PLANS D'EXPÉRIENCES D- ET X-OPTIMAUX POUR MODÈLES NON LINÉAIRES

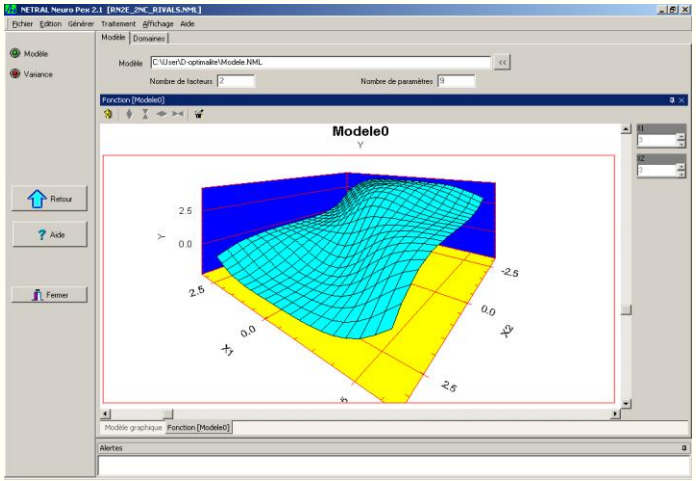
Sébastien ISSANCHOU – NETRAL

Jean-Pierre GAUCHI – INRA

Introduction

- Contexte
- Limites des plans traditionnels
- Plans d'expériences optimaux
- Stratégie locale et stratégie séquentielle
- Exemple : modèle de cinétique chimique
- Conclusions
- Challenges en non linéaire

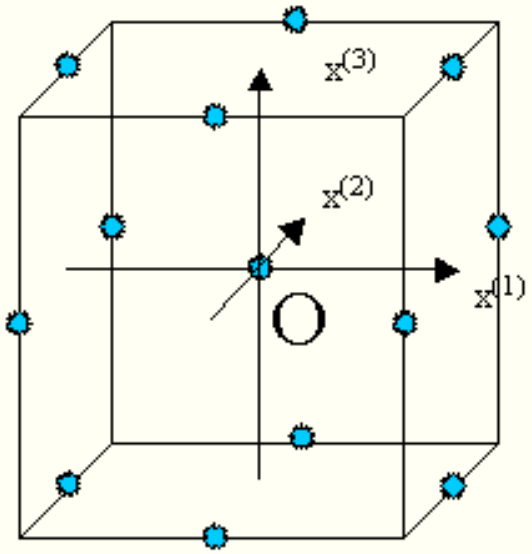
Contexte



- Partenariat de recherche
- Début du projet : mars 03
- Plans d'expériences pour :
  - ✓ Réseaux de neurones
  - ✓ **Modèles de connaissance**
- Logiciel ***Neuro Pex***
- Famille des plans optimaux :
  - ✓ **D-optimalité**
  - ✓ **X-optimalité**

Limites des plans traditionnels

- Plans traditionnels :
  - ✓ Criblage de facteurs
  - ✓ Surfaces de réponse



Plan de Box-Behnken

- Principales limites :
  - ✓ Optimaux pour un modèle polynomial donné
  - ✓ Domaine expérimental de forme géométrique « régulière » (cube, sphère)
  - ✓ Impossibilité de récupérer de façon optimale des expériences déjà réalisées / Réparation de plan
  - ✓ Supposent une variance homogène des observations sur le domaine expérimental

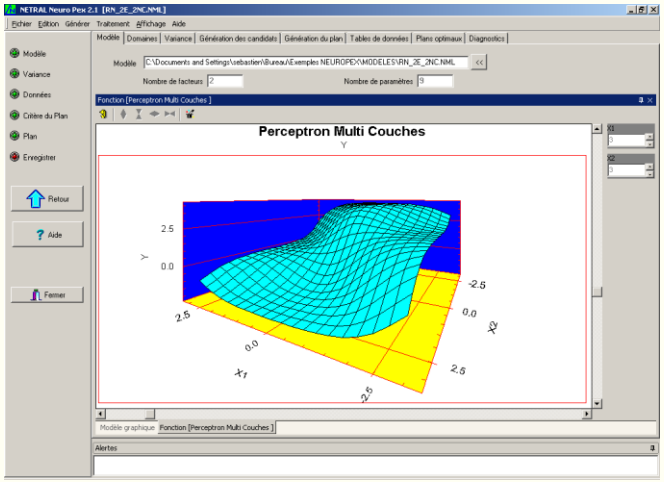
Plans d'expériences optimaux

- Optimalité vis-à-vis d'un modèle spécifié a priori mais quelconque :
  - ✓ Modèle linéaire (factoriel, polynômial, complet ou non)
  - ✓ Réseau de neurones
  - ✓ **Modèle de connaissance**
- Domaine expérimental quelconque (compact)
- Nombre d'expériences quelconque (au moins p)
- Possibilité de réparation d'un plan d'expériences
- Possibilité de variance hétérogène des observations

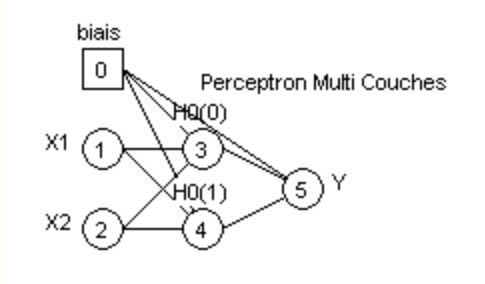
Plans d'expériences optimaux

Exemple 1 :

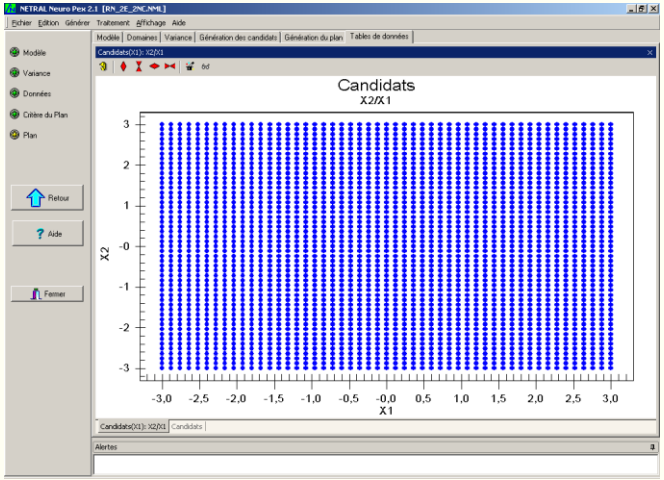
Plan D-optimal pour un réseau de neurones (domaine pavé)



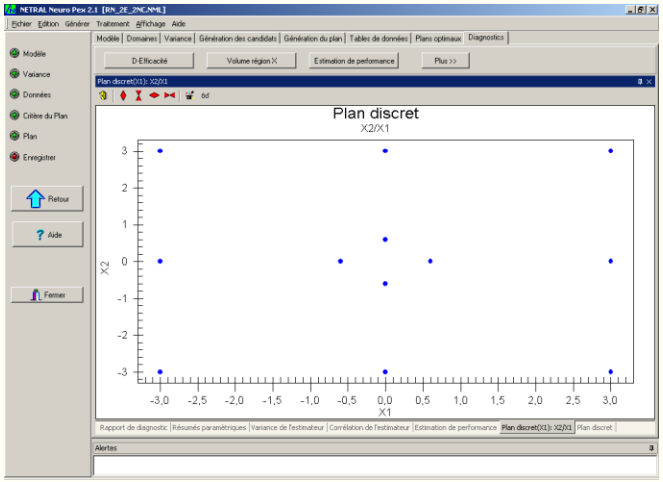
1/ Modèle (RN) : p=9



2/ Ensemble candidat



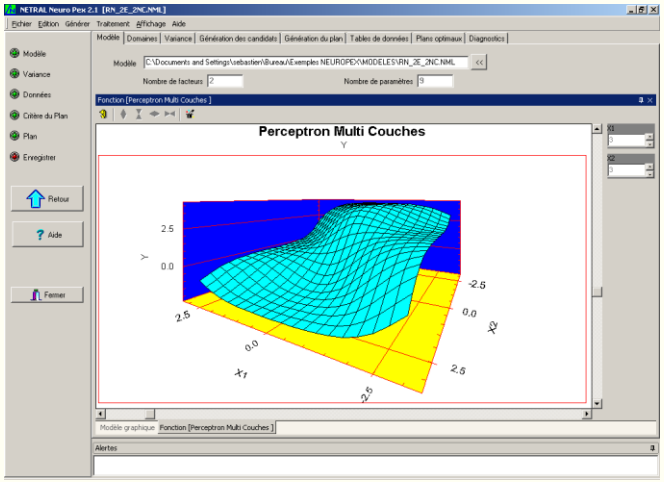
3/ Plan D-optimal : n=12



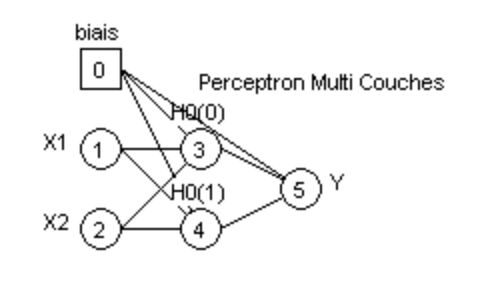
Plans d'expériences optimaux

Exemple 2 :

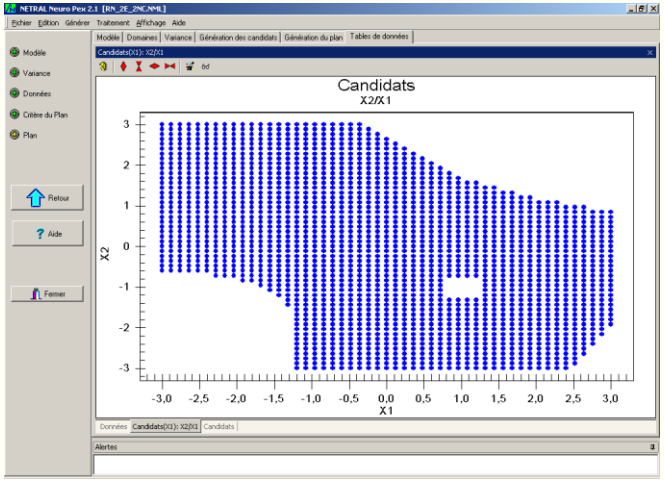
Plan D-optimal pour un réseau de neurones (domaine quelconque)



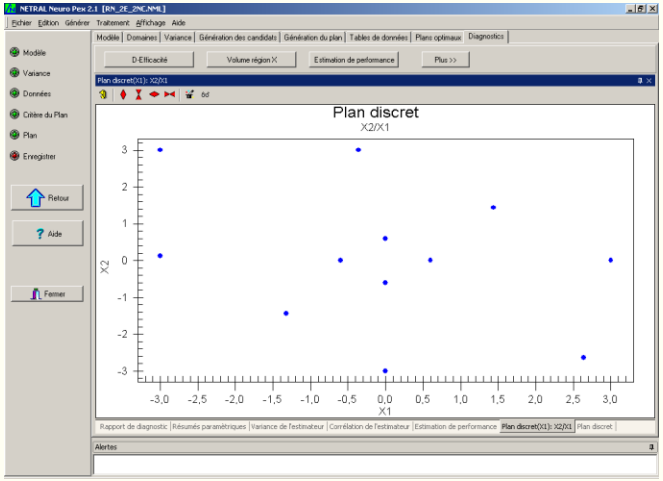
1/ Modèle (RN) : p=9



2/ Ensemble candidat



3/ Plan D-optimal : n=12

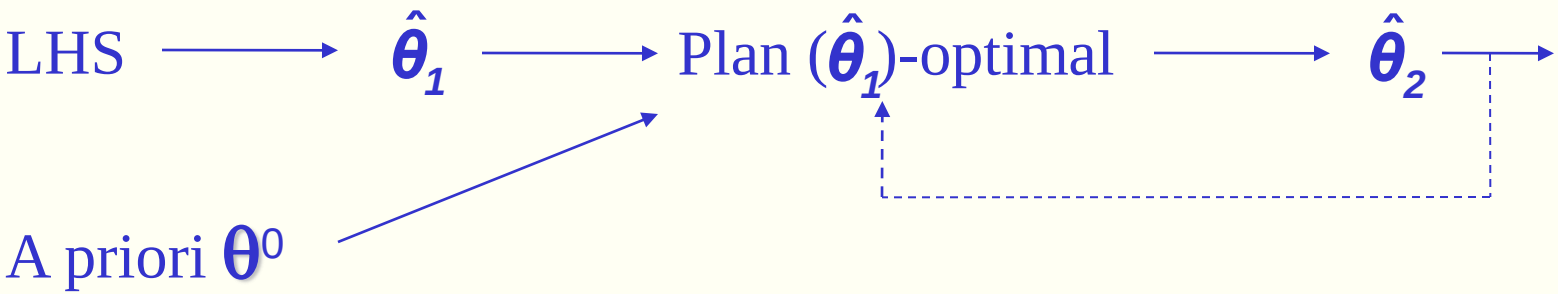


Plans d'expériences optimaux

- Principe des plans d'expériences optimaux :
  - ✓ Définition d'un critère de qualité qui soit fonction du plan d'expériences à construire
  - ✓ Précision des estimations des paramètres du modèle :
    - Estimation ponctuelle : biais et variance d'un estimateur des paramètres
    - Estimation ensembliste : région de confiance espérée des paramètres
    - Critères « courants » : D-optimalité, A-optimalité, E-optimalité
  - ✓ Précision des estimations de la réponse :
    - Critères « courants » : G-optimalité, Q-optimalité
  - ✓ …

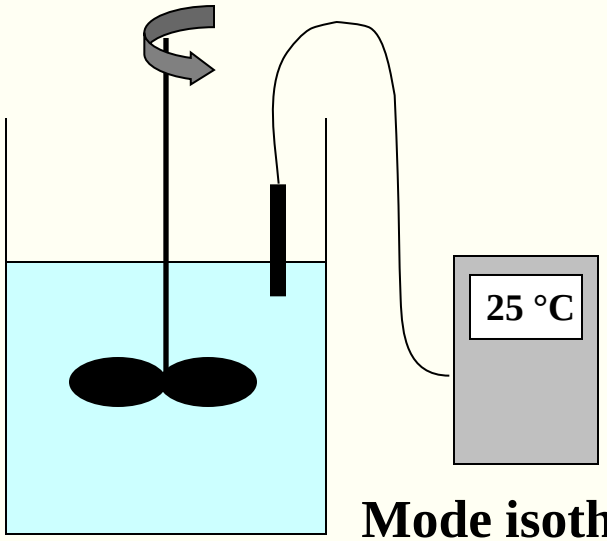
Stratégies locale et séquentielle

- Cas des modèles de régression non linéaire :
  - ✓ **Problématique** : les critères de planification dépendent de la valeur des paramètres du modèle inconnue a priori et dont on recherche la valeur
  - ✓ **Stratégie locale** : on utilise une valeur approchée θ^0 des paramètres qui en respecte l'ordre de grandeur (cas des modèles de connaissance)
  - ✓ **Stratégie séquentielle** : on alterne les phases d'estimation des paramètres ($\boldsymbol{\theta}^0 \equiv \hat{\boldsymbol{\theta}}$) et les phases de planification des expériences



Exemple : cinétique chimique

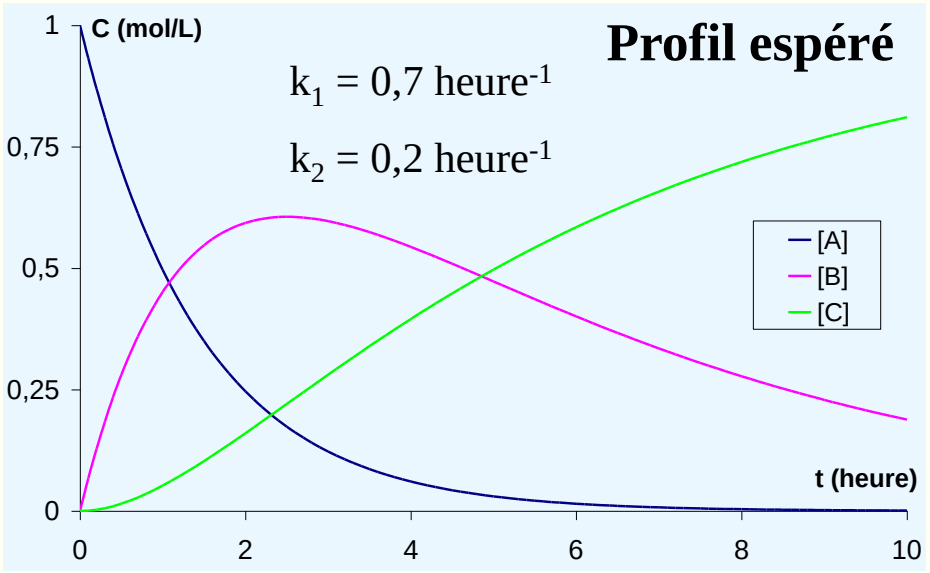
- Modèle de cinétique chimique (Box-Lucas, 59) :



Mode isotherme

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$

$$[A]^0 = 1\, mol.L^{-1}, \quad [B]^0 = [C]^0 = 0\, mol.L^{-1}$$



- Valeurs de k_1 et k_2 ?

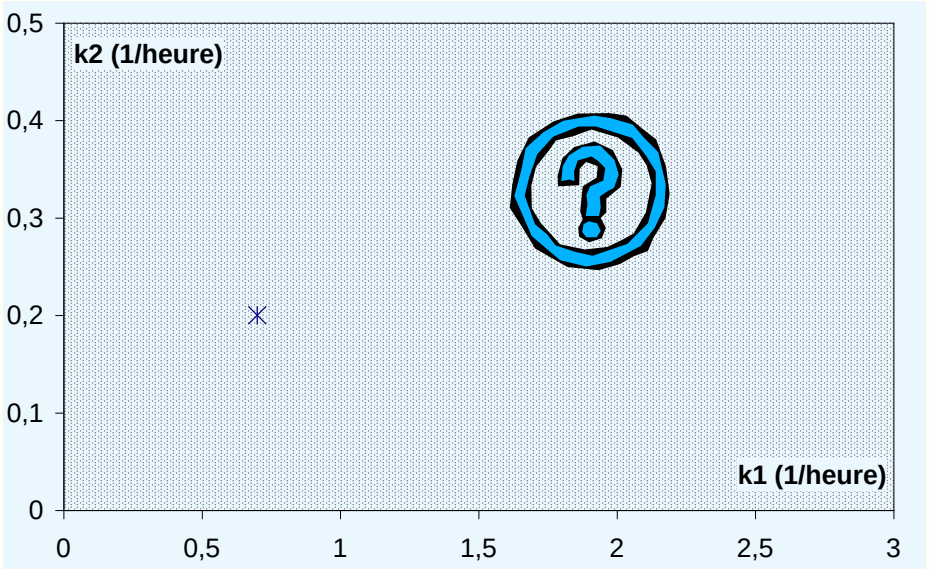
  ⇨ **Plan d'expériences**

Exemple : cinétique chimique

- Hypothèses :
  - ✓ Seule la mesure de [B] est accessible
  - ✓ 1 mesure par expérience :
    - blocage de la réaction puis dosage de [B]
  - ✓ Instant de mesure t compris entre 0 et 10 heures
- Modèle cinétique (à deux compartiments) :
  - ✓ $[B]_i = \frac{k_1}{k_1 - k_2}\left[\exp\left(-k_2 t_i\right) - \exp\left(-k_1 t_i\right)\right] + e_i \quad i = 1, \cdots, N$
  - ✓ $e_i \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right) \quad \forall i$

Exemple : cinétique chimique

- Connaissance a priori de l'expérimentateur :
  - ✓ Domaine paramétrique :
    - $k_1 \in [0 ; 3]$
    - $k_2 \in [0 ; 0,5]$
  - ✓ Valeurs de k_1 et k_2 :
    - $k_1 \approx 0,7$ heure^{-1}
    - $k_2 \approx 0,2$ heure^{-1}
  - ✓ Bruit de mesure :
    - $\sigma \approx 0,1$ mol.L^{-1}

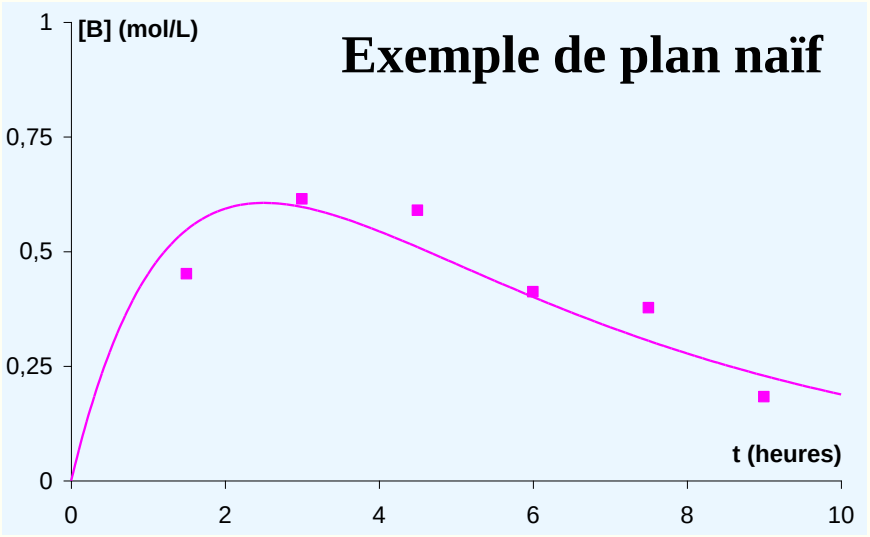


Exemple : cinétique chimique

Plan « naïf » de taille N = 6

- Répartition uniforme des mesures

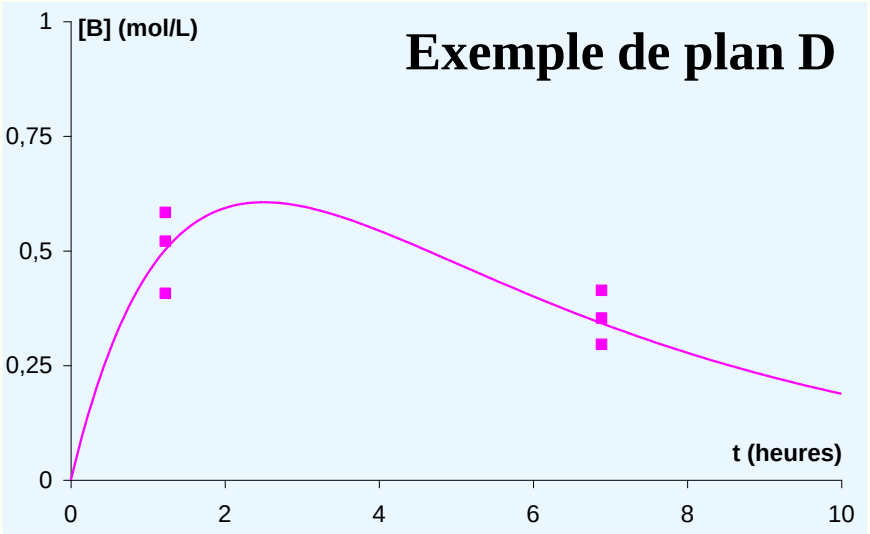
t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6
1,50	3,00	4,50	6,00	7,50	9,00



Plan D-optimal de taille N = 6

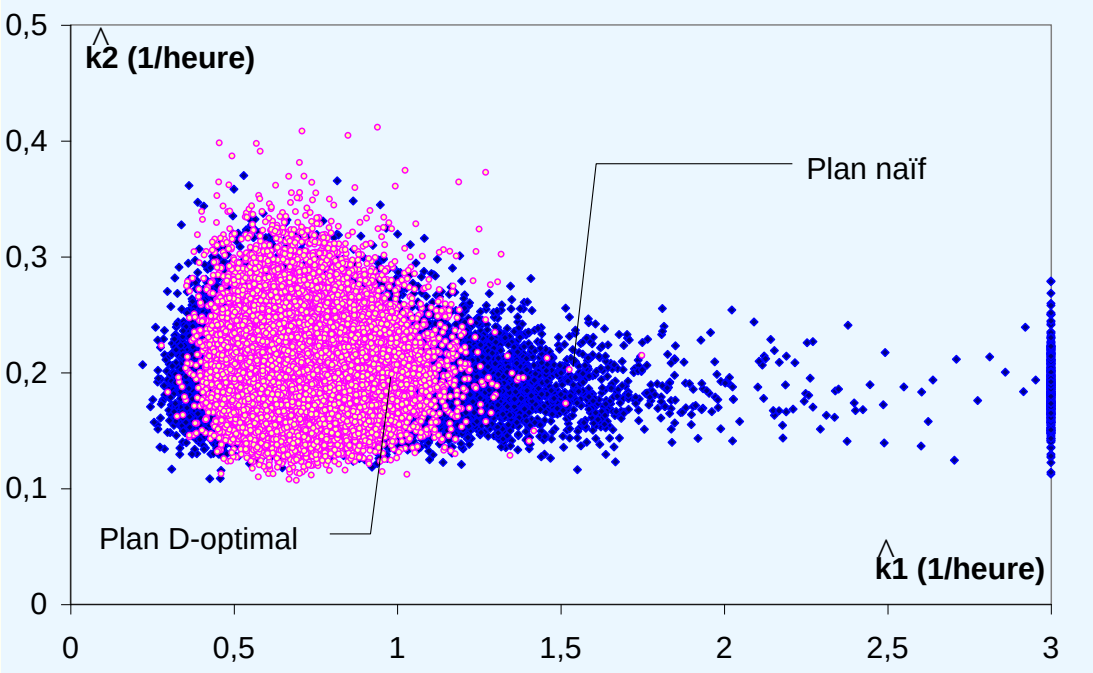
- 2 traitements répétés 3 fois chacun

t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6
1,23	1,23	1,23	6,89	6,89	6,89



Exemple : cinétique chimique

- Précision de l'estimateur des moindres carrés :
  - Distribution empirique sur 30000 simulations des plans



Plan D-optimal

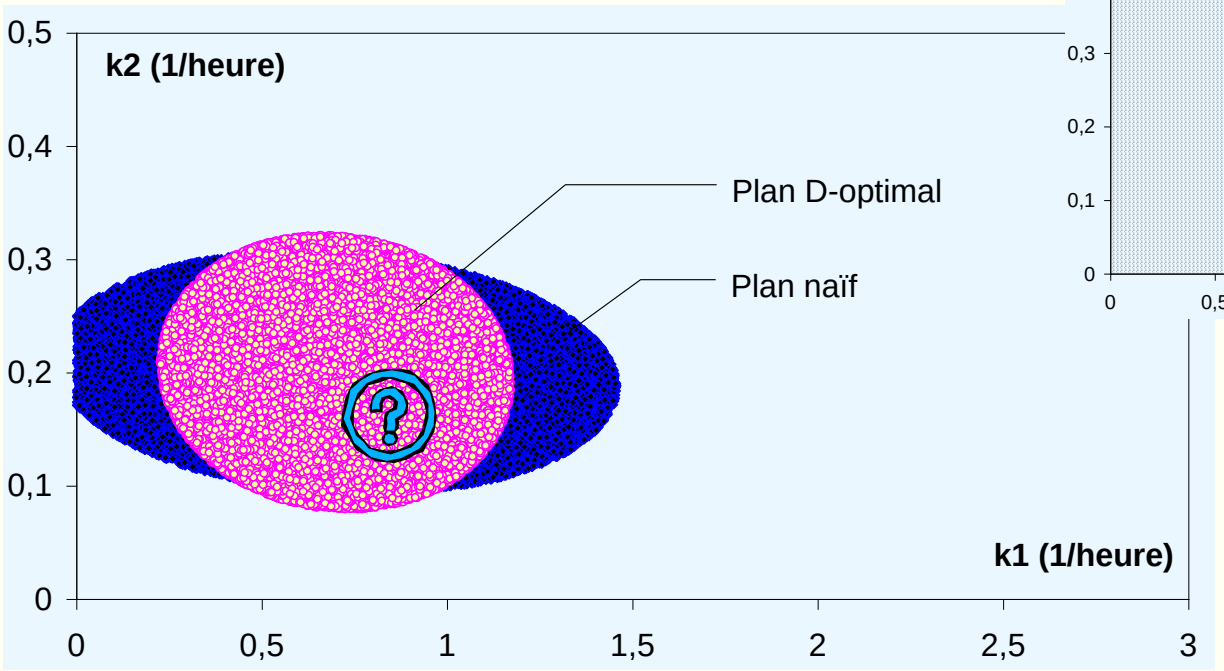
Paramètre	Biais	Ecart-type
$\hat{k}_1$	1,7 %	18,9 %
$\hat{k}_2$	1,5 %	17,0 %
Corrélation	- 0,05	

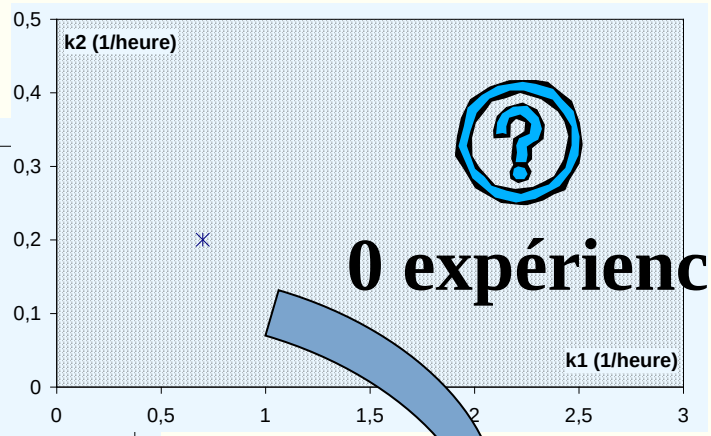
Plan naïf

Paramètre	Biais	Ecart-type
$\hat{k}_1$	10,4 %	50,6 %
$\hat{k}_2$	0,0 %	14,5 %
Corrélation	- 0,11	

Exemple : cinétique chimique

- Précision de l'ellipsoïde de confiance :
  - Régions espérées (95 %)





0 expériences

6 expériences

Exemple : cinétique chimique

- Une approche ensembliste exacte : la X-optimalité

D

- ✓ L'ellipsoïde de confiance est une région approximative dont le taux de recouvrement est fonction de la plus ou moins forte non linéarité du modèle (courbures) :
  - Taux de recouvrement réel obtenu au plan D-optimal : ≈ 94 %
  - Taux de recouvrement réel obtenu au plan naïf : ≈ 91 %
- ✓ La D-optimalité s'intéresse au volume de l'ellipsoïde

X

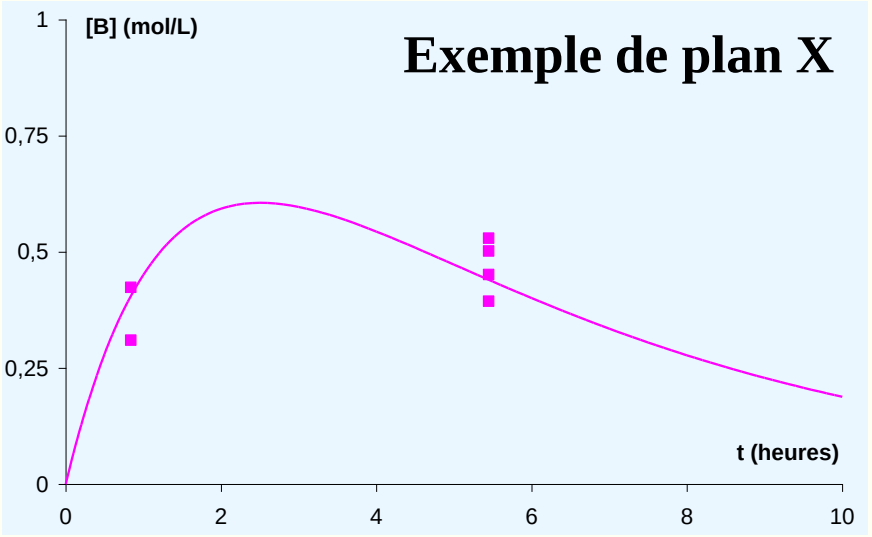
- ✓ Il existe des régions de confiance exactes à distance finie : on utilise la région de Hamilton (Halperin, 63)
- ✓ On minimise le volume espéré de cette région exacte par rapport au plan d'expériences ⇒ plan X-optimal

Exemple : cinétique chimique

Plan X-optimal de taille N = 6

- 2 traitements répétés (2 + 4)

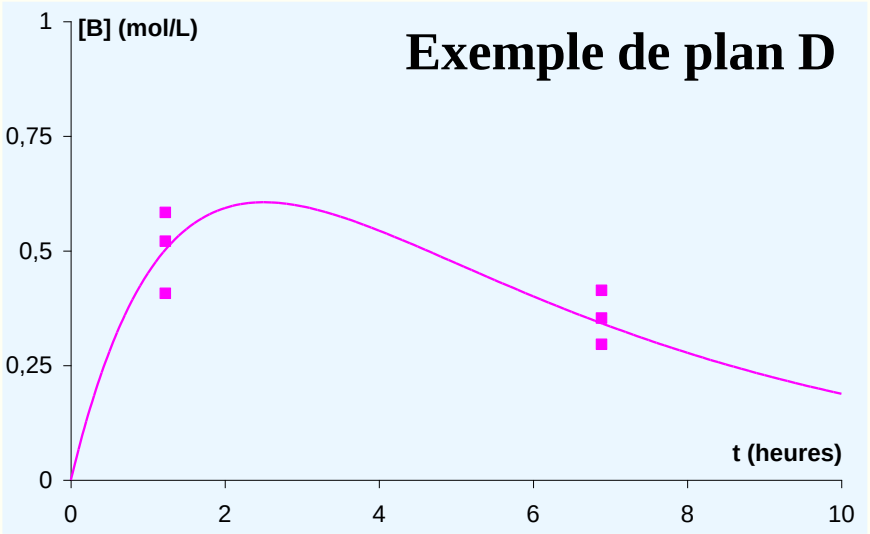
t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6
0,84	0,84	5,45	5,45	5,45	5,45



Plan D-optimal de taille N = 6

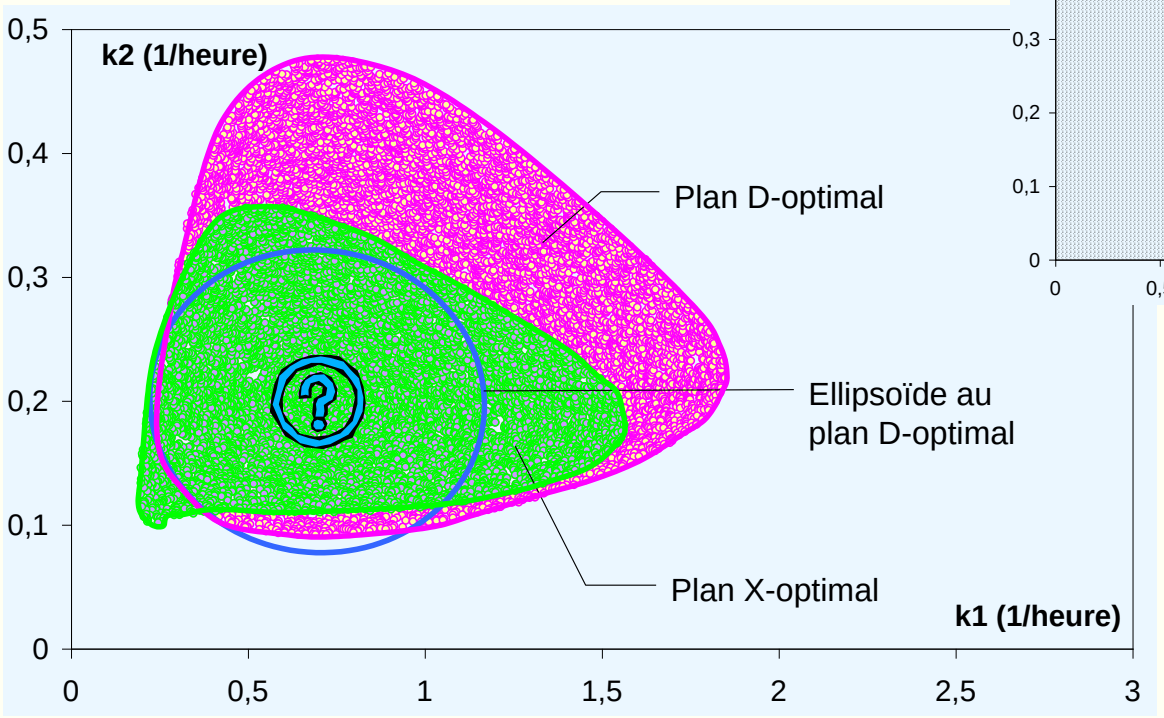
- 2 traitements répétés 3 fois chacun

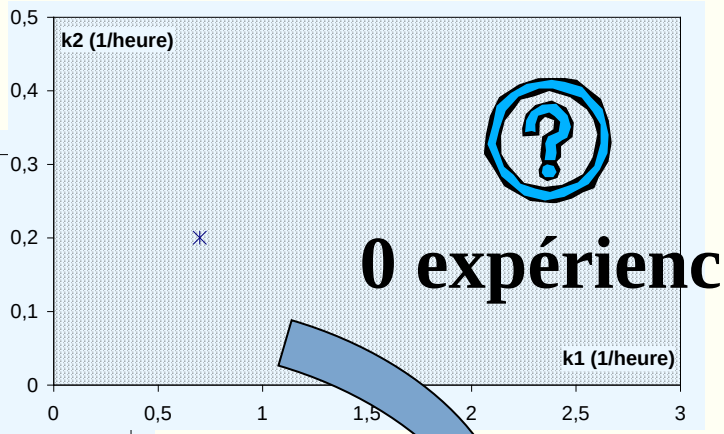
t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6
1,23	1,23	1,23	6,89	6,89	6,89



Exemple : cinétique chimique

- Précision de la région exacte de Hamilton (95 %) :
  - Régions espérées



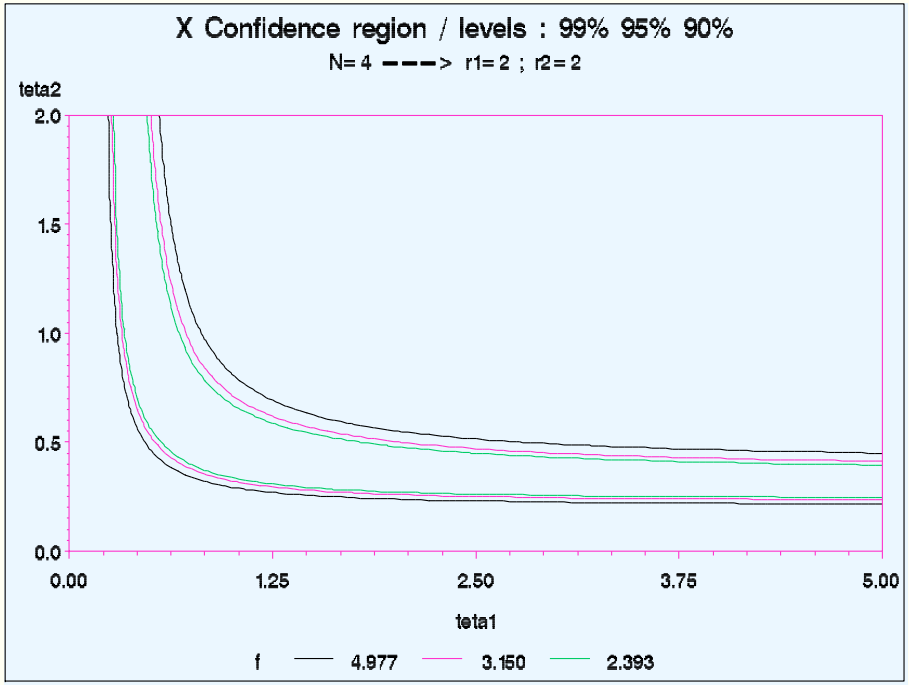


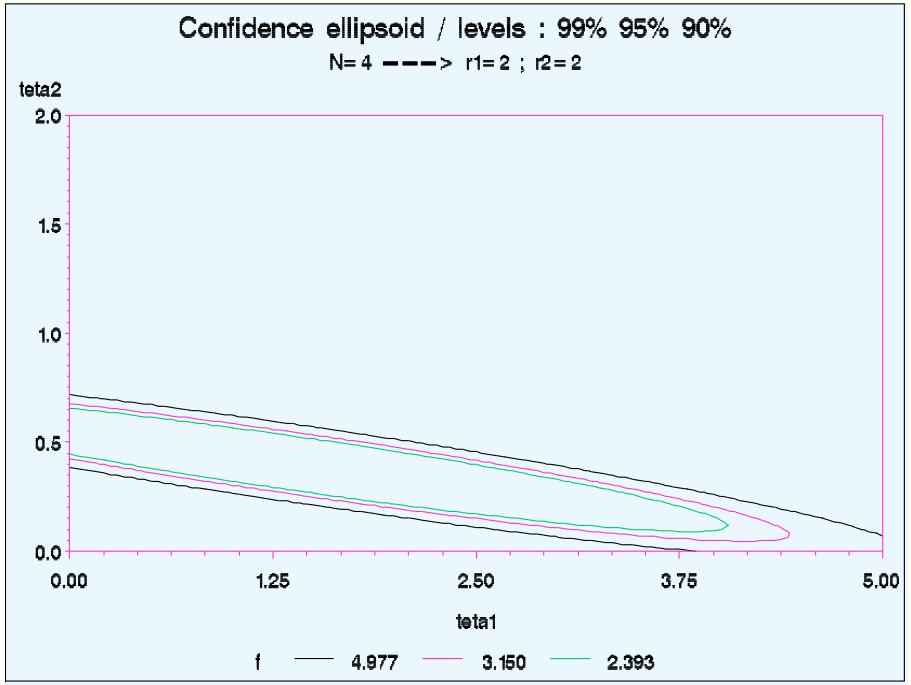
0 expériences

6 expériences

Visualisation sur un autre exemple

- Le modèle de Guttman-Meeter :
  - $$y_i = 1 - \frac{1}{k_1 - k_2}\left[k_1 \exp\left(-k_2 t_i\right) - k_2 \exp\left(-k_1 t_i\right)\right] + e_i \quad i = 1, \cdots, N$$





Conclusions

- Les plans d'expériences optimaux :
  - ✓ Généralisation de la théorie des plans d'expériences
  - ✓ Permettent d'obtenir un plan « sur mesure » bien adapté aux contraintes industrielles :
    - Nombre d'expérience imposé
    - Domaine expérimental de forme « irrégulière »
    - Stratégies séquentielles, récupération optimale d'essais
    - …
  - ✓ Peuvent être appliqués aux modèles de régression non linéaire : modèles de connaissance

Conclusions

- Des approches approximatives…
  - ✓ Précision de l'ellipsoïde de confiance :
    - Approximation linéaire
    - Taux de recouvrement atteint asymptotiquement
    - Niveau asymptotique fonction de la non linéarité du modèle
    - Critère de **D-optimalité** : Volume espéré de cette région
  - ✓ Précision de l'estimateur des moindres carrés :
    - Approximation linéaire
    - Distribution gaussienne non biaisée et efficace atteinte asymptotiquement
    - Critère de **D-optimalité** : matrice « linéarisée » d'erreur quadratique moyenne de l'estimateur des moindres carrés

Conclusions

- Aux approches exactes (1) …
  - ✓ Précision d'une région de confiance exacte :
    - Propriétés statistiques « intéressantes » :
      - Bonne puissance du test d'hypothèse associé
    - Aucune approximation
    - Taux de recouvrement atteint exactement
    - Critère de **X-optimalité** : Volume espéré de cette région
    - Temps de calcul du plan X-optimal raisonnable pour des modèles ayant un nombre de paramètres limité (< 10) grâce à l'utilisation d'algorithmes d'optimisation stochastique (type « Robbins-Monro »)

Conclusions

- Aux approches exactes (2) …
  - ✓ Précision de l'estimateur des moindres carrés :
    - Travaux de A. Pazman : distribution exacte de l'estimateur des moindres carrés à distance finie
    - Possibilité de « minimiser » le biais et la variance de cet estimateur par rapport au plan d'expériences
    - Critère de **DX-optimalité** : déterminant de la matrice d'erreur quadratique exacte de l'estimateur des moindres carrés

Approche de l'estimation	Objectif de précision	Linéaire / Approximatif	Non linéaire / Exact
Ensembliste	Volume de la région de confiance	D-optimalité	X-optimalité
Ponctuelle	Déterminant de la matrice d'erreur quadratique moyenne de l'estimateur des moindres carrés	D-optimalité	DX-optimalité

Challenges en non linéaire

- Approches bayesiennes :
  - ✓ Donner une distribution a priori sur la valeur de θ
  - ✓ Une alternative aux approches locale et séquentielle
  - ✓ Plus grande robustesse qu'un a priori unique sur θ
  - ✓ Difficultés calculatoires pour des critères exacts
- Parallélisation des algorithmes :
  - ✓ Réduire les temps de calcul de plans d'expériences
- Diffusion de ces approches au niveau industriel :
  - ✓ Réduire au maximum le niveau d'expertise nécessaire