UNIVERSITE DE LIMOGES

Ecole Doctorale Science - Technologie - Santé FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES

Institut de Recherche XLIM

Thèse N°75-2007

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE LIMOGES

Discipline : Electronique des Hautes Fréquences et Optoélectronique présentée et soutenue par

Olivier FIAT

le 19 décembre 2007

Utilisation et développement de la méthode du Simplexe. Nouvelles procédures d'optimisation de la démarche expérimentale

Thèse dirigée par : Annie Bessaudou

Françoise Cosset

JURY

rapporteurs

Catherine PORTE Professeur des Universités au CNAM, Paris

Michelle SERGENT Professeur des Universités au LMRE,

Université Paul Cézanne, Marseille

examinateurs

Paul Armand Maître de Conférences HDR, Université de Limoges

Annie Bessaudou Professeur des Universités, Limoges

Françoise Cosset Maître de Conférences, Université de Limoges

Valérie Madrangeas Professeur des Universités, Limoges

François Verinaud Ingénieur R&D, HEF Andrézieux-Bouthéon

Remerciements

Cette thèse a été réalisée à la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université de Limoges, au sein de l'institut de recherches XLIM.

Je remercie mes directrices de thèse, Annie BESSAUDOU et Françoise COSSET qui ont mis à ma disposition, sans compter, leur compétence, leur pédagogie, leur patience, leur dévouement et leur compréhension pour mon statut un peu particulier de doctorant hors des murs. Ce fut un réel plaisir de travailler avec elles ; leur exigence de tout instant et leur rigueur de pensée m'ont été une aide permanente pour orienter mon travail vers la dimension opératoire et expérimentale, et pour m'éviter de partir dans des directions apparemment séduisantes, mais parfois hasardeuses. Leurs valeurs humaines de franchise et d'honnêteté m'ont permis de toujours travailler avec elles dans une ambiance de grande concentration et de bonne humeur.

Je remercie vivement Madame Catherine Porte et Madame Danièle Sergent pour avoir accepté de rapporter mes travaux. Leur incontestable compétence sur le sujet me fait apparaître leurs remarques et critiques avec une acuité toute particulière.

J'exprime aussi tous mes remerciements à Madame Valérie MADRANGEAS qui a accepté de présider mon jury de thèse et à Messieurs Paul ARMAND et François VERINAUD qui ont accepté de faire partie de mon jury.

Je remercie Luc DELPLANQUE et tous les membres de l'association Expérimentique qui ont formé un auditoire attentif et critique à l'exposé de certains de mes travaux.

Je remercie mes deux anciens élèves, Stanis COURREGES qui a accepté de m'aider à développer une application du Simplexe à un problème de filtrage hyperfréquence, et Antoine GUIRAL qui m'a aidé à développer une page web en langage HTML.

Je remercie Stéphane BILLA et Michel AUBOURG pour les très intéressantes conversations que nous avons eues sur le problème de l'optimisation en général, l'algorithme génétique et l'optimisation de forme en particulier.

Je remercie également Aimé LEBLANC pour son immense et sincère gentillesse, pour sa disponibilité et ses talents de relieur et à Armand PASSERGUES pour son dévouement, sa compétence en informatique et son écoute toujours attentive.

Je remercie Alexandre MIQUEL pour avoir su me convaincre de l'intérêt et du caractère incontournable de la réalisation d'une thèse dans un laboratoire de recherches comme XLIM dans mon itinéraire universitaire, afin de bénéficier du jugement de mes pairs.

Je dédie cette thèse à mon père et ses valeurs humanistes, à ma mère et à mes frères et sœur et leur respect profond des valeurs de l'esprit, à mes chers grands-parents pour lesquels l'ascension sociale par les valeurs du travail furent des valeurs fondamentales et à tous mes autres parents.

Je remercie enfin mes proches amis Olivier COCLE, Guy JAILLOT, Philippe ROCHE, David RUDLOFF et Roland THOMAS pour leur soutien et leur aide directe ou indirecte, ainsi que tous les autres amis que je n'ai pas ici la place de citer.

Sommaire

INTRODUCTION	
I. UNE METHODE ITERATIVE D'OPTIMISATION : LE SIMPLEXE	
I.1. HISTORIQUE	
I.1.1. Méthodes évolutionnaires d'optimisation	
I.1.2. La méthode du simplexe et ses évolutions	
I.1.2.1. Définition mathématique du simplexe	
I.1.2.2. Méthode basique du simplexe	
I.1.2.3. Méthode modifiée du simplexe	
I.1.2.5. Méthode centroïde pondérée.	
I.1.2.6. Procédure de test d'une méthode	
I.1.3. Les fonctions test	
I.1.4. Améliorations des méthodes	
I.1.4.1. Choix de la forme du simplexe initial	
I.1.4.2. Choix du pas du simplexe initial	17
I.1.4.3. Limitation des déformations du simplexe modifié	
I.2. ESPACE DES PARAMETRES	
1.2.1. Aspects expérimentaux de la technologie des dépôts	
1.2.2. Terminologie	
1.2.3. Classification des facteurs	
I.2.3.1. Notion de facteur I.2.3.2. Les différents types de facteurs	
I.2.3.3. Cas des paramètres de protocole	
I.2.3.4. L'élimination des facteurs non numériques	
I.2.4. Paramètres et entrées	
I.2.4.1. Paramètres	
I.2.4.2. Classification des paramètres selon le type de valeurs	22
I.2.4.3. Espace des valeurs associé à un paramètre	
I.2.4.4. Exhaustivité des paramètres	
I.2.4.5. Entrées	
I.3. REPONSE.	
1.3.1. Caractéristiques et caractérisation	
1.3.2. De la caractéristique à la réponse	
I.3.2.1. Insuffisance de la notion de caractéristique	25 marcha
rigoureuse de qualification d'un produit.	
I.3.2.2. Grandeur(s) mesurable(s) associée(s) à une caractéristique	25
I.3.2.3. Notion de réponse ou sortie	
I.4. HYPOTHESES DE REGULARITE	25
I.4.1. Description récapitulative du cas étudié	
I.4.2. Fonctionnalité	
I.4.3. Propriétés mathématiques de la réponse comme fonction des variables entrées	26
I.5. METHODE DU SIMPLEXE.	
I.5.1. La surface de réponse	
I.5.2. Objectif réduit	
I.5.3. Fonction de désirabilité	
I.5.4. Principe général du simplexe	
I.5.5. Définition du simplexe initial	
I.5.6. L'algorithme du simplexe basique (« Basic simplex method »)	
I.5.6.1. Algorithme du simplexe basique, illustré par un exemple à deux dimensions, où l'optimum est dans	le domaine des
entrées	33
I.5.6.2. Algorithme du simplexe basique, illustré par un exemple à deux dimensions, où l'optimum est à l'ex	
domaine des entrées	
I .5.6.3. Algorithme de la méthode du simplexe basique	
1.5.7. L'algorithme du simplexe modifié	
I.5.7.1. L'esprit de la méthode modifiée	
5.7.2. Méthode du simplexe modifié illustrée par un exemple à deux dimensions	47
I.5.7.3. Algorithme de la méthode du simplexe modifié	
1.6 CONCLUSION	51

II. REPRODUCTIBILITE ET FIABILITE DU PROTOCOLE	55
II.1. LES TESTS DE FIABILITE DU PROTOCOLE DE FABRICATION	55
II.1.1. Description du développement d'un projet	
II.1.1.1 Contexte expérimental : la fabrication d'un produit	
II.1.1.2. Les trois étapes du projet	55
II.1.1.3. Le cahier de laboratoire, lien entre les trois étapes	
II.1.2. Apports respectifs des étapes du projet	
II.1.2.1. De la deuxième à la troisième étape : constitution d'un processus de labrication	
II.1.2.3. La présérie : mise à l'épreuve de la fiabilité du protocole	
II.1.3. Analyse physique de la fiabilité d'un protocole	
II.1.3.1. Les facteurs	58
II.1.3.2. Les cinq tests de la présérie	
II.1.3.3. Causalité physique : relation entre la variation des facteurs non principaux et celle des caractéristiques du principaux et celle des caractéristiques de celle des celles de celle des celles de ce	
II.2. COMPOSANTES METROLOGIQUES DE LA FIABILITE	
II.2.1. De la mesure des grandeurs à l'analyse de la fiabilité	61
II.2.2. Six notions métrologiques distinctes : répétabilité, reproductibilité, sensibilité, solidité, stabilité, fidé	lité. 62
II.2.2.1. Répétabilité et reproductibilité [9]	
II.2.2.2. Sensibilité, Solidité (ou robustesse) et stabilité	
2.2.3. Fidélité	
II.2.3. Analyse préliminaire	
II.2.3.2. De la mesure à la compréhension de la reproductibilité	
II.2.3.3. Sensibilité et solidité	
II.2.3.4. De la stabilité des appareils de mesure à la stabilité des paramètres	
II.2.3.5. Homogénéité spatiale	64
II.2.3.6. Apparition d'un facteur nouveau	
II.2.4. Généralisation des concepts d'exhaustivité, de répétabilité, reproductibilité, sensibilité, solidité, stab	
II.2.4.1. Exhaustivité	
II.2.4.2. Répétabilité	
II.2.4.4. Sensibilité	
II.2.4.5. Solidité	
II.2.4.6. Stabilité d'un paramètre	67
II.2.5. Illustration croisée des différents concepts	
II.2.5.1. Reproductibilité	
II.2.5.2. Exhaustivité des paramètres	
II.2.5.3. Solidité	
II.2.5.5. Stabilité	
II.3. APPORT DE CETTE ANALYSE POUR L'EXPERIMENTATEUR	
II.3.1. Construction d'une fiche méthodologique d'analyse de fiabilité	
II.3.1.1. Rappel sur le contexte	70
II.3.1.2. L'analyse des tests de fiabilité étayée par les définitions métrologiques	
II.3.1.3. Fiche méthodologique	
II.3.1.4. Commentaires et exemple d'utilisation	
II.3.2. L'articulation de la fiche méthodologique avec la démarche d'optimisation	
II.3.3. Présentation d'un programme informatique opérationnel	
II.4. CONCLUSION	74
III. PRISE EN COMPTE DE PLUSIEURS RÉPONSES, LE MULTISIMPLEXE	79
III 1 L'OPERMICATION MULTICRITERE	70
III.1. L'OPTIMISATION MULTICRITERE	
III.1.1. Les objectifs	
III.1.1.2. Réduction des objectifs	
III.1.2. Mesure de la conformité à un objectif	
III.1.2.1. Situation du problème	
III.1.2.2. Les fonctions de coût	
III.1.2.3. Les fonctions de valorisation	
III.1.2.4. Valorisations normées d'un produit relativement aux divers objectifs	
III.1.2.5. Les divers types de valorisation	
III.1.3. Traduction de la valorisation en termes de sous-ensembles flous	
III.1.3.1. Les sous-ensembles flous	
III.1.4. Optimalité au sens de Pareto	
III.1.4.1. Résumé et formulation du problème	

III.1.4.2. Ordre partiel et mise en évidence de la problématique	
III.1.4.3. La frontière de Pareto	85
III.1.4.4. Présentation des trois familles d'optimisation multicritère	
III.1.5. Méthodes séquentielle, e-contrainte, recherche tabou	
III.1.5.2. L'optimisation séquentielle	
III.1.5.3. Méthodes alternatives à la méthode séquentielle	88
III.1.6. L'optimisation simultanée	
III.2. DEFINITION D'UNE VALORISATION NUMERIQUE AGREGEE	
III.2.1. Propriétés générales d'une valorisation agrégée	
III.2.1.1. Poids associés aux objectifs	
III.2.1.2. Définition générale d'une valorisation agrégée	
III.2.2. Définition d'une valorisation numérique pondérée	90
III.2.2.1. Hypothèses de travail	
III.2.2.2. La fonction générique de Scott et Antonsson	
III.2.2.3. Fonctions agrégatives de référence	
III.2.2.4. Normalisation des poids dans la moyenne géométrique	
III.3. LE MULTISIMPLEXE	
III.3.1. Principe de l'algorithme	
III.3.2. Le logiciel MultisimplexIII.3.3. Application du multisimplexe à une optimisation dans le domaine du filtrage micro-onde	
III.3.3.1. Présentation de l'étude [28]	
III.3.3.2. Présentation de la méthode d'optimisation	
III.3.3.3. Définition du problème d'optimisation	
III.3.3.4. Résultats de la simulation réalisée grâce à Multisimplex	
III.4. CONCLUSION	99
IV. PROCÉDURE DE CALCUL DES COEFFICIENTS DE PONDÉRATION	
IV.1. POIDS OU COEFFICIENTS DE PONDERATION : GENERALITES	
IV.1.1. Rappel : les poids dans la moyenne géométrique des désirabilités	
IV.1.2. Problématique de la détermination des poids	
IV.1.3. Influence des poids sur l'optimum	
IV.2. LA METHODE DE TRI CROISE [3]	
IV.2.1. Définition du contexte	
IV.2.2. Matrice des importances relatives	
IV.2.4. Calcul des poids normalisés à partir d'une matrice d'importances relatives	
IV.2.5. Ajustement d'une matrice d'importances relatives brute	
IV.3. LA METHODE DES CARTES [5]	
IV.3.1. Classification ordinale, classification cardinale	
IV.3.2. Description de la méthode des cartes sur l'exemple	
IV.4. METHODE ORIGINALE DE DETERMINATION DES POIDS [6]	
IV.4.1. Surfaces d'égale satisfaction	
IV.4.1.1. Rappels et notations	
IV.4.1.2. Espaces de représentation des sorties et de leurs désirabilités	
IV.4.1.3. Surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des sorties	
IV.4.1.4. Application transposée définie dans l'espace des désirabilités	
IV.4.1.5. Surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des désirabilités	
IV.4.2. Vecteur gradient de satisfaction	
IV.4.2.1. Définition	
IV.4.3. Relation entre poids et vecteur gradient	
IV.4.3.1. Introduction dans le cas de deux sorties.	
IV.4.3.2. Généralisation dans le cas de n sorties	
IV.5. DESCRIPTION DE LA PROCEDURE MISE EN PLACE POUR LE CALCUL DES POIDS	121
IV.5.1. Description du problème	121
IV.5.1.1. Inventaire des objectifs fixés	121
IV.5.1.2. Notations et définition exacte du problème	
IV.5.2. Description complète de la procédure	
IV.5.2.1. Organigramme	
IV.5.2.2. Exemple d'optimisation dans le domaine des dépôts	
IV.5.2.4. Acquisition de la fonction de désirabilité globale	
IV.5.2.5. Transposition dans l'espace des désirabilités	
IV.5.2.6. Définition de la zone de travail	127
IV.5.2.7. Définition du tableau de travail	127
IV.5.2.8. Approximation quadratique de la ligne d'égale satisfaction	4.00

IV.5.2.9. Calcul de la pente du vecteur gradient	130
IV.5.2.10. Calcul des poids	
IV.5.2.11. Justesse et cohérence de l'appréciation du collège	
IV.6. CONCLUSION	132
V. CAMPAGNE D'EPÉRIENCES	135
V.1. CONTEXTES PARTICULIERS JUSTIFIANT UNE CAMPAGNE D'EXPERIENCES	135
V.1.1. Contraintes de fabrication et de qualification	135
V.1.1.1. Situation de la fabrication dans la démarche globale	
V.1.1.2. Modèle d'organisation de la fabrication et de la qualification	
V.1.2. Inconvénients liés à la démarche monoséquentielle	
V.1.2.1. Démarche monoséquentielle	
V.1.2.2. Surcoûts liés à une démarche monoséquentielle	
V.2. CAMPAGNE DE MANIPULATIONS	
V.2.1. Description d'une campagne d'expériences	
V.2.1.1. Demarche multisequentielle	
V.2.2. Construction d'une campagne d'expériences	
V.2.2.1. Itération proposée par le simplexe	
V.2.2.2. Définition des points candidats pour la campagne d'expériences	140
V.2.2.3. Classement de promesse des points candidats	
V.2.2.4. Sélection des points pour la campagne d'expériences	
V.2.3. Exploitation des résultats de la campagne	
V.2.3.1. Dépouillement des résultats de la campagne	
V.2.3.2. Regies de choix pour la constitution du nouveau simplexe	
V.2.4.1. Organigramme de la méthode des campagnes d'expériences	
V.2.4.2. Discussion de la pertinence de la méthode des campagnes	151
V.2.5. Utilisation de Multisimplex pour une optimisation par campagne d'expériences	
V.3. ÉVALUATION DE LA METHODE	
V.4. CONCLUSION	153
Conclusion	157
Perspectives	
I ERSI ECTIVES	130
ANNEXE A. REPRESENTATION NORMALISEE DES ORGANIGRAMMES ALGORITHMIQUES	
ANNEXE B. REPRESENTATION ARBORESCENTE DES PRINCIPAUX TERMES DE LA METROLOGIE	
ANNEXE C. REALISATION INFORMATIQUE DE LA FICHE METHODOLOGIQUE	
ANNEXE D. FORMES DE LA FONCTION AGREGATIVE GENERIQUE SUIVANT LA VALEUR DE S	169
ANNEXE E. TUTORIAL MULTISIMPLEX.	171
ANNEXE F. DEMONSTRATIONS MATHEMATIQUES DES RESULTATS ENONCES AU CHAPITRE IV	181
F.1. PRINCIPE DE CALCUL DES POIDS A PARTIR D'UNE MATRICE INVERSE SYMETRIQUE	
F.2. NON SECANCE DES SURFACES D'EGALE SATISFACTION	
F.3. POSITIVITE DES COORDONNEES DU GRADIENT DE SATISFACTION	
ANNEXE G. FICHE DE CALCUL EXCEL POUR LE CALCUL DES POIDS PAR LA METHODE DES LIGNES	102
D'EGALE SATISFACTION DANS LE CAS DE DEUX REPONSES	185

INTRODUCTION

Cette thèse est centrée sur une méthode itérative particulière d'optimisation de la pratique expérimentale: la méthode du simplexe.

Elle a été entreprise dans la continuité des travaux de Sandrine Karam à l'Institut de Recherche XLIM. Dans sa thèse soutenue en 2004, elle a étudié les plans d'expériences et l'analyse de données et a montré dans quel contexte ces techniques permettent de rationaliser la pratique expérimentale, en particulier dans le domaine de la technologie des dépôts sous vide.

À cette occasion, le laboratoire a acquis un certain nombre de logiciels informatiques adaptés dont Sandrine Karam a décrit les fondements théoriques, les modes d'utilisation dans les problèmes de dépôt et la pertinence. Un autre logiciel, *Multisimplex*, restait à exploiter et a formé le point de départ de notre travail.

Dans la première partie de notre travail de thèse, nous avons cherché à étudier :

- les fondements théoriques de l'algorithme du multisimplexe (nom commun français) associé au logiciel *Multisimplex* (nom commercial anglo-saxon) ;
- les problématiques particulières dans lesquelles *Multisimplex* est un outil pertinent d'optimisation de la pratique expérimentale ;
- quelques cas particuliers d'activités expérimentales menées par l'Institut XLIM dans lesquels *Multisimplex* pourrait être utilisé.

Dans un premier temps, nous avons donc mené un travail bibliographique pour dresser un panorama historique des principales méthodes d'optimisation itérative, pour décrire les lois mathématiques sous-jacentes au simplexe, et pour expliquer comment le multisimplexe permet l'optimisation simultanée de plusieurs objectifs grâce à la construction d'un objectif agrégé et à son optimisation par le simplexe.

Au cours de ce travail préliminaire, nous avons observé que certaines des hypothèses nécessaires pour le développement de la méthode d'optimisation du multisimplexe pouvaient faire l'objet d'un développement particulier. Trois hypothèses ont plus particulièrement retenu notre attention : la reproductibilité des expériences, la pertinence des coefficients de pondération des divers objectifs dans la constitution de l'objectif agrégé et le déroulement itératif de la succession des essais imposés par le simplexe. Notre démarche s'articule en trois temps.

- Tout d'abord, nous avons examiné l'adéquation entre les hypothèses citées plus haut et la réalité expérimentale ; ce fut l'occasion de nombreuses discussions richement étayées par la grande habitude de la pratique expérimentale des chercheurs de XLIM.
- Après cette étude préliminaire, nous avons mené une étude bibliographique en rapport avec ces hypothèses :
 - le concept de reproductibilité nous a conduit à nous intéresser à la métrologie ;
 - le problème de la pondération des différents objectifs nous a conduit à nous intéresser à l'optimisation multicritère ;
 - la règle du déroulement itératif du simplexe nous a amené à nous intéresser aux règles pratiques de fonctionnement des laboratoires de recherche et d'analyse.
- Dans un troisième temps, nous avons cherché à produire une plus-value théorique plus personnelle, complémentaire de ce que nous avons pu trouver dans la littérature. Nous avons voulu donner un cadre théorique rigoureux à notre apport, mais nous avons cherché en même temps à ne pas nous limiter à une simple formulation théorique ; chaque fois que c'était possible, nous avons ainsi essayé de développer un outil utilisable en pratique.
 - Nous avons transposé les concepts métrologiques au problème de la fiabilité du protocole ; nous avons rédigé une fiche méthodologique complète et avons produit un programme informatique sous la forme d'un outil d'aide à la fiabilisation du protocole.
 - Nous avons décrit une procédure originale de calcul des poids des objectifs et nous avons produit une feuille de calcul opérationnelle.
 - Nous avons décrit dans quels contextes expérimentaux particuliers on pouvait envisager une progression multiséquentielle d'expériences et produit un organigramme complet complémentaire de celui du simplexe.

Nous avons conservé, dans la rédaction de cette thèse, la structure de notre démarche. Le chapitre 1 est entièrement dédié à l'étude bibliographique. Dans les chapitres 2, 3 et 4, on trouvera également une première partie bibliographique avant l'exposé de notre contribution personnelle. Nous avons cherché ainsi à donner plus de clarté à notre propos en traitant dans chaque chapitre un aspect particulier du problème.

Le chapitre 1 est consacré au simplexe. Nous présentons la synthèse de l'étude bibliographique

relative au simplexe ; nous donnons quelques repères historiques, nous présentons les concepts d'entrée et de sortie, nous décrivons les méthodes les plus courantes (basique et modifiée) du simplexe et nous les illustrons par des exemples numériques.

Dans le chapitre 2, nous abordons des considérations métrologiques. Après l'exposé d'une étude bibliographique sommaire de certains concepts métrologiques, nous les développons et les adaptons à une étude originale relative à la fiabilité des protocoles.

Le chapitre 3 est consacré au multisimplexe. Une étude bibliographique relative à l'optimisation multicritère forme une introduction à la description du multisimplexe ; nous décrivons l'utilisation de cette méthode pour l'optimisation d'un filtre planaire supraconducteur menée à l'Institut XLIM.

Dans le chapitre 4, nous nous intéressons au problème de la pondération. Nous présentons la synthèse de notre étude bibliographique relative à deux méthodes existantes pour le calcul des coefficients de pondération des différents objectifs dans la construction d'un objectif agrégé; nous donnons ensuite la description complète, théorique et appliquée, d'une méthode nouvelle que nous avons développée pour le calcul de ces coefficients, basée sur la notion de surface d'égale satisfaction.

Le chapitre 5 est consacré à une méthode originale dérivant de celle du simplexe, la méthode des campagnes d'expériences, permettant de mener une optimisation de la démarche expérimentale en effectuant plusieurs expériences successives entre deux phases d'analyse.

Cette thèse comprend de nombreuses considérations et de nombreux développements mathématiques. Nous avons tenu à faire figurer la grande majorité des démonstrations dans ce document, car elles forment l'assise théorique de notre travail. Nous avons donné en annexe les vérifications purement techniques de certaines lois, et avons gardé dans le texte les démonstrations clés justifiant les lois que nous avons établies. Pour insister sur le sens physique et expérimental de toute cette étude théorique, nous avons aussi essayé d'illustrer toutes les notions décrites par de nombreux exemples ; ceux-ci sont majoritairement empruntés à la technologie des dépôts sous vide telle qu'elle est pratiquée à XLIM.

Règles de présentation

Nous nous sommes efforcés de respecter les règles de présentation courantes. Nous avons mis en exergue :

- les termes étrangers en caractères italiques,
- les termes importants lorsqu'ils sont utilisés ou définis pour la première fois dans le texte en caractères gras,
- les définitions que nous avons introduites, numérotées par un premier chiffre indiquant le numéro du chapitre et par un second donnant le numéro d'ordre,
- les propriétés que nous avons introduites, numérotées de même,
- les figures, numérotées de même,
- les tableaux, numérotés de même,
- les exemples, détachés du texte par un double liseret dans la marge,
- les énumérations, dont les items sont indiqués par des petits triangles et indiqués entre crochets.

Un sommaire détaillé est donné au début de l'ouvrage et un index sont proposés en fin d'ouvrage.

I. Chapitre I. Une méthode itérative d'optimisation : le simplexe

Dans ce premier chapitre, nous présentons le modèle standard de l'algorithme du simplexe. Nous dressons d'abord un panorama historique des principaux développements de cet algorithme. Nous mentionnons ensuite les principales hypothèses de travail : nous précisons les notions de paramètre et de réponse et nous soulignons la nécessité d'une correspondance fonctionnelle entre les entrées et les sorties (hypothèses de régularité). Nous décrivons enfin les méthodes basique et modifiée du simplexe en les illustrant par un exemple numérique.

Cette présentation du modèle est commentée et nous identifions des concepts et des notions qui nous semblent devoir être précisés ou approfondis. Ces études complémentaires seront menées dans les chapitres 2, 4 et 5, et formeront la plus-value théorique de cette thèse. Dans ce premier chapitre, nous mentionnons dans le corps du texte le chapitre (ou à la section) ultérieur(e) dans lequel (laquelle) cette étude sera menée.

I.1. Historique

I.1.1. Méthodes évolutionnaires d'optimisation

Un dispositif expérimental donné est schématisé par le processus suivant : les **entrées** sont un ensemble de paramètres de réglage ; le dispositif opère une transformation de nature quelconque et produit un résultat donnant lieu à une ou plusieurs mesures ; la sortie est une **réponse** calculée à partir des valeurs mesurées ; elle peut évidemment correspondre à l'une de ces valeurs. Nous supposons que ce processus est parfaitement reproductible, c'est-à-dire que la réponse ne dépend que des entrées. Cette hypothèse sera discutée au chapitre 2. Un cahier des charges précis définit une réponse optimale.

L'optimisation de la démarche expérimentale est le processus consistant à chercher les valeurs des entrées permettant de rapprocher le plus possible la réponse observée de la réponse optimale. La fonction de réponse est l'application qui, aux valeurs des entrées fait correspondre la valeur de la sortie. Si le dispositif expérimental est parfaitement bien modélisé par une étude théorique, il est possible de procéder à quelques mesures préalables, d'en déduire explicitement la fonction de réponse ; l'optimisation n'est alors qu'un problème mathématique. On peut citer un cas simple illustratif : soit une pile de force électromotrice E et de résistance interne r alimentant une résistance R. Un électricien cherche la valeur R pour laquelle la puissance fournie est maximale. Il est facile de démontrer mathématiquement que l'optimum est atteint pour R = r, ce qu'on n'a plus qu'à vérifier expérimentalement.

Dans le cas contraire, il faut mener plusieurs expériences, analyser les résultats, refaire éventuellement une ou plusieurs expériences, et par alternance d'expériences et d'analyses, chercher à progresser vers l'optimum. Cette façon de procéder définit les méthodes **évolutionnaires**. En se basant sur la classification proposée par Bäckt, Hammel et Schwefel [1], nous pouvons distinguer quatre grandes familles de méthodes.

- [FAMILLE 1] : les méthodes d'algorithme génétique [2] utilisent des lois d'évolution darwiniennes, et procèdent par générations successives d'essais, selon un principe d'eugénisme. Elles ne sont envisageables que lorsqu'il est possible de réaliser facilement, rapidement et à bas coût de nombreux essais.
- [FAMILLE 2] : les méthodes à stratégie d'évolution [3] utilisent des lois d'évolution basées sur l'analyse physique des lois de variation de la réponse.
- [FAMILLE 3] : les méthodes d'optimisation statistique [1] utilisent des lois d'évolution basées sur l'analyse physique des lois de variation de la réponse.
- [FAMILLE 4] : les méthodes de programmation évolutive [3] définissent une loi d'évolution algébrique prédéfinie. La méthode du simplexe en fait partie ; elle a fait l'objet d'un ouvrage de référence [4].

Si la méthode génétique définit un ensemble d'essais à chaque génération, les trois autres ne définissent qu'un seul essai après chaque analyse.

Une méthode d'optimisation est dite **itérative** si la démarche est formée d'une suite alternée d'expériences et d'analyses : la nouvelle expérience réalisée s'appuie sur le résultat de l'analyse de la

précédente, et des autres réalisées auparavant. La possibilité de procéder à plus d'une expérience entre deux phases d'analyse sera discutée au chapitre 5. La plus courante des méthodes itératives évolutionnaires d'optimisation est la méthode du simplexe. Après l'avoir située dans son contexte historique, nous allons décrire cette méthode dans ce chapitre.

I.1.2. La méthode du simplexe et ses évolutions

La méthode du simplexe a connu une évolution rapide depuis l'article fondateur de Spendley, Hext et Himsworth en 1962 [5]. Elle est basée sur des concepts très accessibles à l'intuition, elle ne nécessite aucune connaissance *a priori* du terrain expérimental exploré, et se prête particulièrement bien à un traitement informatique. Nous donnons maintenant les principales étapes historiques de son développement.

I.1.2.1. Définition mathématique du simplexe

Le **simplexe** est une entité mathématique dont la définition mathématique est classique en géométrie algébrique [6] : dans un espace affine à p dimensions, un simplexe est formé de (p+1) points M_0 , M_1 , ..., M_p tels que $(\overline{M_0M_1},\overline{M_0M_p})$ forme une base de l'espace vectoriel associé. Si p=1, un simplexe est formé par un segment de droite ; si p=2, par un triangle non aplati ; si p=3, par un tétraèdre de quatre points non coplanaires (voir figure 1).

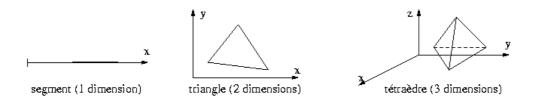


Figure I.1: représentations géométriques d'un simplexe

I.1.2.2. Méthode basique du simplexe

Le collectif W. Spendley, G. R. Hext et F. R. Himsworth a proposé, dans son article de 1962 [5], d'explorer un domaine expérimental pas à pas, en définissant des simplexes successifs dans l'espace des paramètres de réglage, selon un mode d'évolution simple : à chaque étape, on cherche à remplacer le point le plus mauvais (W) par un nouveau, symétrique de W par rapport au centre des autres : on espère ainsi progresser vers l'optimum expérimental. À chaque étape, la forme géométrique du simplexe est toujours la même (aux symétries près). La progression se fait donc à pas constant. Cette méthode est appelée **méthode** basique du simplexe (basic simplex method).

I.1.2.3. Méthode modifiée du simplexe

L'amélioration la plus déterminante de cette méthode est due à J. A. Nelder et R. Mead en 1965 [7] : elle permet d'agrandir le pas lorsqu'on est loin de l'optimum et de le réduire quand on s'en rapproche. La valeur de pas est donc adaptée à chaque étape pour converger à la fois plus rapidement et plus finement vers l'optimum. La progression se fait donc à pas variable. Cette méthode est appelée **méthode modifiée du simplexe** (modified simplex method). Elle reste à ce jour la plus utilisée.

I.1.2.4. Méthodes super modifiées du simplexe

Les améliorations suivantes sont toutes orientées vers le même objectif : remplacer le pas hasardeux à l'opposé du point le plus mauvais (W) (pas constant dans la méthode basique, pas variable dans la méthode modifiée) par un pas plus intelligent (au sens propre, qui comprend la topographie de la surface de réponse), utilisant le plus possible l'information contenue dans les valeurs du critère pour chacun des points du simplexe en cours :

La méthode du simplexe super modifiée (super modified simplex), proposée en 1977 par M. W. Routh, P. A. Swartz et M. B. Denton [8] modélise la réponse expérimentale observée sur le simplexe en cours par une expression quadratique : dans le cas où le problème comporte une seule variable (p=1), cela revient à modéliser la courbe de réponse par une parabole, dans le cas p=2, la surface de réponse par une quadrique (en général, une surface dont les sections droites sont des

paraboles). On cherche algébriquement les coordonnées de l'extremum de la fonction modèle (le sommet de la parabole si p=1) et ce point devient le nouveau point candidat, susceptible de remplacer le point le plus mauvais (appelé dans la suite W (initiale de *worst*). L'approximation quadratique proposée par Routh, Swartz et Denton a l'avantage de la simplicité algébrique, donc d'une simplicité de traitement informatique; mais si elle est acceptable au voisinage d'un sommet, elle est très mauvaise quand on en est loin. En particulier, lorsque la réponse observée est une désirabilité, c'est-à-dire une estimation numérique de la qualité du résultat par rapport à un objectif (cf. paragraphe 5.3) variant entre zéro (résultat sans intérêt) et un (résultat optimal), l'expression quadratique n'est pas adaptée car si elle donne une bonne approximation au voisinage de l'optimum, elle ne tend pas vers zéro quand on en est loin, et peut même devenir négative.

• Une méthode alternative a donc été proposée en 1980 par P. F. A. Van der Wiel [9] : pour donner une meilleure approximation d'une réponse se ramenant à une désirabilité, les auteurs ont remplacé l'approximation quadratique par une approximation gaussienne. Celle-ci est un peu plus lourde à traiter sous forme informatique. La figure 2 montre l'intérêt de l'approximation gaussienne par rapport à l'approximation quadratique dans le cas p = 1.

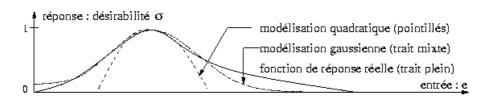


Figure I.2 : approximations quadratique et gaussienne d'une courbe de désirabilité

I.1.2.5. Méthode centroïde pondérée

La même année, P. B. Ryan, R. L. Barr et H. D. Todd ont proposé la **méthode centroïde pondérée** (*weighted centroïd method*) [10] dans laquelle le nouveau point candidat est le symétrique de W non pas par rapport au centre géométrique (isobarycentre) des autres points, mais par rapport à leur barycentre pondéré par les valeurs du critère. Cette méthode permet une convergence plus rapide.

I.1.2.6. Procédure de test d'une méthode

Chacune de ces évolutions a donné lieu à de nombreux tests et à des améliorations ponctuelles formant des amendements plutôt que des méthodes nouvelles. Pour effectuer un test rapide d'une méthode, il est courant de travailler par **simulation**, c'est-à-dire de se donner une fonction de réponse *a priori*. Un programme informatique joue alors le rôle d'une boîte noire et renvoie instantanément la valeur calculée de la réponse correspondant à un jeu de valeurs d'entrée. Nous allons maintenant présenter brièvement les fonctions test les plus couramment utilisées.

I.1.3. Les fonctions test

Une **fonction test** est une fonction de réponse fictive permettant de tester par simulation d'une expérience réelle le comportement d'une méthode d'optimisation.

Il existe de nombreux types de fonctions test. Certaines d'entre elles reflètent bien des réalités expérimentales variées. Elles admettent en général un unique point optimal local qui est aussi l'optimum absolu du domaine. D'autres, souvent imaginées par les utilisateurs aguerris des logiciels d'optimisation, forment des pièges algorithmiques, c'est-à-dire qu'elles peuvent conduire la méthode vers une suite d'itérations qui convergent après un certain nombre d'étapes, tout en restant loin de l'optimum théorique. Les fonctions test les plus utilisées sont les suivantes [11]:

les fonctions gaussiennes dont la forme bidimensionnelle est

$$y = f(x_1, x_2) = Ae^{-(x_1 - x_1^*)^2/\sigma_1^2} \cdot e^{-(x_2 - x_2^*)^2/\sigma_2^2}$$

où $A \in \mathbb{R}_+^*$ est une constante et σ_1 et σ_2 des écarts types ; elles sont partout positives et prennent leur valeur maximale en $(x_1^*; x_2^*)$;

les fonctions quadratiques dont la forme bidimensionnelle est

$$y = f(x_1, x_2) = A - B(x_1 - x_1^*)^2 - C(x_2 - x_2^*)^2$$

où $(A,B,C) \in R_{+}^{*^{3}}$; elles sont partout positives et prennent leur valeur maximale en $(x_{1}^{*};x_{2}^{*})$;

• la fonction de Rosenbrock bidimensionnelle définie par

$$y = f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 - (1 - x_1)^2$$

elle prend sa valeur minimale (0) pour $x_1 = x_2 = 1$; sa forme particulière (on dit que la surface de réponse ressemble à une banane) constitue un test un peu plus exigeant pour les méthodes;

• la fonction de Fletcher et Powel dont la forme bidimensionnelle est

$$y = f(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{2} (A_i - B_i)^2 \ avec \begin{cases} A_i = \sum_{j=1}^{2} a_{ij} \sin \alpha_j + b_{ij} \cos \alpha_j \\ B_i = \sum_{j=1}^{2} a_{ij} \sin x_j + b_{ij} \cos x_j \end{cases}$$

où a_{ij} et b_{ij} sont des coefficients réels, α_1 et α_2 deux réels ; c'est une fonction multimodale, présentant de nombreux extrema relatifs en $x_1=\alpha_1+2k\pi$ et $x_2=\alpha_2+2k\pi$ ($k\in Z$);

• la fonction de Griewank dont la forme bidimensionnelle est

$$y = f(x_1, x_2) = \frac{1}{800} \sum_{i=1}^{2} x_i^2 - \prod_{i=1}^{2} \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right)$$

C'est un autre exemple de fonction multimodale.

Ces fonctions permettent à la fois de tester l'efficacité d'une méthode, et de prouver le cas échéant qu'une nouvelle méthode proposée est plus pertinente qu'une précédente méthode ayant échoué dans la recherche de l'optimum absolu. Par exemple, si une méthode M ne réussit à trouver qu'un optimal local pour une de ces fonctions test, la méthode M' pourra être qualifiée de plus performante si elle réussit à trouver l'optimum absolu de la même fonction. Notons cependant que Wolpert et Macready ont établi un très important théorème, dénommé en anglais le *No free Lunch Theorem* [12], prouvant qu'il n'existe aucun algorithme optimal à la fois pour tous les problèmes.

I.1.4. Améliorations des méthodes

Si nous admettons que les méthodes de simplexe définissent des stratégies de progression (avec une vision globale de la démarche), nous pouvons qualifier les améliorations de choix de tactiques (avec une vision locale de la démarche). Nous pouvons identifier trois catégories d'améliorations de méthodes, le choix de la forme du simplexe initial, celui de son pas et les méthodes de limitation des déformations du simplexe.

I.1.4.1. Choix de la forme du simplexe initial

Deux formes fondamentales, que nous détaillerons dans la section 1.5.5, peuvent être données au simplexe initial :

- en coin (*cornered*): le simplexe a des directions principales $\overline{M_0M_1}$, $\overline{M_0M_2}$, etc... parallèles aux axes (voir figure 3 (a)),
- ou tourné (tilted) : le simplexe a la forme d'un polyèdre régulier convexe (voir figure 3 (b)).

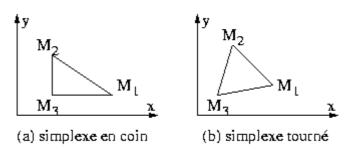


Figure I.3: simplexes initiaux en coin ou tourné

Le choix de la forme peut modifier la vitesse de convergence de la méthode : T. G. Öberg a pu

montrer en 1998 [13], sur un grand nombre de simulations, que la forme tournée conduit pratiquement toujours plus rapidement à l'optimum que la forme en coin (cf. paragraphe 5.5).

I.1.4.2. Choix du pas du simplexe initial

Dans le cas d'une méthode basique, le choix du pas du simplexe initial permettra de converger plus vite vers l'optimum avec un pas important, mais plus précisément avec un pas plus faible (voir figure 4). Nous commenterons plus complètement ce choix dans le paragraphe 5.6.

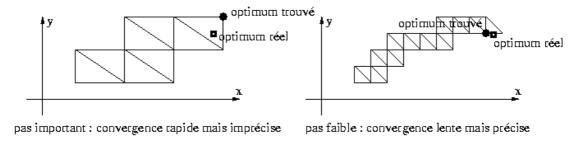
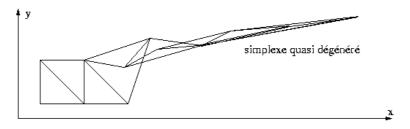


Figure I.4 : différence de comportement selon le pas du simplexe basique

I.1.4.3. Limitation des déformations du simplexe modifié

La méthode du simplexe modifié, comme nous le montrerons dans la section 5.7, induit des déformations du simplexe : dans le cas bidimensionnel, le simplexe a la forme d'un triangle et chaque changement de pas est susceptible de le déformer. Si cette déformation est très importante, on peut observer une **dégénérescence**, c'est-à-dire un aplatissement (voir figure 5). L'algorithme risque alors de ne plus pouvoir progresser dans l'une des directions de l'espace.



I.5. dégénérescence du simplexe modifié

Dans leur article [10], Ryan, Barr et Todd ont édicté des règles permettant de détecter et d'éviter cette dégénérescence.

- Si le simplexe s'aplatit contre l'une des frontières définies par une contrainte (par exemple l'une des entrées x ne peut pas dépasser une valeur maximale $x_{\rm max}$ donnée et la frontière est alors un hyperplan $x=x_{\rm max}$), c'est qu'il faut choisir le paramètre d'entrée en question à sa valeur extrême : ce paramètre ainsi fixé n'est plus pris en compte dans les variables, et le problème d'optimisation voit sa dimension diminuée d'une unité.
- La détection de la dégénérescence est possible par le calcul de deux indicateurs. Le **taux de déformation** noté habituellement δ_1 est le rapport de la longueur de la plus petite arête à celle de la plus longue ; si ce taux devient inférieur à une valeur \mathcal{E}_1 de référence, le simplexe est trop écrasé dans la direction de la plus petite arête. Le **taux de dégénérescence** noté habituellement δ_2 est le rapport du déterminant de la matrice dont les colonnes sont les composantes des vecteurs $\overline{M_0M_1}$, ... $\overline{M_0M_p}$ (ce déterminant est nul lorsque le simplexe est dégénéré et que les arêtes n'engendrent plus qu'un hyperplan) par le produit de leurs normes ; si ce taux devient inférieur à une valeur \mathcal{E}_2 de référence, le simplexe est trop dégénéré. Dans l'un ou l'autre de ces cas, on procède à une **réinitialisation** en définissant un nouveau simplexe à partir de l'ensemble des points testés à ce stade.

L'une des méthodes du simplexe modifié dotée d'une procédure de protection contre la

dégénérescence est celle de l'algorithme GBNM [11,14] qui procède à une réinitialisation utilisant une densité de probabilité d'optimalité auto adaptative (affinée à chaque étape en fonction des résultats de toutes les recherches locales passées).

Après avoir donné ces références historiques, nous allons présenter, dans ce chapitre, une description illustrée des algorithmes basique et modifié du simplexe. Nous devons au préalable définir le vocabulaire utilisé dans l'optimisation par cette méthode. Dans la section suivante, nous allons définir les entrées, c'est-à-dire les paramètres de réglage.

I.2. Espace des paramètres

Nous allons définir dans l'ordre les facteurs, les paramètres, le jeu exhaustif de paramètres formant les entrées. Ces ensembles sont inclus les uns dans les autres, les entrées formant le sous-ensemble exhaustif des paramètres, les paramètres formant eux-mêmes le sous-ensemble des facteurs réductibles à des grandeurs numériques. Cette section est donc essentiellement une classification théorique des différents facteurs. Pour l'illustrer, nous nous référerons principalement à la technologie des dépôts (l'un des axes de recherche du laboratoire XLIM). C'est pourquoi nous allons commencer cette section par un exposé des principaux aspects expérimentaux dans ce domaine. Chaque illustration se référant à celle-ci sera annoncée par l'entête « Exemple dans le domaine des dépôts ».

I.2.1. Aspects expérimentaux de la technologie des dépôts

Dans la brève description que nous donnons ci-dessous, les numéros indiqués sont rappelés sur la figure 6.

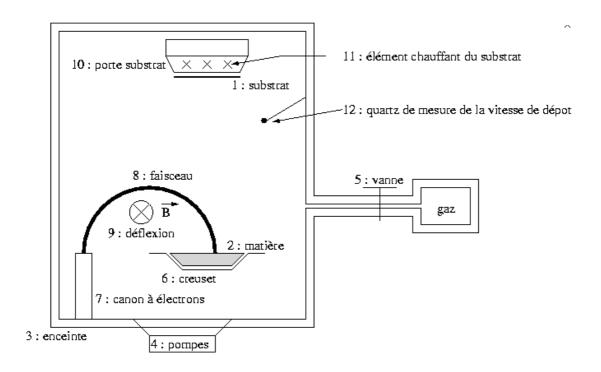


Figure I.6 : vue simplifiée d'une machine d'évaporation sous vide

Le but recherché est de déposer sur la surface d'un échantillon un matériau donné sous la forme d'un dépôt dont l'épaisseur peut varier de quelques nanomètres à quelques dizaines de micromètres.

- Le dépôt est effectué sur une plaquette (souvent rectangulaire et de faibles dimensions), qu'on appelle le **substrat** (1). Pour assurer une bonne adhérence du dépôt sur le substrat, il est possible de lui faire subir un **traitement préalable** éventuellement chimique, ou de déposer une **sous-couche d'accrochage**.
- Le **matériau à déposer** (2) peut être de diverses natures chimiques : métal, alliage, oxyde métallique, et est caractérisé entre autres par sa **composition chimique**.

L'évaporation sous vide est assurée par un dispositif qu'on appelle bâti d'évaporation. Il est constitué :

- d'une **enceinte** étanche (3) dans laquelle il est possible de faire un vide assez poussé ;
- de **pompes à vide** (4) permettant d'assurer une très faible pression, de l'ordre de 10^{-5} Pa, dans l'enceinte ;
- d'un système d'arrivée de gaz grâce à des vannes commandées (5) permettant l'entrée de

dioxygène, de diazote, de gaz rares (essentiellement de l'argon);

- d'un ou plusieurs **creusets** (6) dans lesquels le matériau à évaporer est placé ;
- d'un système de **chauffage et d'évaporation** de la matière dans le ou les creusets grâce à un **canon à électrons** (7) dont la **puissance** est contrôlée ; le point d'impact du **faisceau** (8) peut être déplacé par un **champ magnétique** de déflexion (9) ;
- d'un porte substrat (10) placé au dessus de la zone d'évaporation
- d'un système de **chauffage** (11) et de **régulation de la température du substrat** ;
- d'un système de **contrôle de la vitesse de dépôt** (12) utilisant une balance à quartz ;
- dans le cas d'une machine tricanons, d'un système de rotation du porte substrat.

Il est possible d'effectuer un **recuit**, susceptible de provoquer des modifications structurales de type cristallographique. On utilise pour cela un four assurant une bonne homogénéité de température, et possédant un système de contrôle de cette température. Lorsqu'on effectue un recuit, on définit un programme de variation de température, comportant un ou plusieurs **cycles**. Un cycle est constitué :

- d'une phase de montée en température selon un profil en général affine, avec une température initiale (en général la température ambiante), une température finale, et une rampe de montée en température ;
- d'une phase stationnaire où la température reste constante ;
- d'une phase de descente en température selon un profil en général affine, de la température haute à la température finale (en général la température ambiante), et une rampe de descente en température.

Dans la technologie des dépôts sous vide, les durées caractéristiques des recuits sont très variables (de quelques secondes à quelques heures). Les cycles peuvent être plus complexes et comporter plus de trois phases. La figure 7 montre un exemple de profil de recuit.

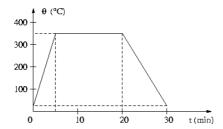


Figure I.7 : exemple de programme de variations de la température dans une procédure de recuit

Malgré la qualité d'asservissement du four, la température réelle n'est pas toujours égale à la température de consigne, et ces deux valeurs sont en général affichées sur le dispositif.

I.2.2. Terminologie

La description de la situation générique dans laquelle il est possible de développer la méthode du simplexe nécessite quelques définitions préalables. Nous adoptons, dans ce premier paragraphe, cinq termes dont l'emploi simplifiera la lecture. Définissons tout d'abord un ensemble de termes que nous emploierons systématiquement dans toute cette thèse.

<u>Définition</u>: le **produit** est une entité matérielle, résultat d'un processus de fabrication. Le **projet** regroupe l'ensemble des étapes, depuis la rédaction du cahier des charges définissant les caractéristiques d'un produit idéal jusqu'aux essais successifs ou simultanés dans le but de réaliser un produit répondant le mieux possible à ce cahier des charges. Les **prescripteurs** sont les différents intervenants humains dans la conception du cahier des charges. Les **agents** sont les différents intervenants humains dans la fabrication des divers produits : ce terme regroupe les opérateurs et les responsables du projet qui organisent la suite des différentes fabrications. Le **collège** regroupe les prescripteurs et les agents.

Le terme « collège » que nous avons choisi possède bien sûr de nombreux synonymes. Ainsi, Michel Genetay définissait, dans son exposé du 15 juin 2006 au colloque Expérimentique [15], le groupe de travail réunissant le responsable Recherche et Développement, le responsable des fabrications, le responsable qualité, le chef du secteur de coulage (le projet concerne la fabrication de bacs de douche) et deux opérateurs.

Le produit parfait ou idéal, tel qu'il est défini par les prescripteurs au début du projet, n'est pas toujours réalisable avec les moyens financiers, techniques et humains dont disposent les agents. C'est pourquoi la volonté de réaliser le produit idéal doit être ramenée à une formulation plus prudente. L'**objectif initial** du collège est formulable ainsi : « s'approcher le plus possible du produit idéal ».

L'objectif n'est ainsi défini qu'incomplètement : il faut en effet définir une relation d'ordre

permettant de classer les produits selon leur écart au produit idéal. Ceci sera réalisé par la définition de la fonction de désirabilité définie au paragraphe 5.3 dans le cas d'une réponse unique et au chapitre 3 dans le cas de plusieurs réponses.

Après avoir précisé la terminologie employée, nous allons maintenant définir précisément la notion de facteur et procéder à une classification des différents types de facteurs.

I.2.3. Classification des facteurs

I.2.3.1. Notion de facteur

Lors de la fabrication d'un produit, on peut faire un inventaire de toutes les conditions opératoires. Cette liste peut être extrêmement longue et recouvrir des données physiques de toute nature. Beaucoup d'entre elles sont évidemment inutiles. Les **facteurs** sont toutes les conditions opératoires dont la modification est susceptible de modifier le produit.

Le caractère très disparate des facteurs est problématique dans une démarche rationnelle : il est important de pouvoir les associer à une ou plusieurs grandeurs. Nous allons donc procéder à une analyse et à une classification des facteurs.

I.2.3.2. Les différents types de facteurs

Le terme facteur est très général. Nous pouvons distinguer cinq grandes classes.

- [CLASSE 1] : on s'astreint en physique à caractériser les conditions opératoires par un ensemble de grandeurs numériques scalaires. Elles prennent des valeurs numériques discrètes ou continues. Un facteur associé à une unique grandeur est appelé un **facteur numérique**.
- [CLASSE 2] : un facteur décomposable en facteurs numériques, est appelé un facteur numérique composite.
- [CLASSE 3] : les **facteurs de protocole** sont ceux qui permettent de décrire, dans le cadre d'une option de fabrication choisie, certaines étapes du mode opératoire.
- [CLASSE 4] : un facteur associé au choix d'une option de fabrication par les agents est un facteur non numérique d'option.
- [CLASSE 5]: les facteurs dont la description est trop complexe pour être ramenée à une valeur numérique, sont les **facteurs non quantifiables**. La norme ISO 3534-3 [17] définit aussi le terme de **facteur non maîtrisable**, régi par des processus aléatoires. Il appartiendra aux concepteurs du projet de se prémunir de ces facteurs ou au moins de rendre leur influence la plus faible possible. Nous pouvons ranger dans cette catégorie tous les facteurs humains.

Illustrons chacun de ces termes.

Exemple dans le domaine des dépôts

[CLASSE 1]: la puissance du canon à électrons assurant le chauffage et l'évaporation de la matière première est un facteur numérique. [CLASSE 2]: un état thermodynamique est un facteur numérique composite : il est défini par ν variables indépendantes. Chacune des variables est une fonction d'état (pression, température, volume, quantité de matière) et représente un facteur numérique. [CLASSE 3]: si les agents ont opté pour un recuit, le protocole décrira une succession d'étapes de montée en température, de maintien à température donnée et de refroidissement : cette description forme un facteur de protocole. [CLASSE 4]: lorsqu'on réalise un dépôt, il est parfois utile d'effectuer un traitement thermique permettant la réorganisation cristalline de la couche déposée ; le choix de réaliser un recuit ou non est typiquement un facteur d'option. [CLASSE 5]: le geste d'un agent qui utilise une manette de commande pour diriger le faisceau électronique sur un creuset d'évaporation (cette manette est couramment appelée *joystick*) est un **facteur non quantifiable**; c'est un geste technique qui nécessite un savoir-faire acquis par l'expérience.

La première et la deuxième classe de facteurs (facteurs numériques) se ramènent à des grandeurs numériques. Montrons d'abord qu'il en est de même pour la troisième (protocole). Le cas de la classe 4 (option) et celui de la classe 5 (non quantifiables) sera étudié ensuite.

I.2.3.3. Cas des paramètres de protocole

Dans la description d'un protocole opératoire, on peut définir une procédure complète qui définit non pas une valeur numérique de réglage, mais un mode de variation d'une grandeur numérique : on dispose alors d'un profil de variation qui s'assimile à la courbe représentative de la grandeur en fonction du temps. Expliquons comment on peut ramener cette courbe à un ensemble fini de valeurs numériques.

- Si cette courbe est affine par morceaux et continue, il suffit de donner la suite des durées et des pentes des segments de droite pour la caractériser et ramener ainsi la procédure à des paramètres numériques.
- Si cette courbe est plus complexe, on pourra déterminer les coefficients numériques $a_0, a_1, ..., a_n$ du polynôme d'approximation de la fonction : $f(t) \square a_0 + a_1 t + ... + a_n t^n$. Le théorème de Stone Weierstrass prouve l'existence de cette approximation [18]. Les coefficients sont alors les paramètres numériques caractéristiques.

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans le cas d'un recuit, le protocole décrit un profil de variation de la température du système. Un programme peut être défini ainsi : (a) monter la température linéairement de $20^{\circ}C$ à $620^{\circ}C$ en 10 minutes ; (b) maintenir à $620^{\circ}C$ pendant 10 minutes ; (c) refroidir linéairement jusqu'à l'ambiante en 20 minutes. On peut alors définir un sextuplet de valeurs numériques formé des durées de chaque étape (exprimées en secondes) et des pentes de variation (exprimées en degrés Celsius par seconde) : $(600s; +1^{\circ}C \cdot s^{-1}; 600s; 0^{\circ}C \cdot s^{-1}; 1200s; -0,5^{\circ}C \cdot s^{-1})$

Les méthodes qui vont être étudiées dans ce chapitre ne sont pas adaptées aux facteurs non numériques. Après avoir ramené les facteurs de protocole à des facteurs numériques, nous allons expliquer dans le prochain paragraphe comment on peut éliminer les facteurs qui ne sont pas numériques.

I.2.3.4. L'élimination des facteurs non numériques

Les facteurs des classes 4 et 5 ne peuvent être réduites à une ou des valeurs numériques. Nous les qualifions donc d'**irréductibles**. L'élimination des facteurs irréductibles doit absolument précéder la recherche d'une solution expérimentale optimale. Les études préalables du projet permettent de tester sommairement les diverses options de fabrication (par exemple avec ou sans recuit). Si aucune des options ne semble vraiment meilleure que les autres, il est possible de mener plusieurs optimisations indépendantes :

- on cherche la solution optimale avec l'option A ;
- on cherche la solution optimale avec l'option B;
- on cherche la solution optimale avec l'option C.

On compare entre elles les trois solutions optimales (par exemple A > B > C) et on en déduit *a posteriori* l'option retenue (A) conduisant au meilleur des trois produits optimaux. Rien n'interdit d'ailleurs, si les deux meilleurs sont proches (par exemple A > B avec A proche de B), de renoncer au meilleur théorique (A) pour retenir l'autre (B) si cette option est moins contraignante ou plus économique que (A).

L'élimination des facteurs non quantifiables ou non contrôlables est en général possible grâce à l'évolution des techniques. Celle-ci permet en particulier d'automatiser une manipulation préalablement effectuée par un agent : les aléas inhérents à cette manipulation seront ainsi nettement diminués. Les paramètres de réglage de l'automate deviennent à leur tour des facteurs numériques.

Exemple dans le domaine des dépôts

Le faisceau électronique, permettant de faire fondre le matériau, doit se déplacer sur sa surface. En effet, s'il est dirigé vers un point fixe, il arrive qu'il ne provoque qu'un échauffement ponctuel, une fusion et une évaporation locale en formant un cratère, et finalement un trou dans le matériau, ce qui ne permet pas de bien maîtriser l'évaporation. Il est donc important que l'extrémité du faisceau balaye la surface du matériau. La courbe décrite peut avoir une forme de spirale, de triangle, ou toute autre forme géométrique (voir figure 1.8). Le mouvement du faisceau peut être commandé par un opérateur, ce qui demandera une certaine maîtrise opératoire ; cette maîtrise forme un facteur non quantifiable. Il est possible de choisir une option d'automatisation de ce mouvement. Les paramètres associés sont la largeur de la spirale, et la fréquence de balayage.

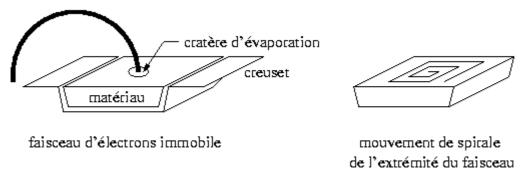


Figure I.8 : modes de balayage de la surface d'un matériau par un faisceau électronique

Dans la suite et la fin de ce chapitre, nous ne conserverons pour facteurs que les facteurs numériques (classe 1):

- les facteurs numériques composites (classe 2) sont décomposés en leurs facteurs numériques individuels ;
- les facteurs de protocole (classe 3) sont ramenés à des facteurs numériques caractéristiques ;
- les facteurs non numériques (classes 4 et 5) sont éliminés.

La dernière étape de cette section 2 est une classification des facteurs numériques selon le type de valeurs qu'ils sont susceptibles de prendre.

I.2.4. Paramètres et entrées

I.2.4.1. Paramètres

Après avoir éliminé tous les facteurs non numériques, on nomme **paramètres** les facteurs numériques scalaires (ou vectoriels) dont la modification (ou celle d'une de leurs coordonnées) est susceptible de modifier le produit.

I.2.4.2. Classification des paramètres selon le type de valeurs

Les paramètres sont *a priori* des nombres réels, mais l'ensemble de leurs valeurs possibles est toujours limité. En se basant sur la classification proposée par Sandrine Karam [16], nous pouvons distinguer les types de paramètres suivants.

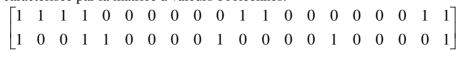
- Les **paramètres continus** sont des paramètres scalaires g dont la valeur est un réel. Leur réglage peut être assuré avec une précision relative $\delta g/g$ arbitrairement petite.
- Les **paramètres discrets** sont les grandeurs classiques g dont le réglage peut être assuré avec une précision absolue δg fixée et connue, et ne pouvant prendre que des valeurs discrètes séparées d'un nombre entier de fois δg . δg peut donc aussi être appelé le **pas de variation**. Nous incluons dans cette catégorie les paramètres ordonnables, correspondant plus à une appréciation qu'à une mesure, par exemple (très faible, faible, moyen, fort, très fort). On peut en effet les classer sur une échelle comportant autant de valeurs entières que de modalités (1, 2, 3, 4, 5). Les facteurs discrets non ordonnables sont, eux, rejetés par hypothèse (ce sont essentiellement des facteurs d'option).
- Les **paramètres booléens** sont des paramètres discrets qui ne peuvent prendre que deux valeurs notées typiquement 0 ou 1.

Exemple dans le domaine des dépôts

La pression partielle en dioxygène dans une enceinte à atmosphère parfaitement contrôlée est un paramètre continu.

Les paramètres discrets sont rares dans le domaine des dépôts, mais dans un autre domaine, la résistance d'une boîte à décades (AOIP) est un **paramètre discret** : le pas est par exemple $\delta R = 1k\Omega$.

Dans la simulation du comportement électromagnétique d'une plaquette isolante métallisée en surface, il est possible d'effectuer un maillage en forme de triangles isocèles rectangles contigus. Si on veut étudier l'influence de la forme de la surface métallisée, on peut considérer que chaque triangle est métallisé ou non métallisé (voir figure 1.9). Ainsi, l'état de la métallisation est une matrice dont chaque composante est un **paramètre booléen** et vaut zéro (non métallisé) ou un (métallisé). Sur la figure 1.9, la métallisation de la plaquette est caractérisée par la matrice à valeurs booléennes.



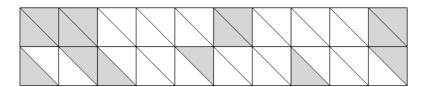


Figure I.9 : exemple de métallisation d'une plaquette représentée par un ensemble de variables booléennes

I.2.4.3. Espace des valeurs associé à un paramètre

Les trois types de paramètres décrits au paragraphe précédent nécessitent la définition d'espaces de valeurs adaptés. Nous notons conventionnellement la grandeur avec une lettre majuscule (G par exemple) et sa valeur numérique avec une lettre minuscule (g par exemple).

- Pour les paramètres continus, l'espace des valeurs est simplement l'intervalle réel compris entre la plus petite et la plus grande valeur possible du paramètre $G:[g_{\min},g_{\max}]$.
- Pour les paramètres à valeurs discrètes, on définit un pseudo intervalle discret contenant toutes les valeurs de g exprimées avec une précision compatible avec le pas δg . On peut le noter ainsi :

$$[[g_{\min}, g_{\max}]]_{\delta g} = \{g_{\min}, g_{\min} + \delta g, g_{\min} + 2\delta g, ..., g_{\max}\}$$

- Ce pseudo intervalle est inclus dans l'intervalle des valeurs extrémales $[g_{\min}, g_{\max}]$. Les paramètres **qualitatifs ordonnables**, se ramènent au cas précédent en prenant des valeurs également espacées : $\{1, 2, 3\}, ..., \{1, 2, ..., 10\}, ...$
- Le cas des paramètres **booléens**, se ramène au cas précédent avec l'ensemble de valeurs $\{0,1\}$.

Par souci de rigueur, nous distinguons l'espace des valeurs possibles (discret ou continu) pour un paramètre, et le plus petit intervalle (nécessairement continu) qui le contient : l'espace des valeurs associé à un paramètre G est l'ensemble V_G des valeurs numériques possibles pour sa valeur g; l'intervalle des valeurs est l'intervalle des valeurs extrémales $\overline{V}_G = [g_{\min}, g_{\max}]$.

Les paramètres et leurs espaces étant ainsi définis, nous devons nous assurer, avant d'entamer une procédure d'optimisation, qu'ils ont été tous recensés.

I.2.4.4. Exhaustivité des paramètres

Après une succession de tentatives de fabrication de produits, les agents peuvent estimer que parmi tous les paramètres physiques possibles, ils ont identifié tous ceux qui peuvent influencer les caractéristiques du produit. Ils peuvent alors pousser plus loin encore leur recherche des paramètres influents en se plaçant volontairement dans d'autres conditions de travail. Exemple dans le domaine des dépôts Lorsqu'un dépôt a été réalisé sur un substrat, ses caractéristiques sont parfois testées dans des conditions extrêmes. Dans le cas où le dépôt forme le circuit imprimé d'un composant électronique embarqué dans un satellite, il sera soumis à des très grands écarts de température et placé à très basse pression ; si le composant est embarqué dans un bateau, il sera soumis à un fort degré hygrométrique.

Un test important est celui de la **reproductibilité** : si un autre laboratoire utilise un dispositif de fabrication avec les mêmes dispositifs de réglage et d'asservissement des paramètres listés, le produit réalisé aura-t-il les mêmes caractéristiques ? Les conditions de ce test et les conclusions qu'on peut en tirer seront développées dans le chapitre 2.

Après cette phase prospective, les agents pourront dresser une liste **complète** des paramètres influents. Nous dirons que la liste $(G_1, G_2, ..., G_n)$ de paramètres est **exhaustive** si

- tous les paramètres G_k ($k \in \{1, 2, ..., p\}$) sont influents;
- aucun autre paramètre physique ne figurant pas dans cette liste n'a une influence supérieure au seuil de précision des mesures des caractéristiques du produit.

Les paramètres ainsi sélectionnés sont appelés **paramètres principaux**. La recherche de ces paramètres fait l'objet de nombreuses méthodes. Elles ont été largement décrites et testées dans la thèse de Sandrine Karam [16]. Ainsi, la technique du **plan de criblage** permet de réduire significativement le nombre d'expériences à réaliser pour tester l'influence de chacun des facteurs. La technique de l'analyse de sensibilité permet d'apprécier le niveau de variabilité des caractéristiques mesurées du produit, et de tester ainsi si ce niveau est inférieur (facteur non principal) ou supérieur (facteur principal) au seuil.

La liste exhaustive des paramètres principaux ne doit *a priori* subir aucun amendement pendant la phase d'optimisation. Bien sûr, si dans cette phase, une anomalie est détectée, il faudra envisager la prise en compte d'un paramètre initialement ignoré. En particulier, dans le domaine expérimental exploré au voisinage de la situation optimale, il est possible que l'influence d'un paramètre augmente brusquement et dépasse le seuil. Nous verrons au chapitre 2 que lors de la phase d'industrialisation (qui suit celle d'optimisation), certaines anomalies détectées au changement d'opérateur, de machine, d'échelle de fabrication peuvent conduire à modifier la liste des paramètres influents.

I.2.4.5. Entrées

Les grandeurs formant l'ensemble exhaustif des paramètres quantitatifs influents sur le produit sont appelées les **entrées**. Nous les noterons désormais $E_1,\ E_2,\ \ldots,\ E_p$ et leurs valeurs numériques $e_1,\ e_2,\ \ldots,\ e_p$. Les conditions de fabrication d'un produit particulier sont parfaitement déterminées par ces valeurs numériques. Chaque grandeur E_i prend ses valeurs dans l'espace des valeurs V_i . Mais il est possible qu'un réglage d'une entrée E_i à une valeur particulière de V_{E_i} (espace des valeurs défini au paragraphe 2.4.3) ne permette pas simultanément celui d'une autre entrée E_j à une valeur particulière de V_{E_j} . Exemple dans le domaine des dépôts La pression totale dans une enceinte d'évaporation sous vide étant limitée par la valeur P_{\max} , la pression partielle en dioxygène et celle en diazote ne peuvent pas être toutes les deux simultanément égales à cette valeur P_{\max} .

Définissons distinctement l'espace des entrées et l'ensemble des jeux d'entrées possibles. L'espace des entrées est le produit cartésien des espaces des valeurs individuelles : $EE = V_1 \times ... \times V_p$. Il est inclus dans le domaine délimitant les valeurs possibles $\overline{EE} = \overline{V_1} \times ... \times \overline{V_p}$. Un **jeu d'entrées** est formé par un p-uplet noté $J = (e_1, e_2, ..., e_p)$. L'ensemble des jeux d'entrées possibles EJ est la partie de EE formée des jeux d'entrées compatibles entre elles.

Ces trois ensembles sont emboîtés : $EJ \subset EE \subset EE$. La figure 10 donne un exemple à deux entrées où l'ensemble des jeux possibles ne représente que la moitié de l'espace des entrées

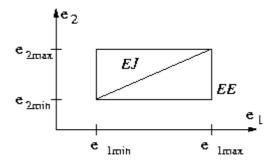


Figure I.10 : exemple à deux entrées où EJ (triangle grisé) n'est qu'une partie de EE (rectangle)

I.3. Réponse

L'espace des paramètres étant défini, nous allons maintenant étudier comment on peut caractériser le produit fabriqué.

I.3.1. Caractéristiques et caractérisation

Un produit (au sens défini dans le paragraphe 2.2), quelqu'il soit, peut faire l'objet d'un nombre certainement illimité de considérations extrêmement variées. Toutes ces considérations se traduisent par l'appréciation de diverses **caractéristiques**:

- certaines sont très subjectives (par exemple la solidité, la régularité de la surface, l'harmonie des couleurs, la qualité de fabrication) ;
- d'autres sont beaucoup plus objectives (par exemple le chromatogramme d'une solution chimique, le spectre de diffraction d'un dépôt, la contrainte maximale de traction admissible pour une éprouvette).

Caractériser un produit, c'est définir un ensemble fini de caractéristiques et estimer le niveau de chacune d'entre elles.

I.3.2.1. Insuffisance de la notion de caractéristique

On comprend bien qu'une caractéristique mal définie, et donc trop subjective, est incompatible avec une démarche rigoureuse de qualification d'un produit.

- D'une part, elle ne peut faire l'objet d'une clause contractuelle tant que les deux contractants n'ont pas défini une échelle de référence commune et objective ;
- D'autre part, les agents ne peuvent mesurer de progrès accompli entre deux produits consécutifs si on ne peut pas les classer de façon fiable pour la caractéristique considérée.

I.3.2.2. Grandeur(s) mesurable(s) associée(s) à une caractéristique

Nous cherchons maintenant à ramener une caractéristique à une grandeur numérique objectivement mesurable. Plusieurs cas sont possibles.

- Si la caractéristique est elle-même une grandeur physique, le problème est résolu car l'appareil de mesure adéquat donnera la valeur de la grandeur dans l'unité internationale ou pratique.
- Si la caractéristique est totalement définie par plusieurs grandeurs physiques, on dira qu'il s'agit d'une caractéristique composite, qu'on décomposera en autant de caractéristiques individuelles qu'il y a de grandeurs.
- Si la caractéristique ne correspond pas à une grandeur physique du système international [19], alors on va chercher dans l'ensemble des normes ISO [17] si on peut trouver la définition d'une échelle de mesure adaptée. Si ce n'est pas le cas, il appartient au collège de définir lui-même une échelle nouvelle : il est fortement conseillé dans ce cas de procéder à de nombreux tests pour vérifier si le mode de mesure donne des résultats stables (en testant plusieurs fois de suite le même produit) et si les agents et les donneurs d'ordre obtiennent séparément la même valeur (en mesurant indépendamment le même produit).

Exemple dans le domaine des dépôts

Lors de l'élaboration de films minces, par des techniques de dépôt physique en phase vapeur, une caractéristique importante est l'adhérence des films sur leur support. Celle-ci offre une bonne illustration de la définition d'une norme. On effectue le test suivant [20] : un peigne comporte 11 dents acérées. On griffe le dépôt dans deux directions orthogonales : on délimite ainsi dix lignes et dix colonnes, soit un damier de 100 cases devenues indépendantes. On colle une bande adhésive sur le damier, et on arrache cette bande perpendiculairement à la surface de l'échantillon : elle entraîne avec elle entre zéro et cent pastilles carrées de dépôt métallique. La norme D25 1075 [21] permet alors de classer l'adhérence du dépôt selon l'échelle suivante. Classe (a) aucun des carrés n'est décollé ; (b) environ 5% des carrés sont altérés ; (c) entre 5% et 15% des carrés sont altérés ; (d) entre 15% et 35% des carrés sont altérés ; (e) entre 35% et 65% des carrés sont altérés ; (>e) la presque totalité des carrés sont altérés.

I.3.2.3. Notion de réponse ou sortie

Une **réponse** (ou **sortie**) *S* est une grandeur numérique dont la valeur *s*, mesurée sur une échelle de classement objectif, permet de définir une caractéristique particulière du produit. Il est rare qu'une seule réponse suffise à caractériser complètement le produit : la méthode du simplexe étudiée dans ce chapitre est développée pour l'optimisation d'une unique réponse, l'optimisation d'un ensemble de plusieurs réponses sera décrite dans le chapitre 3, avec l'étude de la méthode du multisimplexe.

Dans la suite et la fin de ce chapitre, nous nous limitons donc à l'étude d'une unique réponse, c'est-à-dire d'une unique grandeur mesurable que nous noterons S.

I.4. Hypothèses de régularité

Les paramètres (entrées) et la réponse (sortie) étant définis, nous allons maintenant étudier la correspondance mathématique entre les premiers et la seconde.

I.4.1. Description récapitulative du cas étudié

Les p entrées E_1 , ..., E_p sont définies par les agents en sélectionnant un p-uplet de valeurs $J=(e_1,e_2,...,e_p)$ dans l'espace des paramètres. Ce p-uplet forme un **jeu de valeurs d'entrées** J. Ces p grandeurs sont supposées exhaustives, c'est-à-dire que les caractéristiques du produit dépendent d'elles et d'elles seulement. En particulier, la valeur s de la réponse S ne dépend que des valeurs des entrées.

Lorsque nous considérerons plusieurs jeux différents, nous utiliserons une double indexation des valeurs des entrées. Le k-ième jeu est ainsi noté $J_k = (e_{1\,k}, ..., e_{p\,k})$; $e_{i\,k}$ est donc la valeur numérique choisie pour l'entrée E_i dans le k-ième jeu. La valeur de la réponse correspondante est notée s_k .

I.4.2. Fonctionnalité

L'hypothèse d'exhaustivité des entrées permet d'affirmer que la variation d'un autre paramètre ne peut avoir aucune influence détectable sur la réponse. En toute rigueur, si on répète la fabrication d'un produit, en conservant le même jeu d'entrées, à deux moments différents, ou dans deux laboratoires différents, on n'est pas certain d'obtenir la même valeur pour la réponse. Cette question de reproductibilité et de stabilité sera développée au chapitre 2. Nous pouvons ici considérer, pour simplifier, que la date t et le laboratoire L forment eux-mêmes des paramètres non influents, et n'appartiennent donc pas à la catégorie des entrées. Par conséquent, la valeur de la réponse est **parfaitement déterminée** par celles des entrées. Ceci correspond à la définition d'une fonction. Soit $J=(e_1,\ldots,e_p)$ un jeu de valeurs d'entrées. La valeur s de la réponse est une fonction des valeurs des entrées : $s=\Phi(e_1,e_2,\ldots,e_p)$. Φ est appelée **fonction de réponse**. La même relation peut être écrite entre les grandeurs associées S et E_i : $S=\Phi(E_1,E_2,\ldots,E_p)$. La courbe ou surface représentative de Φ est appelée la **surface de réponse**.

Nous parlons de **fonction** (chaque jeu d'entrées donne zéro ou une valeur de sortie) plutôt que d'**application** (chaque jeu d'entrées donne exactement une valeur de sortie) car on peut imaginer que dans certains cas, la valeur de sortie ne soit pas mesurable. Exemple dans le domaine des dépôts Si un dépôt n'adhère pas sur le substrat, il ne sera pas possible de mesurer ses caractéristiques, et en particulier son épaisseur.

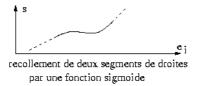
I.4.3. Propriétés mathématiques de la réponse comme fonction des variables entrées

Chaque entrée e_i prend ses valeurs dans l'espace V_i : celui-ci n'est pas nécessairement un intervalle de valeurs réelles, il peut être discret, formé de valeurs isolées dans un intervalle. On ne peut donc pas toujours définir de continuité ou de dérivabilité par rapport à la variable e_i . Définissons une notation pratique : soit $J_0 = ((e_1)_0, (e_2)_0, \dots (e_p)_0)$ un jeu de valeurs d'entrées ; la **fonction partielle** de la i-ième entrée est $f_{J_0}(e_i) = \Phi((e_1)_0, \dots (e_{i-1})_0, e_i, (e_{i+1})_0, \dots, (e_p)_0)$ Cette fonction donne la valeur de la réponse, lorsqu'on garde constantes toutes les autres entrées que la i-ième, en fonction de la valeur de l'entrée e_i . Dans le cas d'une entrée E_i variant continûment, la continuité et la dérivabilité de la fonction de réponse se ramènent alors à celle de la fonction partielle $f_{J_0}(e_i)$.

Il existe des cas particuliers de fonction de réponse non continue, en particulier lorsque la réponse est une variable booléenne caractérisant un échec ou une réussite, l'existence ou l'absence d'un défaut, etc..... Dans ce cas, la surface de réponse a la forme de deux sections hyper planes, séparées par une frontière de discontinuité : d'un côté de cette frontière, la réponse prend la valeur 0 (le produit réalisé avec les réglages d'entrée est rejeté), de l'autre la valeur 1 (le produit réalisé avec les réglages d'entrée est accepté). La notion d'optimisation de la réponse n'a alors plus de sens. Mathieu et coll. ont développé une méthode utilisant le simplexe pour déterminer cette frontière [22].

Remarquons que par un artifice de calcul, en utilisant les **fonctions sigmoïdes** [9], il est possible de rendre continue et dérivable une fonction discontinue, ou continue et non dérivable en un point, sans pour autant changer de façon notable le comportement physique du système. La figure 11 illustre cette transformation appelée **lissage**.

Après avoir soigneusement défini les entrées et la sortie du processus expérimental, nous allons maintenant décrire la méthode d'optimisation du simplexe dans la suite de ce chapitre.



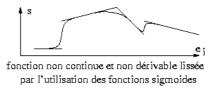


Figure I.11: lissage d'une fonction grâce aux fonctions sigmoïdes

I.5. Méthode du simplexe

Dans toute cette section, on suppose que la réponse étudiée, S, est une fonction continue et dérivable des p entrées E_1 , E_2 , ..., E_p : $S = \Phi(E_1, E_2, ..., E_p)$. Cette fonction est a priori inconnue des agents et de tous les autres membres du collège. On peut mesurer sa valeur s: pour cela, on fabrique un produit en choisissant un jeu de valeurs $(e_1, e_2, ..., e_p)$ pour les entrées et on effectue la caractérisation du produit fabriqué. Les valeurs numériques des entrées et de la réponse sont supposées connues avec précision. Nous n'entrons donc pas ici dans des considérations métrologiques. Nous indiquerons au paragraphe suivant comment il est possible de prendre en compte l'imprécision sur une entrée donnée, et aux paragraphes 5.6.3 (pour la méthode basique) et 5.7 (pour la méthode modifiée) comment la prise en compte de l'imprécision sur la réponse permet de stopper l'algorithme d'optimisation par la méthode du simplexe.

I.5.1. La surface de réponse

Un jeu d'entrées $J = (e_1, e_2, ..., e_n)$ étant fixé, la valeur numérique s de la réponse S sera mesurée sur le produit obtenu. On peut donc définir, dans l'espace à p+1 dimensions R^{p+1} , un point dont les coordonnées $\operatorname{sont}(e_1,e_2,...,e_p,s)$. Si on pouvait reproduire l'expérience pour un très grand nombre de valeurs des entrées, en balayant pour chacune d'entre elles l'ensemble des valeurs de réglage possibles, ce point décrirait une hyper surface sans rupture ni cassure. Pour éviter d'alourdir le propos, nous utiliserons le R^{p+1} surface de réponse est l'ensemble SRdes points de d'équation SR : $s = \Phi(e_1, e_2, ..., e_n)$. La figure 10 (a) donne un exemple de surface de réponse.

Si le réglage ou la mesure de l'entrée E_i n'est possible qu'avec un pas δe_i , nous avons défini au paragraphe 2.4.3 l'espace des valeurs discrètes formant un pseudo intervalle : $V_i = [[e_{i_{\min}}, e_{i_{\max}}]]_{\delta e_i}$. Il est alors possible de tracer la pseudo surface (non nécessairement continue) de réponse (voir figure 10 (b)) en donnant aux entrées discrètes toutes les valeurs du pseudo intervalle $[[e_{i_{\min}}, e_{i_{\max}}]]_{\delta e_i}$ et en faisant varier les entrées continues sur l'intervalle de variation $[e_{i_{\min}}, e_{i_{\max}}]$.

Le terme « surface » est facile à comprendre dans un cas particulier auquel nous nous référerons systématiquement pour donner le sens physique des étapes de la méthode du simplexe : p=2. Dans ce cas, chaque jeu d'entrées forme un couple correspondant à un point du plan $(O,x,y):P(e_1;e_2)$. La valeur s de la sortie est placée sur l'axe (O,z) des cotes et on trace le point M de coordonnées $(e_1;e_2;s)$. On trace ainsi point par point la surface d'équation $z=\Phi(x,y)$ quand $x=e_1$ et $y=e_2$ parcourent les intervalles délimités par les valeurs minimales et maximales des deux entrées.

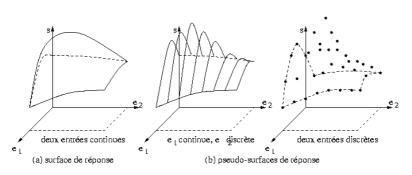


Figure I.12 : surface et pseudo surfaces de réponse

Les hypothèses de continuité et de dérivabilité de la fonction de réponse Φ assurent la régularité de la surface de réponse dans l'espace R^{p+1} . En particulier, quand p=2, on pourra distinguer sur cette surface des sommets, des fosses, des lignes de niveau, des crêtes et des vallées. Ces particularités géométriques nous permettront de donner une interprétation géométrique des déplacements sur la surface de réponse proposés par la méthode du simplexe.

I.5.2. Objectif réduit

Il faut maintenant déterminer l'objectif recherché par le collège, tel que nous l'avons défini au paragraphe 2.2. Dans ce premier chapitre consacré au simplexe, nous supposons que l'objectif ne concerne que l'unique réponse S. Nous verrons avec le multisimplexe, au chapitre 3, comment on peut se ramener à ce cas quand l'objectif est bâti autour de plusieurs réponses différentes.

L'unique réponse S prenant ses valeurs dans l'ensemble des réels, nous pouvons ramener l'objectif initial défini au paragraphe 2.2 à l'un des trois **objectifs réduits** suivants.

- [MIN]: minimiser la valeur de S.
- [CIBLE] : rendre la valeur de S la plus proche possible de la valeur cible notée s^* .
- [MAX]: maximiser la valeur de S.

Nous excluons implicitement le cas d'un objectif à deux éventualités, avec deux valeurs cibles. Ce type de cas est relativement rare : on peut penser à un laboratoire explorant une nouvelle voie de recherche et désirant concourir à l'un des appels d'offre existant simultanément de la part de plusieurs donneurs d'ordre : nommons par exemple P', P'' et P''' les trois produits idéaux attendus. Le laboratoire travaille alors selon l'objectif multiple : se rapprocher le plus possible de l'un ou l'autre des produits attendus. Ce type d'objectif est incompatible avec la méthode du simplexe, et on comprend qu'il n'est pas stable. En effet, si les premiers produits sont fabriqués un peu au hasard, dès que les agents obtiendront un premier produit proche de l'un des attendus, P'' par exemple, le laboratoire abandonnera certainement les objectifs P' et P''' pour se focaliser sur P'' ; on se ramène ainsi au cas de l'objectif unique (bien sûr, rien n'interdira que le laboratoire reprenne plus tard sa quête de P' ou P''').

Nous allons maintenant ramener les trois objectifs réduits [MIN], [CIBLE] et [MAX] à une forme unique.

I.5.3. Fonction de désirabilité

La fonction de désirabilité va nous permettre de remplacer l'objectif réduit par un objectif invariable : une maximisation. Cette fonction a l'avantage de donner la possibilité au collège de nuancer son objectif pour la réponse S .

- ullet Pour une minimisation, nous pouvons définir le seuil à partir duquel s atteint un niveau suffisamment bas pour être jugé acceptable.
- Pour une cible, nous pouvons définir dans quel intervalle la valeur de s sera jugée comme suffisamment proche de s^* .
- \bullet Pour une maximisation, nous pouvons définir le seuil à partir duquel s atteint un niveau suffisamment haut pour être jugé acceptable.

Par définition, la **fonction de désirabilité** est une application continue notée τ de l'intervalle des valeurs possibles pour la réponse S dans l'intervalle [0,1], dont la valeur $\sigma = \tau(s)$ est représentative du niveau de satisfaction du collège pour l'objectif lorsque la valeur de la sortie est égale à s:

$$\tau: [s_{\min}, s_{\max}] \rightarrow [0,1]$$

$$s \mapsto \tau(s) = \sigma$$

Il n'est pas indispensable que la fonction τ soit dérivable, mais il est possible de lui conférer cette propriété grâce aux fonctions sigmoïdes; en revanche, le concept même de désirabilité impose que τ soit :

- décroissante dans le cas d'une minimisation ;
- croissante $\sup[s_{\min}, s^*]$, décroissante $\sup[s^*, s_{\max}]$ et égale à 1 en s^* dans le cas d'une cible de valeur s^* :
- croissante dans le cas d'une maximisation.

La plus courante des fonctions de désirabilité [24] est construite à partir du choix de trois (pour [MIN] et [MAX]) ou quatre (pour [CIBLE]) paramètres numériques : la valeur minimale s_{min} , la valeur

maximale s_{max} , le coefficient de déformation noté R et le cas échéant la valeur cible s^* . Le coefficient R permet de définir un objectif large ou aigu comme nous allons l'illustrer ci-après.

Pour l'objectif [MIN], la valeur de la sortie s doit être la plus petite possible, dans l'intervalle $[s_{\min}, s_{\max}]$. On pose

$$\tau(s) = \begin{cases} 1 & \text{si } s \leq s_{\min} \\ \left[(s_{\max} - s) / (s_{\max} - s_{\min}) \right]^{R} & \text{si } s_{\min} \leq s \leq s_{\max} \\ 0 & \text{si } s \geq s_{\max} \end{cases}$$

La figure 13 (a) donne l'allure de cette courbe lorsque R < 1 (le critère de minimisation est large et la désirabilité croît rapidement dès que s s'éloigne de la valeur maximale), R = 1 (le critère de minimisation est intermédiaire), et R > 1 (le critère de minimisation est aigu et la désirabilité ne devient grande que lorsque s est proche de la valeur minimale).

Pour l'objectif [CIBLE], la valeur de la sortie s doit être la plus proche possible de s^* , dans l'intervalle $[s_{\min}, s_{\max}]$. On pose

$$\tau(s) = \begin{cases} 0 & \text{si } s \leq s_{\min} \\ \left[(s - s_{\min})/(s^* - s_{\min}) \right]^R & \text{si } s_{\min} \leq s \leq s^* \\ \left[(s_{\max} - s)/(s_{\max} - s^*) \right]^R & \text{si } s^* \leq s \leq s_{\max} \\ 0 & \text{si } s \geq s_{\max} \end{cases}$$

La figure 13 (b) donne l'allure de cette courbe lorsque R < 1 (le critère de ciblage est large et la désirabilité croît rapidement dès que s s'éloigne de la valeur minimale et de la valeur maximale), R = 1 (le critère de ciblage est intermédiaire), et R > 1 (le critère de ciblage est aigu et la désirabilité ne devient grande que lorsque s est proche de la valeur cible).

Pour l'objectif [MAX], la valeur de la sortie s doit être la plus grande possible, dans l'intervalle $[s_{\min}, s_{\max}]$. On pose

$$\tau(s) = \begin{cases} 0 & \text{si } s \le s_{\min} \\ \left[(s - s_{\min}) / (s_{\max} - s_{\min}) \right]^{R} & \text{si } s_{\min} \le s \le s_{\max} \\ 1 & \text{si } s \ge s_{\max} \end{cases}$$

La figure 13 (c) donne l'allure de cette courbe lorsque R < 1 (le critère de maximisation est large et la désirabilité croît rapidement dès que s s'éloigne de la valeur minimale), R = 1 (le critère de maximisation est intermédiaire), et R > 1 (le critère de maximisation est aigu et la désirabilité ne devient grande que lorsque s est proche de la valeur maximale).

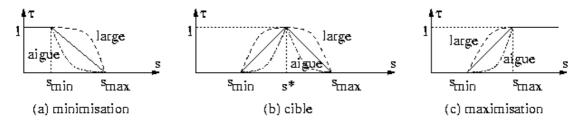


Figure 13 : allure des fonctions de désirabilité

Le concept de fonction de désirabilité est équivalent à celui de fonction d'appartenance au sousensemble flou des produits répondant à l'objectif. Cette terminologie sera décrite dans le chapitre 3, pour la construction des fonctions objectif multicritère. Nous ne parlerons dans ce chapitre que de fonction de désirabilité.

Par composition de la fonction τ et de la fonction Φ , on peut définir la fonction qui, au jeu d'entrées $(e_1,e_2,...,e_p)$, fait correspondre la désirabilité :

$$\tau(s) = \tau \circ \Phi(e_1, e_2, ..., e_p) = \tau(\Phi(e_1, e_2, ..., e_p))$$

Cette fonction est continue et elle définit dans l'espace $R^p \times [0,1]$ une **surface de désirabilité** notée SD d'équation $SD: \sigma = \tau \circ \Phi(e_1, e_2, ..., e_p)$. Nous rappelons que cette surface de désirabilité n'est pas connue a priori des agents. C'est pourquoi une étude complète est nécessaire afin de déterminer le plus finement possible et le plus rapidement le sommet de cette surface. Nous allons maintenant présenter la méthode du simplexe qui permet de guider cette étude.

I.5.4. Principe général du simplexe

Le problème d'optimisation est maintenant complètement défini par la définition des paramètres d'entrée et la fonction de désirabilité. Nous sommes passés de l'objectif initial (s'approcher le plus possible du produit idéal *cf.* paragraphe 2.2) à l'objectif réduit ([MIN], [CIBLE] ou [MAX], *cf.* paragraphe 5.2) pour dégager enfin l'**objectif final** : on cherche à déterminer un jeu de paramètres d'entrées pour <<maximiser la désirabilité>>. Ainsi formulé, cet objectif final sera inchangé dans le cas d'une optimisation multicritère (ou multi objectif) par la méthode du multisimplexe : nous montrerons en effet, au chapitre 3, qu'il est possible d'agréger les différentes désirabilités attachées à chaque réponse en une désirabilité globale.

Dans le cas où p=2, on peut imaginer qu'on cherche à trouver les abscisse $x=e_1$ et ordonnée $y=e_2$ du point le plus haut (σ maximal) de la surface de désirabilité. Il ne faut pas oublier que chaque entrée e_i doit rester dans l'intervalle $[e_{i_{\min}},e_{i_{\max}}]$. On cherche donc le point le plus haut sur la surface de désirabilité SD tendue au dessus d'un rectangle défini sur le plan (O,x,y). Il n'est donc pas impossible que ce point se situe sur l'un des bords du domaine. Pour cela, en l'absence de toute information sur la fonction de réponse, donc sur la forme de la surface de désirabilité, on ne peut qu'avancer pas à pas, en fabriquant un produit avec des valeurs de paramètres d'entrée données, en mesurant s puis en calculant $\tau(s)$.

Une image couramment utilisée pour introduire la méthode du simplexe est la suivante. Les agents sont dans la situation d'un randonneur (le laboratoire va réaliser plusieurs essais avec des jeux distincts d'entrées) aveugle (la fonction de réponse est inconnue) cherchant le sommet (de désirabilité maximale) d'une colline (la surface de désirabilité SD) sur laquelle il avance à tâtons. Pour cela, il teste autour de lui quelques positions dans diverses directions. Ensuite, il effectuera des étapes successives en testant à chaque fois un nouveau point dans la direction opposée à celle du point de plus basse altitude.

Donnons le principe de la méthode itérative du simplexe dans le cas simple où p=2.

- On définit trois jeux distincts d'entrées $((x_E; y_E), (x_F; y_F), (x_G; y_G))$, formant, dans l'espace des paramètres, un triangle (EFG). C'est le simplexe initial. On fabrique les trois produits correspondants et on mesure à chaque fois la réponse s $(s_E, s_F \text{ et } s_G)$. On calcule à chaque fois la désirabilité correspondante $\sigma = \tau(s)$ et on en déduit le triplet des trois désirabilités : $(\sigma_E, \sigma_F, \sigma_G)$.
- On nomme B (initiale de Best) le point de plus forte désirabilité, c'est-à-dire donnant le produit avec la meilleure réponse, W (initiale de Worst) le point de plus faible désirabilité et N (initiale de Next to the worst) le point correspondant à la deuxième désirabilité la plus faible.
- On fait un pas dans la direction opposée au point W de plus faible désirabilité et on définit un nouveau jeu d'entrées : ce sont les coordonnées x_R et y_R du point R (reflect vertex) symétrique de W par rapport au milieu des deux autres points B et N (voir figure 14).
- On mesure la désirabilité en *R* .
 - Si en ${\cal R}$, la désirabilité est plus forte qu'en ${\cal W}$, alors ${\cal R}$ remplace ${\cal W}$ et on réitère la procédure.
 - Si en R, la désirabilité est inférieure à celle en W, alors on fait un pas dans la direction opposée au point N de deuxième plus faible désirabilité : on définit un nouveau jeu d'entrées en R', point symétrique de N par rapport au milieu des deux autres points B et W, auquel on applique les mêmes tests qu'à R (voir figure 14).

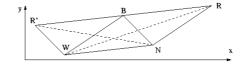


Figure 14 : progression du simplexe dans le cas de deux entrées

- On progresse ainsi pas à pas en cherchant, à chaque étape, la direction dans laquelle la désirabilité augmente.
- Lorsque la désirabilité n'augmente plus quelle que soit la direction choisie, on est arrivé à un extremum de désirabilité.

Le choix du simplexe initial est libre. À partir de ce simplexe initial, pour définir les simplexes suivants, il est possible de faire des pas réguliers (si le simplexe initial est un hyper tétraèdre régulier, il le reste à chaque itération) : c'est l'algorithme du simplexe <
basique>> (cf. paragraphe 5.6) ou des pas irréguliers en agrandissant la taille du simplexe dans les directions où la désirabilité augmente fortement, ou en la diminuant lorsque l'on pense approcher de l'extremum : c'est l'algorithme du simplexe <<modifié>> (cf. paragraphe 5.7).

Nous allons maintenant présenter les divers types de simplexes initiaux.

I.5.5. Définition du simplexe initial

Le simplexe initial est un hyper tétraèdre dans l'espace des p entrées : il est formé de p+1 points dans cet espace. Son choix peut être totalement aléatoire, dicté par l'intuition des agents, ou correspondre à tout ou partie des meilleurs essais déjà réalisés par le laboratoire.

Dans la pratique, on trouve deux catégories principales de simplexes initiaux.

• Le **simplexe en coin** est formé par un point principal $P_0 = (a_1; a_2; ...; a_p)$ et p points secondaires. Pour tout entier $k \in [[1, p]]$, le segment $[P_0P_k]$ est parallèle à l'axe (O, e_k) (axe de repérage de la valeur de l'entrée E_k) de vecteur unitaire directeur u_k :

$$P_k = (a_1; ...; a_{k-1}; b_k; a_{k+1}; ...; a_p) \text{ soit } \overrightarrow{P_k P_{k+1}} = (b_k - a_k) \overrightarrow{u_k} \text{ avec } b_k \neq a_k$$

• Le **simplexe tourné** est formé par un point principal $P_0 = (a_1; a_2; ...; a_p)$ et p points secondaires tels que le simplexe forme un hyper tétraèdre régulier, c'est-à-dire tel que la distance euclidienne entre deux points quelconques est une constante, et possédant une symétrie par permutation d'axes. Ce choix ne se justifie que si les différentes entrées sont normées, c'est-à-dire rapportées à la largeur de leur intervalle de variation. Ainsi, si la variable g varie sur un

intervalle
$$[g_{\min}, g_{\max}]$$
, la variable $g_{\text{normée}} = \frac{g - g_{\min}}{g_{\max} - g_{\min}}$ varie entre 0 et1, et la largeur de

l'intervalle est donc ramenée à 1.

Dans le cas particulier où p=2, on note de façon simplifiée $x=e_1$ et $y=e_2$ les valeurs des deux entrées. Le simplexe initial, dessiné dans le plan (O,x,y), sera alors constitué d'un triangle non aplati. Si on choisit un point P_0 comme premier point,

- le simplexe en coin est un triangle rectangle (voir figure 15 (a));
- le simplexe tourné est un triangle équilatéral (voir figure 15 (b)).

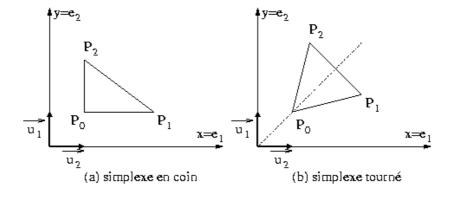


Figure 15 : simplexe initial en coin ou tourné dans le cas à deux entrées

Dans le cas général à p entrées, on démontre que, si on prend le point P_0 comme origine du repère, les coordonnées des points du simplexe initial tourné sont données par le tableau 1.

Tableau 1 : tableau des coordonnées des sommets du simplexe initial tourné

Ainsi, dans le cas particulier où p=2, on trouve $P=\frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{2}}$ et $Q=\frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}}$. On en déduit les valeurs approchées des coordonnées des trois points : $P_0(0\,;0)$, $P_1(0,966\,;0,259)$ et $P_2(0,259\,;0,966)$. Ce simplexe forme un triangle symétrique par rapport à la première diagonale (y=x). On vérifie l'égalité des trois distances : $P_0P_1=P_0P_2=P_1P_2=1$.

Le choix du type de simplexe initial n'est pas toujours libre. Donnons quelques règles de choix.

- [REGLE 1]: le simplexe en coin est utilisable dans tous les cas de figure.
- [REGLE 2] : les calculs des coordonnées des sommets du simplexe initial et celles des sommets des simplexes suivants sont faciles à faire avec une simple calculatrice dans le cas du simplexe en coin ; un outil de calcul, tableur ou logiciel, est indispensable dans le cas du simplexe tourné.
- [REGLE 3]: dans le cas du simplexe en coin, et dans l'algorithme basique, chaque nouveau sommet défini par la procédure possède plusieurs coordonnées déjà rencontrées: ces coordonnées correspondent donc à des valeurs de certaines entrées déjà choisies dans des essais précédents. Par conséquent, les agents pourront éprouver à la fois une plus grande facilité de réglage, par répétition de ces entrées, voire une plus grande rapidité de régalage lorsque plusieurs entrées sont inchangées par rapport à l'essai précédent.
- [REGLE 4] : dans le cas du simplexe tourné, chaque nouveau sommet qui sera défini dans les simplexes suivants correspond à des niveaux presque systématiquement nouveaux.
- [REGLE 5] : corrélativement aux deux remarques qui précédent, le simplexe en coin est le seul possible quand une des variables prend des valeurs discrètes régulièrement espacées. Si p=2 et si e_1 a pour espace de valeurs le pseudo intervalle de pas δg_1 (cf. paragraphe 2.4.3) : $[[E',E'']]_{\delta g_1}$, alors on choisira un simplexe initial dont le pas sur l'entrée 1 est un multiple entier de ce pas, soit $m \cdot \delta g_1$ ($m \in N^*$), et dont le pas sur l'entrée 2 est noté δg_2 :

$$P_0(E', e_{2 \min}), P_1(E' + m \cdot \delta g_1, e_{2 \min}), P_2(E', e_{2 \min} + \delta g_2)$$

Les coordonnées des sommets des simplexes suivants ne prendront alors que des valeurs d'entrée e_1 du type $E'+km\cdot\delta g_1$ ($k\in N$) qui correspondront bien aux valeurs discrètes admises pour cette entrée. La figure 16 illustre ce type de simplexe en coin associé à l'entrée discontinue e_1 en choisissant m=2.

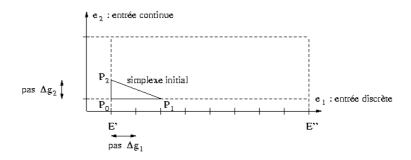


Figure I.16 : simplexe en coin tracé avec un pas $2\Delta g_1$ selon l'entrée discrète e_1

- [REGLE 6] : nous rappelons ici, pour rassembler les diverses règles de choix, la remarque faite au paragraphe 5.5 : le choix du simplexe tourné, en forme d'hyper tétraèdre régulier, ne se justifie que si les différentes entrées sont normées.
 - [REGLE 7] : le principal avantage du simplexe tourné est une convergence plus rapide de l'algorithme : cette propriété a été établie par T.G. Öberg en 1998, en répétant un grand nombre de simulations d'algorithmes de simplexe [13].

Lorsque le simplexe initial est défini, la procédure du simplexe peut être engagée. Nous allons d'abord décrire le simplexe basique.

I.5.6. L'algorithme du simplexe basique (« Basic simplex method »)

Nous allons illustrer cet algorithme en traitant un exemple standard, c'est-à-dire en évitant toute situation difficile dans laquelle l'algorithme peut être mis en défaut. M. A. Luersen a comparé dans sa thèse [11] le comportement des différentes méthodes d'optimisation itérative avec des fonctions de réponse présentant des profils plus complexes (*cf.* fonctions tests au paragraphe 1.3).

Exemple numérique

Choisissons, pour illustrer notre présentation, les hypothèses suivantes. Les deux entrées e_1 et e_2 , à variations continues, prennent leurs valeurs dans des intervalles $[e_{i \min}, e_{i \max}]$. La fonction de désirabilité est une fonction du second degré en chacune d'elles. Posons $x = e_1$ et $y = e_2$. Soient x^* et y^* deux réels. Supposons que la fonction de désirabilité soit :

$$\sigma = \frac{1}{10000} \left[10000 - (x - x^*)^2 - (y - y^*)^2 \right]$$

Rappelons que les agents n'ont pas la connaissance de cette fonction, et qu'en la posant, nous ne faisons que donner un modèle qui englobe le comportement du système physique par la fonction réponse s=f(x,y) et la composition de cette fonction avec celle de désirabilité $\sigma=\Phi(s)$. L'optimum est obtenu quand les deux carrés sont minimaux, donc quand ils sont tous les deux nuls : cela correspond au point correspondant au jeu d'entrées $(x^*;y^*)$, pour lequel la désirabilité est maximale : $\sigma^*=1$. Cependant, il peut arriver que ce point soit en dehors du domaine des entrées : l'optimum dans le domaine sera alors un autre point de désirabilité strictement inférieure à 1. La surface de désirabilité sur laquelle les simplexes successifs s'inscriront est donc un paraboloïde parabolique (une parabole glissant sur une autre parabole) convexe et possédant un unique sommet.

Nous allons maintenant décrire l'algorithme du simplexe basique en l'illustrant par un exemple où l'optimum appartient à l'espace des paramètres, puis par un exemple où l'optimum est à l'extérieur de cet espace. À chaque fois que nous rencontrerons une étape clé de l'algorithme, nous l'illustrerons par l'exemple, et nous mettrons en exergue la loi générale correspondante en encadré de type « définition ». En rassemblant ces lois, nous les organiserons ensuite sous une forme normalisée d'algorithme. Enfin, nous ferons une analyse sommaire de l'efficacité de la méthode basique, qui nous servira d'introduction à la dernière section de ce chapitre, présentant la méthode modifiée.

I.5.6.1. Algorithme du simplexe basique, illustré par un exemple à deux dimensions, où l'optimum est dans le domaine des entrées

Pour la fonction test, nous choisissons $x^* = 82$ et $y^* = 46$ et nous construisons la fonction du type donné au paragraphe 5.6. La désirabilité simulée du produit fabriqué en choisissant pour entrées les valeurs x (notation abrégée pour e_1) et y (notation abrégée pour e_2) est :

$$\sigma = \frac{1}{10000} \left[10000 - (x - 82)^2 - (y - 46)^2 \right]$$

Les deux entrées sont supposées varier continûment dans l'intervalle [10,100] ; avec la notation donnée au paragraphe 2.4.5, l'espace des entrées est égal à l'espace des jeux possibles :

$$EE = EJ = [10,100] \times [10,100]$$

L'hypothèse des variations continues des deux variables va nous permettre de présenter la méthode du simplexe basique. Notons que dans le cas de variables discontinues, Darvas [25] et Gilliom et coll. [26] ont proposé des méthodes dérivées de la méthode du simplexe.

Pour faciliter la lecture, nous allons articuler distinctement les différentes étapes de l'algorithme.

ÉTAPE 0 : CHOIX DU SIMPLEXE INITIAL

Nous choisissons dans cet exemple un simplexe initial en coin, basé au point de valeurs minimales des deux entrées, et de pas identique (mais ce n'est pas obligatoire dans le cas général) égal à 15 pour les deux entrées. Les coordonnées des trois sommets du triangle formant le simplexe initial sont donc : $P_0(10;10) \quad P_1(25;10) \quad P_2(10;25)$.

Le suivi de l'algorithme est possible selon trois modes d'observation :

- [MODE 1]: on peut représenter sur le plan, formant l'espace des paramètres, les triangles isocèles rectangles accolés formant les simplexes successifs. Ceci n'est possible que dans le cas très particulier où p=2, et pas si $p \ge 3$.
- [MODE 2] : on peut dresser un tableau de valeurs avec l'historique des points rencontrés, ou avec seulement les points du simplexe en cours en conservant en mémoire le nombre de fois où le simplexe a déjà été retenu (cette valeur servira pour la condition de terminaison de la procédure).
- [MODE 3]: on peut enfin suivre l'évolution de la désirabilité en espérant qu'elle tendra le plus vite possible vers une valeur optimale, et que cette valeur sera la plus proche possible de 1. On trace donc le graphe donnant σ pour les sommets définissant les simplexes successifs. Dans le cas $p \ge 4$, il est impossible de représenter géométriquement les simplexes successifs dans notre espace à trois dimensions, et le graphe précédent est alors la seule représentation graphique possible.

ÉTAPE 1 : MESURE DES DESIRABILITES DES SOMMETS DU SIMPLEXE INITIAL

Dans le cas d'une utilisation réelle (non simulée) de la procédure, on fabrique trois produits avec les trois jeux d'entrées, puis on procède à la mesure de la réponse. Ensuite, par application de la fonction de désirabilité à la valeur de la mesure, on calcule la désirabilité du produit. Enfin, pour chaque produit, on porte ces valeurs dans le tableau de valeurs. Ici, dans notre situation de simulation, nous appliquerons simplement la fonction de désirabilité aux trois couples d'entrées et nous calculerons directement σ .

ÉTAPE 2 : CLASSEMENT DES SOMMETS SU SIMPLEXE INITIAL

On classe les trois points selon la nomenclature déjà citée au paragraphe 5.4 :

- B (Best) est le meilleur point, de désirabilité maximale ;
- N (*Next to worst*) est l'avant dernier point dans l'ordre de désirabilité : c'est donc aussi (car p=2) le point de désirabilité intermédiaire ;
- W (Worst) est le point de plus mauvaise désirabilité.

On obtient ainsi le tableau de valeurs 2 qui donne les caractéristiques du simplexe en coin initial.

Tableau I.2: simplexe initial en coin (simplexe basique)

On peut donner deux illustrations géométriques de ce tableau. La figure 17 (a) propose une vue du simplexe initial dans l'espace des paramètres. La figure 17 (b) donne la représentation graphique des variations de la désirabilité σ en ordonnée en fonction du numéro d'ordre du sommet (ici 0, 1 et 2) en abscisse. On peut noter que le niveau de désirabilité le plus haut à ce stade est celui du point P_1 : elle vaut 0,5455.

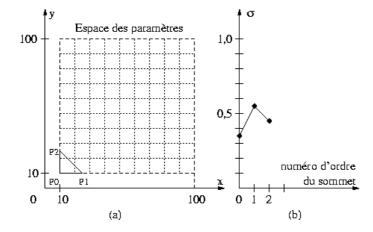


Figure I.17 (a) : représentation géométrique du simplexe initial dans l'espace des paramètres ; (b) graphique d'évolution de la désirabilité

ÉTAPE 3: LE SYMETRIQUE DE W EST LE NOUVEAU POINT CANDIDAT

On définit un nouveau point en <<fuyant>> le plus mauvais point, ici $W=P_0$. Dans l'algorithme du simplexe basique, lorsqu'on a identifié, dans un simplexe donné, le point W de désirabilité la plus faible, le nouveau **sommet candidat** est le symétrique de W par rapport à l'isobarycentre des autres points. Dans notre exemple, p=2 et l'isobarycentre est le milieu I du segment $[P_1,P_2]$. Le symétrique de P_0 par rapport à I est donc défini par $\overline{IP_3}=-\overline{IP_0}$. On calcule les coordonnées du nouveau sommet candidat : $P_3(25;25)$. Comme nous l'avions remarqué dans la règle de choix numéro 3, au paragraphe 5.5, nous pouvons constater ici que ces deux niveaux de réglage des entrées $(e_1=25)$ et $(e_2=25)$ ont déjà été rencontrés séparément; c'est un des avantages du simplexe initial en coin.

ÉTAPE 4: MESURE DE LA DESIRABILITE DU NOUVEAU POINT CANDIDAT

Dans le cas réel, on fabrique un nouveau produit avec ce jeu d'entrées, on procède à la mesure de la réponse, on calcule la désirabilité pour ce nouveau produit et on porte cette valeur dans le tableau de valeurs. Ici, dans notre situation de simulation, nous appliquons la fonction de désirabilité au couple d'entrées et nous calculons directement $\sigma(P_3) = 0.6310$.

ÉTAPE 5: TEST DE PERTINENCE DU NOUVEAU POINT CANDIDAT

On compare cette valeur de désirabilité aux valeurs des points précédents et on constate qu'elle est meilleure que celle de N (elle est également meilleure que celle de B).

ÉTAPE 6: DEFINITION DU NOUVEAU SIMPLEXE

Dans l'algorithme du simplexe basique, si le nouveau point candidat a une désirabilité meilleure que N, il remplace W dans le simplexe. Ici, on élimine donc P_0 et on le remplace par P_3 . Le deuxième simplexe est donc $(B,N,W)=(P_3,P_1,P_2)$. Le nouveau tableau de valeurs 3 résume l'ensemble des données à ce stade.

Tableau I.3 : le deuxième simplexe (simplexe basique)

La figure 18 propose une vue du nouveau simplexe en traits épais, le simplexe initial figurant en traits fins.

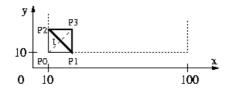


Figure I.18 : représentation géométrique du deuxième simplexe

ÉTAPE 7: ITERATION

La procédure est alors engagée, et on la réitère : on définit un nouveau point en « fuyant » le plus mauvais point, $W = P_2$. Le nouveau point candidat est le point P_4 , symétrique de P_2 par rapport au milieu I des deux autres points, P_1 et P_3 . Ses coordonnées sont $P_4(40;10)$. On calcule sa désirabilité : $\sigma(P_4) = 0,6940$. Elle est à nouveau supérieure à celle de N (et même à celle de P_2) donc P_4 remplace P_2 0. Nous pouvons ainsi remarquer que tant que le nouveau point candidat est de désirabilité supérieure à celle de P_3 0, meilleur point précédemment rencontré, la désirabilité des sommets successifs est strictement croissante. Cette situation de croissance stricte de P_3 0 se répète qu'au septième simplexe.

ÉTAPE 8 : POINT CANDIDAT MOINS BON QUE B MAIS MEILLEUR QUE N

Lorsqu'on calcule la désirabilité de P_8 , on trouve une valeur supérieure à celle de N (P_6) mais inférieure à celle de B (P_7). Le nouveau tableau de valeurs 4 résume l'ensemble des données à ce stade.

	$\boldsymbol{\mathcal{X}}$	У	σ	
P_0	10	10	0,3520	
P_1	25	10	0,5455	
P_2	10	25	0,4375	
P_3	25	25	0,6310	
P_4	40	10	0,6940	
P_5	40	25	0,7795	W
P_6	55	10	0,7975	Ν
P_7	55	25	0,8830	В
P_8	70	10	0,8560	

Tableau I.4 : simplexe basique : cas du huitième point candidat

Cette situation va correspondre à un changement de direction dans le développement des simplexes successifs.

ÉTAPE 9: POURSUITE DE L'ITERATION

Le nouveau point candidat reste meilleur que N jusqu'au treizième simplexe.

ÉTAPE 10 : POINT CANDIDAT MOINS BON QUE N MAIS MEILLEUR QUE W

Le calcul des coordonnées du quatorzième sommet et de sa désirabilité fait apparaître pour la première fois une désirabilité moins bonne que celle du deuxième plus mauvais point N du simplexe en cours. Le tableau de valeurs 5 reproduit les lignes 9 à 14.

La figure 19 donne la représentation géométrique des différents sommets ; en traits épais figure le simplexe en cours $(B,N,W)=(P_{13},P_{11},P_{12})$, en traits fins les simplexes précédents et en pointillés le nouveau point candidat, P_{14} .

Tableau I.5 : cas du quatorzième point candidat (simplexe basique)

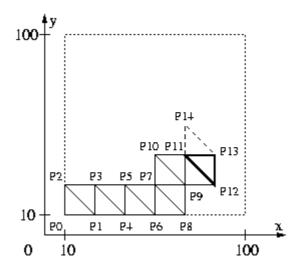


Figure I.19: représentation géométrique du douzième simplexe

Définissons précisément la situation :

- Le point candidat, P_{14} , est le symétrique de P_{12} par rapport au centre des autres points.
- Il a une désirabilité $\sigma(P_{14}) = 0,9775$ supérieure à celle de W (P_{12} de désirabilité 0,9550), mais inférieure à celle de N (P_{11} de désirabilité 0,9820).
- On fait entrer P_{14} à la place de P_{12} dans le nouveau simplexe à la place du plus mauvais point, les deux autres points étant inchangés.
- Leur milieu est donc inchangé.
- Dans ce nouveau simplexe, P_{14} devient à son tour le plus mauvais point W.
- Si on cherche son symétrique par rapport au milieu des autres points, on retombera donc $\sup P_{12}$.
- L'algorithme entre alors dans une oscillation perpétuelle entre les deux points.

L'analogie topographique de cette situation, représentée à la figure 20, est celle d'un randonneur ayant repéré deux points P_{11} et P_{13} sur une ligne de crête, qui constate que dans la direction de P_{12} , on descend dans une vallée et que dans la direction opposée, celle de P_{14} , on descend aussi dans l'autre vallée.

Le randonneur prendra alors la décision :

- 1. d'abandonner P_{12} qui est le plus mauvais des quatre points ;
- 2. de tenter de faire un pas dans la direction opposée à P_{11} qui est le deuxième plus mauvais point après P_{14} , ce qui conduira à P_{15} .

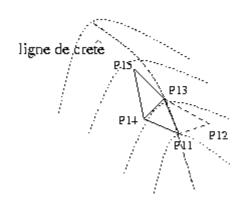


Figure I.20 : analogie topographique de la ligne de crête

Dans l'algorithme du simplexe basique, lorsque dans un simplexe donné, le nouveau point candidat est le point K symétrique de W par rapport à l'isobarycentre des autres points, si K est le point éliminé à la précédente étape, ou si sa désirabilité est plus faible que celle de W, on ne retient pas K. On teste alors le nouveau point candidat K', symétrique de N (deuxième point le plus mauvais) par rapport à l'isobarycentre des autres points. On poursuivra donc l'algorithme en choisissant le point P_{15} symétrique de P_{11} par rapport au milieu des autres points, P_{13} et P_{14} . Sa désirabilité est $\sigma(P_{15}) = 0,9910$, ce qui confirme que cette direction était bonne. P_{15} remplace P_{14} . Le nouveau simplexe est donc $(B,N,W) = (P_{13},P_{15},P_{11})$, le tableau 6 donne la fin du nouveau tableau de valeurs.

	$\boldsymbol{\mathcal{X}}$	У	σ	
P_{11}	70	40	0,9820	W
P_{12}	85	25	0,9550	
P_{13}	85	40	0,9955	В
P_{14}	70	55	0,9775	
P_{15}	85	55	0,9910	N

Tableau I.6 : nouveau point candidat symétrique de N (simplexe basique)

ÉTAPE 11: TERMINAISON

Le nouveau candidat, P_{16} , symétrique de W (P_{11}), a pour coordonnées $P_{16}(100;40)$ et une désirabilité $\sigma(P_{16})=0,9640$ inférieure à celle de W (P_{11} , de désirabilité 0,9820) : on abandonne ce point. Le point P'_{16} , symétrique de N (P_{15}), a pour coordonnées $P'_{16}(100;25)$ et une désirabilité $\sigma(P_{16})=0,9235$ inférieure elle aussi à celle de W (P_{11}) : on abandonne ce point, et l'algorithme se termine avec l'optimum $P_{13}(x=85;y=40)$, $\sigma(P_{13})=0,9955$. Ce point P_{13} est très proche de l'optimum théorique (82;46), et sa désirabilité très proche de 1 : l'objectif peut donc être considéré comme atteint. Dans l'algorithme du simplexe basique, si le symétrique de W et celui de N par rapport à l'isobarycentre des autres points ont tous les deux des désirabilités inférieures à celle de W, alors l'algorithme s'arrête et l'optimum trouvé est le point B du simplexe en cours. La figure 21(a) montre le simplexe final en traits épais et tous les simplexes intermédiaires en traits fins ; la figure 21(b) donne l'allure du graphe de variation de la désirabilité en fonction du numéro d'ordre du sommet. Le sommet idéal P_{13} donne une réponse optimale de désirabilité $\sigma(P_{13})=0,9955$: il correspond au point le plus haut du graphe.

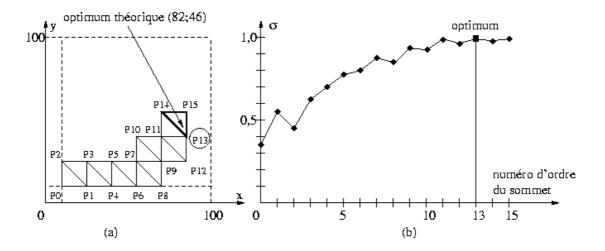


Figure I.21 (a): représentation géométrique de la suite des simplexes; (b) graphique d'évolution de la désirabilité Nous allons maintenant étudier un exemple où l'optimum est à l'extérieur du domaine d'étude.

I.5.6.2. Algorithme du simplexe basique, illustré par un exemple à deux dimensions, où l'optimum est à l'extérieur du domaine des entrées

Il est fréquent que l'optimum recherché soit inaccessible avec la technologie utilisée : l'algorithme du simplexe risque alors de proposer des essais qui sortent du domaine des entrées possibles. Étudions ce cas avec un second exemple.

Pour la fonction test, nous choisissons $x^* = 48$ et $y^* = 56$ et nous construisons la fonction du type donné au paragraphe 5.6. La désirabilité simulée du produit fabriqué en choisissant pour entrées les valeurs x (notation simplifiée pour e_1) et y (notation simplifiée pour e_2) est :

$$\sigma = \frac{1}{10000} \left[10000 - (x - 48)^2 - (y - 56)^2 \right]$$

On suppose que e_1 varie continûment dans [20,45], e_2 dans [20,100]; avec la notation donnée au paragraphe 2.4.5, l'espace des entrées est égal à l'espace des jeux possibles: $EE = EJ = [20,45] \times [20,100]$. L'optimum théorique ($x^* = 48$, $y^* = 56$) est donc en dehors du domaine, mais proche de la frontière. L'algorithme du simplexe appliqué selon les lois du paragraphe précédent va donc certainement nous proposer de tester des points candidats situés en dehors du domaine. Si la simulation ne nous interdit pas de faire le calcul des désirabilités pour ces points, en passant à la pratique expérimentale, il sera en revanche impossible de fabriquer des produits avec des réglages impossibles à réaliser (en tout cas avec la technologie dont disposent les agents). Nous verrons à l'étape 3 la procédure permettant de continuer la recherche de l'optimum lorsque ce cas se présente.

ÉTAPE 0 : SIMPLEXE INITIAL

Nous choisissons un simplexe initial en coin, basé au point de valeurs minimales des deux entrées, et de pas égal à 10 (e_1 varie dans un intervalle de largeur 25, et un pas de 15 comme dans l'exemple précédent serait excessif): $P_0(20;20)$, $P_1(30;20)$, $P_2(20;30)$.

ÉTAPE 1 : PREMIERES ITERATIONS

Les premières étapes jusqu'à P_9 se déroulent sans cas particulier. Le tableau 7 donne l'ensemble des valeurs de désirabilité pour chaque sommet.

 σ P_0 20 0,7920 30 20 0,8380 20 30 0,8540 30 30 0,9000 $P_{\scriptscriptstyle A}$ 20 40 0,8960 P_5 30 40 0,9420 40 0,9260 30 40 0,9680 30 0,9640 40 0,9900

Tableau I. 7 : les neuf premières étapes (simplexe basique, optimum extérieur)

ÉTAPE 2: POINT CANDIDAT A L'EXTERIEUR DU DOMAINE ADMISSIBLE

Le symétrique de W (P_8) par rapport au milieu de [B,N] est le point $P_{10}(50;40)$. Or l'entrée e_1 ne peut dépasser la valeur maximale 45. Ce point, indiqué en pointillés sur la figure 22, est donc hors du domaine des entrées, et le produit ne peut pas être fabriqué. Pour éviter de briser la logique de l'algorithme du simplexe, il suffit d'affecter la désirabilité 0 à ce point, sans même faire le test.

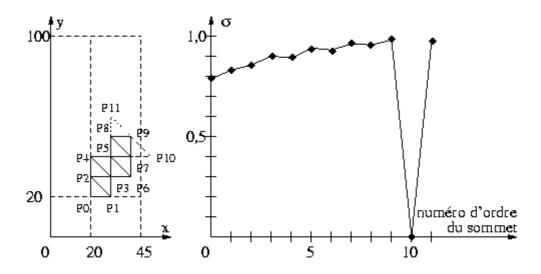


Figure I.22 (a) : les neuf premiers simplexes, avec le sommet numéro 10 à l'extérieur du domaine ; (b) graphique d'évolution des désirabilités, avec la pénalisation $\sigma(P_{10})=0$

Ainsi, le point P_{10} a une désirabilité inférieure à celle de W et l'algorithme, tel qu'il a été défini dans le cas précédent (cf. paragraphe 5.6.1) propose alors de tester le symétrique de N par rapport au symétrique du milieu de [W,B]: on obtient ainsi le point $P_{11}(30\,;60)$. Dans l'algorithme du simplexe basique, si un point candidat K est à l'extérieur du domaine admissible (noté EJ au paragraphe 2.4.5), il n'est pas testé et on le pénalise en l'affectant de la désirabilité 0.

- Si K est le symétrique de W par rapport à l'isobarycentre des autres points, du simplexe en cours, alors K est rejeté et le nouveau point candidat K' est le symétrique de N.
- ullet Si K est lui-même le symétrique de N par rapport à l'isobarycentre des autres points (donc si au préalable le symétrique de W avait déjà été rejeté), alors l'algorithme s'arrête et B est le meilleur point trouvé.

Dans notre exemple, la désirabilité calculée du nouveau point candidat (noté K' dans la loi énoncée cidessus) est $\sigma(P_{11}) = 0,9660$. Par souci de clarté, rassemblons dans le tableau 8 les valeurs numériques nécessaires à l'analyse suivante.

Tableau I.8 : rejet du dixième point (simplexe basique, optimum extérieur)

La figure 22(a) donne la représentation géométrique des simplexes successifs à ce stade et la figure 22(b) montre la pénalisation du dixième point candidat (sa désirabilité est nulle), qui a conduit à son rejet.

On constate que la désirabilité de P_{11} (0,9660), est meilleure que celle de W (P_8 , de désirabilité 0,9640). On pourrait tenter de continuer avec le nouveau simplexe obtenu en remplaçant P_8 par P_{11} dans le simplexe en cours (P_7 , P_8 , P_9). Le nouveau simplexe serait donc (P_8 , P_8). Mais on constate sur la figure 20, ou plus en détail sur la figure 21, que ce simplexe n'aurait pas la forme de triangle isocèle rectangle qu'avaient tous les précédents simplexes.

Comme P_{11} est le symétrique de P_7 , on doit donc continuer la procédure en remplaçant P_7 par P_{11} dans le simplexe en cours (P_7, P_8, P_9) . Le nouveau simplexe est donc $(B, N, W) = (P_9, P_{11}, P_8)$. Cette procédure exceptionnelle revient à longer la frontière coûte que coûte comme le montre la figure 23.

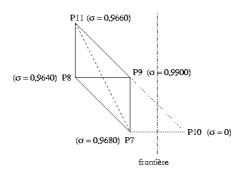


Figure I.23 : choix du simplexe après exclusion du dixième sommet

Après l'exclusion d'un point, si le nouveau point candidat K' est de désirabilité comprise entre celle de W et celle de N, on remplace non pas W mais N par K'.

ÉTAPE 3 : POURSUITE DE L'ALGORITHME EN LONGEANT LA FRONTIERE

L'application de cette procédure permet de poursuivre l'algorithme. On peut trouver dans le tableau de valeurs 9 les différentes étapes qui conduisent à la fin de la procédure :

- P_{12} , symétrique de P_8 par rapport au milieu $de[P_9,P_{11}]$, a pour désirabilité $\sigma(P_{12})=0.9920$. Il devient le meilleur point du nouveau simplexe $(B,N,W)=(P_{12},P_9,P_{11})$;
- P_{13} , symétrique de $W(P_{11})$ par rapport au milieu de $[P_{12}, P_{9}]$, est en dehors du domaine, et on le pénalise avec la désirabilité 0; on rejette donc le point candidat P_{13} ;
- le nouveau point candidat est donc P_{14} , symétrique de N (P_9) par rapport au milieu de $[P_{12}, P_9]$. Sa désirabilité est $\sigma(P_{14}) = 0,9480$. Elle est inférieure elle aussi à celle de W (P_{11}). L'algorithme s'arrête donc à ce stade et le meilleur point trouvé est P_{12} , de coordonnées $x = e_1 = 40$ et $y = e_2 = 60$.

Tableau I.9 : terminaison de l'algorithme (simplexe basique, optimum extérieur)

Le point P_{12} est très proche de l'optimum théorique (48;56) et sa désirabilité (0,9920) est très proche de 1 : l'objectif peut donc être considéré comme atteint. La figure 24(a) montre le simplexe final en traits épais et tous les simplexes intermédiaires en traits fins ; la figure 24(b) donne l'allure du graphe de variation de la désirabilité en fonction du numéro d'ordre du sommet. Le sommet idéal P_{12} donne une réponse optimale de désirabilité $\sigma(P_{12}) = 0,9920$: il correspond au point le plus haut du graphe.

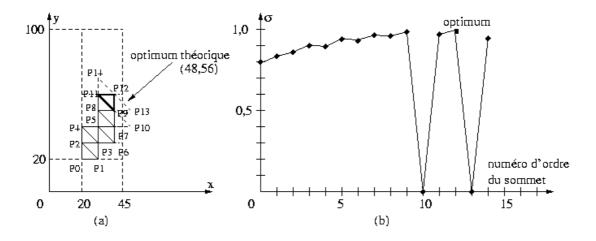


Figure I.24 (a) : représentation géométrique de la suite des simplexes (b) graphique d'évolution de la désirabilité.

Nous allons maintenant rassembler toutes les lois (citées au fil de la description des deux exemples) de la procédure du simplexe basique en les organisant sous la forme d'un organigramme.

I .5.6.3. Algorithme de la méthode du simplexe basique

Nous devons d'abord mentionner deux options de l'algorithme du simplexe basique, qui ne s'inscrivent pas directement dans la démarche de recherche de l'optimum, mais qui ont été mises en place pour des raisons pratiques.

La première option est la possibilité d'arrêter la méthode à tout stade : **l'arrêt du simplexe basique** peut être décidé par l'utilisateur dès que la désirabilité du meilleur point obtenu est jugée suffisante. En particulier, la prise en compte de l'imprécision de mesure sur la réponse se répercute sur celle de la désirabilité. Lorsque l'incertitude sur la désirabilité est supérieure à l'augmentation qu'on peut attendre en se plaçant à l'optimum, le coût des essais supplémentaires doit être pris en compte pour décider si on poursuit ou pas l'optimisation. Par exemple, si la désirabilité du meilleur point B obtenu à un stade est $\sigma_B = 0.98$, mais que l'incertitude relative sur σ est de 5%, alors il est raisonnable de penser que B est le point optimal cherché.

La seconde option est la possibilité à toute étape de répéter un essai : la **réévaluation** est la répétition d'un essai avec le même jeu de réglage : elle est décidée lorsqu'un résultat semble anormal, ou lorsqu'un résultat a donné une désirabilité particulièrement bonne afin de confirmer cette performance.

La figure 25 donne l'algorithme complet du simplexe basique sous la forme d'un organigramme. Nous utilisons les règles conventionnelles de représentation des organigrammes algorithmiques qui sont rassemblées dans l'annexe A. On pourra remarquer par quel artifice tous les différents cas rencontrés dans les deux exemples sont traités par le même organigramme sans multiplier les tests. Tant que la désirabilité de R est au moins égale à celle de W, le point W est remplacé par le point R. Après les tests d'interruption et de réévaluation, le sommet W devient W pour le nouveau simplexe, tandis que parmi les autres sommets, on identifie le meilleur point qu'on nomme W.

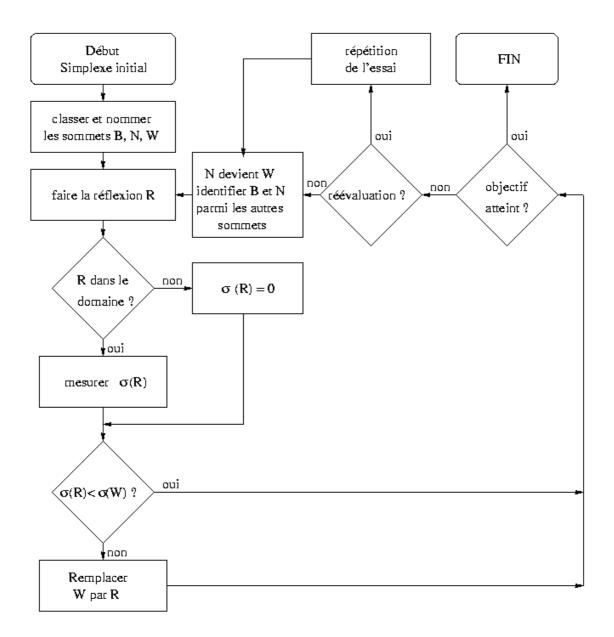


Figure I.25: algorithme du simplexe basique

Vérifions dans le cas p=2 que tous les cas sont bien résolus ainsi. Notons (B,N,W) le simplexe en cours, R le point réfléchi et (B',N',W') le nouveau simplexe.

- [CAS 1]: $\sigma_R > \sigma_B$. On remplace W par R, d'où le triplet (B,N,R). On nomme W' = N (imposé par l'algorithme), les autres points restants sont B et R. On nomme B' = R (meilleur point restant) et N' = B (moins bon point restant). On trouve donc pour nouveau simplexe le triplet (B',N',W') = (R,B,N), ce qui est bien le simplexe prévu.
- [CAS 2] : $\sigma_N < \sigma_R < \sigma_B$. On remplace W par R, d'où le triplet (B, N, R). On nomme W' = N (imposé par l'algorithme), les autres points restants sont B et R. On nomme B' = B

(meilleur point restant) et N' = R (moins bon point restant). On trouve donc pour nouveau simplexe le triplet (B', N', W') = (B, R, N), ce qui est bien le simplexe prévu.

- [CAS 3]: $\sigma_W < \sigma_R < \sigma_N$. On remplace W par R, d'où le triplet (B,N,R). On nomme W' = N (imposé par l'algorithme), les autres points restants sont B et R. On nomme B' = B (meilleur point restant) et N' = R (moins bon point restant). On trouve donc pour nouveau simplexe le triplet (B',N',W') = (B,R,N). Ce triplet n'est pas bien ordonné $\operatorname{car} \sigma_R < \sigma_N$. C'est là que se trouve l'artifice de l'algorithme. En effet, nous avons noté dans les exemples que dans le nouveau simplexe, si on cherchait le symétrique de R, on retrouvait le point W précédemment éliminé. Par conséquent, en imposant W' = N, le nouveau point testé sera le symétrique de N, conformément à ce que nous annoncions.
- [CAS 4]: $\sigma_R < \sigma_W$ (en particulier lorsque R, en dehors du domaine, a été pénalisé). Le triplet reste (B,N,W). On nomme W'=N (imposé par l'algorithme), les autres points restants sont B et W. On nomme B'=B (meilleur point restant) et N'=W (moins bon point restant). Le nouveau simplexe est donc (B',N',W')=(B,N,W). Ce triplet n'est pas bien ordonné car $\sigma_W < \sigma_N$. Mais cet ordre permettra de tester le symétrique de N à l'étape suivante.

I.5.6.4. Analyse d'efficacité de la méthode basique

Pour faire l'articulation entre la méthode basique et la méthode modifiée que nous allons présenter dans le prochain paragraphe, dressons une liste des principales caractéristiques de la méthode basique.

I.5.6.4.1. Force de la méthode

- La méthode est extrêmement simple à mettre en œuvre.
- Elle est généralisable au cas où l'espace des réponses est un ensemble de valeurs qualitatives ordonnables (*cf.* paragraphe I.2.4.3).
- ullet Elle ne nécessite aucune connaissance a priori sur la surface de réponse ou celle de désirabilité (SD définie au paragraphe I.5.3).

I.5.6.4.2. Initiatives laissées à l'utilisateur

- Le choix du type (en coin ou tourné) du simplexe initial peut avoir une influence sur la vitesse de convergence.
- Le choix de la région dans laquelle se trouve le simplexe initial a une influence sur la vitesse de convergence ; plus il est proche de l'optimum, plus la convergence est rapide.
- Le choix de la taille du simplexe initial a une influence double : plus il est petit, plus la convergence est lente ; et en même temps plus la finesse de la recherche de l'optimum sera grande. On peut donc envisager une succession de procédures simpliciales : dans un premier temps, avec un pas important, on détermine un simplexe final dans lequel, ou au voisinage duquel l'optimum semble se trouver ; ensuite, avec un pas beaucoup plus petit, on relance la recherche de l'optimum dans la région de ce simplexe.

I.5.6.4.3. Inconvénients de la méthode

- Elle ne converge pas forcément vers l'optimum absolu du domaine, et peut <<se perdre>> dans un optimum local. Les fonctions multimodales [11] permettent de mettre cette faiblesse en évidence.
- Quand on a commencé un algorithme du simplexe, on ne sait pas en combien de temps il va converger : on peut procéder à 20 premiers essais, voir la désirabilité croître doucement, mais être encore à 100 étapes de l'optimum (lenteur et manque de souplesse de la démarche).
- On n'utilise que le classement ordinal des valeurs de désirabilité pour chacun des sommets du simplexe, sans exploiter les valeurs proprement dites.
 - On fuira de la même manière un point W, point de plus basse désirabilité du simplexe) de très faible désirabilité et un point W de désirabilité moyenne : cette faiblesse est résolue par le simplexe modifié (cf. paragraphe I.5.7).
 - On prendra le point réfléchi par rapport à l'isobarycentre des autres points, sans

- chercher à <<pencher>> du côté du meilleur d'entre eux : cette faiblesse est résolue par la méthode centroïde pondérée (cf. paragraphe I.1.2.5).
- La méthode basique est purement itérative, et reste bloquée tant que la réponse du nouveau sommet n'est pas connue : cette faiblesse sera résolue par la méthode des campagnes d'expériences, qui fera l'objet du chapitre 5.

Nous allons maintenant présenter la méthode du simplexe modifié.

I.5.7. L'algorithme du simplexe modifié

I.5.7.1. L'esprit de la méthode modifiée

Cette méthode [7] compense l'un des inconvénients de la méthode basique : elle autorise des pas variables ; elle permet donc d'augmenter le pas dans la direction des meilleurs points quand on est loin de l'optimum, ou de diminuer le pas quand on s'approche de l'optimum.

Il faut énoncer une loi algorithmique d'augmentation ou de diminution du pas en fonction des valeurs de la désirabilité en chaque sommet du simplexe. À une étape donnée, on dispose d'un simplexe qu'on appellera le simplexe en cours. On peut classer ses sommets par désirabilité décroissante. Dans le cas p=2, on utilise la terminologie introduite dans l'algorithme basique : les trois points sont nommés B (Best), N (Next to worst) et W (Worst).

On calcule la position de l'isobarycentre G des p-1 meilleurs points, en excluant W. Dans le cas p=2, G est le milieu de [B,N]. On en déduit la position du symétrique de W par rapport à G, qu'on note R (initiale de $Reflected\ vertex$). Vectoriellement, on peut donc écrire $\overline{GR} = -\overline{GW}$.

On mesure la désirabilité de R et on la compare à celle des trois autres points B, R, W. Ces trois points définissent quatre intervalles comme on peut le voir sur la figure 26.

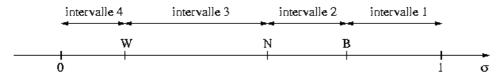


Figure I.26 : les quatre intervalles délimités par B , N et W

Quatre cas sont donc à distinguer.

[CAS 1]: $\sigma_R > \sigma_B$. Le point R est meilleur que le meilleur du simplexe en cours. Ce fait nous encourage à continuer l'exploration dans cette direction. On définit un nouveau point E appelé **extension**: $\overrightarrow{GE} = k \cdot \overrightarrow{GR}$, où k est le **coefficient d'expansion**. Le choix de k est libre. La valeur la plus souvent utilisée est k=2. La figure 27 montre les positions de W, N, B, G, R et E.

- $\operatorname{Si} \sigma_E < \sigma_R$, le point R remplace le point W dans le simplexe. Si p=2, le nouveau simplexe $\operatorname{est}(RBN)$.
- Si $\sigma_E > \sigma_R$, le point E remplace le point W dans le simplexe. Si p=2, le nouveau simplexe est(EBN). Remarquons qu'on aurait pu choisir de continuer avec le simplexe (BRE) car $\sigma_R > \sigma_B$ donc, a fortiori, $\sigma_R > \sigma_N$. On ne le fait pas car on souhaite limiter la déformation du simplexe, et en premier lieu, son aplatissement : celui-ci risque en effet de conduire à la dégénérescence du simplexe (cf) paragraphe 1.4.3) et à l'immobilisation de la procédure.

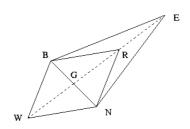


Figure I.27: extension d'un simplexe

[CAS 2] : $\sigma_N < \sigma_R < \sigma_B$. La direction de R n'est ni très bonne, ni très mauvaise, le point R remplace le point W dans le simplexe. Si p=2, le nouveau simplexe est (BRN).

[CAS 3]: $\sigma_W < \sigma_R < \sigma_N < \sigma_B$. Le point R constitue une amélioration par rapport à W, mais s'éloigne peut-être trop du segment de bonne désirabilité [B,N], dont les désirabilités sont meilleures que celle de R. On définit un nouveau point C_R appelé contraction du côté de R: $\overline{GC_R} = k' \cdot \overline{GR}$, où k' est le coefficient de contraction. Le choix de k' est libre. La valeur la plus souvent utilisée est $k' = \frac{1}{k}$ avec k = 2, d'où $\overline{GC_R} = 1/2 \cdot \overline{GR}$. La figure 28 montre les positions de W, N, B, G, R et C_R .

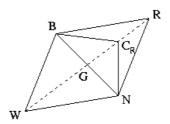


Figure I.28 : contraction du côté de R d'un simplexe

- Si $\sigma_{C_R} < \sigma_R$, on abandonne l'idée de la contraction et R remplace le point W dans le simplexe. Si p=2, le nouveau simplexe est(BNR).
- Si $\sigma_{C_R} > \sigma_R$, le point C_R remplace le point W dans le simplexe. Si p=2, le nouveau simplexe est (BNC_R) .

[CAS 4]: $\sigma_R < \sigma_W$. Il est possible qu'en s'éloignant de W, il soit préférable de ne pas franchir le segment de bonne désirabilité [B,N], dont les désirabilités sont meilleures que celle de R: l'optimum est peut-être à l'intérieur du simplexe. On définit un nouveau point C_W appelé contraction du côté de W: $\overrightarrow{GC_W} = -k' \cdot \overrightarrow{GR}$, où k' est le coefficient de contraction. Le choix de k' est libre. La valeur la plus souvent utilisée est $k' = \frac{1}{k}$ avec k = 2, d'où $\overrightarrow{GC_W} = -1/2 \cdot \overrightarrow{GR}$. La figure 29 montre les positions de W, N, B, G, R et C_W .

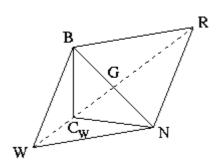


Figure I.29 : contraction du côté de $\,W\,$ d'un simplexe

- Si $\sigma_{C_W} < \sigma_W$, on abandonne l'idée de la contraction, le simplexe est inchangé et comme dans le cas du simplexe basique (cf. paragraphe 5.6.1, étape 9), le nouveau point candidat est le symétrique de N par rapport à G', milieu de [W,B].
- Si $\sigma_{C_W} > \sigma_W$, le point C_W remplace le point W dans le simplexe. Si p=2, le nouveau simplexe est (BNC_W) .

Nous allons maintenant illustrer cette méthode avec un exemple à deux dimensions.

5.7.2. Méthode du simplexe modifié illustrée par un exemple à deux dimensions

Pour la fonction test, nous choisissons $x^* = 52$ et $y^* = 36$ et nous construisons la fonction du type donné au paragraphe I.5.6. La désirabilité simulée du produit fabriqué en choisissant pour entrées les valeurs x (notation simplifiée pour e_1) et y (notation simplifiée pour e_2) est :

$$\sigma = \frac{1}{10000} \left[10000 - (x - 52)^2 - (y - 36)^2 \right]$$

Les deux entrées sont supposées varier continûment dans l'intervalle [10,100] ; avec la notation donnée au paragraphe I.2.4.5, $EE = EJ = [10,100] \times [10,100]$.

Nous choisissons un coefficient d'expansion k=2 et un coefficient de contraction $k'=\frac{1}{2}$. Nous pouvons donc donner explicitement les coordonnées des points réflexion noté R, extension noté E, contraction du côté de R noté C_R et contraction du côté de W noté C_W en fonction de celles des trois points du simplexe B, N et W:

$$\begin{vmatrix} x_R = x_B + x_N - x_W \\ y_R = y_B + y_N - y_W \end{vmatrix} x_E = \frac{3}{2} (x_B + x_N) - 2x_W$$
$$y_E = \frac{3}{2} (y_B + y_N) - 2y_W$$

$$\begin{vmatrix} x_{C_R} = \frac{3}{4}(x_B + x_N) - \frac{1}{2}x_W \\ y_{C_R} = \frac{3}{4}(y_B + y_N) - \frac{1}{2}y_W \end{vmatrix} x_{C_W} = \frac{1}{4}(x_B + x_N) + \frac{1}{2}x_W \\ y_{C_W} = \frac{3}{4}(y_B + y_N) + \frac{1}{2}y_W$$

Dans ce qui suit, nous allons rencontrer trois des quatre cas présentés au paragraphe I.5.7.1. La lecture sera facilitée par la consultation de la figure 30 qui représente non seulement les simplexes successifs en bleu mais aussi les divers points testés. Nous symbolisons l'entrée de chaque nouveau point dans le simplexe par une flèche rouge dont la base est le point R (marqué en pointillés verts) et la pointe le nouveau point entrant. À côté de la flèche, nous inscrivons le type de transformation qui y a conduit : E pour extension, R pour réflexion et C_W pour contraction du côté de W.

ÉTAPE 0 : SIMPLEXE INITIAL

Nous choisissons un simplexe initial en coin, basé au point de valeurs minimales des deux entrées, et de pas identique (mais ce n'est pas obligatoire dans le cas général) égal à 10 pour les deux entrées. Les coordonnées des trois sommets du triangle formant le simplexe initial sont donc : $P_0(10;10)$ $P_1(20;10)$ $P_2(10;20)$. Le tableau 10 donne les valeurs des désirabilités des trois premiers points.

Tableau I. 10: simplexe initial (simplexe modifié)

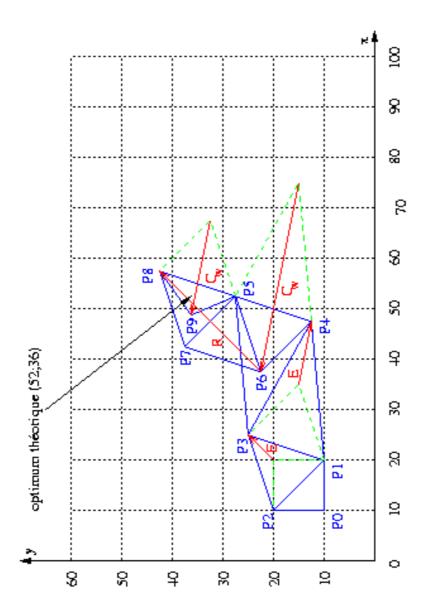


Figure I.30 : simplexes modifiés successifs et flèches d'extension, de réflexion et de contraction

ÉTAPE 1: REFLEXION PUIS EXTENSION

Le symétrique de W par rapport au milieu G de [NB] a pour coordonnées $R(20\,;20)$. Sa désirabilité calculée est 0,8720. Elle est meilleure que celle de B (P_1). On peut donc tenter de faire une extension : on définit le point E par $\overline{GE}=2\overline{GR}$. Les formules données plus haut permettent de calculer les coordonnées $E(25\,;25)$. La désirabilité de E est 0,9150. Elle est meilleure que celle de B. On choisit donc $P_3=E$ qui devient le meilleur point du nouveau simplexe $(B,N,W)=(P_3,P_1,P_2)$.

ÉTAPE 2: REFLEXION PUIS EXTENSION

Le candidat suivant est le symétrique de P_2 par rapport au milieu de $[P_1P_3]$. On calcule les coordonnées du point, R(35;15) et sa désirabilité $\sigma_R=0,9270>\sigma_B$. On peut donc tenter d'effectuer une extension : on calcule les coordonnées du point E(47,5;12,5) et sa désirabilité $\sigma_E=0,9427$. On prend donc $P_4=E=(47,5;12,5)$ et le nouveau simplexe est $(B,N,W)=(P_4,P_3,P_1)$.

ÉTAPE 3: REFLEXION, EXTENSION, ET RETOUR A LA REFLEXION

Le candidat suivant est le symétrique de P_1 par rapport au milieu de $[P_3P_4]$. On calcule les coordonnées du point R(52,5;27,5) et sa désirabilité $\sigma_R=0,9927>\sigma_B$. On peut donc tenter d'effectuer une extension. On calcule les coordonnées du point E(68,75;36,25) et sa désirabilité $\sigma_E=0,9719<\sigma_R$. On renonce donc à faire une extension et on remplace W par R. On prend donc $P_5=R=(52,5;27,5)$ et le nouveau simplexe est $(B,N,W)=(P_5,P_4,P_3)$. Remarquons qu'on est parvenu, avec P_5 , à un point d'excellente désirabilité en très peu d'étapes, grâce à l'augmentation du pas associée aux deux extensions successives.

ÉTAPE 4 : CONTRACTION DU COTE DE W

Le candidat suivant est le symétrique de P_3 par rapport au milieu de $[P_4P_5]$. On calcule les coordonnées du point R(75;15) et sa désirabilité $\sigma_R=0,9030<\sigma_W$. On abandonne donc cette fausse piste et on tente d'effectuer une contraction du côté de W. On calcule les coordonnées du point $C_W(37,5;22,5)$ et sa désirabilité $\sigma_{C_W}=0,9607>\sigma_N$. On remplace donc W par ce point C_W . On prend donc $P_6=C_W=(37,5;22,5)$ et le nouveau simplexe est $(B,N,W)=(P_5,P_6,P_4)$.

ÉTAPE 5: REFLEXION SANS EXTENSION

Le candidat suivant est le symétrique de P_4 par rapport au milieu de $[P_5P_6]$. On calcule les coordonnées du point $R(42,5\,;37,5)$ et sa désirabilité $\sigma_R=0,9907$. On est donc dans le cas $\sigma_N<\sigma_R<\sigma_W$. On ne cherche donc pas à faire une extension et on prend $P_7=R=(42,5\,;37,5)$. Le nouveau simplexe est $(B,N,W)=(P_5,P_7,P_6)$.

ÉTAPE 6: REFLEXION SANS EXTENSION

Le candidat suivant est le symétrique de P_6 par rapport au milieu de $[P_5P_7]$. On calcule les coordonnées du point R(57,5;42,5) et sa désirabilité $\sigma_R=0,9927$. Cette valeur est identique à celle de la désirabilité de B (ce n'est qu'un hasard). On considère néanmoins qu'on est dans le cas $\sigma_N<\sigma_R\leq\sigma_W$. On ne cherche donc pas à faire une extension et on prend $P_8=R=(57,5;42,5)$. Le nouveau simplexe est $(B,N,W)=(P_5,P_8,P_7)$. On remarque que le simplexe tourne autour de P_5 car ce point figure dans le quatrième simplexe consécutif. Mais ce qui serait une clause d'arrêt de l'algorithme du simplexe basique n'en est pas une ici : les contractions vont en effet permettre de se rapprocher de l'optimum aussi finement que possible.

ÉTAPE 7 : CONTRACTION DU COTE DE W

Le candidat suivant est le symétrique de P_7 par rapport au milieu de $[P_8P_5]$. On calcule les coordonnées du point R(67,5;32,5) et sa désirabilité $\sigma_R=0,9747<\sigma_W$. On abandonne donc cette fausse piste et on tente d'effectuer une contraction du côté de W. On calcule les coordonnées du point $C_W(48,75;36,25)$ et sa désirabilité $\sigma_{C_W}=0,9989>\sigma_B$. On remplace donc W par ce point C_W . On prend donc $P_6=C_W=(37,5;22,5)$ et le nouveau simplexe est $(B,N,W)=(P_5,P_6,P_4)$.

On peut considérer à ce stade que l'objectif est atteint, à un pour mille près, et il est inutile de continuer de réduire la taille du simplexe. On peut donc stopper l'algorithme. Cette possibilité n'est pas spécifique à l'algorithme modifié, mais elle est beaucoup plus souvent utilisée dans ce cas que dans le simplexe basique.

L'algorithme du simplexe permet à l'usager de **stopper** librement, à tout stade, la recherche de l'optimum lorsque la désirabilité obtenue pour le meilleur produit obtenu (le point B du simplexe) est jugée suffisante. Lorsque l'optimum d'une fonction de réponse se trouve sensiblement au centre d'un simplexe, il est fréquent que l'algorithme modifié conduise à une longue succession de réductions du simplexe. Il est alors important de stopper la procédure dès que l'objectif est atteint avec une précision jugée suffisante. On peut aussi énoncer comme condition d'arrêt de l'algorithme la faible taille du simplexe obtenu [27].

Le tableau 11 récapitule les différents points en indiquant à chaque fois le type de transformation qui a permis de le construire (E pour extension, R pour réflexion et C_W pour contraction du côté de W).

	$\boldsymbol{\mathcal{X}}$	У	σ	type de transformation
P_0	10	10	0,7560	
P_1	20	10	0,8300	
P_2	10	20	0,7980	
	20	20	0,8720	R
P_3	25	25	0,9150	E
	35	15	0,9270	R
P_4	47,5	12,5	0,9427	E
P_5	52,5	27,5	0,9927	R
	68,75	36, 25	0,9719	E
	75	15	0,9030	R
P_6	37,5	22,5	0,9607	$C_{\scriptscriptstyle W}$
P_7	42,5	37,5	0,9907	R
P_8	57,5	42,5	0,9927	R
	67,5	32,5	0,9747	R
P_9	48,75	36, 25	0,9989	C_{W}

Tableau I.11 : tableau de valeurs récapitulatif (simplexe modifié)

Les coordonnées du meilleur point trouvé (49;36) sont très proches de celles de l'optimum théorique (52;36).

I.5.7.3. Algorithme de la méthode du simplexe modifié

La figure 31 donne l'algorithme complet du simplexe basique sous la forme d'un organigramme. Nous utilisons les règles conventionnelles de représentation des organigrammes algorithmiques qui sont rassemblées dans l'annexe A. Comme nous l'avions remarqué lors de la présentation de l'algorithme du simplexe basique au paragraphe 5.6.3, l'organigramme proposé utilise un artifice pour limiter le nombre de tests. Ainsi, on peut vérifier que les cas 3 et 4 où $\sigma_R < \sigma_N$ (cf. paragraphe 5.7.1), les comparaisons de σ_{C_R} avec σ_R et de σ_{C_W} avec σ_W semblent ne pas avoir été faites. Mais grâce à la procédure de réaffectation (N devient W, identifier N et B parmi les autres), ces tests sont bien effectués à la nouvelle itération. Cet artifice algorithmique rend la lecture comparée de la procédure et de l'organigramme plus difficile ; mais nous nous conformons au choix du logiciel multisimplexe, qui correspond à une meilleure efficacité informatique.

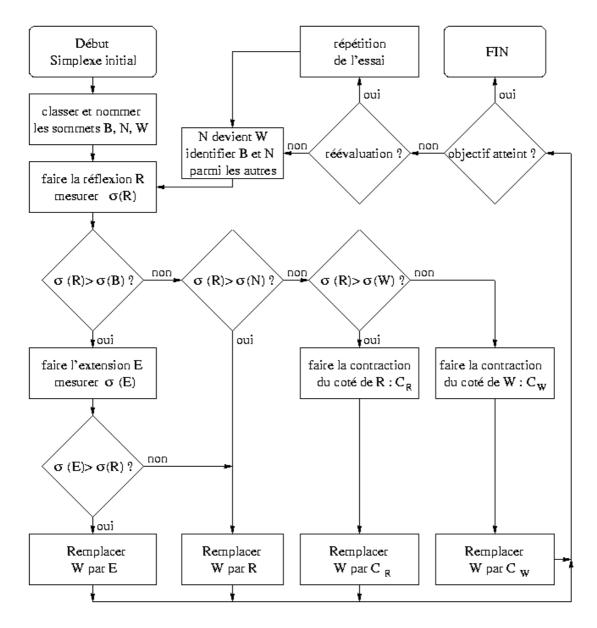


Figure I.29 : algorithme du simplexe modifié

I.6. Conclusion

Nous avons présenté dans ce premier chapitre les principales caractéristiques des deux méthodes du simplexe : le basique et le modifié. Nous n'avons pas cherché à décrire de façon exhaustive les diverses améliorations qui ont été proposées pour ces méthodes, mais nous avons essayé de mettre en évidence les conditions de travail qui président à leur utilisation. Les méthodes du simplexe et leurs dérivées sont d'une part de plus en plus utilisées et développées dans les laboratoires universitaires, (en particulier le Laboratoire de Méthodologie de la Recherche Expérimentale de Marseille [27,28] et d'autre part font maintenant partie des techniques classiques de l'ingénieur ; elles sont exposées en particulier dans les recueils Techniques de l'Ingénieur [29,30].

Il est important de préciser que les méthodes d'optimisation du simplexe ne peuvent intervenir que lorsque le problème est clairement défini, que les agents ont discerné les paramètres influents, et qu'ils en ont la maîtrise. Ces considérations vont être précisées au chapitre 2, où nous allons mener une analyse approfondie des termes de la métrologie. Dans ce même chapitre, nous montrerons que ces termes peuvent être transposés du domaine de la mesure à celui de la fabrication d'un produit. Les modes d'analyse rigoureuse de la métrologie seront ainsi transposés au processus de fabrication, ce qui nous permettra d'établir une fiche méthodologique originale d'aide à la fiabilisation du protocole. Nous montrerons que cette fiabilisation s'inscrit naturellement dans la continuité de la démarche d'optimisation que nous venons de présenter.

Bibliographie du chapitre I

- [1] BACKT T., HAMMEL U., SCHWEFEL H.-P., Evolutionary Computation: comments on the history and current state, IEEE Transactions on Evolutionary computations, 1 (1) 3-17, 1997.
- [2] HOLLAND J. H., *Adapation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan press, MIT press, ISBN 978-0-262-58111-0, 1992.
- [3] BACK T., Evolutionary Algorithms in theory and practice, Oxford University Press, New York 1996.
- [4] WALTERS F. S., PARKER L. R., MORGAN S. L., DEMING S. N., Sequential Simplex Optimization. A technique for improving quality and productivity in research, development and manufacturing. CRC Press, ISBN 8493-5894-9, 1991.
- [5] SPENDLEY W., HEXT G. R., HIMSWORTH F.R., Sequential Application of Simplex Designs in Optimisation and Evolutionary Operation. Technometrics, volume 4 (4), 441-461, 1962.
- [6] SCHOUTE P. H., *Mehrdimensionale Geometrie*, volume 1, 10, 1902, réédité par Cornell University Library, ISBN 978-1429703628, 1969.
- [7] NELDER J. A., MEAD R., A simplex method for function minimization. Computer Journal, volume 7, 308-313, 1965.
- [8] ROUTH M. W., SWARTZ P. A., DENTON M. B., *Performance of the Super Modified Simplex*. Analytical Chemistry, volume 49 (9), 1422-1428, 1977.
- [9] VAN DER WIEL P. F. A., *Improvement of the super-modified simplex optimization procedure*. Analytica Chimica Acta, volume 122, 421-433, 1980.
- [10] RYAN P. B., BARR R. L., TODD H. D., *Simplex techniques for non linear optimization*. Analytical Chemistry, volume 52, 1460-1467, 1980.
- [11] LUERSEN M. A., *GBNM*: un algorithme d'optimisation par la recherche directe. Application à la conception de monopalmes de nage. Thèse de doctorat de mécanique soutenue à l'Institut National de Sciences Appliquées de Rouen le 1-12-2004, 43-50 et annexe C.
- [12] WOLPERT D. H., MACREADY W. G., *The No Free Lunch Theorems for Optimization*. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 1(1), 67-82, 1997.
- [13] ÖBERG T. G., *Importance of the first design matrix in experimental simplex optimization*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, volume 44, 147-151, 1998.
- [14] LUERSEN M. A., LERICHE R., GUYON F., *A constrained, globalized and bounded Nelder-Mead method for engineering optimization.* Structural and Multidisciplinary Optimization, Heildelberg, volume 27, 43-54, 2004.
- [15] GENETAY M., Optimisation d'une machine de coulage céramique sous pression pour receveurs de douche, actes du colloque Expérimentique, Orléans, 15 juin 2006.
- [16] KARAM S., Application de la méthodologie des plans d'expériences et de l'analyse de données à l'optimisation des processus de dépôt. Thèse de doctorat 39-2004, Université de Limoges, Électronique des hautes fréquences et optoélectronique, 2004.
- [17] Normes ISO: recensées par l'International Organization for Standardization, créée en 1967, disponibles sur Internet à l'adresse www.iso.org/iso/fr.
- [18] RAMIS E., DESCHAMPS C., ODOUX J., Cours de mathématiques spéciales, tome 4, éditions Masson, 1997.
- [19] Système international, issu de la 11ième Conférence Générale des Poids et Mesures, 1960 (ISO 1000), disponible en ligne à l'adresse
 - www.industrie.gouv.fr/metro/aquoisert/si3.html
- [20] HAURE T., Couches multifonctionnelles par procédé multitechnique, thèse de doctorat en chimie, chimie physique, spécialité procédés et céramiques, Université de Limoges, soutenue le 14 novembre 2003.
- [21] Norme D25 1075 Paint loatings cross hatch test, PSA Peugeot Citroën.
- [22] MATHIEU D., PUECH-COSTES E., MAURETTE M. T., PHAN-TAN-LUU R., *The simplex method applied to the detection and following of a discontinuity*, Chemometrics Intelligent Laboratory Systems, 20 (1), 25-34, 1993.
- [23] ABRAMOWITZ M., STEGEN I. A., Handbook of mathematical functions, National Bureau of

- standards, Applied Mathematical, series 5, 5, 1964.
- [24] *Multisimplex*, software, developed by Grabitech Solutions AB, Trafikgatan 52, S-856 44 Sundsvall, Sweden.
- [25] DARVAS F., Application of the sequential Simplex method in designing drug analogs, J. Med. Chem., 17 (8), 799-804, 1974.
- [26] GILLIOM R. D., PURCELL W. P., BOSIN T. R., Sequential Simplex optimization applied to drug design in the indole, 1-methylindone and benzo[b]thiophene series, Eur. J. Med. Chem., 12 (2), 187-192, 1977.
- [27] MATHIEU D., PHAN-TAN-LUU R., SERGENT M., *Méthodologie de la recherche expérimentale, Méthodes d'optimisation directe*, LPRAI SARL, Marseille, 2000.
- [28] FARGIN E., SERGENT M., MATHIEU D., PHAN-TAN-LUU R., Approche Méthodologique de la Recherche Expérimentale, Bio-Sciences, 4, 77-82, 1985.
- [29] PORTE C., Méthodes directes d'optimisation Méthodes à une variable et Simplex, Techniques de l'ingénieur, P228, 1-18, 2002.
- [30] PORTE C., Méthodes directes d'optimisation Méthodes dérivées de la méthode Simplex, Techniques de l'ingénieur, P229, 1-14, 2002.

Chapitre II. Reproductibilité et fiabilité du protocole

Dans le premier chapitre, nous avons présenté une méthode itérative d'optimisation d'un procédé expérimental : le simplexe. Nous avons soulevé le problème de la réduction des facteurs à des paramètres mesurables et celui de l'exhaustivité de ces paramètres. À l'issue de l'optimisation, le laboratoire de recherche doit communiquer aux prescripteurs ou simplement publier le résultat de son optimisation ; la validation de ce résultat ne sera acquise que si un résultat identique peut être obtenu indépendamment par application du même protocole. Dans ce deuxième chapitre, nous allons d'abord proposer une définition du protocole et étudier plus particulièrement comment celuici peut être testé et amélioré le cas échéant. De nombreuses notions métrologiques sont sousjacentes. Nous voulons donner ici une synthèse complète et précise de la terminologie, et nous tenterons de généraliser les notions correspondantes, du cadre strict de la mesure à celui de la fabrication. Nous complèterons cette synthèse par la construction d'une fiche méthodologique guidant dans sa démarche le laboratoire confronté à un problème de fiabilité du protocole. Nous rejoindrons ainsi la notion classique de contrôle de qualité.

II.1. Les tests de fiabilité du protocole de fabrication

II.1.1. Description du développement d'un projet

II.1.1.1. Contexte expérimental : la fabrication d'un produit

Comme au chapitre 1, nous nous plaçons ici dans la logique suivante : un laboratoire cherche à fabriquer un produit répondant le mieux possible à un cahier des charges défini par les prescripteurs. Le terme "produit" est à prendre dans son sens le plus vaste : il doit être décrit par un ensemble de caractéristiques clairement définies par le collège.

Ainsi, un produit peut être par exemple :

- un objet comme un analyseur de spectre, une automobile ;
- le résultat d'une transformation ou du traitement d'un objet : la purification chimique d'une substance, le dépôt adhérent d'une couche métallique sur un support ;
- la preuve expérimentale d'un phénomène physique : obtenir dans une enceinte une fusion thermonucléaire contrôlée.

II.1.1.2. Les trois étapes du projet

Entre la définition du projet et la production du produit optimal, nous pouvons distinguer trois étapes.

- [ÉTAPE 1 DU PROJET] : l'**étude préalable** est l'ensemble des manipulations permettant aux opérateurs de se familiariser avec les différentes techniques de fabrication, et de définir les paramètres pertinents ou paramètres principaux.
- [ÉTAPE 2 DU PROJET] : l'**optimisation** est l'étape d'ajustement des paramètres permettant d'avoir un produit dont les qualités sont optimales. La méthode itérative du simplexe peut être utilisée. Le premier produit fabriqué, ayant des caractéristiques jugées optimales par le collège, est appelé le **prototype**. Celui-ci a été fabriqué en suivant un **protocole**, c'est-à-dire une démarche expérimentale complète avec des valeurs numériques fixées des paramètres d'entrée.
- [ÉTAPE 3 DU PROJET] : la **présérie** correspond à un ensemble de produits qu'on fabrique en suivant le protocole ayant permis la fabrication du prototype.

Des allers-retours sont possibles entre ces trois étapes :

- lors de l'optimisation, il peut arriver que l'on explore des domaines expérimentaux dans lesquels un nouveau paramètre se révèle influent : on reviendra alors de l'étape 2 à l'étape 1;
- lors de la présérie, et en particulier lors de la phase d'industrialisation, on peut observer une dégradation nette des qualités du produit, malgré le respect du protocole : un paramètre non pris en compte dans l'étude préalable a pu changer et se révèle influent : on reviendra alors de l'étape 3 à l'étape 1 pour identifier les paramètres incriminés, ou de l'étape 2 si on les identifie immédiatement.

II.1.1.3. Le cahier de laboratoire, lien entre les trois étapes

Le plus grand soin est apporté par les agents pour définir les circonstances expérimentales qui ont présidé à la fabrication du produit. Le **cahier de laboratoire** est ainsi une composante fondamentale de la démarche expérimentale : on y archive, dans la mesure du possible, à la fois tout ce qui fait l'objet d'une démarche contrôlée, et toutes les autres données qu'il est possible de collecter et dont la prise en compte pourrait aider ultérieurement à définir un nouveau protocole :

- l'ensemble des données objectives au début de la manipulation (fournisseurs des produits, conditions climatiques, agents présents);
- les caractéristiques expérimentales dont la mesure est possible ;
- les diverses étapes de la fabrication ;
- mais aussi toutes les « anecdotes » et tous les événements particuliers qui ont accompagné cette fabrication.

Les trois étapes étant décrites, nous allons donner leur intérêt respectif et articuler leur déroulement.

II.1.2. Apports respectifs des étapes du projet

II.1.2.1. De la première à la deuxième étape : constitution d'un processus de fabrication

Des trois étapes décrites précédemment, c'est la première, l'étude préalable, qui est la plus difficile à définir. Elle commence avec l'apprentissage par les agents des techniques de fabrication. On collecte ainsi un certain nombre de données (archivées dans le cahier de laboratoire) permettant de définir certains paramètres influents et leur intervalle de variation. Le passage de ces connaissances fragmentaires à la définition d'un protocole est, lui, particulièrement difficile à décrire dans le cas général. Il s'articule selon trois axes.

- [AXE 1]: l'inventaire des paramètres possibles prendra en compte ceux qui sont apparus pendant la phase d'apprentissage; on leur adjoindra ceux que les théoriciens ont pu mettre en évidence, et ceux que l'expérience passée dans ce domaine expérimental a permis de relever. Il est donc important que le collège regroupe ces deux types d'interlocuteurs; il est aussi important que les prescripteurs fassent état de leurs connaissances dans le domaine : ceci n'est pas toujours facile, en particulier pour des raisons de concurrence entre laboratoires et de clauses de confidentialité.
- [AXE 2]: la mise en évidence des paramètres influents est essentielle : d'une part elle permet de définir les fonctionnalités (réglage et asservissement) de la machine de fabrication, d'autre part l'optimisation est beaucoup plus aisée avec un nombre limité de paramètres réglables. Cette mise en évidence est grandement facilitée par les techniques de plans d'expériences, en particulier les plans de criblages [1,2].
- [AXE 3]: la procédure complète de fabrication peut comporter un nombre d'étapes très variable. Sa construction s'appuie sur de très nombreuses données, qui diffèrent d'un champ scientifique à l'autre, parfois très empirique en chimie des procédés, très organisée et s'appuyant sur des travaux théoriques en chimie organique, par exemple. C'est pourquoi nous ne cherchons pas à donner de description générale de cette construction. Elle est la prérogative de l'équipe de chercheurs et ne peut se réduire à l'application d'une méthode planifiée.

Après la phase d'étude préalable, la démarche expérimentale devient figée : dans la phase d'optimisation, on ne fait théoriquement que reproduire les mêmes processus de fabrication, en changeant les valeurs des paramètres, puis caractériser le produit obtenu. Le passage de la première à la seconde est donc marqué par la définition d'un processus complet de fabrication, c'est-à-dire une description complète de la fabrication d'un produit :

- certains paramètres numériques, imposés par les prescripteurs, par la technologie ou par la nécessité expérimentale, sont fixés et donnés numériquement ;
- les autres paramètres ne sont pas définis par le processus (ils le seront par le protocole) mais seulement désignés par des lettres représentant des variables ; seuls leur intervalle de variation (min, max) et leur sensibilité de réglage sont donnés, la machine de fabrication doit permettre aux opérateurs le réglage de ces paramètres à tous les niveaux correspondants.

Exemple dans le domaine des dépôts

À l'issue de l'étude préalable, le processus de fabrication d'un dépôt d'hexaferrite de baryum peut être décrit ainsi. Le substrat est une plaquette de silicium de $1\times 2\ cm^2$; on utilisera un dispositif d'évaporation au tri-canons à électrons; les matières premières sont des oxydes de fer et de baryum disposés dans deux creusets. Le produit final sera constitué par un dépôt d'adhérence élevée, de $30\ \mu$ m d'épaisseur. Les paramètres à déterminer sont la pression partielle en dioxygène dans l'enceinte, la vitesse de dépôt, la température du substrat et la vitesse de rotation du porte substrat. On cherche à ajuster les niveaux de réglage de ces entrées afin d'optimiser les sorties qui sont par exemple les propriétés magnétiques et la composition du dépôt.

II.1.2.2. De la deuxième à la troisième étape : du processus au protocole optimal

Dans le cas idéal, l'application d'une méthode d'optimisation (la méthode itérative du simplexe par exemple) conduit les agents à une succession de fabrications selon un processus unique et répété à chaque fois avec des jeux de paramètres différents. La qualité mesurée du produit croît régulièrement. Lorsque le produit est jugé optimal, le protocole qui a permis la fabrication de ce produit peut être qualifié de protocole optimal, et le produit correspondant est le prototype.

II.1.2.3. La présérie : mise à l'épreuve de la fiabilité du protocole

Lorsque le protocole optimal a été défini, il reste une étape à effectuer avant de pouvoir proposer aux prescripteurs une version fiable de ce protocole. Définissons plus précisément la fiabilité d'un protocole.

<u>Définition</u>: un **protocole fiable** fourni par le laboratoire aux prescripteurs doit leur donner la garantie que son application, dans le domaine industriel, sur leur propre machine et avec leurs propres opérateurs conduira aux mêmes résultats optimaux pour tous les produits fabriqués.

Ainsi définie, la fiabilité est un terme général qui désigne la qualité d'un protocole qui, appliqué scrupuleusement par n'importe quel opérateur, sur n'importe quelle machine, et dans n'importe quel contexte de fabrication, doit permettre d'obtenir un produit optimal. C'est évidemment une situation idéale. La nécessité de fiabilité des protocoles est particulièrement importante en biochimie, lorsqu'un protocole d'analyse d'eau par exemple est mis au point par un ministère et que les agents doivent localement procéder à l'analyse[3].

On peut comprendre, à ce stade des définitions exposées dans ce chapitre, que la fiabilité regroupe de nombreux caractères distincts. En ce sens, c'est une notion <<composite>>, qui en regroupe plusieurs. Nous allons donner, dans la section suivante, les cinq axes du test de la fiabilité, et dégager ainsi ses composantes fondamentales. Nous mettrons ensuite en regard chacune de ces composantes avec les notions métrologiques classiques.

II.1.3. Analyse physique de la fiabilité d'un protocole

II.1.3.1. Les facteurs

Nous avons déjà décrit la notion de facteur au chapitre I (cf. section I.2.3). Parmi ceux-ci, la technique du plan de criblage [2] permet de mettre en évidence les facteurs dont l'influence est suffisamment importante pour acquérir le statut de facteurs principaux. Les autres facteurs sont appelés facteurs perturbateurs [4,5].

II.1.3.2. Les cinq tests de la présérie

Le test de la fiabilité du protocole consiste à changer, lors des fabrications de présérie, les facteurs non principaux, et à observer si les caractéristiques optimales du produit sont changées ou pas. Les valeurs des paramètres correspondant aux facteurs principaux sont fixées par le protocole. La fabrication du premier produit optimal, appelé prototype, se fait selon différentes conditions opératoires :

- [CONDITION OPERATOIRE 1] à une date donnée,
- [CONDITION OPERATOIRE 2] avec des facteurs numériques non principaux donnés,
- [CONDITION OPERATOIRE 3] sur une machine donnée,
- [CONDITION OPERATOIRE 4] avec des opérateurs donnés,
- [CONDITION OPERATOIRE 5] dans un contexte de production donné, en particulier à une échelle de fabrication donnée.

Cette liste de cinq conditions opératoires va former un fil conducteur de tout ce chapitre. Notons que ce sont justement ces cinq facteurs qu'on inscrit traditionnellement sur le cahier de laboratoire en début de fabrication.

Exemple dans le domaine des dépôts

Le cahier de laboratoire attaché à une manipulation de dépôt peut comporter les conditions opératoires (C.O.) suivantes :

```
[C.O. 1] date: 17 janvier 2007;
```

[C.O. 2] données climatiques : 1013 hPa, 19°C;

[C.O. 3] machine: dispositif d'évaporation sous vide aux tri-canons à électrons;

[C.O. 4] opérateurs présents : A, F, O, S;

[C.O. 5] matériaux : indium sur substrat silicium 1×2 cm².

La présérie permet d'étudier comment la fluctuation de chacun de ces cinq facteurs est susceptible de dégrader les caractéristiques du produit. On procède donc aux cinq tests suivants. Nous extrairons pour chacun le ou les facteurs susceptibles de varier.

- [TEST 1] : la répétition de ce même protocole pour être sûr que l'optimalité du produit n'a pas été obtenue par un heureux concours de circonstances. On tente ainsi de répéter, toutes choses égales par ailleurs, la fabrication du même produit optimal. Le facteur susceptible de varier est donc la date de la fabrication t.
- [Test 2] : la fabrication éventuelle de protocoles affaiblis ou légèrement modifiés si le réglage d'un des paramètres apparaît particulièrement contraignant. On teste ainsi l'affaiblissement des contraintes sur les facteurs non évoqués par le protocole. Les facteurs susceptibles de varier sont donc les valeurs des facteurs numériques non principaux.
- [Test 3]: le test du protocole sur une autre machine avec les mêmes opérateurs, afin de vérifier que le produit n'est pas sensible à un paramètre caché (ou non identifié) de la machine qui a servi à l'optimisation. Ce changement de machine peut être réalisé dans le cadre de la démarche du transfert de technologie. Les agents se déplacent dans le laboratoire ou l'usine des prescripteurs ; ils cherchent à faire une démonstration de la fabrication (réalisée jusqu'alors sur la machine de leur propre laboratoire) sur la machine des

prescripteurs. Le facteur susceptible de varier est donc la machine.

- [TEST 4]: le test du protocole sur la même machine avec des opérateurs différents, afin de vérifier que sa description est claire et assez explicite pour ne nécessiter aucun savoir-faire particulier. Au cours du même processus de transfert de technologie, les prescripteurs peuvent, à leur tour, venir s'initier au protocole de fabrication sur la machine des agents du laboratoire de recherche. Le facteur susceptible de varier est donc l'opérateur.
- [TEST 5]: le test du protocole dans les conditions industrielles, afin de valider le transfert de technologie. On finalise ainsi le transfert de technologie en développant l'application du protocole dans les conditions industrielles. Le facteur susceptible de varier est donc le contexte de fabrication et en particulier l'échelle de fabrication.

Examinons maintenant la ou les causes physiques de la variabilité du produit lors de ces différents tests.

II.1.3.3. Causalité physique : relation entre la variation des facteurs non principaux et celle des caractéristiques du produit

Par définition, seuls les facteurs principaux sont susceptibles de faire varier les caractéristiques optimales du produit. Si le test de présérie échoue et qu'on observe une dégradation de ces caractéristiques, nous nous trouvons en face d'une apparente contradiction. Restons dans la logique des cinq catégories de tests de la présérie, correspondant aux variations des cinq classes de facteurs non principaux. Cherchons à chaque fois à expliquer physiquement comment ces variations peuvent provoquer une dégradation des caractéristiques du produit. Examinons les cinq cas correspondant aux cinq tests.

- [CAS 1]: test de répétition. Imaginons qu'après avoir fabriqué un premier produit optimal, le prototype, une nouvelle tentative de confirmation, effectuée une heure plus tard, par les mêmes opérateurs, conduise à un produit dont les caractéristiques sont sensiblement différentes, donc non optimales. Si l'étude préalable a été bien faite, et si la procédure d'optimisation a nécessité un nombre moyen ou grand de fabrications, il est peu vraisemblable que l'on ait oublié un facteur numérique principal. Rien n'ayant apparemment changé dans la fabrication, seules des petites fluctuations des facteurs numériques, les principaux et les non principaux, ont pu avoir lieu dans le temps. Deux explications physiques sont possibles.
 - Fluctuation mono paramètre : l'un des paramètres a dérivé en restant dans l'intervalle de précision garanti par les appareils de mesure et d'asservissement ; le résultat est très sensible à ce paramètre et varie.
 - Fluctuation de paramètres croisés : un certain nombre de paramètres a dérivé en restant dans les intervalles de précision garantis par les appareils de mesure et d'asservissement ; un couplage a pour effet une conjugaison des variations de ces paramètres croisés et le résultat varie.
- [CAS 2] : affaiblissement du protocole. Supposons que l'assouplissement de la contrainte sur un paramètre identifié comme non principal conduise à un produit dont les caractéristiques sont sensiblement différentes, donc non optimales. On peut imaginer dans ce cas que la variation franche sur le paramètre non principal se conjugue avec la faible fluctuation d'un paramètre principal, et que ce couplage provoque une variation sensible du résultat.
- [CAS 3] : test du changement de machine. Supposons que le respect du protocole par les mêmes opérateurs, travaillant sur une autre machine, conduise à un produit dont les caractéristiques sont sensiblement différentes, donc non optimales. Deux explications physiques sont possibles.
 - Le changement de machine peut induire des fluctuations des paramètres et on se ramène au cas 1.
 - Il est aussi possible que le changement de machine s'accompagne de la variation nette d'un paramètre qui n'avait pas été identifié comme facteur dans l'étude préalable. C'est le cas lorsque la nouvelle machine, de conception différente, ne propose pas de régulation d'un paramètre qui était stable sur la première machine.

On a alors intérêt à essayer d'équiper la nouvelle machine d'un dispositif de régulation de ce nouveau facteur, pour éviter de perdre tout le bénéfice de l'étude du laboratoire. Sinon, on doit recommencer la procédure complète d'optimisation.

- [CAS 4]: test du changement d'opérateurs. Supposons que le respect du protocole par d'autres opérateurs, travaillant sur la même machine, conduise à un produit dont les caractéristiques sont sensiblement différentes, donc non optimales. Si on respecte la chronologie de la présérie, on exclut l'explication basée sur les fluctuations des paramètres (elle aurait été détectée lors du test 1). On peut alors proposer l'explication suivante : le protocole doit comporter une composante technique de savoir-faire : la manipulation d'une manette, la précision d'un réglage, d'une visée, etc..... On peut, dans ce cas, envisager trois solutions :
 - on prévoit dans le protocole une formation préalable de l'opérateur à ce geste technique ;
 - on décrit de façon la plus objective possible l'étape nécessitant un savoir-faire ;
 - on équipe la machine au minimum d'un appareil de contrôle de cette étape, au mieux d'un système automatique la réalisant à la place de l'opérateur.
- [CAS 5]: test du transfert de technologie. Supposons enfin que, le protocole ayant été consolidé par les tests de fluctuation des paramètres, de changement de machine et d'opérateurs, son application à une échelle industrielle conduise à des produits dont les caractéristiques sont sensiblement différentes, donc non optimales. Deux explications physiques sont possibles.
 - Le changement de taille de la production peut s'accompagner de fluctuations spatiales (et non plus temporelles comme dans le cas 1) des paramètres. La notion de stabilité est alors remplacée par celle d'hétérogénéité. Dans le cas de la réalisation de dépôts, il est par exemple possible que la température du substrat, bien homogène sur un support de petite taille, ne le soit plus sur une pièce beaucoup plus grande dans la production industrielle.
 - Il est possible aussi que l'effet d'échelle ait été oublié. Par exemple, une maquette à échelle réduite d'écoulement hydraulique peut donner des résultats très différents de ceux observés sur une installation industrielle à grande échelle. Ainsi, l'apparition de la turbulence en mécanique des fluides [6] est caractérisée par le nombre de Reynolds $Re = \frac{\mu VL}{\eta}$, où μ désigne la masse volumique du fluide, ν sa

viscosité, V sa vitesse moyenne et L une dimension caractéristique de l'écoulement; lors du passage à une installation à grande échelle, la vitesse augmente en même temps que la dimension caractéristique, donc le nombre de Reynolds augmente fortement et un écoulement laminaire dans le cas de la maquette devient turbulent dans l'installation en taille réelle.

Cette liste exhaustive des causes d'échec des tests de fiabilité est longue et d'une grande diversité expérimentale. Elle nécessite une structuration. Or, la discipline appelée métrologie propose justement d'une part une terminologie et une classification rigoureuse des tests de reproductibilité des mesures et d'autre part une analyse des causes d'échecs éventuels de ces tests. Nous allons utiliser et adapter cet apport de la métrologie.

II.2. Composantes métrologiques de la fiabilité

Dans la première section (1), nous avons mis en évidence les différents aspects de la notion de fiabilité. Lors de la réalisation de la présérie, lorsque la fiabilité est mise en défaut, nous avons donné plusieurs interprétations possibles permettant d'expliquer cet échec. Dans cette section, nous allons passer en revue les différentes notions métrologiques associées. Dans un premier temps, nous donnerons les définitions exactes dans leur formulation normalisée. Nous les discuterons et nous les reformulerons en passant du domaine strict de la mesure à celui plus général de la caractérisation d'un produit obtenu par application d'un protocole. Ensuite, nous comparerons ces définitions aux

divers aspects de la fiabilité que nous avons inventoriés dans la première section. Enfin, nous uniformiserons ces diverses notions dans un formalisme mathématique rigoureux.

II.2.1. De la mesure des grandeurs à l'analyse de la fiabilité

La métrologie est définie comme la science de la mesure [7]. Tout appareil de mesure peut être décrit par la **chaîne métrologique**. Celle-ci prend comme entrées principales un ou plusieurs objets appelés mesurandes, comme entrées secondaires des paramètres de mesure ; l'appareil de mesure est le siège d'un phénomène physique et sa sortie est une valeur numérique représentative d'une grandeur physique du mesurande. Donnons deux illustrations.

- Considérons le mesurande qu'est un circuit électrique, et l'appareil de mesure un ampèremètre à aiguille. Les entrées secondaires sont la résistance du cadre mobile, le champ magnétique permanent, le couple de rappel du fil de torsion, et la température ; le phénomène physique est l'apparition d'un champ magnétique (dû à la traversée du cadre par le courant), puis une interaction entre ce champ et le champ permanent (créé par un aimant permanent), et enfin une rotation du cadre qui trouve une position d'équilibre (égalité du couple magnétique et du couple de torsion) ; la sortie est la déviation angulaire de l'aiguille solidaire du cadre mobile, et on lit l'intensité sur un cadran gradué précédemment étalonné.
- Si le mesurande est une solution d'acide acétique et l'appareil de mesure un banc de dosage, les entrées sont la solution titrante, l'indicateur coloré et la température qui influe sur les volumes et les constantes d'acidité ; le phénomène physique est une réaction acidobasique ; on mesure le volume de solution titrante versée à l'équivalence dont on déduit la sortie, c'est-à-dire la concentration en acide acétique de la solution étudiée.

Nous allons maintenant procéder à une généralisation de cette chaîne : elle va nous permettre d'étendre les concepts de la métrologie au domaine de la fabrication d'un produit.

La machine de fabrication, en comparaison avec l'appareil de mesure, prend comme entrée principale une base expérimentale (une solution, un substrat vierge de dépôt, ...), puis comme entrées secondaires des niveaux de réglage et éventuellement des ingrédients externes (des agents chimiques de traitement, une matière première de la substance à déposer) ; elle est le siège d'un processus physique et renvoie en sortie un produit dont on mesure une ou plusieurs caractéristiques. La figure 1 illustre le parallèle entre la chaîne métrologique et la chaîne de fabrication par deux schémas présentés selon la convention de présentation des organigrammes algorithmiques (voir annexe A).

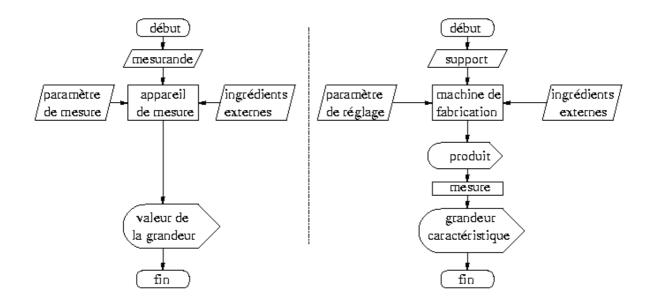


Figure II.1 : parallèle entre la chaîne métrologique et la chaîne de fabrication

Cette équivalence des processus de mesure d'une part, de fabrication d'autre part permet de justifier que le vocabulaire de la métrologie est adaptable au domaine de la fabrication.

Nous verrons au chapitre 3 que la caractéristique globale est souvent la synthèse de plusieurs caractéristiques individuelles. Dans ce cas, le produit s'identifie à la mesure d'un vecteur dont chaque coordonnée est la mesure d'une grandeur particulière.

Remarquons enfin que la mesure de la (ou des) caractéristique(s) du produit entre elle-même dans le champ de la métrologie. Nous nous penchons dans cette thèse sur le problème de l'optimisation de la fabrication. Nous évitons donc de soulever les problèmes que pose cette mesure, appelée aussi qualification du produit, et supposerons qu'elle a toutes les caractéristiques d'une mesure exacte. Cette attitude n'est évidemment admissible qu'après avoir quantifié la précision de la mesure. Dans l'ouvrage de synthèse Les plans d'expériences [8], les auteurs soulignent ainsi que : « Il est inenvisageable de prétendre porter un jugement sur l'effet d'un facteur dont l'amplitude serait de l'ordre de grandeur de l'incertitude de mesure ».

Nous allons maintenant préciser les définitions de six notions métrologiques classiques que nous mettrons ensuite en regard avec la notion de fiabilité des protocoles.

II.2.2. Six notions métrologiques distinctes : répétabilité, reproductibilité, sensibilité, solidité, stabilité, fidélité

II.2.2.1. Répétabilité et reproductibilité [9]

Les deux premières notions de métrologie que nous relevons ont la caractéristique commune de se référer à un processus expérimental global. Elles sont désignées par deux termes très voisins. Nous donnons leur définition telles qu'elles apparaissent dans la norme [ISO 5725].

- **[REPETABILITE]** : étroitesse de l'accord entre les résultats des mesurages (action de déterminer la mesure) successifs, dans un petit intervalle de temps, du même mesurande (le système soumis à la mesure) effectués dans des mêmes conditions de mesure ; ces conditions sont appelées conditions de répétabilité [ISO 5725].
- **[REPRODUCTIBILITE]** : étroitesse de l'accord entre les résultats des mesurages successifs du même mesurande effectués en faisant varier les conditions de mesure. Pour qu'une expression de la reproductibilité soit valable, il est nécessaire de spécifier les conditions que l'on fait varier. Celles-ci peuvent comprendre : le principe de mesure, la méthode de mesure, l'observateur, l'instrument de mesure, l'étalon de référence, le lieu, les conditions d'utilisation de l'appareil de mesure, le temps [ISO 5725].

II.2.2.2. Sensibilité, Solidité (ou robustesse) et stabilité

Les trois définitions suivantes s'attachent plus directement à la variabilité du résultat de la mesure lors des variations des conditions de l'expérience.

- **[SENSIBILITE]** : capacité d'un système à réagir à des *stimuli* physiques ou de détecter de faibles signaux physiques ; la sensibilité d'un instrument de mesure est le quotient de l'accroissement de la réponse de l'instrument par l'accroissement correspondant du signal d'entrée [10]. La solidité n'est pas référencée dans les normes de la métrologie.
- **[SOLIDITE]** ou **[ROBUSTESSE]** : aptitude de l'instrument de mesure à donner des indications de mesure très voisines lors de son application répétée au même mesurande dans les conditions de mesure spécifiées, indépendamment de toutes les autres conditions.
- **[STABILITE]** : aptitude de l'instrument de mesure à maintenir constantes ses caractéristiques métrologiques dans le temps [10].

Mentionnons enfin une caractéristique classique des appareils de mesure : la fidélité.

2.2.3. Fidélité

• **[FIDELITE]** : aptitude d'un instrument de mesure à donner des indications très voisines lors de l'application répétée au même mesurande dans les mêmes conditions de mesure comprenant : réduction au minimum des variations dues à l'opérateur, même mode

opératoire de mesure, même observateur, même équipement de mesure utilisé dans les mêmes conditions, même lieu, répétition durant une courte période de temps [9].

La balance de Roberval, en particulier, est en général fausse (le fléau n'est pas vertical quand les plateaux sont vides) mais fidèle (ce qui permet la méthode de la double-pesée).

Quelques remarques préliminaires vont nous permettre de transposer les notions purement métrologiques à la fiabilité du protocole.

II.2.3. Analyse préliminaire

II.2.3.1. Inclusion de la répétabilité dans la reproductibilité

Il est évident que la reproductibilité d'une expérience implique sa répétabilité. La réciproque est fausse : un expérimentateur débutant ne réussira pas à reproduire la qualité d'un dépôt, même s'il travaille sur la machine ayant déjà été utilisée pour ce dépôt de référence, ou un expérimentateur chevronné ne réussira pas à bien utiliser une machine dont il ne maîtrise pas parfaitement le fonctionnement.

II.2.3.2. De la mesure à la compréhension de la reproductibilité

Les définitions proposées par la métrologie restent vagues sur la notion d'« étroitesse » des résultats entre deux réalisations d'une expérience réputée reproductible. En particulier, les conditions de l'expérience ne sont pas discutées et semblent pouvoir être rigoureusement imposées (« conditions de mesure »).

Exemple dans le domaine des dépôts

Imaginons un protocole optimisé proposé par un laboratoire de recherche pour un dépôt d'alliage métallique. Ce laboratoire dispose d'un système d'asservissement de la température du support très performant : lorsque la température est fixée à 600° C, les fluctuations sont inférieures à 5° C. Or, le dépôt est adhérent à 600° C, mais pas du tout à 580° C. Lors de l'industrialisation du procédé, le dispositif utilisé est moins performant et l'asservissement de température n'assure une précision de la température qu'à 30° C près : la condition imposée est alors bien de 600° C, mais le substrat est en fait à 570° C, le dépôt n'adhère pas et la reproductibilité est mise en cause. Il est donc naturel de considérer que la reproductibilité est associée à la sensibilité des caractéristiques du produit aux paramètres de réglage d'une part, et à la précision de ces réglages d'autre part : nous mettons ainsi en exergue les notions voisines de sensibilité et de solidité.

II.2.3.3. Sensibilité et solidité

Soit S une grandeur caractéristique du produit et F un facteur numérique. On peut distinguer deux cas extrêmes dans lesquels la fiabilité sera mise en cause :

- S est très sensible à F et le réglage de F est moyennement précis.
- ullet S est peu sensible à F mais F est un paramètre très difficile à régler avec précision.

La solidité de S sera donc assurée si la précision de réglage des paramètres auxquels S est la plus sensible est grande.

Distinguons les cas où F est un paramètre principal ou non.

- \bullet Si F est principal, il est probable que lors de l'étude préalable, on aura détecté la grande sensibilité de S à F. Dans ce cas, on aura muni le dispositif expérimental d'un système de régulation fine de F. Il est cependant possible que cette sensibilité ne soit pas constante sur tout le domaine de variation des paramètres et qu'elle croisse fortement au voisinage de l'optimum : c'est un cas intéressant d'apparition de non fiabilité.
- Si F n'est pas principal, c'est qu'il n'a pas a priori d'influence importante sur S. Par suite, la sensibilité de S à F est faible, mais là aussi, il peut arriver qu'elle devienne importante au voisinage de l'optimum.

La figure 2 illustre ces deux cas : lorsque la sortie S est proche de la valeur optimale s^* , la pente de la courbe de réponse devient subitement très grande, ce qui est la marque d'une grande sensibilité de S au facteur F.

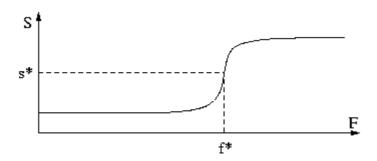


Figure II.2 : exemple de courbe de réponse montrant une sensibilité accrue de la sortie S au facteur F au voisinage de l'optimum

II.2.3.4. De la stabilité des appareils de mesure à la stabilité des paramètres

On peut remarquer dans la définition de la stabilité qu'il n'est fait référence qu'à celle des appareils de mesure ; or le développement technologique des systèmes asservis permet de plus en plus aux expérimentateurs de disposer de dispositifs de régulation des paramètres physiques. Nous allons donc proposer une définition annexe de la stabilité incluant celle des paramètres.

Les fluctuations du résultat d'une expérience dans le temps sont évoquées dans la définition de la répétabilité (« dans un petit intervalle de temps »). On peut donc comprendre la nécessité de travailler à intervalles de temps rapprochés comme la condition obligatoire pour que la dérive de comportement des appareils soit faible, et que leur comportement soit sensiblement identique d'une expérience à l'autre. Il apparaît donc que dans l'esprit des définitions proposées par la métrologie, le temps n'est pas un facteur, mais seulement l'inducteur de fluctuations des paramètres. On peut donc remarquer que la fluctuation du résultat d'une expérience dans le temps est imputable à celle d'un ou plusieurs facteurs. Nous n'entrons pas ici dans des considérations de mécanique quantique, qui pourraient soulever des cas d'imprédictibilité quantique de résultats de mesure, toutes conditions de mesure apparemment identiques par ailleurs [11].

II.2.3.5. Homogénéité spatiale

Rien ne prouve que lors de la tentative de reproduction d'une expérience, le changement de laboratoire, d'opérateur et d'équipement ne provoquera pas l'apparition d'un facteur nouveau inattendu.

Exemple dans le domaine des dépôts

Reprenons le cas décrit dans le précédent exemple, où le dépôt est adhérent à 600° C, mais pas du tout à 570° C. Lors de l'industrialisation du procédé, la taille importante du substrat ne permet pas de régler aussi finement sa température. En imposant une température de 600° C à la pièce à métalliser, l'imperfection des transferts thermiques provoque une hétérogénéité des températures : certaines zones de la pièce à métalliser sont à 550° C tandis que d'autres sont à 650° C. Le dépôt est alors très imparfait et la reproductibilité est rejetée alors que les conditions imposées étaient parfaitement identiques. Le changement d'échelle marque alors l'échec à cause des fluctuations du réglage non pas dans le temps mais dans l'espace.

II.2.3.6. Apparition d'un facteur nouveau

En reprenant un exemple proche de celui évoqué dans le paragraphe précédent, on peut aussi imaginer que l'adhérence d'un dépôt sur une plaquette plane, rectangulaire et de petites dimensions

soit bien assurée, mais que sur un support de plus grande taille et de rayon de courbure faible, elle soit modifiée. On doit donc admettre que la taille et la complexité de la forme du substrat sont des paramètres qui n'ont pas été pris en compte. Nous serons donc amenés à réfléchir à l'exhaustivité du jeu des paramètres influents.

Cette analyse préalable étant achevée, nous allons maintenant proposer une définition plus large de chacun des six concepts en les transposant à la fabrication des produits.

II.2.4. Généralisation des concepts d'exhaustivité, de répétabilité, reproductibilité, sensibilité, solidité, stabilité

Nous sommes maintenant en mesure de généraliser les concepts de la métrologie au processus de fabrication. Nous donnons pour chacun une définition explicite. Nous donnerons aussi de chacune de ces définitions une interprétation mathématique : ce choix est justifié par la volonté d'associer à chaque propriété une grandeur numérique mesurable, susceptible de former la base d'une appréciation objective de la propriété étudiée.

Dans tout ce qui suit, la notation \Box 0 signifie que la quantité est rigoureusement nulle (cas idéal) ou que sa valeur absolue est inférieure à un seuil librement choisi par le collège (cas réel).

II.2.4.1. Exhaustivité

<u>Définition</u>: **exhaustivité d'un jeu de paramètres**: caractère d'un jeu de paramètres physiques tel que le changement de tout autre paramètre hors de ce jeu et le maintien de tous les paramètres du jeu ne changent pas le résultat de l'expérience.

Soit $(E_1, E_2, ..., E_k, E_{k+1}, ..., E_n)$ le jeu des n paramètres identifiés dans un laboratoire pour la fabrication parmi lesquels on a identifié une sous-famille n'en comportant que k (k < n). Soit S une grandeur de sortie mesurable, caractérisant le résultat d'une expérience. Nous pouvons proposer la traduction mathématique suivante : $(P_1, P_2, ..., P_k)$ est un jeu de paramètres **exhaustif** si S est une fonction des k paramètres de ce jeu et ne dépend pas des (n-k) autres :

$$S = S(P_1, P_2, \dots P_k) \text{ et } \forall i \in \{k+1, \dots, n\}, \frac{\partial S}{\partial P_i} \bigg|_{(P_1, P_2, \dots P_k)} \square 0$$

Dans ce cas, les k paramètres exhaustifs forment les entrées au sens défini au paragraphe I.2.4.5.

II.2.4.2. Répétabilité

<u>Définition</u>: **Répétabilité d'une fabrication**: caractère d'une fabrication telle que la répétition de celle-ci avec le même protocole, dans le même laboratoire, avec le même opérateur et sur la même machine donne un résultat variant faiblement dans le temps.

On fait du laboratoire L, de l'opérateur O et de la machine M trois nouveaux paramètres. Nous pouvons proposer la traduction mathématique suivante : soient $(P_1, P_2, ..., P_k)$ les paramètres spécifiés par le protocole. Alors, pour tout autre paramètre P_i $(i \in \{k+1,...,n\})$:

$$\left. \frac{\partial S}{\partial P_i} \right|_{(P_i, P_2, \dots P_k, L, O, M)} \square 0$$

II.2.4.3. Reproductibilité

<u>Définition</u>: **reproductibilité d'une fabrication**: caractère d'une fabrication telle que le réglage des paramètres spécifiés par le protocole dans l'intervalle recommandé, donne, avec la même méthode, dans deux laboratoires distincts, avec deux opérateurs distincts travaillant sur deux machines distinctes, deux résultats dont l'écart relatif est faible.

Là encore, on fait du laboratoire L, de l'opérateur O et de la machine M trois nouveaux paramètres. Nous pouvons proposer la traduction mathématique suivante : soient $(P_1, P_2, ... P_k)$ les paramètres spécifiés par le protocole. Alors :

$$\frac{\partial S}{\partial L}\Big|_{(P_1, P_2, \dots P_k, O, M)} \square 0, \quad \frac{\partial S}{\partial O}\Big|_{(P_1, P_2, \dots P_k, L, M)} \square 0, \quad \frac{\partial S}{\partial M}\Big|_{(P_1, P_2, \dots P_k, L, O)} \square 0$$

La dérivation par rapport à l'opérateur ou par rapport à la machine est une définition formelle que nous devons préciser. Considérons deux opérateurs distincts $(O_0 \text{ et } O_1)$ intervenant, dans deux laboratoires différents, sur deux machines identiques. À chaque opération, on note l'ensemble des préconisations de chacun des deux opérateurs. Nous décrivons ici une technique correspondant, dans le traitement de l'image, à ce qu'on appelle le *morphing* de deux visages par exemple. Soit le réel $\alpha \in [0,1]$. Définissons alors un opérateur virtuel O_α : il doit suivre, à chaque étape de la fabrication, une préconisation qui est la moyenne pondérée par α pour la préconisation de O_1 et par $(1-\alpha)$ pour la préconisation de O_0 . Si $\alpha=0$, O_α travaille comme O_0 , si $\alpha=1$, comme O_1 . Si $0<\alpha<1$, O_α travaille à 100α % comme O_1 et à $100-100\alpha$ % comme O_0 . La dérivation par rapport à l'opérateur devient ainsi une dérivation par rapport au réel α . Il en est de même pour la dérivation par rapport à la machine.

II.2.4.4. Sensibilité

<u>Définition</u>: **sensibilité d'une fabrication**: variation relative du résultat d'une fabrication rapportée à la variation relative d'un des paramètres, qu'il soit principal ou pas.

Nous pouvons proposer la traduction mathématique suivante : soient $(P_1,P_2,...P_k)$ les paramètres spécifiés par le protocole. Notons p_i^* la valeur de réglage de P_i ($i \in \{1,2,...,k\}$) et s^* la valeur correspondante pour la réponse S. Alors la sensibilité relative de la réponse au paramètre P_i est :

$$\frac{p_i^*}{s^*} \frac{\partial S}{\partial P_i} = \frac{\partial \left(\frac{S}{s^*}\right)}{\partial \left(\frac{P_i}{p_i^*}\right)}$$

La thermodynamique est une discipline dans laquelle la notion de variable est particulièrement bien définie. Nous allons illustrer notre propos par la considération d'un système comportant n moles de gaz. Soit U son énergie interne. On note P sa pression, T sa température et V son volume, et on le considère dans l'état défini par les valeurs u, p, t et v. Chaque illustration se référant à ce cas sera annoncé par l'entête « Exemple dans le domaine de la thermodynamique ».

Exemple dans le domaine de la thermodynamique

La sensibilité de l'énergie interne à la température est, par définition : $\frac{\partial \left(U/u\right)}{\partial \left(T/\theta\right)}$. $\frac{U}{u}$ est l'énergie interne réduite et $\frac{T}{\theta}$ la température réduite. En thermodynamique, on peut choisir pour un gaz parfait l'expression $U = nC_{v,m}T$ ($C_{v,m}$ est la capacité calorifique molaire à volume constant) et on en déduit que cette sensibilité vaut 1 pour un gaz parfait si $C_{v,m}$ ne dépend pas de T.

II.2.4.5. Solidité

<u>Définition</u>: **solidité d'une fabrication**: caractère d'une fabrication telle que les fluctuations du résultat sont faibles lorsque les paramètres de réglage fluctuent dans l'intervalle de tolérance garanti par l'appareil de mesure ou l'asservissement.

Soient $(P_1, P_2, ... P_k)$ les paramètres spécifiés par le protocole. Notons ΔP_i la fluctuation maximale du paramètre P_i garantie par l'ensemble {laboratoire, opérateur, machine}. Soit s la valeur attendue pour la réponse, alors :

$$\forall i \in \{1, ..., k\}, \frac{\frac{\partial S}{\partial P_i} \Big|_{(P_1, ..., P_{i-1}, P_{i+1}, ..., P_k)}}{S} \boxtimes 0$$

Exemple dans le domaine de la thermodynamique

Dans le cas des n moles de gaz parfait présenté dans l'exemple précédent, calculons la solidité de l'énergie interne par rapport aux variables P, V et T. U ne dépend ni de P ni de V (première loi de Joule) donc $\frac{\partial U}{\partial P}\Big|_{V,T} = \frac{\partial U}{\partial V}\Big|_{P,T} = 0$. Il est donc inutile d'utiliser un asservissement de pression ou de volume pour maintenir U constante. En ce qui concerne le paramètre T, on a :

$$\frac{\frac{\partial U}{\partial T}\Big|_{P,V} \times \Delta T}{u} = \frac{nC_{V,m}\Delta T}{u} = nC_{V,m} \frac{\Delta T}{nC_{V,m}\theta} = \frac{\Delta T}{\theta}$$

La solidité de U nécessite donc une très faible variation relative de la température $(\frac{\Delta T}{\theta} \Box 0)$. Là encore, un seuil devra être défini par le collège.

II.2.4.6. Stabilité d'un paramètre

<u>Définition</u>: **Stabilité d'un paramètre**: propriété de faible variation de sa valeur dans le temps quelles que soient les fluctuations des autres paramètres.

La stabilité du paramètre P_i implique la faible valeur relative de la dérivée droite de ce paramètre par rapport au temps. Soit Δt la durée caractéristique de la manipulation. Nous pouvons proposer la traduction mathématique suivante :

$$\frac{\frac{dP_i}{t} \times \Delta t}{P_i} \square 0$$

Nous avons terminé notre description et l'uniformisation des six notions métrologiques par des traductions mathématiques qui donnent à l'analyste la possibilité de quantifier les caractères expérimentaux associés à ces notions. Nous allons maintenant chercher à mettre en évidence ce qui les distingue deux à deux.

II.2.5. Illustration croisée des différents concepts

Donnons d'abord le principe de l'illustration croisée. Les concepts de la métrologie se ressemblent. C'est aussi le cas des concepts généralisés que nous avons proposés dans la section précédente. Pour les illustrer, nous allons donner de nombreux exemples dans cette section. Il serait rapidement rébarbatif d'énumérer une longue liste de cas expérimentaux et de faire la liste des propriétés métrologiques illustrées. Nous voulons surtout insister sur les nuances qui permettent de les distinguer deux à deux. Pour cela, nous allons considérer des couples de notions (N_1, N_2) très ressemblantes et choisir pour chacun un ou deux exemples illustratifs choisis dans le domaine particulier de la technologie des dépôts sous vide.

Nous avons identifié six notions fondamentales : l'exhaustivité, la répétabilité, la reproductibilité, la sensibilité, la solidité et la stabilité. On peut donc constituer $C_6^2 = 15$ couples. Quatre notions, l'exhaustivité des paramètres, la répétabilité, la reproductibilité et la solidité sont relatives à la fabrication toute entière ; les deux autres, la sensibilité et la stabilité sont plutôt relatives à des paramètres.

On distinguera donc:

- l'état validé ou non validé de l'exhaustivité des paramètres, de la répétabilité, de la reproductibilité ou de la solidité ;
- le niveau élevé ou bas de la sensibilité à un paramètre ou de la stabilité.

Les quatre propriétés globales étant hiérarchiquement ordonnées,

reproductibilité \Rightarrow exhaustivité des paramètres \Rightarrow solidité \Rightarrow répétabilité nous choisissons l'ordre suivant : 1 reproductibilité, 2 exhaustivité des paramètres, 3 solidité, 4 répétabilité, 5 stabilité, 6 sensibilité. Nous identifierons les couples avec la notation $[i \leftrightarrow j]$: comparaison des propriétés i et j. Nous les énumérerons dans l'ordre lexicographique de $[1 \leftrightarrow 2]$ à $[1 \leftrightarrow 6]$ puis de $[2 \leftrightarrow 3]$ à $[2 \leftrightarrow 6]$, ..., pour terminer par $[5 \leftrightarrow 6]$.

Pour chaque couple $[i\leftrightarrow j]$, si la notion i entraı̂ne hiérarchiquement la propriété j, nous donnerons un exemple où i est vérifiée et pas j. Si les deux propriétés ne sont pas équivalentes ou hiérarchiquement ordonnées, nous chercherons à alterner les états des deux propriétés : par exemple i vérifiée et pas j, puis le contraire.

II.2.5.1. Reproductibilité

- [1 ↔ 2]: reproductibilité et exhaustivité des paramètres. Si tous les paramètres influents sur les propriétés d'un dépôt obtenu par évaporation au canon à électrons ont été identifiés, et sont maîtrisés, il y a exhaustivité des paramètres; mais il est possible qu'un opérateur non averti ne parvienne pas à bien diriger le faisceau d'électrons sur le métal dans le creuset : il n'y a alors pas reproductibilité.
- [1 ↔ 3] : reproductibilité et solidité. L'exhaustivité entraînant la solidité, l'exemple donné en [1 ↔ 2] convient.
- $[1 \leftrightarrow 4]$: reproductibilité et répétabilité. L'exhaustivité entraînant la répétabilité, l'exemple donné en $[1 \leftrightarrow 2]$ convient.
- $[1 \leftrightarrow 5]$: reproductibilité et stabilité. Dans le cas d'une machine ne disposant pas d'un système de régulation de la température du substrat, l'instabilité du paramètre température du substrat peut être responsable de non reproductibilité.
- [1 ↔ 6]: reproductibilité et sensibilité. Si la qualité d'un dépôt par évaporation est peu sensible à la pureté du matériau qu'on place dans le creuset, mais qu'un lot soit de très mauvaise qualité en termes de pureté, la reproductibilité sera mise en défaut.

II.2.5.2. Exhaustivité des paramètres

- $[2 \leftrightarrow 3]$: exhaustivité des paramètres et solidité. Si le dépôt optimal a été obtenu dans diverses conditions de travail, avec assouplissement des paramètres non principaux, par les mêmes opérateurs sur la même machine, le test de solidité est validé; mais lors du passage sur une autre machine, les mêmes opérateurs (donc maîtrisant le savoir-faire technique) échouent à la fabrication bien qu'ils aient vérifié que tous les paramètres principaux identifiés ont été réglés au même niveau et avec la même précision que sur la première machine. Leur analyse leur prouve que la distance entre le creuset d'évaporation et le porte substrat est différente entre les deux machines, et que c'est la cause de l'échec. Cette distance d forme donc un paramètre caché, ce qui prouve qu'il n'y avait pas exhaustivité des paramètres.
- $[2 \leftrightarrow 4]$: exhaustivité des paramètres et répétabilité. La solidité entraînant la répétabilité, l'exemple donné en $[2 \leftrightarrow 3]$ convient.
- [2↔5]: exhaustivité des paramètres et stabilité. L'instabilité d'un paramètre sur une machine donnée, la pression partielle en dioxygène par exemple lorsqu'elle n'est pas régulée, permet de l'identifier comme paramètre principal dans les dépôts d'oxydes magnétiques. Réciproquement, l'exhaustivité des paramètres peut être prise en défaut quand un paramètre dont la stabilité est assurée sur une première machine ne l'est pas sur une autre machine.

• [2 ↔ 6]: exhaustivité des paramètres et sensibilité. On a tendance à identifier plus rapidement les paramètres auxquels la fabrication est la plus sensible; mais si elle est très peu sensible à un paramètre comme la pureté du matériau qu'on évapore, et que celle-ci varie beaucoup d'un fournisseur à l'autre, on risque de ne pas valider l'exhaustivité des paramètres car on a oublié que ce paramètre pouvait avoir une influence.

II.2.5.3. Solidité

- [3 \iff 4]: solidité et répétabilité. Si le dépôt optimal a été obtenu plusieurs fois de suite par les mêmes opérateurs sur la même machine, le test de répétabilité est validé; mais lors de l'assouplissement des contraintes sur un paramètre non principal, par exemple en travaillant avec une matière première achetée chez un autre fournisseur, on constate une dégradation des caractéristiques cristallographiques du dépôt : c'est un critère de non solidité.
- [3\leftrightarrow5]: solidité et stabilité. L'instabilité de la puissance d'un canon à électrons peut provoquer des évaporations brutales (sous forme de projections) qui, dans une machine tricanons nuiront à l'uniformité du dépôt : la solidité est alors prise en défaut.
- [3 \(\to 6 \)]: solidité et sensibilité. On peut observer une haute sensibilité de l'adhérence d'un dépôt à la température du substrat ; mais si la température est finement régulée, il y aura un haut niveau de solidité. Il peut aussi y avoir une mauvaise solidité en même temps qu'une faible sensibilité aux paramètres principaux si leurs réglages sont très grossiers.

II.2.5.4. Répétabilité

- [4\leftrightarrow5]: répétabilité et stabilité. Si la stabilité des paramètres principaux n'est pas établie, on parle de dérive: il est possible que lors de l'essai de répétition de la fabrication du prototype, les paramètres non régulés de la machine, comme la pression dans un dispositif de dépôt sous vide (ne disposant pas d'un asservissement en pression) fluctuent: le second essai peut alors être un échec car les particules présentes modifient la pression totale dans l'enceinte; il y a alors non répétabilité.
- [4\leftrightarrow 6]: répétabilité et sensibilité. Si la fabrication est très sensible à un paramètre principal, il est possible que l'optimalité du prototype ait été obtenue par un heureux concours de circonstances (surtout si le processus d'optimisation a été constitué par très peu d'essais) et qu'on n'arrive pas à fabriquer immédiatement après un produit comparable : il n'y a donc pas répétabilité.

II.2.5.5. Stabilité

• $[5 \leftrightarrow 6]$: stabilité et sensibilité. Ces deux notions ne sont pas comparables : la première est relative aux variations d'une grandeur dans le temps, la seconde aux variations relatives d'une grandeur par rapport à une autre. Elles sont à la base des interprétations de phénomènes de variabilité, mais ne sont pas corrélées entre elles.

Ces analyses croisées nous ont permis d'illustrer les nuances parfois subtiles entre les différents termes de la métrologie. Nous allons, pour finir ce chapitre, construire un outil synthétique qui s'inscrira dans la suite logique du processus d'optimisation de la fabrication expérimentale.

II.3. Apport de cette analyse pour l'expérimentateur

Nous avons décrit et illustré les concepts de la métrologie généralisés au processus de fabrication. Nous allons dresser, dans cette dernière section, une fiche méthodologique que nous voulons la plus complète possible. Nous transformerons ainsi l'analyse formelle de la fiabilité d'un

protocole en un outil synthétique d'aide à sa validation. Nous préciserons enfin comment cette fiche s'articule avec le processus d'optimisation itérative d'une démarche expérimentale, qui fait l'objet principal de cette thèse.

II.3.1. Construction d'une fiche méthodologique d'analyse de fiabilité

II.3.1.1. Rappel sur le contexte

Rappelons brièvement le contexte dans lequel un laboratoire veut tester la fiabilité d'un protocole.

- Dans une étude préalable, les agents se sont familiarisés avec la technologie de fabrication, ils ont mis en évidence les paramètres principaux, ils ont équipé la machine de fabrication de systèmes d'asservissement et de mesure de ces paramètres. Quelques tests de fabrication complète auront permis d'initier l'étape d'optimisation, en formant par exemple le simplexe initial.
- Dans l'étape d'optimisation, menée par exemple avec une méthode itérative de simplexe, les agents ont réalisé plusieurs produits en changeant les valeurs numériques des paramètres principaux, jusqu'à la détermination de celles qui leur ont permis la fabrication d'un produit jugé optimal, dans le domaine des valeurs admissibles de ces paramètres. Le produit en question est le prototype.
- Le but de la troisième et dernière étape est de s'assurer de la fiabilité du protocole, et d'aller, dans le cas d'un projet à vocation industrielle, jusqu'au transfert de technologie.

II.3.1.2. L'analyse des tests de fiabilité étayée par les définitions métrologiques

Dans la section 1 de ce chapitre, nous avons identifié cinq types de tests et nous les avons commentés. Dans la section 2, en utilisant les principes et définitions de la métrologie, nous avons dressé une liste de caractéristiques des protocoles expérimentaux et nous les avons illustrées. Montrons maintenant comment les cinq tests se réfèrent aux différentes notions métrologiques généralisées.

- [Test 1] : test machine et opérateurs identiques, date différente. C'est le test de répétabilité.
- [TEST 2] : test d'assouplissement des paramètres non principaux, machine et opérateurs identiques.
 - Si on fait varier de façon maîtrisée un seul des facteurs non principaux, c'est un test de sensibilité aux facteurs non principaux ;
 - Si plusieurs facteurs varient de façon aléatoire, c'est un test de solidité.
- [TEST 3] : test de changement de machine, opérateurs identiques. C'est un test de reproductibilité.
- [TEST 4] : test de machine identique, changement d'opérateurs. C'est aussi un test de reproductibilité.
- [TEST 5] : test de changement d'échelle, industrialisation. S'il intervient après un succès des quatre premiers tests, c'est un test d'homogénéité spatiale.

Ces tests doivent être effectués dans l'ordre. Le succès de l'un d'eux assure à la fois :

- que l'on peut attribuer une caractéristique métrologique au protocole expérimental ;
- que l'on peut passer au test suivant.

En revanche, l'échec de l'un des tests indique aux acteurs une faiblesse du protocole. C'est à ce stade que la précision que nous avons recherchée dans la définition des caractéristiques métrologiques montre son utilité. Sans méthode particulière, les dysfonctionnements suivants peuvent apparaître.

• Il est possible que l'échec soit simplement ignoré, et le protocole risquera alors, dans son utilisation ultérieure dans d'autres conditions, par d'autres opérateurs, utilisant d'autres machines, de conduire régulièrement à de nouveaux échecs. Cela discréditera le laboratoire auprès des donneurs d'ordre, ou rendra une publication <<suspecte>>> ; dans le cas de la

construction d'un moteur de fusée, on peut même imaginer des conséquences plus graves.

• L'échec peut donner lieu à une remise en question complète et désordonnée du protocole, d'autant plus préoccupante qu'elle intervient après une longue série d'essais dans la phase d'optimisation.

La connaissance du caractère métrologique mis en défaut par l'échec du test va nous permettre de définir à chaque fois le type d'étude complémentaire qui s'impose. Selon le résultat de cette étude, nous pourrons alors indiquer comment réagir, et à quelle étape il faut revenir.

Nous allons maintenant construire une fiche méthodologique que nous voulons la plus opérationnelle possible.

II.3.1.3. Fiche méthodologique

Cette fiche est construite, naturellement, selon les principes de présentation des organigrammes algorithmiques présentés dans l'annexe A. On y trouve :

- des procédures décrivant l'action proposée aux agents (texte encadré dans un rectangle),
- des déclarations, indiquant en particulier les caractéristiques métrologiques acquises après chaque test réussi (texte encadré dans un rectangle aux sommets arrondis),
- des tests : les cinq tests prévus par l'analyse de la fiabilité et des tests relatifs aux études complémentaires exigées lors de l'échec de l'un d'eux (texte dans un losange, avec discrimination du type oui / non ou échec / réussite).

La figure 3 reproduit cette fiche dans laquelle on trouve une synthèse complète de la totalité des considérations de ce chapitre.

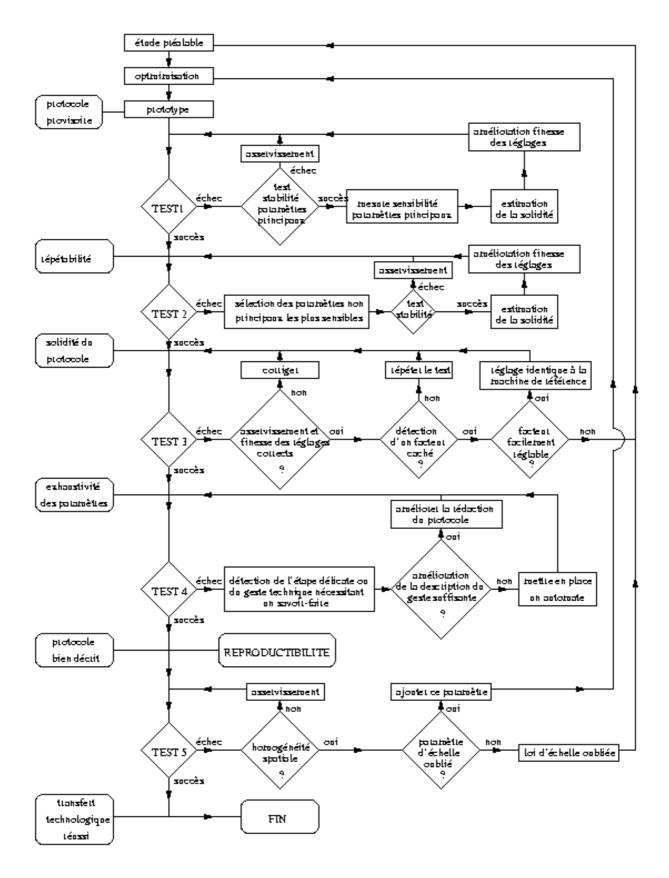


Figure II.3 : fiche méthodologique de contrôle de la fiabilité du protocole

II.3.1.4. Commentaires et exemple d'utilisation

On trouve dans la littérature des listes de définitions métrologiques. Elles sont parfois hiérarchisées : dans la note ISO résumant le vocabulaire international de métrologie (V.I.M.) [12,13], un diagramme est présenté sous forme d'une arborescence qui est reproduite dans l'annexe B. L'arborescence est un mode de présentation moins structuré que l'organigramme. Notre fiche méthodologique indique :

- l'ordre des tests de fiabilité, alors que dans une arborescence les différentes branches offrent des choix alternatifs sans ordre de priorité ;
- comment réagir en cas d'échec d'un test, alors que l'arborescence des termes ne conduit qu'à mettre un nom sur le type de propriété observée ;
- les boucles de retour à l'issue des tests complémentaires, alors que l'arborescence est unidirectionnelle.

Il est possible de retrouver dans ce diagramme tous les cas que nous avons proposés en exemples dans ce chapitre. Illustrons cette affirmation en reprenant l'un d'eux. Exemple dans le domaine des dépôts $[2 \leftrightarrow 5]$: exhaustivité des paramètres et stabilité. Un protocole de manipulation de dépôt sous vide nécessite une température de substrat réglée à 600° C. Sur le dispositif qui a servi à la mise au point du protocole, un système de régulation électronique perfectionné permet un réglage précis.

- Le test de répétabilité est un succès : le laboratoire de recherche fabrique successivement trois dépôts optimaux à partir du réglage des paramètres principaux.
- Le test de solidité est un succès : le laboratoire réussit un dépôt optimal en assouplissant deux paramètres non principaux :
 - sur un substrat bombé alors que le substrat initial était plan ;
 - en partant d'une matière première (dans le creuset d'évaporation) achetée chez un autre fournisseur à l'état de poudre fine alors que la matière initiale était plutôt sous forme de granulés.
- Lors d'un essai sur la machine dont dispose le laboratoire industriel des prescripteurs, les mêmes opérateurs constatent une dégradation nette de l'adhérence du dépôt : le test 3 est un échec.
- Ils procèdent alors, conformément à l'organigramme, au test d'asservissement et de finesse des réglages. Ils constatent que la température du substrat affichée n'est que la température de consigne : le porte substrat n'est équipé que d'un système de chauffage permettant une montée en température rapide, mais pas d'un thermostat et d'une source froide capable de refroidir le substrat. Lors du chauffage du matériau dans le creuset, la température du substrat dérive, de 600° C (température de consigne) à 550° C, température à laquelle le dépôt n'est plus adhérent. Le test d'asservissement est donc un échec.
- Les agents procèdent alors, conformément à l'organigramme, à l'adaptation d'un thermostat sur le porte substrat : ils assurent ainsi la stabilité du paramètre température du substrat.
- Ils refont un essai sur la machine ainsi améliorée qui est, cette fois-ci, un succès : ils concluent à l'exhaustivité des paramètres.

II.3.2. L'articulation de la fiche méthodologique avec la démarche d'optimisation

La fiche méthodologique présentée dans le paragraphe précédent inclut les étapes de l'étude préalable et de l'optimisation. Ces deux premières étapes ne sont pas détaillées ici. Elles font elles-mêmes l'objet d'études approfondies. Par conséquent, en détaillant ces fiches à l'intérieur de la fiche que nous proposons, nous pourrions construire un organigramme complet de la démarche du laboratoire de recherche (la fiche serait cependant beaucoup trop volumineuse pour figurer ici), défini par les trois étapes suivantes.

• L'étude préalable est largement facilitée par l'utilisation de la méthodologie des plans d'expérience, décrite par G. et M.C. Sado [14] dans leur ouvrage sur ce sujet et développée dans la thèse de Sandrine Karam [1]. La méthode rudimentaire des essais erreurs

est critiquée et remplacée par des méthodes comportant la définition des facteurs, le passage d'un plan factoriel complet à un plan fractionnaire, la construction d'un plan d'expérimentation, les plans de criblage et l'analyse statistique des résultats d'expériences. Cette étude préalable permet de dégager les paramètres principaux. Elle peut aussi conduire à un modèle mathématique pour la fonction de réponse.

- L'étape d'optimisation par la méthode itérative du simplexe est largement étudiée dans les chapitres 1 et 3 de la présente thèse, et certains de ses aspects comme la pondération et la campagne d'expériences sont développés dans les chapitres 4 et 5.
- Notre étude nous permet de proposer un nouvel outil de travail : l'étape de test de la fiabilité (comprenant l'éventuel transfert de technologie) peut être guidée par la fiche méthodologique que nous avons développée. Sa construction est basée sur la logique métrologique.

II.3.3. Présentation d'un programme informatique opérationnel

Pour faire de la fiche méthodologique que nous avons construite un réel outil de travail, nous avons construit un programme informatique opérationnel qui guidera, étape par étape, l'utilisateur.

La structure algorithmique de la fiche la rend immédiatement programmable. On y trouve en effet

La structure algorithmique de la fiche la rend immédiatement programmable. On y trouve en effet les structures habituelles décrivant un programme avec des tests, des boucles, des procédures et des déclarations :

- les tests (notés par des losanges) sont les cinq tests présentés au paragraphe 1.3.2 et les tests complémentaires lors de l'échec de l'un de ces tests ;
- les procédures (notées par des rectangles) décrivent à l'utilisateur les actions qu'il doit mener ;
- les boucles (formées par les flèches) ramènent l'utilisateur à la répétition d'un test après diverses procédures correctives ;
- les déclarations (notées par des rectangles aux coins arrondis) donnent à l'utilisateur les propriétés métrologiques prouvées à chaque stade de son étude.

Nous avons voulu réaliser un programme dans un langage moderne et susceptible de s'intégrer facilement dans un programme d'assistance à la démarche expérimentale plus vaste. C'est pourquoi nous avons travaillé en collaboration avec Antoine Guiral, étudiant en informatique à l'école 3IL à Limoges pour développer un programme écrit en langage HTML. Ainsi, le programme est disponible sous la forme d'une page web à l'adresse provisoire

http://www.e-caveavin.com/proto.html

L'usager lit directement à l'écran :

- le libellé des procédures qu'il doit réaliser ;
- le libellé des déclarations des propriétés métrologiques acquises ;
- le libellé des tests qu'il doit effectuer

et il entre le résultat de chaque test par l'intermédiaire d'un menu déroulant. Nous présentons dans l'annexe C une copie d'écran correspondant à un exemple d'utilisation du programme.

II.4. Conclusion

Dans le chapitre 1, nous avons exprimé la volonté de préciser sous quelles conditions on peut parler sans ambiguïté de la fonction de réponse. Cet *a priori* est indispensable pour pouvoir développer une méthode d'optimisation. Il peut se traduire par la dépendance fonctionnelle de la réponse à un ensemble de paramètres principaux. Cet état mathématique idéal nécessite des propriétés expérimentales : l'exhaustivité des paramètres principaux, l'absence de paramètre caché, la stabilité et l'homogénéité des paramètres. Ces propriétés sont testées en amont lors de l'étude préalable. Elles sont aussi testées lors de l'étape finale, celle de la présérie conduisant du prototype (premier produit optimal obtenu par les agents ayant procédé à l'optimisation sur leur propre machine) à l'industrialisation de la fabrication.

Cette étape, que nous avons nommée la « fiabilisation du protocole », est d'une grande importance pour un laboratoire de recherches travaillant en vue d'une application industrielle. C'est pourquoi nous avons construit une fiche méthodologique qui permet :

- un ordonnancement des tests de fiabilité.
- une analyse méthodologique du verdict de ces tests,
- le développement de tests complémentaires,
- la suggestion d'améliorations dans la description du protocole,
- la suggestion de mise en place d'asservissement de paramètres,
- la suggestion de mise en place de processus automatisés sur la machine de fabrication.

•

En somme, nous avons procédé à l'analyse métrologique formelle du concept de « fonction de réponse ». Cette fiche a été transformée en un outil de travail opérationnel qui prend la forme d'un programme informatique. Celui-ci, réalisé dans un langage moderne (HTML) pourra être utilisé tel quel, ou s'intégrer dans un programme plus vaste d'aide à la démarche expérimentale. La traduction en termes mathématiques des diverses caractéristiques métrologiques du protocole est une base théorique qui pourrait permettre de développer une mesure objective de fiabilité des protocoles, en lui associant des valeurs numériques.

Dans le chapitre suivant, nous allons à nouveau nous intéresser à l'algorithme du simplexe en supposant acquise l'existence d'une fonction de réponse et nous montrerons comment l'algorithme du simplexe peut être adapté à l'optimisation itérative multicritère.

Bibliographie du chapitre II

- [1] KARAM S., Application de la méthodologie des plans d'expériences et de l'analyse de données à l'optimisation des processus de dépôt. Thèse de doctorat 39-2004, Université de Limoges, Électronique des hautes fréquences et optoélectronique, 2004.
- [2] BURMANN J. P., PLACKETT R. L., *The Design of Optimum Multifactorial Experiments*, Biometrika, 33 (4), 305-325, 1946.
- [3] Examen par un groupe d'experts des concentrations prédites sans effet pour les organismes aquatiques (PNEC aqua) des substances de la liste II de la Directive 76/464/CEE traitées en 2003 et 2004, relevés des décisions du groupe d'experts, Ministère de l'Écologie et du Développement Durable, INERIS-DRC-66026-06CR015.doc.
- [4] TAGUCHI G., *Introduction to quality Engineering*, Asian Productivity Organisation, American Supplier Institute Inc. Unipub-Kraus, 1986.
- [5] TAGUCHI G., KONISHI S., Taguchi Methods Orthogonal Arrays and Linear Graphs, American Supplier Institute Inc. Dearborn, USA 1987.
- [6] FIAT O., Toute la physique de spé, PC-PSI, éditions Belin, ISBN 2-7011-4114-1, chapitre 4, page 99, 2005.
- [7] TAILLADE F., *Notions de métrologie*, cours édité par le Laboratoire central des Ponts et Chaussées, 58 Bd. Lefebvre, 75732 PARIS, octobre 2004, disponible en ligne à l'adresse
- [8] LOUVET F., DELPLANQUE L., Les plans d'expériences, une approche pragmatique et illustrée, association Expérimentique, Orléans, ISBN 2-9525126-0-4, septembre2005.
- [9] ISO 5725 Exactitude (justesse et fidélité) des résultats de mesure, AFNOR 1994, disponible en ligne à l'adresse

www.boutique.afnor.org

- [10] NF ENV 13 005, Normes fondamentales, AFNOR août 1999.
- [11] LOCHAK G., *Mécanismes et régularités de la nature inanimée*, Histoire de la nature, Einaudi, Torino, 1984 (épuisé, consultable à la bibliothèque de la fondation Louis de Broglie, 23 rue Marsoulan, 75012 Paris).
- [12] NF X 07-001, Normes fondamentales (Vocabulaire International de la Métrologie), AFNOR 1994.
- [13] ISO D GUIDE 99999, International Vocabulary of basic and general terms of Metrology (V.I.M.), page 60, 14.09.2004, disponible en ligne à l'adresse

www.ntmdt.com/download/vim.pdf

[14] SADO M.C., Les plans d'expériences. De l'expérimentation à l'assurance qualité, AFNOR 2000.

Chapitre III. Prise en compte de plusieurs réponses, le multisimplexe

Dans le chapitre 1, nous avons précisé les principes généraux de la procédure d'optimisation séquentielle du simplexe. Nous nous sommes limités à l'optimisation d'un unique critère. Pour cela, nous avons défini une fonction de désirabilité quantifiant la proximité de la valeur mesurée de la réponse par rapport à l'objectif recherché pour cette réponse. L'optimisation de ce critère est ainsi remplacée par la maximisation de la désirabilité.

Il est fréquent qu'on cherche à optimiser plusieurs critères simultanément. Ce très vaste domaine d'étude s'appelle l'optimisation multicritère. Nous présentons, dans ce chapitre, un état de l'art qui ne prétend pas être exhaustif. Notre démarche est la suivante. Cette thèse est centrée sur la méthode du simplexe. Nous allons présenter le principe de la méthode du multisimplexe, méthode itérative d'optimisation multicritère. Celle-ci utilise une désirabilité unique, moyenne géométrique des désirabilités individuelles associées à chaque objectif. Nous allons décrire les hypothèses successives qui permettent de réduire un ensemble d'objectifs (cas le plus général de l'optimisation multicritère) à la maximisation d'une désirabilité unique englobant tous les objectifs. Nous nous sommes donc efforcés de donner, à chaque étape, une description suffisamment précise de ce qu'on trouve dans la littérature pour donner une vue générale des diverses méthodes évoquées, et suffisamment globale pour éviter d'allonger démesurément le propos relatif aux détails de ces méthodes.

Dans la première section, nous donnons un aperçu général de l'optimisation multicritère, et nous présentons les principales méthodes utilisées.

Parmi celles-ci, nous retenons la méthode de maximisation d'une fonction unique agrégée de valorisation. La construction mathématique de cette fonction est présentée dans la deuxième section, et nécessite le choix de coefficients de pondération. Les méthodes de détermination de ces coefficients feront l'objet du chapitre 4. Parmi les fonctions agrégées, nous nous intéresserons à la famille des fonctions de Scott et Antonsson, et plus particulièrement à la moyenne géométrique pondérée.

Enfin, nous montrons dans la troisième section comment la méthode du multisimplexe permet de ramener un problème d'optimisation multicritère à la maximisation de la désirabilité globale par la méthode itérative du simplexe. Cette section sera conclue par l'exposé d'une application du multisimplexe à un problème d'optimisation dans le domaine du filtrage micro-onde ; la méthode décrite, qui part de données expérimentales, qui utilise ensuite un logiciel de simulation pour réaliser les essais nécessaires à l'optimisation, et qui conduit enfin l'expérimentateur à une validation expérimentale de l'optimisation, constitue la partie originale de ce troisième chapitre.

III.1. L'optimisation multicritère

Dans cette première section, nous présentons brièvement les principales méthodes d'optimisation d'un produit selon plusieurs critères de valorisation.

III.1.1. Les objectifs

Nous devons tout d'abord préciser ce qu'on appelle un objectif, et comment on peut mesurer sa satisfaction.

III.1.1.1. Définition des objectifs par le cahier des charges

Toute la démarche du laboratoire de recherche est guidée par le cahier des charges (cf. section I.2.2). Celui-ci décrit, d'un côté un certain nombre de conditions opératoires, de l'autre les objectifs

assignés au produit. Nous pouvons distinguer :

- des objectifs absolus, ou impératifs : le produit doit répondre à des normes prédéfinies ; si ce n'est pas le cas, il sera rejeté sans prendre la peine de mesurer ses performances relatives aux autres objectifs ; dans ce cas, nous parlerons plutôt de **contraintes** :
- des objectifs relatifs ou souples : le produit devra présenter des caractéristiques se rapprochant le plus possible de caractéristiques prédéfinies.

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans le cas d'un dépôt d'oxyde magnétique sur substrat de silicium obtenu par évaporation au canon à électrons, on peut imaginer que le cahier des charges soit rédigé ainsi.

Les dimensions du support sont impératives, elles doivent correspondre à des cotes précises. Si ce support doit être inséré dans un système plus complexe (une carte informatique par exemple), une erreur de dimension le rendrait inutilisable.

L'épaisseur du dépôt est elle aussi impérative, sa valeur ayant été déterminée pour assurer au dépôt des propriétés physiques précises.

L'adhérence du dépôt sur le support doit être la meilleure possible, avec une valeur minimale spécifiée.

Le champ coercitif H_c doit être le plus grand possible, la valeur maximale étant $300~{\rm kA}\cdot m^{-1}$. Le champ de saturation $B_{\rm sat}$ doit se rapprocher le plus possible de celui du matériau massif, $B_{\rm sat}^*=0,5~{\rm T}$.

On voit donc ici que les objectifs de dimension et d'épaisseur sont des contraintes tandis que les objectifs d'adhérence, de champ coercitif et de champ de saturation sont relatifs.

III.1.1.2. Réduction des objectifs

À ce stade du chapitre, aucune contrainte de forme n'est imposée dans la formulation de ces objectifs. En particulier, il n'est pas nécessaire qu'ils soient traduits numériquement par une fonction de désirabilité. Ils peuvent être plus qualitatifs. En revanche, nous supposons que chaque objectif est **irréductible**, c'est-à-dire relatif à une sortie unique. Ainsi, aucun d'eux ne peut être décomposé en plusieurs objectifs. Nous admettons que, dans le cadre technique qui nous intéresse, tout objectif défini avec précision est assimilable à un inventaire d'objectifs irréductibles.

Exemple dans le domaine des dépôts

Considérons un dépôt métallique en couche mince sur un substrat quelconque obtenu par évaporation au canon à électrons d'un matériau massif placé dans un creuset. Un critère de qualité d'un tel dépôt peut être énoncé en trois points : (a) le dépôt doit être adhérent (adhérence maximale) ; (b) le dépôt doit être homogène en épaisseur (écart-type de l'épaisseur minimal) (c) la composition de la couche doit être celle du produit massif (composition proche de la composition du matériau évaporé). Ainsi, l'objectif de qualité maximale du dépôt métallique peut se décomposer en trois objectifs irréductibles relatifs respectivement à l'adhérence, à l'écart type de l'épaisseur et à la composition de la couche.

Dans ce qui suit, pour éviter d'alourdir le propos, le terme <<objectif>> désignera systématiquement un objectif irréductible. Cherchons dans quelle mesure on peut attacher un objectif donné à une réponse unique. Par définition du terme <<sortie>>, les objectifs ne peuvent se ramener qu'à une ou plusieurs de ces sorties. Ce sont en effet elles qui définissent le produit, et par conséquent, ses qualités.

Considérons un objectif relatif à plusieurs sorties. Deux cas peuvent alors se présenter :

3. L'objectif énonce autant de critères que de sorties (par exemple s_1 doit être minimal et s_2 doit être le plus proche possible de la cible) : ce cas correspond à un objectif composite. On peut alors le séparer en autant d'objectifs irréductibles. Ce cas est exclu puisque le terme objectif est pris dans le sens convenu d'objectif irréductible.

4. L'objectif énonce un critère unique relatif à plusieurs sorties simultanément. Cet objectif prend la forme d'un **couplage** entre les différentes sorties. On peut l'exprimer mathématiquement par l'optimisation d'une fonction Ω de plusieurs variables appliquée aux valeurs des sorties s_1, s_2, \ldots Cette fonction $\Omega(s_1, s_2, \ldots)$ doit être la plus petite possible, la plus grande possible ou la plus proche possible d'une valeur objectif donnée. On définit ainsi un nouvel objectif.

Illustrons comment une condition de couplage peut être remplacée par l'optimisation d'une sortie fonction des différentes sorties couplées.

- Prenons comme objectif: les deux sorties S_1 et S_2 doivent être les plus proches l'une de l'autre. Formons alors $s' = |s_1 s_2|$. Le nouvel objectif est la minimisation de s'.
- Prenons comme objectif : la moyenne géométrique des deux sorties S_1 et S_2 doit être égale à une valeur de référence s_0 . Formons alors $s' = \sqrt{s_1 s_2}$. Le nouvel objectif est de rendre s' le plus proche possible de la valeur cible s_0 .

Dans tout ce qui suit, nous noterons O_1 , O_2 , ..., O_n les n objectifs. Étudions maintenant comment on peut mesurer l'optimalité d'un produit relativement à un objectif donné.

III.1.2. Mesure de la conformité à un objectif

III.1.2.1. Situation du problème

Rappelons brièvement le contexte expérimental. Lorsqu'un produit P est fabriqué, avec un jeu d'entrées $J=(e_1,e_2,...,e_p)$, on procède à la mesure des valeurs $s_1,\ s_2,\ ...\ s_n$ des sorties. Ces n valeurs numériques doivent permettre aux agents d'apprécier dans quelle mesure le produit P est conforme à l'objectif O_i ($i\in\{1,...,\omega\}$). Le terme « objectif » se distingue du terme « critère » par une nuance syntaxique : nous dirons ainsi « le produit P est conforme à l'objectif O_i » ou « le produit P satisfait au critère correspondant ».

Exemple dans le domaine des dépôts

Nous pouvons ainsi dire, pour qualifier un dépôt particulier formant un produit P:

- P est jugé selon le critère d'adhérence,
- la sortie est le pourcentage de carrés adhérents selon la norme d'adhérence D25 1075 [1] présentée au paragraphe I ;3.2.2.
 - l'objectif est la maximisation de ce pourcentage.

L'appréciation de la conformité de P à l'objectif O_i n'est possible que par la définition d'une mesure. Soit P un produit caractérisé par les valeurs des sorties s_1 , s_2 , ..., s_n . La **mesure de conformité** de P relativement à l'objectif O_i est une application qui au n-uplet $(s_1, s_2, ..., s_n)$ fait correspondre un élément d'un ensemble totalement ordonné, possédant un plus petit élément et un plus grand élément, correspondant aux deux cas extrêmes : l'objectif n'est pas du tout satisfait ou bien l'objectif est totalement satisfait.

Il existe de nombreux types de mesure de conformité. Nous pouvons les classer selon deux types opposés : les fonctions de coût mesurent l'écart du produit à l'optimalité, les fonctions de valorisation mesurent au contraire le niveau d'optimalité du produit.

III.1.2.2. Les fonctions de coût

Les **fonctions de coût** définissent une pénalité numérique $K_i(P)$ d'autant plus grande que le produit P est éloigné de l'optimalité pour l'objectif O_i ($i \in \{1,...,n\}$). La fonction $K_i(P)$ peut donc être considérée comme une nouvelle sortie qu'il faut minimiser. La méthode de **programmation par but** ($goal\ programming$), définie initialement par Charnes et Cooper [2] se

ramène ainsi à la minimisation de la distance (au sens le plus général du terme) qui sépare le produit du produit optimal dans l'espace des réponses [3].

III.1.2.3. Les fonctions de valorisation

Les fonctions de valorisation mesurent l'adéquation du produit par rapport à l'objectif. Ainsi, la **valorisation** notée V_i d'un produit par rapport à un objectif donné O_i se ramène à la définition d'une application de l'ensemble P des produits possibles dans un ensemble N_i totalement ordonné, possédant un plus petit et un plus grand élément :

$$V_i: P \rightarrow N_i$$
 $P \mapsto V_i(P)$

La valorisation $V_i(P)$ est représentative de l'adéquation du produit P à l'objectif O_i . Si cet objectif n'est pas du tout réalisé, $V_i(P)$ est égal au plus petit élément de N_i ; si cet objectif est parfaitement réalisé, $V_i(P)$ est égal au plus grand élément de N_i .

La lettre N est l'initiale de « note » : on peut considérer que la note est une appréciation d'un travail de toute nature. La fonction $V_i(P)$ peut donc être considérée comme une nouvelle sortie qu'il faut maximiser.

À un produit P considéré comme une tâche, on peut faire correspondre la valorisation $V_i(P)$ mesurant l'adéquation du travail par rapport à un critère i particulier. L'ensemble N_i des valorisations peut être par exemple :

- $\{0, 1, ..., 20\}$ (notation scolaire en France),
- { insuffisant, médiocre, moyen, bien, très bien } (notation qualitative),
- $\{a,b,c,d,e\}$ selon la norme d'adhérence D25 1075 présentée au paragraphe I.3.2.2, qui définit une valorisation d'un dépôt pour le critère d'adhérence,
- l'intervalle [0,1].

III.1.2.4. Valorisations normées d'un produit relativement aux divers objectifs

A priori, rien n'oblige le collège (regroupant les prescripteurs et les personnels du laboratoire de recherches, cf. paragraphe I.2.2) à définir un type unique de notation pour tous les objectifs. Il est ainsi possible qu'on définisse une grille de notation qualitative pour un objectif, et une grille quantitative pour un autre. Il est cependant plus pratique de considérer une situation homogène où tous les objectifs ont une grille de notation identique.

Soit P un produit, O_1 , O_2 , ..., O_{ω} les objectifs définis par les prescripteurs. Pour chaque objectif O_i , la mesure des valeurs de sortie permet de définir le niveau de satisfaction que P donne par rapport à O_i . Quel que soit $i \in \{1,...,\omega\}$, le niveau de satisfaction du produit relativement au i-ième objectif est un nombre compris entre deux valeurs : $V_i(P) \in [n_{\min}, n_{\max}]$ Il est possible de normer cette valorisation, c'est-à-dire de la remplacer par un nombre compris entre 0 et 1:

$$n \in [n_{\min}, n_{\max}] \Leftrightarrow \frac{n - n_{\min}}{n_{\max} - n_{\min}} \in [0, 1]$$

Dans le cadre d'une valorisation qui se ramène à une désirabilité (utilisée dans la méthode du simplexe), nous n'allons considérer que les valorisations individuelles numériques, continues et normées. Pour tout objectif O_i , une valorisation numérique continue et normée est une application qui, à un produit P donné fait correspondre $V_i(P) \in [0,1]$. Si $V_i(P) = 0$, le i-ième objectif n'est pas du tout réalisé par le produit P; si $V_i(P) = 1$, le i-ième objectif est parfaitement réalisé par le produit P.

III.1.2.5. Les divers types de valorisation

Dans la littérature, on trouve trois grands types de valorisation.

- Le premier type est la mesure de l'utilité du produit [4]. Cette approche, fondée sur les travaux des économistes Von Neumann et Morgenstern, définit une valorisation de nature économique basée sur la théorie de la valeur : elle mesure la qualité optimale du produit par sa valeur d'échange (au sens économique du terme).
- Le deuxième type est la mesure de la désirabilité. Cette notion, définie initialement en 1965 par Harrington [5], a été présentée dans le chapitre 1 (*cf.* paragraphe I.5.3) : la désirabilité est définie *a priori* par les prescripteurs.
- Le troisième type est la mesure d'une fonction d'appartenance au sous-ensemble flou des produits optimaux. Cette approche, utilisée par les concepteurs du multisimplexe [6], sera développée dans le paragraphe suivant (1.3).

Il apparaît que les termes note, valorisation, utilité, désirabilité et fonction d'appartenance ne sont pas utilisés dans le même contexte. Les concepteurs de la méthode du multisimplexe, Öberg et Warman, ne font d'ailleurs pas de distinction entre désirabilité et fonction d'appartenance [7]. Cependant, ces termes peuvent indifféremment être traités dans une même démarche théorique, pourvu que l'on s'astreigne à les définir dans l'intervalle [0,1]. C'est ce choix que nous ferons dans la suite de ce chapitre.

III.1.3. Traduction de la valorisation en termes de sous-ensembles flous

Nous allons présenter la notion de sous-ensemble flou et indiquer comment la valorisation $V_i(P)$ du produit P relativement à l'objectif O_i peut être considérée comme une fonction d'appartenance.

III.1.3.1. Les sous-ensembles flous

Les **sous-ensembles flous** ont été définis initialement par L. A. Zadeh [8]. Soit E un ensemble, A une partie de E ($A \subset E$). Soit x un élément quelconque de E. A est un sous-ensemble exact ($crisp\ set$) de E; il est donc possible, sans aucune ambiguïté, de dire si x est élément de A ou de son complémentaire $C_E^A = E$, A. La figure 1 illustre ces deux cas.

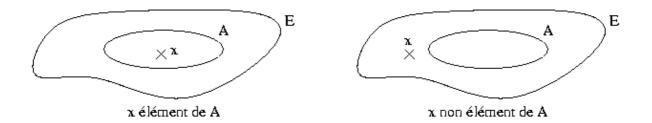


Figure I.1: A sous-ensemble exact (crisp subset) de E

Nous pouvons alors définir une fonction σ d'appartenance booléenne des éléments de E au sousensemble A. Pour tout $x: \text{si } x \in A$, alors $\sigma(x) = 1$; $\text{si } x \in E$, A, alors $\sigma(x) = 0$.

Nous allons maintenant définir un sous-ensemble flou ($fuzzy \ subset$) en considérant une fonction d'appartenance ($membership \ function$) prenant ses valeurs entre $0 \ et 1$. Soit E un ensemble. A est un sous-ensemble flou de E si on peut définir une fonction d'appartenance formant une application de E dans [0,1].

$$\sigma: E \rightarrow [0,1]$$
 $x \mapsto \sigma(x)$

 $\sigma(x)$ est la fonction d'appartenance de x au sous-ensemble flou A, ou le degré de vérité de l'affirmation : « x appartient au sous-ensemble flou A ».

- $\operatorname{si} \sigma(x) = 0$, il est certain que x n'appartient pas à A
- si $\sigma(x)$ est non nul mais proche de 0, x appartient faiblement à A
- si $\sigma(x)$ est proche mais non égal à 1, x appartient fortement à A
- $\operatorname{si} \sigma(x) = 1$, il est certain que x appartient à A.

Exemple dans le domaine des dépôts

Soit E l'ensemble des agents dans un laboratoire de recherches. Nous pouvons définir un sous-ensemble flou de E: soit A le sous-ensemble des personnes compétentes dans l'utilisation d'une machine d'évaporation sous vide par canon à électrons. Définissant quatre types d'agents. Un agent ii ne connaissant pas du tout la machine (i est l'initiale du mot « incompétent ») ne sait pas l'utiliser et $\sigma(ii)=0$; un agent cc utilisant quotidiennement la machine (c est l'initiale du mot « compétent ») ne commettra jamais d'erreur de manipulation et $\sigma(cc)=1$; un agent cc assez habitué à la machine pourra l'utiliser en moyenne neuf fois sans commettre la moindre erreur de manipulation et une seule fois en commettant une erreur donc $\sigma(c)=0,9$; un agent cc peu habitué à la machine pourra l'utiliser en moyenne deux fois sans commettre la moindre erreur de manipulation et huit fois en commettant une erreur donc $\sigma(i)=0,2$.

La figure 2 donne une représentation graphique d'un sous-ensemble flou en traçant des contours flous pour le sous-ensemble A.

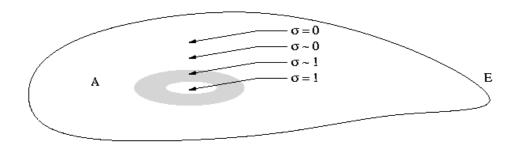


Figure III.2 : A sous-ensemble « flou » de E

III.1.3.2. Valorisation d'un produit et fonction d'appartenance

En conclusion, le terme « valorisation » défini au paragraphe 1.2.3 est synonyme du terme « fonction d'appartenance ». Ainsi, le réel $V_i(P)$ est la valeur de la **fonction d'appartenance** du produit P à l'ensemble des produits optimaux en regard de l'objectif O_i . Il est aussi possible de dire que $V_i(P)$ est le degré de vérité de l'affirmation : « P est un produit optimal pour l'objectif O_i ».

À ce stade du chapitre, nous avons défini les objectifs et précisé comment on peut mesurer le niveau de conformité d'un produit quelconque à chaque objectif. Nous allons finir cette première section du chapitre en présentant les principales méthodes d'optimisation des divers critères. Nous définirons d'abord l'optimalité au sens de Pareto, puis nous présenterons successivement les deux méthodes se ramenant à une ou plusieurs optimisations mono objectif.

III.1.4. Optimalité au sens de Pareto

III.1.4.1. Résumé et formulation du problème

Il importe de bien distinguer les différents jeux de nombres associés à chaque produit : les valeurs des entrées, les valeurs des sorties mesurées et les valeurs des valorisations relatives à chaque objectif. C'est pourquoi nous proposons ici un diagramme récapitulatif :

$$\begin{array}{c} \text{entr\'ee } E_1 \\ \vdots \\ \text{entr\'ee } E_p \end{array} \xrightarrow{\text{fabrication}} P \xrightarrow{\text{mesure}} \begin{cases} \text{sortie } S_1 & \xrightarrow{\text{calcul}} & \text{valorisation } \mathsf{V}_1(P) \\ & \vdots \\ \text{sortie } S_n & \xrightarrow{\text{calcul}} & \text{valorisation } \mathsf{V}_n(P) \end{cases}$$

Le laboratoire cherche à définir le ou les produits optimaux en regard de l'ensemble des n objectifs. Il semble donc naturel de chercher à comparer deux produits distincts P et P' à partir de leurs valorisations relatives à chaque objectif. Un rappel mathématique va nous permettre à la fois :

- de souligner la difficulté de ce problème,
- de définir la frontière de Pareto,
- d'introduire une notation pour la priorité des objectifs.

III.1.4.2. Ordre partiel et mise en évidence de la problématique

Soit E un ensemble muni d'une relation d'ordre notée°. Celle-ci est réflexive, transitive, antisymétrique, mais non nécessairement totale, c'est-à-dire que deux éléments quelconques de E ne sont pas nécessairement comparables par°. Un ordre non total est appelé un ordre partiel. Les produits caractérisés par leurs valorisations relatives aux différents objectifs ne peuvent être classés que selon une relation d'ordre partiel. Soient en effet deux produits P et P' dont les valorisations pour les objectifs O_1 et O_2 sont respectivement

$$\begin{cases} V_1(P) = 0.21 \\ V_2(P) = 0.67 \end{cases} et \begin{cases} V_1(P') = 0.55 \\ V_2(P') = 0.62 \end{cases}$$

P Satisfait mieux l'objectif O_2 que P', mais c'est le contraire pour l'objectif O_1 . Sans information complémentaire, il est donc impossible de comparer les deux produits. Nous mettons ainsi en évidence la principale difficulté de l'optimisation multicritère. Cette problématique étant posée, nous allons en donner la forme conventionnelle au paragraphe suivant.

III.1.4.3. La frontière de Pareto

Soit Pr l'ensemble de tous les produits fabricables et répondant aux contraintes imposées. On définit dans cet ensemble une relation d'ordre partiel : un produit P domine un autre produit P' si et seulement si $V_1(P) \ge V_1(P'),...,V_n(P) \ge V_n(P')$. On parle alors de relation de dominance large. Si une au moins des inégalités est stricte, on parle de dominance stricte.

Cette relation a permis à V. Pareto de définir un type général d'optimalité [9] : un produit P appartenant à l'ensemble Pr de tous les produits fabricables est **Pareto optimal** s'il n'existe aucun autre produit dans Pr qui domine P. Notons que cette définition a été énoncée historiquement en termes d'utilité. Nous pouvons donc dire qu'à partir d'un produit Pareto optimal, il est impossible de faire croître la satisfaction d'un critère sans dégrader celle d'un autre critère.

Il est rare que dans Pr un produit soit simultanément optimal pour tous les objectifs. Par suite, il existe un ensemble de produits Pareto optimaux. Plaçons-nous dans l'espace de représentation des valorisations ou des désirabilités, c'est-à-dire dans l'espace affine $[0,1]^n$; chaque produit y est représenté par un point dont les coordonnées sont ses valorisations respectives

$$P \begin{vmatrix} V_1(P) \\ \vdots \\ V_n(P) \end{vmatrix}$$

Pour simplifier, limitons-nous au cas où n=2. Chaque produit est alors représenté dans un plan par un point dont les coordonnées sont ses deux valorisations $V_1(P)$ et $V_2(P)$. Le produit idéal serait celui parfaitement conforme aux deux objectifs simultanément. Ses coordonnées seraient alors égales à 1, mais il n'est pas forcément possible de le fabriquer. De même, le pire produit aurait deux

coordonnées égales à 0. En traçant sur le plan l'ensemble des produits fabricables, on trace une représentation de Pr. Sur la figure 3, on distingue la frontière supérieure droite du domaine. Chaque point P sur cette ligne ne possède aucun voisin qui soit

- à droite sur la même ligne horizontale
- au dessus sur la même ligne verticale.

Par conséquent, P n'est dominé par aucun autre point de Pr, ce qui prouve que P est Pareto optimal. Cette ligne est donc formée des points Pareto optimaux. On l'appelle la frontière de Pareto.

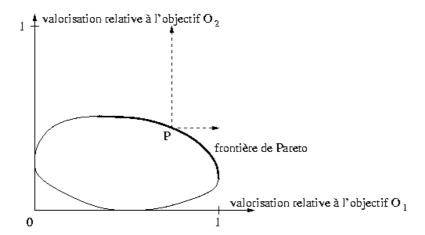


Figure III.3 : exemple d'ensemble des produits dans l'espace de représentation des valorisations et frontière de Pareto

La **frontière de Pareto** est l'ensemble des produits Pareto optimaux dans l'espace de représentation des valorisations. Elle forme une frontière supérieure de l'ensemble Pr des produits fabricables.

La frontière de Pareto est rarement réduite à un seul produit. L'optimisation multicritère doit donc donner la possibilité de sélectionner un produit optimal parmi tous les produits Pareto optimaux.

III.1.4.4. Présentation des trois familles d'optimisation multicritère

H. Meunier, dans sa thèse [10], propose de distinguer trois familles d'optimisation multicritère :

- les méthodes se ramenant à une ou plusieurs optimisations mono objectif ;
- les algorithmes génétiques à approche Pareto utilisant les critères de dominance pour opérer la sélection naturelle [11] ;
- et les algorithmes génétiques à approche non Pareto utilisant les objectifs indépendamment les uns des autres pour opérer la sélection naturelle [12].

Notre travail est centré sur la méthode d'optimisation itérative et monocritère du simplexe. Nous n'allons donc présenter que les méthodes de la première famille. Nous allons étudier d'abord les méthodes séquentielles, qui s'intéressent successivement à chaque objectif pris séparément, dans l'ordre de leur priorité. Nous étudierons ensuite les méthodes d'optimisation simultanée, par agrégation des valorisations.

III.1.5. Méthodes séquentielle, ε -contrainte, recherche tabou

III.1.5.1. Classement des objectifs

Dans la définition initiale du projet, il est fréquent que les objectifs soient simplement inventoriés. Comme il est souvent impossible de les satisfaire tous en même temps, les agents sont alors amenés à demander aux prescripteurs de préciser l'importance relative des différents objectifs. Le classement de priorité est la définition d'une suite des objectifs, décroissante au sens large (il

peut y avoir des $ex \ \alpha quo$): $O_1 \pm O_2 \pm ... \pm O_n$. La relation d'ordre $O_i \pm O_j$ signifie que l'objectif O_i doit être réalisé prioritairement à l'objectif O_j . L'objectif O_1 (et tous ses $ex \ \alpha quos$) est l'objectif le plus important; l'objectif O_n (et tous ses $ex \ \alpha quos$) est l'objectif le moins important.

Dans toute la suite et la fin de ce chapitre, nous considérerons que les n objectifs $O_1, ..., O_n$ sont classés, dans cet ordre, par priorité décroissante.

III.1.5.2. L'optimisation séquentielle

L'optimisation séquentielle est le principe consistant à optimiser les objectifs les uns après les autres, dans l'ordre décroissant de leur priorité : on optimise O_1 , puis O_2 , puis ...puis O_n .

Il importe de ne pas confondre l'optimisation

- itérative : chaque nouvelle tentative est faite après avoir obtenu le résultat de la précédente (c'est le cas du simplexe présenté au chapitre 1);
- et séquentielle : chaque objectif est optimisé après ceux qui lui sont prioritaires.

La méthode séquentielle n'est pas possible dans tous les cas. Imaginons en effet que l'optimisation de l'objectif O_1 ne soit possible que pour un jeu unique d'entrées $(e_1^*,...,e_p^*)$. Lorsqu'on réalise un produit avec ces valeurs pour les paramètres d'entrée, la sortie $S_1(e_1^*,...,e_p^*)$ est alors celle qui réalise le mieux l'objectif O_1 . Il n'est alors plus question de chercher à optimiser les autres objectifs. En effet, à ce jeu d'entrées correspond un unique produit ; on ne peut que **mesurer** les autres sorties $(S_2,...,S_n)$ et en aucun cas les **optimiser** sans changer les valeurs des entrées. Si elles correspondent à des valeurs optimales, ou presque optimales, le produit sera jugé satisfaisant ; sinon, seul le premier objectif sera satisfait.

L'optimisation séquentielle n'est donc adaptée qu'au cas où l'optimisation des objectifs successifs permet de définir non pas un unique jeu de paramètres d'entrée, mais plutôt des ensembles de solutions emboîtés. La figure 4 montre trois pavés emboîtés : le premier, en gris pâle, délimite les couples d'entrées optimisant le premier objectif (O_1) , le deuxième, en gris foncé, optimise en plus le deuxième objectif (O_2) , le troisième, en noir, optimise en plus des deux autres le troisième objectif (O_3) .

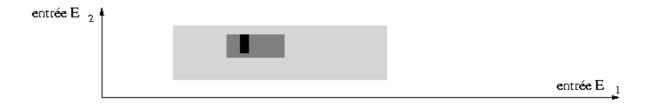


Figure III.4 : pavés emboîtés délimitant les couples d'entrée optimisant O_1 seulement (en gris pâle), O_1 et O_2 (en gris foncé) et O_1 , O_2 et O_3 simultanément (en noir).

L'optimisation séquentielle, quand son application est possible, permet de définir successivement :

- l'ensemble des solutions S_{Ol_1} rassemblant les jeux de paramètres d'entrée, à l'intérieur de l'espace des paramètres EP (cf. section I.2.4.5) qui permettent une optimisation de l'objectif O_1 ;
- l'ensemble Sol_2 , sous-ensemble de Sol_1 , rassemblant les jeux de paramètres d'entrée qui permettent une optimisation de l'objectif O_2 parmi ceux qui optimisent O_1 ;
- l'ensemble S_{Ol_3} , sous-ensemble de_{Sol_2} , donc de_{Sol_1} , rassemblant les jeux de paramètres d'entrée qui permettent une optimisation de l'objectif O_3 parmi ceux qui

optimisent O_1 et O_2 ;

• et ainsi de suite jusqu'à Sol_n qui rassemble les jeux d'entrée optimisant le dernier (dans l'ordre de priorité) objectif O_n parmi ceux qui satisfont de façon séquentielle tous les autres objectifs.

Cette suite décroissante $Sol_1 \supset Sol_2 \supset Sol_3 \supset ... \supset Sol_n$ risque de se réduire rapidement à un très petit nombre de solutions, voire à un singleton si l'optimisation de l'un des objectifs, O_i , n'admet qu'une seule solution. À partir de ce rang, les opérateurs n'ont plus aucune latitude pour optimiser les derniers objectifs. C'est pourquoi nous mettons en évidence une condition d'utilisation de la méthode d'optimisation séquentielle. L'optimisation séquentielle est bien adaptée au cas où simultanément :

- les objectifs les plus prioritaires correspondent à des impératifs incontournables : s'ils ne sont pas réalisés, il est inutile de chercher à optimiser les autres, car le produit sera certainement refusé par les prescripteurs ;
- le nombre d'objectifs est faible ;
- l'optimisation de chaque objectif donne un ensemble de solutions assez large pour permettre une optimisation significative de l'objectif suivant.

Pour s'affranchir de cette restriction des conditions d'application de la méthode séquentielle, deux méthodes alternatives ont été proposées : la méthode ε -contrainte et la méthode recherche tabou.

III.1.5.3. Méthodes alternatives à la méthode séquentielle

Dans la méthode ε -contrainte [13], l'opérateur choisit un objectif particulier, O_k par exemple. Il se fixe ensuite des seuils de valeur notés ε_i pour tous les autres objectifs O_i ($i \neq k$): ε_1 pour $O_1, \ldots, \varepsilon_{k-1}$ pour $O_{k-1}, \varepsilon_{k+1}$ pour $O_{k+1}, \ldots, \varepsilon_n$ pour O_n . L'opérateur doit chercher alors à maximiser la valorisation $V_k(P)$ en respectant les contraintes $V_1(P) \geq \varepsilon_1, \ldots, V_{k-1}(P) \geq \varepsilon_{k-1}, V_{k+1}(P) \geq \varepsilon_{k+1}, \ldots, V_n(P) \geq \varepsilon_n$. Il peut aussi procéder en cherchant à optimiser l'objectif O_k à l'intérieur de l'ensemble des produits vérifiant simultanément toutes les autres contraintes. Cette méthode doit être accompagnée d'une véritable stratégie de choix de l'objectif singularisé (O_k) et des niveaux ε_i ($i \neq k$). Dans le cas où l'objectif O_1 est nettement prioritaire devant les autres, il est possible de choisir un niveau minimal ε_i ($i \in \{2, \ldots, n\}$) identique pour tous les autres objectifs, d'autant plus faible que le nombre n d'objectifs est grand, puis de procéder à l'optimisation sous contrainte de O_1 .

La méthode de **recherche tabou** [14] forme un assouplissement de la méthode purement séquentielle. Détaillons les diverses étapes.

- L'objectif prioritaire O_1 est d'abord optimisé (c'est-à-dire qu'on maximise $V_1(P)$); on note v_1^* la meilleure valeur obtenue pour $V_1(P)$.
- On optimise ensuite l'objectif O_2 , le deuxième «plus prioritaire» en cherchant à ne pas trop dégrader la valorisation maximale obtenue pour O_1 : on définit une valeur v'_1 inférieure ou égale à v_1^* , par exemple $v'_1 = v_1^* \delta_1$ (δ_1 est le seuil de dégradation admise pour O_1). Pour fixer les idées, on peut prendre par exemple $v_1^* = 0.91$, $\delta_1 = 0.05$ d'où $v'_1 = 0.86$. On optimise alors O_2 (c'est-à-dire qu'on maximise $V_2(P)$) avec la contrainte $V_1(P) \ge v'_1$. On note v_2^* la meilleure valeur ainsi obtenue pour $V_2(P)$.
- On optimise ensuite l'objectif O_3 , le troisième << plus prioritaire>> en cherchant à ne pas trop dégrader les valorisations maximales obtenues pour O_1 et O_2 : on définit une valeur v'_2 inférieure ou égale à v_2^* , par exemple $v'_2 = v_2^* \delta_2$ (δ_2 est le seuil de dégradation admise

pour O_2). Pour fixer les idées, on peut prendre par exemple $v_2^* = 0.55$, $\delta_2 = \delta_1 = 0.05$ d'où $v_2' = 0.50$. On optimise alors O_3 (c'est-à-dire qu'on maximise $V_3(P)$) avec les contraintes $\begin{cases} V_1(P) \ge v_1' \\ V_2(P) \ge v_2' \end{cases}$ On note v_3^* la meilleure valeur ainsi obtenue pour $V_3(P)$.

• On réitère ainsi la méthode jusqu'au dernier objectif.

Les trois méthodes que nous venons de présenter (séquentielle, ε -contrainte et recherche tabou) nécessitent plusieurs optimisations, chaque optimisation monocritère nécessitant elle-même plusieurs manipulations et fabrications. Elles sont donc souvent très longues et coûteuses. Nous allons maintenant présenter la famille des optimisations simultanées.

III.1.6. L'optimisation simultanée

La méthode alternative à l'optimisation séquentielle est l'**optimisation simultanée** [15]. La démarche est la suivante : on construit un objectif unique regroupant l'ensemble des objectifs tout en prenant en considération leur importance relative. On doit, pour cela, définir une fonction unique de valorisation globale du produit V(P) en **agrégeant** les valorisations relatives à chaque objectif $V_i(P)$ ($i \in \{1,...,n\}$) et en tenant compte de leurs priorités respectives. C'est pourquoi on parle de **méthodes d'agrégation**. La plus naturelle des fonctions d'agrégation est la moyenne pondérée, mais nous verrons dans la section suivante (2) qu'il en existe d'autres. On procède alors à l'optimisation de l'objectif unique, c'est-à-dire à la maximisation de la valorisation globale du produit V(P).

Nous allons maintenant exposer les principales caractéristiques d'une fonction de valorisation agrégée, nous définirons les poids des divers objectifs et nous construirons, à partir des poids des objectifs et de leurs valorisations respectives, la valorisation globale d'un produit.

III.2. Définition d'une valorisation numérique agrégée

III.2.1. Propriétés générales d'une valorisation agrégée

III.2.1.1. Poids associés aux objectifs

Les **poids** associés aux objectifs O_1 , O_2 , ..., O_n sont des nombres réels positifs w_1 , w_2 , ..., w_n représentatifs de l'importance de chaque objectif. La lettre choisie, w, est l'initiale de l'anglais weight. En particulier :

- $w_i > w_j$ entraı̂ne que O_i est un objectif plus important que O_j ;
- Si l'objectif O_i a un poids nul $(w_i = 0)$, il n'a aucune importance, et il est probable qu'on l'éliminera de la liste des objectifs ;
- $\frac{w_i}{w_j} = \frac{w_k}{w_l}$ signifie que l'importance relative de O_i par rapport à O_j est identique à

celle de O_k par rapport à O_l (les poids w_i et w_l sont supposés non nuls).

Insistons sur la différence entre le classement de priorité et le classement d'importance. Si O_i est prioritaire par rapport à O_j , alors l'indice de satisfaction de O_j n'entre pas en compte lorsqu'on essaye de satisfaire O_i : on rejettera un produit tel que O_i n'est pas parfaitement satisfait et O_j pourtant pleinement satisfait ; il est alors possible que lorsque O_i est pleinement satisfait, O_j ne le soit plus du tout. En revanche, si l'importance de O_i est peu supérieure à celle de O_j (donc si $w_i > w_j$), on préférera certainement un produit tel que O_i n'est pas parfaitement satisfait et O_j

pleinement satisfait à un produit tel que O_i est pleinement satisfait et O_i pas du tout.

La détermination des poids est un problème délicat. Nous présenterons les méthodes usuelles ainsi qu'une méthode originale dans le chapitre 4.

III.2.1.2. Définition générale d'une valorisation agrégée

À partir des valorisations individuelles et des poids de chaque objectif, nous pouvons construire une notion importante : la **valorisation globale** d'un produit au regard des objectifs O_1 , O_2 , ..., O_n affectés des poids w_1 , w_2 , ..., w_n est une application de l'ensemble Pr des produits possibles dans un ensemble N totalement ordonné, possédant un plus petit et un plus grand élément :

$$V: Pr \rightarrow N$$

$$P \mapsto V(P)$$

telle que la valorisation V(P) est une fonction des n valorisations individuelles :

$$V(P) = V(V_1(P), V_2(P), ..., V_n(P))$$

Cette fonction doit vérifier les deux propriétés suivantes :

- toutes choses égales par ailleurs, l'accroissement de la satisfaction d'un objectif fait croître la satisfaction globale ; mathématiquement, on dit que V est une fonction croissante de chacune de ses variables V_i (hypothèse de **monotonie**).
- si le poids d'un objectif est supérieur à celui d'un autre, un accroissement comparable de la satisfaction de l'un de ces deux objectifs donnera un accroissement global plus important dans le premier cas que dans le second.

Cette définition très générale laisse ouverte la possibilité d'une notation qualitative. Nous pouvons aussi remarquer que la pondération n'a de sens réel que si les ensembles de valorisations sont tous identiques. En effet, il faut pouvoir comparer l'augmentation de deux indices de satisfaction pour pouvoir comparer leur influence relative sur l'indice de satisfaction global. Dans le cas de valorisations prenant des valeurs dans un intervalle numérique, nous allons donner dans le paragraphe suivant plusieurs exemples concrets de fonction de valorisation globale.

D'autres propriétés ont été proposées par Fodor et Roubens [16] d'une part, par Grabisch, Orlovski et Yager [17] d'autre part. Dans le cas où toutes les valorisations prennent leurs valeurs dans l'intervalle [0,1], nous pouvons citer en particulier :

- l'unanimité pour les valeurs extrêmes : V(0,0,...,0) = 0 et V(1,1,...,1) = 1 ;
- la **continuité** : V est une fonction continue en chaque variable ;
- le **compromis** : $\min_{i \in \{1,2,...,n\}} V_i(P) \le V(V_1(P), V_2(P), ..., V_n(P)) \le \max_{i \in \{1,2,...,n\}} V_i(P)$

III.2.2. Définition d'une valorisation numérique pondérée

Nous allons étudier, dans cette section, les fonctions de valorisation numérique, dans le cas où la valorisation de chaque objectif est elle-même une valeur numérique variant continûment dans un intervalle. Le terme "valorisation" attribue à tout produit P une note dans un ensemble quelconque. Nous ne nous intéressons maintenant qu'aux valorisations numériques. Cette locution est lourde et inusitée. Nous nous conformons donc, à partir de ce paragraphe, au vocabulaire d'usage et ne parlerons plus que de **désirabilité**. Comme nous l'avons remarqué à la fin du paragraphe 1.2.5, la désirabilité est équivalente à la fonction d'appartenance au sous-ensemble flou des produits optimaux.

III.2.2.1. Hypothèses de travail

Il est utile de rappeler ici les notations et hypothèses de travail pour faciliter la suite de la construction. Soit P un produit, O_1 , O_2 , ..., O_n les objectifs définis par les prescripteurs. Nous appelons désirabilités du produit P relativement aux objectifs O_1 , ..., O_n les grandeurs

normées $V_1(P)$, ..., $V_n(P)$, toutes ramenées dans [0,1]. $V_i(P)$ mesure le niveau de conformité du produit P à l'objectif O_i , ou le niveau de satisfaction de P au i-ième critère ; plus $V_i(P)$ est proche de 0, moins P est satisfaisant pour cet objectif, plus $V_i(P)$ est proche de 1, plus P est satisfaisant pour cet objectif. Chaque objectif O_i est affecté d'un poids, ou coefficient de pondération w_i qui indique son importance dans le projet.

III.2.2.2. La fonction générique de Scott et Antonsson

Soit P un produit quelconque. Pour tout objectif O_i ($i \in \{1,...,n\}$), notons $d_i = V_i(P)$ la désirabilités normée (élément de[0,1]) du produit au regard du i-ième objectif. Nous cherchons à définir une désirabilité globale vérifiant la définition globale donnée au paragraphe 2.1. Otto et Antonsson ont énoncé les propriétés mathématiques que doit vérifier une telle fonction agrégative [18], et Scott et Antonsson ont établi une forme générique de fonctions convenant à ces exigences [19]: la **fonction générique agrégative** V définissant une désirabilité globale à partir des désirabilités individuelles s'écrit :

$$V(P) = \left(\frac{w_1 \cdot d_1^s + ... + w_n \cdot d_n^s}{w_1 + ... + w_n}\right)^{1/s}$$

où $s \in \overline{R}$ (cette notation indique que s peut prendre toute valeur réelle, mais aussi être égal à $-\infty$ ou $+\infty$) est appelé le **niveau de compensation**.

Cette fonction générique a l'avantage de pouvoir représenter simultanément une grande variété de fonctions agrégées de désirabilité. Le coefficient s peut être considéré comme un curseur : pour certaines valeurs particulières $(-\infty, 0, 1, +\infty)$, la fonction générique s'identifie à des fonctions simples que nous détaillerons dans le paragraphe suivant.

Scott a établi une importante propriété [20] : pour tout point Pareto optimal, il existe un jeu de poids $(w_1,...,w_n)$ et un niveau de compensation s qui sélectionnent ce point comme étant l'optimum du problème. Par conséquent, cette fonction générique est particulièrement bien adaptée à un problème d'optimisation multi objectif dans le cadre que nous nous sommes fixé dans cette thèse. En effet, si les prescripteurs du projet ont bien défini le cahier des charges, et si leur conception du produit optimal est bien arrêtée, il est certainement possible de l'exploiter pour déterminer les valeurs des poids. Quant à la valeur de s, nous allons montrer dans le paragraphe suivant que la valeur 0 est la mieux adaptée dans le milieu industriel.

III.2.2.3. Fonctions agrégatives de référence

Le choix de s dans \overline{R} permet de retrouver quatre fonctions agrégatives de référence. Nous allons d'abord les identifier, puis nous justifierons l'appellation donnée à ce réel. La justification mathématique de la forme que prend la fonction générique pour les quatre valeurs de s est donnée dans l'annexe D.

- $[s = -\infty]$: dans ce cas, la fonction générique s'identifie à l'opérateur « minimum ». La valeur du produit P est égale à la plus petite des désirabilités associées aux différents objectifs: $V(P) = \min_{i \in \{1, ..., n\}} d_i$
- [s=0]: dans ce cas, la fonction générique s'identifie à la moyenne géométrique pondérée des désirabilités associées aux différents objectifs:

$$V(P) = \left(d_1^{w_1} ... d_n^{w_n}\right)^{1/(w_1 + ... + w_n)}$$

• [s=1]: dans ce cas, la fonction générique s'identifie à la moyenne arithmétique pondérée des désirabilités associées aux différents objectifs:

$$V(P) = \frac{w_1 \cdot d_1 + ... + w_n \cdot d_n}{w_1 + ... + w_n}$$

• $[s = +\infty]$: dans ce cas, la fonction générique s'identifie avec l'opérateur

« maximum ». La valeur du produit P est égale à la plus grande des désirabilités associées aux différents objectifs : $V(P) = \max_{i \in \{1,\dots,n\}} d_i$.

Illustrons ces quatre formes dans le cas où n = 2.

Exemple numérique

Un produit est mesuré selon deux critères. Les poids des deux objectifs associés sont choisis : $w_1 = 1$ et $w_2 = 2$. Les désirabilités d'un produit P particulier sont respectivement $d_1 = 0,30$ et $d_2 = 0,85$. La désirabilité accordée à ce produit dépend de la valeur de s comme l'indique le tableau 3.1.

valeur de s expression
$$V(P)$$

 $-\infty$ min(0,30;0,85) 0,30
0 $(0,30^1 \times 0,85^2)^{1/3}$ 0,60
1 $\frac{1 \times 0,30 + 2 \times 0,85}{3}$ 0,67
 $+\infty$ max(0,30;0,85) 0,85

Tableau I.1 : exemple numérique des diverses valorisations numériques d'un produit selon la valeur du niveau de compensation *s*

Commentons brièvement ces quatre fonctions de référence.

- $[s = -\infty]$: fonction « min ». On accorde dans ce cas une attention à tous les objectifs, sans exception, et la désirabilité du produit est égale à celle associée au critère le moins bien satisfait. Dans la démarche d'optimisation, on cherche donc à faire progresser en priorité la satisfaction la plus basse, sans chercher à faire progresser les plus hautes.
- [s=0]: fonction moyenne géométrique. On considère tous les objectifs en tenant compte de leurs poids respectifs. La particularité de la moyenne géométrique est que la nullité de l'une au moins des désirabilités entraîne celle de la désirabilité globale. Par suite, la moyenne géométrique conduit à rejeter un produit pour lequel l'un des objectifs n'est pas du tout réalisé, même si tous les autres le sont parfaitement. Cette propriété nous semble fondamentale pour un projet technique: la nullité de la désirabilité globale forme une alerte qui prévient les agents qu'un objectif pose problème. Il est alors envisageable de rediscuter le cahier des charges avec les prescripteurs, et d'assouplir éventuellement l'objectif en question.
- [s=1]: fonction moyenne arithmétique. Cette fois là aussi, on prend en compte tous les objectifs et leurs poids respectifs. Mais la moyenne arithmétique ne s'annule pas quand l'une des désirabilités est nulle.
- $[s = +\infty]$: fonction « max ». Cette fonction est adaptée au cas où la satisfaction optimale d'un seul des objectifs suffit à obtenir une désirabilité globale maximale du produit, quelle que soit celle des autres objectifs. Dans la démarche d'optimisation, tout se passe comme si on ne se préoccupait pas des objectifs les plus difficiles à réaliser, indépendamment des poids.

•

s est appelé niveau de compensation (*trade-off* en anglais, dont une autre traduction possible est « coefficient d'arbitrage ») car son choix permet justement d'infléchir la recherche vers l'un de ces quatre types de fonctions de référence.

Pour illustrer la différence entre moyenne géométrique et moyenne arithmétique, on peut faire référence à un système de notation pour un concours comportant plusieurs épreuves affectées

de coefficients. Si le zéro est éliminatoire, il est envisageable d'effectuer une moyenne géométrique. Sinon, une moyenne arithmétique laisse la possibilité de rattraper un zéro dans une épreuve par de très bonnes notes dans les autres.

Nous ne considérerons, dans la suite, que le cas s=0, la désirabilité du produit étant alors la moyenne géométrique pondérée des différentes désirabilités. Ce choix est celui réalisé par l'algorithme du multisimplexe, que nous allons présenter dans la section suivante (3).

D'autres choix sont possibles. Ainsi, dans le domaine de la chimie, on utilise couramment une moyenne arithmétique pondérée, appelée **fonction de réponse chromatographique** (*Chromatographic Response Function* en anglais, ou CRF) [21, 22, 23]. Les objectifs sont alors la somme des résolutions (notée RS), le nombre de pics (noté ici π) et l'écart de temps entre celui de l'analyse (noté t_m) et celui de montée du composé le plus long (noté t_T); la fonction agrégée s'écrit alors $CRF = RS + a\pi + b(t_m - t_T)$, a et b étant des coefficients de pondération.

III.2.2.4. Normalisation des poids dans la moyenne géométrique

Soit P un produit, w_1 , ..., w_n les poids et $d_1 = V_1(P)$, ..., $d_n = V_n(P)$ les désirabilités associées aux différents objectifs. Nous avons décidé de retenir la fonction agrégée de type moyenne géométrique pondérée : $V(P) = \left[d_1^{w_1}...d_n^{w_n}\right]^{1/(w_1+...+w_n)}$.

Nous pouvons noter que cette définition de la désirabilité globale à partir des désirabilités individuelles correspond bien à celle utilisée par Derringer et Suich [24]. Posons $w'_i = \frac{w_i}{\sum_{i=1}^n w_i}$. Nous pouvons écrire

$$V(P) = \prod_{i=1}^{n} d_{i}^{W_{i}/(\sum_{i=1}^{n} W_{i})} = \prod_{i=1}^{n} d_{i}^{W'_{i}}$$

Les poids w'_i sont donc équivalents aux poids w_i (la fonction de valorisation est inchangée) mais leur somme vaut 1 : les **poids normés** w'_i sont ainsi définis de façon unique à partir des poids w_i et leur somme est égale à 1.

Nous allons maintenant présenter l'algorithme du multisimplexe, qui forme une synthèse entre le simplexe présenté au chapitre 1 et la fonction agrégée de type moyenne géométrique pondérée ramenant un problème multicritère à l'optimisation de cette désirabilité globale.

III.3. Le multisimplexe

III.3.1. Principe de l'algorithme

Le multisimplexe est une méthode d'optimisation itérative d'un projet comportant un ou plusieurs objectifs. Cette méthode est basée sur le double principe suivant :

- l'optimisation itérative utilise la méthode du simplexe présentée au chapitre 1 ;
- les objectifs sont optimisés en maximisant la désirabilité globale, fonction agrégée du type moyenne géométrique pondérée (*cf.* paragraphe 2.2.4) des désirabilités (*cf.* paragraphe 1.2.5) associées à chaque objectif (*cf.* paragraphe 1.1.2).

Le multisimplexe peut donc être utilisé comme un simplexe lorsqu'on cherche à optimiser un unique objectif. La désirabilité globale est alors égale à la désirabilité associée à cet objectif.

III.3.2. Le logiciel Multisimplex

L'algorithme du multisimplexe fait l'objet d'un logiciel commercial : *Multisimplex* [6]. Il est utilisé par de nombreux laboratoires cherchant l'assistance d'un outil d'aide à l'optimisation expérimentale. En particulier, le logiciel donne la possibilité de procéder à l'optimisation des problèmes de formulation chimique. Dans ce cas, une contrainte supplémentaire doit être réalisée : la somme des pourcentages (massiques, volumiques ou molaires) des constituants de la solution doit être égale à 1. Parmi de nombreux exemples, nous pouvons citer deux articles présentant des

utilisations de ce logiciel dans le domaine de la chimie.

- Zuolaga, Etxebarria et Fernandez [25] utilisent le multisimplexe comme un simplexe pour optimiser l'extraction des phénols (toxiques) d'échantillons de sols pollués. Les entrées sont la durée de chauffage, la température, la durée de purge et la concentration en *NaCl*; la sortie est l'aire totale des pics d'absorption en chaque composé phénolique dans le spectre de la solution soutirée.
- Ferreiros, Iriarte et Alonso [26] utilisent le multisimplexe pour optimiser une méthode de séparation et de dosage de l'eprosartan dans le plasma humain (méthode SPE-HPLC-UV, de type chromatographie en colonne). Les six entrées sont les trois concentrations en éluants (solution chimique introduite au bas de la colonne chargée de soutirer l'eprosartan et de le véhiculer jusqu'à la sortie de la colonne), la concentration en eau, la température de la colonne et le débit ; les trois sorties sont (S_1) l'aire totale des pics d'absorption en eprosartan dans le spectre de la solution soutirée (mesure de quantité de produit, poids $w_1 = 1$), (S_2) la séparation angulaire du pic chromatographique (mesure de pureté, poids $w_2 = 1$) et (S_3) la durée de rétention de l'eprosartan dans la solution soutirée (mesure de l'aptitude de l'éluant à fixer l'eprosartan, poids $w_3 = 0,67$).

Nous avons rédigé un tutorial pour le logiciel Multisimplex : il est reproduit dans l'annexe E. Nous ne donnons ici que les grandes lignes du programme.

- Dans un premier temps, l'utilisateur est invité à choisir entre une optimisation simple (les sorties sont indépendantes les unes des autres) ou celle d'une formulation chimique (la somme des fractions molaires ou massiques est égale à 1).
- L'utilisateur définit ensuite les entrées, en indiquant leur unité, les bornes (min, max) de leur ensemble de variation et le pas de réglage.
- L'utilisateur définit ensuite les sorties. Pour chacune d'entre elles, il choisit :
 - le type d'optimisation (minimisation, cible, maximisation);
 - les valeurs clés telles que nous les avons définies dans le paragraphe I.5.3, formant les bornes de la fonction de désirabilité (s_{\min} et s_{\max} pour une minimisation ou une maximisation, s_{\min} , s_{cible} et s_{\max} pour la recherche d'une valeur cible);
 - le coefficient de déformation R permettant d'ajuster le caractère large ou aigu de l'optimisation (cf. chapitre 1, figure I.13);
 - le poids affecté à l'objectif correspondant.
- Les fonctions de désirabilité associées aux différents objectifs sont ainsi ajustées. Notons que le logiciel ne permet pas de définir d'objectifs couplant plusieurs réponses comme nous les avons définis au paragraphe 1.1. La désirabilité globale, ou fonction d'appartenance au sous-ensemble flou des produits optimaux (les auteurs du logiciel utilisent la seconde terminologie) est définie par la moyenne géométrique des désirabilités pondérée par les poids.
- La procédure du simplexe peut commencer. L'une des particularités du multisimplexe est qu'il laisse à l'utilisateur la pleine liberté de choisir, à chaque étape, d'effectuer la manipulation avec les valeurs des entrées suggérées par le logiciel ou avec les valeurs de son choix. Nous utiliserons cette souplesse du programme pour proposer une méthode de campagne de manipulations dans le chapitre 5 de cette thèse. En particulier, le logiciel propose à l'utilisateur de choisir entre :
 - un simplexe initial en coin (cf. chapitre 1, I.5.5)
 - ou un simplexe initial tourné (cf. chapitre 1, I.5.5)
 - ou un simplexe initial libre dans le cas où le laboratoire a déjà effectué un nombre suffisant d'essais préalables dont il désire exploiter les résultats.
- Le logiciel énumère les essais pour chaque sommet du simplexe initial, l'utilisateur est invité à entrer pour chaque essai les valeurs mesurées des sorties. Le logiciel récapitule à chaque étape les essais déjà effectués dans un tableau en faisant apparaître les valeurs des entrées, celles des sorties, celles des désirabilités associées aux sorties et la valeur de la désirabilité globale. À la fin de cette étape, le simplexe initial est acquis.

- L'utilisateur est invité à choisir la méthode classique (*cf.* chapitre 1, I.5.6) ou la méthode modifiée du simplexe (*cf.* chapitre 1, I.5.7).
- Le logiciel applique ensuite la méthode du simplexe en cherchant à maximiser la désirabilité globale. Nous ne détaillons pas ici les étapes correspondantes, qui ont été décrites et commentées au chapitre 1 dans la section I.5.
- Le logiciel permet à l'utilisateur de suivre l'évolution de la désirabilité globale dans une fenêtre dédiée, affichant le graphique des variations de sa valeur en fonction du numéro de l'essai (cf. chapitre 1, figure I.17 (b)). Cette courbe est considérée comme un argument convaincant formant une preuve que l'optimum est atteint. Elle est couramment reproduite dans les articles décrivant une optimisation grâce à *Multisimplex*. Ainsi, Sanz, de Diego, Raposo et Madariaga montrent sur la figure 2 à la page 262 de leur article un profil de variation de la fonction d'appartenance prouvant la convergence de l'algorithme [27]. Cette courbe, reproduite sur la figure 5, fait apparaître une stabilisation de cette fonction avec six points consécutifs de désirabilité globale sensiblement égale à 0,80, correspondant à un très bon niveau d'analyse des espèces mercureuses dans une solution.

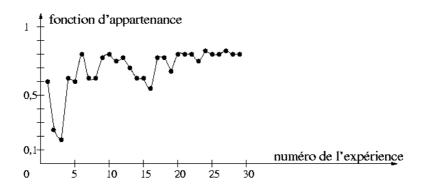


Figure III.5 : courbe d'évolution de la désirabilité dans le cas de l'optimisation réalisée par Sanz et ses collaborateurs

• L'algorithme s'arrête de lui-même dans le cas du simplexe basique, ou peut être arrêté à toute étape par l'utilisateur lorsque la désirabilité obtenue lui semble suffisante. Une réévaluation d'un sommet (permettant la vérification d'un résultat particulier) est possible à toute étape.

III.3.3. Application du multisimplexe à une optimisation dans le domaine du filtrage micro-onde

Nous allons maintenant présenter un exemple d'application du multisimplexe à l'optimisation d'un filtre passe-bande réalisé en technologie microruban. Dans le premier paragraphe, nous présenterons sommairement l'aspect expérimental de l'étude ; dans le deuxième, nous décrirons une méthode d'optimisation originale que nous avons développée ; dans le troisième, nous définirons le problème d'optimisation ; dans le quatrième paragraphe, nous présenterons et commenterons les résultats de l'optimisation.

III.3.3.1. Présentation de l'étude [28]

Les filtres planaires utilisant la technologie supraconductrice sont étudiés depuis une dizaine d'années à l'Institut XLIM. Une étude récente concerne les filtres hyperfréquences utilisés dans les répéteurs des satellites de télécommunications, ayant des contraintes très sévères au niveau du gabarit. Nous avons travaillé sur le rapport de stage de deux étudiants de l'ENSIL, Julien Pailloux et Fiffamen Houndonougbo, intitulé « Optimisation de la conception de filtres planaires supraconducteurs dans l'objectif de faciliter leur réglage après fabrication », projet soutenu en mai 2007. Une couche supraconductrice de *YBaCuO* de 600 nm d'épaisseur est déposée sur un substrat de *LaAlO*₃ de 520 μ m d'épaisseur, puis des résonateurs ayant la forme d'une croix sont gravés,

comme on peut le voir sur la figure 6(a). L'ensemble est refroidi par de l'azote liquide en dessous de la température critique de supraconductivité du matériau *YBaCuO* qui est de l'ordre de 85 K pour fonctionner correctement.

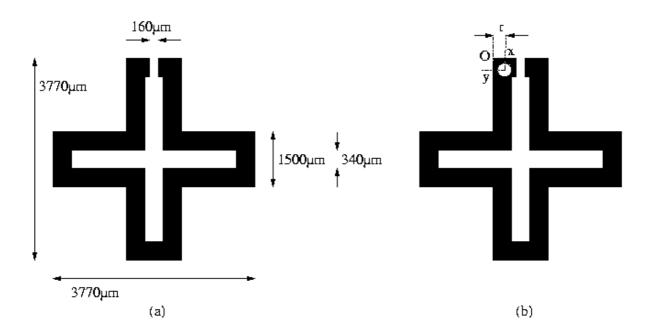


Figure III.6 (a) : résonateur planaire supraconducteur sans trou ; (b) résonateur planaire supraconducteur avec trou réalisé par ablation laser

La modélisation et l'optimisation électromagnétique sont bien maîtrisées, mais on observe un décalage fréquentiel entre la valeur de la fréquence centrale attendue et la fréquence effectivement mesurée. Ce décalage a été expliqué par les imprécisions expérimentales dans l'ajustement de la hauteur du substrat et dans le procédé de gravure du circuit. Le décalage relatif de fréquence est de l'ordre de 0,1%. On cherche donc à accorder le résonateur, c'est-à-dire à modifier sa fréquence pour la rendre la plus proche possible de la valeur de consigne. Une technique, proposée par Parker, Goodyear, Ellis et Humphreys [29], développée à XLIM, plus particulièrement par Stanis Courrèges dans sa thèse de doctorat [30], est la réalisation d'un trou cylindrique dans le dépôt (voir figure 6 (b)) grâce à une ablation laser. L'augmentation de la fréquence de résonance mesurée entre le résonateur initial non troué et le même résonateur troué par ablation laser est suffisamment importante pour envisager d'accorder les résonateurs grâce à cette technique.

La taille et la position du trou ont été identifiées comme les facteurs principaux du problème. Il faut donc développer une méthode d'optimisation pour déterminer, à partir des caractéristiques expérimentales mesurées sur un résonateur donné, la taille et la position du trou.

III.3.3.2. Présentation de la méthode d'optimisation

Il n'est pas possible de réaliser l'optimisation par une succession d'essais expérimentaux. En effet, le résonateur étudié est unique, car son décalage fréquentiel est justement imputable à l'imprécision des techniques de fabrication. Un autre résonateur fabriqué aura donc une fréquence de résonance différente. Mais dans le domaine des filtres planaires hyperfréquences, on dispose de logiciels de simulation très précis, en particulier le logiciel *Momentum* utilisé par les chercheurs de XLIM pour la conception. Ce logiciel permet justement de simuler le comportement électromagnétique du résonateur dans lequel on a réalisé un trou cylindrique. La taille et le diamètre du trou peuvent être ajustés avec une précision du micromètre. Celle-ci correspond à la précision acceptable dans la technologie de l'ablation laser. Les autres paramètres de la simulation sont les caractéristiques géométriques et électromagnétiques du substrat et du supraconducteur (*YBaCuO*). Un résonateur sorti de la chaîne de fabrication est soumis à un ensemble de tests : on mesure

l'épaisseur du substrat, les dimensions de la croix, la fréquence de résonance et le facteur de qualité lié à la bande passante à −3 dB. La fréquence mesurée est supposée inférieure à la fréquence de consigne. Nous proposons la méthode d'optimisation suivante.

- Dans le logiciel *Momentum*, on ajuste les caractéristiques d'un résonateur sans trou virtuel correspondant le plus fidèlement possible au résonateur étudié, de telle sorte que la fréquence de résonance (simulée) corresponde exactement à celle du résonateur réel (mesurée).
- On procède à une optimisation des caractéristiques du résonateur par la méthode du simplexe : les entrées sont la position et la taille du trou, les sorties sont la fréquence et la bande passante à -3 dB du résonateur. Les valeurs des sorties sont obtenues par simulation (utilisation du logiciel *Momentum*).
- À l'optimum, la fréquence de résonance calculée par simulation doit être la plus proche possible de la fréquence de consigne et la bande passante à -3 dB la plus étroite possible pour avoir un facteur de qualité le plus élevé possible. On note la position et la taille du trou correspondantes.
- On réalise alors le trou par ablation laser dans la couche du résonateur réel en respectant la position et la taille obtenues par optimisation simulée.
- On valide l'optimisation en mesurant expérimentalement l'accord entre la fréquence de résonance mesurée sur le résonateur troué et la fréquence de consigne.

III.3.3.3. Définition du problème d'optimisation

Nous cherchons à déterminer la taille et la position du trou. Les trois entrées (dans les notations que nous avons utilisées, p=3) sont donc :

- E_1 : abscisse x du centre du trou, exprimée en micromètres (μ m);
- E_2 : ordonnée y du centre du trou, exprimée en micromètres (μ m);
- E_3 : rayon r du trou, exprimé en micromètres (μ m).

Le but est l'optimisation fréquentielle du filtre. Les deux sorties (dans les notations que nous avons utilisées, n=2) sont donc :

- S_1 : fréquence de résonance exprimée en gigahertz (GHz);
- S_2 : largeur de la bande passante, exprimée en gigahertz (GHz).

Nous avons choisi arbitrairement les contraintes d'optimisation suivantes. Le filtre sera optimisé si la fréquence de résonance est très proche de la fréquence de consigne, soit 4,00900 GHz, et si le filtre est le plus sélectif possible, c'est-à-dire si la bande passante est la plus faible possible. L'optimisation est donc la réalisation des deux objectifs suivants :

- O_1 : rendre s_1 la plus proche possible de la valeur cible $f_{cible} = 4,00900$ GHz
- O_2 : minimiser s_2 .

On accorde une importance beaucoup plus grande à l'accord entre la fréquence de résonance et la valeur cible qu'à l'étroitesse de la bande passante, dont les études préalables ont montré qu'elle varie faiblement ; on a donc choisi les poids normés suivants :

- poids de O_1 : $W_1 = 0.80$
- poids de O_2 : $W_2 = 0.20$.

Enfin, les profils des fonctions de désirabilité ont été choisis en fixant pour chacun des objectifs des bornes admissibles et une valeur du coefficient de déformation R traduisant le caractère aigu ou large de l'optimisation. Ils sont reproduits sur la figure 7. On a choisi (toujours arbitrairement) :

- $R_1 = 3$ pour traduire l'exigence aiguë de l'accord entre la fréquence du résonateur troué et la fréquence de consigne, $s_{1 \, \text{min}} = 4,00600$ GHz et $s_{1 \, \text{max}} = 4,01000$ GHz délimitant l'intervalle (dissymétrique de part et d'autre de f_{cible}) des valeurs admissibles pour la fréquence (voir figure 7(a));
- $R_2 = 1$ pour traduire qu'on cherche seulement à se prémunir d'un accroissement

important de la bande passante sans chercher à la rendre très proche de zéro, $s_{2 \text{ max}} = 0,00100$ GHz délimitant la valeur maximale admissible de la bande passante (voir figure 7(b)).

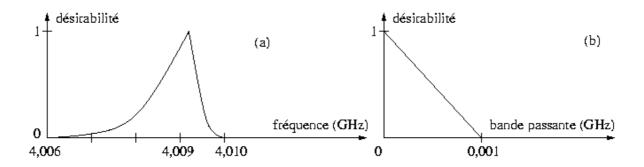


Figure III.7 (a) : fonction de désirabilité de la fréquence ($R_1=3$) ; (b) fonction de désirabilité de la bande passante ($R_2=1$)

III.3.3.4. Résultats de la simulation réalisée grâce à Multisimplex

L'optimisation comportant trois entrées, le simplexe initial est un tétraèdre dont les quatre sommets ont été calculés par *Multisimplex* autour du point central arbitrairement choisi :

$$x = 200 \ \mu m, \ y = -200 \ \mu m, \ r = 120 \ \mu m$$

L'étude a été menée en effectuant 22 simulations au total ; les résultats sont présentés dans le tableau 2.

essai	X	У	r	f	Δf	désirabilité
$(\mu \mathrm{m})(\mu \mathrm{m})(\mu \mathrm{m})$ (GHz) (GHZ)						
1	190	-190	110	4,006583	0,000208	3 0,1166
2	190	-210	130	4,007736	0,000202	2 0,4014
3	210	-210	110	4,006604	0,000208	3 0,1201
4	210	-190	130	4,007764	0,000194	4 0,4118
5	217	-217	137	4,007935	· ·	,
6	230	-230	150	4,009097	0,000195	5 0,7528
7	210	-210	163	4,011139	0,000194	1 0
8	210	-210	123	4,007329	· ·	,
9	243	-210	139	4,008306	0,000209	9 0,6138
10	245	-210	156	4,009743	0,000212	2 0,0043
11	219	-210	131	4,007639	0,000222	2 0,3677
12	251	-243	150	4,009208	0,000209	9 0,5576
13	264	-245	162	4,009866	0,000218	3 0,0010
14	230	-219	139	4,008306	0,000209	9 0,6138
15	218	-196	135	4,008080	0,000214	1 0,5224
16	243	-231	146	4,008583	0,000222	2 0,7330
17	247	-228	151	4,009076	0,000223	3 0,7859
18	256	-233	157	4,009500	0,000200	0,1981
19	237	-249	159	4,010139	0,000198	3 0
20	242	-220	144	4,008687	0,000216	6 0,7833
21	236	-221	151	4,009167	0,000209	0,6248
22	241	-128	147	4,008611	0,000222	2 0,7459

Tableau III.2 : tableau récapitulatif de l'optimisation de l'accord d'un résonateur par la méthode du multisimplexe

La meilleure désirabilité (0,7859) a été obtenue au dix-septième essai. On peut constater qu'une désirabilité comparable a été obtenue dès le sixième point. L'optimisation a été interrompue au vingt-deuxième essai car la désirabilité obtenue était pour la cinquième fois supérieure à 0,70 (5 est strictement supérieur au nombre 3 d'entrées, ce qui rend légitime l'arrêt à ce stade), sans dépasser la valeur 0,7859 obtenue au dix-septième essai.

On peut tirer de cette étude les conclusions suivantes :

- La largeur de la bande passante varie très peu. Sa valeur reste au voisinage de 200 kHz. C'est ce qui explique que la désirabilité maximale atteint une valeur maximale ne dépassant pas 0,80.
- La valeurs du rayon du trou pour les essais dont la désirabilité est supérieure à 0,70 varient entre 144 et 151μ m, cette dernière valeur correspondant au meilleur point trouvé. Le rayon optimal du trou peut donc être pris égal à 151μ m, étant donné que la précision expérimentale sur la taille du trou est de l'ordre de 1μ m.
- La position du trou sera choisie en accord avec les valeurs obtenues au meilleur point : $x = 247 \mu$ m et $y = -228 \mu$ m.

La validation expérimentale de l'accord effectif du résonateur réel n'a pas pu être faite pour deux raisons :

- l'optimisation a été réalisée en juin 2007, les délais nécessaires à la fabrication et les coûts correspondants sont trop importants pour que la validation soit envisagée dans l'immédiat ;
- les chercheurs travaillant actuellement sur ce problème veulent s'assurer que les effets mesurés par simulation sont significatifs et ne sont pas dus à un biais purement informatique, la prise en compte du trou induisant une modification de maillage.

Cet exemple montre donc particulièrement bien l'efficacité du multisimplexe par rapport à une démarche basée sur une succession d'essais et d'erreurs. D'autre part, l'application que nous avons faite au domaine des filtres planaires, après avoir cité plusieurs applications dans le domaine de la chimie, montre la grande amplitude des champs d'utilisation du multisimplexe.

III.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les grandes lignes de l'optimisation multicritère et indiqué comment elle peut être traitée par la méthode du simplexe.

Nous avons d'abord défini l'articulation entre les réponses mesurées sur le produit et les objectifs. Ensuite, nous avons décrit les principaux modes d'appréciation de la conformité du produit à un objectif donné, ou selon une formulation synonyme, de la satisfaction que donne le produit par rapport au critère associé. Nous avons mentionné la notion de fonction de coût (plutôt utilisée dans le domaine économique et financier) qu'on essaye de minimiser et nous avons largement développé la notion de fonction de valorisation qu'on essaye de maximiser; celle-ci peut être appelée utilité, désirabilité, ou fonction d'appartenance au sous-ensemble flou des produits optimaux pour l'objectif considéré.

Nous avons ensuite mis en évidence la problématique de l'optimisation multicritère. La Pareto optimalité est une notion fondamentale, mais souvent insuffisante pour choisir les caractéristiques d'un produit optimal par rapport à l'ensemble des critères. Nous avons mentionné les principales techniques d'optimisation multicritère ; nous avons remarqué que certaines d'entre elles sont très coûteuses en nombre d'essais, c'est pourquoi nous avons restreint notre étude à la méthode d'agrégation des critères par la fonction générique de Scott et Antonsson. Ce type de fonction permet la construction d'une désirabilité dite globale qui prend en compte les valeurs des désirabilités relatives à chaque objectif, leur importance relative par un jeu de poids, et qui peut être ajustée selon divers choix stratégiques grâce au niveau de compensation s (trade-off). Ainsi, le problème d'optimisation multicritère se ramène à la maximisation de la seule fonction désirabilité globale. La méthode du multisimplexe, et le logiciel commercial Multisimplex, offrent ainsi un outil performant et souple d'optimisation itérative multicritère en procédant à la maximisation de la

moyenne géométrique pondérée des désirabilités (cas particulier de la fonction générique de Scott et Antonsson avec s = 0) grâce à une méthode du simplexe.

Nous avons montré comment le multisimplexe peut être utilisé dans l'optimisation d'un filtre planaire microonde, et nous avons proposé à cette occasion une méthode originale de détermination des caractéristiques d'un trou réalisé par ablation laser dans une couche mince de YBaCuO.

Nous avons remarqué que les valeurs des poids, ou coefficients de pondération des objectifs, sont choisies par l'utilisateur ; ce choix est un problème délicat qui va faire l'objet du chapitre 4.

Bibliographie du chapitre III

- [1] Norme D25 1075 Paint loatings cross hatch test, PSA Peugeot Citroën.
- [2] CHARNES A., COOPER W. W., Management Models and Industrial Applications of Linear Programming, Willey, New-York, 1961.
- [3] JONES D. F., TAMIZ M., Goal Programming in the period 1990-2000, in the Multiple Criteria Optimization: State of the art annotated, bibliography surveys, M. Ehrgott and X. Gandibleux Editors, Kluwer, 129-170, 2002.
- [4] KEENEY R. L., RAIFFA H., Decision with Multiple Objectives: Performances and Value Trade-Offs, John Willey and sons editors, New-York, 1976.
- [5] HARRINGTON J., The desirability function, Industrial Quality Control, 21 (10) 494-498, 1965.
- [6] *Multisimplex*, software, developed by Grabitech Solutions AB, Trafikgatan 52, S-856 44 Sundsvall, Sweden.
- [7] ÖBERG T., WARMAN K., The simplex method and fuzzy set membership functions to optimize analytical methods. Method approach and a case study from gaz chromatography, Lecture at the Federation of Analytical Chemistry and Spectroscopy Societies Meeting, Providence, Rhode Island, USA, October 26-30, 1997.
- [8] ZADEH L. A., *A theory of approximate reasoning*, J. E. Hayes, D. Michie and L. I. Mikulich, ed. Machine Intelligence, Vol 9, Elsevier, Amsterdam, 149-194, 1979.
- [9] PARETO V., Cours d'économie politique, Rouge, Lausanne, Switzerland, 1896-1897.
- [10] MEUNIER H., Algorithmes évolutionnaires parallèles pour l'optimisation multi-objectif de réseaux de télécommunications mobiles, thèse soutenue le 12 juin 2002 à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, IEEA, 9-46, 2002.
- [11] GOLDBERG D. E. Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning, Addison-Wesley, 1989.
- [12] SCHAFFER J., Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms, International Conference on Genetic Algorithms, Lawrence Erlbaum, Grefenstette J. J. editor, 93-100, 1985.
- [13] STEUER R. E., Multiple Criteria Optimization Theory, computation and application, John Willey, New-York, ch. 8, 1986.
- [14] HERTZ A., JAUMARD B., RIBEIRO C., FILHO W. F., A multi-criteria tabu search approach to cell formation problems in group technology with multiple objectives, RAIRO Recherche opérationnelle / Operations research, 28 (3) 303-328, 1994.
- [15] HWANG C., MASUD A. S. M., *Multiple Objective Decision Making Methods and Applications*, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, volume 164, Springer-Verlag, Berlin, 1979.
- [16] FODOR J., ROUBENS M., Fuzzy Preference Modelling and Multicriteria Decision Aid, Kluwer Academic Publisher, 1994.
- [17] GRABISCH M., ORLOVSKI S. A., YAGER R. R., Fuzzy aggregation of numerical preferences, Fuzzy sets in decision analysis, operations research and statistics, the handbooks of fuzzy sets series, Kluwer Academic Publisher, 31-68, 1998.
- [18] OTTO K. N., ANTONSSON E. K., *Trade-off strategies in engineering design*, Research in engineering design 3, 2, 87-104, 1991.
- [19] SCOTT M. J., ANTONSSON E. K., Aggregation functions for engineering design trade-offs,

- Fuzzy sets ans systems, 99, 3, 253-264, 1998.
- [20] SCOTT M. J., Formalizing Negociation in Engineering Design, PhD Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, June 1989.
- [21] BOSTYN S., Application de la méthode simplex dans le domaine de la chimie appliqué à l'analyse et au développement, actes du colloque Expérimentique, Orléans, 15 juin 2006.
- [22] BERRIDGE J. C., MORISSEY J., J. Chromatographics, 316, 69-79, 1984.
- [23] MOMENBEIK F., KHORASANI J. H., *Analysis of sugars by micellar liquid chromatography with UV detection*, Acta Chromatographica (16) 58-69, 2006.
- [24] DERRINGER G., SUICH R., Simultaneous optimization of several response variables, Journal of Quality Technology, vol. 12, 214-219, 1980.
- [25] ZUOLAGA O., ETXEBARRIA N., FERNANDEZ L. A., *MultiSimplex optimisation and comparison of different purge-and-trap extractions of volatile organic compounds in soil samples*, Analytica Chimica Acta 416 (1), 43-53, 2000.
- [26] FERREIROS N., IRIARTE G., ALONSO R.M., MultiSimplex and experimental design as chemometric tools to optimize a SPE-HPLC-UV method for the determination of eprosartan in human plasma samples, Talanta 69 (3), 747-756, 2006.
- [27] SANZ J., de DIEGO A., RAPOSO J. C., MADARIAGA J. M. Routine analysis of mercury species using commercially available instrumentation: chemometric optimisation of the instrumental variables, Analytica Chimica Acta 486, 255-267, 2003.
- [28] SEAUX J. F., COURRÈGES S., BILA S., MADRANGEAS V., MAIGNAN M., ZANCHI C., *Novel superconductive Self-Equalized planar Filter Configuration for C-Band Input Multiplexers*, RF and Microwave Computer Aided Engineering, 29-33, 2007.
- [29] PARKER N. J., GOODYEAR S. W., ELLIS D. J. P., HUMPHREYS R. G., *Tuning superconduting microwave filters by laser trimming*, IEEE MTT-S, volume 3, 1971-1974, 2002.
- [30] COURRÈGES S., Étude, conception et test de dispositifs reconfigurables en fréquence utilisant des couches minces ferroélectriques et des matériaux supraconducteurs, soutenue le 6 septembre 2006, XLIM, Université de Limoges.

Chapitre IV. Procédure de calcul des coefficients de pondération

Dans ce chapitre, nous allons décrire et commenter une procédure originale de calcul des coefficients de pondération, nommés aussi poids. Leur connaissance est nécessaire pour l'optimisation par la méthode du multisimplexe (cf. chapitre 3), mais aussi plus généralement pour toutes les méthodes d'analyse multicritère. Nous illustrerons dans la section IV.1 la grande sensibilité que l'optimum de la fonction de désirabilité globale peut avoir au choix de ces poids. Les sections IV.2 et IV.3 dressent l'état de l'art à propos de deux méthodes existantes pour la détermination effective des poids. Il nous a paru naturel de le faire ici afin de proposer un chapitre entièrement relatif au problème de la pondération.

La procédure présentée dans la section IV.4 est basée sur l'analyse des surfaces d'égale satisfaction. Elle est originale nous l'avons entièrement développée à l'Institut de Recherche XLIM. Nous donnerons d'abord les bases théoriques du calcul ; pour justifier rigoureusement les résultats énoncés, les fondements mathématiques de la méthode sont entièrement détaillés, le discours est donc très technique et nécessite de nombreuses notations. Nous décrirons ensuite une technique d'acquisition des surfaces d'égale satisfaction par une méthode de sondage et nous décrirons enfin un programme opérationnel permettant un calcul rigoureux des poids dans le cas de deux réponses.

Dans tout ce chapitre, nous utiliserons la terminologie introduite au chapitre 1 dans le paragraphe I.2.2.

IV.1. Poids ou coefficients de pondération : généralités

IV.1.1. Rappel : les poids dans la moyenne géométrique des désirabilités

Les coefficients de pondération des différents objectifs ont été définis dans la section III.2.1.1. Nous nous plaçons ici dans le cas de la fonction agrégée de type moyenne géométrique. Soit P un produit. On procède à la mesure des valeurs s_1, \ldots, s_n des différentes sorties. On en déduit les valeurs des désirabilités individuelles associées à chacun des objectifs correspondants, $\sigma_1 = \tau_1(s_1), \ldots, \sigma_n = \tau_n(s_n)$ (τ_1, \ldots, τ_n sont les fonctions de désirabilité définies au chapitre 1 dans le paragraphe I.5.3).

La fonction de désirabilité globale d'un n-uplet de sorties est la moyenne géométrique pondérée des fonctions de désirabilité individuelle des différentes sorties :

$$\Phi(s_1, s_2, ..., s_n) = \left[\tau_1(s_1)^{w_1} \cdot \tau_2(s_2)^{w_2} \cdot ... \cdot \tau_n(s_n)^{w_n}\right]^{1/(w_1 + w_2 + ... \cdot w_n)}$$

Les coefficients w_1 , w_2 , ..., w_n seront nommés « poids » dans tout ce qui suit. Nous avons montré au paragraphe III.2.2.4 qu'on peut définir, à partir de n'importe quel jeu de poids, un jeu de poids normalisés $w'_i = \frac{w_i}{w_1 + ... + w_n}$ tels que $w'_1 + ... + w'_n = 1$.

IV.1.2. Problématique de la détermination des poids

La détermination des poids est une opération importante et délicate. Dressons un bref inventaire des attitudes rencontrées dans la pratique courante.

- L'optimisation multicritère est un outil qu'on ne doit employer que lorsqu'on a une bonne maîtrise du dispositif. En particulier, si on n'a pas identifié la totalité des facteurs influents sur les sorties, il est inutile de vouloir réaliser une optimisation pondérée de cellesci.
- Lorsque plusieurs sorties doivent être optimisées en même temps, et qu'on se

préoccupe avant tout que chaque objectif soit à peu près satisfait, il est d'usage de prendre des poids égaux : $w_1 = w_2 = ... = w_n = 1$ par exemple, ou $w'_1 = w'_2 = ... = w_n = \frac{1}{n}$ pour des poids normalisés. Un tel choix est effectué par exemple par Sanz, de Diego, Raposo et Madariaga dans leur utilisation du multisimplexe pour une optimisation des procédés d'analyse des composés du mercure [1] (les sorties sont les aires des trois pics du spectre correspondant à trois composés particuliers du mercure, les poids sont 1, 1 et 1).

- Lorsqu'une sortie est considérée comme ayant un poids prépondérant, il n'est pas rare de choisir un jeu de poids du type : $w_1 = 1$, $w_2 = 1$, ..., $w_{k-1} = 1$, $w_k = 5$, $w_{k+1} = 1$, ..., $w_n = 1$. Ainsi, dans une démarche d'optimisation d'obtention de xylo-oligosaccharides (substance stimulant la croissance et l'activité de la flore intestinale), Genestie [2] affecte les trois objectifs de poids très contrastés :
 - O_1 : « minimiser les polymères résiduels » a pour poids $w_1 = 1$;
 - O_2 : « minimiser les monomères libérés » a pour poids $w_2 = 1$;
 - O_3 : « maximiser le rendement en oligomères » a pour poids $W_3 = 5$.

Il semble légitime de s'interroger quant au caractère arbitraire de cette valeur 5. Nous avons interrogé B. Genestie à ce sujet lors de son exposé oral au colloque Expérimentique ; il a seulement répondu que le troisième critère était « beaucoup plus important ». La désirabilité globale est alors donnée par $\sigma_{_{\sigma}} = (\sigma_{_{1}} \cdot \sigma_{_{2}} \cdot \sigma_{_{3}}^{_{5}})^{1/7}$.

Ces trois situations extrêmes nous amènent à préciser qu'une procédure de détermination des poids ne peut intervenir qu'à un stade avancé de l'optimisation : la maîtrise de la stabilité des sorties et la définition précise des importances relatives doivent être acquises. C'est le détail de cette procédure qui fait l'objet de ce chapitre. Nous verrons que cette procédure peut conduire à une définition plus précise des objectifs.

IV.1.3. Influence des poids sur l'optimum

Nous allons montrer que le choix des poids des différentes sorties est déterminant dans l'optimisation multicritère. Pour cela, nous avons construit un modèle numérique original donnant une frontière de Pareto et une fonction de désirabilité permettant d'observer un glissement brutal de la position du point optimal.

Plaçons-nous pour cela dans l'espace de représentation des valorisations tel qu'il a été présenté au paragraphe III.1.4.1. Chaque produit P y est représenté par un point dont les coordonnées sont les désirabilités de P pour chacun des objectifs. Ici, chaque objectif O_i est associé à une sortie S_i et la valorisation s'identifie à la désirabilité : $V_i(P) = \tau_i(s_i)$. L'espace de représentation des valorisations s'identifie donc à l'espace de représentation des désirabilités dans lequel les coordonnées du produit sont :

$$P \rightarrow (s_1, ..., s_n) \rightarrow P$$

$$\sigma_1 = \tau_1(s_1)$$

$$\vdots$$

$$\sigma_n = \tau_n(s_n)$$

Lorsqu'on fait varier les valeurs des entrées, les valeurs des sorties varient et les désirabilités aussi. On décrit ainsi l'ensemble des produits possibles dans l'espace des désirabilités. Comme nous avons choisi d'imposer à chacune de ces désirabilités de varier dans l'intervalle [0,1] (valorisation normée, *cf.* paragraphe III.2.2.1), cet ensemble est contenu dans [0,1]ⁿ. Au paragraphe III.1.4.3, nous avons défini la frontière de Pareto : c'est le bord supérieur droit de cet ensemble et elle rassemble tous les produits Pareto optimaux, c'est-à-dire ceux pour lesquels l'augmentation de l'une des désirabilités entraîne la diminution d'une autre.

Dans ce paragraphe, nous cherchons seulement à donner une illustration de l'influence des poids sur l'optimum. Nous allons donc nous limiter au cas où n=2, et travailler sur l'interprétation graphique de l'optimisation. Supposons que l'ensemble des produits dans l'espace de représentation soit limité par les trois courbes suivantes, reliant la désirabilité σ_1 de la sortie 1 à celle σ_2 de la

sortie 2:

- $[C]: \sigma_2 = \sigma_1/2;$
- $[C']: \sigma_2 = 2\sigma_1;$
- $[C'']: \sigma_2 = 1/(2\sigma_1).$

Le domaine a donc une forme non convexe limitée par les deux droites C et C' passant par l'origine et par l'hyperbole C''. Les trois points extrêmes de ce domaine sont l'origine O(0;0), le point A(1;0,5) et le point A'(0,5;1). La figure 1 (a) donne la représentation graphique de ce domaine.

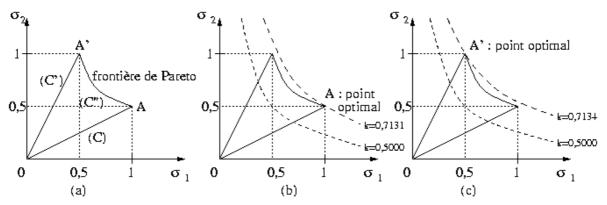


Figure IV.1 (a) domaine des produits possibles dans l'espace des désirabilités avec frontière de Pareto (b) détermination graphique du point optimal si $w_1=1,05$ et $w_2=1$ (c) détermination graphique du point optimal si $w_1=0,95$ et $w_2=1$

La portion d'hyperbole $\widehat{AA'}$ forme la frontière de Pareto du domaine car elle relie les points non dominés, qui n'ont aucun autre point du domaine au dessus et à droite d'eux.

Soient w_1 et w_2 les poids (supposés non nuls) correspondant aux deux désirabilités. Le produit optimal cherché est celui du domaine pour lequel la désirabilité globale $\sigma_g = (\sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2})^{\frac{1}{w_1+w_2}}$ est maximale. Traçons les lignes de niveau notées L_k de la désirabilité globale. Pour $k \in [0,1]$ fixé, on a L_k : $\sigma_g = k$. On en déduit L_k : $\sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2} = k^{w_1+w_2}$ ou encore L_k : $\sigma_2 = \frac{k^{1+\frac{w_1}{w_2}}}{\frac{w_1}{w_2}}$. Si nous posons $x = \sigma_1$, $y = \sigma_2$, $K = k^{1+\frac{w_1}{w_2}}$ et $r = \frac{w_1}{w_2} > 0$, alors l'équation cartésienne de

la ligne L_k est du type $y = \frac{K}{x'}$. Les lignes de niveau sont donc des courbes de nature hyperbolique, tracées en pointillés sur les figures 1 (b) et 1 (c). Avec ces mêmes notations, l'hyperbole C'' a pour équation $y = \frac{1}{2x}$. Distinguons trois cas.

- [Premier cas] : r=1 ($w_1=w_2$). Les lignes de niveau L_k sont des hyperboles équilatères d'équation $y=\frac{K}{x}$ et la frontière de Pareto C'' d'équation $y=\frac{1}{2x}$ est elle-même la ligne d'égale désirabilité, de niveau de désirabilité $K=\frac{1}{2}=0,5$.
- [Deuxième cas] : r > 1 ($w_1 > w_2$). La ligne de niveau L_k est plus verticale que l'hyperbole équilatère passant par le même point (voir figure 1 (b)).
- [Troisième cas] : r < 1 ($w_1 < w_2$). La ligne de niveau est plus horizontale que l'hyperbole équilatère passant par le même point (voir figure 1 (c)).

Nous allons utiliser ces propriétés géométriques pour illustrer la grande sensibilité de l'optimum au choix des poids.

Considérons d'abord le cas particulier où $w_1 = 1,05$ et $w_2 = 1$: on est donc dans le deuxième cas car $w_1 > w_2$. Les lignes de niveau d'égale désirabilité sont un peu plus verticales que

l'hyperbole C''. Le produit optimal correspond au point du domaine dont la désirabilité globale est la plus grande. On voit sur la figure 1 (b) que cela correspond au point A dont les coordonnées sont les désirabilités individuelles $\sigma_1 = 1$ et $\sigma_2 = 0,5$. La ligne L_k passant par A est la ligne d'égale désirabilité k = 0,7131. On vérifie que

$$\sigma_1^{w_1/(w_1+w_2)} \cdot \sigma_2^{w_2/(w_1+w_2)} = 1^{1,05/2,05} \cdot 0,5^{1/2,05} = 0,7131$$

ce qui correspond bien à la valeur k trouvée précédemment.

Changeons maintenant très légèrement le poids relatif à la sortie S_1 en prenant $w_1 = 0.95$ et $w_2 = 1$. Cette fois-ci, on est dans le troisième cas car $w_1 < w_2$. Les lignes de niveau d'égale désirabilité sont un peu plus horizontales que l'hyperbole C''. Le produit optimal correspond au point du domaine dont la désirabilité globale est la plus grande : on voit sur la figure 1 (c) que cela correspond au point A' dont les coordonnées sont les désirabilités individuelles $\sigma_1 = 0.5$ et $\sigma_2 = 1$. La ligne L_k passant par A' est la ligne d'égale désirabilité k = 0.7134. On vérifie que

$$\sigma_1^{w_1/(w_1+w_2)} \cdot \sigma_2^{w_2/(w_1+w_2)} = 0,5^{0,95/1,95} \cdot 1^{1/1,95} = 0,7134$$

ce qui correspond bien à la valeur k trouvée précédemment. Nous constatons donc qu'un très léger changement d'un des deux poids a pour effet un changement radical de produit. Nous aurions pu tout aussi bien passer de $w_1 = 1,01$ à $w_1 = 0,99$, avec le même résultat car le rapport $\frac{w_1}{w_2}$ passe d'une valeur supérieure à 1 à une valeur inférieure à 1. Grâce à ce modèle, nous avons illustré la nécessité d'un choix rigoureux des poids.

Après avoir exposé ces généralités relatives au choix des poids, nous allons présenter successivement trois méthodes de détermination des poids. La première, dite « de tri croisé », qui fait l'objet de la section suivante, est une méthode assez lourde à mettre en œuvre. La deuxième sera plus intuitive et la troisième est celle que nous avons construite et développée.

IV.2. La méthode de tri croisé [3]

Cette méthode a été largement décrite dans la thèse de Limayen, consacrée à l'exposé et l'utilisation de la plate-forme de Tri Croisé Monte-Carlo (TCMC).

Nous donnerons plusieurs illustrations de notre propos en donnant des exemples numériques ; ils seront annoncés par l'entête « Exemple numérique illustratif ».

IV.2.1. Définition du contexte

Le collège comprend divers intervenants. Il doit être constitué en répondant aux trois exigences suivantes :

- [Exigence 1] : pour chaque sortie S_i , l'un des intervenants doit être capable de définir l'objectif et de construire la fonction de désirabilité correspondante τ_i : on l'appellera le spécialiste.
- [Exigence 2] : pour un couple de sorties données (S_i, S_j) , $i \neq j$, l'un des intervenants spécialiste des deux sorties, ou le couple des spécialistes, ou ce couple aidé d'un médiateur doit être capable de mesurer l'importance relative de chacune de ces deux sorties.
- [Exigence 3]: un arbitre doit être capable, en fin de procédure, de faire la synthèse des divers points de vue exprimés. Cette synthèse s'exprime par la définition des importances relatives des sorties deux à deux. L'arbitre peut aussi infléchir les valeurs de ces importances relatives pour estimer les valeurs numériques des poids.

On peut comprendre, avant même la description complète de la procédure, que ces trois exigences définissent un contexte assez strict, dans lequel les fonctions de médiation (pour deux sorties) et d'arbitrage (pour l'ensemble des sorties) nécessitent de la fermeté et de la diplomatie. Courtot a décrit plus complètement dans son ouvrage [4] les caractéristiques d'une telle assemblée de décideurs ainsi que celles d'un projet tout entier.

On peut l'illustrer par la procédure de détermination des budgets des différents laboratoires travaillant sur un grand accélérateur de particules. Les oppositions entre les postes budgétaires les plus antagonistes sont au final arbitrées par le directeur général.

IV.2.2. Matrice des importances relatives

Soient S_1 , S_2 , ..., S_n les sorties. Pour tout couple d'entiers distincts $i, j \in \{1, ..., n\}$, on définit le couple de sorties (S_i, S_j) . Conformément à l'exigence 2, il est possible de définir numériquement l'importance relative $\alpha_{i,j}$ de chaque sortie dans ce couple. L'importance relative d'une sortie par rapport à elle-même est égale à $1: \alpha_{i,i} = 1$. On est ainsi en mesure de construire la **matrice des importances relatives**: elle est notée M_{ir} et est formée du tableau des **importances relatives** $\alpha_{i,j}$ toutes strictement positives:

$$M_{ir} = egin{bmatrix} lpha_{1,1} & \dots & lpha_{1,j} & \dots & lpha_{1,n} \ dots & & dots & & dots \ lpha_{i,1} & \dots & lpha_{i,j} & \dots & lpha_{i,n} \ dots & & dots & & dots \ lpha_{n,1} & \dots & lpha_{n,j} & \dots & lpha_{n,n} \end{bmatrix}$$

où $\alpha_{i,j}$ est l'importance relative de la sortie S_i par rapport à la sortie S_j .

IV.2.3. Propriétés des importances relatives

La définition des poids conduit à identifier l'importance relative au rapport des poids des deux sorties. Si w_i est le poids de la sortie S_i et w_j celui de la sortie S_j , l'importance relative de S_i par rapport à S_j est le rapport :

$$\alpha_{i,j} = \frac{w_i}{w_i} avec \ \alpha_{i,i} = \frac{w_i}{w_i} = 1$$

On parle de « tri croisé » car on va s'efforcer de déterminer les valeurs des poids w_i à partir de l'information contenue dans ces importances relatives $\alpha_{i,j}$ obtenue par croisement systématique des diverses sorties.

Il est immédiat que la matrice des importances relatives est inverse symétrique, c'est-à-dire que les coefficients de sa transposée sont égaux aux inverses de ses coefficients :

$$\alpha_{j,i} = \frac{w_j}{w_i} = \frac{1}{\alpha_{i,j}}$$

La connaissance des poids permet de calculer les importances relatives de façon systématique.

Exemple numérique

Soient trois sorties S_1 , S_2 et S_3 ; supposons que leurs poids respectifs sont $w_1 = 2$, $w_2 = 10$ et $w_3 = 5$. La matrice des importances relatives s'écrit

$$M_{ir} = \begin{bmatrix} 1 & 0.2 & 0.4 \\ 5 & 1 & 2 \\ 2.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix}$$

Nous pouvons remarquer que pour tout triplet d'entiers i, j, et k, $\alpha_{i,j} \cdot \alpha_{j,k} = \frac{w_i}{w_j} \cdot \frac{w_j}{w_k} = \frac{w_i}{w_k}$, d'où la propriété de **transitivité des importances relatives** : $\alpha_{i,k} = \alpha_{i,j} \cdot \alpha_{j,k}$. Nous allons voir que cette propriété est à la base d'un problème particulier lié à la méthode du tri croisé.

IV.2.4. Calcul des poids normalisés à partir d'une matrice d'importances relatives

La recherche réciproque des valeurs des poids à partir d'une matrice d'importances relatives pose un double problème.

- [Problème 1] : une matrice inverse symétrique produite par le collège correspondelle toujours à une matrice de rapports de poids ?
- [Problème 2] : si une matrice inverse symétrique a cette propriété, comment calculet-on les poids ?

La première question a une réponse négative. Un exemple suffit à le prouver.

Exemple numérique

Soit la matrice inverse symétrique

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0.25 & 0.4 \\ 4 & 1 & 2 \\ 2.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix}$$

Les poids éventuels doivent vérifier le système

$$\begin{cases} w_1/w_2 = 0,25 \\ w_1/w_3 = 0,4 \text{ donc} \end{cases} \begin{cases} w_2 = 4 w_1 \\ w_3 = 2,5 w_1 \\ w_2/w_3 = 2 \end{cases}$$

Ce système est impossible car le rapport des deux premières égalités donne $w_2/w_3 = 4/2, 5 = 1, 6$, ce qui est incompatible avec la troisième.

Il est assez aisé de comprendre pourquoi une grande majorité des matrices des importances relatives produites par un collège a ce défaut de ne pas correspondre à une matrice de rapports de poids. Imaginons que les trois sorties S_1 , S_2 et S_3 soient telles que S_2 est plus importante que S_3 , elle-même plus importante que S_1 . S_2 est donc nettement plus importante que S_1 . Mais ce « nettement » est assez difficile à quantifier, et risque de ne pas vérifier la relation de transitivité des rapports $\alpha_{i,k} = \alpha_{i,j} \cdot \alpha_{j,k}$. Ainsi, il est possible que les binômes qui se réunissent à trois moments différents jugent que :

- S_2 est 2 fois plus important que S_3 et $\alpha_{2,3} = 2$;
- S_3 est 2,5 fois plus important que S_1 et $\alpha_{3,1} = 2,5$;
- S_2 est 4 fois plus important que S_1 et $\alpha_{2,1} = 4$.

Il n'y a pas là d'anomalie qualitative car le coefficient $\alpha_{3,1} = 4$ confirme l'emploi du mot « nettement » mais une anomalie quantitative car $4 \neq 2 \cdot 2,5$: ces valeurs conduisent à la matrice donnée dans l'exemple précédent et on a montré qu'elle était incompatible avec une détermination algébrique des poids. Nous en déduisons donc qu'une matrice inverse symétrique produite par le collège ne correspond pas nécessairement à une matrice de rapports de poids.

Le second problème se ramène à un système algébrique. Sa résolution permet d'établir que la propriété de transitivité est nécessaire et suffisante pour qu'une matrice inverse symétrique puisse être considérée comme une matrice de rapports de poids. La démonstration complète de cette propriété est donnée dans l'annexe F au paragraphe F.1; on y donne aussi les expressions exactes des poids calculés à partir des coefficients de la matrice.

La méthode de calcul des poids par le tri croisé doit donc permettre de transformer une matrice d'importances relatives en une matrice inverse symétrique. Cette transformation est appelée « ajustement ».

IV.2.5. Ajustement d'une matrice d'importances relatives brute

Lorsque le collège se réunit et définit, binôme par binôme, les valeurs numériques des importances relatives, il fournit ce qu'on peut appeler une matrice d'importances relatives <
brute>>. Nous avons montré au paragraphe précédent qu'on ne pouvait pas, dans le cas général, en déduire les valeurs des poids. C'est pourquoi les auteurs, cités et commentés par Limayen ont développé des moyens techniques et théoriques d'ajustement et de corrections des coefficients de cette matrice pour lui donner la propriété caractéristique de transitivité. L'un de ces moyens utilise une méthode de Monte-Carlo, et forme le cœur de la plate-forme « TCMC ». L'utilisation de ces moyens confère à la procédure du tri croisé un caractère assez technique, parfois peu lisible, et nécessitant en général l'utilisation d'un logiciel approprié.

Nous avons décrit ici la méthode de tri croisé assez largement pour bien mettre en évidence à la fois sa complexité théorique et les difficultés de sa mise en œuvre. En effet, après la collecte fastidieuse des $\frac{n(n-1)}{2}$ (n est le nombre de sorties) coefficients d'importance relative, il faut encore transformer la matrice des importances relatives en une matrice inverse symétrique. La procédure est donc relativement lourde à mettre en place, et nécessite une modification des données initialement recueillies. Nous soulignons ces difficultés pour mieux mettre en évidence les qualités particulières de la méthode que nous avons développée et qui sera présentée dans la section 4.

IV.3. La méthode des cartes [5]

Cette méthode a été proposée par Simos en 1990 pour pondérer des critères multiples dans un contexte environnemental. Nous allons la présenter de façon structurée : nous mettrons d'abord en évidence la différence entre les classements ordinaux et cardinaux, puis nous exposerons les principes de l'établissement d'un classement cardinal d'un ensemble ordonné par cette méthode et ceux de la détermination des valeurs des poids à partir de ce classement cardinal.

IV.3.1. Classification ordinale, classification cardinale

Les deux termes « ordinal » et « cardinal » correspondent à deux définitions possibles des entiers naturels.

- Un entier ordinal désigne la position d'un terme dans une suite ordonnée d'éléments d'un ensemble. Dans la suite (A, B, C, D), la position de C est désignée par l'entier 3.
- Le cardinal d'un ensemble est le nombre entier d'éléments de cet ensemble. Ce terme a une consonance quantitative. Le cardinal de l'ensemble $\{a,b,c\}$ est 3.

À titre illustratif, imaginons qu'on veuille classer les 8 produits effectués lors d'une série de fabrication. Chaque référence à ce cas sera indiquée par la mention « Exemple de classement par la méthode des cartes ».

Exemple de classement par la méthode des cartes

Supposons qu'on soumette les huit objets à une épreuve formée de 20 tests consécutifs, d'égale importance pour l'appréciation de la qualité du produit. Pour chacun de ces tests, on ne peut donner que le résultat : oui (succès) ou non (échec). Étudions les ordinaux et cardinaux associés à cette épreuve. Lorsqu'on teste le produit P_i , on définit le cardinal de l'ensemble des tests réussis : c'est ce qu'on appelle la note, $n(P_i)$ prenant ses valeurs dans $\{0,...,20\}$. On classe les produits dans la série, par exemple selon l'ordre décroissant des notes, et on obtient ainsi le classement, $c(P_i)$ donnant au produit une valeur ordinale dans l'ensemble $\{1,...,8\}$. On a donc ainsi défini un classement cardinal, celui des notes et un classement ordinal, celui du rang. Les notes des produits et leur classement sont par exemple :

produit $P_1 P_2 P_3 P_4 P_5 P_6 P_7 P_8$ note sur 20 1211041909130705 classement 3 4 8 1 5 2 6 7 Plus généralement, considérons un produit P extrait d'un ensemble qui en contient n. On mesure sur chacun des produits une grandeur physique donnée. En choisissant un multiple ou sousmultiple de l'unité, il est toujours possible d'associer à cette grandeur une mesure S qui est un nombre entier ; par exemple, la longueur d'une voiture peut être considérée comme un nombre entier de millimètres, la température d'un milieu un nombre entier de kelvin, l'épaisseur d'une couche un nombre entier de nanomètres. La mesure S forme un classement cardinal des produits : le classement cardinal de P est la valeur entière s. Elle prend ses valeurs dans N (entiers naturels). Si on classe les produits selon la valeur de leur sortie, le produit P aura alors un rang c(P) dans la famille : on forme ainsi un classement ordinal qui prend ses valeurs dans $\{1,...,n\}$. En cas d'ex extime equo, on donne aux deux éléments le même rang et on décale d'une unité le suivant.

On peut déduire un classement ordinal d'un classement cardinal : connaissant les valeurs numériques de la grandeur cardinale pour chaque élément de l'ensemble, on peut les classer par ordre croissant ou décroissant de cette valeur et en déduire un classement ordinal des éléments. La réciproque est évidemment fausse. On ne peut pas déduire les notes des produits de leur classement. En particulier, en disant que le produit P_4 est premier, P_6 deuxième et P_7 sixième, cela ne signifie pas que P_6 est deux fois moins bon que P_4 , que P_7 est six fois moins bon que P_4 ou que P_7 est trois fois moins bon que P_6 .

IV.3.2. Description de la méthode des cartes sur l'exemple

Lors du passage des notes au classement, il y a évidemment une perte d'information. Pourtant, un agent qui connaît bien les huit produits de l'exemple précédent est capable, au moment où il définit les vingt tests, de produire un classement prévisionnel et même d'estimer les notes probables que les produits obtiendront. Pour cela, le processus mental est assimilable au positionnement des produits sur une échelle graduée, les distances séparant les produits étant l'image de l'écart prévisible des notes. Cette remarque sera illustrée sur la figure 2. En particulier, l'agent distingue bien l'excellent produit (P_4) qui devance nettement les autres produits, ensuite vient un groupe de produits autour ou légèrement au dessus de la moyenne (dans l'ordre P_6 , P_1 , P_2 et P_5) et enfin les trois produits assez nettement en dessous $(P_7, P_8 \text{ et } P_3)$. La figure 2 présente le classement des huit produits sur l'axe supérieur et les notes sur l'axe inférieur. La signification des flèches sera donnée plus loin.

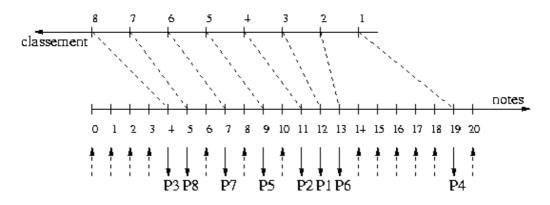


Figure IV.2 : diagramme de classement des produits par la méthode des cartes

Imaginons que l'agent ait dans la main huit fiches cartonnées, chacune étant relative à un produit avec son code de fabrication. Pour passer du classement estimé aux notes probables, il peut alors utiliser un stock de fiches cartonnées vierges, et en insérer autant qu'il veut avant, entre ou après celles des produits, avec la seule contrainte d'avoir 21 fiches en main à la fin. On appelle **carte** une fiche imprimée ou vierge. On obtient ainsi la pile de 21 cartes comme indiqué sur la figure 2, les fiches des produits étant représentés par des flèches pleines vers le bas, les fiches vierges par des flèches en pointillés vers le haut.

Donnons quelques arguments objectifs que l'agent peut utiliser.

- Les produits P_8 et P_3 sont mauvais, mais pas nuls : on place par exemple quatre cartes avant eux.
- Le produit P_4 , certes excellent mais pas parfait, ne passera peut-être pas avec succès la totalité des tests : on place donc une carte derrière lui.
- Les produits P_6 , P_1 et P_2 sont de bonne qualité, mais sont à plusieurs longueurs de P_4 : on place par exemple cinq cartes entre P_4 et ce groupe.
- On passe du produit P_2 à P_5 , de P_5 à P_7 et de P_7 à P_8 par des petits sauts successifs sensiblement égaux : on place à chaque fois une carte entre eux.

Nous avons ainsi décrit sur cet exemple la **méthode des cartes**. Elle permet de définir un classement cardinal de n objets à partir d'un classement seulement ordinal. Donnons maintenant une synthèse de ses principes. La figure 3 donne une illustration complète des différentes étapes de la démarche pour la détermination des poids de n = 9 objectifs associés aux sorties S_1, \ldots, S_9 .

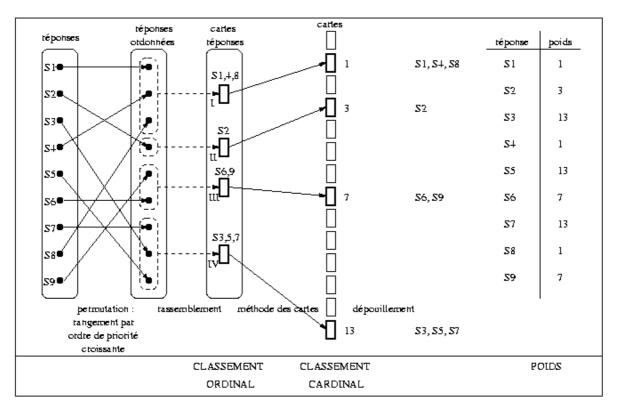


Figure IV.3: diagramme d'illustration de la détermination des poids de neuf objectifs par la méthode des cartes.

Les n objets sont inscrits sur des fiches. Celles-ci sont classées dans l'ordre défini par le classement ordinal. Il faut bien comprendre que les cartes ne sont qu'un médiateur de l'intuition humaine. La procédure consiste à utiliser un jeu de fiches vierges et :

- à placer avant la première fiche-objet un nombre de fiches vierges représentatif de l'écart entre cet objet et le plus mauvais objet imaginable,
- à placer après la dernière fiche-objet un nombre de fiches vierges représentatif de l'écart entre cet objet et le meilleur objet imaginable,
- à intercaler entre les fiches-objets un nombre de fiches représentatif de l'écart quantitatif séparant les deux objets consécutifs.

On obtient ainsi un classement cardinal sur une échelle allant de zéro jusqu'au nombre total de cartes moins une unité (20 dans l'exemple).

Après avoir présenté ces deux méthodes de détermination des poids, le tri croisé et la méthode des cartes, nous allons maintenant exposer la méthode originale que nous avons développée.

IV.4. Méthode originale de détermination des poids [6]

Cette méthode est basée sur l'analyse des surfaces d'égale satisfaction globale tracées dans l'espace de représentation des désirabilités individuelles. Ces surfaces, assez abstraites, sont présentées en détail dans le paragraphe 4.1. Dans le paragraphe 4.2, nous définissons le gradient de satisfaction et nous analysons ses propriétés. Nous en déduirons les expressions des poids calculés à partir des coordonnées du gradient, ce qui constituera l'aboutissement de notre méthode.

IV.4.1. Surfaces d'égale satisfaction

IV.4.1.1. Rappels et notations

L'une des difficultés dans ce qui va suivre est la nuance entre la représentation dans l'espace des entrées et celle dans l'espace des désirabilités individuelles. C'est pourquoi nous allons préciser ici les notations en insistant sur cette distinction.

- On note $E_1, E_2, ..., E_p$ les paramètres d'entrée et $J = (e_1, e_2, ..., e_p)$ le p-uplet formé de leurs valeurs numériques, appelé plus simplement le jeu d'entrées.
- On note $S_1, S_2, ..., S_n$ les grandeurs de sortie ou sorties et $s_1, s_2, ..., s_n$ leurs valeurs numériques.
- On suppose que chaque grandeur de sortie est une fonction des paramètres d'entrée et d'eux seulement (hypothèses d'exhaustivité et de reproductibilité présentées au chapitre 2).
- Les fonctions de désirabilité individuelles associées à chacune des sorties sont $\tau_1, \tau_2, ..., \tau_n$.
- Les désirabilités individuelles sont notées $\sigma_1 = \tau_1(s_1)$, ..., $\sigma_n = \tau_n(s_n)$. Elles prennent leurs valeurs dans [0,1], la valeur 0 correspondant à une valeur non admissible, la valeur 1 à une valeur idéale.
- La satisfaction globale donnée par un n-uplet de valeurs des sorties est mesurée par la fonction agrégée géométrique pondérée par les poids normalisés $w_1, w_2, ..., w_n$:

$$\Phi(s_1, s_2, ..., s_n) = \left[\tau_1(s_1)^{w_1} \cdot \tau_2(s_2)^{w_2} \cdot ... \cdot \tau_n(s_n)^{w_n}\right] = \left[\sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2} \cdot ... \cdot \sigma_n^{w_n}\right]$$

avec $w_1 + ... + w_n = 1$.

Lorsqu'on réalise un produit, on le qualifie en mesurant les valeurs $(s_1, s_2, ..., s_n)$ des n sorties. Chacune peut prendre une valeur dans l'intervalle des valeurs possibles :

$$\forall i \in \{1, 2, ..., n\}, s_i \in [s_{i \min}, s_{i \max}]$$

À la valeur de chaque sortie est associé un nombre de l'intervalle [0,1] qui mesure le niveau de satisfaction que donne cette valeur par rapport à l'objectif correspondant.

IV.4.1.2. Espaces de représentation des sorties et de leurs désirabilités

<u>Définition</u>: l'application qui à une valeur de sortie fait correspondre son niveau de satisfaction permet de définir deux espaces de représentation. L'espace de représentation des valeurs des sorties est le produit cartésien $ER_s = [s_{1 \text{min}}, s_{1 \text{max}}] \times ... \times [s_{n \text{min}}, s_{n \text{max}}]$. L'espace de représentation des désirabilités est le produit cartésien $ER_\tau = [0,1] \times ... \times [0,1]$.

La qualification de l'échantillon définit un point dans ER_s auquel correspond un point dans ER_τ . On parle d'espace de représentation car le point dans l'espace affine est le représentant de l'ensemble des sorties ou de l'ensemble des satisfactions individuelles.

Nous allons illustrer notre propos avec un exemple d'optimisation industrielle, signalé par la mention « Exemple d'optimisation industrielle ». Un groupe électrogène est une installation chargée de la production d'électricité (sur un chantier par exemple) à partir d'un alternateur entraîné par un

moteur thermique diesel. Sur le tableau de bord de l'installation, on a accès à trois paramètres : la puissance produite, le régime moteur et la température de l'eau du système de refroidissement du moteur. Les trois objectifs sont :

- $[O_1]$: maximiser la puissance sans dépasser 130 kW et sans passer en dessous de 50 kW :
- $[O_2]$: minimiser le régime moteur sans passer en dessous de $2000 \, \mathrm{tr} \cdot \mathrm{min}^{-1}$ (en dessous duquel le moteur peut caler), et sans dépasser $5000 \, \mathrm{tr} \cdot \mathrm{min}^{-1}$ (ce qu'on appelle la « zone rouge »),
- $[O_3]$: rendre la température la plus proche possible de 90°C (température idéale de fonctionnement) en restant dans l'intervalle admissible $[60^{\circ}\text{C}, 120^{\circ}\text{C}]$.

Exemple d'optimisation industrielle

Une mesure instantanée effectuée sur le groupe électrogène donne le triplet de sorties : $(120 \, \mathrm{kW}, 3500 \, \mathrm{tr} \cdot \mathrm{min}^{-1}, 95^{\circ} \mathrm{C})$. L'état de fonctionnement du groupe électrogène est donc représenté par le point de coordonnées (120, 3500, 95) dans l'espace de représentation des sorties. Chacune de ces trois valeurs donne un niveau donné de satisfaction individuelle. Pour la puissance, $\tau_1(120) = 0,95$: c'est une puissance à peine inférieure aux 130 kW de l'objectif. Pour le régime moteur, $\tau_2(3500) = 0,40$: c'est un régime trop élevé pour le moteur diesel. Pour la température, $\tau_3(95) = 0,90$: on est proche de la température idéale, mais un peu au dessus, ce qui peut, à la longue, être un signe de légère surchauffe. L'état de fonctionnement du groupe électrogène est donc aussi représenté par le point de coordonnées (0,95;0,40;0,90) dans l'espace de représentation des désirabilités. La figure 4.4 indique la position du point de fonctionnement dans les deux espaces de représentation.

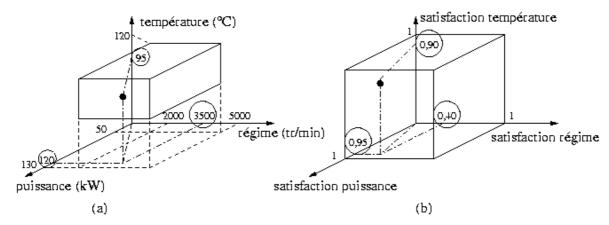


Figure 4.4 : position du point de fonctionnement du groupe électrogène (a) dans ER_s (b) dans ER_{τ}

L'espace de représentation des désirabilités permet de suivre l'évolution de tous les niveaux de satisfaction sans se préoccuper des valeurs des sorties avec leurs spécificités et leurs unités disparates. Dans une optimisation multicritère, on cherche en particulier à se rapprocher le plus possible du sommet de coordonnées (1,1,...,1) qui donnerait idéalement une satisfaction simultanée de tous les objectifs. Ce point correspond également, dans l'espace des sorties, au point idéal. Il est rare de pouvoir atteindre ce point, en particulier car les divers objectifs sont souvent antagonistes (dans l'exemple précédent, plus la puissance est grande, plus le régime moteur est élevé, plus la température est élevée et il faut trouver un compromis entre puissance importante et fonctionnement durable du moteur). Au contraire, plus on s'éloigne de ce point idéal et plus on se rapproche de l'un des axes ou du point (0,0,...,0), moins on satisfait les objectifs. Ainsi, on peut suivre dans l'espace des désirabilités la dégradation de la satisfaction donnée par le produit quand un problème survient.

Exemple d'optimisation industrielle

Dans le cas du groupe électrogène décrit plus haut, on peut tracer une ligne dans l'espace de représentation des désirabilités qui représente ce qui se passe dans quelques cas de dysfonctionnement :

- cas A : le moteur chauffe, la température de l'eau s'élève et l'opérateur le stoppe ;
- cas B : l'alternateur est déconnecté du circuit électrique qu'il alimente (mise <<hors réseau>>), la puissance s'annule et le moteur tourne au ralenti ;
- cas C : une demande accrue provoque une diminution de la puissance, le moteur chauffe et la température de l'eau augmente.

Il est possible de représenter ces trois évolutions dans l'espace de représentation des désirabilités. À partir du point de fonctionnement initial M :

- l'échauffement de la température s'accompagne d'une chute du niveau de satisfaction relatif à la température (passage au point A') puis le moteur étant arrêté, le régime devient nul ce qui s'accompagne d'une augmentation du niveau de satisfaction relatif au régime (passage au point A);
- l'annulation de la puissance s'accompagne d'une chute du niveau de satisfaction relatif à la puissance et la mise au ralenti du moteur s'accompagne d'une augmentation du niveau de satisfaction relatif au régime (passage au point B);
- la diminution de la puissance s'accompagne d'une diminution du niveau de satisfaction relatif à la puissance et l'augmentation de la température s'accompagne d'une diminution du niveau de satisfaction relatif à la température (passage au point C).

La figure 4.5 illustre ces trois cas.

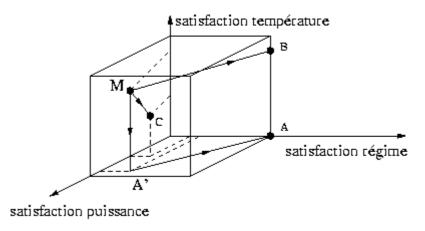


Figure IV.5 : représentation dans ER_{τ} de trois évolutions de l'état de fonctionnement du groupe électrogène

Les deux espaces de représentation correspondent à deux points de vue complémentaires. Dans l'espace des sorties, on définit la désirabilité globale σ d'un produit comme une fonction des valeurs des sorties.

<u>Définition</u>: la fonction de désirabilité globale Φ est une application de l'espace de représentation des sorties ER_s dans l'ensemble [0,1] des désirabilités globales : à un point $(s_1, s_2, ..., s_n)$ de l'espace des sorties ER_s correspond une satisfaction globale $\Phi(s_1, s_2, ..., s_n) \in [0,1]$.

IV.4.1.3. Surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des sorties

Nous sommes maintenant en mesure de définir les surfaces qui relient les points qui donnent un même niveau de satisfaction globale.

<u>Définition</u>: les **surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des sorties** sont les surfaces de niveau de la fonction de désirabilité globale Φ dans l'espace de représentation des sorties ER_s . Étant donné un niveau de satisfaction globale $k \in [0,1]$, la surface de niveau k est notée I_k et vaut : $I_k = \{(s_1, s_2, ..., s_n) \in ER_s \text{ tels que } \Phi(s_1, s_2, ..., s_n) = k\}$.

Les surfaces d'égale satisfaction ou d'égale indifférence rejoignent les points entre lesquels le collège exprime une indifférence, ce qui justifie la notation I utilisée. Les points pour lesquels $\sigma=0$ sont les points interdits ou refusés ; ils délimitent le domaine admissible.

Exemple d'optimisation industrielle

Dans le cas du groupe électrogène, un niveau de satisfaction globale $\sigma = 0,60$ par exemple peut être obtenu de nombreuses manières différentes. En se plaçant dans les situations extrêmes, on peut chercher l'intersection de la surface de niveau 0,60 avec les faces du parallélépipède rectangle (cf. figure 4.5) délimitant les points admissibles

- avec la face avant où la puissance est à sa valeur maximale $130\,\mathrm{kW}$: on peut admettre une température un peu plus élevée que les $90^\circ\mathrm{C}$ idéaux pourvu que le régime moteur soit minimal ($2000\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$), ou un régime moteur un peu plus élevé que les $2000\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$ minimaux pourvu que la température soit idéale ($90^\circ\mathrm{C}$), ou encore une température un peu plus basse que les $90^\circ\mathrm{C}$ idéaux pourvu que le régime moteur soit minimal ($2000\,\mathrm{tr}\cdot\mathrm{min}^{-1}$);
- avec la face de gauche où le régime est à sa valeur minimale $2000~\rm tr \cdot min^{-1}$: on peut admettre une température un peu plus élevée que les $90^{\circ} \rm C$ idéaux pourvu que la puissance soit maximale (130 kW), ou une puissance un peu moins élevée que les $130~\rm kW$ maximaux pourvu que la température soit idéale ($90^{\circ} \rm C$), ou encore une température un peu plus basse que les $90^{\circ} \rm C$ idéaux pourvu que la puissance soit maximale ($130~\rm kW$).

On définit ainsi un arc sur chacune des deux faces, correspondant aux bords de la surface de satisfaction 0,60 dans l'espace de représentation des sorties. La figure 4.6 donne une allure de cette surface tracée dans l'espace de représentation des sorties.

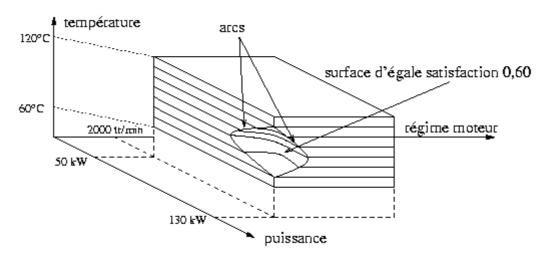


Figure IV.6 : allure de la surface de niveau de désirabilité globale 0,60 tracée dans ER_s

IV.4.1.4. Application transposée définie dans l'espace des désirabilités

Dans cette section, nous cherchons à développer une méthode de détermination des poids. Nous supposons que la fonction de désirabilité globale peut être considérée à la fois comme une fonction des valeurs s_i des sorties et comme une fonction des désirabilités correspondantes $\tau_i(s_i)$. C'est cette deuxième fonction que nous appelons l'application transposée.

<u>Définition</u>: l'application transposée de désirabilité globale est l'application Φ^* qui fait correspondre au n-uplet des indices de satisfaction individuelle des sorties une valeur de satisfaction globale :

$$(s_1, s_2, ..., s_n) \xrightarrow{\Phi} \sigma$$

$$(s_1, s_2, ..., s_n) \xrightarrow{\tau_1 \times \tau_2 \times .. \times \tau_n} (\tau_1(s_1), \tau_2(s_2), ..., \tau_n(s_n)) \xrightarrow{\Phi^*} \sigma$$

Nous pouvons donc écrire la relation de composition : $\Phi = \Phi^* \circ (\tau_1 \times \tau_2 \times ... \times \tau_n)$.

L'application transposée Φ^* est donc celle qui, aux désirabilités individuelles $\sigma_1 = \tau_1(s_1)$, ..., $\sigma_n = \tau_n(s_n)$, fait correspondre la désirabilité globale. Notons que le problème mathématique du caractère fonctionnel de Φ^* n'est pas traité dans cette thèse ; il est difficile à résoudre, en particulier dans le cas où au moins un des objectifs est du type cible ; nous préférons garder un propos centré sur le problème physique. La fonction transposée Φ^* doit s'identifier à la fonction de valorisation définie au paragraphe III.2.2, et plus particulièrement à une moyenne géométrique des désirabilités individuelles. Le problème que nous devons résoudre est donc le suivant : comment choisir les poids w_1 , ..., w_n de telle sorte que l'on puisse écrire $\Phi^*(\sigma_1,...,\sigma_n) = \sigma_1^{w_1}...\sigma_n^{w_n}$?

IV.4.1.5. Surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des désirabilités

La définition de l'application transposée permet de tracer les surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des désirabilités : elles relient les points qui donnent un même niveau de satisfaction globale.

<u>Définition</u>: les **surfaces d'égale satisfaction globale dans l'espace des désirabilités** sont les surfaces de niveau de l'application transposée Φ^* dans l'espace de représentation des désirabilités ER_{τ} . Dans le cas n=2, on parle de lignes d'égale satisfaction globale ; elles ont été utilisées au paragraphe IV.1.3.

Deux surfaces d'égale satisfaction ne peuvent être sécantes : la démonstration en est donnée à l'annexe F au paragraphe F.2. Il est donc possible de tracer dans l'espace de représentation des désirabilités des surfaces de niveau d'égale satisfaction globale (on doit les nommer « lignes » dans le cas n=2, « surfaces » dans le cas n=3 et « hyper surfaces » dans le cas $n\ge 4$). Le problème que nous avons posé à la fin du paragraphe précédent va être résolu par l'analyse locale de ces surfaces de niveau. Nous allons pour cela utiliser un outil de calcul classique en géométrie analytique : le gradient.

IV.4.2. Vecteur gradient de satisfaction

IV.4.2.1. Définition

Soit $P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n)$ un point de l'espace de représentation des désirabilités ER_{τ} . Soit σ la désirabilité globale de ce point. D'après la propriété de non sécance, une unique surface d'égale satisfaction passe par P, celle de niveau k tel que $\Phi^*(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n) = k$. Φ^* est une fonction scalaire. Après avoir défini les surfaces de niveau au paragraphe précédent, nous définissons maintenant le vecteur gradient de cette fonction.

 $\underline{\text{D\'efinition}}$: le **vecteur gradient de satisfaction** est le vecteur d\'efini dans ER_{τ} par

l'expression :
$$\overrightarrow{\text{grad}}\Phi^* = \begin{vmatrix} \partial \Phi^* / \partial \sigma_1 \\ \vdots \\ \partial \Phi^* / \partial \sigma_n \end{vmatrix}$$

IV.4.2.2. Sens physique du gradient de satisfaction

Les propriétés usuelles du gradient [7] nous permettent d'affirmer que :

- la direction du vecteur gradient de satisfaction est celle dans laquelle le niveau de satisfaction globale varie le plus vite ;
- le sens du vecteur gradient de satisfaction est celui dans lequel le niveau de

satisfaction augmente ; il est donc toujours dirigé des zones de bas niveau vers celles de haut niveau de satisfaction ;

• les coordonnées du vecteur gradient sont sans unité ; on peut les exprimer en variation relative du niveau global de satisfaction par rapport à la variation individuelle du niveau de satisfaction de l'une des sorties.

Exemple numérique

Dans le cas n=2, supposons que la fonction transposée ait été analysée et qu'elle s'exprime par exemple par : $\Phi^*(\sigma_1,\sigma_2) = (2\sigma_1 + 5\sigma_2)/7$. Les surfaces d'égale satisfaction sont alors simplement des lignes parallèles, comme le montre la figure 4.7, où on a fait figurer les lignes de niveau 0, 1/7, 2/7, 3/7, 4/7, 5/7, 6/7 et 1. Les coordonnées du vecteur gradient sont indépendantes du point où on le calcule : $\overline{\text{grad}}\Phi^* = \begin{vmatrix} 2/7 \\ 5/7 \end{vmatrix}$ Ces coordonnées peuvent être vérifiées graphiquement sur la figure 4.7.

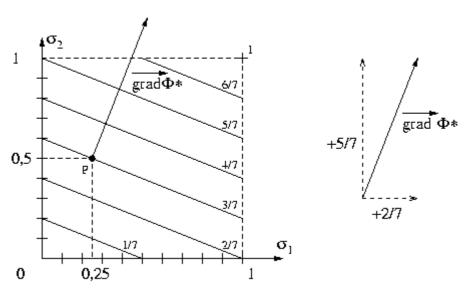


Figure IV.7 : exemple de lignes d'égale satisfaction et du vecteur gradient de satisfaction correspondant à $\Phi^*(\sigma_{_1},\sigma_{_2})=(2\sigma_{_1}+5\sigma_{_2})/7$

Le vecteur gradient de satisfaction possède la propriété spécifique suivante (son utilité apparaîtra au paragraphe suivant), établie dans l'annexe F au paragraphe F.3.

Propriété : les coordonnées du vecteur gradient de satisfaction sont toutes positives.

Les surfaces d'égale satisfaction et le vecteur gradient de satisfaction ont été définis. Nous allons maintenant exploiter ces notions et les propriétés énoncées pour montrer qu'on peut tirer les valeurs des poids de celles des coordonnées du vecteur gradient.

IV.4.3. Relation entre poids et vecteur gradient

IV.4.3.1. Introduction dans le cas de deux sorties

Pour mieux comprendre la démarche exposée dans la suite de cette section, nous la détaillons dans le cas où n=2 sorties S_1 et S_2 , de désirabilités respectives σ_1 et σ_2 . Les surfaces d'égale satisfaction dans l'espace de représentation des désirabilités s'assimilent à des simples lignes de niveau. Pour $k \in [0,1]$, $I_k: \Phi^*(\sigma_1,\sigma_2)=k$. À la fin du paragraphe précédent, nous avons mentionné que les coordonnées du gradient sont toutes positives. Or le gradient est orthogonal à la tangente à la ligne de niveau. Par suite, ces lignes sont de pente négative.

Exemple numérique

Considérons localement deux lignes d'égale satisfaction très proches, par exemple de niveaux de désirabilités respectifs σ et $\sigma+0.01$. La figure 4.8 illustre cette situation. Dans la zone agrandie, la pente du gradient est supérieure à 1 et celle des lignes est faible, inférieure à 1 en valeur absolue. Nous constatons que pour passer de la ligne de niveau σ à celle de niveau $\sigma+0.01$, le saut de désirabilité σ_1 de la première sortie, l'autre restant constant, doit être de +0.060, tandis que celui de σ_2 n'est que de +0.015. En termes courants, nous pouvons dire qu'il suffit que la satisfaction sur la sortie S_1 augmente de 15 millièmes pour que la satisfaction globale augmente d'un centième, tandis qu'il faut que celle sur la sortie S_2 augmente de 60 millièmes pour le même résultat. En somme, la sensibilité de la désirabilité globale est plus grande par rapport à σ_2 que par rapport à σ_1 .

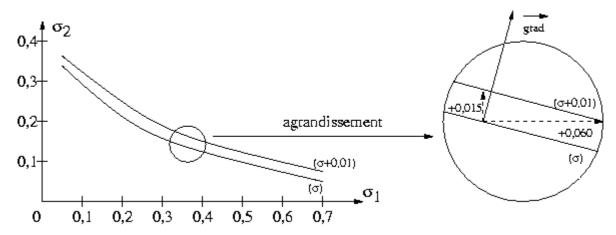


Figure IV.8 : illustration de la correspondance entre l'inclinaison du gradient et la sensibilité relative de la désirabilité globale aux deux désirabilités individuelles

La conclusion donnée à l'exemple précédent peut être généralisée.

<u>Propriété</u> Plus la pente de la ligne de satisfaction est faible, plus la sensibilité relative à σ_2 est grande; plus la pente est forte, plus la sensibilité relative à σ_1 est grande.

Nous allons maintenant affiner cette propriété en montrant que la connaissance du vecteur gradient donne accès aux valeurs locales des poids normalisés. Pour cela, nous aurons recours à un développement mathématique assez technique.

Supposons connues les lignes d'égale satisfaction ; on peut donc déterminer graphiquement les coordonnées γ_1 et γ_2 du vecteur gradient de satisfaction dans une zone donnée de l'espace ER_{τ} . Nous cherchons à assimiler localement les lignes d'égale satisfaction dans ER_{τ} aux lignes de niveau de la fonction géométrique pondérée. Le symbole \equiv désignant l'identification, nous devons résoudre :

$$\Phi^*(\sigma_1, \sigma_2) \equiv \sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2} \ avec \ w_1 + w_2 = 1$$

Calculons les coordonnées du gradient de la fonction géométrique en un point $P(\sigma_1, \sigma_2)$:

$$\overrightarrow{\text{grad}}\Phi^* = \begin{vmatrix} \gamma_1 \equiv \frac{\partial \left(\sigma_1^{w_1}\sigma_2^{w_2}\right)}{\partial \sigma_1} = w_1 \sigma_1^{w_1 - 1} \sigma_2^{w_2} \\ \gamma_2 \equiv \frac{\partial \left(\sigma_1^{w_1}\sigma_2^{w_2}\right)}{\partial \sigma_2} = w_2 \sigma_1^{w_1} \sigma_2^{w_2 - 1} \end{aligned}$$

Posons $m_g = \gamma_2/\gamma_1$ la pente du gradient de satisfaction (elle est positive) et $v = \sigma_2/\sigma_1$ la pente du vecteur \overrightarrow{OP} reliant l'origine du repère (le point des désirabilités nulles) et le point P au voisinage duquel on cherche à déterminer les poids. Effectuons le rapport des coordonnées des deux vecteurs et identifions :

$$m_{g} = \frac{\gamma_{2}}{\gamma_{1}} \equiv \frac{w_{2}\sigma_{1}^{w_{1}}\sigma_{2}^{w_{2}-1}}{w_{1}\sigma_{1}^{w_{1}-1}\sigma_{2}^{w_{2}}} = \frac{w_{2}}{w_{1}} \cdot \frac{\sigma_{1}}{\sigma_{2}} = \frac{w_{2}}{w_{1}} \cdot \frac{1}{v}$$

Les deux poids w_1 et w_2 sont les deux inconnues du problème. Les données sont la pente m_g du gradient et celle v de la droite (OP). La figure 9 illustre graphiquement les données de ce problème.

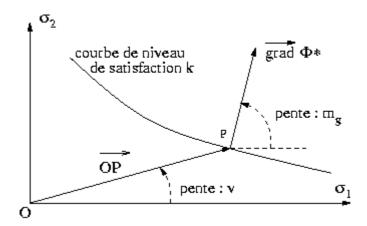


Figure IV.9: illustration graphique des pentes m_g du gradient et v du vecteur \overrightarrow{OP}

Le problème de détermination des poids ainsi posé se ramène donc à un système de deux équations à deux inconnues : $\begin{cases} w_1 + w_2 = 1 \\ w_2/w_1 = m_g \cdot \mathbf{v} \end{cases}$ On pose $u = m_g \cdot \mathbf{v}$ et le système se résout sans difficulté :

$$\begin{cases} w_1 = \frac{1}{1+u} \\ w_2 = \frac{u}{1+u} \end{cases}$$

Nous avons établi la propriété suivante dans le cas de 2 sorties.

Propriété: soit $P \begin{vmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \end{vmatrix}$ un point de ER_{τ} , $v = \sigma_2/\sigma_1$ la pente du vecteur \overrightarrow{OP} , $\overrightarrow{grad}\Phi^* = \begin{vmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{vmatrix}$ le

gradient de satisfaction, $m_g = \gamma_2/\gamma_1$ la pente de ce gradient et $u = m_g \cdot v$. Les **poids calculés** par la méthode du gradient de satisfaction sont :

$$w_1 = \frac{1}{1+u} et \ w_2 = \frac{u}{1+u}$$

Ces formules confirment que plus la pente de la ligne d'égale satisfaction est faible en valeur absolue, plus celle m_g du gradient est forte, plus u est grand, et plus w_1 se rapproche de 0 tandis que w_2 se rapproche de 1, donc plus la sensibilité relative à la sortie S_2 est grande et celle à S_1 faible. Cette propriété sera illustrée par un exemple illustratif au paragraphe IV.5.2.10.

La démarche est la même que dans le cas de deux réponses. Assimilons la surface d'égale satisfaction à la surface de niveau d'une fonction géométrique pondérée des désirabilités :

$$\Phi^*(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n) \equiv \sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2} \cdot ... \cdot \sigma_n^{w_n}$$

Identifions localement les gradients en un point $P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n)$:

$$\overrightarrow{\text{grad}}\Phi^* = \begin{vmatrix} \gamma_1 \equiv \frac{\partial \left[\sigma_1^{w_1}\sigma_2^{w_2}...\sigma_n^{w_n}\right]}{\partial \sigma_1} = w_1 \sigma_1^{w_1-1} \sigma_2^{w_2}...\sigma_n^{w_n} \\ \gamma_2 \equiv \frac{\partial \left[\sigma_1^{w_1}\sigma_2^{w_2}...\sigma_n^{w_n}\right]}{\partial \sigma_2} = w_2 \sigma_1^{w_1} \sigma_2^{w_2-1}...\sigma_n^{w_n} \\ \vdots \\ \gamma_n \equiv \frac{\partial \left[\sigma_1^{w_1}\sigma_2^{w_2}...\sigma_n^{w_n}\right]}{\partial \sigma_n} = w_n \sigma_1^{w_1} \sigma_2^{w_2}...\sigma_n^{w_n-1} \end{vmatrix}$$

Posons $\sigma = \sigma_1^{w_1} \sigma_2^{w_2} ... \sigma_n^{w_n}$ la valeur de la désirabilité globale en P. On obtient le système

$$\begin{cases} w_1 + w_2 + \dots w_n = 1 \\ w_1(\sigma/\sigma_1) = \gamma_1 \\ w_2(\sigma/\sigma_2) = \gamma_2 \quad soit \\ \vdots \\ w_n(\sigma/\sigma_n) = \gamma_n \end{cases} \begin{cases} 1/\sigma \left(\sigma_1 \gamma_1 + \sigma_2 \gamma_2 + \dots + \sigma_n \gamma_n\right) = 1 \\ w_1 = (1/\sigma)\sigma_1 \gamma_1 \\ w_2 = (1/\sigma)\sigma_2 \gamma_2 \\ \vdots \\ w_n = (1/\sigma)\sigma_n \gamma_n \end{cases}$$

On déduit d'abord de la première égalité que $1/\sigma = 1/(\sigma_1\gamma_1 + \sigma_2\gamma_2 + ... + \sigma_n\gamma_n)$, d'où, en remplaçant dans les autres égalités, on obtient une expression générale pour les poids, qui ne fait pas intervenir la valeur de la désirabilité σ en $P: \forall i \in \{1, 2, ..., n\}$,

$$w_i = \frac{\sigma_i \gamma_i}{\sigma_1 \gamma_1 + \sigma_2 \gamma_2 + \ldots + \sigma_n \gamma_n}$$

Nous pouvons établir un résultat encore plus général que celui-ci. Soit en effet un vecteur $\overline{N_P}$ de norme quelconque, mais dont la direction est perpendiculaire à la surface d'égale satisfaction globale σ passant par P. Il est colinéaire au vecteur gradient, lui-même perpendiculaire en P à cette surface. Leurs coordonnées sont donc proportionnelles. Si on note $y_1, y_2, ..., y_n$ les coordonnées de $\overline{N_P}$, alors on peut écrire

$$\overrightarrow{N_P} = \begin{vmatrix} y_1 = k\gamma_1 \\ y_2 = k\gamma_2 \\ \vdots \\ y_n = k\gamma_n \end{vmatrix}$$

On en déduit que les poids peuvent aussi s'écrire : $\forall i \in \{1, 2, ..., n\}$,

$$w_i = \frac{\sigma_i k \gamma_i}{\sigma_1 k \gamma_1 + \sigma_2 k \gamma_2 + \dots + \sigma_n k \gamma_n} = \frac{\sigma_i y_i}{\sigma_1 y_1 + \sigma_2 y_2 + \dots + \sigma_n y_n}$$

Nous avons établi la propriété suivante dans le cas général.

<u>Propriété</u>: soient σ_1 , σ_2 , ..., σ_n les coordonnées d'un point P de ER_τ et y_1 , y_2 , y_n les coordonnées du gradient de satisfaction ou d'un quelconque vecteur normal à la surface d'égale satisfaction passant par P, les **poids calculés** par la méthode du gradient de satisfaction sont, pour tout $i \in \{1, 2, ..., n\}$:

$$w_i = \frac{\sigma_i y_i}{\sigma_1 y_1 + \sigma_2 y_2 + \dots + \sigma_n y_n}$$

Le fait que cette expression des poids puisse être obtenue à partir de la seule connaissance des coordonnées σ_i du point P et de celles y_i d'un quelconque vecteur normal à la surface d'égale satisfaction en P est très intéressant. En effet, nous allons pouvoir privilégier une méthode purement géométrique pour calculer les poids avec ces formules. C'est l'objet de la dernière section de ce chapitre.

IV.5. Description de la procédure mise en place pour le calcul des poids

IV.5.1. Description du problème

IV.5.1.1. Inventaire des objectifs fixés

La procédure de détermination des poids que nous allons développer doit répondre à quelques exigences pratiques.

- La procédure doit pouvoir être suivie par le collège tout entier.
- Elle doit à la fois guider ses travaux et en faire la synthèse.
- Elle résume les données acquises et les données calculées par une feuille de calcul de tableur (EXCEL par exemple).
- Elle utilise la méthode de détermination des poids à partir des surfaces d'égale satisfaction. On rappelle ici que cette méthode ne peut intervenir qu'à un stade avancé du projet, et que la maîtrise des entrées assurant la stabilité des sorties est un préalable fondamental.

Nous allons décrire complètement cette procédure en nous appuyant sur la feuille de calcul qui a été développée, validée dans le cas de n=2 sorties [8]. Ce choix restrictif est justifié par la volonté de rester à un niveau mathématique et informatique simple. En particulier, pour la détermination des coordonnées du vecteur normal à la ligne d'égale satisfaction, nous montrerons que le cas n=2 permet une détermination exacte sans utiliser de sous-programme complexe. Ce choix rend donc complètement lisible le détail des différentes étapes de la procédure.

IV.5.1.2. Notations et définition exacte du problème

Les deux sorties sont notées S_1 et S_2 , leurs valeurs numériques s_1 et s_2 , les fonctions de désirabilité individuelles τ_1 et τ_2 , leurs valeurs dans [0,1] $\sigma_1 = \tau_1(s_1)$ et $\sigma_2 = \tau_2(s_2)$ et la fonction transposée de désirabilité globale $\Phi^*(\sigma_1, \sigma_2) = \Phi(s_1, s_2)$.

Le problème posé peut être formulé ainsi. On cherche à déterminer les poids normalisés w_1 et w_2 ($w_1 + w_2 = 1$) tels que, au voisinage d'un point donné (s_1, s_2) dans l'espace de représentation des sorties ER_s correspondant au point $P(\sigma_1 = \tau_1(s_1), \sigma_2 = \tau_2(s_2))$ dans l'espace de représentation des désirabilités ER_τ , la fonction transposée de désirabilité globale s'identifie à la fonction géométrique pondérée :

$$\Phi^*(\sigma_1,\sigma_2) \equiv \sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2}$$

Les données du problème sont les deux fonctions de désirabilité individuelle τ_1 et τ_2 , et la fonction de désirabilité globale Φ .

IV.5.2.1. Organigramme

La figure IV.10 donne l'organigramme de la procédure de détermination des poids en respectant les règles de la symbolique algorithmique présentée dans l'annexe A. Il est découpé en étapes successives numérotées de 1 à 8 que nous allons ensuite décrire et commenter.

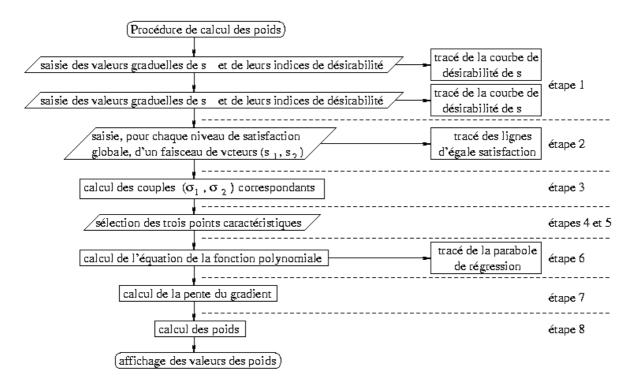


Figure IV.10 : organigramme de la procédure de détermination des poids par la méthode des lignes d'égale satisfaction

Pour plus de clarté, nous allons choisir un exemple illustratif d'optimisation dans le domaine des dépôts. Chaque illustration se référant à celle-ci sera annoncée par l'entête « Exemple d'optimisation dans le domaine des dépôts ». Nous allons maintenant décrire cet exemple.

IV.5.2.2. Exemple d'optimisation dans le domaine des dépôts

Imaginons qu'on cherche à réaliser un dépôt métallique sur un substrat donné. Les deux sorties sont :

- S_1 , l'épaisseur du dépôt mesurée en micromètres, dont la valeur s_1 varie de 11 à 25 et qu'on cherche (par exemple) à minimiser;
- S_2 l'adhérence du dépôt mesurée par un critère chiffré s_2 variant de 0 (le dépôt s'enlève en passant le doigt dessus) à 10 (le dépôt résiste à une contrainte d'arrachement maximale), variant ici par valeurs demi-entières, qu'on cherche à maximiser.

Le produit idéal (mais non nécessairement réalisable) a pour couple de sorties (11μ m,10). Pour définir la valorisation de l'échantillon obtenu, nous nous plaçons dans un cas très schématique, correspondant plus au fonctionnement d'un prestataire de services que d'un laboratoire de recherches. Un échantillon ayant les caractéristiques idéales (11μ m,10) sera payé Π = 1000 euros par l'organisme qui effectue la commande. Si les caractéristiques ne sont pas optimales, le prix payé sera plus faible. Cette valorisation économique va nous permettre d'illustrer simplement la désirabilité globale et les lignes d'égale satisfaction.

Nous allons maintenant détailler, étape par étape, la procédure d'acquisition des données numériques et le calcul explicite des poids. Cette procédure a été programmée dans une feuille de calcul EXCEL : les extraits de cette feuille sont donnés dans l'annexe G. Nous reprenons ici tous les calculs et opérations intermédiaires afin de montrer le passage entre le développement théorique précédent et son application pratique.

IV.5.2.3. Acquisition des fonctions de désirabilité individuelle

Dans un premier temps, les spécialistes du collège définissent les objectifs relatifs à chacune des deux sorties S_1 et S_2 . Pour cela, ils affectent à chaque valeur numérique de la sortie un niveau de satisfaction de l'objectif compris entre 0 et 1 et construisent point par point la fonction de désirabilité correspondante.

ETAPE 1: ACQUISITION DES FONCTIONS DE DESIRABILITE INDIVIDUELLE

Cette étape ne pose aucune difficulté théorique ni technique. Elle est couramment pratiquée dans l'entreprise lors de la définition des objectifs [9]. Les trois types de fonctions de désirabilité sont possibles : minimisation, cible ou maximisation. La réalisation pratique prend la forme d'un simple tableau d'affectation : dans la première colonne figure une suite de valeurs graduelles pour la valeur numérique s_i de la sortie i, entre la valeur minimale $s_{i\min}$ et la valeur maximale $s_{i\max}$. Le collège procède à la saisie des désirabilités correspondantes selon la convention de la note 0 pour la ou les valeurs inadmissibles (rejet) et de la note 1 pour la ou les valeurs idéales. Exemple eodep Dans l'exemple illustratif présenté dans le paragraphe précédent, chaque valeur des grandeurs est affectée d'une désirabilité.

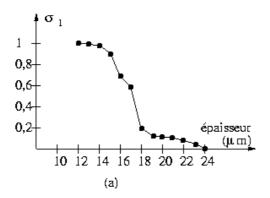
- L'épaisseur s_1 , variant de 11 à 25 micromètres, est affectée d'une désirabilité qui vaut, par exemple, 1 pour $s_1 = 11 \,\mu$ m et 0 à partir de $s_1 = 24 \,\mu$ m.
- L'adhérence s_2 , variant de 0 à 10, est affectée d'une désirabilité qui vaut, par exemple, 0 jusqu'à $s_2 = 2$ et 1 à partir de $s_2 = 9$.

Le tableau 4.1 donne un extrait des tableaux de saisie correspondant aux deux sorties.

$s_1 (\mu m) \sigma_1 = \tau_1(s_1)$		s_2	$\sigma_2 = \tau_2(s_2)$	
:	:	:	:	
13	0,95	5,0	0,30	
14	0,92	5,5	0,37	
15	0,85	6,0	0,45	
16	0,70	6,5	0,52	
17	0,58	7,0	0,60	
18	0,20	7,5	0,80	
:	: :	:	:	

Tableau IV.1 : extrait du tableau de saisie pour les fonctions de désirabilité τ_1 et τ_2

La feuille de calcul donne automatiquement l'allure de la courbe représentative de la fonction de désirabilité (voir annexe G). Cette courbe permettra une détermination graphique de la désirabilité correspondant à une valeur quelconque de la sortie ; son équation est $\sigma_i = \tau_i(s_i)$. Nous reproduisons, sur la figure 11, l'allure des deux courbes correspondant à l'exemple traité. Elles permettent à l'utilisateur de visualiser les fonctions de désirabilité.



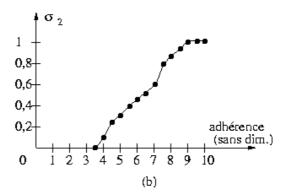


Figure IV.11 (a) allure de la courbe de désirabilité sur l'épaisseur (b) allure de la courbe de désirabilité sur l'adhérence

IV.5.2.4. Acquisition de la fonction de désirabilité globale

La fonction transposée Φ^* de désirabilité globale est une fonction des deux variables σ_1 et σ_2 . Elle se déduit de la fonction Φ de désirabilité globale (fonction des deux variables s_1 et s_2) si on connaît les fonctions de désirabilités individuelles τ_1 et τ_2 . C'est le cas ici, après l'étape 1. Nous allons donc nous attacher à déterminer la valeur de la désirabilité globale attachée à chaque couple de sorties (s_1, s_2) . On peut imaginer deux procédures distinctes :

- Acquisition directe: on fait un tableau complet avec tous les couples possibles correspondant à des valeurs graduelles des deux sorties entre leur valeur minimale et maximale respectives. Ensuite, on passe en revue les couples selon un ordre prédéterminé (ligne par ligne, colonne par colonne, etc....) ou de façon aléatoire et on demande à chaque fois aux spécialistes du collège de donner le niveau de désirabilité qu'ils attribuent à chacun de ces couples. Ils sont invités à répondre à la question : « Quelle note entre 0 et 1 donnezvous à un échantillon dont les caractéristiques sont : valeur s_1 pour la sortie s_2 ? ».
- Acquisition réciproque : on inventorie des valeurs graduelles de désirabilité globale et on demande aux spécialistes du collège de produire au moins trois exemples de couples (s_1, s_2) dont la réalisation pour un échantillon donné lui vaudrait la désirabilité globale en question. Ils sont invités à répondre à la requête : « Donnez les valeurs des sorties s_1 et s_2 d'au moins trois échantillons distincts qui mériteraient la note σ ($\sigma \in [0,1]$) ».

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans la procédure d'acquisition directe, on demande aux spécialistes de donner une note à un échantillon donné. Par exemple, un échantillon dont le dépôt a une épaisseur $s_1 = 18 \,\mu$ m et l'adhérence $s_2 = 6,0$ est valorisé par un prix d'achat de 320 euros, ce qui correspond à une désirabilité globale $\sigma = 0,32$ (car le produit idéal est payé 1000 euros). Dans la procédure d'acquisition réciproque, on demande aux spécialistes de dresser les caractéristiques d'un échantillon correspondant à une note donnée. Par exemple, pour $\sigma = 0,55$, l'organisme qui effectue la commande est prêt à payer 550 euros un échantillon dont l'épaisseur du dépôt est $s_1 = 18 \,\mu$ m et l'adhérence $s_2 = 6,5$.

Ces deux procédures (acquisition directe et réciproque) ont été largement étudiées par les spécialistes du sondage [10,11]. Il apparaît que la première procédure est très imparfaite. Elle introduit des biais de jugement, parmi lesquels on peut citer les plus marquants. Nous utilisons, dans la suite de ce paragraphe, un vocabulaire qui est plus utilisé dans les sciences psychologiques que dans les sciences physiques et mathématiques.

- Le rang auquel un couple est cité dans l'inventaire modifie la note qui lui est attribuée. Ainsi, le jugement évolue dans le temps, le jury devenant de plus en plus sévère ou au contraire de plus en plus souple au cours d'une session. Il n'est donc pas rare de constater qu'après un inventaire de nombreux couples, si on propose à nouveau un couple qui a été jugé au début de la session, le jury lui attribue une note sensiblement différente de celle qu'il lui avait attribuée la première fois.
- Lorsque ce genre d'incident arrive, on observe que le jury émet souvent le désir de reprendre les couples étudiés en début de session. Mais cette remise en cause d'un consensus passé induit souvent des tensions dans le collège : ceux qui avaient fermement défendu les premiers arbitrages peuvent objecter que la remise en cause des dix premières notes n'exclut pas celle des dix suivants, voire de la totalité des notes déjà attribuées.
- Dans le cas étudié, l'appréciation se ramène à un débat binaire entre l'influence des deux sorties. Il est possible que celui ou ceux qui défendent l'importance de l'une des deux sorties deviennent de moins en moins pugnaces, pour des raisons souvent très humaines, au fil du débat. On assiste alors à un effondrement de l'influence de cette sortie sur la désirabilité globale ; cet effondrement ne se serait peut-être pas produit si les intervenants du collège n'avaient pas été dans la même pièce.
- Enfin, le jugement est presque toujours altéré après le débat sur un couple extrême du type : valeur de s_1 exceptionnellement bonne, valeur de s_2 extrêmement mauvaise, à la limite du rejet. La discussion devient alors assez vive, les <<pre>expartisans>> de S_1 défendant largement l'échantillon, ceux de S_2 le dénigrant. Lorsque l'opposition est très grande, le consensus devient très difficile à trouver, et la variabilité de la note est maximale. Si l'un des deux camps donne l'impression de l'emporter (celui de S_1 par exemple, si la note finale est bonne), les couples qui viendront ensuite ne seront sans doute pas jugés très objectivement, les partisans de S_2 éprouvant un ressentiment et un désir de se rattraper, ceux de S_1 étant prêts à faire des concessions.

Pour toutes ces raisons, nous privilégions la seconde procédure, celle de l'acquisition réciproque. Ce qui la rend encore plus intéressante pour la méthode que nous utilisons est que cette procédure d'acquisition met en avant la notion d'égale satisfaction. En effet, en passant en revue les valeurs graduelles de la satisfaction globale σ , on construit très exactement des lignes d'égale satisfaction dans l'espace des sorties ER_s .

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans l'exemple illustratif, à un niveau de désirabilité donné, $\sigma = 0,60$ par exemple, le collège a toute latitude pour définir au moins trois couples. C'est un moment important de dialogue et de débat, où tous doivent tomber d'accord sur quelques compromis possibles donnant un niveau global de satisfaction de 60%. Par exemple, les trois couples retenus peuvent être (13;5,5), (16;6,5) et (18;7,5). On peut imaginer que le contrat passé entre l'organisme payeur et le laboratoire prenant le marché prévoit une rétribution de $\sigma \cdot 1000 = 700$ euros pour un quelconque de ces trois produits. La figure IV.12 donne l'allure de la ligne d'égale satisfaction globale de niveau $\sigma = 0,60$ dans l'espace de représentation des sorties ER_s .

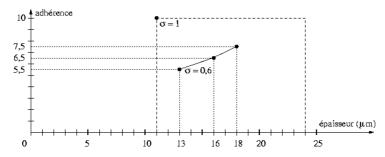


Figure IV.12 : exemple de courbe d'égale satisfaction globale ($\sigma = 0, 6$) dans l'espace de représentation des sorties ER_s

<u>Propriété</u>: la procédure d'acquisition réciproque revient à déterminer des points représentatifs de lignes d'égale satisfaction dans l'espace des sorties. Elle permet une définition chiffrée de l'importance relative des différents objectifs.

Cette procédure répond parfaitement aux critères définis dans l'inventaire des objectifs fixés (cf. paragraphe IV.5.1.1). Lors de cette acquisition, c'est le collège au complet qui synthétise ses choix en définissant très précisément l'objectif global. La procédure permet au collège à la fois de définir comment doit se situer l'équilibre entre les deux objectifs et de donner à cet équilibre une définition chiffrée. Elle fait l'objet de la deuxième étape.

ETAPE 2 : SAISIE DE COUPLES DE DESIRABILITES GLOBALES GRADUELLES

La feuille de calcul EXCEL (voir annexe G) propose une suite de valeurs graduelles croissantes de la désirabilité globale σ . Pour chacune d'elles, le collège procède à la saisie d'au moins trois couples de sorties correspondant à ce niveau σ . Le tableau IV.2 donne un exemple de tableau de saisie.

σ	$s_1 (\mu m)$	s_2
: 0.55		
0,55	•••	• • •
	•••	•••
0.60	• • •	• • •
0,60	13	5,5
	16	6,5
0,70	18	7,5
0,70	•••	• • • •
	•••	•••
•	•••	•••

Tableau IV.2 : exemple de tableau de saisie pour la fonction de désirabilité globale

Lors de la définition du contrat entre les prescripteurs et le laboratoire de recherche, le collège est réuni. Nous pouvons donc mettre en évidence une double dynamique.

- D'une part, le contrat peut définir une valorisation financière du produit optimal fourni par le laboratoire, cette valorisation pouvant être immédiatement convertible en désirabilité : si le produit idéal (tel que les désirabilités associées à chaque objectif valent toutes 1) est payé 1000 euros, un produit non idéal payé 740 euros par exemple a une désirabilité globale $\sigma = 0,74$. La rédaction du contrat entraîne donc la définition de désirabilités globales.
- D'autre part, si le collège réuni procède à la rédaction des tableaux de désirabilités individuelles et globales, l'accord des différents intervenants sur ces tableaux est un préalable encourageant à la rédaction d'un contrat qui satisfera les deux parties.

À ce stade, on connaît les valeurs des réponses (s_1, s_2) d'un certain nombre de points des lignes d'égale satisfaction.

IV.5.2.5. Transposition dans l'espace des désirabilités

On doit maintenant se placer dans l'espace des désirabilités. Grâce aux fonctions de désirabilité individuelle acquises à la première étape, on détermine pour chaque couple de sorties (s_1, s_2) le couple des désirabilités correspondantes $(\sigma_1 = \tau_1(s_1), \sigma_2 = \tau_2(s_2))$. C'est l'objet de la troisième étape.

Cette étape n'est pas automatisée dans la feuille de calcul EXCEL (voir annexe G), car nous voulons rester le plus fidèle possible aux fonctions de désirabilité définies par le collège. Par suite, la détermination de la désirabilité σ_i associée à une sortie s_i n'est possible que par la lecture sur le graphique correspondant. Le collège procède donc à la saisie des couples de désirabilités $(\sigma_1 = \tau_1(s_1); \sigma_2 = \tau_2(s_2))$ associés à chaque point de chaque ligne de satisfaction donnée. Le tableau 2 donne un exemple de tableau de saisie cohérent avec les tableaux 4.1 et 1.

σ :	S_1	S_2	$\tau_1(s_1)$	$\tau_2(s_2)$
0,60	13	5,5	0,95	0,37
	16	6,5	0,70	0,52
	18	7,5	0,20	0,80
:				

Tableau IV.3 : exemple de tableau de transposition des valeurs des sorties s_1 et s_2 aux valeurs de désirabilité correspondantes $\sigma_1 = \tau_1(s_1)$ et $\sigma_2 = \tau_2(s_2)$

IV.5.2.6. Définition de la zone de travail

Les lignes d'égale satisfaction peuvent couvrir la totalité des couples de sorties possibles *a priori*. Or, il est rare qu'on s'écarte beaucoup d'une zone particulière du domaine défini par les valeurs possibles des deux sorties. On peut donc envisager d'introduire une souplesse dans la définition des poids, avec la possibilité que ceux-ci ne soient pas définis de façon universelle, mais plutôt au voisinage de certains points de lignes de satisfaction particulières.

<u>Définition</u>: une **zone de travail** est définie par un point particulier sur une ligne d'égale satisfaction particulière, au voisinage duquel on cherche à déterminer les poids.

ETAPE 4: DELIMITATION DE LA ZONE DE TRAVAIL

Le collège est invité à définir un point au voisinage duquel il souhaite calculer les poids. Ce point définit une valeur de la satisfaction globale, ce qui permet de repérer la ligne d'égale satisfaction correspondante.

IV.5.2.7. Définition du tableau de travail

Après avoir défini la zone de travail, et le point central en particulier, on peut choisir deux autres points de la même ligne de satisfaction, suffisamment proches de lui pour rester dans la zone de travail, de part et d'autre du point central sur la même ligne d'égale satisfaction.

<u>Définition</u>: le **tableau de travail** est formé des coordonnées dans ER_{τ} de trois points sur la même ligne d'égale satisfaction: le point central de la zone de travail est entouré des deux autres points sur la même ligne dans cette même zone.

ETAPE 5: DEFINITION DU TABLEAU DE TRAVAIL

On cherche le point au centre de la zone de travail dans le tableau général obtenu à la fin de la procédure de transposition (étape 3). On choisit les deux points qui l'entourent avec la même désirabilité globale. On lit ainsi, pour ces trois points de désirabilité σ , les trois couples de désirabilités individuelles de chaque sortie.

Le tableau de travail est recopié à un endroit prédéfini de la feuille de calcul : il suffit de recopier les couples d'indices de satisfaction individuelles des trois points. Choisissons comme tableau de travail l'extrait donné au tableau IV.3. Nous allons maintenant exploiter l'information contenue dans ce tableau.

IV.5.2.8. Approximation quadratique de la ligne d'égale satisfaction

À ce stade, il est possible de tracer, dans l'espace de représentation des désirabilités ER_{τ} , la ligne d'égale satisfaction sélectionnée. La figure IV.13 donne le tracé de la ligne de niveau $\sigma = 0,60$ correspondant au tableau de travail IV.3.

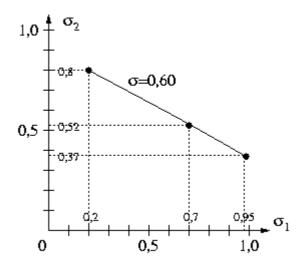


Figure IV.13 : ligne de niveau $\sigma = 0,60$ correspondant au tableau de travail 2, tracée dans l'espace de représentation des désirabilités ER_{τ}

Nous devons déterminer la pente m_g du vecteur gradient pour calculer les poids grâce aux formules établies au paragraphe 4.3.1. Une méthode graphique est possible. Mais elle est, d'une part difficilement réalisable dans le cadre d'une feuille de calcul EXCEL, d'autre part impossible à généraliser dans le cas où le nombre n de sorties est supérieur ou égal à 3. Nous privilégions donc une méthode algébrique nécessitant dans un premier temps la détermination de l'équation de la parabole passant par les trois points considérés.

<u>Définition</u>: l'**approximation quadratique** est la fonction du second degré f dont la courbe représentative dans l'espace de représentation des désirabilités ER_{τ} , d'équation $\sigma_2 = f(\sigma_1)$, passe par les trois points sélectionnés dans le tableau de travail.

Remarquons que si les trois points sont alignés, f n'est pas définie, mais il sera alors très facile de déterminer la pente du gradient, comme nous le verrons au paragraphe suivant.

Nous devons donc déterminer les trois coefficients a, b, c, définissant la fonction $f(x) = ax^2 + bx + c$ telle que chaque couple de désirabilités des trois points du tableau de travail vérifie

$$\sigma_2 = f(\sigma_1) = a\sigma_1^2 + b\sigma_1 + c$$

Posons $x = \sigma_1$ et $y = \sigma_2$. Notons A_1 , A_2 et A_3 les trois points et $(x_1; y_1)$, $(x_2; y_2)$, $(x_3; y_3)$ leurs coordonnées respectives. Nous devons donc résoudre le système suivant dont les inconnues sont (a,b,c):

$$\begin{cases} y_1 = ax_1^2 + bx_1 + c \\ y_2 = ax_2^2 + bx_2 + c \text{ soit } \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 = ax_3^2 + bx_3 + c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ b \\ a \end{bmatrix}$$

La matrice colonne des coefficients est obtenu en inversant la matrice de Van der Monde [12] :

$$\begin{bmatrix} c \\ b \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

Cette inversion est réalisable de façon exacte.

Propriété: les coefficients de l'approximation quadratique de la ligne d'égale désirabilité passant par les trois points $A_1 \begin{vmatrix} x_1 \\ y_1 \end{vmatrix}$, $A_2 \begin{vmatrix} x_2 \\ y_2 \end{vmatrix}$ et $A_3 \begin{vmatrix} x_3 \\ y_3 \end{vmatrix}$ sont donnés matriciellement par l'égalité suivante

:

$$\begin{bmatrix} c \\ b \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-x_2x_3}{(x_3 - x_1)(x_1 - x_2)} & \frac{-x_1x_3}{(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)} & \frac{-x_1x_2}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_3)} \\ \frac{x_2 + x_3}{(x_3 - x_1)(x_1 - x_2)} & \frac{x_1 + x_3}{(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)} & \frac{x_1 + x_2}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_3)} \\ \frac{-1}{(x_3 - x_1)(x_1 - x_2)} & \frac{-1}{(x_1 - x_2)(x_2 - x_3)} & \frac{-1}{(x_3 - x_1)(x_2 - x_3)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

On est alors en mesure d'effectuer l'étape suivante, purement calculatoire

ETAPE 6: DETERMINATION DES COEFFICIENTS DE L'APPROXIMATION QUADRATIQUE

On calcule les neuf coefficients de la matrice inverse de Van der Monde, puis on en déduit les valeurs numériques des coefficients a, b et c grâce aux formules précédentes. La feuille de calcul EXCEL (voir annexe G) calcule automatiquement ces valeurs.

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans le problème illustratif de cette section, les valeurs des coefficients de la matrice inverse de Van der Monde et les valeurs des coefficients de l'approximation quadratique de la ligne d'égale satisfaction $\sigma = 0,60$ ont été calculés. Leurs valeurs sont respectivement

$$\begin{bmatrix} 0,7467 & -1,5200 & 1,7733 \\ -4,8000 & 9,2000 & -4,4000 \\ 5,3333 & -8,0000 & 2,6667 \end{bmatrix} et \begin{cases} a = -0,05333 \\ b = -0,51200 \\ c = 0,90453 \end{cases}$$

Rapportons ici toutes les valeurs numériques, afin de vérifier numériquement la validité des calculs :

$$\begin{cases} x_1 = 0.95 \\ x_2 = 0.70 \\ x_3 = 0.20 \end{cases} \begin{cases} y_1 = 0.37 \\ y_2 = 0.52 \\ y_3 = 0.80 \end{cases}$$

On peut ainsi vérifier que

$$\begin{bmatrix} 1 & 0.95 & 0.95^{2} \\ 1 & 0.70 & 0.70^{2} \\ 1 & 0.20 & 0.20^{2} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0.7467 & -1.5200 & 1.7733 \\ -4.8000 & 9.2000 & -4.4000 \\ 5.3333 & -8.0000 & 2.6667 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

et que

$$\begin{cases} 0,37 = -0.05333 \times 0.95^{2} - 0.51200 \times 0.95 + 0.90453 \\ 0,52 = -0.05333 \times 0.70^{2} - 0.51200 \times 0.70 + 0.90453 \\ 0,80 = -0.05333 \times 0.20^{2} - 0.51200 \times 0.20 + 0.90453 \end{cases}$$

La feuille de calcul EXCEL propose également une vérification graphique de la qualité de l'interpolation quadratique. La figure IV.14 montre la parabole d'interpolation quadratique dans le cas de l'exemple numérique. Celle-ci a été tracée sur un intervalle de désirabilités en abscisse et en ordonnée dépassant l'intervalle habituel [0,1], afin de mieux distinguer qu'il s'agit d'une parabole passant par les trois points A_1 , A_2 et A_3 du tableau de travail.

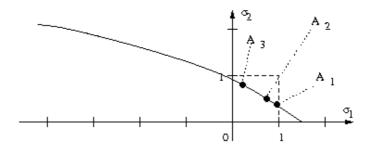


Figure IV.14: parabole d'interpolation de la ligne d'égale satisfaction $\sigma = 0,60$

IV.5.2.9. Calcul de la pente du vecteur gradient

Nous pouvons déduire de ce qui précède la pente m_g du vecteur gradient de satisfaction qui est, rappelons-le, la pente de tout vecteur normal à la tangente à la ligne d'égale satisfaction. Dans le cas où les trois points du tableau de travail sont alignés, la pente m_g est égale à l'opposé de

l'inverse de la pente de la droite passant par ces trois points : $m_g = -1/\frac{y_3 - y_1}{x_3 - x_1}$.

Dans tous les autres cas, nous utilisons l'approximation quadratique f établie au paragraphe précédent et nous nous plaçons au point A_2 qui est le centre de la zone de travail. La pente de la tangente à la parabole au point A_2 est $f'(x_2)$ où f' désigne la dérivée de f. Il vient : $f'(x_2) = 2ax_2 + b$. Le vecteur gradient est perpendiculaire à la tangente : sa pente est donc l'opposée de l'inverse de la pente de la tangente. On en déduit que la pente du vecteur gradient de satisfaction en A_2 est $m_g = \frac{-1}{f'(x_2)} = \frac{-1}{2ax_2 + b}$.

ETAPE 7 : DETERMINATION DE LA PENTE
$$m_{_{g}}\,$$
 DU GRADIENT EN $A_{_{2}}\,$

La feuille de calcul donne cette valeur calculée à partir des valeurs de x_2 (figurant dans le tableau de travail) et de a, b et c calculées à l'étape 6.

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans le problème illustratif de cette section, la pente calculée est $m_g = 1,7045$. Elle est positive, conformément à la propriété 4.1. La figure IV.15 permet de vérifier que le vecteur gradient dont la pente a été calculée est bien perpendiculaire à la ligne d'égale satisfaction $\sigma = 0,60$.

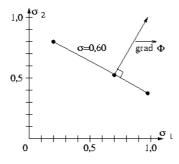


Figure IV.15 : vérification graphique de la pente du gradient de satisfaction en A_2

IV.5.2.10. Calcul des poids

Nous pouvons enfin calculer les valeurs des poids grâce aux formules établies au paragraphe 4.3.1. On calcule la pente de la droite joignant l'origine O et le point A_2 : $\mathbf{v} = y_2/x_2$. On en déduit $u = m_g \cdot \mathbf{v}$ et enfin les poids normalisés $\begin{cases} w_1 = \frac{1}{1+u} \\ w_2 = \frac{u}{1+u} \end{cases}$ On en déduit le calcul effectué dans la dernière étape.

ETAPE 8: DETERMINATION DES POIDS

La feuille de calcul donne la valeur calculée de v à partir des valeurs de x_2 et y_2 (figurant dans le tableau de travail) puis celle de u grâce à la valeur de m_g calculée à l'étape 7 et enfin les valeurs des poids w_1 et w_2 .

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans le problème illustratif de cette section, on calcule $v = y_2/x_2 = 0,52/0,7 = 0,7428$. On a calculé au paragraphe précédent $m_g = 1,7045$, on en déduit $u = m_g \cdot v = 1,2662$ et enfin les poids normalisés

$$\begin{cases} w_1 = \frac{1}{1+u} = 0,4413 \\ w_2 = \frac{u}{1+u} = 0,5587 \end{cases}$$

Ces valeurs confirment la propriété qualitative établie au paragraphe 4.3.1 : la ligne d'égale satisfaction $\sigma = 0,60$ est faiblement inclinée (sa pente est inférieure à 1 en valeur absolue) ; la sensibilité est donc plus grande par rapport à s_2 que par rapport à s_1 , et on vérifie effectivement que $w_2 > w_1$. Nous pouvons enfin vérifier la cohérence de ces résultats avec la définition des poids : la désirabilité globale σ doit être la moyenne géométrique pondérée des désirabilités individuelles. Le calcul donne :

$$\sigma_1^{w_1} \cdot \sigma_2^{w_2} = 0,7^{0,4413} \cdot 0,52^{0,5587} = 0,5929$$

ce qui est en excellent accord avec la valeur 0,60 définie par le collège pour le point A_2 .

Nous allons commenter cet accord dans le prochain paragraphe.

IV.5.2.11. Justesse et cohérence de l'appréciation du collège

La **justesse** [13] est l'étroitesse de l'accord entre l'espérance mathématique du résultat d'une mesure et la valeur vraie. On peut donc noter qu'un désaccord entre la valeur calculée de la désirabilité globale au point A_2 et la valeur définie est un indicateur de manque de justesse sur l'appréciation des désirabilités globales par le collège. En particulier, si ce point avait été affecté de la désirabilité globale $\sigma=0,75$ par exemple, il aurait été flagrant qu'on aurait accordé une désirabilité globale supérieure simultanément aux deux désirabilités individuelles ($\sigma_1=0,7$ et $\sigma_2=0,52$); ce serait absurde car un produit donnant 70% de satisfaction pour un des critères et 52% pour l'autre ne peut recueillir un niveau de satisfaction globale de 75%.

La **fidélité** [13] est l'étroitesse de l'accord entre les résultats d'une mesure indépendants obtenus sous des conditions stipulées, ce qui équivaut à un faible écart-type, sans relation avec la valeur vraie. On peut donc noter que le principe de la détermination des poids que nous avons présenté ici est basé sur l'hypothèse d'une fidélité d'appréciation des désirabilités par le collège, qui se traduit géométriquement par des faisceaux de lignes d'égale satisfaction non sécantes.

En somme, la méthode que nous avons présentée nécessite une attitude cohérente du collège dans son appréciation des désirabilités globales affectées aux produits.

IV.6. Conclusion

Dans ce chapitre IV, nous avons d'abord montré l'importance du choix des coefficients de pondération des divers objectifs. Nous avons exposé deux méthodes existantes de détermination des poids, le tri croisé et la méthode des cartes. Nous avons remarqué que la méthode du tri croisé, la plus adaptée à une situation complexe où de nombreux objectifs sont exprimés, est délicate à mettre en œuvre et nécessite des procédures de correction de la matrice des importances relatives. Nous avons ensuite exposé une méthode nouvelle que nous avons développée, simple à mettre en œuvre : la méthode d'analyse des surfaces d'égale satisfaction. Nous avons cherché à l'asseoir sur des bases théoriques solides et à la rendre totalement opérationnelle. Ainsi, nous avons développé :

- une procédure complète d'acquisition des désirabilités individuelles ;
- une procédure d'acquisition réciproque des désirabilités globales ;
- une procédure de sélection d'une zone puis d'un tableau de travail, extrait du tableau des désirabilités individuelles donnant une égale désirabilité globale donnée ;
- un ensemble de formules mathématiques permettant le calcul explicite des poids à partir du tableau de travail.

•

Cette méthode est opérationnelle grâce à une feuille de calcul EXCEL directement utilisable dans le cas à deux sorties. Nous avons montré que l'utilisation de cette procédure par le collège, avec la phase déterminante de l'acquisition réciproque des désirabilités globales, forme un moment privilégié de discussion : le contrat liant les prescripteurs et le laboratoire de recherche se trouve ainsi clarifié.

La généralisation de cet outil à n sorties pourrait être réalisée au prix d'un important travail informatique, mais sans nécessiter de travail théorique supplémentaire, car elle utilise les formules définissant les poids à partir des coordonnées d'un vecteur normal à la surface d'égale désirabilité établies dans ce chapitre.

Dans le dernier chapitre, nous allons étudier la possibilité d'utiliser la méthode itérative du simplexe en réalisant plus d'une expérience entre deux analyses simpliciales.

Bibliographie du chapitre IV

- [1] SANZ J., de DIEGO A., RAPOSO J. C., MADARIAGA J. M. Routine analysis of mercury species using commercially available instrumentation: chemometric optimisation of the instrumental variables, Analytica Chimica Acta 486, 255-267, 2003.
- [2] GENESTIE B., Obtention de xylo-oligosaccharides (XOS) d'intérêt prébiotique à partir de sons de céréales : optimisation par plans d'expériences, actes du colloque Expérimentique, Orléans, 15 juin 2006.
- [3] LIMAYEN F., Modèles de pondération par les méthodes de tri croisé pour l'aide à la décision collaborative en projet, thèse soutenue le 23 novembre 2001, École Centrale de Paris, 2001-26.
- [4] COURTOT H., *La gestion des risques dans les projets*, Production et techniques quantitatives appliquées à la gestion, Ed. S. Giard, volume 1, Éditions numéro 1, Economica, 1998.
- [5] SIMOS J., Évaluer l'impact sur l'environnement, une approche originale par l'analyse multicritère et la négociation, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1990.
- [6] FIAT O., BESSAUDOU A., COSSET F., Calculation of weights from equal satisfaction surfaces, accepté pour publication en juillet 2007 dans la revue Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems.
- [7] FIAT O., Toute la physique de SPÉ, PC-PSI, éditions Belin, ISBN 2-7011-4114-1, page 110, 2005.
- [8] FIAT O., Une procédure de calcul des coefficients de pondération dans l'optimisation multicritère, le multisimplexe en particulier, actes du colloque Expérimentique, Orléans, 15 juin 2006.
- [9] MILLER RICHARD E., *The Design and Implementation of Employee Opinion Surveys*, Employment relations today, 315-319, hiver 1989-1990.
- [10] SCARPELLO V., VANDENBERG R. J., *Some Issues to Consider When Surveying Employee Opinions*, J. W. Jones et al., Applying Psychology Business, The handbook for managers and human resource professionals, Lexington, 1991.
- [11] HARWOOD P. L., Enquêtes menées auprès des employés de la fonction publique : expériences et facteurs de succès, Les pratiques de gestion, Centre canadien de gestion, 20, ISBN 0-662-62991-4, 1998, disponible en ligne à l'adresse
 - www.ccmd-ccg.gc.ca/Research/publications/pdfs/82.fra.pdf
- [12] RAMIS E., DESCHAMPS C., ODOUX J., Cours de mathématiques spéciales, tome 1, éditions Masson, 1997.
- [13] AFNOR, NF ISO 5725-1, Application de la statistique, exactitude (justesse et fidélité) des résultats et méthodes de mesure. Partie 1 : principes généraux et définitions, AFNOR, éd. Paris, 1994.

Chapitre V. Campagne d'expériences

Les logiciels d'optimisation des plans d'expérience guident l'expérimentateur dans la succession des manipulations. Parfois, les contraintes économiques, pratiques, techniques, ou organisationnelles poussent les expérimentateurs à travailler sous forme de campagnes d'expériences plutôt que par expériences au coup par coup. Dans la première section de ce chapitre, nous dresserons une liste de cas particuliers. Dans la deuxième section, nous montrerons que cette façon de procéder n'est pas incompatible avec l'utilisation de logiciels d'optimisation, dans le cas particulier des logiciels de simplexe monocritère et de multisimplexe ; ensuite, nous développerons une procédure d'optimisation par campagnes d'expériences, proposant à l'utilisateur de tester, dans chaque campagne, tout ou partie des sommets définis par le simplexe modifié. Dans la troisième section, nous jaugerons la pertinence de la méthode décrite.

V.1. Contextes particuliers justifiant une campagne d'expériences

Nous allons d'abord donner un modèle d'organisation du laboratoire procédant à la fabrication d'un produit et à la mesure de la ou des réponses.

V.1.1. Contraintes de fabrication et de qualification

V.1.1.1. Situation de la fabrication dans la démarche globale

Nous conservons dans ce chapitre la terminologie présentée au paragraphe I.2.2. Le laboratoire va procéder selon une démarche, découpée en trois grandes étapes, que nous avons synthétisée dans la fiche méthodologique de la figure 5.1. Cette fiche permet d'avoir une vision globale de la structure de notre thèse, elle est donc reproduite à nouveau sur la figure 1.

- La première étape est une étude préalable. Le laboratoire va d'abord procéder à un certain nombre de manipulations préliminaires pour se familiariser avec les spécificités expérimentales de l'étude. Ensuite, il procédera à la fabrication complète de quelques produits. Il pourra ainsi déterminer les limites du domaine expérimental et mettre en évidence, en utilisant éventuellement une méthode de plans d'expériences, le jeu de paramètres influents formant les entrées.
- La deuxième étape est une optimisation. En utilisant éventuellement une méthode itérative de simplexe (cf. chapitre 1), le laboratoire va procéder à une suite de fabrications de produits, mesurer à chaque fois la réponse (dans le cas d'une optimisation monocritère par un simplexe) ou les réponses (dans le cas d'une optimisation multicritère par un multisimplexe, cf. chapitre 3) sur le produit. Les valeurs mesurées pour ces réponses permettent de suivre l'évolution du produit vers l'optimalité telle qu'elle a été définie dans le chapitre 3 (définition de la désirabilité) et dans le chapitre 4 (définition et calcul des poids dans la constitution de la désirabilité globale).
- La troisième étape, nécessaire dans le cas d'une industrialisation de la fabrication ou de la validation des résultats du laboratoire avant une publication, est une mise à l'épreuve de la fiabilité du protocole (cf. chapitre 2); celle-ci nécessite à nouveau la fabrication de produits dans des conditions différentes, avec d'autres valeurs des facteurs non principaux, avec d'autres machines, par d'autres opérateurs. La mesure de la ou des réponses doit être effectuée à chaque fois pour contrôler le maintien de l'optimalité du produit. Ainsi présentée, la démarche du laboratoire apparaît comme une suite de fabrications et de mesures entrecoupées d'analyses et de calculs. Nous allons montrer que sous certaines conditions, l'étape d'optimisation peut être effectuée avec profit en procédant à des campagnes d'expériences, c'est-à-dire en effectuant plusieurs fabrications et mesures consécutives entre deux phases d'analyse.

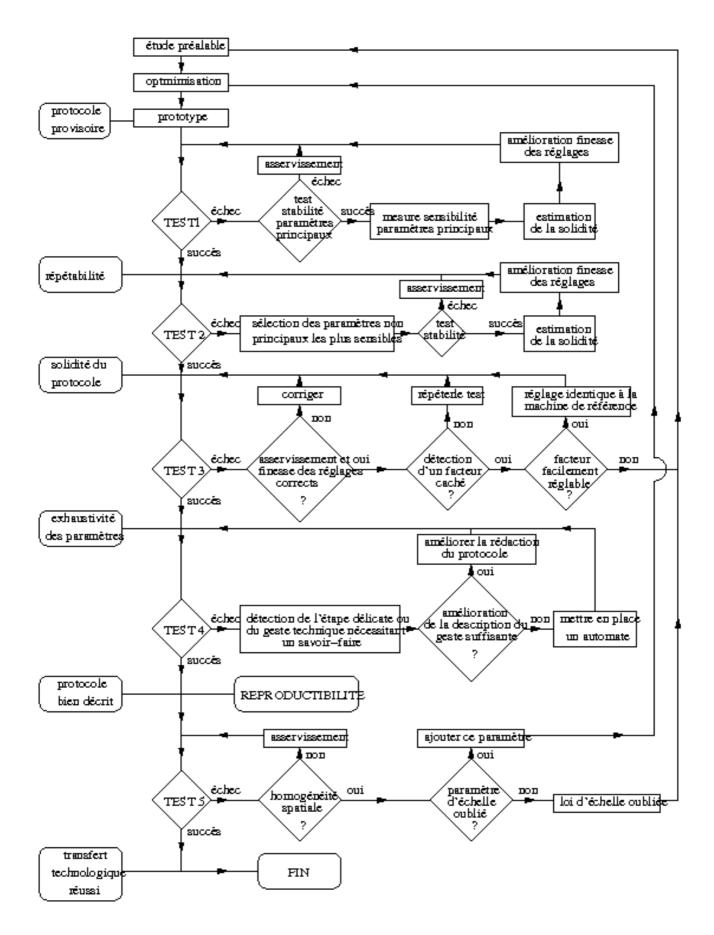


Figure V.1 : fiche méthodologique de contrôle de la fiabilité du protocole

V.1.1.2. Modèle d'organisation de la fabrication et de la qualification

Rappelons que la locution « fabrication d'un produit » englobe une grande diversité d'activités expérimentales et industrielles. La fabrication nécessite :

- de la matière première ;
- l'utilisation de machines de fabrication ;
- la mobilisation d'un ou plusieurs opérateurs ;
- des opérations de maintenance.

Nous pouvons nommer **qualification** l'ensemble des actions nécessaires à la mesure des grandeurs de sortie. La qualification englobe :

- la prise en charge du produit depuis le laboratoire de fabrication jusqu'au laboratoire d'analyses ;
- la préparation du produit ;
- l'utilisation de moyens d'analyse ;
- la mobilisation d'un ou plusieurs opérateurs du laboratoire d'analyse ;
- les éventuels calculs permettant de déterminer les valeurs des sorties à partir des grandeurs mesurées ;
- les opérations de maintenance associées à la mesure.

Comme dans les chapitres précédents, nous illustrerons principalement notre propos par des exemples dans le domaine des dépôts.

Exemple dans le domaine des dépôts

Dans le cas de la fabrication et de la qualification d'un dépôt sous vide, nous pouvons citer parmi les processus de fabrication et d'analyse les points suivants :

- le laboratoire dispose d'un certain nombre de substrats (par exemple des plaquettes de silicium placées sur le porte-substrat) et de matière première (placée dans le creuset d'évaporation) pour réaliser les dépôts ;
- la machine de fabrication est un procédé d'évaporation sous vide aux tricanons à électrons ;
 - un opérateur bien formé peut prendre en charge seul le bâti d'évaporation ;
- la maintenance regroupe les opérations de nettoyage, de réparation ou de remplacement des pièces les plus fragiles ;
- il faut ensuite procéder aux diverses analyses de l'échantillon, sur place ou dans un laboratoire d'analyse ; l'analyse par diffraction des rayons X, par exemple, permet d'obtenir le diffractogramme (ou spectre de diffraction) de chaque échantillon analysé ; l'exploitation de ces spectres permet de définir les propriétés cristallographiques de l'échantillon (nature amorphe ou cristalline, orientation cristallographique, etc....).

Nous allons maintenant expliquer pourquoi une démarche itérative monoséquentielle peut se révéler très coûteuse pour le laboratoire fonctionnant selon le modèle d'organisation que nous avons décrit.

V.1.2. Inconvénients liés à la démarche monoséquentielle

V.1.2.1. Démarche monoséquentielle

La **démarche monoséquentielle** consiste à fabriquer un échantillon unique, à le caractériser, et à ne procéder à la fabrication d'un nouvel échantillon qu'après avoir pris connaissance du résultat de l'analyse du précédent.

Dans l'étape d'optimisation, la méthode du simplexe est itérative (cf. paragraphe I.1.1) et donc monoséquentielle : après chaque fabrication, en effet, il faut mesurer les valeurs des réponses, et calculer les valeurs des entrées formant les réglages pour la nouvelle fabrication.

V.1.2.2. Surcoûts liés à une démarche monoséquentielle

La démarche monoséquentielle peut souvent se révéler excessivement coûteuse. Donnons quelques exemples.

- Si la matière première utilisée a une durée de vie très faible (quelques jours par exemple), et qu'elle n'est fournie qu'en une quantité minimale bien supérieure à celle nécessaire à la fabrication d'un seul échantillon, le laboratoire risque de perdre beaucoup de matière s'il ne peut procéder qu'à une fabrication par semaine.
- Si la manipulation du matériau nécessite des précautions expérimentales exigeantes (c'est le cas de nombreux métaux, comme le Baryum, utilisés dans la technologie des dépôts sous vide), le laboratoire doit mettre en œuvre de nombreuses procédures, quel que soit le nombre d'expériences réalisées ; on a alors intérêt à fabriquer plus d'un produit à la fois.
- Si l'utilisation des machines est facturée proportionnellement à leur temps d'utilisation et pas au nombre d'échantillons fabriqués en même temps, le laboratoire a intérêt à fabriquer plus d'un produit à la fois.
- Si l'un des opérateurs ne peut être présent qu'un jour par semaine, le laboratoire a intérêt à programmer pour ce jour-là plusieurs fabrications consécutives.
- Si le laboratoire procédant à l'analyse et à la caractérisation des échantillons n'est pas disponible en libre service et ne peut accepter qu'un rendez-vous par semaine, le laboratoire de recherche a intérêt à programmer pour ce jour-là plusieurs caractérisations en série.
- Si l'une des analyses nécessite un réglage très pointu et très particulier d'une machine qui est utilisée pour d'autres mesures, le laboratoire a intérêt à programmer plusieurs qualifications consécutives.

L'utilisation d'un logiciel d'optimisation peut permettre de minimiser le nombre de manipulations à faire pour trouver les conditions optimales ; mais s'il impose une démarche monoséquentielle, l'avantage économique peut être annulé. C'est pourquoi nous avons développé une démarche plus souple de campagne de manipulations que nous allons définir et étudier dans la suite de ce chapitre.

V.2. Campagne de manipulations

V.2.1. Description d'une campagne d'expériences

V.2.1.1. Démarche multiséquentielle

Comme nous l'avons mis en évidence dans la section précédente, il peut être intéressant pour le laboratoire de procéder à des campagnes de plusieurs manipulations.

La démarche multiséquentielle consiste à procéder à des campagnes successives de manipulations ; chaque campagne est décomposée en la fabrication de plusieurs échantillons à la fois, soit en parallèle, soit selon une succession rapprochée, mais pour lesquels les choix des paramètres de réglage et des modes de procédé opératoire ont été décidés tous en même temps, puis à la qualification de ces échantillons.

Illustrons la différence entre les démarches mono et multiséquentielles. Soit F_i la démarche de fabrication du produit i, Q_i celle de sa qualification.

[DEMARCHE MONOSEQUENTIELLE] : c'est une suite alternée d'une seule fabrication et d'une seule qualification : $F_1, Q_1, F_2, Q_2, ..., F_i, Q_i, ...$

[DEMARCHE MULTISEQUENTIELLE] : c'est une suite alternée d'un ensemble de fabrications et d'un ensemble (en même nombre) de qualifications :

$$\left[(F_{1,1}, F_{1,2}, ..., F_{1,\pi_1}), (Q_{1,1}, Q_{1,2}, ..., Q_{1,\pi_1}) \right], \left[(F_{2,1}, F_{2,2}, ..., F_{2,\pi_2}), (Q_{2,1}, Q_{2,2}, ..., Q_{2,\pi_2}) \right], \\ ..., \left[(F_{n,1}, F_{n,2}, ..., F_{n,\pi_n}), (Q_{n,1}, Q_{n,2}, ..., Q_{n,\pi_n}) \right]$$

La notation permet d'identifier deux entiers en indice de F et Q. Le premier varie entre 1 et n: c'est le numéro d'ordre de la campagne d'expériences. Le second varie entre 1 et π_i (où π_i est le nombre d'expériences ou de fabrications de la i-ième campagne): c'est le numéro d'ordre de l'expérience dans la i-ième campagne. Ainsi, $F_{i,j}$ désigne la j-ième expérience effectuée dans la i-ième campagne; $Q_{i,j}$ désigne la qualification du produit fabriqué lors de $F_{i,j}$.

V.2.1.2. Intérêt de la démarche multiséquentielle

La démarche multiséquentielle nécessite la définition, avant chaque campagne, des paramètres de réglage de plusieurs manipulations. Les π_i manipulations de la i-ième campagne seront probablement moins efficaces qu'une démarche monoséquentielle comportant autant de manipulations, pour la convergence vers l'optimum. Mais on peut espérer que l'économie réalisée par la démarche multiséquentielle compensera le surcoût imputable au nombre plus important de manipulations.

On peut donner une illustration simple de ce principe. Imaginons un rameur traversant un océan. Il a la possibilité de contrôler sa position géographique à tout instant, mais ce contrôle lui prend beaucoup de temps : il doit jeter une ancre, ôter ses gants, sortir et allumer un dispositif électronique, attendre le résultat de la mesure, puis arrêter, ranger le système dans une boîte étanche, remettre ses gants, lever l'ancre et reprendre son élan. Il a le choix entre :

- la démarche monoséquentielle : il fait le point après chaque coup de rame, ce qui lui permet de toujours ramer dans la bonne direction ;
- la démarche multiséquentielle : il fait le point tous les 500 coups de rame, sans avoir l'assurance que chacun d'entre eux est parfaitement efficace, et redéfinit sa direction après chaque mesure pour la campagne de rame suivante. On comprend aisément que la seconde démarche est beaucoup plus efficace que la première dès que la durée de mesure est grande devant celle du coup de rame et que la divergence de la barque en 500 coups de rame est faible devant celle due aux fluctuations naturelles.

V.2.2. Construction d'une campagne d'expériences

Conformément à la démarche détaillée dans la section précédente, nous cherchons à définir une campagne de manipulations qui brise la succession des essais et des qualifications dans une optimisation itérative en nous limitant à la méthode du simplexe étudiée dans cette thèse.

V.2.2.1. Itération proposée par le simplexe

Rappelons brièvement le principe de la méthode du simplexe modifié (cf. paragraphe I.5.7). Le but est de maximiser la désirabilité du produit. Soit p le nombre d'entrées, c'est-à-dire de paramètres significativement influents. L'algorithme exploite la connaissance des désirabilités associées à p+1 produits. Dans l'espace de représentation des p entrées, EE, les p+1 points correspondant aux produits forment une figure géométrique appelée simplexe (un triangle si p=2, un tétraèdre si p=3). À partir d'un simplexe donné, l'application de l'algorithme fournit un nouveau jeu de paramètres expérimentaux, soit $(e_1,e_2,...,e_p)$. Ce jeu est défini par :

- une direction de déplacement, s'éloignant du point W (Worst) le plus mauvais, c'est-à-dire de désirabilité la plus basse.
- une amplitude de déplacement. Le premier point candidat testé par le simplexe modifié est le point R (Reflected), symétrique du point W par rapport à l'isobarycentre G des autres sommets du simplexe : GR = -GW. Dans le cas où p = 2, le simplexe est un triangle ; la figure 2 indique les positions des divers points dans ce cas ; le point G n'est alors que le milieu I de B (Best, le meilleur point) et N (Next to worst, le second moins bon point).

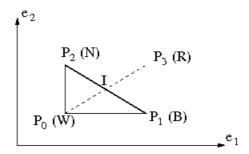


Figure V.2: position des divers points du simplexe dans le cas p = 2

V.2.2.2. Définition des points candidats pour la campagne d'expériences

L'idée centrale qui préside à la définition de la campagne d'expériences résulte de l'observation, sur un grand nombre de cas, des suites de manipulations proposées par l'algorithme du simplexe modifié (*cf.* paragraphe ?). Par souci de clarté pour l'analyse qui va suivre, nous mentionnons les principaux points suivants, illustrés sur la figure 3. Le coefficient d'expansion k est pris, selon l'habitude, égal à 2; le coefficient de contraction est pris égal à $\frac{1}{k} = \frac{1}{2}$.

- Si la direction de déplacement testée par R est la bonne, il peut être opportun de faire un pas plus important dans le même sens : c'est l'**extension** E définie par GE = 2GR.
- Si la direction de déplacement testée par R est la bonne, il peut être opportun de faire un pas moins important dans le même sens : c'est la **contraction dans la direction de** R, C_R , définie par $GC_R = 1/2GR$.
- Si la direction de déplacement testée par R est la bonne, il peut être opportun de faire un pas dans le sens opposé : c'est la **contraction dans la direction de** W, C_W , définie par $GC_W = -1/2GR$.
- Si la direction de déplacement n'est pas exactement la bonne, il peut être utile de tester les directions adjacentes obtenues en effectuant les symétriques des autres sommets du simplexe que W par rapport à l'isobarycentre des autres points.
- Lorsqu'on est encore loin de l'optimum, il est cependant très fréquent que le point R, voire le point E soient de meilleure désirabilité que B. Par suite, dans un déroulement habituel (monoséquentiel) du simplexe :
 - si R est meilleur que B, on remplace W par R dans le simplexe et le nouveau sommet candidat sera le point S_N , symétrique de N par rapport à l'isobarycentre des autres points ;
 - si E est meilleur que R, lui-même meilleur que B, on remplace W par E dans le simplexe et le nouveau sommet candidat sera le point T_N , symétrique de N par rapport à l'isobarycentre des autres points.

Détaillons la construction de ces nouveaux sommets dans le cas où p=2. Adoptons la notation simplifiée pour les deux entrées : $x=e_1$ et $y=e_2$. Le simplexe formant la base de travail est un triangle ; il est formé des trois points B, N et W correspondant à trois produits précédemment fabriqués et qualifiés. Ceux-ci sont classés par ordre décroissant de désirabilité. L'application de l'algorithme du simplexe modifié propose pour l'étape suivante le jeu d'entrées représenté sur le diagramme par le point R, symétrique de W par rapport au milieu de [B,N]. Les explorations complémentaires sont représentées par les points E (extension), C_R (contraction du côté de R), C_R (contraction du côté de R), R_R (exploration à l'opposé de R) et R_R (exploration à l'opposé de R). On obtient ainsi une campagne de R0 et R1 et R2 manipulations : R3, R3, R4, R5, R6, R7, R8, R8, R9, R9,

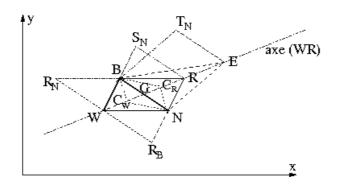


Figure V.3 : représentation géométrique de la campagne d'expériences dans le cas de p=2 entrées ; visualisation de la droite (WR) sur laquelle se trouvent W, C_W , C_R , R et E

Dans le cas général ($p \ge 2$), nous pouvons dénombrer les nouveaux points candidats ainsi définis. Ordonnons d'abord les p+1 sommets du simplexe en cours dans l'ordre de désirabilité décroissante, soit

$$A_0, ..., A_{p-1}, A_p \sigma(A_0) \ge ... \ge \sigma(A_{p-1}) \ge \sigma(A_p)$$

Posons $B = A_0$ (best), $N = A_{p-1}$ (next to worst) et $W = A_p$ (worst).

- Quatre nouveaux candidats se trouvent sur la droite (W,R): R, E, C_R et C_W .
- Deux nouveaux points candidats sont les symétriques de N par rapport aux simplexes où W est remplacé par R ou par $E:S_N$ et T_N .
- Il y a p nouveaux candidats symétriques des autres sommets : R_{p-1} réfléchi de A_{p-1} , ..., R_2 réfléchi de A_2 , R_1 réfléchi de A_1 .

Nous avons donc défini, autour d'un simplexe donné, p+6 nouveaux sommets candidats. Bien sûr, si un de ces points est en dehors du domaine admissible, il est rejeté. Nous allons pouvoir choisir parmi eux ceux qui formeront la campagne d'expériences.

V.2.2.3. Classement de promesse des points candidats

Le nombre de produits fabriqués dans une campagne d'expériences donnée dépend des conditions expérimentales et des contraintes de travail. Donnons quelques exemples de détermination de ce nombre.

Exemple dans le domaine des dépôts

Si le laboratoire d'analyse n'est disponible qu'un jour par semaine, par exemple le lundi, et que le laboratoire de fabrication ne peut réaliser qu'un produit par jour ouvrable, on réalisera des campagnes de quatre expériences, réalisées du mardi au vendredi ; le lundi sera dédié aux analyses, à leur dépouillement et à la définition de la nouvelle campagne. Un autre exemple de contrainte est le nombre maximal de produits qu'on peut introduire simultanément dans un four de recuit, ou plus généralement dans un dispositif de caractérisation. Ce nombre peut alors fixer le nombre d'expériences.

Le nombre π_i de produits fabriqués dans la i-ième campagne d'expériences n'est donc pas nécessairement égal au nombre de points candidats définis dans le paragraphe précédent (2.2.2). Nous devons établir un ordre de ces points candidats, en définissant en tête le point qu'il faut absolument tester, que nous qualifions donc de « plus prometteur », puis en classant les autres points dans le sens décroissant de leur intérêt prévisible. Ce classement que nous appellerons le « classement de promesse », ne peut être qu'hypothétique. La surface de désirabilité n'étant en effet pas connue, il est impossible de prévoir lequel des candidats aura effectivement la meilleure désirabilité. L'ordre que nous proposons n'est donc pas justifié par une analyse mathématique. Celle-ci nécessiterait d'ailleurs des hypothèses sur la régularité de la surface de désirabilité ; ces

hypothèses ne nous semblent pas justifiables dans le cas général. Nous allons maintenant présenter plusieurs points candidats et commenter le classement que nous en faisons. La lecture sera facilitée par la consultation de la figure 4, que nous reproduisons ici et dont nous détaillerons la construction dans l'exemple suivant.

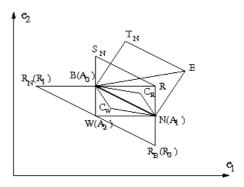


Figure V.4 : représentation géométrique d'une campagne de sept expériences dans un cas à deux entrées

- Nous privilégions parmi tous les candidats le seul point prévu par l'algorithme du simplexe basique, c'est-à-dire $\it R$, qui est donc classé premier.
- Les explorations du côté de R (E et C_R) sont justifiées par la volonté de se diriger à l'opposé de W. Nous proposons arbitrairement de classer le point E en deuxième position et le point C_R en troisième. Si la campagne ne comporte que deux expériences, le collège peut tenter d'estimer si E est proche de l'optimum (auquel cas on pourrait classer E en deuxième et E en troisième) ou loin de l'optimum (auquel cas on pourrait classer E en deuxième et E en troisième); mais ces décisions restent hypothétiques.
- Si l'on retient l'hypothèse que R sera certainement de meilleure désirabilité que N, N deviendra alors le pire point du nouveau simplexe et le nouveau point testé sera le réfléchi de N, c'est-à-dire S_N . Nous classons donc S_N quatrième.
- Si nous reprenons le même raisonnement en prenant E à la place de R, nous pouvons espérer que T_N soit aussi assez prometteur, et nous le classons cinquième.
- Le point C_w , le dernier prévu par l'algorithme du simplexe modifié, est classé sixième.
- Les p points suivants sont les symétriques des autres sommets. Il est donc naturel de les classer par ordre décroissant selon qu'ils correspondent à une direction opposée aux sommets de désirabilité croissante. Le septième point est donc R_{p-1} (réfléchi de A_{p-1} qui n'est autre que N, le point de désirabilité la deuxième plus basse) : c'est d'ailleurs le point testé par le simplexe modifié lorsque les points R, E, C_R et C_W ont été rejetés. Le huitième point est R_{p-2} (réfléchi de A_{p-2}), et ainsi de suite jusqu'au dernier point dans le classement, R_0 , réfléchi de A_0 , c'est-à-dire de B. Il est assez compréhensible que ce point soit le dernier classé car il correspond à une exploration dans la direction opposée au meilleur point trouvé.

Nous définissons le **classement de promesse** des p+6 points candidats à une campagne par une liste ordonnée de jeux de paramètres d'entrée dont on pense, *a priori*, qu'elles permettront de fabriquer des produits de désirabilités décroissantes. Il est donné dans le tableau 1

rang 1 2 3 4 5 6 7 ...
$$p+6$$

point $R \ E \ C_R \ S_N \ T_N \ C_W \ R_{p-1} \dots R_0$

Tableau V.1 : tableau de classement de promesse des p+6 sommets candidats à une campagne d'expériences

Notons que Catherine Porte, membre du jury et rapporteur, a suggéré de prendre également en compte, parmi les points candidats, les réfléchis de N, U_N lorsque C_R remplace W dans le simplexe.

V.2.2.4. Sélection des points pour la campagne d'expériences

Nous pouvons maintenant définir le mode de construction d'une campagne d'expériences. La construction d'une campagne d'expériences est menée en deux temps :

- Le collège définit le nombre π d'expériences qu'il désire réaliser (ou de produits qu'il désire fabriquer).
- Il retient alors les π premiers points candidats parmi les p+6 classés dans l'ordre de promesse défini au paragraphe précédent.

Exemple numérique illustratif

Plaçons-nous dans le cas p=2. Le simplexe en cours a pour sommets B(12;10), N(14;9) et W(12;9). Le collège choisit par exemple de procéder à une campagne de $\pi=7$ expériences. Nous pouvons remarquer que p+6=8, donc qu'un seul sommet candidat sera rejeté. Donnons la liste des cinq sommets classés dans l'ordre décroissant de promesse.

$$R\begin{vmatrix} 14 \\ 10 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ 10,5 \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 13,5 \\ 9,75 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 11 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 11,5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12,5 \\ 9,25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10 \end{bmatrix}$$

La figure 5.5 donne la représentation géométrique de ces sept points autour du simplexe en cours (on note $x = e_1$ et $y = e_2$). Le point $R_0(14; 8)$ (en pointillés) ne sera pas réalisé.

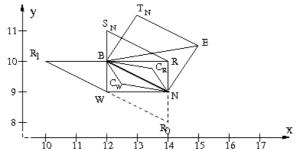


Figure V.5: représentation géométrique d'une campagne de sept expériences dans un cas à deux entrées

V.2.3. Exploitation des résultats de la campagne

V.2.3.1. Dépouillement des résultats de la campagne

Après avoir défini la campagne d'expériences, les opérateurs procèdent à la fabrication des π produits avec les jeux d'entrée correspondant aux π points sélectionnés. Le laboratoire d'analyse procède ensuite à la qualification de ces produits en mesurant la ou les valeurs des sorties. Les désirabilités sont calculées. À la différence de la méthode habituelle du simplexe, où un seul sommet change quand on passe d'un simplexe au suivant, la campagne d'expériences va nous donner la possibilité de changer plusieurs points. Nous allons énoncer les règles de choix.

V.2.3.2. Règles de choix pour la constitution du nouveau simplexe

La méthode qui semble la plus naturelle consiste à ne garder pour le nouveau simplexe que les p+1 sommets de plus haute désirabilité choisis parmi l'ensemble comportant :

- les p+1 sommets du simplexe précédent $(A_0, A_1, ..., A_{p-1}, A_p)$
- et les π sommets testés dans la campagne d'expériences parmi les p+6 candidats R, E, C_R , S_N , T_N , C_W , R_{p-1} , ..., R_0 . Cette méthode n'est pas applicable ainsi. En effet, plusieurs triplets de sommets parmi les candidats de la liste précédente sont alignés. Par conséquent, leur coexistence dans un même simplexe conduirait à une dégénérescence du

simplexe, c'est-à-dire à un aplatissement avec perte d'une dimension (cf. paragraphe I.1.4.3).

Identifions d'abord les sommets alignés. Soit G l'isobarycentre des points du simplexe en cours autres que W, c'est-à-dire l'isobarycentre des points $\left(A_0,A_1,...,A_p\right)$. Par définition, les points R, E, C_R et C_W sont alignés avec W et G, donc les points W, R, E, C_R et C_W sont alignés. Par conséquent, nous pouvons énoncer la **règle 1**: trois (ou plus) de ces points ne peuvent coexister dans le même simplexe. D'autre part, nous pouvons observer plusieurs points intérieurs à certains simplexes, et qui pourraient ainsi être presque alignés avec des couples de points. La figure 4 permet d'illustrer géométriquement les propriétés que nous allons énoncer.

- Le point C_W est le seul à l'intérieur du simplexe en cours. Il est donc susceptible d'être presque aligné avec les couples du type (A_k,R_k) où R_k est le réfléchi de A_k $(k\in\{0,...,p\})$. Par conséquent, nous énonçons la **règle 2** : nous chercherons à éviter de faire coexister C_W , A_k et R_k dans le même simplexe.
- De même, les points N, C_R et S_N risquent d'être presque alignés, ainsi que les points N, R et T_N . Nous énonçons donc la **règle 3**: nous chercherons à éviter de faire coexister C_R , N et S_N dans le même simplexe. Nous énonçons enfin la **règle 4**: nous chercherons à éviter de faire coexister R, N et T_N dans le même simplexe.
- Si aucun sommet de la campagne ne convient, ce qui signifie qu'aucun des sommets candidats n'est de désirabilité supérieure à celle de W, il faut lancer une nouvelle campagne en testant les autres sommets candidats qui n'ont pas encore été testés. S'ils ont tous été testés, le point B est optimal.

Nous sommes maintenant en mesure de définir les principes de construction suivants. **Principe de construction du nouveau simplexe** : l'entrée (c'est-à-dire l'apparition parmi les sommets du nouveau simplexe) des sommets testés dans la campagne d'expérience ne se fait que par échange avec l'un des sommets du simplexe en cours.

- Conformément à la règle 1, un seul des sommets R, E, C_R ou C_W peut entrer dans le simplexe.
 - Si aucune des désirabilités de ces quatre sommets ne dépasse celle de W, alors aucun d'entre eux n'entre dans le simplexe.
 - ullet Si au moins une des désirabilités de ces quatre sommets dépasse celle de W, alors le point de meilleure désirabilité parmi ceux-ci entre à la place de W.
- Conformément aux règles 2, 3 et 4, $R_{\scriptscriptstyle N}$, $T_{\scriptscriptstyle N}$ ou $S_{\scriptscriptstyle N}$ ne peuvent entrer qu'en remplacement de N .
 - Si aucune des désirabilités de R_N , S_N et T_N ne dépasse celle de N, alors aucun d'entre eux n'entre dans le simplexe.
 - Si au moins une des désirabilités de ces trois sommets dépasse celle de N, alors le point de meilleure désirabilité parmi ceux-ci entre à la place de N.
- Conformément à la règle 2, pour $k \in \{1,..., p-2\}$ R_k entre dans le simplexe à la place de A_k si et seulement si sa désirabilité est meilleure que celle de A_k .

Nous allons illustrer la méthode en reprenant un cas déjà étudié dans le premier chapitre.

V.2.4. Exemple illustratif

Soient $x = e_1$ et $y = e_2$ les deux entrées. Considérons la fonction de désirabilité déjà utilisée dans la présentation du simplexe modifié au paragraphe I.5.7.2 :

$$\sigma = 1 - \left(\frac{x - 52}{100}\right)^2 - \left(\frac{y - 36}{100}\right)^2$$

Les deux entrées varient continûment dans [10,100]. L'optimum théorique est donc obtenu pour le couple $(x^* = 52 \; ; \; y^* = 36)$. Nous allons procéder à la recherche de l'optimum par la méthode des campagnes d'expériences. Le simplexe initial est le même simplexe en coin que celui que nous avons utilisé dans la méthode modifiée : $P_0(10\;;10)$, $P_1(20\;;10)$ et $P_2(10\;;20)$. Leurs désirabilités calculées sont respectivement $\sigma_0 = 0,7560$, $\sigma_1 = 0,83$ et $\sigma_2 = 0,7980$. Nous allons tester un grand nombre de sommets candidats ; pour alléger les notations, nous allons donc choisir une notation

conventionnelle : M $\begin{vmatrix} x_M \\ y_M \end{vmatrix}$ désigne le point M , x_M et y_M désignent ses coordonnées (valeurs des (σ)

entrées) et σ sa désirabilité, la mention HD signifiant que le point est hors domaine, et que sa désirabilité est donc prise égale à zéro. Le nom donné au point sera B, N ou W quand on désigne le simplexe, ou R, E, C_R , C_W , S_N , T_N , R_N ou R_W quand on désigne les sommets candidats pour la campagne.

Nous devons choisir un nombre π de tests dans chaque campagne. Étudions un cas fictif. Chaque fabrication dure une demi-journée. Le lundi matin est consacré à la préparation du matériel. Le vendredi matin est le jour de disponibilité du laboratoire d'analyse. Remarquons que selon un fonctionnement monoséquentiel, on ne pourrait pas faire plus d'une fabrication par semaine, et la durée de l'optimisation exprimée en semaines serait égale au nombre de sommets testés. La méthode du simplexe modifié a nécessité 16 essais (cf. ?); l'optimisation durerait donc 16 semaines. Si nous considérons que le vendredi après-midi est consacré au dépouillement des résultats des analyses et à la planification de la campagne de la semaine à venir, nous pouvons envisager de procéder à 7 essais dans la semaine, selon le planning donné au tableau 2

	lundi	mardi	mercredi	jeudi	vendredi
matin	préparation	essai 2	essai 4	essai 6	analyse
après-midi	essai 1	essai 3	essai 5	essai 7	dépouillement et planification

Tableau V.2 : planning d'organisation d'un laboratoire procédant à une optimisation par campagne de 7 expériences

Huit sommets candidats sont proposés pour la campagne ; $R_{\rm W}$ est donc le seul le point qui ne sera pas testé. Nous allons maintenant commencer la description des campagnes successives. La figure 5 permet de suivre l'évolution des simplexes en traits noirs épais et des sommets testés dans les campagnes en couleurs différentes que nous indiquerons au fur et à mesure. La notation adoptée est :

- les trois points du k -ième simplexe sont $(B^{(k)}, N^{(k)}, W^{(k)})$;
- de même, $S_N^{(k)}$ (par exemple) désigne le point S_N (réfléchi de N par rapport au simplexe où R remplace W) de la k-ième campagne.

Pour plus de lisibilité, la figure 6 présente uniquement les deux premières campagnes. Un tableau récapitulatif 3 sera proposé à la fin de la description des campagnes ; il sépare clairement les points testés (notés R, E, C_R , C_W , R_N , S_N et T_N) et les points effectivement retenus dans les simplexes successifs (notés P_0 , P_1 , P_2 , ...). Remarquons enfin qu'il peut arriver que certains points testés dans une campagne donnée aient déjà été testés précédemment (ces points sont communs à plusieurs campagnes, comme T'_N confondu avec N'', $N^{(3)}$ et $W^{(4)}$). Le laboratoire pourra effectuer une vérification de contrôle de ce point, ou en tester un autre de son choix.

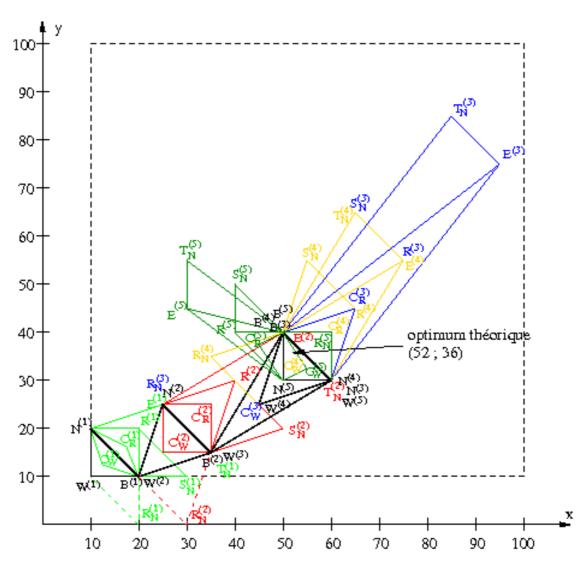
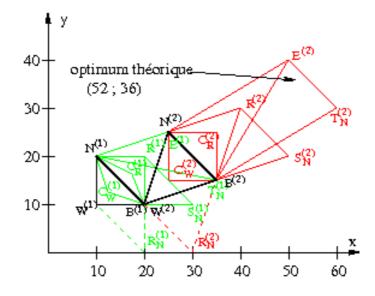


Figure V.5 : représentation géométrique des simplexes successifs et des sommets testés dans une campagne d'expériences



6. représentation géométrique des simplexes successifs et des sommets testés dans les deux premières campagnes

Le simplexe initial est formé des trois points

Les sept points de la première campagne sont tracés en vert clair sur les figures 5 et 6. Si on note $G^{(1)}$ le milieu de $[B^{(1)}, N^{(1)}]$, les points testés sur l'axe $(W^{(1)}, G^{(1)})$ sont :

$$R^{(1)} \begin{vmatrix} 20 & & 25 & & 17,5 & & 12,5 \\ 20 & E^{(1)} & 25 & C_R^{(1)} & 17,5 & C_W^{(1)} & 12,5 \\ (0,872) & (0,915) & (0,84675) & (0,78875) \end{vmatrix}$$

Une au moins des désirabilités est supérieure à celle de $W^{(1)}$: le point $E^{(1)}$ de plus haute désirabilité entre donc dans le simplexe et remplace $W^{(1)}$. Les autres points testés sont :

$$R_N^{(1)} \begin{vmatrix} 20 & & 30 & & 35 \\ 0 & S_N^{(1)} & 10 & T_N^{(1)} & 15 \\ (HD) & (0,884) & (0,927) \end{vmatrix}$$

Une au moins des désirabilités est supérieure à celle de $N^{(1)}$: le point $T_N^{(1)}$ de plus haute désirabilité entre donc dans le simplexe et remplace $N^{(1)}$. Nous en déduisons que le nouveau simplexe est formé des trois points $P_1 = B$, $P_3 = E$ et $P_4 = T_N$.

CAMPAGNE 2

Le simplexe initial est :

$$B^{(2)} = T_N^{(1)} \begin{vmatrix} 35 \\ 15 \\ (0,927) \end{vmatrix} = E^{(1)} \begin{vmatrix} 25 \\ 25 \\ (0,915) \end{vmatrix} = B^{(1)} \begin{vmatrix} 20 \\ 10 \\ (0,83) \end{vmatrix}$$

Les sept points de la deuxième campagne sont tracés en rouge sur les figures 5 et 6. Si on note $G^{(2)}$

le milieu de
$$[B^{(2)}, N^{(2)}]$$
, les points testés sur l'axe $(W^{(2)}, G^{(2)})$ sont :
$$R^{(2)} \begin{vmatrix} 40 & 50 & 35 & 25 \\ 30 & E^{(2)} & 40 & C_R^{(2)} & 25 & C_W^{(2)} & 15 \\ (0,982) & (0,998) & (0,959) & (0,883) \end{vmatrix}$$

Une au moins des désirabilités est supérieure à celle de $W^{(2)}$: le point $E^{(2)}$ de plus haute désirabilité entre donc dans le simplexe et remplace $W^{(2)}$. Sa désirabilité, égale à 0,998, est déjà excellente. Nous pouvons donc déjà envisager un arrêt du simplexe dès la deuxième campagne. C'est pourquoi la figure 6 donne une vue synthétique à ce stade. Cependant, nous allons effectuer quelques itérations supplémentaires, pour compléter la description. Les autres points testés sont :

$$R_N^{(2)} \begin{vmatrix} 30 & & 50 & 60 \\ 0 & S_N^{(2)} & 20 & T_N^{(2)} & 30 \\ (HD) & (0,974) & (0,99) \end{vmatrix}$$

Une au moins des désirabilités est supérieure à celle de $N^{(2)}$: le point $T_N^{(2)}$ de plus haute désirabilité entre donc dans le simplexe et remplace $N^{(2)}$. Nous en déduisons que le nouveau simplexe est formé des trois points $B^{(2)}$, $E^{(2)}$ et $T_N^{(2)}$.

Le simplexe initial est :

$$B^{(3)} = E^{(2)} \begin{vmatrix} 50 \\ 40 \\ (0,998) \end{vmatrix} = T_N^{(2)} \begin{vmatrix} 60 \\ 30 \\ (0,99) \end{vmatrix} = B^{(2)} \begin{vmatrix} 35 \\ 15 \\ (0,927) \end{vmatrix}$$

Les sept points de la troisième campagne sont tracés en bleu sur la figure 5. Si on note $G^{(3)}$ le milieu de $[B^{(3)}, N^{(3)}]$, les points testés sur l'axe $(W^{(3)}, G^{(3)})$ sont :

$$R^{(3)} \begin{vmatrix} 75 & 95 & 65 \\ 55 & E^{(3)} & 75 & C^{(3)}_{R} & 45 & C^{(3)}_{W} & 25 \\ (0,911) & (0,663) & (0,975) & (0,983) \end{vmatrix}$$

Une au moins des désirabilités est supérieure à celle de $W^{(3)}$: le point $C^{(3)}_W$ de plus haute désirabilité entre donc dans le simplexe et remplace $W^{(3)}$. Les autres points testés sont :

$$R^{(3)}_{N} = E25$$
25
 $0,915 S^{(3)}_{N}65$
65
 $(0,899) T^{(3)}_{N}85$
85
 $(0,651)$

Aucune de ces désirabilités n'est supérieure à celle de $N^{(3)}$, donc $N^{(3)}$ demeure dans le simplexe. Nous en déduisons que le nouveau simplexe est formé des trois points $B^{(3)}$, $N^{(3)}$ et $C^{(3)}_W$.

CAMPAGNE 4

Le simplexe initial est :

$$B^{(4)} = B^{(3)} \begin{vmatrix} 50 \\ 40 \\ (0,998) \end{vmatrix} = N^{(3)} \begin{vmatrix} 60 \\ 30 \\ (0,99) \end{vmatrix} = C^{(3)}_{W} \begin{vmatrix} 45 \\ 25 \\ (0,983) \end{vmatrix}$$

Les sept points de la quatrième campagne sont tracés en jaune orangé sur la figure 5. Si on note $G^{(4)}$ le milieu de $[B^{(4)}, N^{(4)}]$, les points testés sur l'axe $(W^{(4)}, G^{(4)})$ sont :

$$R^{(4)} = C^{(3)}_{R} \begin{vmatrix} 65 & 75 & 60 & 50 \\ 45 & E^{(4)} = R^{(3)} & 55 & C_{R}^{(4)} & 40 & C_{W}^{(4)} & 30 \\ (0,975) & (0,911) & (0,992) & (0,996) \end{vmatrix}$$

Une au moins des désirabilités est supérieure à celle de $W^{(4)}$: le point $C_W^{(4)}$ de plus haute désirabilité entre donc dans le simplexe et remplace $W^{(4)}$. Les autres points testés sont :

$$R_N^{(4)} \begin{vmatrix} 35 & 55 \\ 35 & S_N^{(4)} & 55 \\ (0,971) & (0,963) \end{vmatrix} = S_N^{(3)} \begin{vmatrix} 65 \\ 65 \\ (0,899) \end{vmatrix}$$

Aucune de ces désirabilités n'est supérieure à celle de $N^{(4)}$, donc $N^{(4)}$ demeure dans le simplexe. Nous en déduisons que le nouveau simplexe est formé des trois points $B^{(4)}$, $N^{(4)}$ et $C_W^{(4)}$.

Le simplexe initial est :

$$B^{(5)} = B^{(4)} \begin{vmatrix} 50 \\ 40 \\ (0,998) \end{vmatrix} = C_W^{(4)} \begin{vmatrix} 50 \\ 30 \\ (0,996) \end{vmatrix} = N^{(4)} \begin{vmatrix} 60 \\ 30 \\ (0,996) \end{vmatrix}$$

Les sept points de la cinquième campagne sont tracés en vert foncé sur la figure 5. Si on note $G^{(5)}$ le milieu de $[B^{(5)}, N^{(5)}]$, les points testés sur l'axe $(W^{(5)}, G^{(5)})$ sont :

$$R^{(5)} \begin{vmatrix} 40 & & 30 & & 45 & 55 \\ 40 & E^{(5)} & 45 & C_R^{(5)} & 37,5 & C_W^{(5)} & 32,5 \\ (0,984) & (0,9435) & (0,994875) & (0,997878) \end{vmatrix}$$

Le point $C_W^{(5)}$ a une désirabilité pratiquement égale à celle de $B^{(5)}$. On peut donc considérer que l'optimum se trouve au voisinage du couple $(B^{(5)}, C_W^{(5)})$. Nous pouvons donc tester, en dehors de la procédure habituelle du simplexe, le point milieu I: il a pour coordonnées $I\begin{vmatrix} 52,5\\36,25\end{vmatrix}$ et sa désirabilité est $\sigma_I=0,99937$, qui peut être considéré comme l'optimum. Vérifions que les autres points ne sont pas meilleurs:

$$R_N^{(5)} = C_R^{(4)} \begin{vmatrix} 60 & 40 & 30 \\ 40 & S_N^{(5)} & 50 & T_N^{(5)} \\ (0,992) & (0,966) & (0,9155) \end{vmatrix}$$

Le tableau 3 rassemble l'ensemble des données numériques relatives à l'exemple.

campagne	nom	$x y \sigma$	classement	entrant	sortant
1	P_0	10 10 0,75600	W	P_0	
1	P_1	20 10 0,83000	B	P_1	
1	P_2	10 20 0,79800	N	P_2	
1	R	20 20 0,87200			
1	E	25 25 0,91500	meilleur	donc P_3	Remplace W
1	C_R	17,517,5 0,84675			
1	C_W	12,512,5 0,78875	Ш		
1	R_N	20 0 0,76800	HD		
1	S_N	30 10 0,88400 35 15 0,92700	meilleur	Dona D	Dammlaga M
2	$egin{array}{c} T_N \ P_1 \end{array}$	20 10 0,83000	W	Donc P_4	Remplace N
2	P_3	25 25 0,91500	N		
2	P_4	35 15 0,92700	B		
2	R	40 30 0,98200			
2 2	E C_R	50 40 0,99800 35 25 0,95900	meilleur	Donc P_5	Remplace W
2	C_W	25 15 0,88300			
2	R_N	30 0 0,82200	HD		
2	S_N	50 20 0,97400			
2	T_N	60 30 0,99000	meilleur	Donc P_6	Remplace N
3	P_4	35 15 0,92700	W		
3	P_5	50 40 0,99800	В		
3	P_6	60 30 0,99000	N		
3	R	75 55 0,91100			
3	E	95 75 0,66300			
3	C_R	65 45 0,97500			
3	$C_W = R_N$	45 25 0,98300 25 25 0,91500	meilleur	donc P_7	Remplace W
3	S_N	65 65 0,89900			
3 4	$T_N P_5$	85 85 0,65100 50 40 0,99800	aucun n'est B	meilleur	on garde N
4	P_6	60 30 0,99000	N		
4	P_7	45 25 0,98300	W		
4	R	65 45 0,97500			
4	E	75 55 0,91100			
4	C_R	60 40 0,99200			
4	C_W	50 30 0,99600	meilleur	donc P_8	remplace W
4	R_N	35 35 0,97100			
4 4	S_N	55 55 0,96300	ayaya n'aat	meilleur	on gordo M
5	$T_N P_5$	65 65 0,89900 50 40 0,99800	aucun n'est B	memeur	on garde N
5	P_6	60 30 0,99000	W		
5	P_8	50 30 0,99600	N		
5	R	40 40 0,98400			
5	E	30 45 0,94350			
5	C_R	45 37,50,994875			
5 5	C_W	55 32,50,997875	meilleur	donc P_9	remplace W
5	R_N S_N	60 40 0,99200 40 50 0,96600			
5	T_N	30 55 0,91550	aucun n'est	meilleur	on garde N
5	- IV	20 22 0,71230	andan n Ost	ciiicui	on garde 11

Tableau V.3 : tableau récapitulatif de l'illustration numérique de la méthode des campagnes d'expériences

150

V.2.4.1. Organigramme de la méthode des campagnes d'expériences

La figure 7 présente l'organigramme de la méthode des campagnes d'expériences rédigé selon les conventions des organigrammes algorithmiques présentées dans l'annexe ?. Cet organigramme synthétise, sous la forme normalisée, toute la construction que nous avons faite et que nous venons d'illustrer numériquement.

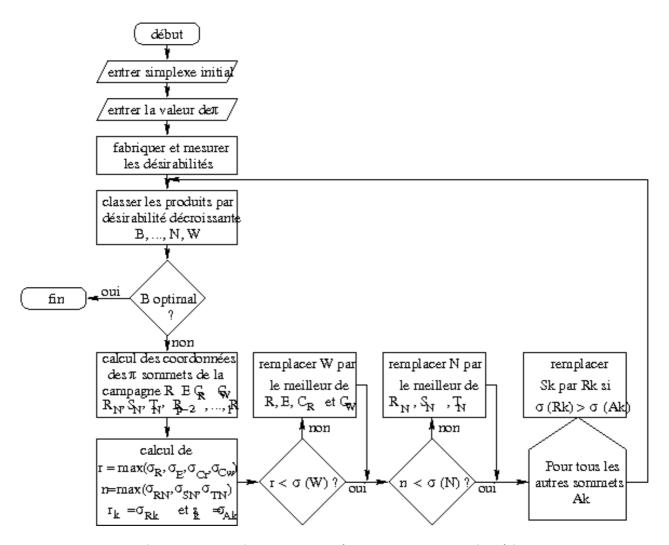


Figure V.7 : organigramme de la méthode des campagnes d'expériences

V.2.4.2. Discussion de la pertinence de la méthode des campagnes

Une désirabilité comparable à celle trouvée par la méthode du simplexe modifié au chapitre 1 (cf. paragraphe I.5.7) a donc été trouvée à la cinquième campagne, et a nécessité la réalisation de 38 expériences (3 pour le simplexe initial puis cinq campagnes de 7 expériences). C'est donc un peu plus de deux fois plus d'expériences que par la méthode basique, mais dans le contexte expérimental que nous avons décrit plus haut, l'optimum est trouvé en seulement cinq semaines (au lieu des seize semaines mentionnées précédemment). Si le poste budgétaire du salaire hebdomadaire de l'opérateur est beaucoup plus important que le poste budgétaire des fabrications, alors la méthode des campagnes peut être largement justifiée. Dans ce cas concret, nous montrons que la méthode des campagnes d'expériences n'est justifiée que dans un contexte d'économie d'échelle (c'est-à-dire lorsque le coût de chaque expérience décroît avec leur nombre). Notons aussi que dès la deuxième campagne (après 17 expériences), un excellent point (de désirabilité 0,998) avait été trouvé, et qu'on aurait pu ainsi ramener la durée totale de l'expérimentation à seulement deux semaines.

De plus, la figure 5, qui donne une vue générale des sommets testés dans le plan des couples d'entrées, montre que les campagnes ont permis de faire un crible serré des points au voisinage de l'optimum et en même temps d'explorer ponctuellement des sommets dans une vaste zone du domaine. Ces sommets apportent donc une information importante sur la surface de réponse. Par conséquent, il est envisageable d'exploiter cette information en cherchant par exemple à réaliser une approximation polynomiale de la surface de réponse grâce à un logiciel adapté, NLREG par exemple [2]. Ainsi, Zuloaga et coll. [3] ont utilisé un multisimplexe à quatre sorties pour optimiser l'extraction de phénols d'échantillons de sol; ils ont procédé selon la méthode classique du multisimplexe (sans avoir recours à des campagnes d'expériences). Ils mentionnent que les 17 essais qu'ils ont réalisés leur ont permis de déterminer une approximation des quatre surfaces de réponse (taux d'extraction de quatre composants phénoliques en fonction des quatre paramètres chimiques choisis comme entrées). L'ordre de grandeur du nombre d'essais dans une méthode par campagne d'expériences sera vraisemblablement comparable ou supérieur au nombre 17; la perspective de déterminer alors une bonne approximation de la surface de réponse nous semble donc réaliste.

V.2.5. Utilisation de Multisimplex pour une optimisation par campagne d'expériences

Comme nous l'avons déjà signalé au paragraphe III.3.2, le logiciel *Multisimplex* [4] possède une grande souplesse d'utilisation. Il est donc possible à tout instant de refuser le nouveau sommet candidat qu'il a calculé et d'entrer dans le logiciel les valeurs obtenues pour un point librement choisi. Rien n'empêche en particulier un utilisateur d'entrer, les uns après les autres, tous les résultats obtenus avec les sommets d'une campagne d'expériences, selon son libre choix des essais ; ensuite, il lui est possible de demander au logiciel de déterminer un nouveau simplexe à partir de toutes ces données. Enfin, lorsque le collège pense approcher de l'optimum, il a tout loisir de cesser la démarche par campagne et revenir à une démarche monoséquentielle aidée par le logiciel dans son utilisation classique.

En somme, s'engager dans une démarche par campagne d'expériences n'est pas incompatible avec l'utilisation de *Multisimplex*. Il est possible à toute étape :

- d'utiliser le logiciel pour le calcul des essais successifs (en mode monoséquentiel) ;
- de procéder ensuite à une ou plusieurs campagnes (en mode multiséquentiel);
- de revenir à l'utilisation du logiciel après avoir saisi les résultats des campagnes, par exemple pour déterminer avec précision l'optimum.

V.3. Évaluation de la méthode

L'exemple que nous avons traité montre que l'avantage économique de la méthode par campagne d'expériences nécessite une évaluation soigneuse des coûts. Il est donc impossible de définir une loi générale de pertinence de cette méthode par rapport à la méthode monoséquentielle. Nous pouvons néanmoins faire ressortir quelques éléments objectifs d'analyse.

- -Si dans la campagne de mesures, on détecte une majorité de points entrants (donnant de meilleures désirabilités que celles des points du simplexe initial les moins bons), alors la méthode est assurément efficace d'après les hypothèses de travail en termes de gain de temps et d'argent.
- Si à l'issue de la campagne, on détecte une minorité de points entrants, mais qu'il en existe au moins deux, alors la méthode ne sera efficace que si le coût de la manipulation et de la qualification est quasiment indépendant du nombre d'échantillons : à coût égal, il est alors plus intéressant d'obtenir deux échantillons qui font progresser la désirabilité parmi tous ceux de la campagne, plutôt que d'en fabriquer un seul dont on n'est même pas sûr qu'il fera progresser la désirabilité.
- Si à l'issue de la campagne, on détecte un seul point entrant, la méthode semble inefficace. Pourtant, il ne faut pas oublier que les points non entrants correspondent à des mesures effectuées. Par conséquent, après application de l'algorithme sur le nouveau simplexe dont un seul point a été modifié, ou après une ou plusieurs itérations, il est fort possible que le

nouveau jeu de paramètres proposés se confonde avec, ou soit très proche de l'un des points déjà mesurés, auquel cas on économisera une ou plusieurs étapes de la procédure.

- Enfin, si à l'issue de la campagne, on ne détecte aucun point entrant, c'est que R lui-même ($Reflected\ vertex$, symétrique du meilleur point W par rapport à l'isobarycentre des autres sommets, proposé par l'algorithme du simplexe basique) n'améliore pas la désirabilité et que le procédé monoséquentiel de test et de caractérisation de R seul aurait donné un résultat négatif. Dans ce cas, la campagne de mesures apporte une information importante : se déplacer dans la direction de R ou dans les directions adjacentes n'a pas d'intérêt, et l'optimum se trouve sans doute à l'intérieur du simplexe initial.

V.4. Conclusion

Après une réflexion approfondie sur le fonctionnement des laboratoires de recherche et d'analyse, nous avons mis en évidence la possibilité d'économies d'échelle ; en particulier, la répétition rapide d'un certain nombre d'expériences, ou même leur déroulement simultané peut être beaucoup plus économique que leur déroulement ponctuel sur une grande durée. Or, la méthode du simplexe implique justement une suite du type monoséquentiel, où chaque essai doit être suivi d'une analyse puis d'une saisie des valeurs des sorties et enfin d'un calcul par le logiciel des paramètres du nouvel essai.

Nous avons donc défini une nouvelle méthode, celle des campagnes d'expériences, dans laquelle on procède à un nombre librement choisi d'essais entre deux phases d'analyse et de saisie. Ce nombre varie entre 1 et p+6, p désignant le nombre d'entrées. Cette méthode, multiséquentielle, est basée sur une exploration rationnelle des sommets habituellement explorés par le simplexe modifié, avec des réflexions, extensions et contractions autour des points du simplexe en cours. Ces explorations sont faites selon un ordre de promesse décroissante, cette notion étant nécessairement spéculative, car la surface de réponse n'est pas connue.

Pour donner à notre méthode un caractère opératoire, nous avons complètement rédigé l'algorithme de la méthode.

Nous avons présenté un exemple illustratif et discuté dans ce cas de la pertinence de l'optimisation par campagnes d'expériences par rapport à la méthode traditionnelle du simplexe. Cette méthode peut être très intéressante dans un certain nombre de situations relatives à l'organisation d'un laboratoire de recherches (en particulier la relation entre les unités de fabrication et les unités d'analyse). Nous avons recensé quelques situations dans lesquelles la méthode que nous proposons peut faire gagner beaucoup de temps et d'argent au laboratoire. Nous avons enfin remarqué que notre méthode est parfaitement compatible avec l'utilisation de *Multisimplex*.

L'algorithme proposé forme une base de travail pour la réalisation d'un programme informatique englobant l'aide à l'optimisation expérimentale monoséquentielle ou par campagne d'expériences.

Bibliographie du chapitre V

- [1] FIAT O., BESSAUDOU A., COSSET F., *Optimisation d'expériences séquencées*, NUMELEC 2006, 5^e Conférence Européenne sur les Méthodes Numériques en Électromagnétisme, Lille, France, 29 décembre 1 décembre 2006.
- [2] SHERROD P. H., *NLREG*: Non Linear Regression Analysis Program, Nashville, TN, 1995, programme disponible à l'adresse

www.nlreg.com/order.htm

- [3] ZULOAGA O., ETXEBARRIA N., FERNANDEZ L. A., MADARIAGA J. M., *Multisimplex optimisation of purge-and-trap extraction of phenols in soil samples*, Journal of chromatography, A, 849, 225-234, 1999.
- [4] *Multisimplex*, software, developed by Grabitech Solutions AB, Trafikgatan 52, S-856 44 Sundsvall, Sweden.

Conclusion

Dans l'étude que nous avons menée, nous nous sommes efforcés de construire des outils annexes à l'utilisation du simplexe et du multisimplexe.

Notre objectif n'était pas de construire une nouvelle version du simplexe. Nous avons mentionné dans la brève étude historique du chapitre 1 qu'il y en avait déjà plusieurs. Leur développement est rendu plus aisé par la puissance croissante de l'outil informatique ; d'autres versions seront certainement imaginées, permettant la prise en compte de topographies des surfaces de réponse de plus en plus complexes. Ainsi, lors d'une réunion de travail du groupe Expérimentique en mars 2007 à Orléans, un participant évoquait la difficulté particulière que posait l'optimisation de l'extraction du pétrole dans un gisement présentant une forte discontinuité locale au voisinage d'une faille géologique. Mais on peut douter de l'existence d'une forme ultime de la méthode du simplexe, susceptible de converger rapidement et systématiquement vers l'optimum absolu, en vertu du *No free Lunch Theorem* cité dans le chapitre 1.

En revanche, nous avons travaillé sur trois domaines voisins.

En aval de la démarche d'optimisation du simplexe, nous avons construit au chapitre 2 une fiche méthodologique de fiabilisation du protocole. Cette fiche forme la troisième et dernière étape de la démarche expérimentale complète menant de la définition du problème à son industrialisation. Rappelons brièvement que :

- la première étape est celle de la sélection des variables ; elle est largement guidée par les techniques de plans d'expériences et d'analyse des données étudiées par Sandrine Karam dans sa thèse ;
- la deuxième étape est celle de l'optimisation ; la méthode itérative du simplexe est une technique bien adaptée à ce problème ;
- la troisième étape est la fiabilisation du protocole, permettant aux opérateurs d'un laboratoire de recherches ayant obtenu un prototype optimal d'assurer la répétabilité puis la reproductibilité et enfin l'industrialisation de la fabrication du produit ; le protocole, grâce à une série de cinq tests fondamentaux est amélioré progressivement.

En transformant cette fiche méthodologique en un véritable programme informatique, nous pensons avoir construit un outil réellement nouveau et opérationnel qui peut former la base d'un outil complet d'aide à la décision.

En amont du multisimplexe, nous avons présenté dans le chapitre 4 un nouvel outil informatique de détermination des coefficients de pondération (ou poids) des divers objectifs d'une optimisation. Nous avons d'abord montré par un exemple numérique qu'une faible variation des poids peut changer radicalement la position de l'optimum. Ensuite, nous avons rappelé synthétiquement le principe de deux méthodes existantes, la méthode des cartes et le tri croisé. Enfin, nous avons montré comment il est possible d'organiser le débat entre les prescripteurs et le laboratoire de recherches afin de définir précisément l'importance relative de chaque objectif. Il s'agit en l'occurrence d'une méthode d'acquisition réciproque dans laquelle on compare la valorisation globale (appelée désirabilité globale) d'un panel de produits et les valorisations individuelles (désirabilités individuelles) associées à chaque objectif. On construit ainsi des surfaces d'égale satisfaction dans une représentation de type Pareto et on en déduit les poids grâce à des formules rigoureusement établies dans notre propos. Comme pour la fiche méthodologique, nous avons voulu donner à nos résultats une forme complète et utilisable : une fiche de calcul excel a été réalisée et testée avec succès.

Enfin, dans le chapitre 5, nous avons décrit une méthode parallèle à la méthode du simplexe, la méthode des campagnes d'expériences. Elle en est inspirée car elle s'appuie sur les lois de réflexion, de contraction et d'extension définies dans la méthode modifiée du simplexe. Elle en diffère car elle donne à l'utilisateur la souplesse de choisir librement le nombre d'expériences qu'il

désire réaliser dans chaque campagne : ce n'est alors qu'à la fin de la campagne qu'il sera invité à saisir les résultats des expériences et que les données définissant les essais de la nouvelle campagne seront calculées. Nous n'avons pas, dans ce cas, réalisé un programme informatique sur la base de l'algorithme que nous avons construit. Il est difficile en effet, sans compétence informatique particulière, de traiter des tableaux dans lesquels le nombre de points (ici le nombre d'expériences dans la campagne) est variable.

Conformément à la première définition du sujet de cette thèse, nous avons aussi tenu à montrer l'adéquation de l'outil *Multisimplex* à des problèmes concrets rencontrés à XLIM. Ainsi, dans le chapitre 3, nous avons présenté l'optimisation d'un filtre planaire microonde : nous avons déterminé la position et la taille d'un trou cylindrique, réalisé par ablation laser, permettant l'optimisation de l'accord du filtre avec une fréquence de résonance de consigne.

Perspectives

Nous terminons notre propos en indiquant trois perspectives de recherche qui nous semblent dignes d'intérêt dans le prolongement de cette thèse.

- PERSPECTIVE 1. Les modifications successives de la méthode du simplexe permettent une adaptation sélective à la topographie présumée de la surface de réponse. Il pourraît être intéressant de développer des techniques mixtes utilisant à la fois la connaissance physique des expérimentateurs et l'analyse statistique des données existantes sur le comportement du système pour mettre en évidence des propriétés topographiques probables de la surface de réponse. On pourrait alors développer un simplexe adaptatif, dont l'évolution de forme n'est pas définie de façon unique (comme dans le simplexe modifié) mais définie pour tenir compte le mieux possible de cette topographie présumée. Bien sûr, le cas du champ de pétrole avec faille, cité plus haut, serait un excellent sujet d'étude préliminaire.
- PERSPECTIVE 2. La méthode des campagnes d'expériences pourrait faire l'objet d'un logiciel : l'algorithme complet est proposé au chapitre 5 et un informaticien professionnel devrait pouvoir, sans grande difficulté, lui donner une forme commercialement acceptable.
- PERSPECTIVE 3. Certains chercheurs de l'Institut de Recherche XLIM travaillent sur des problèmes d'optimisation de forme. Ce type de problème peut être formulé en termes identiques à ceux qui sont résolus par la méthode du simplexe. Dans le cas particulier d'un circuit planaire obtenu par dépôt d'une couche mince métallique sur un substrat, on peut en effet définir la forme de la couche en la découpant en très petits éléments juxtaposés carrés ou triangulaires (comme les pixels d'une image numérisée). L'état de chaque élément est alors une variable booléenne (0 : non métallisé) ou (1 : métallisé). Mais si chaque variable ne peut prendre que deux valeurs, le nombre de variables peut devenir excessivement grand si on veut obtenir une bonne résolution. On cherche cependant à optimiser le circuit, par exemple à accorder le filtre. À l'heure actuelle, ce type de problème ne peut être résolu par un logiciel du type *Multisimplex*. Nous croyons que seule une conjugaison très habile entre diverses méthodes très différentes (le simplexe, le recuit simulé, les plans de criblage, le gradient topologique, l'algorithme génétique) pourrait permettre de traiter ce type de problème. Ce serait alors une révolution dans la conception d'objets de toutes natures définis par leur forme et optimisant un critère.

Annexe A. Représentation normalisée des organigrammes algorithmiques

Un organigramme donne une représentation symbolique normalisée d'un algorithme. Les principales conventions sont présentées sur la figure A.1.

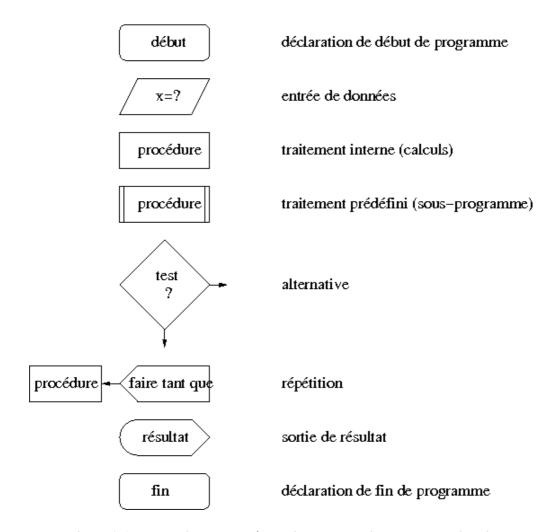


Figure A.1 : conventions de représentation des organigrammes algorithmiques

Annexe B. Représentation arborescente des principaux termes de la métrologie

Le diagramme représenté sur la figure 2 est une reproduction de la figure B.8, page 6, du guide V.I.M. (vocabulaire international de la métrologie). Il présente un diagramme conceptuel centré sur les caractéristiques métrologiques d'un système de mesure et est intitulé « concept diagram for part of Chapter 4, centered on metrological characteristic of a measurement system ».

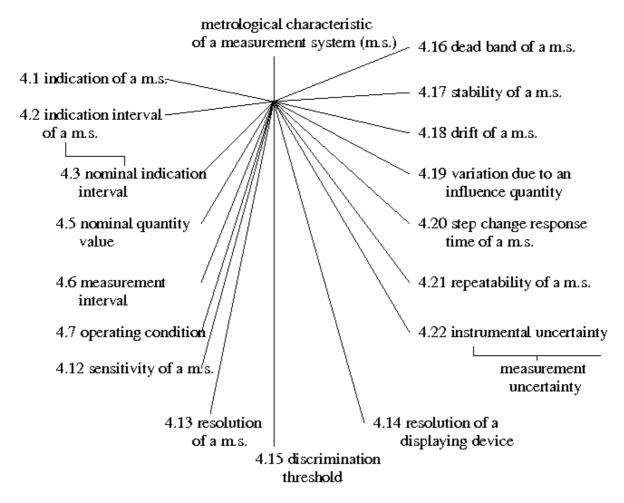


Figure B.2 : diagramme extrait du guide V.I.M. (vocabulaire international de la métrologie), présentant plusieurs concepts de métrologie

On pourra y identifier les termes suivants que nous avons repris dans le chapitre 2 : sortie, assimilée à l'indication d'un système de mesure (*indication of a measurement system*, noté 4.1 sur le diagramme),

- sensibilité (sensitivity of a measurement system, noté 4.12),
- stabilité (stability of a measurement system, noté 4.17),
- répétabilité (repeatability of a measurement system, noté 4.21),

et plusieurs autres termes dont nous avons tenté de donner des traductions : 4.2 intervalle d'affichage du système de mesure, 4.3 intervalle nominal d'affichage du système, 4.5 valeur quantitative nominale, 4.6 intervalle de mesure, 4.7 conditions opératoires, 4.13 résolution du système, 4.14 résolution d'un dispositif, 4.15 seuil de discrimination, 4.16 bande inactive du système, 4.18 dérive du système, 4.19 non traduit (nous n'avons pas trouvé le sens de ce terme), 4.20 vitesse de réponse du système, 4.22 incertitude des instruments.

Cette présentation est arborescente, ce qui nous semble un handicap. En effet, elle ne permet

pas de mettre en regard les différentes notions afin de les différencier; de plus, elle ne donne pas le classement hiérarchique existant entre certaines notions; enfin, elle ne cite que les propriétés sans les lier à la manière de les tester. Nous justifions ainsi que la présentation algorithmique que nous présentons dans le chapitre 2 (figure?) est plus riche, car elle articule les propriétés métrologiques (présentées dans les cadres rectangulaires) avec les tests correspondants (présentés dans des losanges) et qu'elle guide l'utilisateur dans la validation successive des propriétés.

Annexe C. Réalisation informatique de la fiche méthodologique

Nous présentons, dans les pages suivantes, une copie d'écran de la page html guidant l'utilisateur dans le processus de test de fiabilité du protocole.

Les cadres successifs sont affichés automatiquement par le programme. L'utilisateur n'a qu'à effectuer les tests décrits ; il entre, grâce à un menu déroulant, le résultat du test, puis suit les préconisations données par le programme.

Décrivons la procédure qui a conduit aux pages présentées. Il est bien sûr possible de suivre le déroulement de cette étude sur l'organigramme présenté à la fin du chapitre 2 (fiche méthodologique de contrôle de la fiabilité du protocole, figure II.3).

- Les quatre premiers cadres sont les déclarations préalables : après l'étude préalable et l'optimisation, un prototype optimal est obtenu ; il est décrit par un protocole provisoire.
- Le test (1) de répétition est effectué.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : le produit obtenu par application du protocole n'est pas optimal.
- Le programme propose un test de stabilité des paramètres principaux.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : un des paramètres principaux est instable dans le temps.
- Le programme suggère d'installer un système d'asservissement pour le paramètre incriminé.
- Le programme suggère de réitérer le test 1 après cette amélioration.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un succès.
- La répétabilité est maintenant établie.
- Le test (2) d'assouplissement des paramètres non principaux est effectué.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : le produit obtenu avec des contraintes moins strictes sur les paramètres non principaux n'est pas optimal.
- Le programme suggère de rechercher les paramètres non principaux les plus sensibles.
- Le programme propose un test de stabilité de ces paramètres.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : un des paramètres non principaux est instable dans le temps.
- Le programme suggère d'installer un système d'asservissement pour le paramètre incriminé.
- Le programme suggère de réitérer le test 2 après cette amélioration.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un succès.
- La solidité du protocole est maintenant établie.
- Le test (3) de fabrication sur une autre machine est effectué.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : le produit ainsi obtenu n'est pas optimal.
- Le programme suggère de vérifier si l'asservissement des paramètres sur la nouvelle machine est conforme à celui de la machine de référence.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : un des asservissements est moins précis.
- Le programme suggère de corriger ce réglage.
- Le programme suggère de réitérer le test 3 après cette amélioration.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait à nouveau par un échec.
- Le programme propose de vérifier à nouveau les asservissements.
- Ici, nous avons supposé que ce test se traduisait par un succès.
- Le programme suggère la recherche d'un facteur caché, dont la variation d'une machine à l'autre expliquerait l'écart des résultats.
- Ici, nous avons supposé qu'un facteur caché était détecté.
- Le programme demande si ce facteur est aisément réglable.
- Ici, nous avons supposé que c'était le cas.
- Le programme suggère de régler ce facteur comme dans la machine de référence.

- Le programme suggère de réitérer le test 3 après cette amélioration.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un succès.
- Il y a donc exhaustivité des paramètres à ce stade.
- Le test (4) de fabrication par d'autres opérateurs est effectué.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : le produit ainsi obtenu n'est pas optimal.
- Le programme suggère de chercher quelle étape du protocole pose problème.
- Il suggère ensuite de tester si l'amélioration de la description de cette étape permet au nouvel opérateur de mieux réussir cette étape.
- Ici, nous avons supposé que ce n'était pas le cas.
- Le programme suggère donc de mettre en place un automate pour cette étape délicate de la fabrication.
- Le programme suggère de réitérer le test 4 après cette amélioration.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un succès.
- Le protocole, enrichi de toutes les améliorations décrites, est alors bien décrit.
- La reproductibilité est maintenant établie.
- Le test (5) de transfert de technologie est effectué.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec : le produit obtenu à l'échelle industrielle n'est pas optimal.
- Le programme suggère de tester l'homogénéité spatiale des paramètres.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un échec.
- Le programme suggère d'équiper la machine industrielle d'un système d'asservissement assurant l'homogénéité spatiale.
- Le programme suggère de réitérer le test 5 après cette amélioration.
- Ici, nous avons supposé qu'il se traduisait par un succès.
- Le transfert technologique est réussi.
- Le programme s'arrête.

Etude préalable

Optimisation

Prototype

Protocole provisoire

Test 1 : Répéter la fabrication sur la même machine, avec les mêmes opérateurs et les mêmes conditions expérimentales (paramètres non principaux)



Test de stabilité paramètres principaux



Asservissement

Test 1 : répéter la fabrication sur la même machine, avec les mêmes opérateurs et les mêmes conditions expérimentales (paramètres non principaux)



Répétabilité

Test 2 : répéter la fabrication sur la même machine, avec les mêmes opérateurs et en assouplissant les conditions expérimentales (paramètres non principaux)



Séléction des paramètres non principaux les plus sensibles

Test de stabilité



Asservissement

Test 2 : répéter la fabrication sur la même machine, avec les mêmes opérateurs et en assouplissant les conditions expérimentales (paramètres non principaux)



Solidité du protocole

Test 3 : répéter la fabrication sur une autre machine, avec les mêmes opérateurs

échec ▼
Asservissement et finesse des réglages corrects ?
échec ▼
Corriger
Test 3 : répéter la fabrication sur une autre machine, avec les
mêmes opérateurs
échec ▼
Asservissement et finesse des réglages corrects ?
succès 🔻
Détéction d'un facteur caché ?
oui 🔻
Facteur facilement réglable
oui 🔻
Le régler comme dans la machine de référence
Test 3 : répéter la fabrication sur une autre machine, avec les
mêmes opérateurs
succès 🔻
Exhaustivité des paramètres
Test 4 : répéter la fabrication sur la même machine, avec
d'autres opérateurs
échec 🔻
Détection de l'étape délicate ou du geste technique nécessitant
un savoir-faire
Amélioration de la descritpion du geste suffisante ?
non 🔻
Mettre en place un automate

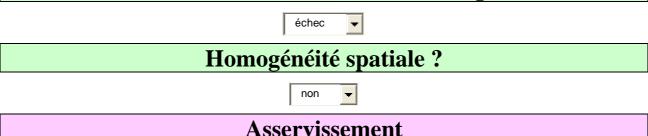
Test 4 : répéter la fabrication sur la même machine, avec d'autres opérateurs



Protocole bien décrit

REPRODUCTIBILITE

Test 5 : répéter la fabrication sur une autre machine, avec d'autres opérateurs, dans les conditions et à l'échelle industrielle (transfert de technologie).



Test 5: répéter la fabrication sur une autre machine, avec d'autres opérateurs, dans les conditions et à l'échelle industrielle (transfert de technologie).



Annexe D. Formes de la fonction agrégative générique suivant la valeur du niveau de compensation s

Pour alléger les notations, travaillons dans le cas où le nombre d'objectifs est $\omega = 2$. La fonction agrégative générique de Scott et Antonsson s'écrit donc

$$f_s(d_1, d_2) = \left(\frac{w_1 \cdot d_1^s + w_2 \cdot d_2^s}{w_1 + w_2}\right)^{\frac{1}{s}}$$

Si $d_1 = d_2$, il est immédiat que $f_s(d_1, d_2) = d_1 = d_2$ qui s'identifie alors aux fonctions min, moyenne géométrique, moyenne arithmétique et max. Supposons maintenant que $d_1 > d_2$ (l'autre cas se traite de même).

 $s = -\infty$ (cette écriture est autorisée par le fait que $s \in R$).

On écrit alors

$$f_s(d_1, d_2) = d_2 \left[\frac{w_1 \left(\frac{d_1}{d_2}\right)^s + w_2}{w_1 + w_2} \right]^{\frac{1}{s}} = d_2 \exp \left(\frac{1}{s} \ln \left[\frac{w_1 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^{-s} + w_2}{w_1 + w_2} \right] \right)$$

 $\frac{d_2}{d_1}$ < 1 donc quand $s \to -\infty$, $\left(\frac{d_2}{d_1}\right)^{-s} \to 0$. Par suite, le terme entre crochets tend vers $\frac{w_2}{w_1 + w_2}$ donc le terme entre parenthèses tend vers 0, donc l'exponentielle tend vers 1 et $f_s(d_1, d_2)$ tend vers d_2 , qui est bien la plus petite des deux désirabilités :

$$f_{-\infty}(d_1, d_2) = \min(d_1, d_2)$$

$$s = 0$$

Exprimons le logarithme de $f_s(d_1, d_2)$:

$$\ln f_s(d_1, d_2) = \frac{1}{s} \ln \left[\frac{w_1 \cdot d_1^s + w_2 \cdot d_2^s}{w_1 + w_2} \right] = \frac{1}{s} \ln \left[1 + \frac{w_1(d_1^s - 1) + w_2(d_2^s - 1)}{w_1 + w_2} \right]$$

On a

$$\lim_{s \to 0} \frac{w_1(d_1^s - 1) + w_2(d_2^s - 1)}{w_1 + w_2} = 0$$

donc on peut effectuer le développement ($\ln(1+u) \square u$ quand $u \square 0$):

$$\ln f_s(d_1, d_2) \square \frac{1}{s} \frac{w_1(d_1^s - 1) + w_2(d_2^s - 1)}{w_1 + w_2} = \frac{w_1 \frac{d_1^s - 1}{s} + w_2 \frac{d_2^s - 1}{s}}{w_1 + w_2}$$

Un résultat d'analyse mathématique¹ donne

$$\lim_{s \to 0} \frac{d_1^s - 1}{s} = \ln d_1 \lim_{s \to 0} \frac{d_2^s - 1}{s} = \ln d_2$$

¹voir par exemple RAMIS E., DESCHAMPS C., ODOUX J., Cours de mathématiques spéciales, tome 4, éditions Masson, 1997

On en déduit que

$$\ln f_0(d_1, d_2) = \frac{w_1 \ln d_1 + w_2 \cdot \ln d_2}{w_1 + w_2} = \ln \left(d_1^{\frac{w_1}{w_1 + w_2}} \cdot d_2^{\frac{w_2}{w_1 + w_2}} \right)$$

et on retrouve la moyenne géométrique pondérée :

$$f_0(d_1, d_2) = d_1^{\frac{w_1}{w_1 + w_2}} \cdot d_2^{\frac{w_2}{w_1 + w_2}}$$

qui s'identifie à la moyenne géométrique pondérée.

$$s = 1$$

L'identification de f_1 à la moyenne arithmétique pondérée est immédiate :

$$f_1(d_1, d_2) = \frac{w_1 \cdot d_1 + w_2 \cdot d_2}{w_1 + w_2}$$

 $s = +\infty$ (cette écriture est autorisée par le fait que $s \in R$).

On écrit alors

$$f_s(d_1, d_2) = d_1 \left[\frac{w_1 + w_2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^s}{w_1 + w_2} \right]^{\frac{1}{s}} = d_1 \exp\left(\frac{1}{s} \ln \left[\frac{w_1 + w_2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^s}{w_1 + w_2} \right] \right)$$

 $\frac{d_2}{d_1} < 1$ donc quand $s \to +\infty$, $\left(\frac{d_2}{d_1}\right)^s \to 0$. Par suite, le terme entre crochets tend vers $\frac{w_1}{w_1 + w_2}$ donc le terme entre parenthèses tend vers 0, donc l'exponentielle tend vers 1 et $f_s(d_1, d_2)$ tend vers d_1 , qui est bien la plus grande des deux désirabilités:

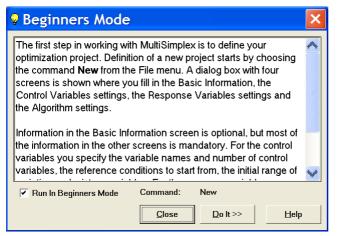
$$f_{+\infty}(d_1, d_2) = \max(d_1, d_2)$$

Annexe E. Tutorial Multisimplex

Nous présentons, dans les pages qui suivent, un tutorial (ou didacticiel) décrivant en détail l'utilisation du logiciel commercial *Multisimplex*. Il est illustré par un exemple.

Tutorial: Utilisation du logiciel Multisimplex

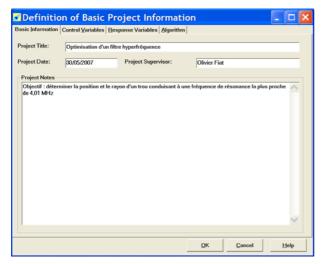
1- Lancer Multisimplex (noté MSX dans tout ce qui suit)



Ouverture de la fenêtre **Beginners Mode** (description sommaire du principe du programme)

Cliquer sur **Do it** (aide assistant utilisateur) ou **Close** (sans assistant)

2- La fenêtre suivante s'affiche.

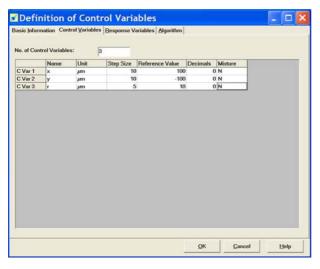


On entre le titre et quelques commentaires. La date est proposée par défaut.

Attention: <u>ne pas cliquer sur OK</u> car le projet n'est pas encore défini.

On commence (par exemple) par définir les variables d'entrée en cliquant sur **Control Variables.**

3- Fenêtre : Control Variables



On entre le nombre de variables (ici 3)

Pour chacune, on entre le nom, l'unité, la taille du pas, la valeur de référence (point au centre du simplexe initial), le nombre de décimales.

L'option mixture est dédiée aux problèmes de mélanges chimiques (N pour non, Y pour oui).

Attention : <u>ne pas cliquer sur OK</u> car le projet n'est pas encore complètement défini.

On va maintenant définir les variables de sortie en cliquant sur **Response Variables.**

4- Fenêtre: Response Variables

On choisit le nombre de réponses (par exemple 2) puis on définit pour chaque réponse un ensemble de caractéristiques :

<u>Name</u>: nom<u>Unit</u>: unité

• Objective : 3 choix possibles

- **Minimisation**: pour rendre la réponse la plus petite possible c'est-à-dire la plus proche possible de **Low Limit** (valeur à entrer sous la courbe). A rentrer également, la valeur maximale admissible **High Limit**
- **Maximisation**: pour rendre la réponse la plus grande possible c'est-à-dire la plus proche possible de **High Limit** (valeur à entrer sous la courbe). A rentrer également, la valeur minimale admissible **Low Limit**
- **Target value** : pour rendre la réponse la plus proche possible d'une valeur cible **Target** (valeur à entrer sous la courbe). A rentrer également, les valeurs maximale et minimale admissibles **High Limit** et **Low Limit**
- <u>Influence</u>: on choisit le poids de la réponse, 3 niveaux sont proposés par défaut
 - low => poids = 0.33, medium (0.67) et high (1)
 - Il est possible de choisir la valeur du poids en entrant une valeur comprise entre 0 et 1 ou en déplaçant le curseur sous la ligne Numerical definition of influence.
- <u>Shape</u>: il faut voir le petit graphique de la fenêtre comme un indice de satisfaction (en fait, c'est un nombre flou). On choisit ensuite l'une des trois formes proposées par défaut qui dépendent de l'objectif fixé:
 - Cas où on est peu exigeant: Fast near High Limit (minimisation) ou Fast near Low Limit (maximisation) ou Fast near Limits (cible): la satisfaction est souvent proche de 1, seules les valeurs de la réponse éloignées de l'objectif sont pénalisées. Le coefficient d'ajustement (Numerical definition of M-Function) vaut alors R = 0,3.
 - <u>Cas intermédiaire</u>: **Proportionnal** (minimisation, maximisation ou cible): l'indice de satisfaction varie de façon affine entre les valeurs extrêmes et les valeurs cherchées. Le coefficient d'ajustement vaut alors R = 1.
 - Cas où on est très exigeant: Fast near Low Limit (minimisation) ou Fast near High Limit (maximisation) ou Fast near Target value (cible): la satisfaction n'est proche de 1 que lorsqu'on est au voisinage de l'optimum et décroît rapidement quand on s'en écarte. Le coefficient d'ajustement vaut alors R = 3.

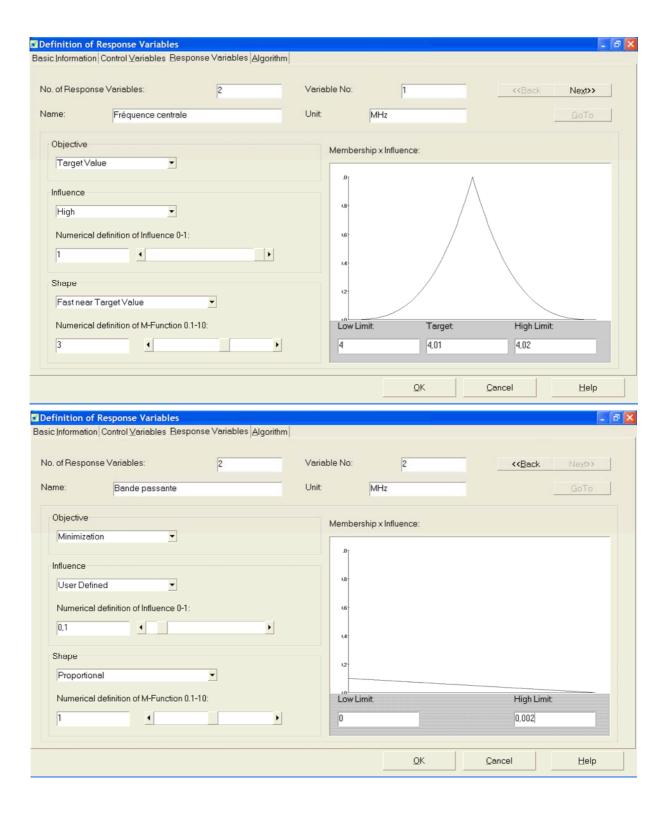
Il est possible, entre ces formes de référence, de choisir librement la forme de la courbe de satisfaction en entrant au clavier dans la fenêtre **Numerical definition of M-Function 0,1-10** la valeur du coefficient R, ou de l'ajuster grâce au curseur.

Dans tous ces cas, la courbe s'ajuste au fur et à mesure dans la fenêtre graphique.

On passe de l'une à l'autre des réponses par **Next** et **Back**.

Désormais, le multisimplexe s'assimile à un monosimplexe où on cherche à maximiser l'indice de satisfaction globale moyenne géométrique des indices de satisfaction individuel.

Attention : ne pas cliquer sur OK car le projet n'est pas encore complètement défini.



5- Fenêtre : Algorithm :

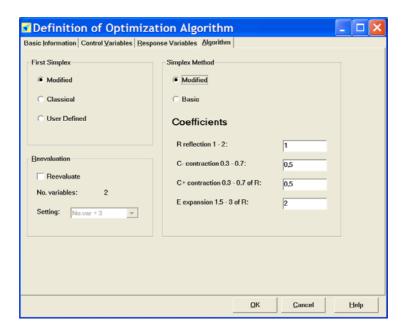
- First simplex : choix du simplexe initial
 - Modified (cas du simplexe tourné)
 - **Classical** (cas du simplexe en coin)
 - **User defined** (si des essais en nombre suffisant, ont déjà été réalisés, on peut choisir parmi eux les sommets du simplexe initial)

• Reevaluation: si activé, le logiciel va proposer de retester le meilleur point tous les n + 1 ou n + 3 essais (à choisir dans Setting) où n désigne le nombre de réponses. Exemple ici: 2 réponses, test tous les 3 ou 5 essais.

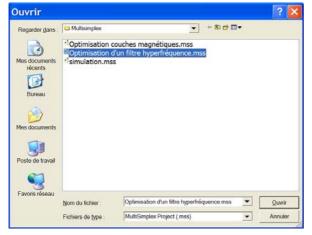
• <u>Simplex method</u>:

- Basic: les déplacements ne se font que à pas constant (le choix des coefficients est désactivé): dans le cas particulier où l'on a deux paramètres d'entrée, on se déplace de triangle en triangle: cette méthode a l'avantage de la simplicité, évite la dégénérescence, mais sera lente si on est loin de l'optimum.
- <u>Modified</u>: les déplacements peuvent se faire à pas variable, on peut donc choisir les coefficients: le logiciel peut alors tourner le dos à un point jugé mauvais (<u>reflection</u>), faire un pas plus court (<u>C+reflection</u>), dans une direction extérieure au simplexe si on pense qu'on ne doit pas aller trop loin ou faire un pas plus court (<u>C-reflection</u>), dans une direction intérieure au simplexe si on pense que l'on doit rester à l'intérieur du simplexe ou faire un pas plus long dans une direction jugée bonne (<u>expansion</u>, quand on est loin de l'optimum).

On peut enfin cliquer sur <u>OK</u>. Le logiciel est prêt à fonctionner.



Penser à sauvegarder : file – save asavant de fermer Multisimplex

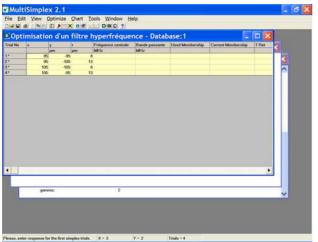


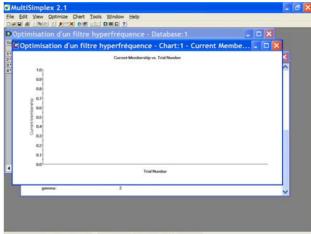
Pour reprendre une étude, rouvrir Multisimplex, fermer la fenêtre **Beginners Mode**, cliquer sur **File Open**, sélectionner le nom de l'étude puis cliquer sur **Ouvrir**.

On peut revenir sur n'importe lequel des choix précédents en cliquant sur le $12^{\text{ème}}$ (Project Information) ou $13^{\text{ème}}$ bouton (Response Variables) dans la barre de sigles.

6- Initialize Optimization

Cliquer sur Optimize, Initialize Optimization ou sur le 9^{ème} bouton en partant de la gauche => l'ouverture de trois fenêtres :



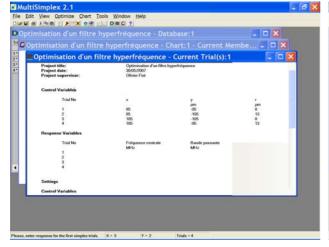


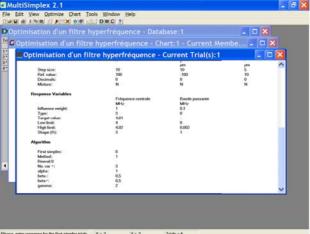
La fenêtre **Database** 1 permet de visualiser

- les coordonnées des différents essais (sommets du Simplexe)
- les valeurs des réponses
- used membership:
- current membership: fonction d'appartenance
- T Ret : 1 - Type : F

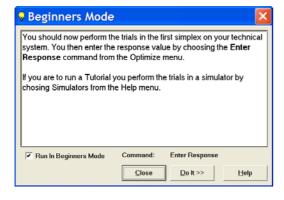
<u>Number</u>: fonction d'appartenance en cours en fonction des n° des essais (valeur de la désirabilité globale: moyenne géométrique des désirabilités individuelles)

La fenêtre **Current membership vs. Trial**





Fenêtre <u>Current Trial(s)</u> : tableau récapitulatif de l'ensemble de l'étude



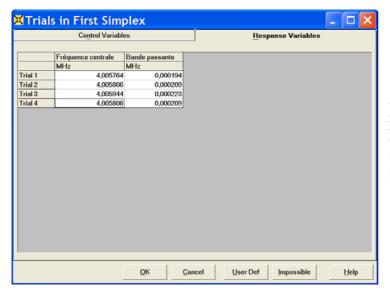
plus une petite fenêtre (Beginners Mode) qui dit ce qu'il faut faire. On peut accepter ce guide en cliquant sur <u>Do it</u> ou fermer par <u>Close</u> si on veut garder l'initiative.

La fenêtre **Database : 1** propose 4 essais

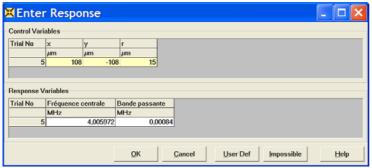
χ (μm)	y (µm)	r (µm)
95	-95	8
95	-105	13
105	-105	8
105	-95	13

On procède aux quatre essais proposés et on mesure les valeurs des deux réponses (fréquence centrale et bande passante)

Il faut maintenant entrer ces valeurs dans le logiciel. Pour cela, on clique sur **Optimize Enter Response** ou sur le 11^{ème} bouton en partant de la gauche ce qui ouvre la fenêtre **Trials in First Simplex**



Après avoir entré les valeurs des réponses, on clique sur **OK**La fenêtre **Beginners Mode** s'ouvre, cliquer sur **Do it** >> (à faire 2 fois)

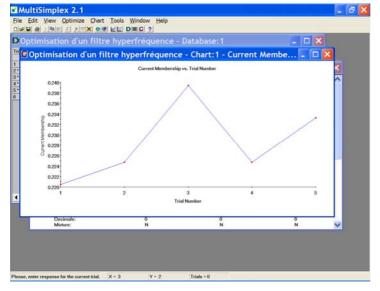


Le logiciel propose les valeurs x, y et r du 5^{ème} essai

On entre les valeurs des réponses, on clique sur **OK**

La fenêtre **Beginners Mode** s'ouvre, cliquer sur **Do it** >> (à faire 2 fois)

.

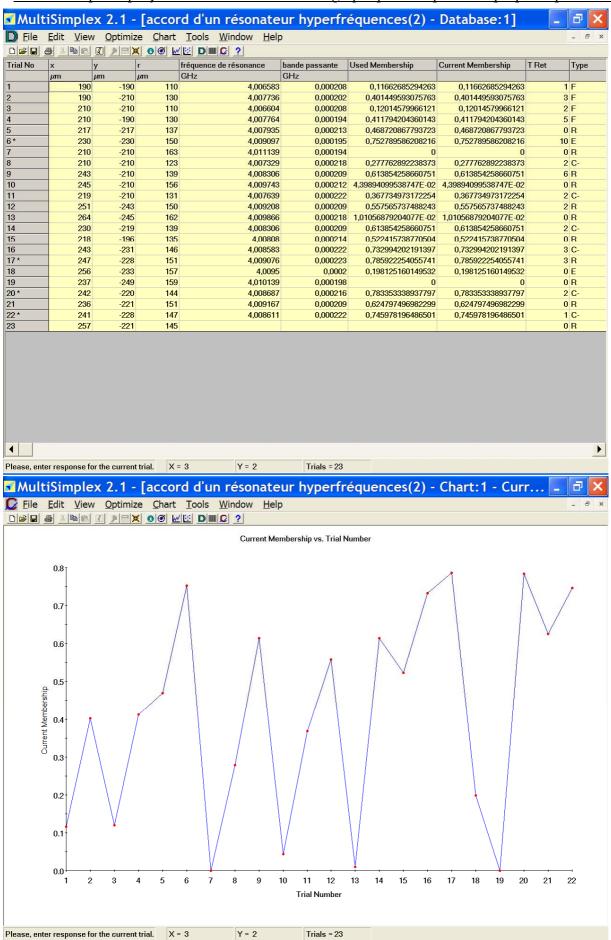


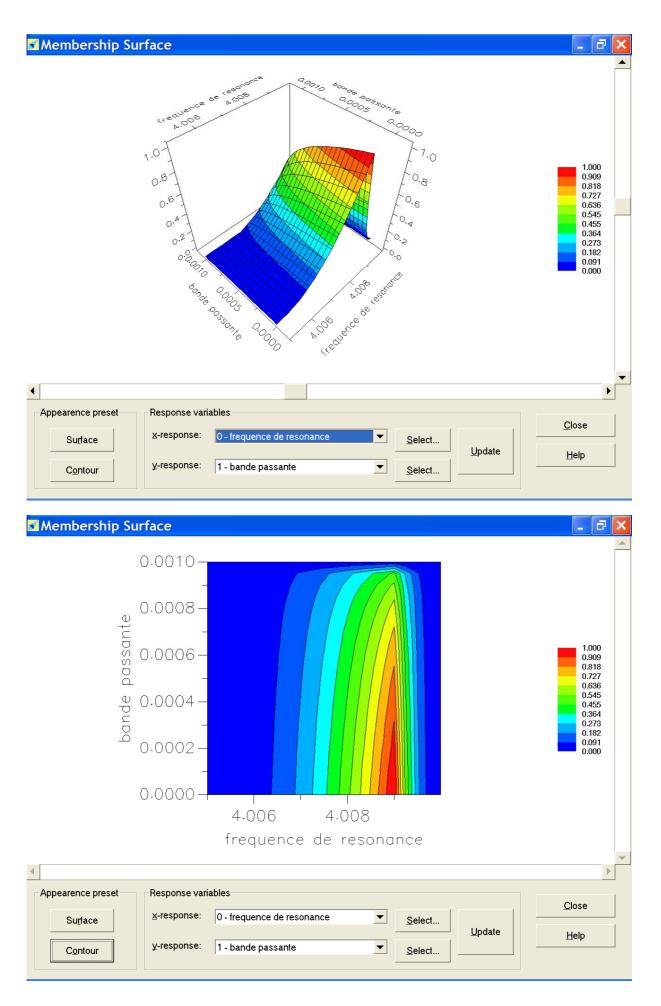
On peut, à chaque essai, visualiser l'évolution de la fonction de désirabilité globale.

Ici, l'étude n'est pas terminée car les valeurs sont trop faibles, la valeur maximale est égale à 0,239 pour l'essai n°3

Donc on continue essai n°6

Autre exemple : aperçu des différents tableaux et graphiques récapitulatifs proposés par MSX





Annexe F. Démonstrations mathématiques des résultats énoncés au chapitre IV

F.1. Principe de calcul des poids à partir d'une matrice inverse symétrique

Soit $M = [m_{i,j}]$ une matrice inverse symétrique. La recherche des poids donne le système

$$\frac{w_{1}}{w_{2}} = m_{1,2} \quad \frac{w_{1}}{w_{3}} = m_{1,3} \quad \dots \quad \frac{w_{1}}{w_{j}} = m_{1,j} \quad \dots \quad \frac{w_{1}}{w_{n}} = m_{1,n}$$

$$\vdots \qquad \qquad \vdots$$

$$\frac{w_{i}}{w_{j}} = m_{i,j} \quad \dots \quad \frac{w_{i}}{w_{n}} = m_{i,n}$$

$$\vdots$$

$$\frac{w_{n-1}}{w_{n}} = m_{n-1,n}$$

Les n-1 équations sur la première ligne donnent accès aux expressions des poids w_2 , ..., w_n en fonction du poids w_1 :

$$w_2 = \frac{1}{m_{1,2}} w_1 = m_{2,1} w_1 ; \dots ; w_n = \frac{1}{m_{1,n}} w_1 = m_{n,1} w_1$$

Cherchons la condition pour laquelle ces expressions sont cohérentes avec les autres équations sur les lignes inférieures :

$$\forall i, j \in \{1, ..., n\}, \frac{w_i}{w_i} = m_{i,j} \iff \frac{w_i}{w_1} \cdot \frac{w_1}{w_j} = m_{i,j} \iff m_{i,1} \cdot m_{1,j} = m_{i,j}$$

Ceci traduit la relation de transitivité dans le cas particulier où l'indice intermédiaire est 1. On peut en déduire qu'elle est vraie pour tout indice intermédiaire :

$$\forall i, j, k \in \{1, ..., n\}, m_{i,j} \cdot m_{j,k} = (m_{i,1} \cdot m_{1,j}) \cdot (m_{j,1} \cdot m_{1,k})$$

Or *M* est supposée inverse symétrique donc $m_{1,i} \cdot m_{i,1} = 1$ et :

$$m_{i,j} \cdot m_{j,k} = m_{i,1} \cdot m_{1,k} = m_{i,k}$$

ce qui prouve que la propriété de transitivité est toujours vérifiée. Pour déterminer complètement les poids, il suffit d'écrire la condition de normalisation des poids :

$$\sum_{i=1}^{n} w_i = 1w_1 \left(1 + m_{2,1} + \dots + m_{n,1} \right) = 1w_1 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} m_{i,1}}$$

En somme:

- Si la matrice est une matrice de rapports de poids, la relation de transitivité est vérifiée et on peut calculer la matrice des importances relatives.
- Si les coefficients de la matrice des importances vérifient la relation de transitivité, alors on peut calculer les valeurs des poids normalisés et la matrice est donc une matrice de rapports de poids. Une matrice d'importances relatives peut donc être considérée comme une matrice de rapports de poids si et seulement si la propriété de transitivité $m_{i,j} \cdot m_{j,k} = m_{i,k}$ est vérifiée par tous les termes. On peut alors déterminer complètement les valeurs des poids

normalisés:

$$w_1 = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} m_{i,1}} \forall i \in \{2, ..., n\}, w_i = m_{i,1} w_1$$

5.

En particulier, la matrice inverse symétrique donnée à l'exemple ? :

$$M_{ir} = \begin{bmatrix} 1 & 0.2 & 0.4 \\ 5 & 1 & 2 \\ 2.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix}$$

donne grâce à ces formules les poids normalisés

$$w'_1 = \frac{1}{1+5+2,5} = \frac{2}{17}, w'_2 = \frac{5}{1+5+2,5} = \frac{10}{17}, w'_1 = \frac{2,5}{1+5+2,5} = \frac{5}{17}$$

ce qui est bien cohérent avec les poids $w_1 = 2$, $w_2 = 5$ et $w_3 = 5$ donnés dans l'exemple.

F.2. Non sécance des surfaces d'égale satisfaction

Soient deux surfaces d'égale satisfaction distinctes dans l'espace des désirabilités. Notons k' le niveau de satisfaction globale de la première surface et k" celui de l'autre surface et supposons que k' et k" sont distincts. Raisonnons par l'absurde. Supposons qu'elles soient sécantes en un point. La figure 3 donne une illustration de ce cas lorsque n=2 avec σ_1 en abscisse et σ_2 en ordonnée.

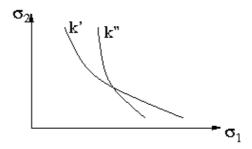


Figure F.3: illustration de la sécance de deux lignes d'égale satisfaction

Alors, pour un même n-uplet $(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n)$ de désirabilités individuelles, on aurait deux valeurs distinctes (k' et k'') de la satisfaction globale : cela contredirait le fait que la transposée Φ^* est une fonction, car $(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n)$ aurait deux images. Il est donc impossible que deux surfaces d'égale satisfaction se croisent.

F.3. Positivité des coordonnées du gradient de satisfaction

Raisonnons par l'absurde. Supposons que l'une des coordonnées du gradient de satisfaction au moins soit strictement négative en un point $P(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n)$ de ER_{τ} :

$$\frac{\partial \Phi^*}{\partial \sigma_i}(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n) < 0$$

Dans ce cas, il existe un voisinage fermé de P dans lequel cette dérivée partielle reste strictement négative, donc majorée par une valeur strictement négative, soit -m. Par application du théorème des accroissements finis, on en déduit que

$$\exists \varepsilon > 0, \frac{\Phi^*(\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_i + \varepsilon, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_n) - \Phi^*(\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_i, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_n)}{\varepsilon} \leq -m$$

On en déduit :

$$\Phi^*(\sigma_1,...,\sigma_{i-1},\sigma_i+\varepsilon,\sigma_{i+1},...,\sigma_n) - \Phi^*(\sigma_1,...,\sigma_{i-1},\sigma_i,\sigma_{i+1},...,\sigma_n) \le -m \cdot \varepsilon < 0$$

Par suite, toutes autres satisfactions égales, l'accroissement de $\varepsilon > 0$ sur la satisfaction de la *i*-ième

sortie a provoqué la diminution (au moins égale à $m \cdot \mathcal{E}$) de la satisfaction globale, ce qui est absurde. Les coordonnées du gradient sont donc toutes positives.

Annexe G. Fiche de calcul EXCEL pour le calcul des poids par la méthode des lignes d'égale satisfaction dans le cas de deux réponses

Nous donnons dans les pages suivantes les copies des tableaux et graphiques de la feuille de calcul EXCEL que nous avons réalisée pour le calcul des poids par la méthode du gradient de satisfaction. Les deux sorties sont l'épaisseur (s_1) et l'adhérence (s_2) d'une couche.

- Le tableau G.1, rempli par l'utilisateur, définit les deux fonctions de désirabilité τ_1 et τ_2 .
- Le tableau G.2, rempli par l'utilisateur, définit un faisceau de produits dont les caractéristiques couplées, épaisseur et adhérence, donnent un niveau de désirabilité globale $\sigma = 0.60$.
- Les figures G.1 et G.2 donnent l'allure des courbes de désirabilité individuelles.
- Le tableau G.3, appelé tableau de travail, rassemble les données numériques relatives aux trois points choisis sur la ligne d'égale satisfaction $\sigma = 0,60$.
- Le tableau G.4 rassemble les valeurs numériques calculées par le programme pour la détermination de l'approximation quadratique de la ligne d'égale satisfaction $\sigma = 0,60$ passant par les trois points choisis.
- Le tableau G.5 donne les valeurs calculées des pentes u de la droite (OP) (joignant l'origine du repère et le point médian de la ligne d'égale satisfaction) et v du gradient de satisfaction.
- Le tableau G.6 donne les valeurs calculées des poids w_1 et w_2 .

1. Tableau des indices de	satisfaction indi	viduelle			
1.1. épaisse	eur		1.2. adhérence		
	s1 (nm) ta	au1(s1)	s2 (SD)		tau2(s2)
	11000	1		3,5	0
	12000	0,98		4	0,1
	13000	0,95		4,5	0,25
	14000	0,92		5	0,3
	15000	0,85		5,5	0,37
	16000	0,7		6	0,45
	17000	0,58		6,5	0,52
	18000	0,2		7	0,6
	19000	0,15		7,5	0,8
	20000	0,13		8	0,85
	21000	0,11		8,5	0,9
	22000	0,08		9	1
	23000	0,03		9,5	1
	24000	0		10	1

Tableau G.1 : tableau de saisie des fonctions de désirabilité τ_1 et τ_2

2. Grille de sati C	sfaction On proposera 5 modèle	es pour ch	aque indice	de satisfactio	on globale)	
3	s1(nm)	s2 (S	D)	(ca x	lculé) (d y	calculé)
0						
0 0						
0						
0						
0,2						
0,2						
0,2						
0,2						
0,2						
0,4						
0,4						
0,4 0,4						
0,4						
2.2	***	200	4.5		4	0.0
0,6 0,6	110 130		4,5 5,5	_	1 0,95	0,2 0,3
0,6	160		6,5		0,33	0,5
0,6	180	000	7,5		0,2	0
0,6	210	000	9		0,11	
0,8						
0,8						
0,8						
0,8 0,8						
1	110		7,5			
1 1	120 130		8 8,5			
1	138	300	9			
1	145	500	10			

 $Tableau\ G.2: tableau\ de\ saisie\ pour\ la\ fonction\ de\ d\'esirabilit\'e\ globale$

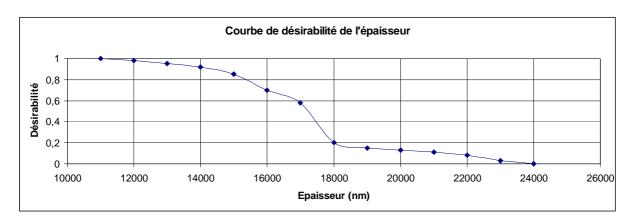


Figure G.1 : courbe de désirabilité de l'épaisseur

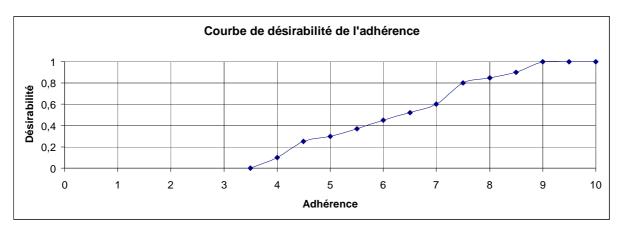


Figure G.2 : courbe de désirabilité de l'adhérence

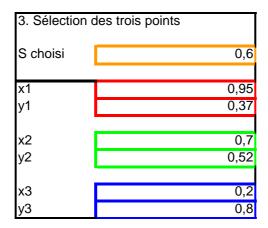


Tableau G.3: tableau de travail

4. Calcul de l'équation de la ligne de satisfaction S					
y=ax²+bx+c					
0,74666667	-1,52	1,773333333			
-4,8	9,2	-4,4			
5,33333333	-8	2,666666667			
C=	0,904533333				
c= b= a=	-0,512				
a=	-0,053333333				

Tableau G.4 : tableau de calcul des coefficients quadratiques de la ligne d'égale désirabilité $\sigma=0,60$

Pente du gradient de satisfaction				
u=	1,704545455			
v=	0,742857143			

Tableau G.5 : pentes calculées de la droite $\ OP\ (u)$ et du gradient de satisfaction en $P\ (v)$

6. Poids respectifs normés (w1+w2=1)			
w1=	0,441260745		
w2=	0,558739255		

Tableau G.6 : valeurs numériques des poids calculés