LES PLANS DE MELANGES
AGB – 2A –Statistiques appliquées
Florent ARNAL

10 Cours/TD + Evaluation (CR) avec R

Contexte :

Innover et renouveler régulièrement ses produits, est devenu une condition de survie sur le marché agro-alimentaire où l'avenir d'une entreprise ne dépend plus seulement de la qualité de ses produits, services, de ses hommes ou de son management,...

LES PLANS DE MELANGES

Lien avec les plans d'expérience

Les facteurs doivent être indépendants.
Ainsi, si on a identifié 4 facteurs, on peut choisir le niveau d'un facteur quels que soient les niveaux associés aux autres facteurs.
Ceci n'est pas le cas dans le cadre des plans de mélanges.

Les réponses sont étudiées en fonction des proportions des constituants.
Ainsi, s'il y a 4 constituants et que 3 proportions ont été fixées, la quatrième est **forcément imposée** (la somme étant égale à 100 %).

1

Exemple de processus de développement de produits

Veille marketing et commerciale
↓
Étude du projet et proposition de réponses
↓
Recherche de matières premières
↓
Essais laboratoire : formulation
↙ ↓ ↘
Dégustation | Anticipation industrialisation | Calcul du prix de revient technique
↓
Si essais concluants
Échantillonnage client
↓
Si proposition acceptées
Essais industriels
↓
Industrialisation

2

Exemple de processus de développement de produits

Veille marketing et commerciale

↓

Étude du projet et proposition de réponses

↓

Recherche de matières premières

↓

Essais laboratoire : formulation

Dégustation

Anticipation industrialisation

Calcul du prix de revient technique

↓

Si essais concluants
Échantillonnage client

↓

Si proposition acceptées
Essais industriels

↓

Industrialisation

3

Formulation

La formulation recouvre l'ensemble des savoir-faire nécessaires au développement et à la fabrication d'un produit commercial répondant à un cahier des charges préétabli.

Conditionnement

Conditions de conservation

Réglementation

Procédé de fabrication

FORMULATION

Coût

Caractéristiques nutritionnelles

Caractéristiques organoleptiques

Caractéristiques microbiologiques

4

Formulation

La formulation recouvre l'ensemble des savoir-faire nécessaires au développement et à la fabrication d'un produit commercial répondant à un cahier des charges préétabli.

Conditionnement

Conditions de conservation

Réglementation

Procédé de fabrication

FORMULATION

Coût

Caractéristiques nutritionnelles

Caractéristiques organoleptiques

Caractéristiques microbiologiques

Essais laboratoire

5

Essais laboratoire : deux approches

1. **Ajouts successifs** : réalisation d'une série d'essais jusqu'à obtentio d'un résultat à priori satisfaisant : méthode empirique

2. **Plans de mélanges : outil mathématique de la formulation**

Réduction ou optimisation du nombre de mélanges (et donc d'analyses nécessaires).
Mesures expérimentales uniquement sur les mélanges les plus informatifs.

Modélisation mathématique des réponses en fonction des mélanges.

Choix du mélange optimal en respectant les contraintes extérieures.

6

Démarche suivie en plan de mélanges

- **Formuler clairement le problème étudié** :
les objectifs, le budget, le temps, les moyens matériels…

C'est l'étude du projet qui a pour objectif de bien prendre connaissance de la demande du client, et de répondre en tenant compte de ses compétences.

7

Démarche suivie en plan de mélange

- **Formuler clairement le problème étudié** : les objectifs, le budget, le temps, les moyens matériels…
- **Recenser les informations existantes** (bibliographie, rapports sur la création de produits similaires, réglementation…) et à partir de celles-ci définir les constituants

1. Sélectionner la ou les variables Y
(Réponses qui permettent de qualifier le produit).

2. Sélectionner les variables X_i
(composants les plus significatifs pour ces réponses).

3. Sélectionner les niveaux pour chaque X_i .

8

Démarche suivie en plan de mélange

- **Formuler clairement le problème étudié** :
les objectifs, le budget, le temps, les moyens matériels…
- **Recenser les informations existantes** (bibliographie, rapports sur la création de produits similaires, réglementation…) et à partir de celles-ci définir les constituants.
- **Etablir une stratégie expérimentale ou un plan d'expérimentation**
éventuellement faire l'hypothèse d'un modèle mathématique qui semble adapté

Comment les X_i affectent Y ?
Existe-t-il une relation du type $Y=f(X_1, X_2, \ldots, X_n)$?
Quelles sont les interactions entre les X_i qui affectent Y ?

9

Démarche suivie en plan de mélange

- **Formuler clairement le problème étudié** : les objectifs, le budget, le temps, les moyens matériels…
- **Recenser les informations existantes** (bibliographie, rapports sur la création de produits similaires, réglementation…) et à partir de celles-ci définir les constituants,.
- **Etablir une stratégie expérimentale ou un plan d'expérimentation**
- **Effectuer les expériences** qui donneront les valeurs des réponses étudiées.

1. Etablir la matrice du plan.
2. Faire les essais et collecter les données.

10

Démarche suivie en plan de mélange

- **Formuler clairement le problème étudié** : les objectifs, le budget, le temps, les moyens matériels…
- **Recenser les informations existantes** (bibliographie, rapports sur la création de produits similaires, réglementation…) et à partir de celles-ci définir les constituants,.
- **Etablir une stratégie expérimentale ou un plan d'expérimentation**
- **Effectuer les expériences** qui nous donneront les valeurs des réponses étudiées.
- **En déduire les réponses aux questions posées**.

1. Faire un graphe des valeurs des essais.
2. Examiner les effets des facteurs.
3. Déterminer les niveaux optimaux des facteurs.

11

Les caractéristiques des mélanges

Dans les plans de mélanges, on étudie chacune des réponses en fonction des proportions des constituants.
La somme de ces proportions est toujours égale à 100 %.

Ainsi, le pourcentage du dernier constituant est imposé par la somme des pourcentages des premiers constituants.

Contrainte fondamentale des mélanges

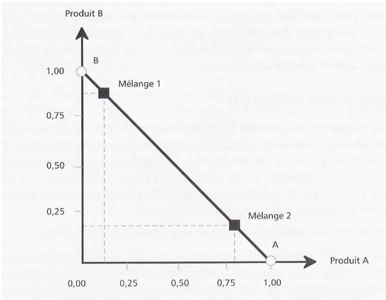
$$\sum_{i=1}^{n} X_i = 1$$

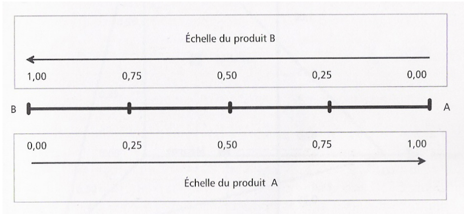
12

Représentation géométrique des mélanges

1. Mélange à deux constituants

Soient X_A la teneur du constituant A et X_B celle du second B.
On sait que $X_A + X_B = 1$



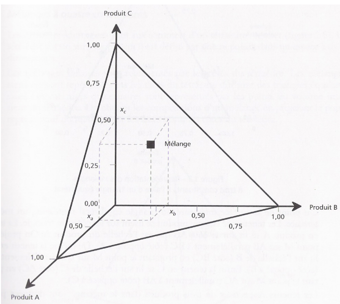


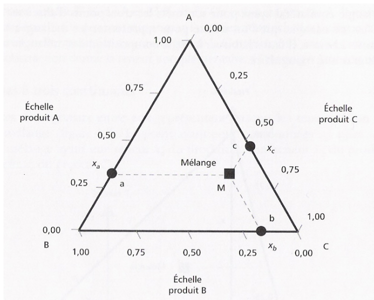
Les compositions X_A et X_B variant entre 0 et 1, toutes les compositions possibles des mélanges des deux produits A et B sont représentées par les points de $[AB]$
(contenu dans la droite d'équation $X_B = - X_A + 1$).

Représentation géométrique des mélanges

2. Mélange à trois constituants

Soit X_A, X_B, X_C les teneurs respectives des constituants A, B et C.
On sait que $X_A + X_B + X_C = 1$.





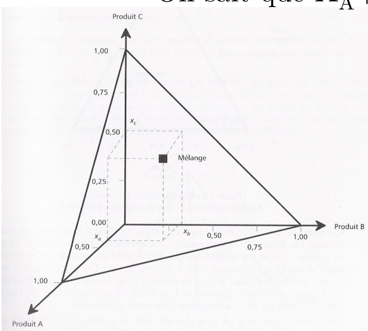
Toutes les compositions possibles des mélanges des trois produits A, B et C sont représentées par les points d'un triangle équilatéral (contenus sur un plan passant par les trois points d'abscisse 1 sur chacun des axes des coordonnées).

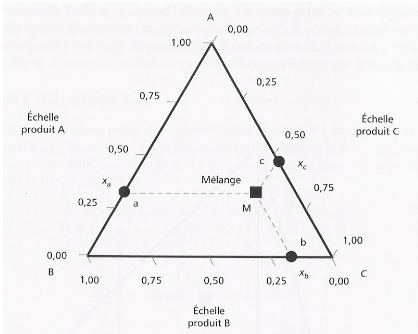
Représentation géométrique des mélanges

2. Mélange à trois constituants

Soit X_A, X_B, X_C les teneurs respectives en constituant A, B et C.

On sait que $X_A + X_B + X_C = 1$



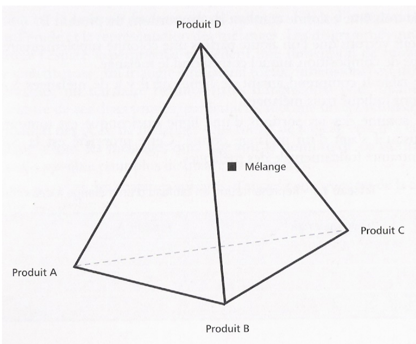


Un point surface intérieur du triangle représente un mélange ternaire.
Les teneurs X_A, X_B, X_C se lisent sur les cotés du triangle
(A : coté [AB], B : coté [BC], C : coté [AC]).

Représentation géométrique des mélanges

3. Mélange à quatre constituants

Soit X_A, X_B, X_C, X_D les teneurs respectives en constituant A, B, C et D.
On sait que $X_A+X_B+X_C+X_D = 1$



Les quatre produits sont aux sommets d'un tétraèdre régulier.
Les mélanges binaires sont représentés sur les cotés du tétraèdre,
les mélanges ternaires sur les faces qui sont des triangles équilatéraux
et les quaternaires par les points du volume intérieur du tétraèdre.

Représentation géométrique des mélanges

4. Mélange à cinq constituants

La représentation géométrique n'est plus possible car il faudrait Dessiner un volume régulier à quatre dimensions.
Autre représentation pour illustrer tous les mélanges quel que soit le nombre de constituants : les tableaux …

Ex :

N° du mélange	Produit A	….	Produit D
1	$x_{A,1}$		$x_{D,1}$
2	$x_{A,2}$		$x_{D,2}$
3	$x_{A,3}$		$x_{D,3}$

17

Différents types de plans de mélanges

1. Mélanges sans contraintes

$$0 \leq X_i \leq 1$$

2. Mélanges avec contraintes supérieures **ou** inférieures

$$0 \leq X_i \leq b_i < 1 \text{ ou } 0 < a_i \leq X_i \leq 1$$

3. Mélanges avec contraintes supérieures **et** inférieures

$$0 < a_i \leq X_i \leq b_i < 1$$

4. Mélanges avec contraintes relationnelles

18

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Introduction

Les principaux plans de mélange sont liés à la façon de placer les points représentatifs des mélanges.

On peut citer :

- les plans en réseaux $\{q,m\}$ où q représente le nombre de composants et $1/m$ correspond au pas.

Le nombre total de mélanges différents est

$$\binom{q+m-1}{m}$$

- les plans centrés comprenant les mélanges suivants :

Produits purs, mélanges moitié-moitié, mélanges tiers-tiers-tiers, …

Le nombre total de mélanges différents est

$$2^q - 1$$

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Objectif :

Obtenir la meilleure approximation possible du mélange optimal en effectuant un minimum d'essais.

Comment choisir un modèle mathématique ?

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Modèle mathématique

La modélisation mathématique permet d'exprimer la surface de réponse dans le domaine d'étude.

Choix a priori d'un modèle mathématique

Validation du modèle

1. Calcul des coefficients du modèle à l'aide de résultats d'expériences

2. Évaluation de la qualité de prévision du modèle grâce à des paramètres et tests statistiques (**R^2 ajusté, Test de Fisher**)

Solution éventuelle :
Validation du modèle en réalisant des essais avec de nouvelles compositions de mélanges

21

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Modèle mathématique du premier degré

Modèle mathématique le plus simple. On suppose que les variations de la réponse sont proportionnelles aux teneurs des constituants du mélange. L'équation polynomiale du premier degré est :

Cas de 3 constituants :

L'équation polynomiale du premier degré est :

$$Y = a_0 + a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3$$

où X_1, X_2, X_3 = teneurs liées à A, B, C
et a_0, a_1, a_2, a_3 = coefficients à déterminer

En utilisant la contrainte fondamentale des mélanges, on a

$$Y = b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3$$

22

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Modèle mathématique du premier degré

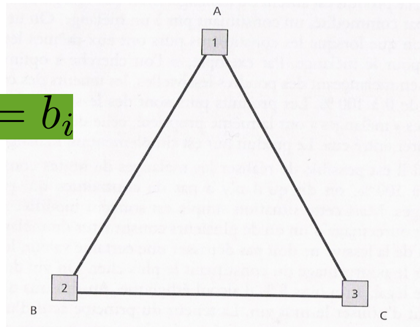
$$Y = b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3$$

Calcul des coefficients du modèle

Matrice du modèle de Scheffé (plan en réseaux {3;1})

n	X_1	X_2	X_3	Y
1	1	0	0	y_1
2	0	1	0	y_2
3	0	0	1	y_3

$$y_i = b_i$$



LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Modèle mathématique du second degré

Modèle mathématique qui comprend les termes du premier degré, les termes rectangles et les termes carrés.

Cas de 2 constituants

L'équation polynomiale du second degré est :

$$Y = a_0 + a_1X_1 + a_2X_2 + a_{11}X_1^2 + a_{12}X_1X_2 + a_{22}X_2^2$$

En utilisant la contrainte fondamentale des mélanges, on a

$$Y = b_1X_1 + b_2X_2 + b_{12}X_1X_2$$

24

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Modèle mathématique du troisième degré (cas de 3 constituants)

Modèle réduit :

$$Y = b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{123}X_1X_2X_3$$

25

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Validation du modèle mathématique

Le modèle devant servir à faire des prévisions, il est important de savoir s'il représente bien le phénomène que l'on étudie.
Pour nous assurer de sa validité, il faut comparer une (ou plusieurs) valeur(s) mesurée(s) de la réponse à une (ou plusieurs) valeur(s) prévue(s) par le modèle.

$\Downarrow$

La position du mélange de validation dans le domaine est importante. On choisit, en général, les points qui permettent d'établir le modèle de degré juste supérieur à celui choisi initialement.

26

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Exemple : Comportement au froid d'un mélange de 3 constituants
Précision sur la tenue au froid est de 0,5°C

1. **Hypothèse d'un modèle linéaire**

$$Y = b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3$$

n	X_1	X_2	X_3	Tenue au froid (°C)
1	1	0	0	-40,5
2	0	1	0	-12,5
3	0	0	1	-19

Il faut 3 équations.

On choisit un plan réseaux {3,1}.

$$Y = -40,5X_1 - 12,5X_2 - 19X_3$$

27

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Exemple

1. **Hypothèse d'un modèle linéaire**

$$Y = -40,5X_1 - 12,5X_2 - 19X_3$$

Validité du modèle linéaire testée avec une nouvelle expérience

n	X_1	X_2	X_3	Tenue au froid (°C)
4	1/3	1/3	1/3	-26,9

$y_{obs} = -26,9$
$y_{calc} = -24$
$\mid y_{obs} - y_{calc} \mid = 2,5$

Modèle linéaire non valable

28

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Exemple

2. Hypothèse d'un modèle quadratique

$$Y = b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3$$

n	X_1	X_2	X_3	Tenue au froid (°C)
5	1/2	1/2	0	-28,6
6	0	1/2	1/2	-30,8
7	1/2	0	1/2	-18,3

Il faut 6 équations.

On choisit un plan réseaux {3,2}

$$Y = -40,5X_1 + -12,5X_2 - 19X_3 - 8,4X_1X_2 + 45,8X_1X_3 - 60,2X_2X_3$$

29

LES MELANGES SANS CONTRAINTES

Exemple

2. Hypothèse d'un modèle quadratique

$$Y = -40,5X_1 + -12,5X_2 - 19X_3 - 8,4X_1X_2 + 45,8X_1X_3 - 60,2X_2X_3$$

n	X_1	X_2	X_3	Tenue au froid (°C) *Observée*	Tenue au froid (°C) *Calculée*
4	1/3	1/3	1/3	-26,9	-26,5
8	2/3	1/6	1/6	-29,6	-29,75
9	1/6	2/3	1/6	-24,2	-24,6
10	1/6	1/6	2/3	-23,5	-23,3

$$|y_{obs} - y_{calc}| < 0,5$$

Modèle quadratique « valable » (voir suite pour validation statistique)

VALIDATION D'UN MODÈLE

- Utilisation du coefficient de détermination R^2 (ajusté)

- Analyse de variance

Exemples précédents :
Estimation de l'écart-type de la réponse Y permettant de comparer un résultat observé et un résultat « théorique »

31

AUTOUR DU COEFFICIENT DE DÉTERMINATION

R^2 et R^2 ajusté

Rappel :

$$R^2 = \frac{SCE_{exp}}{SCE_{totale}} = 1 - \frac{SCE_{res}}{SCE_{totale}}$$

Problème : Augmentation mécanique du coefficient de détermination en augmentant le nombre de coefficients

$$R^2_{aj} = 1 - \frac{SCE_{res}/(n-p)}{SCE_{totale}/(n-1)} = 1 - \left(1 - R^2\right)\frac{n-1}{n-p}$$

n = nombre d'expériences
p = nombre de coefficients à estimer (lié au modèle)

Choix du modèle suivant la valeur du coefficient de détermination ajusté ...

32

AUTOUR DU TEST DE FISHER
ANOVA

Le test de Fisher permet de tester l'hypothèse de nullité de tous les paramètres (p coefficients) du modèle.
$\mathcal{H}_0 : a_1 = a_2 = \cdots = a_p$

La statistique de test (pour n expériences) est :
$\mathcal{F}_{obs} = \dfrac{CM_{exp}}{CM_{res}} \sim \mathcal{F}\,(p-1; n-p)$

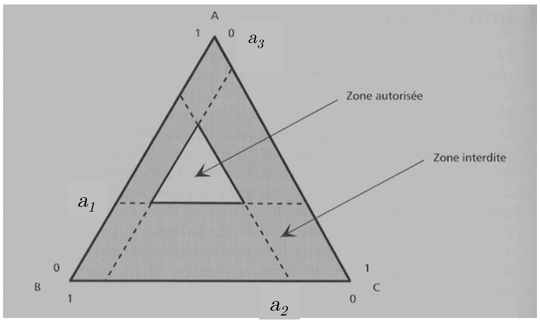
En cas de rejet de $\mathcal{H}_0$, on conclut qu'il existe au moins un paramètre non nul dans le modèle.

33

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Les contraintes inférieures : $0 < a_i \leq X_i \leq 1$



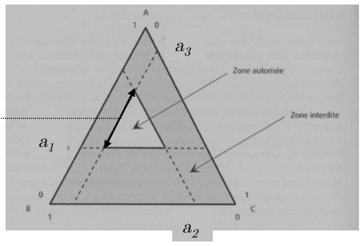
Réduction du domaine expérimental : les mélanges à étudier doivent se situer à la frontière ou à l'intérieur du domaine autorisé.

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Le nouveau domaine expérimental :

$$R_a = 1 - \sum_i a_i$$



- $R_a < 0$: le domaine expérimental n'existe pas,
  les contraintes inférieures sont incompatibles
- $R_a = 0$: le domaine expérimental se limite à un point
- $R_a > 0$: le domaine expérimental est réduit et de taille R_a
  (R_a = mesure linéaire du nouveau domaine)

35

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Le domaine expérimental est limité par des contraintes supérieures qui se déduisent des contraintes inférieures.

Les contraintes supérieures implicites :

$$b_i^* = a_i + R_a$$

Dans le nouveau domaine de taille réduite, les sommets sont des mélanges
de constituants purs :
ces mélanges sont appelés « pseudo-composants ».

36

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple

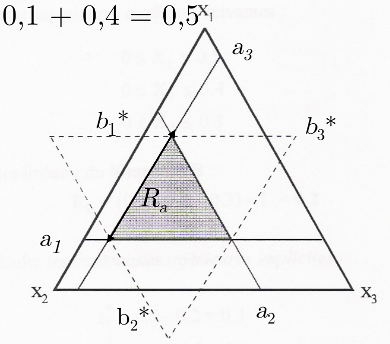
$0{,}2 \leq X_1 \leq 1$
$0{,}3 \leq X_2 \leq 1$
$0{,}1 \leq X_3 \leq 1$

Mesure linéaire du simplexe A

$R_a = 1 - (0{,}2 + 0{,}3 + 0{,}1) = 0{,}4$

$R_a > 0$: le domaine expérimental existe

$b_1^* = 0{,}2 + 0{,}4 = 0{,}6$
$b_2^* = 0{,}3 + 0{,}4 = 0{,}7$
$b_3^* = 0{,}1 + 0{,}4 = 0{,}5$



Le domaine expérimental cohérent est donnée par l'ensemble des contraintes :

$0{,}2 \leq X_1 \leq 0{,}6$
$0{,}3 \leq X_2 \leq 0{,}7$
$0{,}1 \leq X_3 \leq 0{,}5$

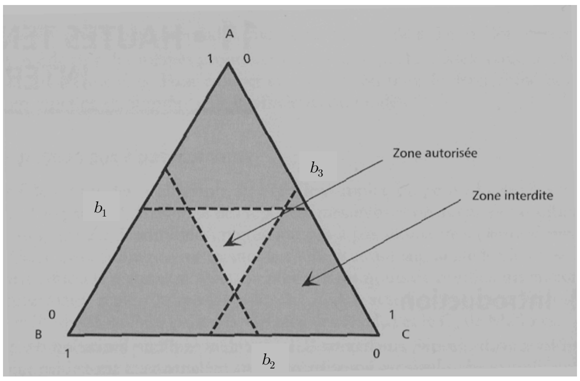
LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Les contraintes supérieures : $0 \leq X_i \leq b_i < 1$

$$\sum_{i=1}^{n} X_i = 1$$

$$\begin{cases} X_1 \leq b_1 \\ X_2 \leq b_2 \\ X_3 \leq b_3 \end{cases}$$



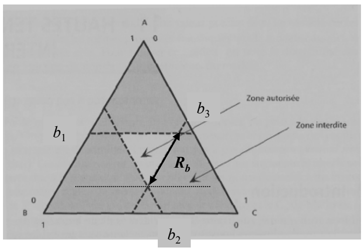
Réduction du domaine expérimental : les mélanges à étudier doivent se situer à la lisière ou à l'intérieur du domaine autorisé.

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Le nouveau domaine expérimental :

$$R_b = \sum_i b_i - 1$$



$R_b < 0$: le domaine expérimental n'existe pas,
les contraintes supérieures sont incompatibles

$R_b = 0$: le domaine expérimental se limite à un point

$R_b > 0$: le domaine expérimental est réduit et de taille R_b
(R_b = mesure linéaire du nouveau domaine)

39

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Le domaine expérimental est limité par des contraintes inférieures qui se déduisent des contraintes supérieures.

Les contraintes inférieures implicites :

$$a_i^* = b_i - R_b$$

Dans le nouveau domaine de taille réduite, les sommets sont des mélanges de constituants purs :
ces mélanges sont appelés « pseudo-composants ».

40

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple

$X_1 \leq 0,5$
$X_2 \leq 0,4$
$X_3 \leq 0,3$

Mesure linéaire du simplexe A

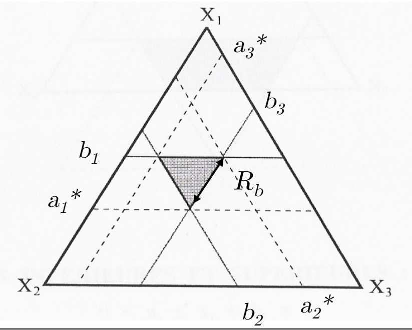
$R_b = (0,5 + 0,4 + 0,3) - 1 = 0,2$

$R_b > 0$ Le domaine expérimental existe

$a_1^* = 0,5 - 0,2 = 0,3$
$a_2^* = 0,4 - 0,2 = 0,2$
$a_3^* = 0,3 - 0,2 = 0,1$

Le domaine expérimental cohérent
est donnée par l'ensemble des contraint

$0,3 \leq X_1 \leq 0,5$
$0,2 \leq X_2 \leq 0,4$
$0,1 \leq X_3 \leq 0,3$



LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple

$X_1 \leq 0,2$
$X_2 \leq 0,6$
$X_3 \leq 0,7$

Mesure linéaire du simplexe B

$R_b = (0,2 + 0,6 + 0,7) - 1 = 0,5$

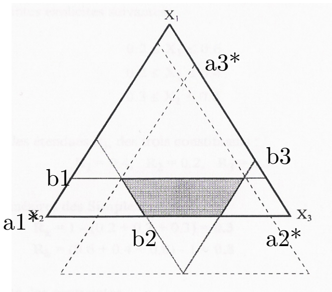
$R_b > 0$ Le domaine expérimental existe

$a_1^* = 0,2 - 0,5 = -0,3$
$a_2^* = 0,6 - 0,5 = 0,1$
$a_3^* = 0,7 - 0,5 = 0,2$

Le domaine expérimental cohérent
est donnée par l'ensemble des contraintes :

$0 \leq X_1 \leq 0,2$
$0,1 \leq X_2 \leq 0,6$
$0,2 \leq X_3 \leq 0,7$

Le domaine expérimental n'est plus un simplexe !



LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Les contraintes inférieures et supérieures : $0 < a_i \leq X_i \; b_i < 1$

On doit vérifier la compatibilité des contraintes afin d'obtenir un domaine expérimental cohérent.

$$R_b = \sum_i b_i - 1 \qquad R_a = 1 - \sum_i a_i \qquad R_i = b_i - a_i$$

(Etendue de composant i)

contraintes supérieures compatibles si toutes les $R_i \leq R_a$
contraintes inférieures compatibles si toutes les $R_i \leq R_b$

Les contraintes incompatibles sont remplacées par des contraintes implicites :

$$b_i{}^* = a_i + R_a \qquad a_i{}^* = b_i - R_b$$

43

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Le domaine expérimental

$R_b = R_a$: les simplexes A et B ont des orientations différentes. Le domaine expérimental n'est donc pas un simplexe.

$R_a < R_b$: le simplexe A est plus petit que le simplexe B, A est il inclus dans B ?

$R_b < R_a$: le simplexe B est plus petit que le simplexe A, B est il inclus dans A ?

domaine expérimental est un simplexe si et seulement si
un simplexe est inclus dans l'autre.

44

Les contraintes individuelles

Le domaine expérimental est-il un simplexe ?

- Calcul de l'étendue R_i du composant i :
$$R_i = b_i - a_i$$
- Calcul de la mesure R_p définie par :
$$R_p = \min (R_a \ , R_b)$$

Si toutes les étendues R_i sont égales à R_p alors la domaine expérimental est un simplexe.

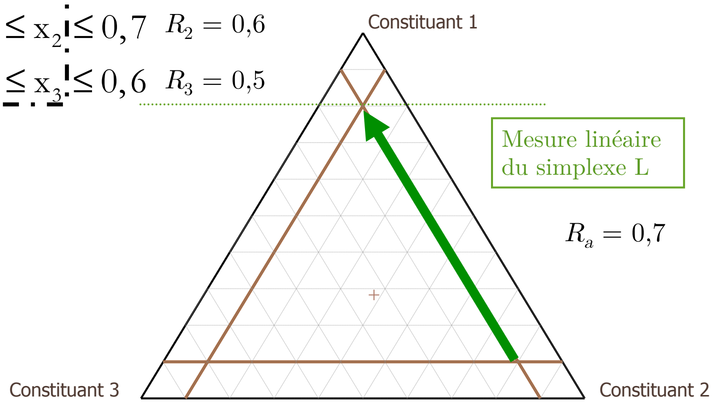
Les contraintes individuelles

Exemple

Caractérisation de la géométrie du domaine expérimental

$$\begin{cases} 0,1 \leq x_1 \leq 0,5 & R_1 = 0,4 \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,7 & R_2 = 0,6 \\ 0,1 \leq x_3 \leq 0,6 & R_3 = 0,5 \end{cases}$$

$R_i < R_a$: contraintes supérieures compatibles



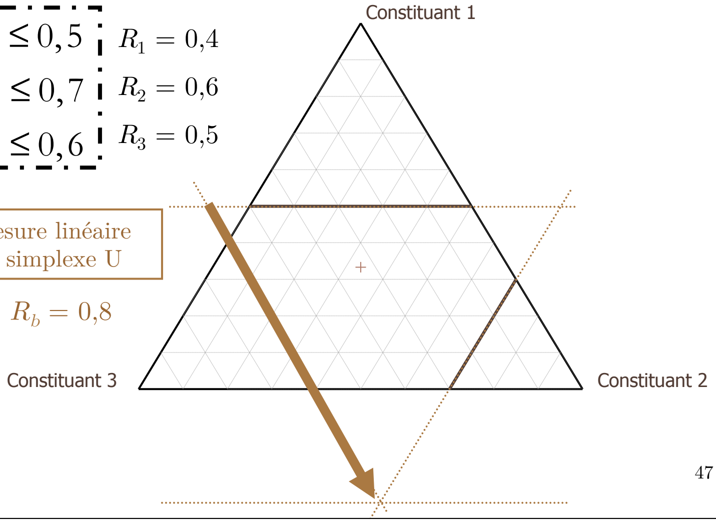
LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Caractérisation de la géométrie du domaine expérimental

$R_i < R_b$: contraintes inférieures compatibles

$$\begin{cases} 0,1 \leq x_1 \leq 0,5 & R_1 = 0,4 \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,7 & R_2 = 0,6 \\ 0,1 \leq x_3 \leq 0,6 & R_3 = 0,5 \end{cases}$$



Mesure linéaire du simplexe U

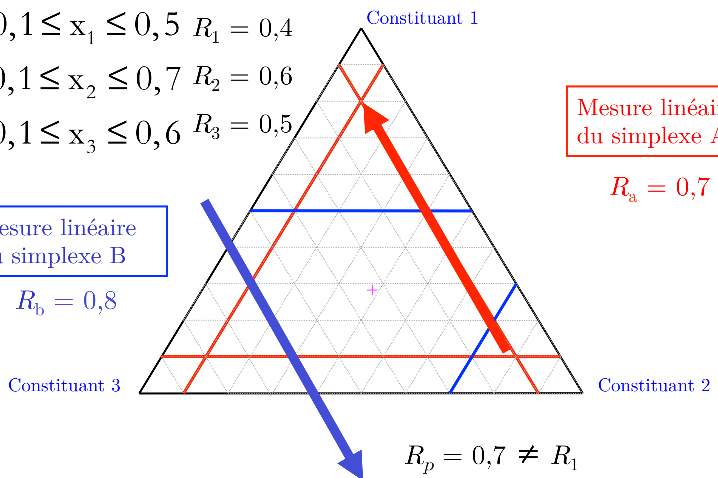
$R_b = 0,8$

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Caractérisation de la géométrie du domaine expérimental

$$\begin{cases} 0,1 \leq x_1 \leq 0,5 & R_1 = 0,4 \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,7 & R_2 = 0,6 \\ 0,1 \leq x_3 \leq 0,6 & R_3 = 0,5 \end{cases}$$



Mesure linéaire du simplexe A

$R_a = 0,7$

Mesure linéaire du simplexe B

$R_b = 0,8$

$R_p = 0,7 \neq R_1$

Le domaine expérimental n'est pas un simplexe

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple

$0{,}2 \le X_1 \le 0{,}6$ $\quad R_1 = 0{,}4$
$0{,}2 \le X_2 \le 0{,}4$ $\quad R_2 = 0{,}2$
$0{,}3 \le X_3 \le 0{,}8$ $\quad R_3 = 0{,}5$

$R_a = 0{,}3$
$R_b = 0{,}8$

$R_1 > R_a$: la contrainte supérieure b_1 est incompatible,
il faut la remplacer par la contrainte supérieure implicite

$$b_1{}^* = a_1 + R_a = 0{,}2 + 0{,}3 = 0{,}5$$

$R_3 > R_a$: la contrainte supérieure b_3 est incompatible,
il faut la remplacer par la contrainte supérieure implicite

$$b_3{}^* = a_3 + R_a = 0{,}3 + 0{,}3 = 0{,}6$$

Domaine expérimental cohérent

$0{,}2 \le X_1 \le 0{,}5$ $\quad R_1 = 0{,}3$
$0{,}2 \le X_2 \le 0{,}4$ $\quad R_2 = 0{,}2$
$0{,}3 \le X_3 \le 0{,}6$ $\quad R_3 = 0{,}3$

$R_a = 0{,}3$; $R_b = 0{,}5$

Toutes les étendues sont inférieures ou égales à R_a et R_b

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

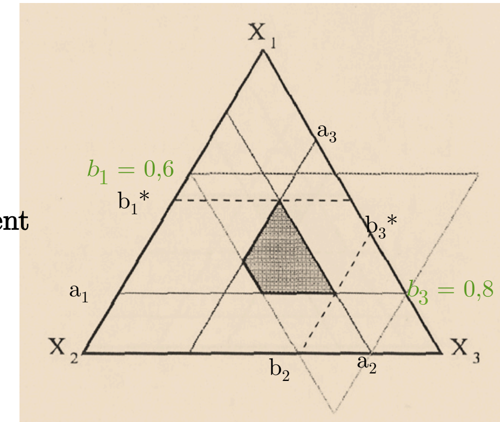
Exemple

$$\begin{cases} 0{,}2 \le X_1 \le 0{,}6 \\ 0{,}2 \le X_2 \le 0{,}4 \\ 0{,}3 \le X_3 \le 0{,}8 \end{cases}$$

b_1 et b_3 incompatibles

Domaine expérimental cohérent

$$\begin{cases} 0{,}2 \le X_1 \le 0{,}5 \\ 0{,}2 \le X_2 \le 0{,}4 \\ 0{,}3 \le X_3 \le 0{,}6 \end{cases}$$



LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Quelles matrices pour quels domaines ?

1. Le domaine expérimental est un simplexe

Il faut exprimer les matrices en fonction des «pseudo-composants» Z_i

1er cas : $R_a \leq R_b$

$$Z_i = \frac{X_i - a_i}{R_a} \quad soit \quad X_i = R_a Z_i + a_i$$

2nd cas : $R_a > R_b$

$$Z_i = \frac{b_i - X_i}{R_b} \quad soit \quad X_i = b_i - R_b Z_i$$

51

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple : Mesure élasticité d'un mélange de 3 constituants

$$\begin{cases} 0,4 \leq X_1 \\ 0,3 \leq X_2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 0,4 \leq X_1 \\ 0,3 \leq X_2 \\ 0 \leq X_3 \end{cases}$$

Domaine expérimental implicite :

$0,4 \leq X_1 \leq 0,7$

$0,3 \leq X_2 \leq 0,6$

$0 \leq X_3 \leq 0,3$

Nouveau domaine expérimental = simplexe A

$X_i = a_i + Z_i R_a$

52

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple 1. Hypothèse d'un modèle linéaire

$$Y = a_1X_1 + a_2X_2 + a_3X_3$$

N	Z_1	Z_2	Z_3	X_1	X_2	X_3	Elasticité
1	1	0	0	0,7	0,3	0	14150
2	0	1	0	0,4	0,6	0	17550
3	0	0	1	0,4	0,3	0,3	6450

$$Y = 10750X_1 + 22083\ X_2 - 14917\ X_3$$

53

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple 1. Hypothèse d'un modèle linéaire

$$Y = 10750X_1 - 22083X_2 - 14916X_3$$

Validité du modèle linéaire testée avec expérience n°4

N	Z_1	Z_2	Z_3	X_1	X_2	X_3	Elasticité
4	1/3	1/3	1/3	0,5	0,4	0,1	10850

Y observée : 10850
Y calculée pour le mélange (0,5 ; 0,4 ; 0,1) : Ycal = 12717

Yobs – Ycal > 500 (précision de la mesure) : **Modèle linéaire non valable**

54

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Exemple 2. Hypothèse d' un modèle quadratique

$$Y = a_1 X_1 + a_2 X_2 + a_3 X_3 + a_{12} X_1 X_2 + a_{23} X_2 X_3 + a_{13} X_1 X_3$$

N	Z_1	Z_2	Z_3	X_1	X_2	X_3	Elasticité
1	1	0	0	0.7	0.3	0	14150
2	0	1	0	0.4	0.6	0	17550
3	0	0	1	0.4	0.3	0.3	6450
5	1/2	1/2	0	0.55	0.45	0	15550
6	0	1/2	1/2	0.4	0.45	0.15	10400
7	1/2	0	1/2	0.55	0.30	0.15	8600

$$Y = 13150X_1 + 25817X_2 + 35039X_3 - 13333X_1X_2 - 71111X_2X_3 - 75556X_1X_3$$

55

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Exemple

2. Hypothèse d' un modèle quadratique

$$Y = 13150X_1 + 25817X_2 + 35039X_3 - 13333X_1X_2 - 71111X_2X_3 - 75556X_1X_3$$

Validité du modèle quadratique

N	Z_1	Z_2	Z_3	X_1	X_2	X_3	Elasticité *Observée*	Elasticité *Calculée*
4	1/3	1/3	1/3	0.5	0.4	0.1	10850	11117
8	2/3	1/6	1/6	0.6	0.35	0.05	12100	12367
9	1/6	2/3	1/6	0.45	0.5	0.05	14250	14100
10	1/6	1/6	2/3	0.45	0.35	0.2	8300	8083

y_{obs} et y_{cal} proches : **Modèle quadratique envisageable**

56

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Quelles matrices pour quels domaines ?

2. Le domaine expérimental n'est pas un simplexe

Il faut définir le polyèdre expérimental et pour cela le nombre et les coordonnées des sommets

Calcul du nombre de sommets

$$N = q + \sum_{r=1}^{q}(q-2r)L(q,r) + \sum_{r=1}^{q}(1-r)E(q,r)$$

L(q,r) : Nombre de combinaisons d'étendues R_i, prises r à r, dont la somme est inférieure à R_p.

E(q,r) : Nombre de combinaisons d'étendues R_i, prises r à r, dont la somme est égale à R_p

57

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Détermination des coordonnées caractéristiques du polyèdre

1. Réaliser tableaux comportant q colonnes et 2^{q-1} lignes

2. Classer les q constituants par ordre croissant de leur domaine
 de variation. Remplir q-1 colonnes par un plan factoriel complet 2^{q-1} à partir des contraintes inférieures et supérieures affectant q-1 facteurs.

3. Compléter la colonne vide pour respecter la contrainte fondamentale des mélanges.

Construction de la matrice avec les coordonnées les sommets, milieux des arêtes, milieu des faces et barycentre.

58

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

$$\begin{cases} 0,1 \leq X_1 \leq 0,5 \longrightarrow R_1 = 0,4 \\ 0,1 \leq X_2 \leq 0,7 \longrightarrow R_2 = 0,6 \\ 0,1 \leq X_3 \leq 0,6 \longrightarrow R_3 = 0,5 \end{cases} \qquad R_p = 0,7$$

Calcul du nombre de sommets q=3

- r = 1 R_1, R_2 et $R_3 < R_p$: $L(q,1)= 3$; $E(q,1) = 0$
- r = 2 toutes les combinaisons $> R_p$ $L(q,2)= 0$; $E(q,2) = 0$
- r = 3 $R_1 + R_2 + R_3 > R_p$: $L(q,3)= 0$; $E(q,3) = 0$

$$N = q + \sum_{r=1}^{q}(q-2r)L(q,r) + \sum_{r=1}^{q}(1-r)E(q,r) \text{ avec } q = 3$$

$$N = 3 + (1 \times 3 + (-1) \times 0 + (-3) \times 0) + (0 \times 0 + (-1) \times 0 + (-2) \times 0) = 6$$

6 sommets

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Détermination des coordonnées caractéristiques du polyèdre

$$\begin{cases} 0,1 \leq X_1 \leq 0,5 \quad R_1 = 0,4 \\ 0,1 \leq X_2 \leq 0,7 \quad R_2 = 0,6 \\ 0,1 \leq X_3 \leq 0,6 \quad R_3 = 0,5 \end{cases} \qquad R_p = 0,7$$

$R_1 < R_3 < R_2$

	X_1	X_3	X_2
1	0,1	0,1	0,8 HD
2	0,5	0,1	0,4
3	0,1	0,6	0,3
4	0,5	0,6	-0,1 HD

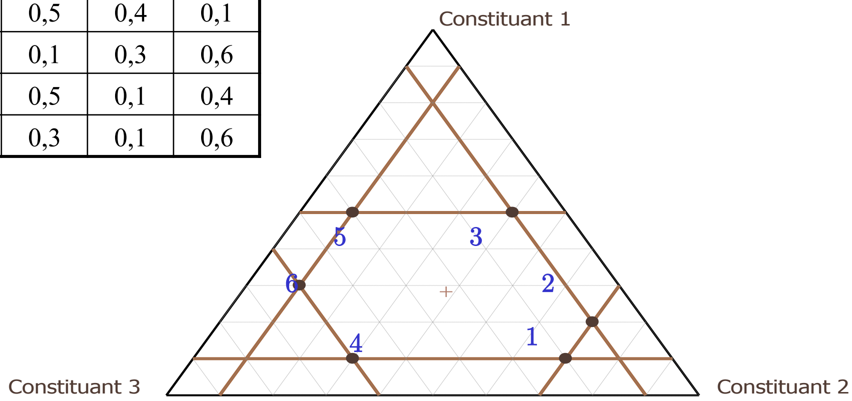
	X_1	X_3	X_2
1	0,1 0,2	0,2 0,1	0,7 0,7
2	0,5	0,1	0,4
3	0,1	0,6	0,3
4	0,5 0,3	0,4 0,6	0,1 0,1

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

	X_1	X_2	X_3
1	0,1	0,7	0,2
2	0,2	0,7	0,1
3	0,5	0,4	0,1
4	0,1	0,3	0,6
5	0,5	0,1	0,4
6	0,3	0,1	0,6

$$\begin{cases} 0,1 \leq X_1 \leq 0,5 \\ 0,1 \leq X_2 \leq 0,7 \\ 0,1 \leq X_3 \leq 0,6 \end{cases}$$



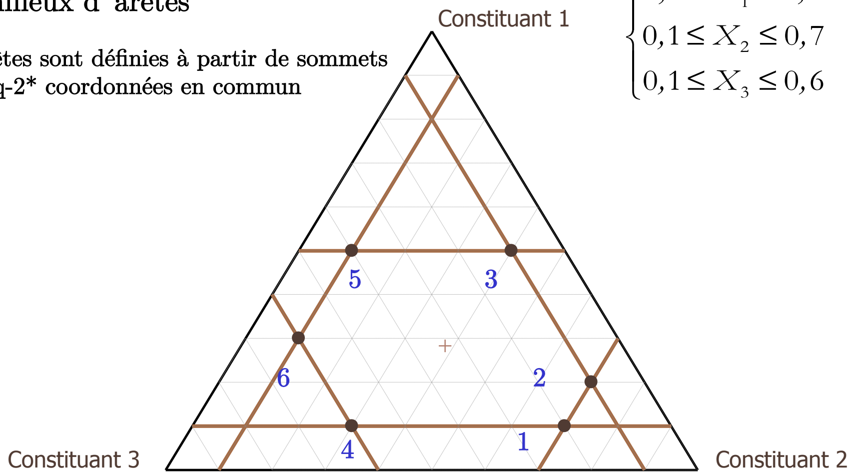
LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Les milieux d’arêtes

Les arêtes sont définies à partir de sommets ayant q-2* coordonnées en commun

$$\begin{cases} 0,1 \leq X_1 \leq 0,5 \\ 0,1 \leq X_2 \leq 0,7 \\ 0,1 \leq X_3 \leq 0,6 \end{cases}$$



LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

	X_1	X_2	X_3
1	0,1	0,7	0,2
2	0,2	0,7	0,1
3	0,5	0,4	0,1
4	0,1	0,3	0,6
5	0,5	0,1	0,4
6	0,3	0,1	0,6

	X_1	X_2	X_3
1	0,1	0,7	0,2
2	0,2	0,7	0,1
7	0,15	0,7	0,15

	X_1	X_2	X_3
1	0,1	0,7	0,2
4	0,1	0,3	0,6
8	0,1	0,5	0,4

	X_1	X_2	X_3
2	0,2	0,7	0,1
3	0,5	0,4	0,1
9	0,35	0,55	0,1

$$\begin{cases} 0,1 \leq x_1 \leq 0,5 \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,7 \\ 0,1 \leq x_3 \leq 0,6 \end{cases}$$

63

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

	X_1	X_2	X_3
1	0,1	0,7	0,2
2	0,2	0,7	0,1
3	0,5	0,4	0,1
4	0,1	0,3	0,6
5	0,5	0,1	0,4
6	0,3	0,1	0,6
7	0,15	0,7	0,15
8	0,1	0,5	0,4
9	0,35	0,55	0,1

	X_1	X_2	X_3
3	0,5	0,4	0,1
5	0,5	0,1	0,4
10	0, 5	0,25	0,25

	X_1	X_2	X_3
5	0,5	0,1	0,4
6	0,3	0,1	0,6
11	0,4	0,1	0,5

	X_1	X_2	X_3
4	0,1	0,3	0,6
6	0,3	0,1	0,6
12	0,2	0,2	0,6

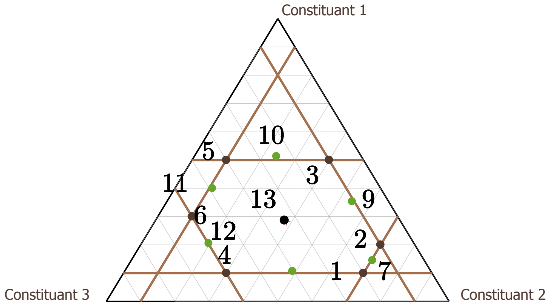
$$\begin{cases} 0,1 \leq x_1 \leq 0,5 \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,7 \\ 0,1 \leq x_3 \leq 0,6 \end{cases}$$

64

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Le centre de gravité



1 centre (isobarycentre)

6 milieux d’arêtes

13	0,28	0,38	0,33

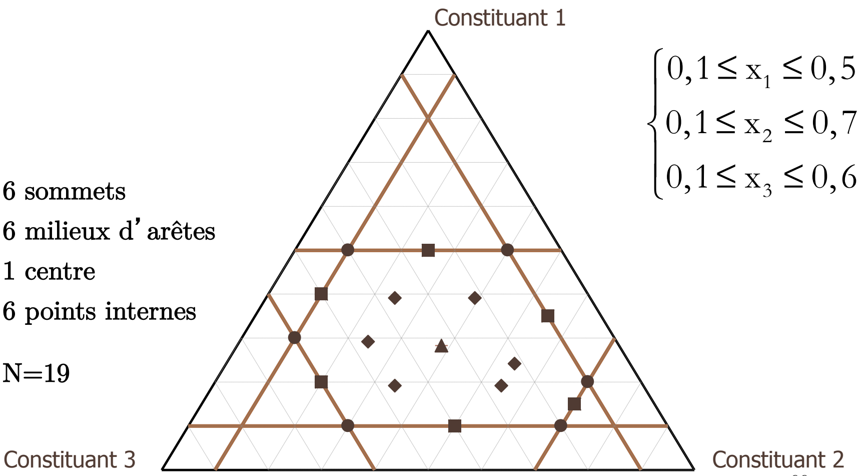
	X1	X2	X3
1	0,1	0,7	0,2
2	0,2	0,7	0,1
3	0,5	0,4	0,1
4	0,1	0,3	0,6
3	0,5	0,4	0,1
5	0,5	0,1	0,4
6	0,3	0,1	0,6
7	0,15	0,7	0,15
8	0,1	0,5	0,4
9	0,35	0,55	0,1
10	0, 5	0,25	0,25
11	0,4	0,1	0,5
12	0,2	0,2	0,6

65

LES MELANGES AVEC CONTRAINTES

Les contraintes individuelles

Les points internes (ou points axiaux) sont situés à mi-distance entre les sommets et le centre du domaine …



$$\begin{cases} 0,1 \leq x_1 \leq 0,5 \\ 0,1 \leq x_2 \leq 0,7 \\ 0,1 \leq x_3 \leq 0,6 \end{cases}$$

6 sommets

6 milieux d’arêtes

1 centre

6 points internes

N=19

66