

Proposition de correction du TD sur les plans optimaux

Module de plan d'expériences - F. Husson - Agrocampus

Exercice 1 : PLAN OPTIMAL POUR RETROUVER UN PLAN FRACTIONNAIRE

```
1. set.seed(123)
library(DoE.base)
plan <- fac.design(nlevels=2, nfactores=6)
library(AlgDesign)
planOpt <- optFederov(~.,plan,nTrials=8,criterion="D")
planOpt
```

```
$D
[1] 1
$A
[1] 1
$Ge
[1] 1
$Dea
[1] 1
$design
  A B C D E F
2  2 1 1 1 2 2
23 1 2 1 2 2 1
35 1 1 1 1 1 1
36 2 1 2 2 1 1
40 2 2 1 2 1 2
45 2 2 2 1 2 1
53 1 2 2 1 1 2
56 1 1 2 2 2 2
```

- Il faut estimer 7 paramètres (1 pour la constante et 6 pour chaque facteur). Il reste 1 ddl pour la résiduelle.
- On retrouve le plan 2^{6-2} .

```
options(contrasts = c("contr.sum", "contr.sum"))
Xopti <- model.matrix(~ . , planOpt$design)
t(Xopti)%*%Xopti
```

```
      (Intercept) A1 B1 C1 D1 E1 F1
(Intercept)      8  0  0  0  0  0  0
A1                0  8  0  0  0  0  0
B1                0  0  8  0  0  0  0
C1                0  0  0  8  0  0  0
D1                0  0  0  0  8  0  0
E1                0  0  0  0  0  8  0
F1                0  0  0  0  0  0  8
```

Exercice 2 : CONSTRUCTION DE PLANS OPTIMAUX

On s'intéresse à l'effet de 5 facteurs A B C D E sur une réponse Y. Le facteur A a 2 modalités, B et C ont 3 modalités, D et E ont 4 modalités.

- $2 \times 3^2 \times 4^2 = 288$
- $PPCM(6, 8, 12, 9, 16) = 144$

```
library(DoE.base)
Design.1 <- fac.design(nlevels=c(2,3,3,4,4), factor.names= c("A","B","C","D", "E"))
X <- model.matrix(~ . , Design.1)
VARCOV <- solve(t(X)%*%X)
determinant <- det(VARCOV)
```

```
[1] 82944
```

```
3. set.seed(123)
library(DoE.base)
Design.1 <- fac.design(nlevels=c(2,3,3,4,4), factor.names= c("A","B","C","D", "E"))

library(AlgDesign)
plan.1.Dopt<-optFederov(~.,Design.1,nTrials=12,criterion="D")
Xopti=model.matrix(~ . , plan.1.Dopt$design)
det(t(Xopti)%*%Xopti)      #1194393600
```

```
[1] 9437184
```

```
VARCOVopti <- solve(t(Xopti)%*%Xopti)
round(VARCOVopti, 2)
```

	(Intercept)	A1	B.L	B.Q	C.L	C.Q	D.L	D.Q	D.C	E.L	E.Q	E.C
(Intercept)	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
A1	0.00	0.12	0.00	0.00	-0.04	-0.08	-0.06	0.00	0.03	0.03	0.00	0.06
B.L	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
B.Q	0.00	0.00	0.00	0.33	0.14	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C.L	0.00	-0.04	0.00	0.14	0.33	-0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02
C.Q	0.00	-0.08	0.00	-0.08	-0.01	0.32	0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.03
D.L	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.02	0.03	0.40	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.10
D.Q	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.12	0.00
D.C	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.38	-0.12	0.00	0.01
E.L	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.12	0.38	0.00	0.01
E.Q	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.38	0.00
E.C	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.10	0.00	0.01	0.01	0.00	0.40

On peut retrouver la valeur de l'objet D qui donne à quel point le plan est efficace par rapport au plan complet (efficacité de 32.7% pour l'estimation de chaque facteur) :

```
plan.1.Dopt$D
```

```
$D
[1] 0.3177281
```

```
plan.1.Dopt$A
```

```
$A
[1] 3.803819
```

```
(det((1/12)*t(Xopti)%*%Xopti)^(1/12))
```

```
[1] 0.3177281
```

```
sum(diag(solve(t(Xopti)%*%Xopti/12)))/12
```

```
[1] 3.803819
```

4. Avec la fonction `oa.design`, on obtient le plan complet.

```
> plan <- oa.design(nlevels=c(2,3,3,4,4),nruns=144)
```

```
creating full factorial with 288 runs ...
```

Pourtant avec le plan optimal en 144 essais on trouve bien un plan orthogonal.

```
Design.1.Dopt <- optFederov(~A+B+C+D+E,Design.1,nTrials=144,criterion="D")
Xopti <- model.matrix(~ A + B+ C + D + E , Design.1.Dopt$design)
VARCOVopti <- solve(t(Xopti)%*%Xopti)
round(VARCOVopti, 2)
```

	(Intercept)	A1	B.L	B.Q	C.L	C.Q	D.L	D.Q	D.C	E.L	E.Q	E.C
(Intercept)	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
A1	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
B.L	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
B.Q	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C.L	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C.Q	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
D.L	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
D.Q	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
D.C	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
E.L	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
E.Q	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00
E.C	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03

Exercice 3 : CONSTRUCTION D'UN PLAN POUR FAIRE DE LA FARINE D'INSECTES

On peut proposer une liste d'essais à partir d'un plan composite centré. Mais le mieux est de partir d'une grille et de laisser un algorithme de Fedorov choisir les points dans la grille.

```
library(AlgDesign)
levelsA <- seq(3,5,by=.1)
levelsB <- seq(90,120,by=1)
dat <- expand.grid(list(A=levelsA,B=levelsB))
dat
```

Il faudrait ensuite supprimer 1 à 1 les essais qui ne conviennent pas, ou alors trouver une règle de décision pour supprimer les essais. Et ensuite, on utilise Fedorov. Avec 6 essais on sera extrêmement limité car il y aura autant d'essais que de paramètres à estimer. Il serait préférable d'en prendre un peu plus.

```
planOpt <- optFedorov(~quad(.),dat,nTrials=10,eval=TRUE)
```

```
1          3.0          90
11         4.0          90
21         5.0          90
294        5.0         103
316         3.0         105
326         4.0         105
630         5.0         119
631         3.0         120
640         3.9         120
651         5.0         120
```

Attention, pour vérifier l'orthogonalité, on doit centrer les variables quantitatives. Donc on utilise la fonction `scale`.

```
planOpt$design <- as.data.frame(scale(planOpt$design,scale=FALSE))
options(contrasts=c("contr.sum","contr.sum"))
X <- model.matrix(~quad(.), data=planOpt$design)
round(solve(t(X)%*%X),3)
```

	(Intercept)	A	B	I(A ²)	I(B ²)	A:B
(Intercept)	0.553	-0.037	0.003	-0.329	-0.001	-0.001
A	-0.037	0.155	0.001	0.064	0.000	0.000
B	0.003	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000
I(A ²)	-0.329	0.064	0.001	0.489	0.000	0.002
I(B ²)	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
A:B	-0.001	0.000	0.000	0.002	0.000	0.001

Exercice 4 : MISE EN PLACE D'UN PLAN D'EXPÉRIENCE POUR DES ÉMULSIONS

1. On construit un plan 2^{5-1} .

```
library (FrF2)
plexp<-FrF2(nruns=16, nfacteurs=5, factor.names = list(mecanique=c("8000rpm", "13500rpm"),
  ultrasons=c("20min","30min"), huile=c("2%", "5%"),
  gelatine=c("2%", "4%"), incorporation=c("une fois", "goutte/goutte")))
summary(plexp2)
```

On est ici en résolution 5 : les effets principaux sont confondus avec des interactions d'ordre 4.

2. On veut construire un plan avec 5 facteurs à 2 modalités et un facteur à 4 modalités. On peut partir de MOLS et donc utiliser 3 carrés latins orthogonaux pour avoir 5 facteurs à 4 modalités, et ensuite découper 3 facteurs à 4 modalités en 3 fois 2 facteurs à 2 modalités. L'autre solution possible est de construire le plan complet est d'utiliser un algorithme optimal. Cela sera d'ailleurs utile si on veut construire un plan en 12 essais.

```
library(DoE.base)
plexp <- fac.design(nlevels=c(2,2,2,2,4,2), factor.names = list(mecanique=c("8000rpm", "13500rpm"),
  ultrasons=c("20min","30min"), huile=c("2%", "5%"),
  incorporation=c("une fois", "goutte/goutte"),
  ratio=c("25-75", "50-50", "75-25", "0-100"), experimentateur=c("moi", "stagiaire")))
```

```
library(AlgDesign)
plopt <- optFederov(~., plexp, nTrials=16, criterion="D")
Xopti <- model.matrix(~ . , plopt$design)
solve(t(Xopti)%*%Xopti)
```

Ici, on peut voir que le plan n'est pas orthogonal. Il y a des confusions avec : I (Intercept) et le facteur à 4 modalités (ratio de protéines). Mais sinon le plan est très bon.

```
plopt <- optFederov(~., plexp, nTrials=12, criterion="D")
Xopti <- model.matrix(~ . , plopt$design)
solve(t(Xopti)%*%Xopti)
round(solve(t(Xopti)%*%Xopti),4)
```

	(Intercept)	mecanique1	ultrasons1	huile1	incorporation1	ratio50-50	ratio75-25
(Intercept)	0.3974	0.0385	0.0385	0.0385	-0.0385	-0.3974	-0.4615
mecanique1	0.0385	0.0897	0.0064	0.0064	-0.0064	-0.0385	-0.0769
ultrasons1	0.0385	0.0064	0.0897	0.0064	-0.0064	-0.0385	-0.0769
huile1	0.0385	0.0064	0.0064	0.0897	-0.0064	-0.0385	-0.0769
incorporation1	-0.0385	-0.0064	-0.0064	-0.0064	0.0897	0.0385	0.0769
ratio50-50	-0.3974	-0.0385	-0.0385	-0.0385	0.0385	0.6474	0.4615
ratio75-25	-0.4615	-0.0769	-0.0769	-0.0769	0.0769	0.4615	0.9231
ratio0-100	-0.3974	-0.0385	-0.0385	-0.0385	0.0385	0.3974	0.4615
experimentateur1	-0.0385	-0.0064	-0.0064	-0.0064	0.0064	0.0385	0.0769

	ratio0-100	experimentateur1
(Intercept)	-0.3974	-0.0385
mecanique1	-0.0385	-0.0064
ultrasons1	-0.0385	-0.0064
huile1	-0.0385	-0.0064
incorporation1	0.0385	0.0064
ratio50-50	0.3974	0.0385
ratio75-25	0.4615	0.0769
ratio0-100	0.8974	0.0385
experimentateur1	0.0385	0.0897

Le plan est 12 essais engendre beaucoup de confusions. On choisirait plutôt le plan en 16 essais.

3. Il suffit de remplacer ces 2 facteurs par 1 seul facteur à 4 modalités.