

## PLAN D'EXPÉRIENCES POUR MODÈLE NON-LINÉAIRE DE CONNAISSANCE CALCULE AVEC NEURO PEX

### Minimisation du nombre d'essais dans l'industrie et au laboratoire

#### Enoncé du problème :

Soit à calculer un plan d'expériences et rechercher les points optimaux pour une estimation précise des paramètres du modèle de croissance cellulaire *Porphyridium* décrit de la manière suivante :

2 variables d'entrées avec leur domaine de variation :

$$E \text{ in } [0..500] \quad CIT \text{ in } [0..7]$$

4 paramètres avec une estimation initiale de leur valeur possible :

$$Mumx = 0,0451 \quad Kci = 20,96 \quad Ke = 32,25 \quad Kcl = 0,17$$

Forme algébrique du modèle postulé :

$$Mu = Mumx \frac{E}{Ke + E} \frac{CIT}{Kcl + CIT} \frac{Kci}{Kci + CIT}$$

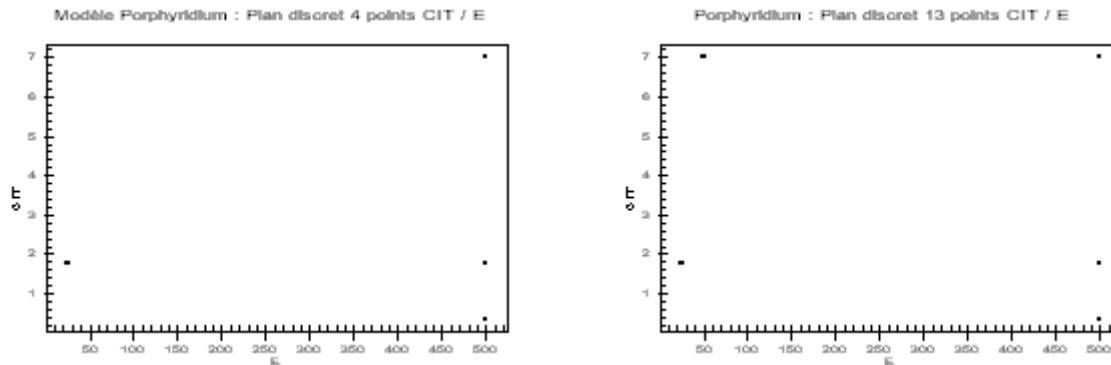
#### Solution :

Les plans d'expérience à 4 et 13 points D-optimaux calculés par le logiciel NEURO PEX sont :

Plan d'expériences à 4 points		
E	CIT	
25	1.75	1
500	0.35	2
500	1.75	3
500	7	4
		5
		6
		7
		8
		9
		10
		11
		12
		13

Plan d'expériences à 13 points	
E	CIT
25	1.75
25	1.75
25	1.75
50	7
500	0.35
500	0.35
500	0.35
500	1.75
500	1.75
500	1.75
500	7
500	7
500	7

Dans le domaine expérimental à deux dimensions [E ; CIT], les représentations des points D-optimaux sont (figure de gauche : plan à 4 points ; figure de droite : plan à 13 points) :

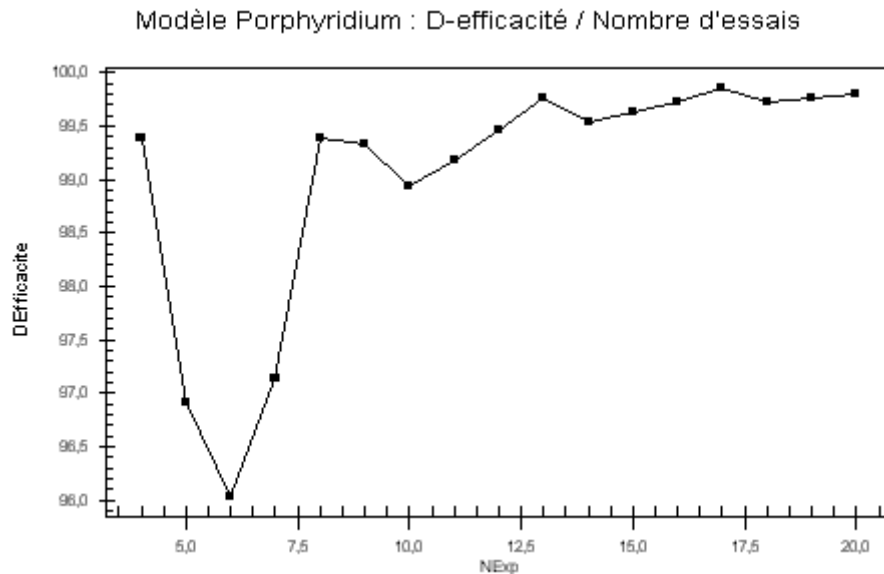


On notera que le logiciel recommande des répétitions de points plutôt qu'un pavage régulier du domaine expérimental. Il en résulte un espace « vide », sans que cela nuise à la qualité du modèle. Ce phénomène, déjà visible dans un espace à deux dimensions comme celui présenté ci-dessus, devient spectaculaire dans des espaces de dimension supérieure, i.e. pour des problèmes à 3 entrées ou plus.

Le point [50 ; 7 ] apparaît à partir de 13 expériences. Ceci est lié à sa probabilité d'apparition dans le plan D-optimal, pour un maillage du domaine expérimental choisi par l'utilisateur. NEURO PEX fournit le tableau complet des probabilités d'apparition, ici, pour un maillage  $21 \times 21 = 441$  points :

Traitement	E	CIT	Probabilité
1	500	0,35	0,246
2	500	1,75	0,243
3	500	7	0,229
4	25	1,75	0,211
5	50	7	0,062
6	50	0,35	0,009
7	25	1,4	6,47 E-6
8	0	0	0
9	25	0,35	0
10	50	0,70	0
...	...	...	...
...	..	...	...
440	500	6,30	0
441	500	6,65	0

Le choix des plans à 4 ou 13 points est justifié par le critère de D-efficacité. Ce critère indique la quantité d'information portée par un essai pour l'identification du modèle. Ici, des plans à 4 ou 8 essais sont plus informatifs que des plans à 5, 6 ou 7 essais. Un plan à 13 essais sera meilleur que des plans à 12 ou 14 essais. Compte-tenu du budget expérimental disponible, on choisira donc des plans à 4, 8 ou 13 essais.



### Conclusion et remarque :

Après réalisation du plan à 4, 8 ou 13 essais proposé ci-dessus et obtention des réponses  $\mu$  associées, on procédera à une régression des moindres carrés et une nouvelle estimation des paramètres du modèle. Par construction, cette nouvelle estimation sera plus proche de la valeur vraie des paramètres. Nous ne détaillons pas cette étape qui ne fait pas partie, *stricto sensu*, du plan d'expériences.

Pour un modèle non-linéaire, le calcul d'un plan d'expériences en vue de l'identification des paramètres de ce modèle n'est possible que si l'on a déjà une estimation raisonnable de la valeur de ces paramètres. Cette ambiguïté bien connue est le propre du non-linéaire. Pour une identification extrêmement précise, on pourra envisager une démarche séquentielle alternant expérimentation et identification des paramètres. Les exemples traités par NETRAL indiquent des convergences en 1 à 3 itérations de l'algorithme de D-optimalité, selon la qualité de l'estimation initiale des paramètres, l'importance du bruit de mesure et la faible ou forte non-linéarité du problème étudié. Pour les modèles fortement non-linéaires, il faut préférer l'algorithme de X-optimalité qui a des temps de calcul plus longs.

## 1. EXEMPLE DE PLAN CALCULE POUR UN RESEAU DE NEURONES

Voir la présentation de Netral à la page suivante :

<http://www.netral.com/lasociete/2004/2004-1201-conference-chimiometrie-si.pdf>