MTH8301 : planification 25 novembre 2020

ordre des chapitres à venir 7,5 heures

chap 15 : plans algorithmiques (10)

chap 14 : modèles multiniveaux (nouveau) (20)

chap 17 : facteurs emboités – facteurs croisés (8)

chap 10 + chap 18 : facteurs aléatoires – modèles mixtes (30)

chap 16 : mesures répétées (42)

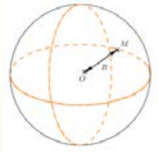
chap 11 : SplitPlot / parcelles divisées (61)

chap 12 : expériences sur ordinateurs (51) 220 slides

MTH8301 chapitre 15

Plans sur mesure : contraintes ou algorithmiques

jusqu'à maintenant espace expérimental =

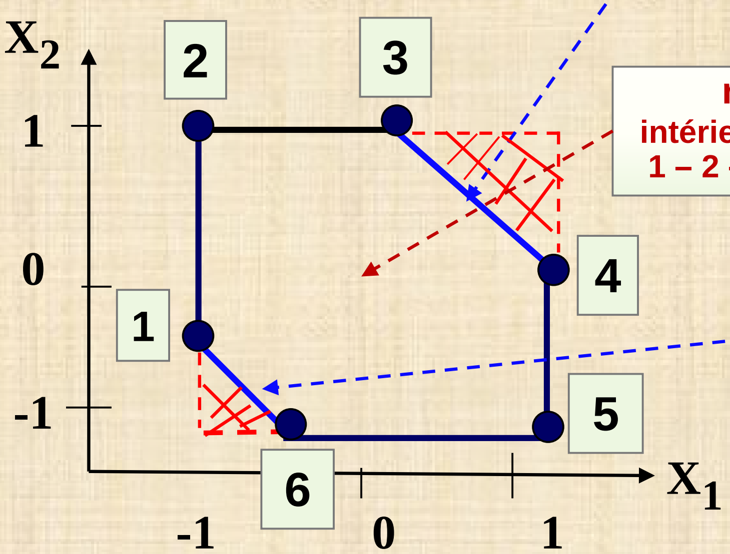
cubique  **sphérique** 

plans standards : 2^{k-p} CCD Box-Behnken …

cas 1 : contrainte - espace expérimental irrégulier

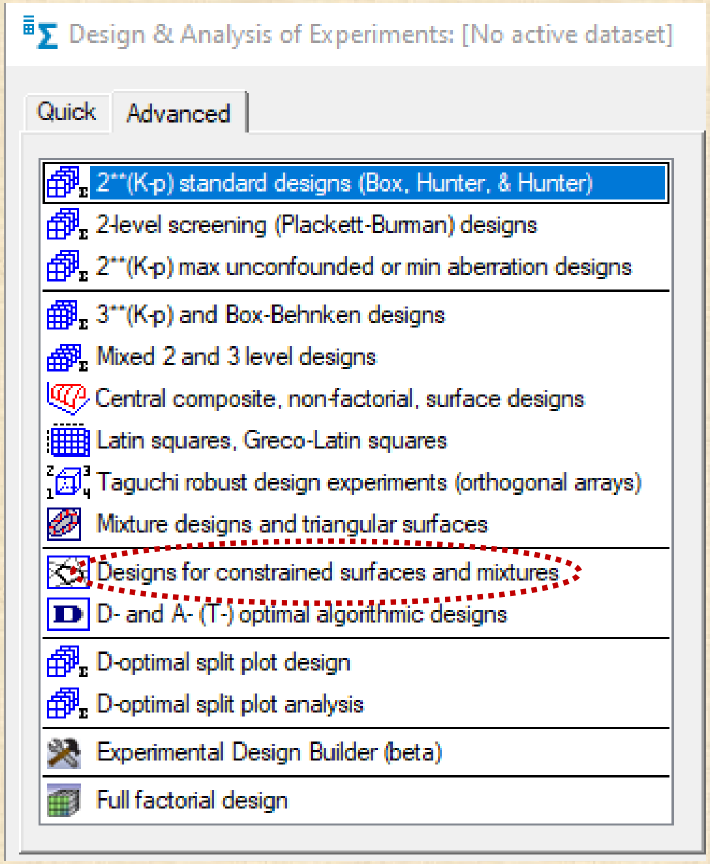
Ex-15.1-contraintes

$$X_1 + X_2 <= 1$$

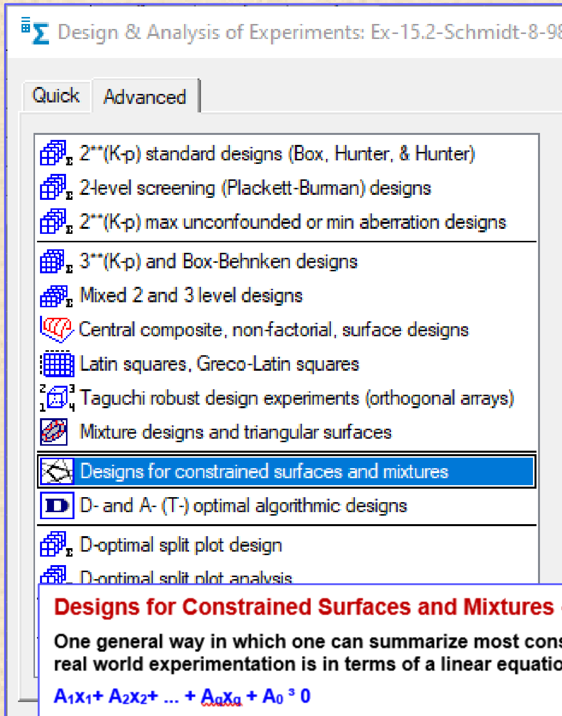


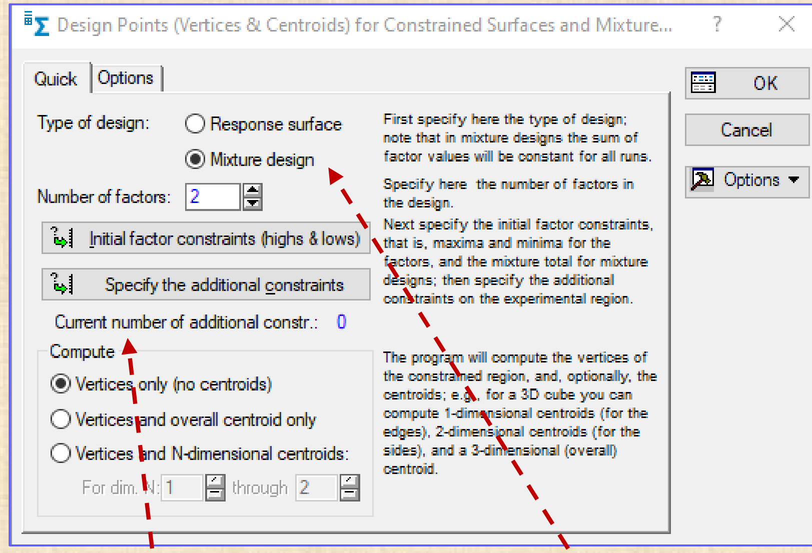
région intérieur polygone 1 – 2 – 3 – 4 - 5 - 6

$$-1.5 <= X_1 + X_2$$



contraintes





Designs for Constrained Surfaces and Mixtures - Linear Constraints

One general way in which one can summarize most constraints that occur in real world experimentation is in terms of a linear equation (see Piepel, 1988):

$A_1x_1 + A_2x_2 + ... + A_qx_q + A_0$ ³ 0

Here, $A_0, ..., A_q$ are the parameters for the linear constraint on the *q* factors, and $x_1, ..., x_q$ stands for the factor values (levels) for the *q* factors.

This general formula can accommodate even very complex constraints.

For example, suppose that in a two-factor experiment the first factor must always be set at least twice as high as the second, that is, x_1 ³ $2*x_2$. This simple constraint can be rewritten as x_1-2*x_2 ³ 0. The ratio constraint $2*x_1/x_2$ ³ 1 can be rewritten as $2*x_1 - x_2$ ³ 0, and so on.

The problem of multiple upper and lower constraints on the component values in mixtures was discussed earlier, in the context of mixture experiments. For example, suppose in a three-component mixture of fruit juices, the upper and lower constraints on the components are (see example 3.2, in Cornell 1990a):

40% <= Watermelon (x1) <= 80%
10% <= Pineapple (x2) <= 50%
10% <= Orange (x3) <= 30%

These constraints can be rewritten as linear constraints into the form:

Watermelon:	x_1-40³0
	$-x_1$+80³0
Pineapple:	x_2-10³0
	$-x_2$+50³0
Orange:	x_3-10³0
	$-x_3$+30³0

choix design

Response ou Mixture designs

types de points

contraintes : formes linéaires seulement

$$\sum a_i X_i \geq 0$$

grande flexibilité

Plans avec contraintes

Ex – 15.1 - contraintes

$$0 <= X_i <= 1 \qquad (1)$$

$$-1.5 <= X_1 + X_2 < = 1 \qquad (2)$$

(2) s'écrit (3) et (4)

$$- X_1 - X_2 + 1.0 >= 0 \qquad (3)$$

$$X_1 + X_2 + 1.5 >= 0 \qquad (4)$$

liste points candidats

	point	X_1	X_2
1	1	-1.00	-0.50
2	2	-1.00	1.00
3	3	-0.50	-1.00
4	4	1.00	-1.00
5	5	1.00	0.00
6	6	0.00	1.00

modèle recherché : 2^{ième} ordre

contraintes : formes linéaires seulement

$$\sum a_i X_i \geq 0$$

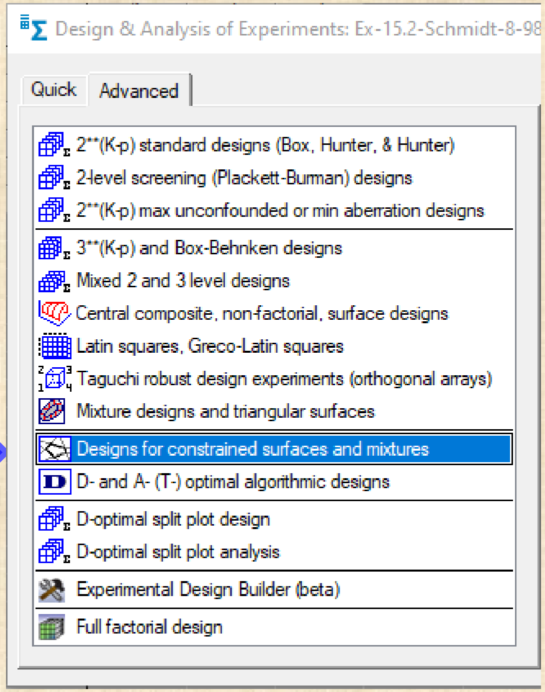
(2) s'écrit → (3) et (4)

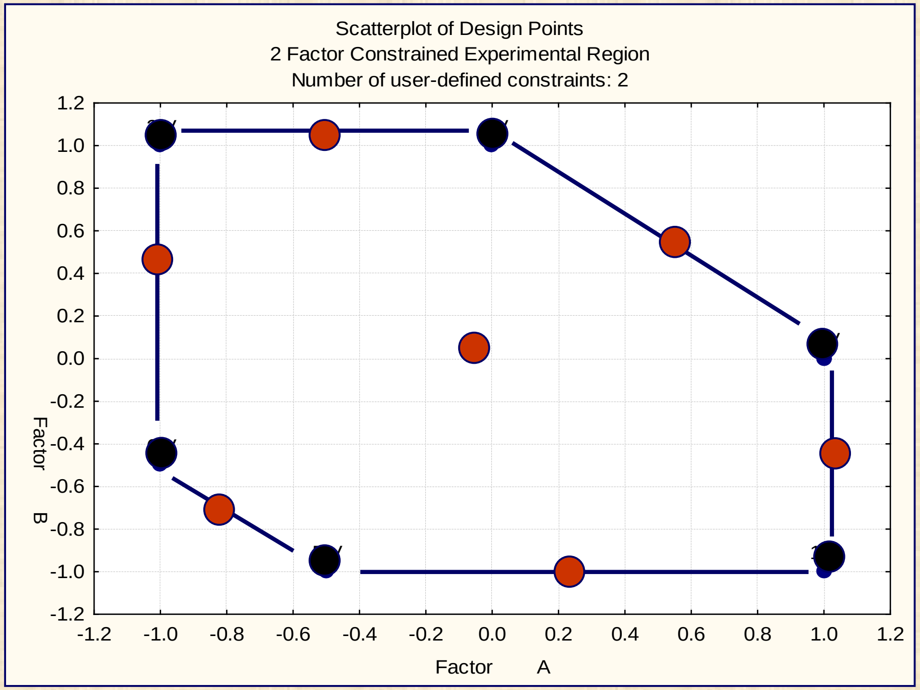
Ex – 15.1 - contraintes

points candidats

points ajoutés

	A	B
1 V	1.00	-1.00
2 V	-1.00	1.00
3 V	1.00	0.00
4 V	0.00	1.00
5 V	-0.50	-1.00
6 V	-1.00	-0.50
7 C(1)	1.00	-0.50
8 C(1)	-1.00	0.25
9 C(1)	-0.50	1.00
10 C(1)	0.25	-1.00
11 C(1)	0.50	0.50
12 C(1)	-0.75	-0.75
13 C(2)	-0.08	-0.08





Plans sur mesure : algorithmiques

cas 2 : modèle non standards

designs standards : orientés pour l'ajustement des modèles polynomiaux ordre 1 ou ordre 2

si le modèle est autre : par exemple

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{112} X_1^2 X_2 + \beta_{122} X_1 X_2^2 + \varepsilon$$

cas 3 : réduction du nombre d'essais

exemple : 4 variables - modèle polynomial d'ordre 2

solution classique : CCD exige 28 à 30 essais

mais le polynôme a 15 coefficients

si coût / durée essais est un facteur important

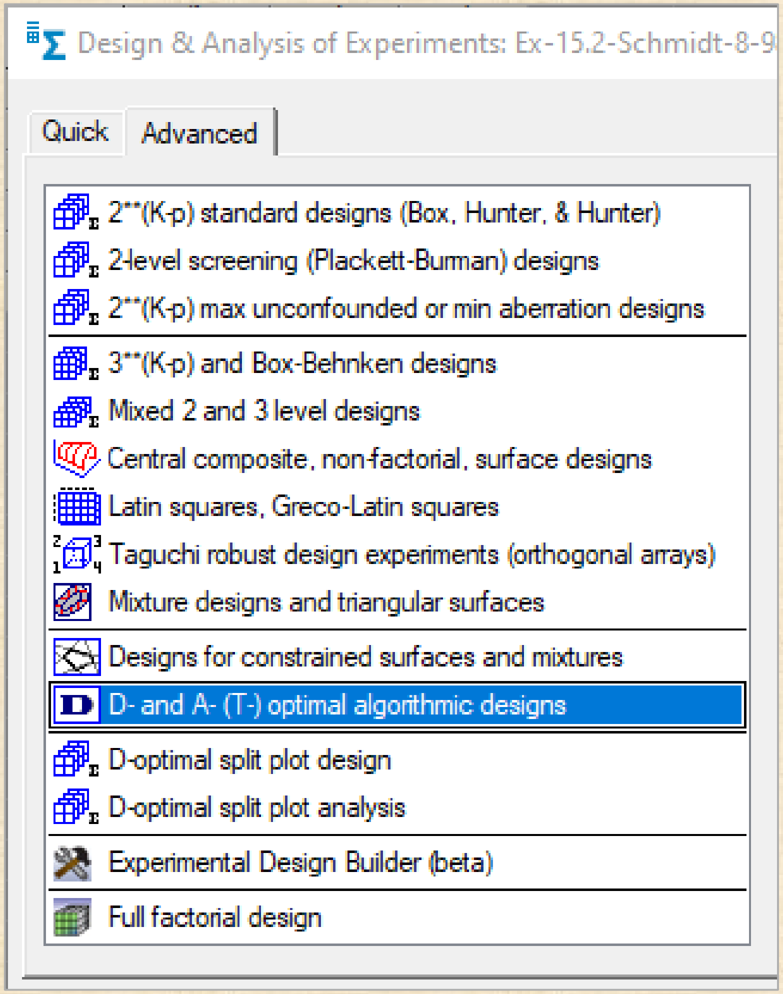
question : comment faire un plan avec moins de 28 essais?

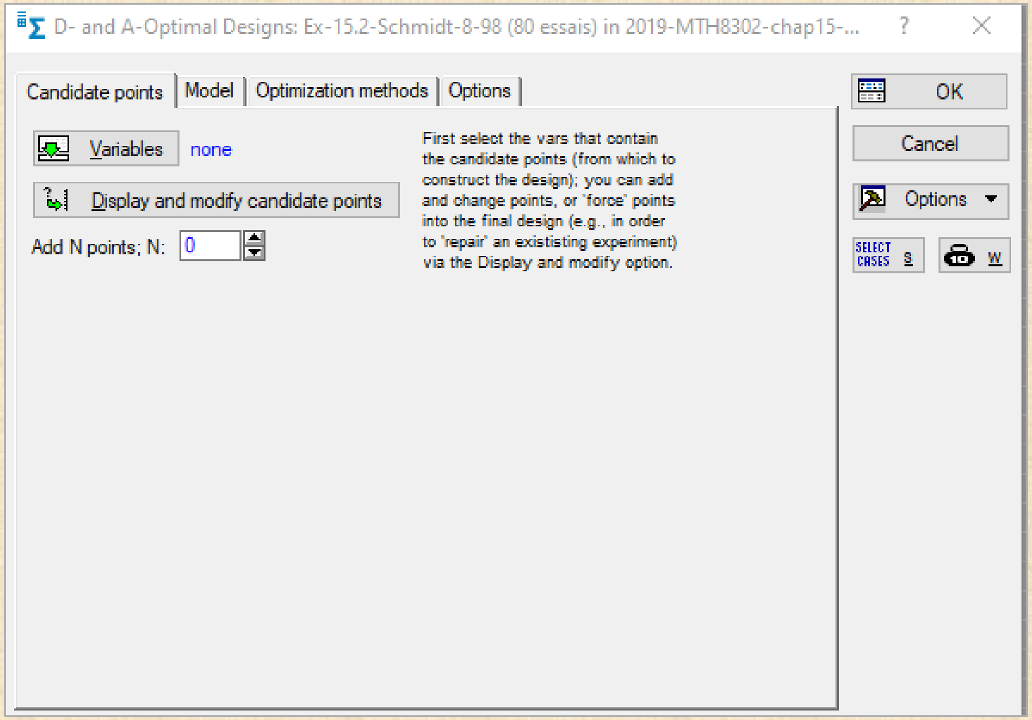
réponse : oui - petit CCD de 20 essais

- design hybride de 16 essais

cas 4 : essais additionnels - réparer / compléter / ajouter nouveaux essais à une série existante

Plans sur mesure : D et A optimal





PLANS SUR MESURE : méthodologie

1

SPÉCIFIER
- modèle
- région d'intérêt
- nombre d'essais
- critère d'optimisation / méthode solution
- liste points candidats essais

2

OPTIMISER : critères D – A – G - V

D-optimal : minimiser $|(X'X)^{-1}|$ $|A|$ = déterminant A
- minimise volume région confiance coefficients
- précision maximale des coefficients du modèle

A-optimal : minimiser variance coefficients régression
- minimise somme éléments diagonale principale $(X'X)^{-1}$
- minimise trace de $(X'X)^{-1}$

G-optimal : minimise variance prédiction Y espace
min max $N * Var(Y(x)) / \sigma^2$ N = # points

V-optimal : minimise variance Y - liste points choisis

3

SOLUTIONNER algorithmes
Dykstra / Wynn-Mitchell / Detmax / Federov

Plan initial : $2^4 5^1$: 80 essais
facteurs A B C D à 2 modalités
facteur E à 5 modalités

Ex – 15.2 – réduction des essais

id	A	B	C	D	E
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	2
3	1	1	1	1	3
4	1	1	1	1	4
5	1	1	1	1	5
.	.	.	.	.	.
78	2	2	2	2	3
79	2	2	2	2	4
80	2	2	2	2	5

Objectif: plan =? avec moins d'essais

Modèle

	nombre
- effets principaux A B C D	4
- effets principaux de E	4
- effets d'interaction A B C D	6
E avec A B C D	4
total	18

- on veut 28 essais

id	Predictn Variance	A	B	C	D	E
1	0,593750	1	1	1	1	1
6	0,500000	1	1	1	2	1
10	0,593750	1	1	1	2	5
11	0,500000	1	1	2	1	1
15	0,593750	1	1	2	1	5
16	0,718750	1	1	2	2	1
20	0,500000	1	1	2	2	5
21	0,500000	1	2	1	1	1
25	0,718750	1	2	1	1	5
26	0,593750	1	2	1	2	1
30	0,500000	1	2	1	2	5
31	0,593750	1	2	2	1	1
35	0,500000	1	2	2	1	5
40	0,593750	1	2	2	2	5
41	0,500000	2	1	1	1	1
45	0,718750	2	1	1	1	5
46	0,593750	2	1	1	2	1
50	0,500000	2	1	1	2	5
51	0,593750	2	1	2	1	1
55	0,500000	2	1	2	1	5
60	0,593750	2	1	2	2	5
61	0,593750	2	2	1	1	1
66	0,500000	2	2	1	2	1
70	0,593750	2	2	1	2	5
71	0,500000	2	2	2	1	1
75	0,593750	2	2	2	1	5
76	0,718750	2	2	2	2	1
80	0,500000	2	2	2	2	5

Ex – 15.2 – réduction des essais

Plan initial : $2^4\ 5^1$: 80 essais
facteurs A B C D à 2 modalités
facteur E à 5 modalités

Measure	Summary of Efficiency Measures 5 factors; 28 runs; D-optimal Model incl.: linear effects/interacts Final Design	 All Candidts
Number of runs	**28**	**80**
Determinant	**75558E18**	**87961E24**
Log(e) of det.	**52,67919**	**66,64669**
Trace	**,625**	**,2625**
Log(e) of trace	**-,470004**	**-1,3375**
D-efficiency (%)	**96,10245**	**80,52452**
A-efficiency (%)	**91,42857**	**76,19048**
Max pred. var.	**1,**	**,2625**
G-efficiency (%)	**75,59289**	**87,28716**