06 Plans d'expérience pour modèles à effets d'interactions

01 Généralités

Considérons, par exemple, une réaction chimique dont on mesure le rendement. Supposons que ce rendement dépend, entre autre, des deux facteurs que sont la température et la pression. Modéliser cette expérience à l'aide d'un modèle polynomial du premier degré entraîne que l'effet de la température sur la réponse est toujours le même quelle que soit la valeur prise par la pression. Il est évident que cette hypothèse n'est pas toujours vérifiée dans la réalité car on peut envisager que l'effet de la température sur la réponse change en fonction de la pression utilisée. Dans ce cas de figure il existe donc un **effet d'interaction** entre ces deux facteurs.

guia

considerar

L'objet de ce chapitre est de proposer des modélisations adaptées à ces situations d'interaction. Ceci est possible en restant dans un cadre polynomial, il suffit de rajouter des termes croisés rendant compte de ces nouveaux effets. L'analyse de tels modèles est facilement réalisable dès lors que l'on utilise, une nouvelle fois, des plans d'expérience factoriels ou des fractions régulières adéquates de ceux-ci.

02 Modèle utilisé

Considérons un phénoméne aléatoire dépendant de m facteurs quantitatifs mis en oeuvre au sein du domaine expérimental $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^m$. Le modèle statistique étudié ici s'écrit donc $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec la loi de réponse donnée par :

$$C_m^2 = \frac{m!}{(m-2)!\,2!} = \frac{m(m-1)\cancel{(m-2)!}}{\cancel{(m-2)!}\,2}$$

$$\forall\, x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i + \sum_{i<j}\sum \beta_{ij} x_i x_j$$

On dit alors que β_{ij} $(i, j = 1, ..., m, i < j)$ est l'**effet d'interaction** entre les facteurs i et j. Il existe autant d'interactions entre couples de facteurs que de choix non-ordonnés de deux élément dans un ensemble en contenant m (c'est-à-dire $C_m^2 = m(m-1)/2$), le nombre de paramètres inconnus du modèle considéré est donc égal à :

β_0 β_i, $i \neq 0$ effets d'interaction

$$p = 1 + m + C_m^2 = \frac{m^2 + m + 2}{2}.$$

Remarquons que matriciellement ce modèle linéaire peut être écrit sous la forme classique $Y = X\beta + \varepsilon$ avec donc ici :

$$X = \left[\ \mathbb{I}_n \mid D \mid D_I\ \right]$$

La matrice $D_I \in \mathcal{M}(\mathrm{m}(\mathrm{m}-1)/2, \mathrm{p})$ est appelée **matrice des effets d'interactions** du plan d'expérience.

$$X = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ \begin{matrix} \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{23} \end{matrix} \end{array}$$

• √ autant de (-1) que (1)

03 Plans factoriels complets

1) Exemple introductif

Détaillons brièvement un exemple dans le cas à $m = 3$ facteurs sont considérés. Le modèle à ajuster est alors $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec :

$$\forall\, x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 .$$

$n = 2^3 = 2^m$ $m =$ #factores

On a donc ici $p = 7$. Si un plan factoriel complet (donc en $n = 8$ expériences) est utilisé la matrice du modèle est alors donnée par :

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} \boxed{1} & \boxed{2} & \boxed{3} & 12 & 13 & 23 \end{array} \\ \left[\begin{array}{c|ccc|ccc} 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}\right] \end{array} \Rightarrow X^T X = \begin{pmatrix} 8 & & & 0 \\ & 8 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 8 \end{pmatrix}$$

$[-1, 1]$

Les colonnes identifiées aux valeurs encadrées l'ont été selon la convention posée au chapitre 03, les trois dernières colonnes (de la matrice des effets d'interactions) s'obtiennent par contre directement à l'aide du produit d'Hadamard. On vérifie alors que :

$${}^t XX = 8 I_7$$

Todo plan de experiencia factorial completo de m factores es ortogonal, su matriz de información es $X^T X = 2^m I_p$

Il en résulte donc que ce type de configuration est ici très intéressante puisque de taille correcte tout en conservant la propriété d'orthogonalité.

2) Cas général

A l'aide d'arguments géométriques basés sur le fait que tout plan factoriel complet est invariant par de multiples symétries, on montre que :

Proposition 08

Tout plan d'expérience factoriel complet pour m facteurs est **orthogonal** pour le modèle à effets d'interactions. Sa matrice d'information est de plus donnée par :

$${}^t XX = 2^m I_p$$

Il en résulte donc que l'estimateur des moindres carrés ainsi que sa dispersion sont donnés par :

$$\hat{\beta} = \frac{1}{2^m}\, {}^t XY \quad \text{et} \quad \mathbb{V}\left(\hat{\beta}\right) = \frac{\sigma^2}{2^m} I_p \qquad \beta = \frac{1}{2^m} X^T Y$$

Un problème se pose encore au niveau de la **taille** de ces configurations puisqu'il vient pour tout plan factoriel complet lorsque m est grand :

$$n = 2^m \gg 1 + m + m(m-1)/2 = p$$

Il en résulte que de telles configurations ne sont absolument pas économiques lorsque le nombre de facteurs est élevé (elles ne sont utilisées en général que pour $m = 2, 3, 4$ facteurs).

¿Qué pasa con la Résolution III ? Pas possible

Pour $m = 3$ facteurs considérons la fraction régulière définie par $\mathbb{1} = 123$

On a : $\mathbb{1} = 123 \iff$ $\boxed{\begin{array}{l} \mathbb{1} = 123 \\ 1 = 23 \\ 2 = 13 \\ 3 = 12 \end{array}}$ Table des confussions d'effets

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & 12 & 13 & 23 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & \vdots & 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \vdots & -1 & -1 & 1 & \vdots & 1 & -1 & -1 \\ 1 & \vdots & -1 & 1 & -1 & \vdots & -1 & 1 & -1 \\ 1 & \vdots & 1 & -1 & -1 & \vdots & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

$\Rightarrow X$ n'est pas de plein rang!

$\Rightarrow (X^T X)^{-1}$ n'existe pas

¿Y con Résolution IV?

Pour $m=4$ facteurs considérons la fraction régulière telle que: $11 = 1234 \Leftrightarrow 12 = 34$, $13 = 24$, $14 = 23$
X n'est pas de plein rang car des effets d'interactions sont confondus $\Rightarrow$ de manière similar Resolution IV n'est pas possible

04 Fractions régulières

Une nouvelle fois la problématique de la diminution du nombre des expériences (tout en conservant l'othogonalité) se pose. La technique des fractions régulières présentée au chapitre 04 est réutilisable ici sans difficulté majeure.

*Résolution I o II -> car ne me permets pas d'ajouter le sous-modèle d'ordre 1

☛ *Vérifier à titre d'exercice que l'utilisation de fractions régulières de résolution III ou IV est impossible dans le cadre de l'ajustement d'un modèle à effets d'interactions.* *

Le résultat principal est donné ci-dessous :

Proposition 09

Considérons une **fraction régulière** d'un plan factoriel complet pour m facteurs, obtenue à l'aide de q générateurs. Alors :

1) cette fraction régulière a un total de $n = 2^{m-q}$ expériences,

2) si cette fraction régulière est de **résolution V** (ou plus) elle constitue un plan d'expérience **orthogonal** pour le modèle à effets d'interactions avec :

$$^tXX = 2^{m-q} I_p$$

$\beta = \frac{1}{2^{m-q}} X^T Y$

Il en résulte donc que l'estimateur des moindres carrés ainsi que sa dispersion sont donnés par :

$$\hat{\beta} = \frac{1}{2^{m-q}}\,{}^tXY \quad \text{et} \quad \mathbb{V}\left(\hat{\beta}\right) = \frac{\sigma^2}{2^{m-q}} I_p$$

$\mathrm{Var} = \frac{\sigma^2}{2^{m-4}} I_p$

05 Généralisations

Le modèle présenté en début de chapitre est polynomial (incomplet) de degré deux. Dans certaines applications ce type de modèle sera cependant jugé trop pauvre, ce sera par exemple le cas si des interactions entre trois facteurs peuvent survenir. Voici alors deux types de généralisations classiques :

1) Modèle à effets d'interactions d'ordre trois

Le modèle statistique étudié ici s'écrit ici $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec la loi de réponse donnée au sein du domaine expérimental $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^m$ par :

$$\forall\, x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i + \sum_{i<j}\sum \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}\sum\sum \beta_{ijk} x_i x_j x_k$$

Le nombre de paramètres inconnus de ce modèle est égal à :

$p = 1 + m + \frac{m(m-1)}{2} + \frac{m(m-1)(m-2)(m-3)!}{\cancel{(m-3)!}\, 6}$

$$p = 1 + m + C_m^2 + C_m^3 = \frac{m^3 + 5m + 6}{6}. = 1 + m + \frac{m(m-1)}{2} + \frac{m!}{(m-3)!\,3!}$$

On démontre alors que :

i) tout plan factoriel complet est orthogonal pour le modèle à efftes d'interactions d'ordre trois,

ii) toute fraction régulière de résolution VII (ou plus) est orthogonale pour le modèle à efftes d'interactions d'ordre trois (résultat théoriquement juste mais inutilisable en pratique car un tel modèle ne va jamais être mis en oeuvre pour 7 facteurs ou plus).

2) Modèle contenant tous les effets d'interactions

Le modèle statistique étudié ici s'écrit ici $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec la loi de réponse donnée au sein du domaine expérimental $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^m$ par :

$$\forall\, x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \beta_0 + \sum_{i_1=1}^{m} \beta_{i_1} x_{i_1} + \sum_{i_1<i_2}\sum \beta_{i_1 i_2} x_{i_1} x_{i_2} + \ldots + \sum_{i_1<i_2<\ldots<i_m}\sum \ldots \sum \beta_{i_1 i_2 \ldots i_m} x_{i_1} x_{i_2} \ldots x_{i_m}$$

$$+ \ldots + \beta_{i_1 i_2 \ldots i_m} x_{i_1} x_{i_2} \ldots x_{i_m}$$

Le nombre de paramètres inconnus de ce modèle est égal à :

$$p = 2^m.$$

☛ *Vérifier ce résultat à titre d'exercice.*

On démontre alors que tout plan factoriel complet est orthogonal pour le modèle contenant tous les effets d'interactions. Le plan factoriel complet est de plus une configuration **saturée** dans ce cas de figure (il est donc inutile de rechercher une quelconque fraction régulière). En pratique ce type de plan d'expérience est mis en oeuvre pour un petit nombre de facteurs ($m = 2, 3, 4, 5$) dans des situations où des effets d'interactions peuvent exister entre toutes les combinaisons possibles de facteurs.

06 Exercices d'applications

Exercice 1

[Isovariance]

Les plans factoriels (complets ou non) sont-ils isovariants par rotations dans le cas de l'ajustement d'un modèle à effets d'interactions ? (on pourra raisonner dans le cas de $m = 2$ facteurs puis généraliser).

Exercice 2

[Modèle incomplet]

Considérons un phénomène aléatoire dépendant de $m = 4$ facteurs et supposons que les spécialistes du phénomène étudié affirment (à leurs risques et périls) que la seule interaction possible est entre les facteurs 1 et 2. Le modèle statistique étudié ici s'écrit donc $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec la loi de réponse donnée par :

$$\forall\, x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_{12} x_1 x_2.$$

Le budget ne permet pas de réaliser plus de $n = 10$ expériences. Quelle solution pouvez-vous proposer ?

Exercices

Ex 1

Considérons $m = 2$ facteurs et le plan factoriel complet $\quad g(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1 x_2 \end{pmatrix}$

Trouver la forme de $\mathrm{Var}[\hat{Y}(x)]$

On a $\mathrm{Var}\,\hat{y}(x) = \sigma^2\, {}^t g(x) (X^T X)^{-1} g(x)$ avec ici ${}^t g(x) = {}^t g(x_1, x_2) = (1, x_1, x_2, x_1 x_2)$

interaction

$(X^T X)^{-1} = 2^{m-?} I$

ici $X = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ \quad\;\; 1 \quad\; 2 \quad\; 12 \end{array}$ donc ${}^t X X = 4 I_4 \Rightarrow (X^T X)^{-1} = \frac{1}{4} I_4$

$\Rightarrow \mathrm{Var}\,\hat{y}(x) = \frac{\sigma^2}{4} g^T(x) g(x) =$

$\frac{\sigma^2}{4} \left[1 + \|X\|^2 + x_1^2 x_2^2 \right]$

$$= \frac{\sigma^2}{4}\left[1 + x_1^2 + x_2^2 + (x_1 x_2)^2\right] \quad = \quad 4$$

problème

Ex 2:

$m = 4$, $p = 6 = m + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{effet moyenne} \\ \beta_0}}{1} + \overset{\beta_{12}}{1}$ ← effet d'interactions

por el efecto de interacción

p4 con 3

hay confusion $\mathbb{1} = 124 \Leftrightarrow 12 = 4$ confusion d'effets

Fraction régulière de resolution IV

On a forcément $\mathbb{1} = 1234$

modèle d'ordre un

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & 3 & 4 & 12 \end{array}$$

$$\Rightarrow \underset{6\times 8}{X^T}\underset{8\times 6}{X} = \underset{6\times 6}{\begin{pmatrix} 8 & & & & & 0 \\ & 8 & & 0 & & 0 \\ & & 8 & & & 0 \\ & 0 & & 8 & & 0 \\ & & & & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}} = 8 I_6$$

Algébriquement

$\mathbb{1} = 1234 \Leftrightarrow 12 = 34$

con 34 colome absente de X

$\Rightarrow$ puede usar

por eso no necesitamos ir hasta la fracción regular V.

Fraction régulière de resolution III ?

On peut utiliser les fractions telles que:

$\mathbb{1} = 234$) ok.

$\mathbb{1} = 134$

$\mathbb{1} = 124 \Rightarrow 4 = 12$) confussion

$\mathbb{1} = 123 \Leftrightarrow 3 = 12$) d'effets

pues $\mathbb{1} = 124$ tendría que $12 = 4$

mismo signo para poder tener 1 como producto

pues 12 si está presente, gracias al efecto de interacción

pente : pendiente

07 Plans d'expérience pour surfaces de réponse

01 Généralités

Les modèles étudiés dans les chapitres précédents, d'ordre un ou bien avec effets d'interactions, ne permettent pas toujours de rendre compte correctement du phénomène considéré. Il existe en effet des situations où de tels modèles vont s'avérer trop pauvres, principalement parce qu'ils ne comportent pas de termes quadratiques aptes à traduire une "courbure" dans la réponse étudiée. Afin de pallier ce type de problème il est possible d'ajuster cette fois un modèle polynomial complet de degré deux (*i.e.* contenant un effet moyen général, des effets linéaires, des effets d'interactions mais aussi des effets quadratiques). On dit alors que l'on ajuste une **surface de réponse**.

02 Modèle utilisé

Considérons un phénoméne aléatoire dépendant de m facteurs quantitatifs mis en oeuvre au sein du domaine expérimental $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^m$. Le modèle statistique étudié ici s'écrit donc $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec la loi de réponse donnée par :

$$\forall\, x \in \mathcal{E} \;,\; f(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i + \boxed{\sum_{i=1}^{m} \beta_{ii} x_i^2} + \sum_{i<j}\sum \beta_{ij} x_i x_j$$

On dit alors que β_{ii} $(i, j = 1, ..., m, i < j)$ est l'**effet quadratique** du facteur i. Le nombre de paramètres inconnus du modèle considéré est égal à :

$$p = 1 + m + m + C_m^2 = \frac{(m+1)(m+2)}{2}.$$

Remarquons que matriciellement ce modèle linéaire peut être écrit sous la forme classique $Y = X\beta + \varepsilon$ avec donc ici :

$$X = \left[\; \mathbb{I}_n \mid D \mid D_Q \mid D_I \;\right]$$

La matrice $D_Q \in \mathcal{M}(\mathrm{n}, \mathrm{m})$ est appelée **matrice des effets quadratiques** du plan d'expérience.

03 Plans factoriels

Les plans factoriels (complets ou non) présentés précédemment sont-ils encore utilisables avec un modèle d'ordre deux ? Considérons (sans perte de généralité) le cas où $m = 2$ facteurs interviennent. Le modèle à ajuster est alors $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec :

ques

p=6

$$\forall\, x \in \mathcal{E} \;,\; f(x) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2.$$

Si un plan factoriel complet est utilisé la matrice du modèle est alors donnée par :

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & \boxed{\mathbf{1}} & \boxed{\mathbf{2}} & \mathbf{1^2} & \mathbf{2^2} & \mathbf{12} \end{array} \\ \left[\begin{array}{c|cc|cc|c} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}\right] \end{array}$$

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & & & 12 \end{array} \\ \left(\begin{array}{c|cc|cc|c} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}\right) \\ \begin{array}{cccccc} B_0 & B_1 & B_2 & B_{11} & B_{22} & B_{12} \end{array} \end{array}$$

(B_{22} 3 columns identi

Cuando los capítulos anteriores encontrabamos X^TX de manera fácil pues habría tantos (-1) como (+1) y se cancelaban en la diagonal. ⇒ aquí ya no se puede aplicar

En dehors du fait que cette configuration ne comporte pas assez d'expériences ($n = 4$ expériences alors que $p = 6$ paramètres sont à estimer) on constate que X n'est pas de plein rang puisque trois de ses colonnes sont identiques (et égales à l'indicatrice). Ce problème est général puisque pour m facteurs la matrice X va contenir $(m + 1)$ colonnes égales à l'indicatrice (ceci provient du fait que chacune des colonnes de D est composée des valaurs ± 1 donc son carré d'Hadamard est égal à l'élément neutre). Il en découle donc que les plans factoriels (complets ou fractionnaires) ne sont **pas utilisables** afin d'ajuster un modèle pour surfaces de réponse. en lugar de deshecharlos buscaremos enriquecerlos

04 Plans composites centrés

1) Définition

Les plans factoriels (complets ou fractionnaires) permettent d'ajuster de manière efficace les modèle présentés dans les chapitres précédents. Il serait donc peu efficace de ne pas les réutiliser, d'autant plus que l'on est parfois amené à utiliser un modèle pour surfaces de réponse car les modèle d'ordre inférieur ont été utilisés sans succès au préalable. L'idée la plus simple est alors de « compléter » les plans factoriels afin de les rendre compatibles avec le modèle pour surfaces de réponse. Ceci conduit alors aux structures classiques que sont les plans composites centrés :

Définition 10

3 morceaux

Un plan d'expérience **composite centré** pour m facteurs est constitué par :

1) la partie **factorielle** contenant tous les sommets du cube $[-1, 1]^m$ ou une fraction régulière de résolution V (ou plus) de ces sommets, Esquinas del intervalo $[-1,1]^m$ o una fracción regular $\geq V$

2) la partie **axiale** contenant tous les points situés sur les axes du repère à une même distance α du centre du domaine expérimental, puntos en los ejes $(-1,0)$ $(0,1)$, ...

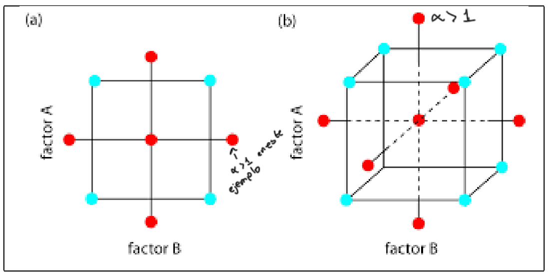
3) la partie **centrale** contenant $n_0 \in \mathbb{N}$ éventuelles réplications du centre du domaine expérimental.

Il en découle que si la partie factorielle de ce plan d'expérience est construite à l'aide de q générateurs il est donc constitué de n expériences avec :

$m=2$, $2^2 + 2(2) + 2 = 4+4+2 = 10$

$$n = 2^{m-q} + 2m + n_0.$$

$$\Rightarrow X^TX = \begin{pmatrix} 10 & & & & \\ & 4+\alpha^2 & & & \\ & & 4+\alpha^2 & & \\ & & & 4+\alpha^2 & \\ & & & & 4 \end{pmatrix}$$



$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & ① & ② & 1^2 & 2^2 & 12 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{array}{cccccc} \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_{11} & \beta_{22} & \beta_{12} \end{array} \end{array}$$

partie factorielle

partie axiale

partie centrale

* α puede tomar el valor de 1

☛ *Vérifier à titre d'exercice que pour $m = 2$ facteurs et (par exemple) $n_0 = 2$ expériences centrales la matrice d'information du plan d'expérience composite centré est donnée par :*

$${}^tXX = {}^tX_{6\times 10}\, X_{10\times 6} = M_{6\times 6}$$

$$\underset{6\times 10}{{}^tX}\underset{10\times 6}{X} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 4+2\alpha^2 & 0 \\ 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 4+2\alpha^4 & 4 & 0 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 4 & 4+2\alpha^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}_{6\times 6} = [\ \ ]_{4\times 4}$$

$2^{m-q} + 2m + 2n_0 = 2^{2-0} + 2(2) + 2 = 4+4+2$

$= 10 \quad 0 \quad 0 \quad 4+2\alpha^2 \quad 4+2\alpha^2 \quad 0$

$$X^T X = \begin{pmatrix} 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 4 & 0 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 4 & 4+2\alpha^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

2) Matrice d'information canonique

Dans le cas général où m facteurs sont considérés on montre que la matrice d'information de tout plan d'expérience composite centré a la forme suivante :

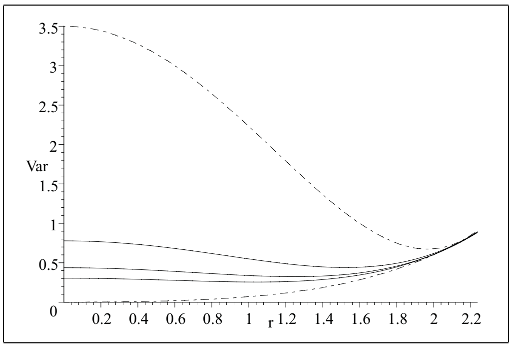
$$ {}^tXX = \begin{bmatrix} n & 0 & c_2\,{}^t\mathbb{I}_m & 0 \\ 0 & c_2 I_m & 0 & 0 \\ c_2\mathbb{I}_m & 0 & (c_4 - c_{22})\, I_m + c_{22}J_m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{22}I_{m(m-1)/2} \end{bmatrix}$$

avec c_2, c_4 et c_{22} constantes liées aux moments des points du plan (donc fonctions des coordonnées) et J_m matrice carrée d'ordre m uniquement constituée par la valeur 1. La matrice du bloc associé aux effets quadratiques est combinaison linéaire de I_m et J_m, il s'agit d'une matrice dite **complètement symétrique**.

Ce résultat met en évidence le fait qu'il est maintenant impossible d'obtenir l'orthogonalité telle qu'elle a été présentée dans les chapitres précédents (c'est à dire avec une matrice d'information diagonale). Tout plan d'expérience pour modèle d'ordre deux ayant une matrice d'information de la forme présentée ici est qualifié de plan d'expérience à matrice d'information **canonique**. On obtient alors la matrice d'information contenant un maximum de valeurs nulles. Une telle matrice d'information est cependant bien orthogonale modulo une réécriture du modèle polynomial sur une base adéquate de polynômes orthogonaux ! sim em bloco

3) Choix des divers paramètres

En pratique le choix des deux paramètres pour ce type de plans que sont α et n_0 constitue souvent un problème. Concernant le nombre d'expériences centrales un raisonnement identique à celui de l'exercice 2 du chapitre 3 conduit à une conclusion similaire : si cela est financièrement possible il est conseillée d'en réaliser un petit nombre ($n_0 = 2, 3, 4$). La figure ci-dessous représente la variance de la réponse moyenne prédite pour un même plan composite centré isovariant par rotations (de haut en bas $n_0 = 0, 1, 2, 3, 4, +\infty$) :



obedecer

Le choix de la distance α entre les points axiaux et le centre du domaine peut lui obéir à d'éventuelles propriétés souhaitées pour le plan d'expérience. Voici quelques exemples classiques :

i) plans composites centrés à **faces centrées**.

Il s'agit ici de prendre la valeur la plus simple possible $\alpha = 1$. Un tel choix n'a aucune propriété statistique particulière mais permet par contre de limiter le nombre de niveaux des facteurs à 3 (ce qui peut être utile lorsque les changements de niveaux s'avèrent complexes).

ii) plans composites centrés **isovariants par rotation**.

On montre que la variance de prédiction ne va dépendre que de la distance entre le point x considéré et le centre du domaine expérimental si et seulement si :

$$\alpha = (2^{m-q})^{1/4}$$ preferée par logiciels

iii) plans composites centrés **équiradiaux**.

Certaines propriétés peuvent être obtenues lorsque tous les points du plan d'expérience sont à une même distance du centre du domaine expérimental (à l'exclusion, bien entendu, des éventuels points centraux). Il est alors évident que :

$$\alpha = \sqrt{m}$$

iv) plans composites centrés **presque-orthogonaux**.

Un objectif peut être d'obtenir un maximum de valeurs nulles dans la matrice de dispersion $({}^tXX)^{-1}$. On montre que ceci est atteint si et seulement si :

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sqrt{2^{m-q}}\left(\sqrt{n} - \sqrt{2^{m-q}}\right)}{2}}.$$

05 Autres configurations classiques

Les plans composites centrés sont d'usage très courant mais il existe d'autres configurations ayant aussi une structure de plan d'expérience à matrice des moments canonique. Voici deux exemples classiques.

1) Plans de Box et Behnken

L'objectif visé est d'obtenir des configurations à matrice d'information canonique n'utilisant que les niveaux des facteurs $-1, 0, +1$. Pour certains nombres de facteurs c'est réalisable, pour d'autres non. Voici par exemple la matrice du plan de Box et Behnken pour $m = 3$ facteurs : 4 facteurs pas possible

$$\underset{12\times 3}{D} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pm 1 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & \pm 1 \end{bmatrix}.$$

2) Plans hybrides

L'idée est cette fois de construire des plans d'expérience pour m facteurs en « complétant » une structure classique pour $(m-1)$ facteurs (donc en rajoutant une colonne à la matrice D). Voici par exemple la matrice du plan hybride de type $311A$:

facteurs # expériences

$$\underset{11\times 3}{D} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1/\sqrt{2} \\ 1 & -1 & 1/\sqrt{2} \\ -1 & 1 & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 1 & 1/\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

06 Exercices d'applications

Exercice 1

[Plans composites centrés optimaux]

On considère ici un plan d'expérience composite centré pour $m = 2$ facteurs et la problématique est de fixer la distance α des points axiaux au centre du domaine de manière à obtenir une configuration optimale selon le critère usuel de D-efficacité. On considèrera ici que le domaine expérimental est sphérique, de rayon égal à $\sqrt{2}$. Rappel: On veut minimisen $\Phi_0(\alpha) = [\det(X^TX)^{-1}]^{1/p} = (\det(X^TX))^{-1/6}$ $\Leftrightarrow$ maximisen $(\det(X^TX))^{1/6}$ pour $\alpha \in [0, \sqrt{2}]$ cuando $\alpha \xrightarrow{tend} 0 \Rightarrow X^T \xrightarrow[tend]{} \infty$ (ici $p = 6$)

$\boxed{1}$ Supposons ici que $n_0 = 2$ expériences centrales ont été rajoutées. Quelle valeur de α permet d'obtenir un plan d'expérience D-optimal ? [LogCalc]

$\boxed{2}$ Supposons ici qu'il n'y ait pas d'expériences centrales. Quelle valeur de α permet d'obtenir un plan d'expérience D-optimal ? [LogCalc]
Expliquer de manière théorique pourquoi les résultats des questions 1 et 2 sont si différents.

Exercice 2

[Mise en oeuvre d'un plan composite centré]

On considère ici un phénomène aléatoire dépendant de $m = 2$ facteurs et on cherche à minimiser la réponse. Une analyse est menée (realizado) via le plan composite centré donné ci-dessous (on considèrera encore que le domaine expérimental est sphérique, de rayon égal à $\sqrt{2}$).

Fact. 1	*Fact. 2*	*Réponse*
-1	-1	12.4
$+1$	-1	10.2
-1	$+1$	8.6
$+1$	$+1$	6.8
$\sqrt{2}$	0	5.0
$-\sqrt{2}$	0	7.5
0	$\sqrt{2}$	10.2
0	$-\sqrt{2}$	14.2
0	0	4.3
0	0	4.5

$\boxed{1}$ Ce plan d'expérience est-il isovariant par rotations ? Ecrire explicitement la forme de la variance de la réponse moyenne prédite. [LogCalc]

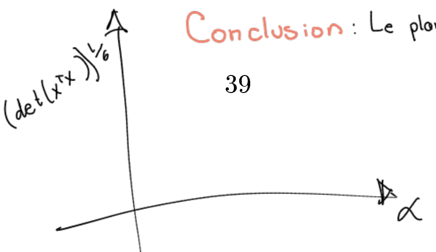
$\boxed{2}$ Rechercher les niveaux des deux facteurs minimisant la réponse. Donner la valeur de la réponse moyenne prédite optimale ainsi que l'écart-type associé. [LogStat]

Exercises I:

$m = 2$ facteurs $\Rightarrow Y(x) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{12} X_{12} \Rightarrow p = 6$ variables

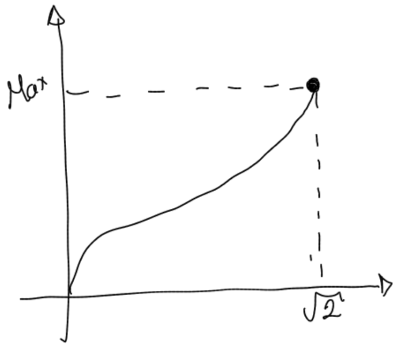
Rappel: On veut minimisen $\Phi_0(\alpha) = [\det(X^TX)^{-1}]^{1/p} = [\det(X^TX)]^{-1/6} \Leftrightarrow$ maximiser $[\det(X^TX)]^{1/6}$ pour $\alpha \in [0, \sqrt{2}]$ cuando $\alpha \xrightarrow{tend} 0$
$\Rightarrow X^T \xrightarrow[tend]{} \infty$

1) Boucle pour α $0[0, \sqrt{2}]$
Para cada valor de α
generamos $4 + 2\alpha^2$

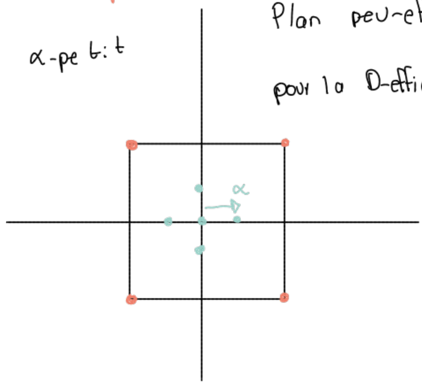


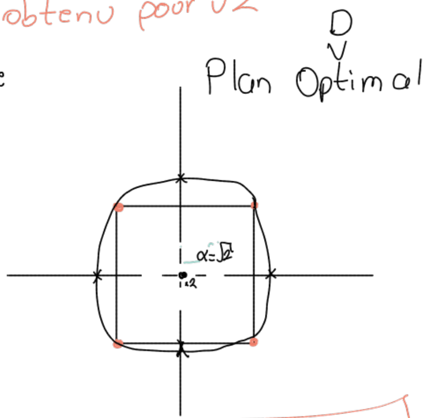
Conclusion: Le plan D-optimal est obtenu pour $\alpha = \sqrt{2}$ (les points axiaux sont éloignés les plus possibles)

$$\begin{array}{ccccc} \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 & \beta_{11} & \beta_{12} \end{array}$$
$$\begin{pmatrix} 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 \end{pmatrix}$$



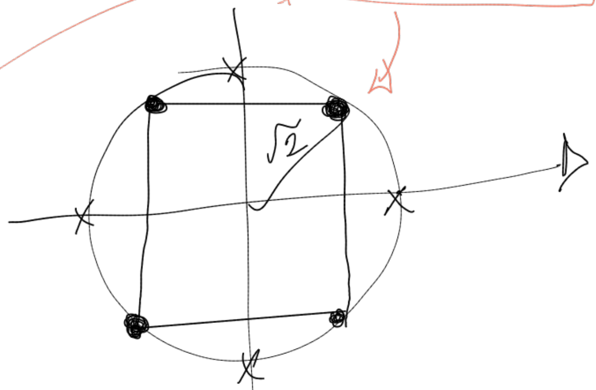
$\Rightarrow$ Le plan D-optimal est obtenu pour $\sqrt{2}$





2) Transformen dans X^TX le 10 en 8

$\boxed{X_1^2+X_2^2=2}$



$$1^2+2^2=2\,\mathbb{1}_n\ (pb) \qquad X=\begin{array}{cccc} & ① ② & 1^2\ 2^2 & 12 \\ \Big(& \mathbb{1}_n & & \Big) \end{array}$$

$\alpha=1$ ver cómo quedaría la matriz creada, es la del ejemplo, si tomamos $\alpha=1$

Aquí no funciona pues hay columnas no lin independientes

$\Rightarrow \det(X^TX)$ será 0

para quitar está dependencia debemos agregar al menos una experiencia central.

---

la variance de prediction ne va dépendre que de la distance entre x et centre du domaine experimental $\Leftrightarrow \alpha=(2^{m-q})^{1/4}$ (Isovariance)

1) On a ici $\alpha=\sqrt{2}=(2^{m-q})^{1/4}$ avec $m=2$ et $q=0$ donc d'après les cours ce plan est bien isovariant por rotations

Verifions-le

Ici:

$$X^TX=\begin{pmatrix} 10&0&0&8&8&0\\ 0&8&0&0&0&0\\ 0&0&8&0&0&0\\ 8&0&0&12&4&0\\ 8&0&0&4&12&0\\ 0&0&0&0&0&4 \end{pmatrix} \Rightarrow \underset{6\times 6}{(X^TX)^{-1}}=\begin{pmatrix} 1/2&0&0&-1/4&-1/4&0\\ 0&1/8&0&0&0&0\\ 0&0&1/8&0&0&0\\ -1/4&0&0&7/32&3/32&0\\ -1/4&0&0&3/32&7/32&0\\ 0&0&0&0&0&1/4 \end{pmatrix}$$

(above the 12 entries: $=4+2\alpha^2$)

Podemos observar que los 0 permanecen en la misma posición, esto sucede pues X^TX es una matriz canónica y

La inversa de una matriz canónica es una matriz canónica

On sait que

$$X^TX=\begin{pmatrix} 10&0&0&4+2\alpha^2&4+2\alpha^2&0\\ 0&4+2\alpha^2&0&0&0&0\\ 0&0&4+2\alpha^2&0&0&0\\ 4+2\alpha^2&0&0&4+2\alpha^2&4&0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1\\ x_1\\ x_2\\ x_1^2 \end{pmatrix}$$

Isovariante? Calculemos Var

$$\begin{matrix} 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 4 & 4+2\alpha^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \cdot g(x) = \underset{6\times 1}{\begin{pmatrix} x_2^2 \\ x_1 x_2 \end{pmatrix}}$$

Calcul de

$$\operatorname{Var}\hat{Y}(x) = \sigma^2 g^T(x)(X^TX)^{-1}g(x) \text{ avec } \underset{1\times 6}{g^T(x)} = \bar{g}(x_1,x_2) = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2)$$

$$\underset{1\times 6}{g^T(x)(X^TX)^{-1}} = \left(\frac{1}{2} - \frac{x_1^2}{4} - \frac{x_2^2}{4} \quad \frac{x_1}{8} \quad \frac{x_2}{8} \quad -\frac{1}{4}+\frac{7x_1^2}{32}+\frac{3x_2^2}{32} \quad -\frac{1}{4}+\frac{3x_1^2}{32}+\frac{7x_2^2}{32} \quad \frac{x_1x_2}{4}\right)$$

On a

$$\operatorname{Var}\hat{Y}(x) = \sigma^2\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{8}x_1^2 + \frac{1}{8}x_2^2 + \frac{7}{32}x_1^4 + \frac{7}{32}x_2^4 + \frac{1}{4}x_1^2x_2^2 - \frac{1}{2}x_1^2 - \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{6}{32}x_1^2x_2^2\right)$$

$$= \sigma^2\left(\frac{1}{2} - \frac{3}{8}(x_1^2+x_2^2) + \frac{1}{32}(7x_1^4 + 14x_1^2x_2^2 + 7x_2^4)\right]$$

$$= \sigma^2\left(\frac{1}{2} - \frac{3}{8}(x_1^2+x_2^2) + \frac{7}{32}(x_1^2+x_2^2)^2\right) = \sigma^2\left(\frac{1}{2} - \frac{3}{8}\|X\|^2 + \frac{7}{32}\|X\|^4\right)$$

On a bien l'isovariance par rotations.

2) Meilleur modèle au sens des moindres carrés

$$\hat{Y}(x_1,x_2) = 4.40 - 0.94x_1 - 1.61x_2 + 0.99x_1^2 + 3.97x_2^2$$

(a priori pas d'effet d'intersection détecté et bon R^2)

Par dérivation des dérivées partielles on obtient le point critique $(x_1^*, x_2^*) = (0.48, 0.20)$

On vérifie qu'il s'agit bien d'un minimum, Valeur théorique du minimum $\hat{Y}(0.48, 0.20) \approx \boxed{4.01}$

L'expérience optimale est à la distance $R \simeq 0.52$ du centre.

D'après la question 1

$$\operatorname{Var}\hat{y}(x) = \sigma^2\left(\frac{1}{2} - \frac{3}{8}R^2 + \frac{7}{32}R^4 \approx 0.415\sigma^2\right)$$

d'après logiciel $\boxed{MSE = \approx 0.12345}$

Conclusion: $\hat{Y}(x^*) \approx 4.01\ (0.22)$

Puede pasar que no haya efectos de interacción, cuadráticos o lineales
=> ¿Cómo proceder? Primero verificamos que la información dada es la correcta

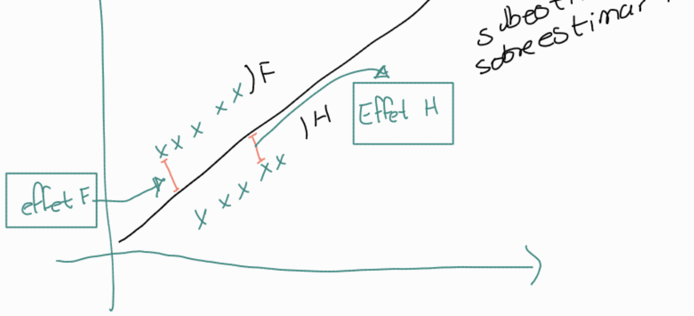
① Avons-nous vraiment tous les facteurs?
Facteurs influents oubliés?

② Entre más grande sea el dominio experimental más espacio habrá para tener un error. Le domaine experimental est-il bien choisi? ("trop grand")

③ Adjustement d'un polynôme de degrés 3 ou plus.... mauvaise idée
difícil de tener observaciones necesarias $$$
De qué manera este modelo explica la realidad pqe $3x^2y + 2xy^2$
cuál es la diferencia en el campo de estudio del efecto de interacción?

④ Ploblema de heterogeneité heterogeneidad pas homogene

moindres carrés
timar F
H


)F
)H
Effet H
effet F
sobreestimar

08 Plans d'expérience en blocs

14 NOV
CC.

01 Généralités

Le chapitre précédent a présenté la construction de plans d'expérience adaptés à l'ajustement d'une surface de réponse. Le modèle utilisé alors est relativement riche puisqu'il tient compte d'effets linéaires et quadratiques des facteurs ainsi que d'éventuels effets d'interactions entre couples de facteurs.

Ce modèle postule cependant que toutes les observations effectuées sont homogènes (*i.e.* le même modèle est utilisé pour toutes les expériences) et ceci peut s'avérer forte gênant en pratique. En effet, il existe de nombreuses situations pour lesquelles l'hypothèse **d'hétérogénéité** des observations s'impose naturellement : production industrielle réalisée à partir de divers arrivages de matière première, réponses à un médicament différentes selon le sexe du patient, expériences agronomiques sur plusieurs parcelles situées dans des endroits différents, *etc...* Pour s'adapter à ce type de situation il est naturel de regrouper les observations en sous-ensembles homogènes, appelés **blocs**, et de tenir compte d'un éventuel effet de bloc dans le modèle utilisé.

02 Modèle utilisé

Considérons un phénoméne aléatoire dépendant de m facteurs quantitatifs mis en oeuvre au sein du domaine expérimental $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^m$ et supposons que b blocs soient requis. Le modèle statistique étudié ici s'écrit donc $Y(x) = f_l(x) + \varepsilon(x)$ pour les réponses associées au bloc l $(l = 1, ..., b)$ avec la loi de réponse donnée par :

$$\forall\, x \in \mathcal{E} \ , \ f_l(x) = \gamma_l + \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{m} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i<j}\sum \beta_{ij} x_i x_j$$

On dit alors que γ_l $(l = 1, ..., b)$ est l'**effet du bloc** l. Le nombre de paramètres constituant ce modèle est égal à :

$$p^* = b + \underbrace{\frac{(m+1)(m+2)}{2}}_{\text{effets quadratics}}.$$

Remarquons que matriciellement ce modèle linéaire peut être écrit sous la forme :

$$Y = B\gamma + X\beta + \varepsilon$$

avec donc $B \in \mathcal{M}(n, b)$ matrice des **indicatrices des blocs** (*i.e.* chacune de ses colonnes est associée à un bloc et repère l'absence ou la présence d'expérience au sein du bloc par, respectivement, les valeurs 0 ou 1) et X matrice du modèle pour surface de réponse « classique » (sans effets de blocs, voir le chapitre précédent). Remarquons que ce modèle est bien un modèle linéaire au sens classique puisqu'il peut aussi être réécrit en :

$$Y = X_b \beta_b + \varepsilon$$

avec $X_b = \left[\ B \mid X\ \right]$ matrice du modèle et ${}^t\beta_b = \left(\ {}^t\gamma \mid {}^t\beta\ \right)$ vecteur des paramètres du modèle.

Désignons dans la suite par $k_1, ..., k_b$ les tailles des différents blocs, c'est-à-dire le nombre d'expériences de chacun d'eux (on aura toujours, bien entendu, $\sum_l k_l = n$).

03 Analyse du modèle à effets de blocs

Analyser statistiquement un tel modèle est plus complexe que pour ceux vus précédemment car la matrice du modèle $X_b = \left[\ B \mid X\ \right]$ n'est jamais de plein rang (ceci est du au fait que la somme des colonnes de la matrice des indicatrices B est toujours égale à $\mathbb{I}$ donc à la première colonne de X). Par rapport à la théorie classique de la modélisation linéaire ceci n'est pas étonnant puisque l'effet de bloc introduit ici peut être vu comme une nouvelle variable **qualitative** entrainant donc toujours ce type de problème.

Afin de lever cette surparamétrisation du modèle il convient de poser une **contrainte d'identification** rendant la matrice du modèle de plein rang. Une telle stratégie n'est pas unique, nous allons considérer ici la contrainte d'identification très classique sur les effets de blocs données par :

même taille K

$$(C)\ \text{-}\ \sum_{l=1}^{b} k_l \gamma_l = 0. \qquad K \sum_{l=1}^{b} \gamma_l = 0 \iff \sum_{l=1}^{b} \gamma_l = 0$$

(remarquons que si tous les blocs sont de même taille alors cette contrainte d'identification se résume à dire que la somme des effets des blocs est nulle). Remarquons que, sous cette contrainte d'identification, le nombre de paramètres inconnus du modèle est alors :

puedo tener 1 de los bloques en términos del resto

$$p = b - 1 + \frac{(m+1)(m+2)}{2}.$$

Sous contrainte d'identification la matrice des indicatrices des effets des blocs devient la matrice « centrée » $B^* \in \mathcal{M}(n, b-1)$ et la matrice du modèle est alors $X_b^* = \left[\ B^* \mid X\ \right]$ (matrice qui est cette fois potentiellement de plein rang). La matrice d'information devient alors :

$${}^tX_b^* X_b^* = \begin{bmatrix} {}^tB^*B^* & {}^tB^*X \\ {}^tXB^* & {}^tXX \end{bmatrix}$$

avec donc ${}^tXX$ matrice d'information du modèle sans effets de blocs. Les équations normales sous contrainte d'identification sont alors données par (en notant ${}^t\beta_b^* = \left(\ {}^t\gamma^* \mid {}^t\beta\ \right)$ où γ^* est le vecteur des effets de blocs inconnus) :

$$({}^tX_b^*X_b^*)\,\widehat{\beta_b^*} = {}^tX_b^*Y \iff \begin{cases} ({}^tB^*B^*)\,\hat{\gamma}^* & +\,({}^tB^*X)\,\hat{\beta} & = {}^tB^*Y \\ ({}^tXB^*)\,\hat{\gamma}^* & +\,({}^tXX)\,\hat{\beta} & = {}^tXY \end{cases}$$

Résoudre partiellement ce système d'équations afin de trouver les expressions générales pour $\hat{\gamma}^*$ et $\hat{\beta}$ correspond à la recherche des équations normales dites **réduites.**

04 Plans d'expérience en blocs

Certains logiciels ou ouvrages proposent des techniques peu efficaces pour la constructions de plans d'expérience en blocs. En effet il est parfois suggéré de répliquer b fois un plan d'expérience lorsque b blocs sont requis. Cette technique est mathématiquement efficace et simple à mettre en oeuvre mais va totalement à l'encontre de l'aspect **économe** des plans d'expérience ! Afin de ne pas occulter cet objectif il est donc fortement recommandé de construire des blocs en **partitionnant** un plan d'expérience classique (au lieu de le répliquer).

Lors de la mise en oeuvre de plans d'expérience en blocs une nouvelle propriété peut être recherchée, il s'agit du blocage orthogonal défini ci-dessous :

Définition 11

Un plan d'expérience en blocs est dit **bloqué orthogonalement** si et seulement si ses estimateurs des moindres carrés de l'effet moyen général, des effets linéaires, quadratiques et d'interactions sont identiques à ceux obtenus avec le même plan d'expérience sans bloc.

L'intérêt d'une telle propriété réside dans le fait qu'elle ne va pas nécessiter de réaliser une nouvelle analyse si au final des hétérogénéités sont détectées et une structure en blocs est requise (seuls les nouveaux effets de blocs seront à estimer). Remarquons que par rapport à la structure de la matrice d'information sous contraintes (vue à la partie 03) le blocage orthogonal sera obtenu si et seulement si :

$$ {}^tB^*X = 0 $$

Les équations normales réduites sont alors simplement données par :

$$ ({}^tB^*B^*)\,\hat{\gamma}^* = {}^tB^*Y \text{ et } ({}^tXX)\,\hat{\beta} = {}^tXY $$

Remarquons que cette propriété est très intéressante dans le sens où elle permet de « séparer » l'analyse en deux problèmes distincts et indépendants : la recherche de l'effet des blocs d'une part (variable qualitative) et la recherche des effets du modèle classique d'ordre deux d'autre part (variables quantitatives). Sans le blocage orthogonal ces facteurs de types différents se retrouvent « mélangés » ce qui induit pas mal de complications et de problèmes d'interpétation.

On montre aussi que, pour un plan d'expérience donné, s'il est possible de le bloquer orthogonalement alors cette stratégie (rendant sa matrice d'information diagonale par blocs) est **optimale** du point de vue de la D-efficacité.

Diverses stratégies sont utilisables afin de constuire des blocs associés à des effets de blocs faciles à manier et potentiellement bloqués orthogonalement. Nous ne présentons pas ici de théorie générale mais seulement quelques exemples dans le cadre du plan composite centré (exemple illustrés par des exercices en fin de chapitre). Les sous-ensembles suivants d'un plan composite centré peuvent alors être utilisés comme blocs :

- la partie factorielle,
- la partie axiale,
- une fraction régulière de résolution III (ou plus) de la partie factorielle.

05 Exercices d'applications

Exercice 1

[Structures en deux blocs]

On considère ici l'évolution d'un taux hormonal découlant de deux principes actifs ingérés par des patients. Les facteurs 1 et 2 mesurent les quantités des ces deux principes actifs. La réalisation d'un maximum de $n = 10$ expériences est possible. Le sexe a une influence potentielle sur les résultats observés, une structure de plan d'expérience en blocs est donc demandée.

1 Quelle valeur de α proposez-vous pour l'utilisation des deux blocs ci-dessous ?

	Fact 1.	*Fact 2.*
Bloc 1	-1	-1
	1	-1
	-1	1
	1	1
	0	0

	Fact 1.	*Fact 2.*
Bloc 2	α	0
	$-\alpha$	0
	0	α
	0	$-\alpha$
	0	0

2 Quelle valeur de α proposez-vous pour l'utilisation des deux blocs ci-dessous ?

	Fact 1.	Fact 2.
Bloc 1	-1	-1
	1	-1
	-1	1
	1	1
	0	0
	0	0

	Fact 1.	Fact 2.
Bloc 2	α	0
	$-\alpha$	0
	0	α
	0	$-\alpha$

$\boxed{3}$ Laquelle des deux configurations précédentes est la plus efficace ? [LogCalc]

Exercice 2

[Structures en trois blocs]

On quantifie ici la résistance à la corrosion d'un alliage via sa perte de masse. Cette perte de masse semble dépendre de $m = 3$ facteurs et trois matériaux distincts doivent être testés à l'aide d'une configuration relativement économique. On propose alors de partitionner un plan composite centré en trois blocs de même taille donnés ci-dessous :

	F1	F2	F3	Y
B1	-1	-1	1	13.5
	-1	1	-1	16.2
	1	-1	-1	21.4
	1	1	1	20.0
	0	0	0	14.8
	0	0	0	15.2

	F1	F2	F3	Y
B2	-1	-1	-1	9.7
	-1	1	1	10.2
	1	-1	1	13.0
	1	1	-1	18.8
	0	0	0	9.6
	0	0	0	9.8

	F1	F2	F3	Y
B3	$\sqrt{2}$	0	0	16.9
	$-\sqrt{2}$	0	0	7.5
	0	$\sqrt{2}$	0	15.7
	0	$-\sqrt{2}$	0	12.8
	0	0	$\sqrt{2}$	9.0
	0	0	$-\sqrt{2}$	11.4

$\boxed{1}$ Justifier que ce plan d'expérience est bien bloqué orthogonalement.

$\boxed{2}$ Réaliser une analyse statistique à l'aide du modèle sans bloc pour surface de réponse. Que peut-on en déduire ? [LogStat]

$\boxed{3}$ Déterminer les valeurs des estimateurs des moindres carrés des effets des blocs ainsi que leurs dispersions. Comment peut-on juger de leur significativité ?

$\boxed{4}$ Réaliser une analyse statistique à l'aide cette fois du modèle à effets de blocs. Que peut-on en déduire ? [LogStat]

Exercices

Exercice 1

1) Matrices X et β :

$$X = \begin{array}{c} \\ \end{array}\begin{array}{cccccc} & & & 1^2 & 2^2 & 12 \end{array}$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \left.\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} \text{Bloc 1} \\ \left.\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} \text{Bloc 2} \end{array}$$

Matrice des indicatrices des effets de blocs $(b=2, \gamma_1 \text{ et } \gamma_2)$

Modèle pour l'expérience 1 :

$f_1(x) = \gamma_1 + (\beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_{12} x_1 x_2) =$

$= 1 \cdot \gamma_1 + 0 \cdot \gamma_2 + (\beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_{12} x_1 x_2)$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_5 & 0_5 \\ 0_5 & \mathbb{1}_5 \end{pmatrix}$$

On a ici $K_1 = K_2 = 5$, donc $(C): \gamma_1 + \gamma_2 = 0$

$\iff \gamma_2 = -\gamma_1 \ldots ①$

La matrice B^* centrée est donc : sous la contrainte de identificación (remplazando ..①)

$$B^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$f_2(x) = \gamma_2 + (\beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_{12} x_1 x_2) = -\gamma_1 + (\beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots)$

Buscamos el

Blocage orthogonal : que se cumple $\iff {}^tB^* X = 0$

Il vient

$$(1\ 1\ 1\ 1\ 1\ -1\ -1\ -1\ -1\ -1) \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & & 1^2 & 2^2 & 12 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array} = (0\ 0\ 0\ \underline{4-2\alpha^2}\ \underline{4-2\alpha^2}\ 0)$$

Conclusion: Ce plan d'expérience est bloqué orthogonalement si et seulement si $4 - 2\alpha^2 = 0 \Rightarrow \alpha = \sqrt{2}$ $\quad 4 = 2\alpha^2 \quad 2 = \alpha^2 \quad \sqrt{2} = \alpha$

2)

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & & 1^2 & 2^2 & 12 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

Ici on a donc $b = 2$ blocs avec $K_1 = 6$ et $K_2 = 4$

Matrice B, $\quad B = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \gamma_1 & \gamma_2 \end{array} \\ \begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 \\ 0_4 & \mathbb{1}_4 \end{pmatrix} \end{array}$

La constrainte d'identification est ici $(C): 6\gamma_1 + 4\gamma_2 = 0$

$\Rightarrow \gamma_2 = -1.5\gamma_1$, Donc

$$B^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1'5 \\ -1'5 \\ -1'5 \\ -1'5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 \\ -1.5\,\mathbb{1}_4 \end{pmatrix}$$

la orthogonalithé
Buscamos ${}^tB^*X=0$

$$\Rightarrow {}^tB^*X = (0\ 0\ 0\ \underline{4-3\alpha^2}\ \ \underline{4-3\alpha^2}\ \ 0)$$

donc ${}^tB^*X=0 \iff 4-3\alpha^2=0 \Rightarrow \alpha = \frac{2}{\sqrt{3}} \approx 1'155$

3) Laquelle des deux configurations est la plus efficace? Considérons la D-efficacité ici

Il va falloir calculer ici les déterminants de ${}^tX_B^* X_B^*$
Mais ces 2 plans étant bloqués orthogonalement, on a :

$${}^tX_B^* X_B^* = \left(\begin{array}{c|c} {}^tB^*B^* & 0 \\ \hline 0 & {}^tXX \end{array}\right) \Rightarrow \det\left({}^tX_B^* X_B^*\right) = \underbrace{\det\left({}^tB^* B^*\right)}_{\text{Facile}} \det\left({}^tXX\right)$$

Configuration 1:
$\det({}^tB^*B^*) = 10 \qquad \det({}^tXX) = 6.5556 \Rightarrow \Phi_0 \approx 0'148$

Configuration 2:
$\det({}^tB^*B^*) = 15$ et $\det({}^tXX) = 16856 \Rightarrow \Phi_0 \approx 0'169$

Conclusion: La configuration 1 est plus efficace que la configu 2
Tiene sentido pues en la cofig 1 cada bloque tiene una experiencia central, en la config 2 el 2do bloque no tiene ninguna exp. central

Exercice 2

1)

① ② ③ $\quad 1^2\ 2^2\ 3^2 \mid 12 \cdot 13\ \ 23$

$1\ \ 1\ \ 1 \qquad 1\ \ -1\ \ -1$

$$
X = \begin{array}{c} \\ \mathbb{1}_6 \\ \\ \\ \mathbb{1}_6 \\ \\ \\ \mathbb{1}_6 \\ \\ \end{array}
\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc}
-1 & -1 & 1 & & & & & & \\
-1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\
1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
-1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
-1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\
1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\
1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0
\end{array}\right)
$$

Matrice B

$$
B = \begin{array}{c} \\ \\ \\ \end{array}
\begin{array}{ccc} \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \\ \end{array}
$$

$$
B = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 & 0_6 \\ 0_6 & \mathbb{1}_6 & 0_6 \\ 0_6 & 0_6 & \mathbb{1}_6 \end{pmatrix}
$$

On a $K_1 = K_2 = K_3$

$\Rightarrow$ Constrainte d'identification

$(c) : \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 = 0$

$\Leftrightarrow \gamma_3 = -\gamma_1 - \gamma_2$

Matrice centrée B^*

$$
\begin{array}{c} \\ B^* = \end{array}
\begin{array}{c} \begin{array}{cc} \gamma_1 & \gamma_2 \end{array} \\ \begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 \\ 0_6 & \mathbb{1}_6 \\ -\mathbb{1}_6 & -\mathbb{1}_6 \end{pmatrix} \end{array}
\qquad \underbrace{B^*_{63 \times 2}}_{\text{bloques}} = B^*_{n \times \underbrace{b-1}_{\text{variables}}}
\quad \Rightarrow \ {}^tB^* = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 & -\mathbb{1}_6 \\ 0_6 & \mathbb{1}_6 & -\mathbb{1}_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\,1\,1\,1\,1\,1 & 0\,0\,0\,0\,0\,0 & -1\,-1\,-1\,-1\,-1\,- \\ 0\,0\,0\,0\,0\,0 & 1\,1\,1\,1\,1\,1 & -1\,-1\,-1\,-1\,-1\,- \end{pmatrix}
$$

On a bien ${}^tB^* . X = 0$ donc le plan est bien bloqué orthogonalement

2) Utiliser R Sans tenir en compte des effets des blocs (utilisation seulement de la matrice X), on trouve $R^2 \approx 0'66$

seulement
(modèle mal ajusté)

3) Le plan étant bloqué orthogonalement on a ici :

$$\underset{2\times3}{({}^tB^*B^*)}\hat{\gamma}^* = {}^tB^*Y \quad \text{où} \quad \gamma^* = \begin{pmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\end{pmatrix}$$

et $\underset{3\times2}{B^*} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 \\ 0_6 & \mathbb{1}_6 \\ -\mathbb{1}_6 & -\mathbb{1}_6 \end{pmatrix}$, $\quad {}^tB^*B^* = \underset{2\times3}{\begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 & -\mathbb{1}_6 \\ 0_6 & \mathbb{1}_6 & -\mathbb{1}_6 \end{pmatrix}} \underset{3\times2}{\begin{pmatrix} \mathbb{1}_6 & 0_6 \\ 0_6 & \mathbb{1}_6 \\ -\mathbb{1}_6 & -\mathbb{1}_6 \end{pmatrix}}$

Donc $\begin{pmatrix} 12 & 6 \\ 6 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_1 \\ \hat{\gamma}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 27'8 \\ -2'2 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} 12\hat{\gamma}_1 + 6\hat{\gamma}_2 = 27'8 \\ 6\hat{\gamma}_1 + 12\hat{\gamma}_2 = -2'2 \end{cases}$

$${}^tB^* \begin{pmatrix} 13.5 \\ 16.2 \\ 21.4 \\ 20 \\ 14.8 \\ 15.2 \\ 9.7 \\ 10.2 \\ 13 \\ 18.8 \\ 9.6 \\ 9.8 \\ 16.9 \\ 7.5 \\ 15.7 \\ 12.8 \\ 9 \\ 11.4 \end{pmatrix} = {}^tB^*Y$$

$\Rightarrow \begin{cases} \hat{\gamma}_1 = 3'211 \\ \hat{\gamma}_2 = -1'789 \end{cases} \quad \hat{\gamma}_3 = -\hat{\gamma}_1 - \hat{\gamma}_2 = -1'422$

- Dispersions des effets des blocs ?

Comme $({}^tB^*B^*)\hat{\gamma}^* = {}^tB^*Y$, on en déduit que

$$V(\hat{\gamma}^*) = \sigma^2({}^tB^*B^*)^{-1} = \frac{\sigma^2}{18}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Donc $Var(\hat{\gamma}_1) = Var(\hat{\gamma}_2) = \frac{\sigma^2}{9}$

On vérifie que $Var(\hat{\gamma}_3) = Var(-\hat{\gamma}_1 - \hat{\gamma}_2) =$

$= Var(\hat{\gamma}_1) + Var(\hat{\gamma}_2) + 2\,Cov(\hat{\gamma}_1, \hat{\gamma}_2) = \frac{\sigma^2}{9}$

= Significativité des valeurs $\hat{\gamma}_i$?

Possibilité de réaliser des test de l'hypothèse "$\gamma_i = 0$"
ou encore de l'hypothèse plus adaptée "$\gamma_i = \gamma_j$"

Utiliser R 4) On obtient maintenant $R^2 \approx 0'9967$
donc le modèle est très bien ajusté si des effets de blocs sont ajoutés.

On constante que pour les materiaux

Mot 1 / Mot 2 / Mot 3

Meilleur

Difference significative!

09 Plans d'expérience pour mélanges

01 Généralités

Les dispositifs expérimentaux considérés jusqu'à présent sont tels que les niveaux de chacun des facteurs sont indépendants des niveaux des autres facteurs étudiés. Il existe cependant des situations qui, par nature, ne vérifient pas une telle hypothèse. Un exemple classique, bien connu des chimistes, est celui de l'élaboration d'un **mélange** à partir de plusieurs composants. Les propriétés du mélange dépendent alors couramment des proportions de chacun des composants et ces proportions ne sont, par définition, pas indépendantes les unes des autres puisque leur somme est toujours égale à l'unité. Ce chapitre aborde le problème de l'élaboration de plans d'expérience relevant de ce type de situation.

Considérons alors un mélange à m composants (ou constituants). Supposons dans la suite que la réponse observée ne dépend que des **proportions** des composants (et non de leurs quantités totales dans le mélange). On note alors classiquement $x_1, x_2, ..., x_m$ les m proportions associées à tout mélange (donc $\forall\ i = 1, ..., m\ ,\ 0 \leq x_i \leq 1$) et l'hypothèse fondamentale suivante est imposée :

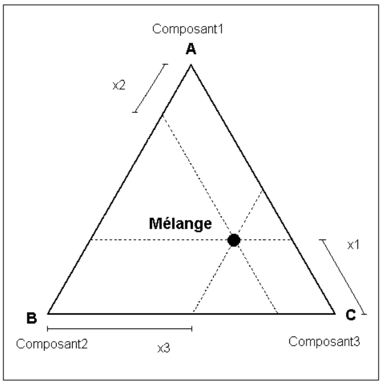
$$(H)\ :\ \sum_{i=1}^{m} x_i = 1.$$

Au niveau du vocabulaire, lorsque le composant i est utilisé seul (avec donc $x_i = 1$ et $x_j = 0$ pour $j \neq i$) on dit que l'on a un **corps pur**. On désigne couramment par mélange **binaire** tout mélange obtenu à partir de seulement deux composants (*i.e.* seulement deux des x_i sont non-nuls). De même un mélange élaboré à l'aide de trois composants est qualifié de mélange **ternaire**. Enfin un mélange dans lequel toutes les proportions sont égales (avec donc $x_i = 1/m$ pour tout $i = 1, ..., m$ dans le cas de m constituants) sera qualifié de mélange **équilibré**.

02 Représentations graphiques des mélanges

Tout mélange à m constituants est repéré par le vecteur $(x_1, x_2, ..., x_m)$ de ses proportions. Dans les chapitres précédents une telle expérience a toujours été identifiée à un point de l'espace $\mathbb{R}^m$ positionné selon ses coordonnées cartésiennes. Une telle identification n'a plus de sens ici puisque l'hypothèse fondamentale (H) n'est pas vérifiée.

Détaillons maintenant le cas le plus classique des mélanges ternaires (repérés donc par le triplet de proportions (x_1, x_2, x_3) où seulement deux des trois valeurs sont à connaitre). Une méthode mathématique classique permettant de représenter ce mélange consiste à le considérer sous forme de **coordonnées barycentriques**. On place alors trois points A, B, C dans le plan (en les positionnant sous forme d'un triangle équilatéral) et la convention est que tout mélange est identifié au **barycentre** des points pondérés $A\,(x_1)$, $B\,(x_2)$ et $C\,(x_3)$. Le graphique ci-dessous illustre le positionnement de tout mélange au sein du domaine expérimental triangulaire. Remarquons que les sommets du triangle ABC représentent avec une telle convention les trois corps purs.



Cette méthode peut être facilement généralisée mathématiquement. Un mélange obtenu à partir de m composants est alors totalement déterminé par la connaissance de $(m-1)$ proportions, il peut donc être représenté dans un espace à $(m-1)$ dimensions (du type $\mathbb{R}^{m-1}$). Considérons alors m points A_1, A_2, ..., A_m de cet espace associés à chacun des corps purs. Par souci de simplicité on place ces points de manière à obtenir une figure géométrique la plus régulière possible de manière à ce que $A_1A_2...A_m$ soit un **simplexe** de $\mathbb{R}^{m-1}$. Il s'agit donc de considérer un triangle équilatéral pour $m=3$ composants, un tétrahèdre régulier pour $m=4$ composants, *etc...* Tout mélange est alors représenté de manière unique par le barycentre des sommets A_1, A_2, ..., A_m affectés des pondérations x_1, x_2, ..., x_m égales aux différentes proportions. Remarquons qu'un mélange équilibré $(x_1 = x_2 = ... = x_m = 1/m)$, identifié à l'isobarycentre des m sommets, est souvent appelé **centroïde** du simplexe.

03 Modèles pour mélanges

Les modèles polynomiaux classiques utilisés jusqu'à présent ne sont pas adaptés à une étude de mélanges car l'hypothèse (H) entraîne une dépendance entre divers paramètres du modèle qui devient ainsi surparamétré. Détaillons ici la forme des principaux modèles adaptés aux mélanges.

1) Modèle d'ordre un

fácilmente

On vérifie aisément que le modèle polynomial classique d'ordre un est inutilisable dans le cas des mélanges car un de ses paramètres est en trop. On supprime alors classiquement l'effet moyen général pour aboutir à la définition suivante :

tener éxito

Définition 12

Le **modèle polynomial d'ordre un** pour mélanges à m composants est donné par :

$$\forall\ x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \sum_{i=1}^{m} b_i x_i.$$

Pas de β_0:

$f(x_1,..,x_m) = \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i = 1 \cdot \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i = \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)\beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i x_i = \sum_{i=1}^{m} \underbrace{(\beta_0+\beta_i)}_{b_i} x_i$

Il en résulte que le nombre de paramètres inconnus d'un tel modèle est :

$$p = m.$$

2) Modèle d'ordre deux

De manière identique, en partant d'un polynôme d'ordre deux classique et en injectant la contrainte (H) on montre que :

Définition 13

Le **modèle polynomial d'ordre deux** pour mélanges à m composants est donné par :

$$\forall\ x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \sum_{i=1}^{m} b_i x_i + \sum_{i<j}\sum b_{ij} x_i x_j.$$

Il en résulte que le nombre de paramètres inconnus d'un tel modèle est :

$$p = m + C_m^2 = m + \frac{m(m-1)}{2} = \frac{m(m+1)}{2}.$$

3) Modèles d'ordre trois

En partant d'un polynôme d'ordre trois classique et en injectant la contrainte (H) on arrive au modèle identifiable suivant :

Définition 14

Le **modèle polynomial d'ordre trois complet** pour mélanges à m composants est donné par :

$$\forall\ x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \sum_{i=1}^{m} b_i x_i + \sum_{i<j}\sum b_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j}\sum \delta_{ij} x_i x_j (x_i - x_j) + \sum_{i<j<k}\sum\sum b_{ijk} x_i x_j x_k$$

Il en résulte que le nombre de paramètres inconnus d'un tel modèle est :

$$p = m + 2C_m^2 + C_m^3 = \frac{m(m+1)(m+2)}{6}.$$

Un tel modèle peut être parfois complexe à mettre en oeuvre en pratique à cause de sa taille mais aussi à cause de l'interprétation des paramètres δ_{ij}. On propose alors parfois de considérer le sous-modèle suivant :

Définition 15

Le **modèle polynomial synergique d'ordre trois** pour mélanges à m composants est donné par :

$$\forall\ x \in \mathcal{E}\ ,\ f(x) = \sum_{i=1}^{m} b_i x_i + \sum_{i<j}\sum b_{ij} x_i x_j + \sum_{i<j<k}\sum\sum b_{ijk} x_i x_j x_k$$

Il en résulte que le nombre de paramètres inconnus d'un tel modèle est :

$$p = m + C_m^2 + C_m^3 = \frac{m(m^2+5)}{6}.$$

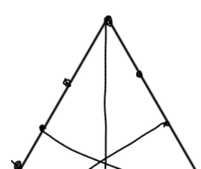
modelo solo con x_1, x_{12}, x_{132}
sin x^2y vs y^2x

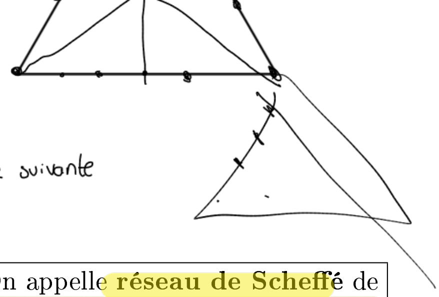
04 Plans d'expérience pour mélanges

Nous présentons ici deux dispositifs très classiques pour l'étude des mélanges que sont les réseaux de Scheffé ainsi que les réseaux de Scheffé centrés.

1) Réseaux de Scheffé

Un réseau de Scheffé de type $\{m, q\}$ est défini de la manière suivante :





Un réseau de Scheffé de type $\{m,q\}$ est défini de la manière suivante

Définition 16

Considérons un mélange élaboré à l'aide de m composants. On appelle **réseau de Scheffé** de type $\{m,q\}$, avec $q \in \mathbb{N}^*$, le plan d'expérience constitué par tous les points dont les coordonnées barycentriques sont des multiples de $1/q$.

☛ *Construire à titre d'exercice les réseaux de Scheffé de type* $\{3,1\}$, $\{3,2\}$, $\{3,3\}$ *et* $\{3,4\}$.

On vérifie alors que le nombre d'expérience d'un réseau de Scheffé de type $\{m,q\}$ est donné par :

$$n = K_m^q = C_{m+q-1}^q$$

On montre enfin que tout réseau de Scheffé de type $\{m,1\}$ permet d'ajuster un modèle d'ordre 1 pour mélanges, tout réseau de Scheffé de type $\{m,2\}$ permet d'ajuster un modèle d'ordre 2 pour mélanges et tout réseau de Scheffé de type $\{m,3\}$ permet d'ajuster un modèle d'ordre 3 complet pour mélanges. Les réseaux proposés constituent à chaque fois des plans d'expérience saturés.

2) Réseaux de Scheffé centrés

Les réseaux de Scheffé étudiés précedemment présentent un inconvénient au niveau de leur mise en oeuvre séquentielle puisque :

$$\{m,1\} \subset \{m,2\} \not\subseteq \{m,3\} \not\subseteq \{m,4\}$$

Si cela pose problème il est alors possible d'utiliser la structure alternative suivante :

Définition 17

Considérons un mélange élaboré à l'aide de m composants. On appelle **réseau de Scheffé centré** de type $\{m,q\}_C$, avec $q \in \mathbb{N}^*$ tel que $1 \leq q \leq m$, le plan d'expérience constitué par la réunion des q ensembles de points donnés ci-dessous :

1) tous les corps purs,

2) tous les mélanges binaires équilibrés, $x_i = x_j = \frac{1}{m} \ \forall i,j$

⋮

q) tous les mélanges équilibrés à q composants.

Un réseau de Scheffé centré de type $\{m,m\}_C$ est dit **complet**.

☛ *Construire à titre d'exercice les réseaux de Scheffé centrés de type* $\{3,1\}_C$, $\{3,2\}_C$ *et* $\{3,3\}_C$.

Le nombre d'expérience d'un réseau de Scheffé centré de type $\{m,q\}_C$ est donné par :

$$n = \sum_{i=1}^{q} C_m^i.$$

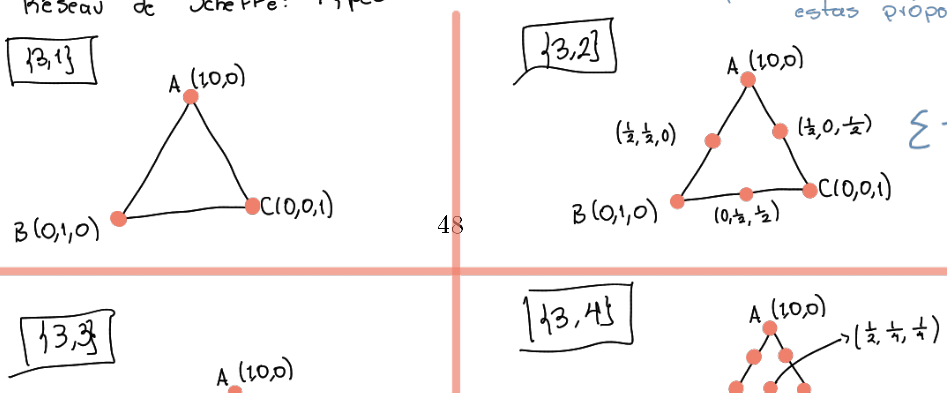
Il en découle qu'un réseau de Scheffé centré de type $\{m,m\}_C$ a donc pour nombre d'expériences $n = 2^m - 1$.

On montre enfin que tout réseau de Scheffé centré de type $\{m,3\}_C$ permet d'ajuster un modèle d'ordre 3 synergique pour mélanges. Ce réseau constitue de plus un plan d'expérience saturé.

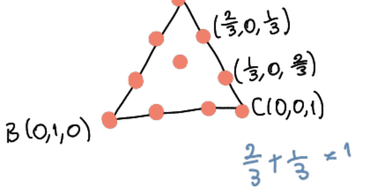
Remarque. Les réseaux de Scheffé centrés de type $\{m,1\}_C$ et $\{m,2\}_C$ sont toujours identiques aux réseaux de Scheffé de type $\{m,1\}$ et $\{m,2\}$.

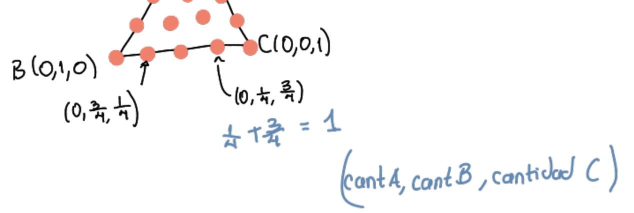
Réseau de Scheffé: Types

no puedo tener $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ pues la suma de estas proporciones será mayor a



$\sum \frac{1}{2}+\frac{1}{2} = 1$





05 Exercices d'applications

Exercice 1

[Expériences « centrales »]

Un mélange de trois composants est réalisé dans le but de maximiser le rendement d'une réaction chimique. Des expériences sont réalisées à l'aide d'un réseau de Scheffé de type $\{3, 1\}$ et un modèle d'ordre un pour mélanges est utilisé. Voici alors les résultats expérimentaux observés où x_1, x_2 et x_3 désignent respectivement les proportions des composants 1, 2 et 3 (les réponses sont exprimées en pourcentages) :

Prop. x_1	*Prop.* x_2	*Prop.* x_3	*Réponse* Y
1	0	0	10
0	1	0	15
0	0	1	20

1 Ecrire la forme du modèle linéaire d'ordre un pour mélanges. En déduire la forme de la matrice du modèle X ainsi que la forme de la matrice d'information ${}^tXX$.

2 En déduire les estimateurs des moindres carrés du modèle.

3 Expliquer pourquoi une analyse de la variance « classique » est réalisable ici alors que le modèle pour mélanges ne contient pas d'effet moyen général. Réaliser cette analyse de la variance et en déduire la valeur du coefficient de corrélation linéaire multiple.

Supposons maintenant qu'une expérience supplémentaire "centrale" ait été réalisée avec les résultats suivants :

melange equilibré, para dimensiones + grandes
moverse en el centro del triángulo

Prop. x_1	*Prop.* x_2	*Prop.* x_3	*Réponse* Y
1	0	0	10
0	1	0	15
0	0	1	20
1/3	1/3	1/3	33

4 Donner la forme de la matrice du modèle X ainsi que la forme de la matrice d'information ${}^tXX$.

5 Démontrer que si $A = aI_n + bJ_n$ est une matrice complètement symétrique d'ordre n inversible alors son inverse est elle-même complètement symétrique.

6 En déduire les estimateurs des moindres carrés du modèle.

7 Réaliser une analyse de la variance, en déduire la valeur du coefficient de corrélation linéaire multiple.

8 Les résultats des questions 3 et 7 sont-ils incompatibles ? Le modèle utilisé est-il bien ajusté ?

Exercice 2

[Formules explicites]

Un mélange de trois composants est réalisé dans le but de maximiser le rendement d'une réaction chimique. Des expériences sont réalisées à l'aide d'un réseau de Scheffé de type $\{3, 2\}$. Voici alors les résultats expérimentaux observés où x_1, x_2 et x_3 désignent respectivement les proportions des composants 1, 2 et 3 (les réponses sont exprimées en pourcentages) :

Prop. x_1	*Prop.* x_2	*Prop.* x_3	*Réponse* Y
1	0	0	$Y_1 = 6$
0	1	0	$Y_2 = 15$
0	0	1	$Y_3 = 25$
0.5	0.5	0	$Y_{12} = 12$
0.5	0	0.5	$Y_{13} = 42$
0	0.5	0.5	$Y_{23} = 23$

$\boxed{\mathbf{1}}$ Ecrire la forme du modèle linéaire d'ordre deux pour mélanges utilisable ici. En déduire la forme de la matrice du modèle X.

$\boxed{\mathbf{2}}$ Montrer ensuite que la matrice ${}^tXX$ peut être écrite sous la forme suivante :

$$ {}^tXX = \left[\begin{array}{c|c} aI_3 + bJ_3 & {}^tA \\ \hline A & cI_3 \end{array}\right]. $$

avec A matrice à déterminer ainsi que les constantes a, b et c.

$\boxed{\mathbf{3}}$ Montrer alors que $({}^tXX)^{-1}$ est donnée par :

$$ ({}^tXX)^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} I_3 & -16{}^tA \\ \hline -16A & 20I_3 + 4J_3 \end{array}\right]. $$

$\boxed{\mathbf{4}}$ En déduire que les estimateurs des moindres carrés du modèle sont obtenus par :

$$ \forall\, i, j = 1, ..., 3 \text{ avec } i \neq j, \quad \begin{cases} \widehat{b}_i = Y_i, \\ \widehat{b}_{ij} = 4Y_{ij} - 2\,(Y_i + Y_j)\,. \end{cases} $$

Déterminer alors le meilleur modèle au sens des moindres carrés.

$\boxed{\mathbf{5}}$ Quel est le mélange optimal sachant qu'une proportion de 0.2 est imposée pour le composant numéro 3 ?

Notas

Modèle classique avec β_0 :

$$ \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccc} \beta_0 & X_1 & X_2 \end{array} \\ X = & \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0'5 & 0'5 \\ 1 & 0'2 & 0'8 \end{pmatrix} \end{array} $$

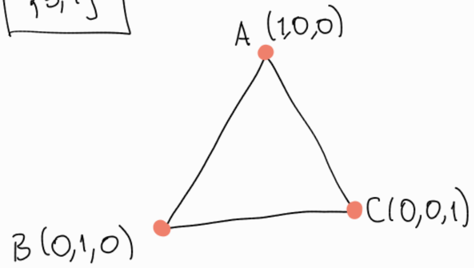
Matrice qui n'est pas de plein rang car $C_1 = C_2 + C_3$

<u>Ordre 2</u>

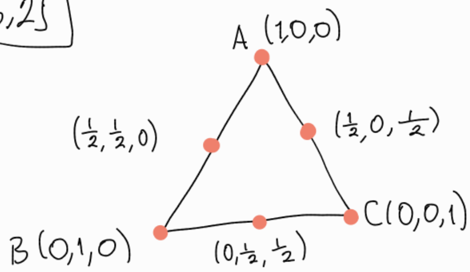
• $m = 3$: $X_1^2 = X_1 \cdot X_1 = X_1(1 - X_2 - X_3)$

Réseau de Scheffé : Types

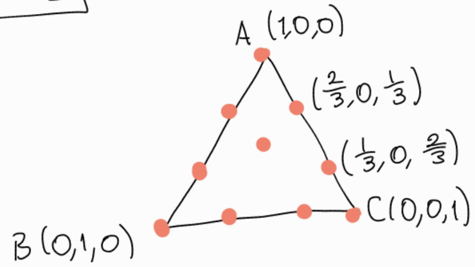
$\{3,1\}$



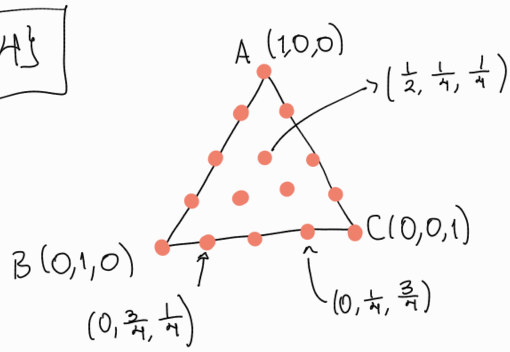
$\{3,2\}$



$\{3,3\}$



$\{3,4\}$



Combinatoire

Ordre \ Rep	OUI	NON
OUI	n^p	A_n^p
NON	K_n^p	C_n^p

nombre de combinations avec repetition

C'est aussi le nombre de solutions entiers des equations linéaires $x+y=4 \Rightarrow \{0,4\}, \{1,3\}, \{2,2\}$

On appelle résseau de Scheffé centré de type $\{m,q\}_C$, avec $q \in \mathbb{N}$ ‡ $1 \leq q \leq m$, le plan d'expérience constitué par la réunion des q ensembles des points donnés ci-dessous :

1) tous les corps purs (le composant i est utilisé seul)
2) tous les mélanges binaires (seulement deux des x_i sont non-nuls) - equilibrés, seulement 2 composants, i.e

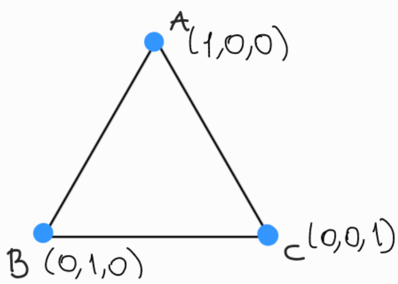
⋮

q) tous les mélanges à q composants equilibrés (tous les proportions son égales) $x_i = \frac{1}{m}$ $\forall\, i = 1, \dots, m$

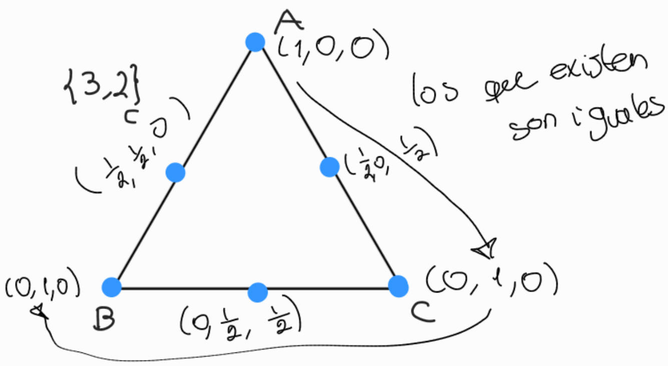
d'expérience d'un reseau de Scheffé centré de type $\{m,q\}_C$ est : $n = \sum_{i=1}^{q} C_m^i$

Reseau de Scheffé centré de type $\{3,1\}_C$, $\{3,2\}_C$, $\{3,3\}_C$

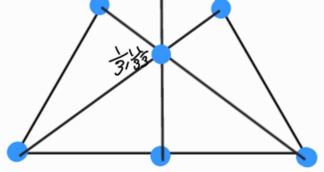
$\{3,1\}_C$



$\{3,2\}_C$



$\{3,3\}_C$



1° $\{ (1,0,0)\ (0,1,0)\ (0,0,1)$

$(\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3}) \to$ no suma 1 $\quad (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0)$

no son iguales

$\{m,m\}_c = \{3,3\}_c =$

$C_3^1 + C_3^2 + C_3^3 = 3+3+1 = 7$

$= \{m,1\}_c + \{m,2\}_c + \{m,3\}_c$

$= \{3,1\}_c + \{3,2\}_c + \{3,3\}_c$

Nombre d'expériences du réseau $\{m,q\}_c$: $\sum_{i=1}^{q} C_m^i$

Pour $\{m,m\}_c$, on a: $\sum_{i=1}^{m} C_m^i = 2^m - 1$

Exercices

1)

i) On a $Y(x_1,x_2,x_3) = b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + \varepsilon(x_1,x_2,x_3)$

Matrice du modele est $X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I_3$ donc $X^T X = I_3$

ii) $B = (X^T X)^{-1} X^T Y = X^T Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix} \begin{matrix} \to b_1 \\ \to b_2 \\ \to b_3 \end{matrix}$

iii) Recordemos que $SST = SSR + SSE$ solo es válida bajo la hipotesis que $1\!\!1_m \in \operatorname{Im} X$, lo cual se sigue cumpliendo aun cuando no tengamos la constante β_0 pues $\sum_{i=1}^{m} x_i = 1$

Rappel La relation $SST = SSR + SSE$ est vraie dès lors que $1\!\!1_m \in \operatorname{Im} X$

Même si le modèle pour mélanges n'a pas de constante la relation
(H) $\sum_{i=1}^{m} x_i = 1$ entraîne que la somme des colonnes de X est égale à $1\!\!1_3$

On a $\bar{Y} = 15$, $SST = \sum_{i=1}^{3} (Y_i - \bar{Y})^2 = 50$ où $\hat{Y}(x_1,x_2,x_3) = 10x_1 + 15x_2 + 20x_3$

$SSE = \sum_{i=1}^{3} (Y_i - \hat{Y})^2 = 0$ car $\hat{Y}_1 = 10$

$1 \;\; \frac{SSE}{} - 1$

$1 - \frac{}{SST} = 1$

iv) $X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}_{4\times 3} \Rightarrow X^T X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}_{3\times 4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}_{4\times 3}$

$J_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

$$= \begin{pmatrix} \frac{10}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} \\ \frac{1}{9} & \frac{10}{9} & \frac{1}{9} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{10}{9} \end{pmatrix} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 10 & 1 & 1 \\ 1 & 10 & 1 \\ 1 & 1 & 10 \end{pmatrix} = I_3 + \frac{1}{9} J_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{9} & \frac{1}{9} \end{pmatrix}$$

v) Cherchons l'inverse de A sous la forme $\alpha I_n + \beta J_m$

$$\underbrace{(a I_n + b J_n)}_{A} \underbrace{(\alpha I_n + \beta J_n)}_{A^{-1}} = I_n$$

$$\Leftrightarrow (a\alpha) I_n + (a\beta) J_n + (\alpha b) J_n + \underbrace{(b+\beta) J_n^2}_{} = I_n \quad 111$$

On a $J_n = 1\!\!1_n^t 1\!\!1_n$ donc $J_n^2 = (1\!\!1_n^t 1\!\!1_n)(1\!\!1_n^t 1\!\!1_n) = 1\!\!1_n \underbrace{(1\!\!1_n^t 1\!\!1_n)}_{n}^t 1\!\!1_n = n\, 1\!\!1_n^t 1\!\!1_n = n J_n$

Alors

$\Leftrightarrow (a\alpha) I_n + (a\beta + b\alpha + nb\beta) J_n = I_n \Leftrightarrow \begin{cases} a\alpha = 1 & \Rightarrow \alpha = \frac{1}{a} \\ a\beta + b\alpha + nb\beta = 0 & \Rightarrow \beta = \dfrac{-\frac{b}{a}}{a + nb} \end{cases}$

vi) On a $\hat{b} = ({}^tXX)^{-1}\, {}^tXY$ avec $\left| \begin{array}{l} {}^tXX = I_3 + \frac{1}{9} J_3 \\ \text{donc } \beta = \dfrac{-\frac{1}{9}}{1 + 3\left(\frac{1}{9}\right)} = \dfrac{-\frac{1}{9}}{\frac{12}{9}} = -\dfrac{\cancel{9}}{\cancel{9}(12)} \end{array} \right.$

$\Rightarrow ({}^tXX)^{-1} = I_3 - \frac{1}{12} J_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

Conclusion

$\begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 \\ 15 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \frac{11}{12} & \frac{1}{12} & 0.96 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 14.5 \\ 5 \end{pmatrix}$

$$\hat{b}=\left(I_3-\frac{1}{12}J_3\right)^t XY=\underset{3\times 3}{\begin{pmatrix} 1-\frac{1}{12} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} \\ \frac{1}{12} & 1-\frac{1}{12} & \frac{1}{12} \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & 1-\frac{1}{12}\end{pmatrix}}\underset{3\times 4}{\begin{pmatrix} \cdots & & & \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{3}\end{pmatrix}}\underset{4\times 1}{\begin{pmatrix} \vdots \\ 26 \\ 33\end{pmatrix}}=\begin{pmatrix} \\ \\ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \vdots \\ 33\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \vdots \\ 19.5 \\ 24.5\end{pmatrix}$$

où $\left[\hat{Y}(x_1, x_2, x_3) = 14.5x_1 + 19.5x_2 + 24.5x_3\right]$

vii) On a $\bar{Y} = 19.5$ Pour $SST = \sum_{i=1}^{4}(Y_i - \bar{Y})^2 = \underline{293}$

$SSE = \sum_{i=1}^{4}(Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \underline{243}$, $\hat{Y}_1 = 14.5\left(\frac{1}{3}\right) + 19.5\left(\frac{1}{3}\right) + 24.5\left(\frac{1}{3}\right)$

Donc $R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST} \approx 0.17$

viii) On peut decir que ici c'est un test de linearité

El modelo sugiere que hay ajustar un modelo de más de un grado pues R^2 es muy bajo y, además en iii) tenemos uno constante ?? => 1 cap central no es suf para mejorar el modelo

mi expx -> melanges.

10 Plans d'expérience factoriels complets pour facteurs qualitatifs

01 Généralités

Les plans d'expérience présentés dans les chapitres précédents utilisaient des facteurs quantitatifs c'est-à-dire directement mesurables à l'aide d'une grandeur physique (température, masse, concentration, *etc...*). L'objet de ce chapitre est de s'intéresser maintenant aux problèmes faisant intervenir des facteurs **qualitatifs** donc non directement quantifiables (couleur d'une peinture, variété de blé, catégorie socio-professionelle, sexe, *etc...*). Le type de plan d'expérience mis en œuvre dans un tel contexte est fondamentalement différent des diverses configurations étudiées jusqu'à présent.

Le modèle étudié ici est le modèle additif classique. Divers plans d'expérience sont adaptés à l'analyse de ce modèle, nous détaillons dans un premier temps les plans factoriels complets. L'objectif principal est, une nouvelle fois, d'obtenir des plans d'expérience de petite taille d'analyse la plus simple possible. La notion d'**orthogonalité** d'un plan d'expérience pour facteurs qualitatifs est introduite ici via l'utilisation de ce type de plans d'expérience.

02 Utilisation de facteurs qualitatifs

Considérons ici un phénomène aléatoire dépendant de m facteurs qualitatifs et supposons que le facteur i ($i = 1, ..., m$) est à h_i **modalités**. Deux techniques classiques de codage pour de tels facteurs sont présentées ci-dessous :

Z/h0 0 modulité

1) Codage naturel. Afin de quantifier les différentes modalités il est naturel d'affecter chacune d'elles à un entier naturel. Lorsque h_i modalités sont présentes on peut, par exemple, les coder à l'aide de l'ensemble $\{0, 1, 2, ..., h_i - 1\}$ identifiable à $\mathbb{Z}/\mathrm{h_i}\mathbb{Z}$. Il n'y a pas de façon unique pour réaliser un tel codage, il convient donc de choisir arbitrairement quelle modalité est affectée à chacun des entiers de l'ensemble précédent.

o Pas utilisable en calcul

2) Codage binaire. Le codage naturel est très pratique pour décrire de façon simple un plan d'expérience. Il s'avére cependant plus problématique dans une optique de modélisation car il induit artificiellement un ordre sur les différentes modalités des facteurs. Afin de palier cet inconvénient et de pouvoir comparer les effets des différentes modalités entre elles il est alors classique d'utiliser un codage binaire : la valeur 1 est affectée à la modalité lorsqu'elle est présente dans l'expérience considérée, la valeur 0 lui est affectée sinon. grande no compacto, todo el mundo de acuerdo

Exemple. Une étude médicale est menée afin de mesurer l'impact psychologique de la couleur d'un médicament sur l'amélioration de la santé du malade. Deux facteurs qualitatifs sont étudiés : la couleur du médicament avec les modalités dans l'ensemble {blanc, bleu, rouge} ($h_1 = 3$) et le sexe du patient avec les modalités cette fois dans l'ensemble {homme, femme} ($h_2 = 2$). Quatre expériences sont réalisées de la manière suivante :

	Couleur	*Sexe*
Expérience 1	blanc	homme
Expérience 2	bleu	femme
Expérience 3	rouge	femme
Expérience 4	rouge	femme

autant de modalité testé pour chaque facteur

Un codage naturel peut être, par exemple, le suivant :

blanc	(0)	homme	(0)
bleu	(1)	femme	(1)
rouge	(2)		

Les expériences réalisées sont alors associées à la matrice du plan d'expérience ci-dessous :

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

autant de modalités que des colonnes

Pour un codage binaire la matrice du plan d'expérience est donnée ci-dessous en affectant les colonnes aux indicatrices des modalités suivantes (de gauche à droite) : blanc, bleu, rouge, homme et femme.

a nivel orthogonal vemos que tenemos un desequilibrio de observaciones pour femme

$$D = \left[\begin{array}{c|c} X_1 & X_2 \end{array}\right] = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} \text{blanc} & \text{bleu} & \text{rouge} & \text{homme} & \text{femme} \end{array} \\ \left[\begin{array}{ccc|cc} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array}\right] \\ \begin{array}{cc} \underbrace{\qquad\qquad}_{X_1} & \underbrace{\qquad}_{X_2} \end{array} \end{array}.$$

Les sous-matrices X_1 et X_2 sont les matrices d'indicatrices des modalités des facteurs 1 et 2.

Il découle de ceci la notion classique de **matrice d'incidence,** issue (resultado) du croisement des deux facteurs qualitatifs i et j $(i, j = 1, ..., m$ avec $i < j$), définie par :

Valorar la calidad del modelo

modalidad factor i

modalidad factor j

$$N_{ij} = {}^t X_i X_j$$

où X_i est la matrice des indicatrices des modalités du facteur i. En désignant par $\lambda_{ij}(l, c)$ le terme général de la matrice $N_{ij} \in \mathcal{M}(h_i, h_j)$ situé à l'intersection de la ligne l et de la colonne c il est clair que $\lambda_{ij}(l, c)$ représente le nombre de fois où la l-ième modalité du facteur i et la c-ième modalité du facteur j apparaissent simultanément dans le plan d'expérience utilisé.

Exemple. En considérant que le premier facteur est la couleur et le second est le sexe il vient :

Trataremos de tener # constantes en la matriz

Pos testé

$$N_{12} = \begin{array}{cc} \begin{array}{cc} \text{homme} & \text{fem} \end{array} & \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \text{blanc} \\ \text{bleu} \\ \text{rouge} \end{array} \end{array} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}}_{3\times 4} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{4\times 2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}}_{3\times 2}$$

fem avec rouge

de couples

Ceci montre bien que, par exemple, la troisième modalité du facteur un et la seconde modalité du facteur deux (*i.e.* comprimé *rouge* et patient *femme*) apparaissent simultanément deux fois dans le protocole expérimental. Concernant maintenant les marges (marges) du tableau N_{12} il vient :

		homme	*femme*	
N_{12}	*blanc*	1	0	*som. blanc* = **1**
	bleu	0	1	*som. bleu* = **1**
	rouge	0	2	*som. rouge* = **2**
		som. hom. = **1**	*som. fem.* = **3**	*som. générale* = **4**

Ceci montre, par exemple, que 3 individus de sexe féminin ont participé à l'expérimentation.

03 Modèle utilisé

Considérons le modèle postulant que les effets des différents facteurs s'ajoutent les uns aux autres de manière indépendante. Ce modèle statistique peut toujours être écrit mathématiquement sous la forme générale $Y(x) = f(x) + \varepsilon(x)$ avec ici $x = (i_1, i_2, ..., i_m) \in \mathcal{E}$ vecteur associé aux différents codages naturels de l'expérience réalisée. On dit alors que l'on utilise un **modèle additif** si et seulement si :

$\sum_{i=1}^{m} h_i$

$$f(i_1, i_2, ..., i_m) = \beta_0 + \beta_1^{[i_1]} + \beta_2^{[i_2]} + ... + \beta_m^{[i_m]}$$

$\beta_{color}^{rojo} + \beta_{color}^{verde} + \beta_{sexe}^{femme}$

avec β_0 effet moyen général et $\beta_j^{[i]}$ **effet de la modalité i du facteur j.**

Le nombre total de paramètres de ce modèle est donné par :

m = # factores

$$p^* = 1 + \sum_{i=1}^{m} h_i.$$

$\beta_0 + \beta_i$ $i \in$ # modalidades

Notons enfin que matriciellement l'écriture du modèle additif est $Y = X\beta + \varepsilon$ avec :

$$X = \left[\ \mathbb{I}_n \ \middle|\ D\ \right] = \left[\ \mathbb{I}_n \ \middle|\ X_1 \ \middle|\ ... \ \middle|\ X_m\ \right]$$

où X_i $(i = 1, ..., m)$ est la matrice des indicatrices des modalités du facteur i.

Exemple. Le modèle additif est donné par la relation :

couleur sexe

$$f(i_1, i_2) = \beta_0 + \beta_1^{[i_1]} + \beta_2^{[i_2]}$$

blanc, bleu, rouge h femme

avec $(i_1, i_2) \in \mathcal{E} = \{0, 1, 2\} \times \{0, 1\}$, $\beta_1^{[i_1]}$ étant l'effet de la couleur i_1 sur la réponse et $\beta_2^{[i_2]}$ l'effet du sexe i_2 sur la réponse. Matriciellement il vient donc :

effet moyen

$$X = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c|ccc|cc} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array}\right] \\ \begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array} \end{array}, \ \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \hline \beta_1 \\ \hline \beta_2 \end{pmatrix} \text{ avec } \beta_1 = \begin{pmatrix} \beta_1^{[0]} \\ \beta_1^{[1]} \\ \beta_1^{[2]} \end{pmatrix} \text{ et } \beta_2 = \begin{pmatrix} \beta_2^{[0]} \\ \beta_2^{[1]} \end{pmatrix}.$$

facteur 2

Un tel modèle est toujours **surparamétré** puisque la somme des colonnes de chacune des matrices X_i des indicatrices des modalités du facteur i est égale à l'indicatrice $\mathbb{I}_n$. Afin de rendre la matrice du modèle X de plein rang il est donc nécessaire de rajouter m **contraintes d'identification**. Un tel choix n'est pas unique, nous allons considérer dans la suite les contraintes classiques suivantes :

Soma de efectos sera 0

$$\forall\ i = 1, ..., m\ , \sum_{j=0}^{h_i - 1} \beta_i^{[j]} = 0.$$

Il en résulte que le nombre de paramètres inconnus du modèle est alors :

$$p = p^* - m = \underset{\beta_0}{1} + \sum_{i=1}^{m} (h_i - 1)\,.$$

Etant donnée la matrice $X \in \mathcal{M}(n, p^*)$ du modèle on appelle dans la suite **matrice du modèle centrée** la matrice $X^* \in \mathcal{M}(n, p)$ obtenue sous les contraintes d'identification précédentes.

04 Plans factoriels complets

Todos combinaciones posibles

Les plans factoriels complets ont été définis précedemment, pour m facteurs quantitatifs, par les 2^m sommets de l'hypercube $[-1, +1]^m$. Mais ils peuvent aussi être vus comme le cas particulier où m facteurs qualitatifs ayant tous $h = 2$ modalités sont considérés, le codage des modalités étant à valeurs dans $\{-1, +1\}$. En dehors de l'interprétation géométrique (qu'il va être impossible de généraliser au cas de facteurs qualitatifs) un plan factoriel complet n'est autre qu'une configuration où **toutes les expériences** possibles ont été réalisées. On en déduit alors la généralisation suivante :

Définition 18

Considérons un phénomène aléatoire dépendant de m facteurs qualitatifs à $h_1, ..., h_m$ modalités. On appelle plan d'expérience **factoriel complet** la configuration donnée en codages naturels par :

$$\{0, ..., h_1 - 1\} \times \{0, ..., h_2 - 1\} \times ... \times \{0, ..., h_m - 1\}.$$

Le nombre d'expériences d'un tel plan est donc :

Ch 3 fs, 13 modalites

$$n = \prod_{i=1}^{m} h_i$$

Si tous les facteur ont le même nombre h de modalités on dit que le plan d'expérience est **symétrique**, le nombre d'expériences à réaliser est donc h^m. Remarquons que, contrairement au cas des facteurs quantitatifs, la notion d'expériences centrales n'a plus de sens maintenant.

Ordre de Yates pour les expériences

Concernant maintenant l'écriture de la matrice du plan d'expérience on généralise ici l'**ordre standard** proposé par Yates en procédant de la manière suivante :

i) la première ligne de D n'est constituée que des valeurs 0 (*i.e.* la première expérience est réalisée en utilisant la modalité 0 pour tous les facteurs),

ii) la première colonne de D est obtenue en répétant la séquence 0, 1, ..., $h_1 - 1$ autant de fois que nécessaire. La seconde colonne est obtenue de manière identique mais chacune des modalités est répétée h_1 fois. La troisième colonne est obtenue de manière identique mais chacune des modalités est répétée $h_1 h_2$ fois, *etc...*

Désignons dans la suite par $\overline{Y}$ la moyenne générale relative à toutes les réponses observées et notons :

$$\begin{cases} Y_i^{[j]} \text{ la somme des réponses où seule la modalité } j \text{ du facteur } i \text{ intervient,} \\ \overline{Y}_i^{[j]} \text{ la moyenne des réponses où seule la modalité } j \text{ du facteur } i \text{ intervient.} \end{cases}$$

On démontre alors le résultat suivant :

Proposition 10

Soit un plan d'expérience **factoriel complet** pour m facteurs qualitatifs à $h_1, ..., h_m$ modalités, analysé à l'aide du modèle additif. Les **estimateurs des moindres carrés** de l'effet moyen général β_0 ainsi que de chacun des paramètres $\beta_i^{[j]}$ ($\forall\ i = 1, ..., m$ et $\forall\ j = 0, ..., h_i - 1$) sont donnés, sous les contraintes classiques d'identification, par :

la moyenne des réponses $\hat{\beta}_0$

$$\widehat{\beta}_0 = \overline{Y} \text{ et } \widehat{\beta}_i^{[j]} = \overline{Y}_i^{[j]} - \overline{Y}.$$

$\hat{\beta}_i^{[j]} = Y_i^{[j]} - \overline{Y} = Y_i^{[j]} - \hat{\beta}_0$

moyenne des réponses de modalité j du facteur i − moyenne des réponses

Concernant la **dispersion** de ces estimateurs il vient :

$$\text{Var}\left(\widehat{\beta}_0\right) = \frac{\sigma^2}{n} \text{ et } \text{Var}\left(\widehat{\beta}_i^{[j]}\right) = \frac{\sigma^2}{n}(h_i - 1).$$

$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \frac{\sigma^2}{n}$ $\text{Var}(\hat{\beta}_1^{[j]}) = \frac{\sigma^2}{n}[h_i - 1]$

Remarquons que les estimateurs, obtenus ici de manière très simple, découlent des multiples **équilibres** présents dans ce type de plan d'expérience. En effet, vu que toutes les combinaisons possibles d'expériences ont été réalisées il en découle que :

i) les nombres d'occurences de chacune des modalités du facteur i sont **constantes** données par :

$$h_1 h_2 ... h_{i-1} h_{i+1} ... h_m = n / h_i$$

#occurences de chacune des modalites du facteur i

ii) les nombres d'occurences de chacun des couples de modalités des facteurs i et j sont **constantes** données par :

$$h_1 h_2 ... h_{i-1} h_{i+1} ... h_{j-1} h_{j+1} ... h_m = n/h_i h_j$$

Ces propriétés vont être généralisées dans le chapitre suivant à la classe dite des plans d'expérience orthogonaux pour facteurs qualitatifs.

05 Exercices

Exercice 1

[Exemple de plan factoriel complet]

On reprend ici la situation où deux facteurs qualitatifs sont étudiés : la couleur du médicament avec les modalités dans l'ensemble {blanc, bleu, rouge} ($h_1 = 3$) et le sexe du patient avec les modalités cette fois dans l'ensemble {homme, femme} ($h_2 = 2$). On souhaite réaliser une étude à l'aide d'un plan factoriel complet.

1 Ecrire la matrice de ce plan d'expérience (selon l'ordre de Yates) en codage naturel.

2 Ecrire la matrice X du modèle ainsi que la matrice X^* centrée du modèle.

3 Retrouver alors les formules permettant d'obtenir les estimateurs des moindres carrés ainsi que leurs dispersions (travailler dans le cas général sans fixer les valeurs des réponses).

Example

1) Plan factoriel complet pour les 3 couleurs (codées 0,1,2) et les 2 sexes (0,1).

Ordre de Yates

$$D = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \text{couleur} & \text{sexe} \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ & \underbrace{\text{blanc} \quad \text{blue} \quad \text{rouge}}_{X_1} & & & \underbrace{\text{hom} \quad \text{fem}}_{X_2} & \end{pmatrix}$$

Matrice d'indice

$$N_{12} = {}^tX_1 X_2 = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} H & F \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \text{-blanc} \\ \text{-bleu} \\ \text{-rouge} \end{array}$$

$$N_{12} = {}^tX_1 X_2 = \underset{3\times6}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \underset{6\times2}{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}} = \underset{3\times2}{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}$$

Exercices

1) Matrice du plan factoriel

On écrit tous les modalités possibles $h(n)$ fois

$$D = \begin{array}{cc} \text{couleur} & \text{sex} \\ \end{array}$$
$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

blanc (0), bleu (1), rouge (2)
homme (0), femme (1)

Matrice du plan sous forme binaire

$$D = \begin{array}{ccc|cc} \text{blanc} & \text{bleu} & \text{rouge} & H & F \end{array}$$
$$D = \left(\underbrace{\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}}_{X_1} \middle| \underbrace{\begin{matrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{matrix}}_{X_2}\right)$$

Matrice d'incidence

$$N_{12} = {}^tX_1 X_2 = \begin{array}{c} \\ \\ \end{array}\begin{array}{cc} H & F \end{array}$$
$$\begin{array}{c} \\ \text{blanc} \\ \text{bleu} \\ \text{rouge} \end{array}\begin{array}{c} H \quad F \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

produit des variables hommes et rouge

$$X = \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{matrix}\right)$$

$B_0 \quad \underbrace{B_1^{[0]} \quad B_1^{[1]} \quad B_1^{[2]}}_{X_1} \quad \underbrace{B_2^{[1]} \quad B_2^{[2]}}_{X_2}$

Ici $p^* = 1+3+2 = 6$

$\Rightarrow p = p^* - m = 6 - 2 = 4$

sous contraintes

Constraintes d'identifiabilité

1. $B_1^{[0]} + B_1^{[1]} + B_1^{[2]} = 0$ $\qquad B_1^{[2]} = -B_1^{[0]} - B_1^{[-1]}$

$$\begin{cases} B_1 + B_1 + B_1 = 0 \\ B_2^{[0]} + B_2^{[1]} = 0 \end{cases} \iff B_2^{[1]} = -B_2^{[0]}$$

On en déduit la matrice centrée de X^* (qui est de plein rang)

$$X^* = \begin{array}{cccc} B_0 & B_1^{[0]} & B_2^{[1]} & B_2^{[0]} \\ \end{array}$$

$$X^* = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

- bleu homme

$f(2,0) = B_0 + B_1^{[2]} + B_2^{[0]}$ rouge, homme

$= B_0 - B_1^{[0]} - B_1^{[1]} + B_2^{[0]}$

3) Estimateurs des moindres carrés $({}^tX^*X^*)\hat{B}^* = {}^tX^*Y$

$$Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ Y_5 \\ Y_6 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad B^* = \begin{pmatrix} B_0 \\ B_1^{[0]} \\ B_1^{[1]} \\ B_2^{[0]} \end{pmatrix}$$

quitamos el efecto rojo

quitamos femme

$${}^tX^*X^* = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrice d'information

$$\Rightarrow {}^tX^*X^* = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{et,} \quad {}^tX^*Y = \begin{pmatrix} Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 + Y_5 + Y_6 \\ Y_1 - Y_3 + Y_4 - Y_6 \\ Y_2 - Y_4 + Y_5 - Y_6 \\ Y_1 + Y_2 + Y_3 - Y_4 - Y_5 - Y_6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{6} Y_i \\ Y_1 - Y_3 + Y_4 - Y_6 \end{pmatrix}$$

Difference entre le rouge et le blanc

$$ {}^tX^*Y = \begin{pmatrix} \vdots \\ Y_2 - Y_3 + Y_5 - Y_6 \\ \left(\sum_{i=1}^{3} Y_i\right) - \left(\sum_{i=4}^{6} Y_i\right) \end{pmatrix} $$

et entre le rouge et le bleu

Resolution des équatios normales

$$ ({}^tX^* X^*)(\hat{B}^*) = \begin{pmatrix} 6\hat{B}_0 \\ 4B_1^{[0]} + 2B_1^{[1]} \\ 2B_1^{[0]} + 4B_1^{[1]} \\ 6\hat{B}_2^{[0]} \end{pmatrix} $$

On a $({}^tX^* X^*)\hat{B}^* = {}^tX^*Y$

$$ \iff \begin{cases} 6\hat{B}_0 = \sum_{i=1}^{n} Y_i \\ 4B_1^{[0]} + 2B_1^{[1]} = Y_1 - Y_3 + Y_4 - Y_6 \quad (L_1) \\ 2B_1^{[0]} + 4B_1^{[1]} = Y_2 - Y_3 + Y_5 - Y_6 \quad (L_2) \\ 6\hat{B}_2^{[0]} = \sum_{i=1}^{3} Y_i - \sum_{i=4}^{6} Y_i \end{cases} $$

$$ \Rightarrow \hat{B}_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i}{6} = \bar{Y} $$

$$ \Rightarrow \frac{Y_1+Y_2+Y_3-Y_4-Y_5-Y_6}{6} = \frac{1}{3}(Y_1+Y_3+Y_3) - \bar{Y} = \bar{Y}_2^{[0]} - \bar{Y} $$

Effet estimé du blanc et du bleu

$$ \begin{cases} 4\hat{B}_1^{[0]} + 2\hat{B}_1^{[1]} = Y_1 - Y_3 + Y_4 - Y_6 & (L_1) \\ 2\hat{B}_1^{[0]} + 4\hat{B}_1^{[1]} = Y_2 - Y_3 + Y_5 - Y_6 & (L_2) \end{cases} $$

$$ 2(L_1) - (L_2) : 6\hat{B}_1^{[0]} = 2Y_1 - Y_2 - Y_3 + 2Y_4 - Y_5 - Y_6 = 3Y_1 + 3Y_4 - \left(\sum_{i=1}^{6} Y_i\right) $$

$$ \Rightarrow \hat{B}_1^{[0]} = \frac{Y_1+Y_4}{2} - \bar{Y} = \bar{Y}_1^{[0]} - \bar{Y} $$

Y_1 y Y_4 son los unicos observaciones de color blanco $\Rightarrow \frac{Y_1+Y_4}{2} = \bar{Y}_1^{[0]}$

Ne pas oublier de vérifier les formules de la proposition 10 pour les effets de rouge et des femmes

$$ \hat{B}_1^{[2]} = -\hat{B}_1^{[0]} - \hat{B}_1^{[1]} = \ldots $$

$$ V(\hat{B}^*) = \sigma^2 ({}^tX^*X^*)^{-1} $$

Pour les dispersions des estimateurs calculons

$${}^tX^*X^* = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} = \mathrm{diag}\left(6, 2I_2 + 2J_2 + 6\right)$$

$$\mathrm{diag}\left(6, 2I_2 + 2J_2, 6\right)$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{matrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{matrix}$$

On sait que (voir exercice Ch 09) $a=2 \quad b=2$

si $A = aI_n + bJ_n$ est inversible alors $A^{-1} = \frac{1}{a}\left(I_n - \frac{b}{a+nb} I_n\right)$

$$A^{-1} = \frac{1}{2}\left(I_2 - \frac{2}{14} I_2\right) =$$

$$\frac{1}{2} I_2 - \frac{2}{2+2(2)} I_2)$$

$$= \frac{1}{2} I_2 - \frac{2}{6} I_2$$

$$({}^tX^*X^*)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & -\frac{1}{6} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

Conclusion

- $\mathrm{Var}\,\hat{B}_0 = \frac{\sigma^2}{6}$ (Prop 10: $\frac{\sigma^2}{m}$)

- $\mathrm{Var}\,\hat{B}_2^{[0]} = \frac{\sigma^2}{6}$ (Prop 10, $\frac{\sigma^2}{m}(h_2 - 1) = \frac{\sigma^2}{6}$)

- $\mathrm{Var}\,\hat{B}_1^{[0]} = \mathrm{Var}\,\hat{B}_1^{[1]} = \frac{\sigma^2}{3}$ (— : $\frac{\sigma^2}{n}(h_1 - 1) = \frac{2\sigma^2}{6} = \frac{\sigma^2}{3}$)

misma? since $\mathrm{Var}(B_i^{[j]}) = \frac{\sigma^2}{n}(h_i - 1)$ no depende de j

Pour l'effet du rouge

$$\mathrm{Var}\,\hat{B}_1^{[2]} = \mathrm{Var}\left(-\hat{B}_1^{[0]} - \hat{B}_1^{[1]}\right) =$$

$$\mathrm{Var}\left(-\hat{B}_1^{[0]}\right) + \mathrm{Var}\left(-\hat{B}_1^{[1]}\right) + 2\,\mathrm{cov}(B_1^{[0]}, B_1^{[0]})$$

$$= (-1)^2\,\mathrm{Var}(B_1^{[0]}) + \mathrm{Var}(B_1^{[1]}) + 2\,\mathrm{Cov}(B_1^{[0]}, B_1^{[0]})$$

11 Plans d'expérience orthogonaux pour facteurs qualitatifs

01 Généralités

Les plans factoriels complets pour facteurs qualitatifs ont été présentés dans le chapitre précédent. Ces plans d'expérience vont en général avoir une taille beaucoup trop importante afin d'être utiles d'un point de vue pratique. Ils sont par contre très intéressants de part leurs propriétés d'équilibre concernant les modalités ainsi que les couples de modalités des facteurs étudiés. Nous allons ici nous focaliser sur ces propriétés qui vont conduire à la notion plus générale de plan d'expérience **orthogonal**.

Quelques exemples de plans orthogonaux sont ensuite présentés avec, en particulier, la généralisation au cas des facteurs qualitatifs de la notion de fraction régulière de plan factoriel complet.

02 Notion d'orthogonalité

Nous avons vu précédemment que les plan factoriels complets pour facteurs qualitatifs sont tels que, pour chaque couple de facteurs fixé, chaque couple de modalités apparait le même nombre de fois. Il en découle la notion générale suivante :

Chaque couple de modalite appareille 2 fois

Définition 19

Un plan d'expérience à m facteurs qualitatifs est dit **orthogonal** si et seulement si ses **matrices d'incidence** vérifient :

rempli de 1

$$\forall\ i,j = 1,...,m \text{ pour } i < j \ ,\ N_{ij} = {}^tX_iX_j = \boxed{\lambda_{ij}J_{h_ih_j}}$$

colonnes

lignes

debe ser igual para todas ones λ [i j]

avec donc $\lambda_{ij} \in \mathbb{N}^*$ nombre de fois où chacune des modalités des facteurs i et j apparaissent simultanément dans le plan et $J_{q_1q_2} = \mathbb{I}_{q_1}{}^t\mathbb{I}_{q_2}$ matrice constituée par l'unique valeur 1.

λ_{ij} : # veces q c/modalidad de i e j aparecen simultaneamente y $J_{q_1q_2} = \mathbb{I}_{q_1}{}^t\mathbb{I}_{q_2}$

q aparecen al mismo tiempo

Quelques propriétés des plans orthogonaux

i) nous avons déjà vu que la somme totale des éléments de chaque matrice d'incidence N_{ij} donne le nombre d'expériences réalisées. Pour tout plan d'expérience orthogonal ce nombre est alors égal à :

n est un multiple de h_ih_j

$$\forall\ i,j = 1,...,m \text{ avec } i \neq j \ ,\ n = h_ih_j\lambda_{ij}.$$

#mod de i · #modo de j · # c/modalid de i e j simultáneamente

ii) de même les sommes par ligne ou par colonne de chaque matrice d'incidence N_{ij} entraînent que pour tout plan d'expérience orthogonal les nombres d'occurences de chacune des modalités du facteur i sont **constantes** données par :

$$\forall\ i = 1,...,m\ ,\ r_i = h_j\lambda_{ij} = \frac{n}{h_i}.$$

iii) il découle du résultat présenté en i) que pour tout plan orthogonal le nombre d'expérience doit forcément être un **multiple** de tous les produits de la forme h_ih_j. Le nombre d'expérience d'un plan orthogonal vérifie donc :

$$n \geq PPCM\,(h_ih_j\ /\ i,j = 1,...,m \text{ avec } i \neq j)\,.$$

plus petit common

On vérifie que la proposition 10 présentée dans le cadre des plans factoriels complets est en fait une propriété vérifiée par tout plan orthogonal, donc :

Proposition 11

lo q se cumple en la prop 10 para plan factorial completo tmbn es una propiedad de todo plan orthogonal

> Soit un plan d'expérience **orthogonal** pour m facteurs qualitatifs à $h_1, ..., h_m$ modalités, analysé à l'aide du modèle additif. Les **estimateurs des moindres carrés** de l'effet moyen général β_0 ainsi que de chacun des paramètres $\beta_i^{[j]}$ ($\forall\ i = 1, ..., m$ et $\forall\ j = 0, ..., h_i - 1$) sont donnés, sous les contraintes classiques d'identification, par :
>
> $$\widehat{\beta}_0 = \overline{Y} \text{ et } \widehat{\beta}_i^{[j]} = \overline{Y}_i^{[j]} - \overline{Y}.$$
>
> Concernant la **dispersion** de ces estimateurs il vient :
>
> $$\text{Var}\left(\widehat{\beta}_0\right) = \frac{\sigma^2}{n} \text{ et } \text{Var}\left(\widehat{\beta}_i^{[j]}\right) = \frac{\sigma^2}{n}(h_i - 1).$$

$\hat{\beta}_0 = \overline{Y}$ $\quad B_i^{[j]} = \overline{Y}_{[i]}^{[j]} - \overline{Y}$

$\text{Var}(\hat{\beta}_0) = \frac{\sigma^2}{n}$

$\text{Var}\ B_i^{[j]} = \frac{\sigma^2}{n}(h_i - 1)$

03 Fractions régulières symétriques

Les plans factoriels complets présentés précédemment sont difficilement utilisables à cause de leur grande taille car il vient en général :

$$p = 1 + \sum_{i=1}^{m}(h_i - 1) \ll n = \prod_{i=1}^{m} h_i.$$

L'idée la plus naturelle est alors de généraliser ce qui a été montré dans le cas des facteurs quantitatifs, c'est-à-dire n'utiliser qu'une partie des expériences du plan complet tout en conservant l'orthogonalité.

1) Cas particulier des facteurs à deux modalités

Revenons ici aux fractions régulières de plans factoriels pour facteurs quantitatifs où seulement les deux niveaux extrêmes étaient considérés et interprétons ceci comme un cas particulier. Il est alors possible de réutiliser tous les résultats obtenus et de les adapter à des facteurs qualitatifs à $h = 2$ modalités *via* la correspondance des codages donnée par l'application φ telle que :

numeric $\qquad$ blan

Facteurs quantitatifs : $\begin{vmatrix} -1 \\ +1 \end{vmatrix}$ $\quad$ Facteurs qualitatifs : $\begin{vmatrix} \varphi(-1) = 1 \\ \varphi(+1) = 0 \end{vmatrix}$

rouge $\qquad$ imagen del neutro es el neutro en el nuevo grupo

Remarquons que φ définit un isomorphisme entre les groupes $(\{-1, 1\}, \times)$ et $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}, +)$. Illustrons ceci sur un exemple simple, avec seulement $m = 3$ facteurs. Le plan factoriel complet a ici pour matrice (avec à gauche les codages $\{-1, 1\}$ et à droite les codages $\{0, 1\}$) :

$2^3 = 8 \to 8\times3$

$$D_{\{-1,1\}} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad D_{\{0,1\}} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ x_1 \quad x_2 \quad x_3 \end{array}.$$

Considérons maintenant la fraction régulière de type 2_{III}^{3-1} définie par la relation $\mathbb{I}$ =123. La matrice du plan est donnée ci-dessous (avec les mêmes conventions pour les codages) :

$$D_{\{-1,1\}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}, \quad D_{\{0,1\}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \Sigma = 0 \\ \Sigma = 2 \\ \Sigma = 2 \\ \Sigma = 2 \end{array} \Big\} \equiv 0_{\text{mod}_2}$$

$N_{12} = X_1^t X_2$ $\quad X_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ $\quad X_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\quad X_1^t = \begin{pmatrix} 10 & 10 & 10 & 10 \\ 01 & 01 & 01 & 01 \end{pmatrix}_{2\times 8}$ $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Quien es ¿x_1?

Ce plan d'expérience pour facteurs qualitatifs obtenu est bien orthogonal puisque :

en este caso 1 vez aparece c/modalidad {1,2}, {1,3} y {2,3}

$$N_{12} = N_{13} = N_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \lambda_{ij} J_{h_i \times h_j} = \lambda_{ij} J_{2\times 2}$$

Avec les codages $\{0, 1\}$ la sélection des expériences de la fraction régulière a été réalisée en ne gardant que les lignes de la matrice du plan complet dont la **somme** des codages des modalités est multiple de 2. En d'autres termes, en désignant respectivement par x_1, x_2 et x_3 les codages des modalités des facteurs 1, 2 et 3 on a conservé ici uniquement les expériences telles que la somme de ces trois quantités donne toujours un reste nul lors de la division euclidienne par 2 :

$$x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 = 1 \xrightarrow{\text{devient}} x_1 + x_2 + x_3 \equiv 0\,[2]\,.$$

2) Notion de générateurs

Considérons à partir de maintenant m facteurs qualitatifs ayant chacun h modalités et l'opérateur d'addition **modulo h** (*i.e.* le reste de la division euclidienne par l'entier h). Sous ces hypothèses on dit que l'on cherche à construire un fraction régulière **symétrique**. L'exemple ci-dessous présente la matrice du plan D de la fraction régulière obtenue pour $m = 3$ facteurs qualitatifs à $h = 3$ modalités en ne conservant que les expériences du plan factoriel vérifiant la relation $x_1 + x_2 + x_3 \equiv 0\,[3]$:

$$\underset{9\times 3}{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}.$$

Afin de garder une cohérence avec les notations des fractions régulières dans le cas de facteurs quantitatifs on définit cette fraction régulière en notation multiplicative. Dans l'exemple présenté il vient donc :

$$\mathbb{I} = \mathbf{123} \iff (x_1 + x_3 + x_3 \equiv 0\,[3])$$

et on dira encore que **123** est le générateur de cette fraction régulière.

Remarque. Cette notation multiplicative a du sens du point de vue mathématique via l'écriture complexe de la matrice du plan d'expérience (écriture purement théorique car lourde à manipuler en pratique). Elle découle de la règle suivante : la modalité i d'un des facteurs est codée par ω^i où ω est un nombre complexe tel que $\omega^h = 1$ (donc une racine h-ième de l'unité). Avec un tel codage la matrice (dite complexe) de la fraction régulière s'écrit donc (avec ici ω tel que $\omega^3 = 1$) :

$$D_{\mathbb{C}} = \begin{bmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \omega^2 \\ \omega^0 & \omega^2 & \omega^1 \\ \omega^1 & \omega^2 & \omega^0 \\ \omega^1 & \omega^0 & \omega^2 \\ \omega^1 & \omega^1 & \omega^1 \\ \omega^2 & \omega^1 & \omega^0 \\ \omega^2 & \omega^0 & \omega^1 \\ \omega^2 & \omega^2 & \omega^2 \end{bmatrix}$$

et la relation $\mathbb{I} = \mathbf{123}$ est effectivement vérifiée dans cette matrice. Par rapport à l'exemple introductif on travaille donc dans le cas général à un isomorphisme près, cet isomprphisme étantφ du groupe $\left(\{\omega^0, \omega^1, ..., \omega^{h-1}\}, \times\right)$ dans le groupe $(\mathbb{Z}/h\mathbb{Z}, +)$ tel que $\forall\ i = 0, ..., h-1,\ \varphi\left(\omega^i\right) = i$.

☛ *Construire à titre d'exercice les fractions régulières pour $m = 3$ facteurs qualitatifs à $h = 3$ modalités définies par les relations :*

$$\mathbb{I} = \mathbf{12^23}\ (i.e.\ x_1 + 2x_2 + x_3 \equiv 0\,[3]),$$

$= 1 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 3$

$\hookrightarrow x_1 + x_2 + x_2 + x_3 \to x_1 + 2x_2 + x_3$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$0 + 2\cdot 0 + 0 = 0$

$0 + 2\cdot 1 + 1 = 3$

$0 + 2\cdot 2 + 2 = 6 \equiv 0\,[3]$

$1 + 2\cdot 0 + 2 = 3$

$\omega 1 = 1^2 2^2 3 \iff 2x_1 + 2x_2 + x_3 \equiv 1\,[3]$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$D_{9\times 3}$ = $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$ $2+2\cdot 1+2=6$

$D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$

$$\omega\mathbb{I} = \mathbf{1}^2\mathbf{2}^2\mathbf{3} \ (i.e.\ 2x_1 + 2x_2 + x_3 \equiv 1\,[3]).$$

De manière plus générale maintenant on appelle **générateur** toute expression de la forme suivante (avec **1**,**2**, ...,**m** les colonnes de la matrice du plan factoriel complet et le produit d'Hadamard noté multiplicativement) :

$$M = \mathtt{1}^{\alpha_1}\mathtt{2}^{\alpha_2}\mathtt{3}^{\alpha_3}\ldots(\mathtt{m}-\mathtt{1})^{\alpha_{m-1}}\mathtt{m}^{\alpha_m}$$

où $\alpha_1, ..., \alpha_m$ sont des entiers naturels tels que $(\forall\ i = 1, ..., m)$ $0 \leq \alpha_i < h$ puisque, par hypothèse, $\mathtt{i}^h = \mathbb{I}$. On dit que la **longueur** de ce générateur est k où l'entier k désigne le nombre des entiers α_i non-nuls. Une **fraction régulière** est encore définie par la donnée de q générateurs (indépendants). Dès lors que $q > 1$ il n'y a pas unicité des q générateurs proposés (puisque tout produit de générateurs donne encore un candidat générateur). D'où la notion suivante :

Définition 20

On appelle groupe des **contrastes de définition** d'une fraction régulière, noté $\mathcal{G}$, le groupe engendré par ses q générateurs.

La question du cardinal du groupe $\mathcal{G}$ se pose alors naturellement. On montre que :

\# primo

Proposition 12

Considérons m facteurs qualitatifs tels que chacun d'entre eux a un **nombre premier** h de modalités. Le groupe $\mathcal{G}$ engendré par les q générateurs d'une fraction régulière est alors un **groupe fini** constitué de h^q éléments.

Remarque. Le fait que h doive être un nombre premier est une condition à priori étonnante. Sans entrer dans les détails de la démonstration le fait que h soit premier entraîne que tout générateur de $\mathcal{G}$ engendre un groupe de cardinal h (*i.e.* par analogie lorsque h est premier alors tout élément de $\mathbb{Z}/h\mathbb{Z}$ est bien un générateur du groupe). Lorsque le nombre de modalités h n'est plus premier il faut prendre garde au fait que cette propriété n'est plus vraie (*i.e.* par analogie lorsque h est quelconque alors un élement z de $\mathbb{Z}/h\mathbb{Z}$ est bien un générateur du groupe si et seulement si z et h sont premiers entre eux).

3) Notion de résolution

La notion de résolution d'une franction régulière se généralise sans la moindre difficulté :

Définition 21

Considérons une fraction régulière définie à l'aide de q générateurs. On appelle **résolution** de cette fraction régulière (notée classiquement en chiffres romains) la **longueur** du plus petit des élements du groupe $\mathcal{G}$ des contrastes de définition de la fraction régulière ($\mathbb{I}$ exclu).

4) Lien avec l'orthogonalité

Le problème se pose ensuite de savoir sous quelles conditions une fraction régulière va générer un plan d'expérience orthogonal. On généralise alors naturellement la notion de résolution d'une fraction régulière à plus de deux modalités pour aboutir à un résultat similaire :

Proposition 13

Considérons m facteurs qualitatifs tels que chacun d'entre eux a un nombre premier h de modalités. Alors :

1) cette fraction régulière a un total de $n = h^{m-q}$ expériences, h^{m-q}_{III}

2) si cette fraction régulière est de **résolution III** (ou plus) elle constitue un plan d'expérience **orthogonal.**

04 Autres plans orthogonaux

Il est évident que la théorie des fractions régulières (ne s'adaptant qu'à un nombre commun de modulités h avec h nombre premier) ne va pas permettre de traiter tous les cas de figure possibles. Voici un bref tour d'horizon des méthodes utilisables afin de construire des plans d'expérience orthogonaux :

1) fractions régulières symétriques avec h **non premier.**

Il est possible de réappliquer ce qui a été montré dans ce chapitre mais alors nous ne serons pas assurés que le groupe $\mathcal{G}$ soit de cardinal h^q. Il en résulte que la taille de la fraction régulière sera peut être supérieure à $n = h^{m-q}$.

2) fractions régulières **asymétriques.** $h_i \neq h_j$ para $i \neq j$ modalités

Si cette fois les m facteurs ont des nombres de modalités $h_1, h_2, .., h_m$ non égaux il est toujours possible de réappliquer ce qui a été montré dans ce chapitre mais il n'y a plus unicité de la méthode et de la fraction régulière obtenue puisque l'opératuer « modulo h » n'est plus unique.

3) plans en **carrés latins.** Carré magic

Il s'agit des premiers plans d'expérience orthogonaux (uniquement pour $m = 3$ facteurs) proposés historiquement par Fisher. Le niveau du premier facteur est repéré par la ligne, le niveau du second par la colonne et le niveau du dernier facteur par la valeur dans la cellule. Par exemple :

Fact 2

ligne	0	1	2
0	0	1	2
1	1	2	0
2	2	0	1

Fact 1

facteur 3

le carré latin

0	1	2
1	2	0
2	0	1

est un plan de matrice $D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$.

$2\cdot 0 + 2\cdot 1 + 1 = 3 \equiv 0\ [3]$

$2\cdot 2 + 2\cdot 0 + 2 = 6 \equiv 0\ [3]$

Remarquons que les plans en carré latins ne sont que des cas particuliers des fractions régulières présentées précédemment (pour cet exemple il s'agit de la fraction régulière définie par $\mathbb{I}_9 = 1^2 2^2 3$). $2X_1 + 2X_2 + X_3$

4) tables de **Taguchi.**

Le professeur Taguchi a eu par le passé l'idée de proposer des tables (dites « tables de Taguchi ») contenant de multiples plans d'expérience « clé en mains ». Ces tables ont été obtenues par diverses méthodes. Nous retiendrons ici l'écriture générique qu'il a proposé (très utilisée par les ingénieurs) : un plan d'expérience de type $L_n h_1^{\alpha_1} h_2^{\alpha_2} ... h_m^{\alpha_m}$ désigne une structure en n expériences où α_i est le nombre de facteurs à h_i modalités considérés. Voici à titre d'exemple la table de Taguchi $L_{12} 2^3 3^1$ permettant d'étudier trois facteurs à 2 modalités ainsi qu'un facteur à 3 modalités à l'aide de 12 expériences :

lignes, modalités

$L_{12}\ 2^3 3^1$

12 observaciones donde tengo 3+1=4 factores, 3 de ellos a 2 modalidades y 1 a 3

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

1 a 3 modalidades

3 a 2 modalidades

5) plans obtenus par diverses **transformations** sur d'autres plans.

Il est parfois possible de combiner des plans d'expérience de diverses manières afin d'obtenir de nouveaux plans d'expérience conservant l'orthogonalité des plans initiaux. Plusieurs techniques sont principalement utilisées, elles consistent (consulter des ouvrages spécialisés pour en savoir plus) : soit à remplacer un facteur par un plan, soit réciproquement à remplacer un sous-plan par un facteur, soit à construire un « plan produit » à partir de deux plans initiaux.

6) tableaux **orthogonaux.**

Une méthode classique afin d'obtenir la matrice d'un plan d'expérience consiste à rechercher celle-ci dans la classe des tableaux orthogonaux**.** D'un point de vue théorique un tableau $D \in \mathcal{M}(n,m)$ à éléments dans un groupe abélien fini G est qualifié de tableau orthogonal de force t $(1 \leq t \leq m)$ sur G^m si dans tout bloc formé de t colonnes de D les éléments de G^t figurent un même nombre de fois λ. Tout l'intérêt de ce type de structure est lié au fait qu'un plan d'expérience orthogonal pour le modèle additif est donc associé à une matrice qui est forcément un **tableau orthogonal de force 2**.

7) plans obtenus **numériquement.**

Lorsque les méthodes théoriques de construction ne donnent pas de bons résultats il est possible de s'orienter alors vers des algorithmes de construction de plans d'expérience. Malgré la puissance de calcul des ordinateurs modernes il est impossible en général de construire tous les plans possibles (sauf dans les cas où très peu de facteurs interviennent) afin de sélectionner le où les plans intéressants selon divers critères. En effet si, par exemple, $m = 4$ facteurs à $h = 3$ modalités interviennent une recherche exhaustive de tous les plans d'expérience susceptibles d'être orthogonaux et de taille minimale (c'est-à-dire $n = 9$ ici) conduit à un total de $3^{36} \simeq 10^{17}$ possibilités différentes (puisque trois modalités peuvent intervenir dans chacun des $9 \times 4 = 36$ termes de la matrice du plan). Voila donc pourquoi il est nécessaire d'utiliser des algorithmes capables de construire des plans d'expérience vérifiant certaines conditions dites d'optimalité. Citons ici brièvement quelques techniques algorithmiques classiques :

1) les algorithmes basés sur le principe de **propagation des contraintes** ont pour but de réduire au maximum la classe des plans à étudier. Pour la recherche, par exemple, d'un plan orthogonal il est inutile de considérer des configurations ne vérifiant pas au préalable la contrainte selon laquelle chacune des modalités des facteurs apparait un même nombre de fois, *etc...*

2) l'algorithme **d'échange** consiste, partant d'un plan d'expérience initial donné ou bien déterminé au hasard, à rajouter itérativement (on supprimer dans certains cas) des expériences de manière à optimiser au mieux un critère d'optimalité choisi au préalable.

A titre d'exemple considérons 4 facteurs à deux modalités et 1 facteur à trois modalités. Le plan d'expérience suivant est orthogonal, de type $L_{12}2^4 3^1$, obtenu de façon algorithmique :

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

05 Exercices

Exercice 1

[Quelques plans orthogonaux]

1 Quel plan d'expérience orthogonal peut-on proposer pour $m = 3$ facteurs qualitatifs ayant $2, 3$ et 4 modalités ?

2 Quel plan d'expérience orthogonal peut-on proposer pour $m = 5$ facteurs qualitatifs ayant tous 2 modalités ?

$n = 2^{m-q} = 2^{5-1} = 2^4 = 16$

$\boxed{\mathbf{3}}$ La table de Taguchi de type $L_{12}2^3 3^1$ présentée au point 4 de la section 04 est-elle de taille intéressante ?

Exercice 2

[Construction de fractions régulières]

$\boxed{\mathbf{1}}$ Considérons $m = 4$ facteur ayant tous $h = 3$ modalités. Construire et commenter l'utilisation de la fraction régulière définie par :

$$\mathbb{I} = \mathbf{123} = \mathbf{23^2 4}$$

$\boxed{\mathbf{2}}$ Considérons $m = 4$ facteur ayant tous $h = 3$ modalités. Construire et commenter l'utilisation de la fraction régulière définie par :

$$\mathbb{I} = \mathbf{123} = \mathbf{2^2 3^2 4}$$

$\boxed{\mathbf{3}}$ Considérons $m = 3$ facteur ayant tous $h = 4$ modalités (soit une valeur qui n'est pas un nombre premier). Construire et commenter l'utilisation des fractions régulières définies par :

$$\mathbb{I} = \mathbf{123} \text{ puis } \mathbb{I} = \mathbf{1^2 2^2 3^2}.$$

Exercice 3

[Analyse d'un plan orthogonal]

Considérons ici un fabriquant d'automobiles dont l'objectif est de choisir un nouveau train de pneumatiques devant équiper un de ses modèles. L'intérêt principal du constructeur est d'effectuer ce choix de manière à obtenir une consommation du véhicule la plus faible possible. Ce choix a été réduit à $m = 3$ facteurs principaux à $h = 4$ modalités résumés dans le tableau suivant (avec affectation arbitraire des diverses modalités à un codage naturel) :

	Modalité 0	*Modalité 1*	*Modalité 2*	*Modalité 3*
Structure	Diagonale	Radiale	Bidiagonale	Renforcée
Modèle	Classique	Sport	Economique	Mixte
Gomme	Type 1	Type 2	Type 3	Type 4

Pour chaque type de pneumatique testé la réponse est la consommation moyenne (exprimée en litres pour 100 km) mesurée suite à la réalisation de plusieurs parcours types effectués sur des pistes privées dans des conditions facilement reproductibles. Supposons que pour des raisons de coût de fabrication et de temps d'expérimentation le constructeur ne souhaite pas tester tous les pneus possibles (ce qui représenterait ici $n = 4^3 = 64$ expériences à réaliser).

	Structure	*Modèle*	*Gomme*	Y
Exp. 01	Diagonale	Classique	Type 1	7.34
Exp. 02	Diagonale	Sport	Type 4	7.79
Exp. 03	Diagonale	Economique	Type 3	7.48
Exp. 04	Diagonale	Mixte	Type 2	7.25
Exp. 05	Radiale	Classique	Type 4	7.16
Exp. 06	Radiale	Sport	Type 3	7.74
Exp. 07	Radiale	Economique	Type 2	7.08
Exp. 08	Radiale	Mixte	Type 1	7.48
Exp. 09	Bidiagonale	Classique	Type 3	7.36
Exp. 10	Bidiagonale	Sport	Type 2	7.64
Exp. 11	Bidiagonale	Economique	Type 1	7.60
Exp. 12	Bidiagonale	Mixte	Type 4	7.78
Exp. 13	Renforcée	Classique	Type 2	7.21
Exp. 14	Renforcée	Sport	Type 1	8.06
Exp. 15	Renforcée	Economique	Type 4	7.66
Exp. 16	Renforcée	Mixte	Type 3	7.72

$\boxed{\mathbf{1}}$ Montrer que les expériences réalisées constituent bien une fraction régulière du plan factoriel complet.

$\boxed{\mathbf{2}}$ Quel type de pneumatique semble minimiser la consommation moyenne ?

Exercices

$m = 3$ facteurs $\Rightarrow$ 3 colonnes

où $h = 3$ modalités $\Rightarrow$ on peut prendre seulement valeurs en $\{0,1,2\}$

page 59

$\mathbb{1} = 1 2^2 3 \quad \Leftrightarrow \quad x_1 + 2x_2 + x_3 \equiv 0\,[3]$

$$D_{9\times3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$0 + 2\cdot 0 + 0 = 0$

$0 + 2\cdot 1 + 1 = 3$

$0 + 2\cdot 2 + 2 = 6 \equiv 0\,[3]$

$1 + 2\cdot 0 + 2 = 3$

$2 + 2\cdot 1 + 2 = 6$

$\omega\mathbb{1} = 1^2 2^2 3 \quad \Leftrightarrow \quad 2x_1 + 2x_2 + x_3 \equiv 1\,[3]$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

(q premier ?)

Le groupe $\frac{\mathbb{Z}}{p\mathbb{Z}}$ est engendré par chacun de ses éléments (hors élément neutre) si et seulement si p est premier

Par exemple, $p = 5$, p est premier

$\langle 4 \rangle = \{4, 8, 12, 16, 20\} = \{4, 3, 2, 1, 0\}$

• $\frac{\mathbb{Z}}{5\mathbb{Z}} = \{0, 1, 2, 3, 4\} \rightarrow \langle 2 \rangle = \{2, 4, 6 \equiv_5 1, 3, 0\}$ $\quad \langle 3 \rangle = \{3, 1, 4, 2, 0\}$ etc

$\{2, 2+2, 2+2+2, 2+2+2+2, 2+2+2+2+2\}$

par contre, avec $p=4$

- $\frac{\mathbb{Z}}{4\mathbb{Z}} = \{0,1,2,3\}$ $\quad \langle 2\rangle = \{2,0\}$ on n'est peut pas engendré le groupe à cause de que p n'est pas une nombre premier

Exercices plan orthogonaux

Exercice 1)

a) On a ici $h_1=2, h_2=3$ et $h_3=4$ On sait que pour qu'un plan soit orthogonal il est nécessaire que

$$n \geq PPCM(h_i h_j, i=1,..,3) = PPCM(\overset{2\cdot 3}{h_1h_2}, \overset{2\cdot 4}{h_1h_3}, \overset{3\cdot 4}{h_2h_3})$$
$$\geq PPCM(6,8,12)$$
$$\geq 24$$

Conclusion: seul le plan factoriel complet (en $n=2\cdot3\cdot4=24$ expériences est orthogonal)

b) $n=5$ avec $h_1=h_2=h_3=h_4=h_5=2$

Pour qu'un plan soit orthogonal il est nécessaire que

$n \geq PPCM(h_i h_j, i,j=1,\dots,5) = 4$ inutile, parce qu'on a 10 variables à connaitre de los cuales c/factor se puede expresar en término del otro $\Rightarrow$ 5 variables más la constante $\Rightarrow$ en realidad necesito mínimo 6

Solution (par exemple) $1 = 123 = 345$ $\quad n = 2^{5-2} = 8$

c) Table $L_{12}2^3 3^1$ (ici $h_1=h_2=h_3=2$ et $h_4=3$)

Pour qu'un plan soit orthogonal il faut que $n \geq PPCM(h_i h_j, i,j=1,2,3,4)$
$\geq PPCM(4,6) = 12$

$\Rightarrow$ cette table est bien le plus petit plan orthogonal possible

Exercice 2

a) $I = 123 = 23^2 4$ $\quad m=4$, avec $h=3$ et $q=2$

Cherchons le groupe G, constitué ici par $|G| = h^q = 3^2 = 9$ éléments car h est prémier. On a:

no

x $\boxed{123 \cdot 23^2 4 = 12323^2 4 = 134 \text{ x}}$

el carré ne disparait pas?? pq - pq es modulo 3!

$(123)(123)$ $\quad (123)^2 = 1^2 2^2 3^2$

$\bullet\ (123)(123) = (123)^2 = 1^2 2^2 3^2$

$\bullet\ (23^24)(23^24) = (23^24)^2 = 2^2 3 4^2$

$\bullet\ (123)(23^24) = 12^24$

$\bullet\ (123)(2^2 3 4^2) = 13^2 4^2$

$(23^24)(1^2 2^2 3^2) = 1^2 3 4$

$(1^2 2^2 3^2)(2^2 3 4^2) = 1^2 2 4^2$

Conclusion: $G = \{1^2 2^2 3^2,\ 2^2 3 4^2,\ 12^2 4,\ 13^2 4^2,\ 1^2 3 4,\ 1^2 2 4^2,\ 123,\ 23^2 4,\ \mathbb{1}\}$

$|G| = 9$

il n'ya pas de générateur cassé

$\Rightarrow$ On en deduit que ce plan est bien orthogonal, il s'agit d'une fraction régulière de type 3^{4-2}_{III} où h^{m-q}_{III}

On construit la matrix, en tenant en compte $\mathbb{1} = 123$. et $\mathbb{1} = 23^2 4$

esto en lenguaje aditivo nos da el sistema

$$\begin{cases} X_1 + X_2 + X_3 \equiv 0_{[3]} \\ X_2 + 2X_3 + X_4 \equiv 0_{[3]} \end{cases}$$

$\mathbb{1} = 23^2 4$

grace au $2^{ème}$ generator

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

on doit résoudre les deux au même temp!

$\rightarrow$ si je commence par 1,1 pour resoudre $X_1 + X_2 + X_3 \equiv 0_{[3]}$ alors je dois remplir 1 en X_3, y completo para que el 2° generador también se cumpla

de manera simultánea

b) $m = 4$, avec $h = 3$ et $\mathbb{1} = 123 = 2^2 3^2 4$ $q = 2$

Cherchons le groupe G, constitué ici pour $|G| = 9 = h^q = 3^2$

$(2^2 3^2 4)(2^2 3^2 4) = 234^2$

$\bullet\ (123)(234^2) = 12^2 3^2 4^2$

$\bullet\ (2^2 3^2 4)(1^2 2^2 3^2) = 1^2 2 3 4$

$(123)^2 = 1^2 2 3^2$

$(123)(2^2 3^2 4) = 14$!

$\bullet\ (123)^2 (234^2) = 1^2 4^2$

$\Rightarrow G = \{ 234^2, 1^2 2^2 3^2, 14, 12^2 3^2 4^2, 1^2 234, 1^2 4^2, 123, 2^2 3^2 4, 11 \}$, $|G| = 9$ ✓ checked

On a ici une fraction régulière de résolution II, donc inutilisable

A nivel od. tivo los generadores nos dan:

$$x_1 + x_2 + x_3 \equiv 0_{[3]}$$ → le module est donné par h, # de modalités!

$$2x_2 + 2x_3 + x_4 \equiv 0_{[3]}$$

Observons que les colonnes C_1 et C_4 sont liées

Problème !

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Al observar la matriz notamos que efectivamente no es ortogonal

c) $m = 3 \quad h = 4 \quad q = 1 \quad \mathrm{I} = 123, \quad \mathrm{I} = (123)^2, \quad |G| \geq h^q = 4^1 = 4$

on ne peut pas assumir la taille de G, il sera au moins h^q

$G = \{ 11, 123, (123)^2, (123)^3 \}$ avec $|G| = 4$ dans ce cas $|G| = h^q$

On doit avoir $x_1 + x_2 + x_3 \equiv 0_{[h]} \equiv 0_{[4]}$, tendremos m columnas

on peut prendre des valeurs en $\{0, 1, 2, 3\}$

Plan orthogonal en $n = 16$ expériences

$$n = h^{m-q} = 4^{3-1} = 4^2$$

$\mathbb{Z}/\mathbb{Z}_4$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 3 \\ 3 & 0 & 1 \\ 3 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Matrix orthogonal

$m = 3 \quad h = 4 \quad q = 1 \quad \Pi = (123)^2$

Para el 2^{do} caso con el generador, $2x_1 + 2x_2 + 2x_3 \equiv 0_{[4]}$ notemos que al generar G, este no es de tallo 4, lo cual paso pues $h=4$ no es primo

Attention $G = \{11, 1^2 2^2 3^2\}$ G n'est pas de taille h^q parce que h n'est pas premier! Ici D va avoir 32 expériences

$$= \frac{4^3}{|G|} = \frac{4^3}{2} = 32 \qquad h = \frac{h^m}{|G|} \qquad n = \prod_{i=1}^{m} h_i \overset{\text{dans ce cas}}{=} h^m$$

Funciona, sin embargo 32 no es de gran ayuda comparando contra el plan completo de 64