	-1	65	-1	
4	-1	-1	+1	1	75	-1	
6	+1	-1	+1	-1	60	1	-1
7	-1	+1	+1	-1	80	-1	-1
8	+1	+1	+1	1	96	1	

On calcule les coefficients du modèle qui sont égaux à la différence des moyennes de la réponse entre le niveau 1 et -1 divisé par 2 pour chaque facteur ou interaction. (AB est confondue avec CD, AC avec BD et AD avec BC)

moyenne	=	70,75
A	=	9,5
B	=	0.75
C	=	7
D	=	8,25
AB+CD	=	-0.5
AC+BD	=	-9,25
AD+BC	=	9.5

On ne peut effectuer ici de test d'analyse de la variance car il n'y a pas assez de degrés de liberté pour estimer la variance résiduelle. Par contre le facteur B est sans effet ainsi que les interactions AB et CD et on enlèvera les interactions BC et BD qui ne peuvent être séparées de AC et AD. On réestime le modèle suivant :

$$Y = \beta_0 + \beta_A A + \beta_C C + \beta_D D + \beta_{AC} AC + \beta_{AD} AD + \epsilon$$

ABC · AC · B

source de variation	Somme des carrés	DF	Proba
A	772	1	0.0045
C	392	1	0.0082
D	$544,5$	1	0.0059
AC	$684,5$	1	0.0047
AD	722	1	0.0045
Résiduelle	$6,5$	2	
totale	$3071,5$	7	

Le modèle s'écrit
$Y = 70,75 + 9,5A + 7,0C + 8,25D - 9,25AC + 9,5AD$. Comme la matrice $\mathbf{X'X} = \mathbf{n} * \mathbf{I_n}$, les coefficients sont égaux à la somme algébrique des réponses expérimentales y_i affectées des signes de la colonne de la matrice X correspondant au facteur Xi divisé par le nombre d'expériences.

Définition

On appelle résolution du plan noté ρ l'entier

$$\rho = \inf\{\text{nombre de symbole des éléments de l'alias de } 1\}$$

Le plan de l'exemple précédent est de résolution III.

- Résolution III : certains effets principaux sont confondus avec des interactions "double" (produit de 2 facteurs).
- Résolution IV : un effet principal ne peut être confondu avec une interaction "double", mais certaines interactions "doubles" sont confondues entre elles.
- Résolution V : on peut poser un modèle avec toutes les interactions "doubles" et les effets principaux sans confusion.

Remarque : on supposera toujours que les interactions "triples" (produit de 3 facteurs) sont négligeables. Un effet principal (resp. une interaction) confondu(e) avec une interaction "triple" sera considéré(e) sans confusion.

A B C D ABC ABD

CD

Exercice 1

1. Est-ce possible de construire un plan 2^{6-2} de résolution IV ? Reste-il des interactions non aliasées ?
2. Mêmes questions pour un plan 2^{5-2}.
3. Quel est le nombre d’expériences minimal pour construire un plan de résolution IV à 7 facteurs ?

Exercice 2

On veut construire un plan pour 2 facteurs quantitatifs A et B appartenant à $[-2, 2]$ à 8 expériences : 4 en $(0, 0)$, 1 en $(-a, -b)$, 1 en $(-a, b)$, 1 en $(a, -b)$ et la dernière en (a, b). Comment choisir a et b de sorte que :

1. les paramètres soient estimés sans corrélation
2. la constante et les effets principaux soient estimés avec la même précision.

Exercice 3 On considère deux plans à deux facteurs quantitatifs A, B et à 4 expériences.

$P1 =$

A	B
-1	-1
-1	1
1	-1
1	1

et $P2 =$

A	B
0	-1
0	1
-1	0
1	0

.

On répète deux fois chaque expérience. Quel est le meilleur plan ? Pour quelle(s) raison(s) ?

Plan

L'objectif des plans de surfaces de réponses est de pouvoir prédire la réponse en vu d'une optimisation, d'une inversion ou d'une propagation d'incertitude. On remplace l'expérience par un modèle simple (régression linéaire de degré 2 par exemple). On choisit un plan d'expériences adaptés au modèle de degré 2. On réalise les essais en les points du plan et on estime le modèle de régression. On parle alors de **surface de réponse**. On travaille ensuite sur cette surface de réponse pour résoudre le problème posé (optimisation par exemple).

Exercice

On veut construire un plan pour 1 facteur quantitatif A appartenant à $[-1, 1]$. On souhaite estimer un modèle de degré 2.

1. Combien de paramètres y-a-t-il a estimer ? Cela conditionne le nombre d'essais à effectuer au minimum.
2. Est-ce possible d'estimer un modèle de degré 2 avec des expériences dupliquées en -1 et en 1 ?
3. On choisit de réaliser 3 expériences : 1 en -1, 1 en 1, 1 en a, $a \in [-1, 1]$. Comment choisir a pour une estimation la plus précise possible des paramètres ?

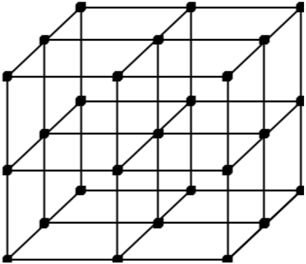
Exercice

On veut construire un plan pour 1 facteur quantitatif A appartenant à $[-1, 1]$. On souhaite estimer un modèle de degré 2.

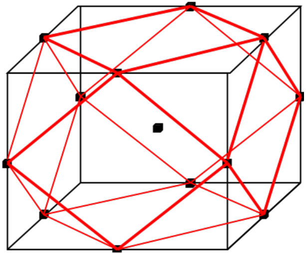
1. Combien de paramètres y-a-t-il a estimer ? Cela conditionne le nombre d'essais à effectuer au minimum.
2. Est-ce possible d'estimer un modèle de degré 2 avec des expériences dupliquées en -1 et en 1 ?
3. On choisit de réaliser 3 expériences : 1 en -1, 1 en 1, 1 en a, $a \in [-1, 1]$. Comment choisir a pour une estimation la plus précise possible des paramètres ?

=> Il faut donc des niveaux intermédiaires ...

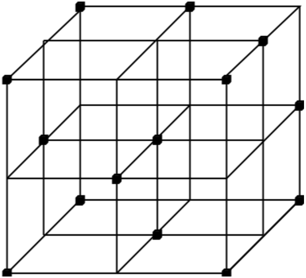
Le plan factoriel complet à $3^3 = 27$ expériences.



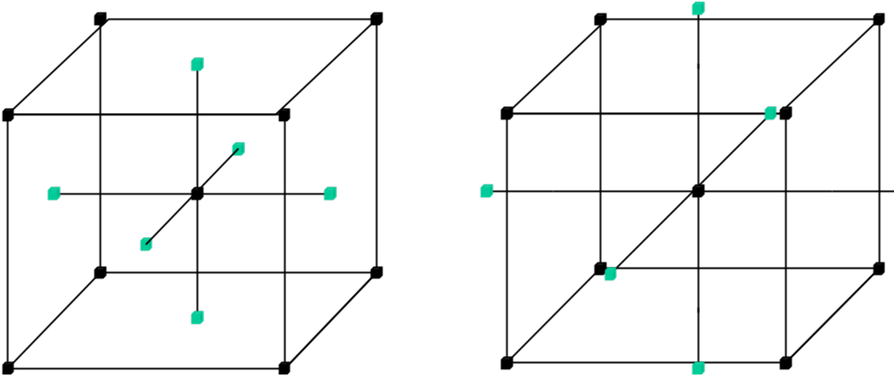
Le Box Benkhen à 13 expériences en $d = 3$.



Le plan de Hoke à 14 expériences en $d = 3$.



Le plan composite à 15 expériences en $d = 3$. Ce plan permet la séquentialité des études (criblage puis surface de réponse).



Une autre façon de choisir un plan d'expériences sachant un nombre d'essais (budget de l'étude) fixé est d'optimiser un certain critère. On travaille toujours sur l'estimation des paramètres du modèle :

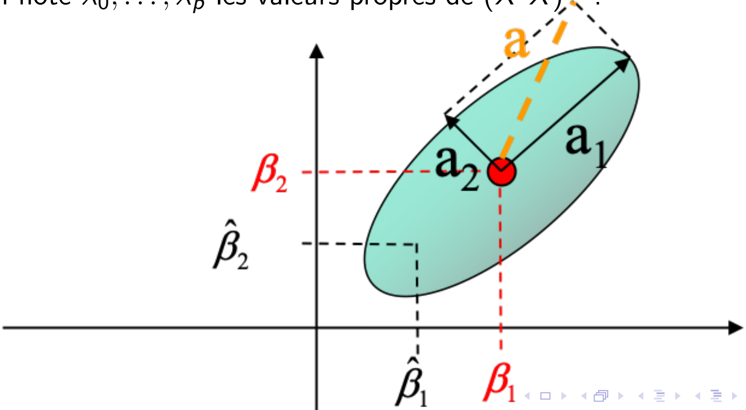
$$\hat{\beta} \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2 (X^t X)^{-1})$$

On note $\lambda_0, \ldots, \lambda_p$ les valeurs propres de $(X^t X)^{-1}$.

Une autre façon de choisir un plan d'expériences sachant un nombre d'essais (budget de l'étude) fixé est d'optimiser un certain critère. On travaille toujours sur l'estimation des paramètres du modèle :

$$\hat{\beta} \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2 (X^t X)^{-1})$$

On note $\lambda_0, \ldots, \lambda_p$ les valeurs propres de $(X^t X)^{-1}$.



Plusieurs critères existent pour minimiser $(X^tX)^{-1}$:

- **D-optimalité** Choisir X de sorte que le volume de l'ellipsoïde de confiance soit le plus petit possible, i.e. $\min det((X^tX)^{-1}) = \arg\min \lambda_0 \times ... \times \lambda_p$
- **E-optimalité** Choisir X de sorte que le plus grand axe de l'ellipsoïde de confiance soit le plus petit possible, i.e. $\min\{\max\{\lambda_0, \ldots \lambda_p\}\}$
- **A-optimalité** Choisir X de sorte que la somme des carrés des longueurs des axes de l'ellipsoïde de confiance soit la plus petite possible, i.e. $\min\{Tr((X^tX)^{-1})\} = \arg\min\{\lambda_0 + \cdots + \lambda_p\}\}$
- **G-optimalité** Choisir X de sorte que la variance de prédiction soit la plus petite possible, i.e. $\forall x, \min\{\mathbb{V}(\hat{y}(x))\} = \min\{\sigma^2 x^t (X^tX)^{-1} x\}\}$