

**PLANS D'EXPERIENCES ASSOCIES A DES EQUATIONS DIFFERENTIELLES  
LOGICIEL NEURO PEX**

**Jean-Luc Ploix, Patrice Kiener  
NETRAL**

**14 rue Verdi 92130 Issy-Les-Moulineaux  
Tel : 01.46.38.75.12 – Fax : 01.46.38.75.94  
jeanluc.ploix@netral.com, patrice.kiener@netral.com**

Le calcul des plans d'expériences D-optimaux à mettre en oeuvre pour identifier au mieux les paramètres d'un phénomène décrit par une ou des équations différentielles non-linéaires en les paramètres nécessite une bonne structure de modèle. Tous les termes de la Jacobienne sont décrits par des équations différentielles et toutes ces équations différentielles doivent être intégrées simultanément. De même pour le Hessien et le calcul des mesures de courbure.

Nous décrivons une méthode relativement simple qui exploite au mieux les possibilités du logiciel **Neuro Pex**. L'exemple traité, facilement généralisable, est tiré d'Atkinson et Bogacka (2002) et décrit une réaction chimique :  $A \rightarrow B \rightarrow C$  d'ordre différent de 1 dont l'équation principale utilisée pour le calcul du plan d'expériences est :

$$\frac{d[B]}{dt} = \theta_1[A]^{\alpha_1} - \theta_2[B]^{\alpha_2} .$$

De manière plus générale, nous discuterons de la réduction du nombre d'essais pour les expériences physiques et pour les simulations numériques.

**Référence**

Atkinson, A.C., Bogacka, B. (2002). Compound and other optimum designs for systems of non-linear differential equations arising in chemical kinetics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 61, pp 17 - 33. (<http://www.maths.qmul.ac.uk/~bb/abnumr3.pdf>)