

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA

Faculté des Sciences

Département de mathématiques

MEMOIRE DE MAGISTER

en Mathématiques

Spécialité : Modélisation mathématiques pour l'aide à la décision



**PROPOSITION DE PLANS D'EXPERIENCES DANS
LA METHODOLOGIE DE LA RECHERCHE
EXPERIMENTALE : ETUDE ET PROGRAMMATION**

Par

Hichem EL MOSSAOUI

Devant le jury composé de

M. Bezzina	Professeur, U. de Blida	Président
A. BERRACHEDI	Professeur, U.S.T.H.B., Alger	Examineur
A. Hadj Sadok	Chargé de cours, U. de Blida	Examineur
R. Phan-Tan-Luu	Professeur, U. d'Aix-Marseille III	Invité d'Honneur
F. Hannane	Maître de conférences, U. de Blida	Rapporteur

Blida, Décembre 2004

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA

Faculté des Sciences

Département de mathématiques



MEMOIRE DE MAGISTER

en Mathématiques

Spécialité : Modélisation mathématiques pour l'aide à la décision

**PROPOSITION DE PLANS D'EXPERIENCES DANS
LA METHODOLOGIE DE LA RECHRECHE
EXPERIMENTALE : ETUDE ET PROGRAMMATION**

Par

Hichem EL MOSSAOUI

Devant le jury composé de

M. Bezzina	Professeur, U. de Blida	Président
A. BERRACHEDI	Professeur, U.S.T.H.B., Alger	Examineur
A. Hadj Sadok	Chargé de cours, U. de Blida	Examineur
R. Phan-Tan-Luu	Professeur, U. d'Aix-Marseille III	Invité d'Honneur
F. Hannane	Maître de conférences, U. de Blida	Rapporteur

Blida, Décembre 2004

ملخص

إن طريفة المنهج التجريبي هي فرع من الرياضيات حديثة العهد، و هي جزء من علم الإحصاء. تستعمل كثيرا من قبل الباحثين و الصناعيين من أجل تخطيط تجاربهم، نمذجة النتائج و إنجاز التحاليل.

يهدف البحث المقدم في هذه الأطروحة: أولا إلى تطوير برنامج بلغة Delphi، حيث تمت برمجة و كتابة ثمانية مناهج تجريبية كلاسيكية و ثانيا محاولة اقتراح منهجين تجريبيين.

إن الحصول على برنامج خاص يسهل بشكل هائل استعمال طريقة المنهج التجريبي، نمذجة و تحليل النتائج. إضافة إلى إمكانية تطوير هذا البرنامج بإضافة خصائص أخرى.

RESUME

La Méthodologie de la recherche expérimentale est une discipline des mathématiques relativement récente, faisant partie des statistiques. Elle est très utilisée aussi bien par les chercheurs que par les industriels pour planifier leurs expériences, modéliser les résultats et effectuer leurs analyses.

Ce travail comporte deux objectifs : développement d'un logiciel où huit plans d'expériences classiques ont été programmés et décrits et une proposition de deux plans d'expériences présentant des avantages pour les critères d'optimalité.

L'utilité d'avoir son propre logiciel est évidente. La planification des expériences que nous aurons à effectuer, la modélisation et l'analyse des résultats se trouveront considérablement facilités. On peut également améliorer ultérieurement ce logiciel en ajoutant d'autres options.

ABSTRACT

Experimental search methodology is recent mathematical discipline and part of statistics. This methodology is designed and used by many industrialist or the searchers for the organization of their experiences and analysis.

This work contains tow objectives : the development of logiciel form witch eight classical experimental designs were programmed and described and a proposition of tow experimental designs.

The benefit to have a self logiciel of each one is very evident. To make easier the organization of experiences which we will effect, the modelisation and the analysis of result, we can also improve this Logiciel for adding other options.

REMERCEMENTS

Tous d'abord, je tiens à remercier Dieu tout puissant pour m'avoir préservé, donné la santé et guidé vers la connaissance et le savoir.

Je remercie vivement mon promoteur, **M^r F. Hannane** maître de conférences à l'université de Blida pour m'avoir encadré et guidé tout le long de ce travail et pour les nombreux conseils, les informations et la bibliographie qu'il m'a fournis sur les plans d'expériences.

Je suis très sensible à l'honneur que me fait le professeur **M. Bezzina**, doyen de la faculté des sciences, en acceptant de présider le jury.

J'adresse mes plus vifs remerciements à **M^r A. Berrachedi** professeur à l'Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, d'avoir bien voulu accepter d'être examinateur de ma thèse.

Je remercie très respectueusement **M^r A. Hadj sadok** chargé de cours au département de chimie industrielle pour avoir accepté de faire partie du jury.

J'exprime aussi ma profonde gratitude à **M^r R. Phan-Tan-Luu**, professeur à l'Université d'Aix-Marseille III, pour nous avoir fait l'honneur de leur présence lors de la *soutenance de ce mémoire*.

Mes remerciements vont également à tout le personnel administratif, pédagogique, technique et, sécuritaire du département de mathématiques de l'Université de Blida.

Je tiens enfin à présenter mes remerciements les plus chaleureux à ma famille, mes amis et mes collègues pour leur soutien moral.

TABLE DES MATIERES

RESUME	1
REMERCEMENTS	2
TABLE DES MATIERES	3
LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX	5
INTRODUCTION	9
1. GENERALITES, METHODE et MODELES POUR PLANS D'EXPERIENCES	12
1.1. Historique	12
1.2. Limites des méthodes traditionnelles d'essais	13
1.3 La Méthode des plans d'expériences	14
1.4. Notion d'espace expérimental	15
1.5. Notion de modélisation mathématique	19
1.6. Système d'équations	21
2. REGRESSION MLR, PLS ET VALIDATION DU MODELE	22
MATHEMATIQUE	
2.1. Régression multilinéaire MLR (Multilinear Regression)	22
2.2. Régression PLS (Partial Least Squares Regression)	28
2.3. Evaluation de la qualité des modèles	36
3. TRANSMISSIONS DES ERREURS ET CRITERES D'OPTIMALITE	41
3.1. Transmissions des erreurs	41
3.2. Critères d'optimalité	44
4. ETUDE DE DIVERS PLANS D'EXPERIENCES	49
4.1. Plans factoriels complets à deux niveaux	49
4.2. Plans factoriels fractionnaires à deux niveaux	58
4.3. Plans de Mozzo	65
4.4. Plans factoriels complets à trois niveaux	68
4.5. Plans Composites	70
4.6. Plans de Box-Behnken	76

4.7. Plans de Doehlert	80
4.8. Plans de Roquemore	83
5. PROPOSITION DE DEUX NOUVEAUX PLANS D'EXPERIENCES	89
5.1. Premier plan proposé	89
5.2. Deuxième plan proposé	91
6. DESCRIPTION DU LOGICIEL	100
6.1. Démarrage	100
6.2. Description de la barre des menus	103
CONCLUSION	113
APPENDICE	
A. Liste des symboles	115
REFERENCES	118

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1.1	Seule la variables x_i prends des niveaux différents, les autres variables étant fixées à des niveaux bien définies	13
Figure 1.2	Domaine de variation du facteur	15
Figure 1.3	Définition de l'espace expérimental	15
Figure 1.4	Niveaux des facteurs définissant des points expérimentaux dans l'espace expérimental	16
Figure 1.5	Définition du domaine d'étude	16
Figure 1.6	Définition de surface de réponse	17
Figure 1.7	La théorie des plans d'expériences montre que les meilleurs emplacement sont les sommets A, B, C et D du domaine d'étude	18
Figure 2.1	Droite des moindres carrés	23
Figure 3.1	Ellipsoïde de confiance	45
Figure 4.1	Domine d'étude d'un plan 2^2	51
Figure 4.2	Domaine expérimental d'un plan 2^3	51
Figure 4.3	Effet du facteurs 1	53
Figure 4.4	Domaine d'étude du plan de Mozzo pour deux facteurs	66
Figure 4.5	Domaine d'étude du plan de Mozzo pour trois facteurs	67
Figure 4.6	Domaine d'étude pour un plan 3^2	69
Figure 4.7	Domaine d'étude pour un plan 3^3	70
Figure 4.8	Plan composite pour l'étude de deux facteurs	71
Figure 4.9	Plan de Box-Behnken pour trois facteurs	76
Figure 4.10	Plan de Doehlert pour l'étude de deux facteurs	81
Figure 4.11	Emplacement des points expérimentaux du plan de Roquemore 311A	85
Figure 5.1	Domaine expérimental pour deux facteurs	89
Figure 5.2	Domaine expérimental pour deux facteurs	92
Figure 6.1	Icône du logiciel	100

Figure 6.2	Fenêtre d'ouverture	101
Figure 6.3	Fenêtre d'accueil	101
Figure 6.4	Barre du menu, Barre des outils	102
Figure 6.5	Menu Fichier	103
Figure 6.6	Nom de l'étude	104
Figure 6.7	Introduction des facteurs	104
Figure 6.8	Introduction des réponses	104
Figure 6.9	Nombre de points au centre	104
Figure 6.10	Objectifs	105
Figure 6.11	Plan d'expériences et introduction des réponses	106
Figure 6.12	Choix de la réponses à étudier	106
Figure 6.13	Menu Analyse	106
Figure 6.14	Menu Affichage	107
Figure 6.15	Graphes des effets	107
Figure 6.16	Coefficients du modèle	107
Figure 6.17	Histogramme des coefficients	108
Figure 6.18	Analyse de la variances	108
Figure 6.19	Analyse des résidus	109
Figure 6.20	Isoréponses par traits	109
Figure 6.21	Isoréponses par intervalles	110
Figure 6.22	Surface de réponses	110
Figure 6.23	Courbes de niveau de la fonction d'erreur de prédiction	110
Figure 6.24	Isoréponses par traits pour plusieurs réponses	111
Figure 6.25	Matrice des corrélations	111
Figure 6.26	Graphe des réponses observées en fonction des réponses prédites	112
Figure 6.27	Voir	112
Figure 6.28	Aide	112
Tableau 1.1	Matrice d'expériences	19
Tableau 2.1	Présentation des résultats d'essais pour une régression simple	23
Tableau 2.2	Présentation des résultats d'essais pour une régression multiple	24
Tableau 4.1	Matrice d'expériences d'un plan 2^2	50

Tableau 4.2	Matrice d'expériences d'un plan 2^3	50
Tableau 4.3	Matrice des effets pour un plan 2^2	53
Tableau 4.4	Matrice des effets d'un plan 2^3	54
Tableau 4.5	Matrice des expériences (étude d'une émulsion de bitume)	59
Tableau 4.6	Comparaison des effets calculés	59
Tableau 4.7	Matrice de calcul des contrastes pour les deux demi plans fractionnaires	61
Tableau 4.8	Plans de Mozzo pour 2, 3 et 4 facteurs	66
Tableau 4.9	Matrice d'expériences pour un plan 3^2	69
Tableau 4.10	Matrice d'expériences d'un plan composite pour deux facteurs	72
Tableau 4.11	Plan de Box-Behnken pour trois facteurs	77
Tableau 4.12	Plan de Box-Behnken pour quatre facteurs	77
Tableau 4.13	Plan de Box-Behnken pour six facteurs	80
Tableau 4.14	Plan de Box-Behnken pour sept facteurs	80
Tableau 4.15	Matrice d'expériences d'un plan de Doehlert pour deux facteurs	81
Tableau 4.16	Plan de Doehlert pour deux à quatre facteurs	82
Tableau 4.17	Plan de Roquemore 311A pour trois facteurs	84
Tableau 4.18	Plan de Roquemore 311B pour trois facteurs	87
Tableau 4.19	Plan de Roquemore 416B pour quatre facteurs	87
Tableau 4.20	Plan de Roquemore 416C pour quatre facteurs	88
Tableau 5.1	Matrice d'expériences pour deux facteurs	90
Tableau 5.2	Comparaison des caractéristiques du premier plan proposé avec le plan factoriel à deux niveaux et le plan de Mozzo	91
Tableau 5.3	Matrice d'expériences pour deux facteurs	92
Tableau 5.4	Caractéristiques du deuxième plan proposé à deux facteurs en fonction de α	94
Tableau 5.5	Caractéristiques des plans d'expériences classiques à deux facteurs	95
Tableau 5.6	Comparaison des caractéristiques des plans d'expériences classiques avec le deuxième plan proposé pour trois facteurs	96
Tableau 5.7	Comparaison des caractéristiques du plan composite avec le deuxième plan proposé pour deux facteurs	98
Tableau 5.8	Comparaison des caractéristiques des plans d'expériences classiques	99

avec le deuxième plan proposé pour trois facteurs

Tableau 6.1 Plans d'expériences et résultats

103

INTRODUCTION

La Méthodologie de la Recherche Expérimentale (Méthode des Plans d'Expériences) sont utiles à toutes les personnes qui entreprennent des recherches scientifiques ou des études industrielles. L'emploi des plans d'expériences pour l'étude empirique d'une loi de réponse pose aux statisticiens ou aux chercheurs des problèmes particuliers. Alors qu'ils ont peu d'informations sur cette loi, ils ne peuvent disposer en général que d'un échantillon d'observations très limité au regard du nombre des paramètres des modèles qu'ils peuvent envisager pour leurs analyses. Avant toute observation de la réponse il doit donc préciser, non seulement quels modèles utiliser, mais encore, comment organiser les expériences. En effet, la qualité de l'analyse statistique dépend étroitement du plan expérimental utilisé pour observer la réponse. Par ailleurs, il faut généralement recourir à l'analyse combinatoire pour construire les plans d'expériences proposés.

Pour proposer une solution répondant aux objectifs industriels, il est donc parfois nécessaire de chercher l'information manquante en réalisant un ensemble d'expériences. Les décisions importantes prises à partir des résultats expérimentaux et le coût non négligeable d'une expérimentation interdisent de laisser à la seule intuition de l'expérimentateur la recherche de la solution du problème. Il est nécessaire d'utiliser une approche méthodologique qui permet non seulement de réduire le coût de l'expérimentation, mais aussi d'établir une organisation optimale des expériences.

Le but de la méthode des plans d'expériences est de proposer une ou plusieurs stratégies pour résoudre un problème particulier posé par la recherche expérimentale.

Dans notre travail, les principes généraux de construction des plans d'expériences sont présentés à partir de la notion d'espace expérimental. La représentation géométrique des points expérimentaux est très parlante mais elle est vite limitée lorsque la dimension de l'espace augmente. C'est pourquoi l'on utilise la représentation matricielle. A l'aide des deux représentations, géométrique et matricielle, les principaux plans d'expériences sont

décrits : **plans factoriels complets à deux niveaux, plans fractionnaires, plans de Mozzo, plans factoriels complets à trois niveaux, plans composites, plans de Box-Behnken, plans de Doehlert et plans Hybrides.**

La diversité des plans d'expériences proposés dans la littérature vient du fait qu'il n'existe pas un plan parfait où tous les critères d'optimalité sont vérifiés en même temps. Chaque plan présente des avantages pour un certain critère d'optimalité et un inconvénient pour un autre. Il s'agira donc de trouver un compromis pour les besoins de chaque étude. C'est pour ces raisons que, dans notre travail, nous avons également proposé deux plans qui essayent d'améliorer les critères d'optimalité. Une comparaison avec d'autres plans décrits dans la littérature a été effectuée pour les besoins de chaque étude et chaque utilisateur.

Un logiciel appelé HIDE1 a été établi. Il permet la construction des huit plans énoncés ci-dessus, de donner le modèle, les graphes représentatifs ainsi que l'analyse et les résultats numériques permettant de mener à bien une étude expérimentale.

Les principales notions développées dans la Méthodologie de la Recherche Expérimentale, ont été abordées au premier chapitre.

Dans le second chapitre deux méthodes de régression différentes MLR (Multilinear Regression) et PLS (Partial Least Square Regression) ont été décrites. Elles ont été utilisées dans le logiciel, afin de calculer les coefficients du modèle. Pour valider ce dernier, un rappel sur les outils statistiques a été effectué (Analyse de la variance; Analyse des résidus etc...).

Les importantes notions de transmission des erreurs aux coefficients du modèle et donc aux réponses prédites ainsi que les critères d'optimalité ont été également décrites au chapitre trois.

Le chapitre quatre est consacré à la description de huit plans classiques ayant fait l'objet de l'établissement du logiciel. Les deux proposés sont décrits au cinquième chapitre.

Enfin la description du logiciel élaboré a été abordée au chapitre six.

CHAPITRE 1

GENERALITES, METHODE ET MODELES POUR PLANS D'EXPERIENCES

1.1. Historique

La méthode des plans d'expériences est à la fois nouvelle et ancienne [1]. Les scientifiques n'ont abordé ce sujet que depuis peu d'années. Les premiers qui se sont penchés sur ce problème sont des agronomes et des statisticiens. Les techniques et les notions qu'ils ont développées sont si générales qu'elles peuvent être utilisées dans beaucoup de domaines. Cette méthode est récente puisqu'on peut la faire démarrer avec les travaux de **R.A .Fisher** (début de vingtième siècle). Aussi bizarre que cela paraisse, elle ne porte pas encore de nom [2]. Les chercheurs ont proposés **Expérimentique** ou **Expérimentologie**. Après 1945, les plans d'expériences suscitent de nombreuses publications et recherches dans le monde anglo-saxon. Des statisticiens comme **Yate**, **Youden**, **Cochran**, **Plackett** et **Burman**, et bien d'autres, enrichissent et divulguent la méthode. **Box** et **Hunter**, s'appuyant notamment sur les travaux de **Yate**, développent des méthodes particulières de construction de **plans fractionnaires à deux niveaux**. A partir des années 50, en s'attaquant à l'amélioration de la qualité, le Japon imprime un nouveau souffle. **Taguchi** et **Masuyama** élaborent des tables permettant de construire des **plans d'expériences orthogonaux** adaptés à la majorité des problèmes industriels. Ces tables ont été publiées en 1959 et 1961. Par la suite les méthodes initiées par **Taguchi** se sont répandues aux Etats-unis puis en Europe. Il faut signaler l'existence sur le marché de logiciels de plus en plus conviviaux destinés à la construction et à l'analyse des plans d'expériences. Il faut noter cependant que si ces logiciels déchargent l'utilisateur de certains calculs parfois fastidieux, ils ne permettent pas de poser le problème. En d'autres termes les logiciels ne doivent être utilisés qu'après une solide formation à la méthode. Autrement les risques de fausses conclusions seront importantes.

1.2. Limites des méthodes traditionnelles d'essais

1.2.1. Etude d'un phénomène

L'étude d'un phénomène peut se schématiser de la manière suivante: l'expérimentateur s'intéresse à une grandeur, par exemple le rendement en blé d'une parcelle de terre, le prix de revient d'un produit chimique ou l'usure d'une pièce de moteur automobile. Cette grandeur dépendra d'un grand nombre de variables. Le rendement en blé sera fonction de la nature du terrain, de la qualité d'engrais incorporé, du climat, de l'exposition au soleil, etc... Sous une forme mathématique, on peut écrire que la grandeur d'intérêt y est une fonction de plusieurs variables x .

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k) \quad (1.1)$$

L'étude du phénomène se ramène alors à la mesure de la grandeur en fonction des différentes valeurs que l'on peut donner aux variables. Nous allons décrire rapidement la méthode classique pour étudier la fonction (1.1).

1.2.2. La méthode classique et ses inconvénients

Traditionnellement, les essais sont effectués de manière séquentielle [3] en faisant varier les variables l'une après l'autre sans planification préalable de l'ensemble des essais à réaliser. On fixe le niveau de toutes les variables sauf une (variable x_i) et l'on mesure la grandeur y correspondant différents niveaux de cette dernière.

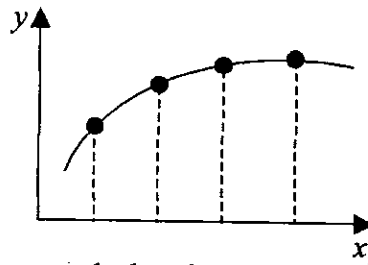


Figure 1.1 : Seule la variable x_i prends des niveaux différents, les autres variables étant fixées à des valeurs bien définies

A la fin de l'expérimentation à l'aide de cette première variable, on peut tracer une courbe représentative de $y = f(x_i)$ (Figure 1.1). On peut refaire la même expérience avec chacune des autres variables. Si l'on désire étudier simplement sept variables et que l'on décide de prendre cinq points expérimentaux par variable, il faut exécuter $5^7 = 781125$ expériences. Ce chiffre représente un travail gigantesque qui dépasse les limites du

faisable. L'expérimentateur doit réduire le nombre des essais et il n'a, à sa disposition, que deux attitudes possibles :

- Diminuer le nombre de points expérimentaux : pour trois points au lieu de cinq par variable, nous aurons $3^7=2187$ expériences à réaliser. Pour deux points, il faut $2^7=128$ expériences, ce qui est encore important et dépasse souvent les budgets disponibles ou le temps que l'on peut consacrer à l'étude.
- Diminuer le nombre de variables. Pour quatre variables prenant chacune trois valeurs, il faudra exécuter $3^4=81$ essais.

Sans parler du grand nombre d'essais qu'il faut réaliser avec cette méthode, il est difficile d'obtenir l'optimum de cette fonction et impossible d'obtenir les interactions entre les facteurs. On mesure les inconvénients de cette approche quand sont en jeu des risques liés à la sécurité ou des montants financiers importants. C'est pourquoi nous allons examiner la méthode des plans d'expériences.

1.3. La méthode des plans d'expériences

La différence capitale avec la méthode classique tient au fait que l'on fait varier, à la fois, les niveaux de toutes les variables à chaque expérience, mais de manière programmée et raisonnée. Aussi choquant que cela paraisse au premier abord, le fait de faire varier toutes les variables à la fois n'est pas un inconvénient mais au contraire offre de nombreux avantages parmi lesquels :

- Diminution du nombre des essais
- Nombre de facteurs étudiés peut être très grand
- Détection des interactions entre facteurs
- Meilleure précision sur les résultats
- Modélisation des résultats et l'obtention de l'optimum

Les plans d'expériences permettent l'étude de nombreux facteurs tout en maintenant le nombre des essais à des valeurs raisonnables. Une de leurs applications principales est la recherche des facteurs influents. La compréhension de la méthode des plans d'expériences s'appuie sur deux notions essentielles, celle d'espace expérimental et celle de modélisation mathématique des grandeurs étudiées [4].

1.4. Notion d'espace expérimental

1.4.1. Réponses, facteurs, niveaux

- La grandeur d'intérêt mesurée à chaque essai est appelée la réponse. La valeur de cette réponse, dépend de plusieurs variables. Au lieu de terme variable nous emploierons le mot facteur.
- Le premier facteur peut être représenté par un axe gradué et orienté (Figure 1.2). La valeur donnée à un facteur pour réaliser un essai est appelée niveau. Lorsque l'on étudie 'influence' un facteur, en général, on limite ses variations entre deux bornes (borne inférieure c'est le niveau bas ; borne supérieure c'est le niveau haut).

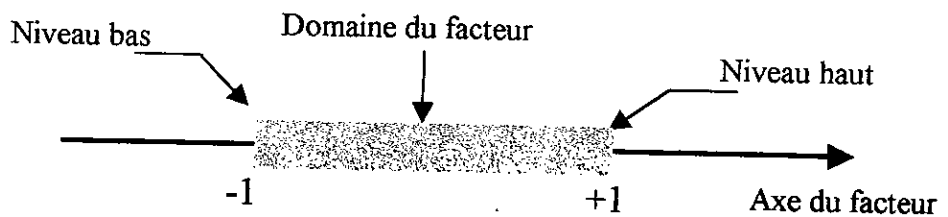


Figure 1.2 : Domaine de variation du facteur

- L'ensemble de toutes les valeurs que peut prendre le facteur entre le niveau bas et le niveau haut, s'appelle le domaine de variation du facteur. On a l'habitude de noter le niveau bas par -1 et le niveau haut par +1.
- S'il y a un second facteur, il est représenté, lui aussi, par un axe. On définit, comme pour le premier facteur, son niveau bas, son niveau haut et son domaine de variation. Ce second axe est disposé orthogonalement au premier. On obtient ainsi un repère cartésien qui définit un espace euclidien à deux dimensions. Cet espace est appelé l'espace expérimental (Figure 1.3).

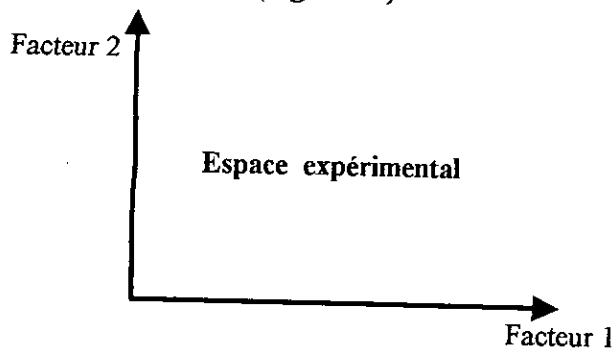


Figure 1.3 : Définition de l'espace expérimental

- Le niveau x_1 du facteur 1 et le niveau x_2 du facteur 2 peuvent être considérés comme les coordonnées d'un point de l'espace expérimental (Figure 1.4).

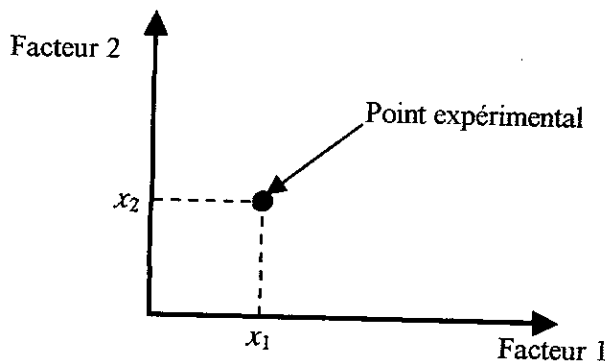


Figure 1.4 : Niveaux des facteurs définissant des points expérimentaux dans l'espace expérimental

Une expérience donnée est alors représentée par un point dans ce système d'axes. Un plan d'expériences est représenté par un ensemble de points expérimentaux.

1.4.2. Domaine d'étude, surface de réponse

- La réunion des domaines de chaque facteur définit le domaine d'étude. Ce domaine d'étude est la partie de l'espace expérimental retenu par l'expérimentateur pour faire ses essais. Une étude, c'est à dire un ensemble d'expériences bien définies, est représentée par une série de points disposés dans le domaine d'étude. Cette manière de représenter une expérimentation par un ensemble de points dans un espace cartésien est une représentation géométrique de l'étude (Figure 1.5).

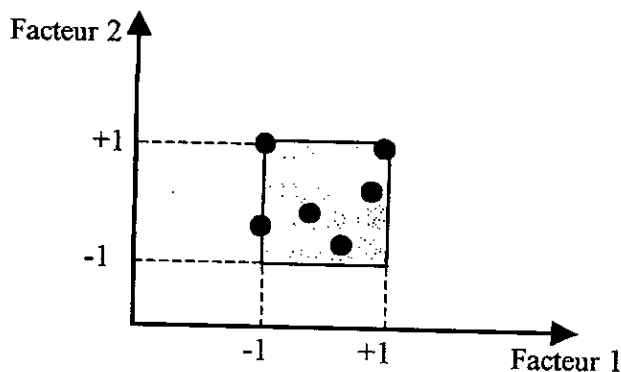


Figure 1.5 : Définition du domaine d'étude

- La représentation géométrique de la réponse s'effectue donc dans un espace ayant une dimension de plus que celle de l'espace expérimental. A l'ensemble de tous les points du domaine d'étude correspond un ensemble de réponses qui se localisent sur une surface appelée surface de réponse (Figure 1.6).

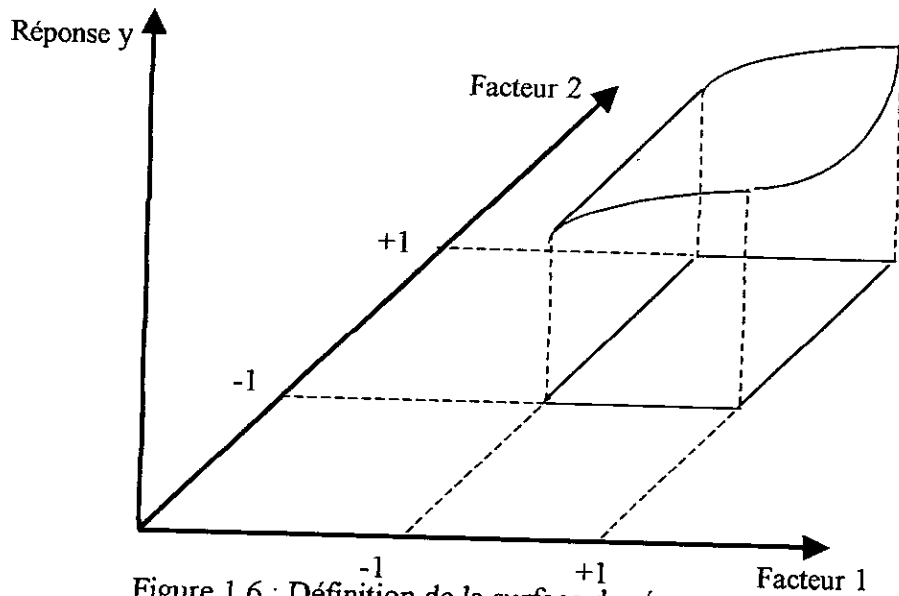


Figure 1.6 : Définition de la surface de réponse

1.4.3. Coordonnées centrées réduites

Lorsqu'on attribue la valeur -1 au niveau bas d'un facteur et la valeur $+1$ au niveau haut, on effectue deux modifications importantes :

- on déplace l'origine des mesures
- on change l'unité des mesures

Ces deux modifications entraînent l'introduction de nouvelles variables que l'on appelle variables centrées réduites, centrées pour indiquer le changement d'origine et réduites pour signaler la nouvelle unité. Le passage des variables d'origine z aux variables centrées réduites x (variables sans dimensions), et inversement, est donné par la formule suivante :

$$x = \frac{z - z_0}{pas}$$

Où $z_0 = (\text{niveau haut} + \text{niveau bas})/2$

$pas = (\text{niveau haut} - \text{niveau bas})/2$

L'intérêt des variables centrées réduites est de pouvoir présenter les plans d'expériences de la même manière quels que soient les domaines d'études retenus et quels que soient les unités des facteurs. La théorie des plans d'expériences présente ainsi une grande généralité [2].

1.4.4. Plans d'expériences

Chaque point du domaine d'étude représente des conditions opératoires possibles, donc une expérience que l'opérateur peut réaliser.

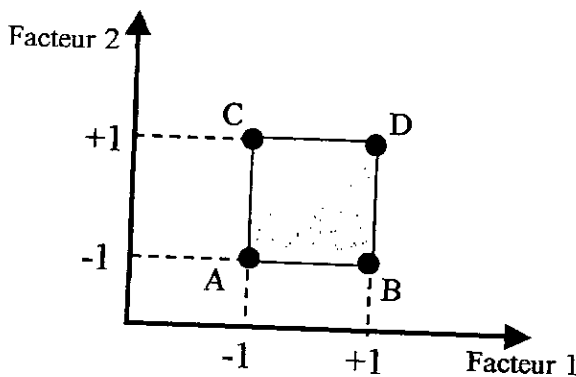


Figure 1.7 : La théorie des plans d'expériences montre que les meilleurs emplacements sont les sommets A, B, C et D du domaine d'étude

Le choix du nombre et de l'emplacement des points d'expériences est le problème fondamental des plans d'expériences. On a l'habitude d'appeler plans d'expériences des ensembles de points expérimentaux répondant à des propriétés bien précises. Ce sont les plans d'expériences classiques. Ils sont connus et largement publiés. Lorsque les points expérimentaux sont disposés autrement que dans les plans d'expériences classiques, on parle de plans non conventionnels. Leurs propriétés sont le plus souvent moins bonnes que celles des plans classiques. Mais ce sont des plans que l'on rencontre car il n'est pas toujours possible de respecter les impératifs des plans d'expériences classiques [5].

1.4.5. Matrice d'expériences

La représentation géométrique d'un plan d'expériences est commode pour imaginer la position des points expérimentaux dans le domaine d'étude. Mais elle ne peut plus être employée dès que le nombre de facteurs est supérieur à deux. Pour les espaces multidimensionnels, nous adopterons une représentation sous forme de tableau ou matrice d'expériences. La matrice d'expériences (Tableau 1.1) définit les essais à réaliser. Le terme essai est l'équivalent de point d'expérience.

Tableau 1.1 : Matrice d'expériences

N° essai	Facteur 1	Facteur 2
1(A)	-1	-1
2(B)	1	-1
3(C)	-1	1
4(D)	1	1

1.5. Notion de modélisation mathématique

Le modèle est une relation entre les facteurs x_1, x_2, \dots, x_k et la réponse que l'on désire étudier. La fonction $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ correspondant à une surface de réponse (appelée hyper surface si $k \geq 3$) est trop générale et il est d'usage d'en prendre un développement limité de Taylor [4]. Si les dérivées du développement de Taylor peuvent être considérées comme constantes, le développement précédent prendra la forme d'un polynôme de degré plus ou moins élevé :

$$y = a_0 + \sum a_i x_i + \sum a_{ij} x_i x_j + \sum a_{ii} x_i^2 + \dots$$

- y est la grandeur à laquelle s'intéresse l'expérimentateur
- x_i représente le niveau attribué au facteur i . C'est la valeur de la coordonnée centrée réduite du facteur i retenue par l'expérimentateur pour réaliser un essai. Cette valeur est parfaitement connue
- $a_0, a_i, a_{ij}, a_{ii}, \dots$ sont les coefficients du modèle. Ils ne sont pas connus et doivent être calculés à partir des résultats des expériences.

1.5.1. Intérêt de la représentation polynomiale

La représentation polynomiale de la réponse permet l'utilisation du calcul matriciel, contrairement aux autres formes de la modélisation, d'où son grand intérêt. Elle permet aussi de faire apparaître dans l'expression elle-même de y les effets des facteurs, ainsi que leurs interactions ce qui n'aurait pas été possible si on avait utilisé d'autres fonctions mathématiques telles que : les logarithmes, les exponentielles, etc... Enfin l'usage montre que les polynômes permettent de résoudre la plupart des problèmes et ce sont eux qui ont la faveur des expérimentateurs.

1.5.2. Modèles mathématiques pour plans d'expériences

Les réponses mesurées au cours d'une expérimentation sont des grandeurs aléatoires, qu'il faut traiter d'une manière aléatoire. La réalité doit être prise en compte. Malgré tous les soins que l'on peut prendre, la même expérience ne donnera pas exactement le même résultat à chaque détermination. Chaque mesure est entachée d'une incertitude appelée **erreur expérimentale** ou **erreur de mesure** ou **erreur pure**. Ceci est dû à la variation de certains paramètres qui ne sont pas connus par l'expérimentateur. On peut classer les modèles en 3 catégories [5].

1.5.2.1. Modèle du mathématicien

On exprime la valeur de la réponse en fonction d'une relation mathématique faisant intervenir des coefficients (les a) et les niveaux des facteurs (les x). Le modèle mathématique du mathématicien est caractérisé par l'absence d'erreur expérimentale. Par exemple pour deux facteurs :

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2$$

1.5.2.2. Modèle de l'expérimentateur

Deux compléments doivent être apportés au modèle précédemment écrit. Le premier est le manque d'ajustement ou bien l'erreur d'ajustement. Cette expression traduit le fait que le modèle choisi par l'expérimentateur avant les essais est probablement un peu différent du modèle réel qui régit le phénomène étudié. Il y a un écart entre ces deux modèles. Cet écart est le manque d'ajustement Δ (Lack of Fit). Le second est la prise en compte de la nature aléatoire de la réponse. En effet si l'on mesure plusieurs fois une réponse en un même point expérimental, on n'obtient pas exactement le même résultat. Il y a une dispersion des résultats. Les dispersions ainsi constatées sont appelées **erreurs aléatoires** σ_y . Ces deux écarts sont souvent réunis dans un seul écart, le **résidu**. Le modèle utilisé par l'expérimentateur pour deux facteurs s'écrit alors :

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + \Delta + \sigma_y$$

Ce modèle se compose de trois parties. La première partie est un modèle du mathématicien, la seconde partie est l'écart d'ajustement. L'objectif de l'expérimentateur est de réduire ce terme pour le ramener à une valeur de l'ordre de grandeur de l'erreur expérimentale. La troisième partie est l'erreur aléatoire. Cette erreur est due à la variation des niveaux des facteurs non contrôlés.

1.5.2.3. Modèle du statisticien

Le modèle précédent est trop compliqué pour faire des calculs. On effectue les simplifications suivantes :

- L'erreur d'ajustement entre le modèle choisie à priori et le modèle réel est supposée négligeable
- Les erreurs aléatoires sont issues d'une même population, pour tout le domaine d'étude

Il s'agit de valeurs ayant la même moyenne, le même écart type et provenant de la même Distribution. Il faut bien voir que les valeurs de l'erreur sont différentes les unes des autres, Puisqu'elles résultent de tirages au hasard dans une population donnée. Pour un modèle polynomial du second degré à deux facteurs, le modèle de statisticien s'écrit :

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + \sigma_y$$

1.6. Système d'équations

Chaque point expérimental apporte une valeur de la réponse. Or cette représentation est modélisée par un polynôme dont les coefficients sont les inconnues qu'il faut déterminer. A la fin du plan d'expériences, on a un système de N équations (s'il y a N essais) à q inconnues (s'il y a q coefficients dans le modèle choisi à priori). Ce système s'écrit d'une manière simple en notation matricielle :

$$y = X A + \varepsilon \tag{1.2}$$

Avec :

y : Vecteur des réponses

X : Matrice de calcul, qui dépend des points expérimentaux choisis pour exécuter le plan et du modèle postulé

A : Vecteur des coefficients

ε : Vecteur des résidus

Ce système ne peut pas, en général, être résolu simplement car le nombre d'équations est inférieur au nombre d'inconnues. En effet, il y a N équations et $q + N$ inconnues. Cette résolution ne peut pas être menée à bien que si l'on utilise une méthode de régression qui introduit q équations supplémentaires. La plupart du temps cette méthode est basée sur le critère **des moindres carrés** qui sera exposé au chapitre suivant.

CHAPITRE 2

REGRESSION MLR, PLS ET VALIDATION DU MODELE MATHEMATIQUE

Dans ce chapitre, nous allons décrire deux méthodes de régression utilisées dans la théorie des plans d'expériences et permettant de calculer les coefficients du modèle mathématique recherché à partir d'un certain nombre d'expériences. La première méthode est une méthode classique et très connue sous le nom de méthode des moindres carrés. La seconde, moins connue et plus récente est contrairement à la précédente, une méthode itérative qui donne également de bons résultats. La validation du modèle obtenu à l'aide de ces deux méthodes de régression est effectuée par une analyse de la variance et une analyse des résidus. Ces deux dernières analyses statistiques seront également décrites dans ce chapitre.

2.1. Régression multilinéaire MLR (Multilinear Régression)

L'objectif est de trouver un ensemble de q coefficients qui résout le mieux possible le système d'équations (1.2).

2.1.1. Principe

La régression multilinéaire est une généralisation de la régression linéaire simple. Dans la régression linéaire simple l'expérimentateur dispose des résultats de N expériences.

Tableau 2.1 : Présentation des résultats d'essais pour une régression simple

x	y
x_1	y_1
x_2	y_2
\vdots	\vdots
\vdots	\vdots
x_i	y_i
\vdots	\vdots
\vdots	\vdots
x_N	y_N

Au cours de l'essai $n^\circ i$, la variable explicative ou le facteur x à la valeur x_i , la réponse mesurée est y_i . Si les points (x_i, y_i) s'alignent correctement dans le plan (x, y) , l'expérimentateur cherchera l'équation de la droite qui s'ajuste au mieux à ces résultats.

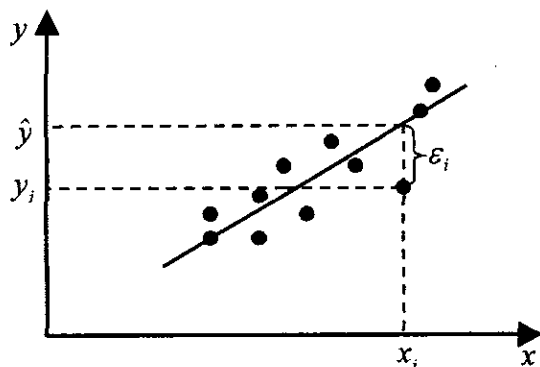


Figure 2.1 : Droite des moindres carrés

Sur la figure 2.1, nous voyons qu'à chaque valeur x_i de x correspondent deux valeurs de la réponse : y_i valeur mesurée et \hat{y}_i valeur donnée par la droite, avec $y_i = \hat{y}_i + e_i$. Cette droite recherchée satisfait au critère des moindres carrés $\sum e_i^2$ minimale. La démarche se généralise au cas où l'expérimentateur désire étudier une réponse y en fonction non plus d'un seul facteur x , mais de K facteurs x_1, x_2, \dots, x_K . Le tableau des résultats d'une régression linéaire multiple est présenté par le tableau 2.2 :

Tableau 2.2 : Présentation des résultats d'expériences pour une régression multiple

x_1	...	x_j	...	x_K	y
x_{11}	...	x_{1j}	...	x_{1K}	y_1
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
x_{i1}	...	x_{ij}	...	x_{iK}	y_i
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
x_{N1}	...	x_{Nj}	...	x_{NK}	y_N

Au cours de l'essai $n^{\circ} i$, le facteur x_1 a la valeur x_{i1} , le facteur x_2 a la valeur x_{i2} , ..., le facteur x_j a la valeur x_{ij} , ..., et le facteur x_K a la valeur x_{iK} . La réponse observée est y_i . L'expérimentateur fait l'hypothèse que la réponse peut être approchée par un modèle linéaire de type :

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_j x_j + \dots + a_q x_q$$

Dans lequel une variable quelconque x_j peut représenter :

- L'un des facteurs x_1, x_2, \dots, x_K
- Une interaction quelconque entre ces facteurs
- Une fonction de ces facteurs : $x_j^2, \log(x_j), \dots$ etc.

Les coefficients a_i du modèle sont estimés par la méthode des moindres carrés.

2.1.2. Hypothèses de la régression multilinéaire

La valeur attendue pour y dans les conditions de l'expérience i , si le modèle ci-dessus est valide est :

$$\eta(y_i) = a_0 + a_1 x_{i1} + a_2 x_{i2} + \dots + a_q x_{iq}$$

En raison des erreurs aléatoires, la valeur y_i obtenue expérimentalement diffère de $\eta(y_i)$ d'une quantité ε_i [6].

$$y_i = \eta(y_i) + \varepsilon_i$$

La méthode des moindres carrés ne nécessite aucune hypothèse sur la distribution des réponses. Cependant, elle possède certaines propriétés intéressantes sous réserve que soient satisfaites le mieux possible les conditions suivantes [7] :

- Les erreurs ε_i doivent être distribuées suivant une loi Normale de moyenne 0 et de variance σ^2 , $N(0, \sigma)$, ce qui s'écrit :

$$E(\varepsilon_i) = 0$$

$$\text{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$$

2.1.3. Estimation des coefficients par la méthode des moindres carrés

Lorsqu'on estime les inconnues a_0, a_1, \dots, a_q par $\hat{a}_0, \hat{a}_1, \dots, \hat{a}_q$ nous pouvons calculer la réponse au point i par :

$$\hat{y}_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{i1} + \hat{a}_2 x_{i2} + \dots + \hat{a}_j x_{ij} + \dots + \hat{a}_q x_{iq}$$

La valeur \hat{y}_i diffère du résultat expérimental y_i de la quantité e_i (de même que les \hat{a}_i sont les estimateurs de a_i , les e_i sont des estimations des ε_i).

$$y_i = \hat{y}_i + e_i.$$

Nous écrirons cette égalité quelque soit i , nous obtenons le système linéaire :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1 = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{11} + \hat{a}_2 x_{12} + \dots + \hat{a}_j x_{1j} + \dots + \hat{a}_q x_{1q} + e_1 \\ y_2 = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{21} + \hat{a}_2 x_{22} + \dots + \hat{a}_j x_{2j} + \dots + \hat{a}_q x_{2q} + e_2 \\ \dots \\ y_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{i1} + \hat{a}_2 x_{i2} + \dots + \hat{a}_j x_{ij} + \dots + \hat{a}_q x_{iq} + e_i \\ \dots \\ y_N = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{N1} + \hat{a}_2 x_{N2} + \dots + \hat{a}_j x_{Nj} + \dots + \hat{a}_q x_{Nq} + e_N \end{array} \right.$$

Nous cherchons les valeurs des \hat{a}_j qui minimisent la somme des carrés des écarts $\sum e_i^2$. Concrètement nous cherchons le modèle linéaire qui passe au plus près de l'ensemble des points expérimentaux. Pour simplifier l'écriture, nous adoptons la notation matricielle :

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_i \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1q} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2j} & \dots & x_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{i1} & \dots & x_{ij} & \dots & x_{iq} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & \dots & x_{Nj} & \dots & x_{Nq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \\ \vdots \\ \hat{a}_j \\ \vdots \\ \hat{a}_q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_0 \\ e_1 \\ \vdots \\ e_i \\ \vdots \\ e_N \end{pmatrix}$$

Le système à résoudre s'écrit : $y = X\hat{A} + e$, et le critère des moindres carrés $'ee$ soit minimale on a :

$$\begin{aligned} 'ee &= '(y - X\hat{A})(y - X\hat{A}) \\ &= '(y - \hat{A}'X)(y - X\hat{A}) \\ &= 'yy - \hat{A}'Xy - 'yX\hat{A} + \hat{A}'XX\hat{A} \\ &= 'yy - 2'\hat{A}'Xy + \hat{A}'XX\hat{A} \end{aligned}$$

Calculons la dérivée de $'ee$ par rapport à l'inconnue \hat{A} :

$$\frac{\partial('ee)}{\partial\hat{A}} = \frac{\partial('yy)}{\partial\hat{A}} - 2\frac{\partial(\hat{A}'Xy)}{\partial\hat{A}} + \frac{\partial(\hat{A}'XX\hat{A})}{\partial\hat{A}}$$

Où :

- $\frac{\partial('yy)}{\partial\hat{A}} = 0$ car $'yy$ ne dépend pas de \hat{A}
- $\frac{\partial(\hat{A}'Xy)}{\partial\hat{A}} = 'Xy$ car $\hat{A}'Xy$ est une forme linéaire en \hat{A}
- $\frac{\partial(\hat{A}'XX\hat{A})}{\partial\hat{A}} = 2'XX\hat{A}$ car $\hat{A}'XX\hat{A}$ est une forme quadratique en \hat{A}

Il vient donc :

$$\frac{\partial('ee)}{\partial\hat{A}} = -2'Xy + 2'XX\hat{A}$$

La valeur de \hat{A} qui minimise $'ee$ doit vérifier :

$$\begin{aligned} \frac{\partial('ee)}{\partial\hat{A}} = 0 &\Rightarrow -2'Xy + 2'XX\hat{A} = 0 \\ &\Rightarrow 'XX\hat{A} = 'Xy \end{aligned}$$

Si la matrice $('XX)^{-1}$ n'est pas singulière on a :

$$\hat{A} = ('XX)^{-1}'Xy \quad (2.1)$$

Cette relation est fondamentale et nous l'utiliserons constamment par la suite. Elle est valable pour tous les modèles polynomiaux quelque soit leur degré et quel que soit le nombre de coefficients. Les coefficients ainsi obtenus sont utilisés pour écrire le modèle mathématique. Ce modèle permet de calculer les réponses (qui sont souvent appelées les réponses prédites \hat{y}) dans tout le domaine d'étude.

$$\hat{y} = X\hat{A}$$

Elles sont très utiles pour faire des prévisions, tracer les diagrammes d'isoréponses, chercher des optimums ou des valeurs bien précises. C'est un précieux outil de prévision.

2.1.4. Propriétés des coefficients

Les coefficients \hat{a}_i sont fonction des résultats expérimentaux et doivent être considérés comme des variables aléatoires, donc nous pouvons calculer leur espérance mathématique ainsi que leur variance.

2.1.4.1. Espérance mathématique des coefficients

D'après la formule (2.1) l'espérance mathématique de \hat{A} a pour expression :

$$\begin{aligned} E(\hat{A}) &= E[({}^tXX)^{-1}{}^tXy] \\ &= ({}^tXX)^{-1}{}^tXE(y) \end{aligned}$$

Car les éléments de X sont considérés comme fixes. En désignant par A le vecteur des coefficients vrais et ε le vecteur des N écarts entre les résultats expérimentaux et les réponses théoriques alors :

$$y = XA + \varepsilon$$

Et

$$\begin{aligned} E(y) &= E(XA + \varepsilon) = E(XA) \\ &= XE(A) \end{aligned}$$

Car $E(\varepsilon) = 0$ par hypothèse. Nous trouvons :

$$E(\hat{A}) = ({}^tXX)^{-1}{}^tXXA = A$$

Le résultat que nous venons d'établir signifie que les distributions des \hat{a}_i sont centrés sur les valeurs vraies a_i .

2.1.4.1. Variance des coefficients

Par définition la variance de \hat{A} est :

$$\text{var}(\hat{A}) = E[(\hat{A} - A) {}^t(\hat{A} - A)]$$

Remplaçons \hat{A} par $({}^tXX)^{-1}{}^tXy$ et y par $XA + \varepsilon$. Nous obtenons :

$$(\hat{A} - A) = ({}^tXX)^{-1}{}^tX(XA + \varepsilon) - A = A + ({}^tXX)^{-1}{}^tX\varepsilon - A = ({}^tXX)^{-1}{}^tX\varepsilon$$

Puisque

$${}^t(\hat{A} - A) = {}^t\varepsilon X ({}^tXX)^{-1}$$

Donc

$$\text{var}(\hat{A}) = E[({}^tXX)^{-1}{}^tX\varepsilon'\varepsilon X({}^tXX)^{-1}] = ({}^tXX)^{-1}{}^tX E(\varepsilon'\varepsilon)X({}^tXX)^{-1}$$

Remplaçons $E(\varepsilon'\varepsilon)$ par $E[(\varepsilon - 0)'(\varepsilon - 0)] = \text{var}(\varepsilon) = \sigma^2$. Nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}\text{var}(\hat{A}) &= ({}^tXX)^{-1}{}^tX\sigma^2X({}^tXX)^{-1} \\ &= \sigma^2({}^tXX)^{-1}{}^tXX({}^tXX)^{-1}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{var}(\hat{A}) = \sigma^2 X({}^tXX)^{-1} \quad (2.2)$$

En multipliant les éléments de la matrice $({}^tXX)^{-1}$ par σ^2 , nous obtenons la matrice de variance-covariance :

$$\text{var}(\hat{A}) = \begin{pmatrix} \text{var}(\hat{a}_0) & \dots & & & \dots & \text{cov}(\hat{a}_q, \hat{a}_0) \\ \vdots & & & & \vdots & \\ \vdots & & \text{var}(\hat{a}_i) & \text{cov}(\hat{a}_j, \hat{a}_i) & \vdots & \\ \text{cov}(\hat{a}_i, \hat{a}_j) & & \text{var}(\hat{a}_j) & & \vdots & \\ \vdots & & & & \vdots & \\ \text{cov}(\hat{a}_0, \hat{a}_q) & \dots & & & \dots & \text{var}(\hat{a}_q) \end{pmatrix}$$

La matrice de variance-covariance ci-dessus est comme $({}^tXX)^{-1}$, une matrice carrée symétrique. Les éléments de la diagonale sont les variances des coefficients, tandis que les termes hors diagonale correspondent aux covariances.

2.2. Régression PLS (Partial Least Squares Regression)

La régression PLS relève d'une toute autre stratégie. C'est une méthode d'analyse des données. Elle a été proposée par World, Albano, Dunn, Esbensen, Hellberg, Johansson et Sjöström en 1983 [8]. A la différence de la régression MLR qui calcule les coefficients au cours d'une seule itération, la méthode PLS est une méthode qui améliore la qualité de l'ajustement à chaque nouvelle itération.

2.2.1. Algorithme de la régression PLS

On cherche à réaliser une régression d'une variable à expliquer y sur des variables explicatives x_1, x_2, \dots, x_k qui peuvent être hautement corrélées entre elles. Par ailleurs les coefficients de régression doivent être interprétables c'est-à-dire qu'on souhaite prendre en compte le fait que le chercheur mesure la contribution de la variable x_j à la construction de la variable y à l'aide du coefficient de régression. On peut atteindre l'objectif d'une régression interprétable de la manière suivante [9] :

On construit tout d'abord une composante

$$t_1 = w_{11}x_1 + \dots + w_{1q}x_q \quad (2.3)$$

Où

$$w_{1j} = \frac{\text{cov}(x_j, y)}{\sqrt{\sum_{j=1}^q \text{cov}^2(x_j, y)}} \quad (2.4)$$

Dans la formule (2.4) w_{1j} représente la pente de la droite des moindres carrés, passant par l'origine du nuage de points (w_{1j}, x_{1j}) . Puis on effectue une régression de y sur t_1 :

$$y = c_1 t_1 + y_1 \quad (2.5)$$

Où c_1 est le coefficient de régression et y_1 le vecteur des résidus. D'où une première équation de régression :

$$y = c_1 w_{11}x_1 + \dots + c_1 w_{1q}x_q + y_1 \quad (2.6)$$

Si le pouvoir explicatif de cette régression est trop faible, on cherche à construire une deuxième composante t_2 , combinaison linéaire des x_j non corrélée à t_1 et expliquant bien le résidu y_1 . Cette composante t_2 est combinaison linéaire des résidus x_{1j} des régressions des variables x_j sur la composante t_1 .

On obtient t_2 à l'aide de la formule :

$$t_2 = w_{21}x_{11} + \dots + w_{2q}x_{1q} \quad (2.3)$$

Où

$$w_{2j} = \frac{\text{cov}(x_{1j}, y_1)}{\sqrt{\sum_{j=1}^q \text{cov}^2(x_{1j}, y_1)}} \quad (2.4)$$

On effectue ensuite une régression de y sur t_1 et t_2 :

$$y = c_1 t_1 + c_2 t_2 + y_2 \quad (2.9)$$

En exprimant t_1 et t_2 en fonction des variables x_j , l'équation de régression (2.9) peut s'écrire en fonction de ces variables. D'où une deuxième équation de régression plus précise que la première. Cette procédure itérative se poursuit en utilisant de même les résidus $y_2, x_{21}, \dots, x_{2q}$ des régressions de y, x_1, \dots, x_q sur t_1 et t_2 .

Le nombre de composantes t_1, t_2, \dots, t_h à retenir est habituellement déterminé par validation croisée. Pour chaque valeur h on calcule les prédictions \hat{y}_{hi} et $\hat{y}_{h(-i)}$ de y_i , à l'aide du modèle à h composantes, calculées en utilisant toutes les observations puis sans utiliser l'observation i . On calcule ensuite les critères RSS_h (Prediction Sum of Squares) et $PRESS_h$ (Residual Error Sum of Squares) définis par :

$$RSS_h = \sum (y_i - \hat{y}_{h(i)})^2$$

Et

$$PRESS_h = \sum (y_i - \hat{y}_{h(-i)})^2$$

La composante est retenue si :

$$\sqrt{PRESS_h} \leq 0,95 \sqrt{RSS_{h-1}}$$

2.2.1.1. Algorithme PLS

Nous notons Y la matrice des variables dépendantes y_1, y_2, \dots, y_p centrées réduites et X la matrice des valeurs des variables indépendantes x_1, x_2, \dots, x_q centrées réduites. La matrice X est de rang a . L'algorithme de la régression PLS peut s'écrire comme suit :

1. pour chaque colonne l de Y , poser $X_0 = X$, $y_0 = y_l$
2. pour $h=1, \dots, a$:
 - 2.1. $w_h = \frac{{}^t X_{h-1} y_{h-1}}{{}^t y_{h-1} y_{h-1}}$
 - 2.2. normer w_h à 1
 - 2.3. $t_h = X_{h-1} w_h$
 - 2.4. $p_h = \frac{{}^t X_{h-1} t_h}{{}^t t_h t_h}$
 - 2.5. $X_h = X_{h-1} - t_h {}^t p_h$
 - 2.6. $c_h = \frac{{}^t y_{h-1} t_h}{{}^t t_h t_h}$
 - 2.7. $u_h = \frac{y_{h-1}}{c_h}$
 - 2.8. $y_h = y_{h-1} - c_h t_h$

2.2.1.2. Commentaire de l'algorithme

Les coordonnées des vecteurs w_h, t_h, p_h et c_h représentent toutes des pentes des droites des moindres carrés passant par l'origine et peuvent donc être calculées avec données manquantes :

- La coordonnée w_{hj} du vecteur w_h représente le coefficient de régression de y_{h-1} dans la régression de la $j^{\text{ième}}$ colonne de la matrice X_{h-1} sur la variable y_{h-1}
- La coordonnée t_{hi} du vecteur t_h représente le coefficient de régression de w_h dans la régression sans constante de la variable définie par la $i^{\text{ième}}$ ligne de la matrice X_{h-1} sur la variable définie par le vecteur w_h
- La coordonnée p_{hj} du vecteur p_h représente le coefficient de régression de t_h dans la régression de la $j^{\text{ième}}$ colonne de la matrice X_{h-1} sur la composante t_h
- La valeur c_h représente le coefficient de régression de t_h dans la régression de la variable y_{h-1} sur la variable t_h

La matrice X_h est le résidu de la régression de X_{h-1} sur t_h . La variable y_h est le vecteur des résidus dans la régression de y_{h-1} sur t_h . On peut déduire de ces régressions les propriétés d'orthogonalité :

$${}^t t_h X_h = 0 \quad \text{et} \quad {}^t t_h y_h = 0$$

Nous allons décrire un ensemble de propriétés de l'algorithme PLS, ces propriétés permettant de le simplifier.

Proposition [9]

Les vecteurs et les matrices issus d'une régression PLS vérifient les propriétés suivantes :

- 1) ${}^t t_h t_l = 0$ pour $h < l$
- 2) ${}^t w_h p_h = 1$
- 3) ${}^t w_h {}^t X_l = 0$ pour $h \leq l$
- 4) ${}^t w_h p_l = 0$ pour $h < l$
- 5) ${}^t w_h w_l = 0$ pour $h < l$
- 6) ${}^t t_h X_l = 0$ pour $h \leq l$
- 7) $X_h = X \prod_{j=1}^{j=h} (I - w_j {}^t p_j)$ pour $h \geq 1$

Preuve 1

On va la montrer par récurrence. Pour $h=1$ et $l=2$ on a ${}^t t_1 t_2 = {}^t t_1 X_1 w_2 = 0$ (puisque ${}^t t_h X_h = 0$).

Supposons t_1, t_2, \dots, t_h orthogonaux, alors les vecteurs t_1, t_2, \dots, t_{h+1} sont orthogonaux.

Montrons que t_{h+1} est orthogonal aux vecteurs t_1, t_2, \dots, t_h :

$$\begin{aligned} {}^t t_h t_{h+1} &= {}^t t_h X_h w_{h+1} = 0, \quad (\text{car } {}^t t_h X_h = 0) \\ {}^t t_{h-1} t_{h+1} &= {}^t t_{h-1} X_h w_{h+1} = {}^t t_{h-1} [X_{h-1} - t_h {}^t p_h] w_{h+1} \\ &= [{}^t t_{h-1} X_{h-1} - {}^t t_{h-1} t_h {}^t p_h] w_{h+1} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Puisque ${}^t t_{h-1} X_{h-1} = 0$ et par hypothèse de récurrence ${}^t t_{h-1} t_{h-1} = 0$.

$${}^t t_{h-2} t_{h+1} = {}^t t_{h-2} X_h w_{h+1}$$

$$\begin{aligned}
&= {}^t t_{h-2} [X_{h-1} - t_h {}^t p_h] w_{h+1} \\
&= {}^t t_{h-2} [X'_{h-2} - t_{h-1} {}^t p_{h-1} - t_h {}^t p_h] w_{h+1} \\
&= 0, \text{ puisque } {}^t t_{h-2} X_{h-2} = 0 \text{ et par hypothèse } {}^t t_{h-2} t_h = 0
\end{aligned}$$

Preuve 2

La propriété (2) est immédiate :

$${}^t w_h p_h = \frac{{}^t w_h {}^t X_{h-1} t_h}{{}^t t_h t_h} = \frac{{}^t (X_{h-1} w_h) t_h}{{}^t t_h t_h} = \frac{{}^t t_h t_h}{{}^t t_h t_h} = 1$$

Preuve 3

On a :

$$\begin{aligned}
{}^t w_h {}^t X_h &= {}^t w_h (X_{h-1} - t_h {}^t p_h) \\
&= {}^t w_h {}^t X_{h-1} - {}^t w_h p_h {}^t t_h \\
&= {}^t t_h - {}^t w_h p_h {}^t t_h = {}^t t_h - {}^t t_h = 0
\end{aligned}$$

Montrons maintenant que l'égalité ${}^t w_h {}^t X_l = 0$, pour un indice $h \leq l$, implique ${}^t w_h {}^t X_{l+1} = 0$. On a :

$$\begin{aligned}
{}^t w_h {}^t X_{l+1} &= {}^t w_h (X_l - t_{l+1} {}^t p_{l+1}) \\
&= {}^t w_h {}^t X_l - {}^t w_h p_{l+1} {}^t t_{l+1} \\
&= {}^t w_h {}^t X_l - \frac{{}^t w_h {}^t X_l t_{l+1} {}^t t_{l+1}}{{}^t t_{l+1} t_{l+1}} \\
&= 0
\end{aligned}$$

D'où le résultat.

Preuve 4

En utilisant (3) on a :

$${}^t w_h p_l = \frac{{}^t w_h {}^t X_{l-1} t_l}{{}^t t_l t_l} = 0, \text{ pour } h \leq l-1, \text{ soit } h < l.$$

Preuve 5

En utilisant (3) on a :

$${}^t w_h w_l = \frac{{}^t w_h {}^t X_{l-1} y_{l-1}}{{}^t y_{l-1} y_{l-1}} = 0, \text{ pour } h < l.$$

Preuve 6

L'égalité est vraie pour $h = l$. En utilisant l'orthogonalité des t_h , on a pour $h < l$:

$$\begin{aligned}
{}^t t_h X_l &= {}^t t_h (X_{l-1} - t_{l-1} {}^t p_{l-1}) \\
&= {}^t t_h X_{l-1} \quad (\text{car } {}^t t_h t_{l-1} = 0) \\
&= {}^t t_h (X_{l-2} - t_{l-2} {}^t p_{l-2}) \\
&= {}^t t_h X_{l-2} = \dots = {}^t t_h X_h = 0
\end{aligned}$$

Preuve 7

Montrons la par récurrence. Pour $h=l$ on a :

$$\begin{aligned}
X_l &= X - t_1 {}^t p_1 \\
&= X - X w_1 {}^t p_1 \\
&= X(I - w_1 {}^t p_1)
\end{aligned}$$

Supposons que ce résultat est vrai pour $h=j$. montrons qu'il est vrai pour $h=j+1$:

$$\begin{aligned}
X_{j+1} &= X_j - t_{j+1} {}^t p_{j+1} \\
&= X_j - X_j w_{j+1} {}^t p_{j+1} \\
&= X_j (I - w_{j+1} {}^t p_{j+1}) \\
&= X \prod_{h=1}^{h=j} (I - w_h {}^t p_h) (I - w_{j+1} {}^t p_{j+1})
\end{aligned}$$

D'où le résultat.

2.2.2. Simplification de l'algorithme de régression PLS

L'orthogonalité des composantes t_h permet de simplifier l'algorithme de régression PLS. Elle rend inutile le calcul des résidus y_h . Cette orthogonalité entraîne en effet les résultats suivants [9]:

- La matrice X_h des résidus de la régression de X_{h-1} sur t_h est aussi la matrice des résidus de la régression de X sur t_1, t_2, \dots, t_h :

$$\begin{aligned}
X_h &= X - t_1 {}^t p_1 - \dots - t_h {}^t p_h \\
&= X_{h-1} - t_h {}^t p_h
\end{aligned}$$

- Le vecteur y_h des résidus de la régression de y_{h-1} sur t_h est aussi le vecteur des résidus de la régression de y sur t_1, t_2, \dots, t_h :

$$y_h = y - c_1 t_1 - \dots - c_h t_h$$

$$= y_{h-1} - c_h t_h$$

Montrons que le calcul à chaque étape de y_h n'est pas nécessaire. On a tout d'abord

$${}^t X_{h-1} y_{h-1} = {}^t X_{h-1} (y - c_1 t_1 - \dots - c_{h-1} t_{h-1}) = {}^t X_{h-1} y$$

Puisque le résidu X_{h-1} de la régression de X sur t_1, t_2, \dots, t_{h-1} est orthogonal aux composantes t_1, t_2, \dots, t_{h-1} On a donc :

$$w_h = \frac{{}^t X_{h-1} y_{h-1}}{\|{}^t X_{h-1} y_{h-1}\|} = \frac{{}^t X_{h-1} y}{\|{}^t X_{h-1} y\|}$$

Et de même

$$c_h = \frac{{}^t y_{h-1} t_h}{{}^t t_h t_h} = \frac{{}^t (y - c_1 t_1 - \dots - c_{h-1} t_{h-1}) t_h}{{}^t t_h t_h}$$

$$= \frac{{}^t y t_h}{{}^t t_h t_h}$$

On peut aussi simplifier le calcul du vecteur p_h . L'orthogonalité des t_h conduit à :

$$p_h = \frac{{}^t X t_h}{{}^t t_h t_h}$$

On peut remplacer les étapes 2.1, 2.4 et 2.6 de l'algorithme PLS par les étapes suivantes :

$2.1.b. w_h = \frac{{}^t X_{h-1} y}{{}^t y y}$
$2.4.b. p_h = \frac{{}^t X t_h}{{}^t t_h t_h}$
$2.6.b. c_h = \frac{{}^t y t_h}{{}^t t_h t_h}$

La régression PLS permet d'obtenir une décomposition du vecteur $\hat{A} = ({}^t X X)^{-1} {}^t X y$ solution des équations normales de la régression multiple.

$$\hat{A} = ({}^t X X)^{-1} {}^t X y = \sum_{i=1}^h c_i w_i$$

Ainsi la solution $\hat{A}_h = \sum_{i=1}^h c_i w_i$ de la régression PLS à l'ordre h tend vers la solution de la régression MLR et l'atteint pour $h=q$.

2.2.3. Application de la régression PLS

La régression PLS s'applique également au cas où le nombre de variables de la matrice X est grand, voire supérieur ou très supérieur au nombre N des essais. Ce cas est très courant lorsque l'ensemble des variables provient d'un spectre en proche Infrarouge, de RMN, ou dans les procédés industriels où les informations sont fournies très fréquemment par de nombreux capteurs installés à demeure sur l'unité de production. L'algorithme de PLS a de plus l'avantage d'accepter les valeurs manquantes.

2.3. Évaluation de la qualité des modèles

L'évaluation de la qualité du modèle permet de savoir si le modèle résume bien les résultats des essais du plan d'expériences. On peut juger de cette qualité à l'aide d'outils statistiques. Quatre techniques ont été décrites pour effectuer cette évaluation.

2.3.1. Examen graphique des résultats

Lorsque cet examen est possible, il est toujours riche d'enseignements et permet souvent d'éviter de grosses fautes d'interprétation.

2.3.2 Analyse de la variance

2.3.2.1. Propriétés de y , \hat{y} et e

Pour le modèle des moindres carrés, les N résultats expérimentaux y_i et les réponses calculées par le modèle \hat{y}_i ont la même moyenne générale \bar{y} , les sommes des carrés vérifiant la relation :

$$\sum_{i=1}^{i=N} e_i^2 = \sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - \sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2$$

Cette égalité est facile à démontrer. On a :

$$'ee = 'yy - 2'A'Xy + 'A'XXA'$$

Pour le modèle des moindres carrés :

$$'Xy = 'XXA'$$

Et par conséquence :

$${}^t e e = {}^t y y - 2 {}^t \hat{A} {}^t X X \hat{A} + {}^t \hat{A} {}^t X X \hat{A} = {}^t y y - {}^t \hat{A} {}^t X X \hat{A}$$

Revenons aux scalaires correspondants.

$${}^t e e = \sum_{i=1}^{i=N} e_i^2, \quad {}^t y y = \sum_{i=1}^{i=N} y_i^2, \quad {}^t \hat{A} {}^t X X \hat{A} = {}^t \hat{y} \hat{y} = \sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2$$

Nous obtenons l'égalité (2.10). Les propriétés de y , \hat{y} et e sont à la base de l'analyse de la variance qui suit.

2.3.2.2. Signification du modèle

L'égalité (2.10) peut s'écrire :

$$\sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 = \sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2 + \sum_{i=1}^{i=N} e_i^2$$

Retranchant $N \bar{y}^2$ aux deux membres de l'égalité. On obtient :

$$\sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - N \bar{y}^2 = \sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2 - N \bar{y}^2 + \sum_{i=1}^{i=N} e_i^2$$

La dispersion des y_i autour de leur moyenne, encore appelée dispersion totale, se décompose en deux part :

- La dispersion des \hat{y}_i autour de leur moyenne. Elle correspond à la dispersion expliquée par le modèle
- La dispersion des écarts autour de leur moyenne correspond à la dispersion résiduelle. Elle est appelée somme des carrés des écarts

Les degrés de liberté correspondant à chacune de ces sommes des carrés sont :

$$\left\{ \begin{array}{ll} N-1 & \text{Pour } \sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - N \bar{y}^2 \\ q & \text{Pour } \sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2 - N \bar{y}^2 \\ N-q-1 & \text{Pour } \sum_{i=1}^{i=N} e_i^2 \end{array} \right.$$

Par définition la variance est obtenue en divisant la somme des carrés par le nombre de degrés de liberté de ces sommes. On obtient ainsi les variances :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Variance totale} \\ \text{Variance d'ajustement} \\ \text{Variance résiduelle} \end{array} \right. = \begin{array}{l} = \frac{\sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - N\bar{y}^2}{N-1} \\ = \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2 - N\bar{y}^2}{q} \\ = \frac{\sum_{i=1}^{i=N} e_i^2}{N-q-1} \end{array}$$

L'analyse consiste à comparer la variance d'ajustement à la variance expérimentale en calculant leur rapport appelé F de Fisher.

$$F = \frac{\frac{\sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2 - N\bar{y}^2}{q}}{\frac{\sum_{i=1}^{i=N} e_i^2}{N-q-1}}$$

Le modèle sera déclaré globalement significatif si $F > F_{1-\alpha, q, N-q-1}$. On peut dire aussi que la qualité du modèle est d'autant meilleure que la variance d'ajustement est plus faible par rapport à la variance expérimentale.

2.3.3. Tests statistiques

Ces tests utilisent les résultats de l'analyse des variances. Ils permettent de calculer, sous certaines hypothèses, trois statistiques très répandues :

2.3.3.1. Le coefficient de corrélation multiple R^2

On appelle R^2 le rapport de la partie des résultats expliqués par le modèle à la totalité de ce qu'il devrait expliquer :

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \hat{y}_i^2 - N\bar{y}^2}{\sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - N\bar{y}^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{i=N} e_i^2}{\sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - N\bar{y}^2}$$

D'après cette formule on voit que le rapport R^2 varie entre 0 et 1. S'il vaut zéro c'est que le modèle n'explique rien, s'il vaut 1 c'est que le modèle explique toutes les

réponses mesurées. Attention ! Le rapport R^2 n'est pas une qualité d'un modèle. Tout dépend du nombre de résultats et du modèle choisi. Par exemple, si l'on possède deux réponses et que l'on souhaite utiliser un modèle du premier degré, on aura toujours un R^2 de 1. En effet, par deux points il passe toujours une droite. Le modèle explique bien les deux réponses. Si l'on a trois réponses le R^2 ne sera probablement plus de 1. Mais si on veut faire passer une courbe du second degré par les trois points, le R^2 sera à nouveau égal à 1. C'est pour cette raison que certains auteurs ont introduit le R^2 ajusté.

2.3.3.1. Le R^2 ajusté

Par définition ce coefficient est donné par la relation :

$$R_{ajusté}^2 = \frac{\frac{\sum_{i=1}^{i=N} e_i^2}{N - q - 1}}{\frac{\sum_{i=1}^{i=N} y_i^2 - N\bar{y}^2}{N - 1}}$$

Ces deux rapports varient entre 0 et 1. Ils mesurent en quelque sorte le degré d'ajustement du modèle. Plus ils sont voisins de 1 et plus le modèle représente bien les points expérimentaux.

2.3.3.1. Le Q^2

Par définition ce coefficient est donné par la relation :

$$Q^2 = \frac{(\sum y_i^2 - N\bar{y}^2) - \sum_{i=1}^N \frac{e_i^2}{(1 - h_i)^2}}{\sum y_i^2 - N\bar{y}^2}$$

Où h_i est la $i^{ème}$ élément diagonal de la matrice $X ({}^tXX)^{-1} {}^tX$

Souvent un seuil est fixé pour se prononcer sur la qualité de l'ajustement, en général un Q^2 d'une valeur 0,7 ou plus signifie que l'ajustement est d'une bonne qualité.

2.3.4. Analyse des résidus

Il s'agit d'une représentation graphique des résidus. En abscisse on porte les valeurs des réponses prédites par le modèle \hat{y}_i et en leur coordonnée on porte les valeurs des résidus e_i . On regarde si les résidus semblent être distribués aléatoirement ou non. Un modèle est bon si les points (\hat{y}_i, e_i) semblent disposés au hasard.

CHAPITRE 3

TRANSMISSIONS DES ERREURS ET CRITERES D'OPTIMALITE

Nous savons que chaque mesure est entachée d'une incertitude appelée erreur expérimentale. L'examen de la formule (2.2) permet de voir que cette erreur expérimentale sur la réponse observée y , se transmet aux coefficients du modèle recherché. Des erreurs moins connues par les expérimentateurs sont dues également au type du modèle postulé à priori et aux dispositions des points expérimentaux dans le domaine d'étude. Dans ce chapitre nous verrons donc ces notions de transmissions des erreurs ainsi que certains critères d'optimalité dont on donnera la définition.

3.1. Transmissions des erreurs

Les réponses mesurées par l'expérimentateur sont entachées d'une erreur expérimentale. Ce sont donc des grandeurs aléatoires. Cette erreur peut être estimée par l'écart-type de la population et déterminée sur une échantillon. Les niveaux des facteurs et le modèle mathématique choisi à priori sont supposés n'introduire aucune erreur et ne sont pas considérés comme des variables aléatoires. La matrice X n'est donc pas une grandeur aléatoire et elle n'introduit aucune erreur. Seule la matrice y est une matrice dont les éléments sont des variables aléatoires. Les variations des éléments de cette matrice entraînent donc des variations ou des erreurs sur les coefficients du modèle mathématique puisqu'il existe la relation :

$$\hat{A} = ({}^tX X)^{-1} {}^tXy$$

Les coefficients déterminés par la méthode des moindres carrés sont des grandeurs aléatoires. Ils vont donc à leur tour, engendrer d'autres variables aléatoires lorsqu'ils figureront dans une relation mathématique. Par exemple, les réponses prédites sont des grandeurs aléatoires puisqu'il existe la relation :

$$\hat{y} = X \hat{A}$$

Il résulte de cette courte analyse que les erreurs sur les coefficients du modèle et sur les réponses prédites ne seront pas les mêmes selon la valeur des erreurs sur les réponses mesurées, le modèle choisi à priori et l'emplacement des points expérimentaux dans le domaine d'étude. Nous allons examiner en détail les liens qui existent entre ces différentes erreurs.

3.1.1. Prisions sur les coefficients

Dans la relation (2.2), les variances des coefficients sont disposées sur la diagonale principale de $\text{var}(\hat{A})$, la formule précédente, pour l'usage que nous voulons en faire, devient alors :

$$\text{Diag}[\text{var}(\hat{A})] = \sigma^2 \text{Diag}({}^tXX)^{-1} \quad (3.1)$$

C'est la relation des variances des coefficients. Cette relation est très importante. En effet, elle montre qu'il y a trois composantes qui induisent des erreurs sur les coefficients. Ces composantes sont :

- l'erreur commise sur les réponses à cause du terme σ^2 , les erreurs commises sur les réponses mesurées se transmettent donc aux coefficients du modèle mathématique
- L'emplacement des points expérimentaux. La position des points expérimentaux, dans le domaine d'étude génère des erreurs plus ou moins élevées sur les coefficients du modèle mathématique. C'est la matrice X qui est responsable de ce transfert. Cela signifie qu'un expérimentateur qui conduit des expériences avec beaucoup de soin et obtient des résultats d'essai très précis peut quand même avoir des modèles mathématiques médiocres s'il a mal disposé les points expérimentaux dans le domaine expérimental
- Le modèle mathématique choisi a priori. Le choix initial du modèle mathématique engendre des écarts d'ajustement plus ou moins élevés sur les coefficients du modèle. Les responsables de ce transfert sont σ^2 et la matrice X , cela signifie que l'on doit s'attendre à de grosses erreurs sur certains coefficients lorsque le modèle mathématique choisi a priori est très éloigné du modèle réel

3.1.2. Précision sur les réponses prédites

La méthode des moindres carrés permet, grâce au jeu des coefficients qui a été calculé, d'obtenir les réponses dans tout le domaine d'étude, c'est à dire que l'on peut

calculer les réponses pour tous les points du domaine d'étude même si aucune expérience n'y a été réalisée. Soit un point u du domaine d'étude, défini par ses coordonnées, la réponse prédite en ce point est donnée par :

$$\hat{y}_u = {}^t x_u \hat{A}$$

Si u est un des point expérimentaux du plan d'expériences, la matrice vecteur ${}^t x_u$ est une ligne de la matrice X , la matrice vecteur x_u sera appelée le vecteur modélisé du point u , \hat{A} est la matrice des coefficients calculés avec la méthode des moindres carrés. L'incertitude sur les coefficients se transmet à la réponse calculée :

$$\text{var}(\hat{y}_u) = \text{var}({}^t x_u \hat{A})$$

Dans cette relation la matrice ligne ${}^t x_u$ dépend des coordonnées d'un point du domaine d'étude et il a été admis par hypothèse que les coordonnées des points expérimentaux étaient parfaitement connues et n'introduisaient pas d'erreurs. On peut donc sortir le vecteur modélisé du point u des parenthèses :

$$\text{var}(\hat{y}_u) = {}^t x_u \text{var}(\hat{A}) x_u$$

Dans cette expression la variance de \hat{A} est connue et l'on sait qu'elle est égale à :

$$\text{var}(\hat{A}) = \sigma^2 ({}^t X X)^{-1}$$

La variance de la réponse calculée au point u est donc :

$$\text{var}(\hat{y}_u) = {}^t x_u \sigma^2 ({}^t X X)^{-1} x_u$$

Cette relation permet de calculer l'incertitude sur la réponse calculée au point u . On constate que cette erreur sur la réponse calculée (ou réponse prédite) dépend de quatre grandeurs :

- l'erreur expérimentale sur les réponses mesurées
- la position du point u dans le domaine d'étude
- l'ensemble des points qui ont été utilisés pour établir les coefficients du modèle, c'est à dire le plan d'expériences lui même
- le modèle postulé choisi pour interpréter les résultats (par la matrice de calcul des coefficients et la variance des résidus)

3.1.3. Fonction de variance de prédiction

L'erreur commise sur les réponses mesurées dépend de la nature de l'expérimentation, du degré de précision de la technologie employée, du soin, de l'habilité

de l'expérimentateur, et de bien d'autres facteurs dont l'expérimentateur est responsable. Ces facteurs ne dépendent pas de la théorie des plans d'expériences mais de la pratique expérimentale [5]. Pour séparer cette partie expérimentale de celle qui dépend de la théorie, on introduit la fonction de variance de prédiction $d^2(\hat{y}_u)$:

$$d^2(\hat{y}_u) = 'x_u ('XX)^{-1} x_u$$

En prenant la racine carrée de la fonction de variance, on obtient la fonction d'erreur de prédiction :

$$d(\hat{y}_u) = ['x_u ('XX)^{-1} x_u]^{\frac{1}{2}}$$

On peut tracer les courbes d'égale erreur de prédiction dans le domaine d'étude. Il est intéressant de constater que la fonction d'erreur de prédiction ne dépend pas des résultats des expériences c'est à dire des valeurs des réponses mesurées. Elle dépend essentiellement de l'emplacement des points expérimentaux dans le domaine d'étude et du modèle postulé. On peut donc savoir, avant de commencer l'expérimentation, comment la précision des réponses prédites sera affectée par le choix de l'emplacement des points expérimentaux et par celui du modèle. En faisant apparaître les écarts-types et la fonction de la variance de prédiction, la relation peut s'écrire :

$$\text{var}(\hat{y}_u) = \sigma^2 'x_u ('XX)^{-1} x_u = \sigma^2 d^2(\hat{y}_u)$$

Si la fonction d'erreur de prédiction est plus petite que 1, on a une meilleure précision sur les réponses prédites que sur les réponses mesurées. Si la fonction d'erreur de prédiction est plus grande que 1, c'est l'inverse. En général, on s'arrange pour que l'erreur de prédiction ne soit pas plus élevée que l'erreur expérimentale. On évite donc de faire des prévisions dans les régions où la fonction d'erreur de prédiction est supérieure à l'unité.

3.2. Critères d'optimalité

Les erreurs sur les réponses prédites sont liées à la matrice X . Comme cette matrice est connue, il est possible d'évaluer la qualité de l'expérimentation avant le début des expériences. La matrice X dépend du modèle mathématique postulé et de l'emplacement des points expérimentaux. Un bon plan d'expériences sera un plan permettant d'obtenir la plus faible erreur sur les réponses prédites. La règle que l'on peut suivre est d'obtenir une erreur sur les réponses prédites de l'ordre de grandeur de l'erreur sur les réponses mesurées. Selon les critères choisis, l'emplacement des points expérimentaux pourra varier d'un plan à l'autre. Il y a plusieurs critères d'optimalité. Il y a

ceux qui s'intéressent à la répartition de la variance dans le domaine d'étude. C'est par exemple le critère d'iso variance par rotation. Il y a les critères d'optimalité qui ont pour objectif d'obtenir un modèle mathématique de bonne qualité. Ces derniers critères s'intéressent à la précision des coefficients du modèle.

3.2.1. Qualité de la représentation des coefficients

Plusieurs auteurs ont montré que la limite du domaine de confiance des coefficients est donnée par la relation [10] :

$${}^t(A - \hat{A})({}^tXX)(A - \hat{A}) = qs^2 \quad (3.2)$$

Où

s^2 est une estimation de la variance expérimentale

F est la statistique correspond au test de Fisher

α est le niveau de confiance choisi

ddl est le nombre de degrés de liberté associé à s^2

Ce domaine est un hyper ellipsoïde dans l'espace des coefficients, centré sur le vecteur calculé \hat{A} . Avec un risque α , on peut dire, que les valeurs vraies des coefficients sont dans cet hyper ellipsoïde. Pour deux coefficients, l'hyper ellipsoïde est représenté graphiquement par :

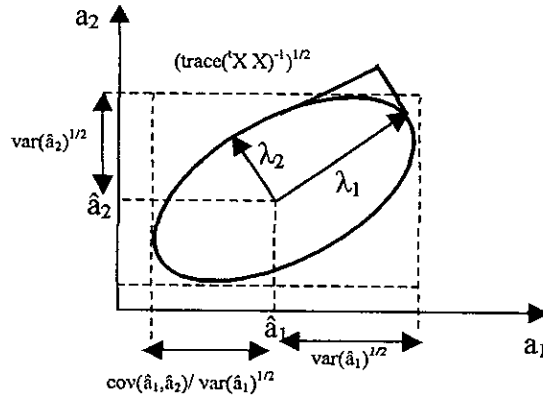


Figure 3.1 : Ellipsoïde de confiance

Où (\hat{a}_1, \hat{a}_2) sont les deux coefficients trouvés par la régression multilinéaire, (λ_1, λ_2) les deux valeurs propres de l'ellipsoïde. Cet hyper ellipsoïde représente les performances de l'ensemble des observations pour un modèle donné. Il peut être décrit par 3 caractérisations :

A. Volume

Le volume de l'ellipsoïde est égal à $\pi(\lambda_1\lambda_2)^{\frac{1}{2}} = \pi(\det('XX)^{-1})^{\frac{1}{2}}$. Ce volume est lié au déterminant de la matrice de dispersion $('XX)^{-1}$. Plus le volume sera petit, plus l'hyper ellipsoïde tend vers un point et plus on se rapprochera de la solution vraie A .

B. Forme

Lorsque la forme est très allongée, alors il existe une grande disparité sur la précision des coefficients. Si $\lambda_1 = \lambda_2$ l'ellipsoïde devient une hyper sphère, et donc tous les coefficients sont déterminés avec la même précision.

C. Orientation

Si les axes principaux de l'hyper ellipsoïde sont parallèles aux axes des coefficients alors, la valeur calculée d'un coefficient sera indépendante des valeurs calculées des autres coefficients.

D'après la formule (3.2), l'hyper ellipsoïde dépend de la matrice de $('XX)$, donc les critères sont fondés sur les matrices d'information $('XX)$ et de dispersion $('XX)^{-1}$.

3.2.2. Critère A

Une matrice d'expériences est dite optimale-A, si elle conduit à la trace de $('XX)^{-1}$ minimale.

3.2.3. Critère D

Une matrice d'expériences est dite optimale-D, si elle conduit au déterminant minimal pour sa matrice de dispersion.

3.2.4. Critère E

Une matrice d'expériences est dite optimale-E, si elle conduit à la valeur propre maximale de $('XX)^{-1}$ la plus faible possible.

3.2.5. Critère G

Le critère-G prend en compte la plus grande valeur, sur tout le domaine expérimental, de la fonction de variance $d^2(\hat{y}_u)$ engendré par la matrice X .

$$d_{\max}' = \text{Max}(d^2(\hat{y}_u))$$

La meilleure matrice d'expériences vis à vis de ce critère étant celle qui a la plus petite valeur.

3.2.5.1. Efficacité-G

L'efficacité-G d'une matrice d'expériences est donnée par la formule suivante :

$$\text{Eff} - G = \frac{q}{Nd_{\max}} 100$$

Une matrice d'expériences est proche de la matrice d'expériences optimale G , si la valeur de l'efficacité-G avoisine 100 % [11].

3.2.6. Critère M

Le critère M permet de tenir compte de la qualité d'information apportée par l'expérience. Ce critère est indépendant du nombre des essais du plan d'expériences.

On appelle matrice des moments M , la matrice définie par :

$$M = \frac{({}^tXX)}{N}$$

Grâce à ce critère on peut comparer deux matrices d'expériences, n'ayant pas forcément le même nombre d'expériences. Soient M_1 et M_2 deux matrices des moments associées à deux matrices d'expériences constituées respectivement de N_1 et N_2 expériences.

$$M_1 = \frac{({}^tX_1X_1)}{N_1}$$

$$M_2 = \frac{({}^tX_2X_2)}{N_2}$$

Nous dirons que le premier plan est plus efficace que le deuxième plan vis-à-vis du critère M si :

$$|M_1| > |M_2|$$

3.2.7. Critère d'orthogonalité

Une matrice d'expériences est orthogonale si elle permet d'obtenir des estimations des coefficients indépendants. Cela se caractérise par des axes de l'ellipsoïde parallèles aux

axes des coefficients. Cette propriété est obtenue quand $(X'X)^{-1}$ (ou $X'X$) est diagonale, donc quand les covariances des coefficients sont nulles [12].

3.2.8. Critère de presque orthogonalité

Si la sous matrice obtenue en retirant la première ligne et la première colonne de la matrice $(X'X)^{-1}$ est diagonale, le critère de presque orthogonalité est respecté.

3.2.9. Critère d'iso variation par rotation

On désire que les réponses calculées avec le modèle issu du plan d'expériences aient une *erreur de prévision identique pour des points situés à la même distance du centre du domaine d'étude*. Dans ce cas on parle de plan iso variant par rotation (rotable).

CHAPITRE 4

ÉTUDE DE DIVERS PLANS D'EXPERIENCES

Dans ce chapitre, nous introduirons les principaux plans d'expériences. Ces plans peuvent être classés en deux catégories : plans pour un modèle de premier degré (plans factoriels complet à deux niveaux, plans fractionnaires et plans de Mozzo), plans de modélisation (plans factoriels complets à trois niveaux, plans composites, plans de Box-Behnken, plans de Doehlert et plans de Roquemore). Ces deux catégories concernent les facteurs indépendants. Par définition des facteurs indépendants sont des facteurs dont on peut choisir les niveaux comme on le désire. Le choix du niveau d'un facteur n'entraîne aucune contrainte sur le choix des niveaux des autres facteurs.

4.1. Plans factoriels complets à deux niveaux

Les plans factoriels complets à deux niveaux sont les plus simples. Ils sont aussi les plus utiles car ce sont eux qu'on utilise au début de toute étude. Ils permettent en effet de répondre de façon optimale aux questions :

- quels sont les facteurs qui influencent le plus sur le phénomène étudié ?
- si influence il y a, que vaut-elle ?
- y a t-il des interactions entre facteurs et quelle est l'importance relative de chacune d'elles ?

Les plans factoriels complets à deux niveaux permettent aussi d'étudier k facteurs à raison de deux niveaux par facteur. Ils renferment toutes les combinaisons des k facteurs à leurs deux niveaux, soit 2^k combinaisons.

4.1.1. Construction des plans factoriels complets à deux niveaux

4.1.1.1. Matrice des essais

Pour étudier l'influence d'un facteur sur une réponse, il faut lui affecter au moins deux niveaux. Reprenons les notions du chapitre 1, le premier niveau est repéré par -1, le second

par +1. Pour l'étudier deux facteurs 1 et 2, à raison de deux niveaux pour chaque facteur, il faut réaliser $2^2 = 4$ essais. Les conditions opératoires de chaque essai sont décrites dans le tableau 4.1.

Tableau 4.1 : Matrice d'expériences d'un plan 2^2

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1



Pour trois facteurs le nombre des essais à réaliser est $c = 8$ essais. La matrice des essais ou d'expériences est donnée par le tableau 4.2.

Tableau 4.2 : Matrice d'expérience d'un plan 2^3

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	1	1	-1
5	-1	-1	1
6	1	-1	1
7	-1	1	1
8	1	1	1

Pour k facteurs, le nombre d'essais est de 2^k d'où le nom de plan 2^k donné à cette famille de plans. La matrice des essais comporte k colonnes et 2^k lignes. Elle se construit simplement :

- Colonne du 1^{er} facteur : alternance de -1 et +1
- Colonne du 2^{ème} facteur : alternance de -1 et +1 de 2 en 2
- Colonne du 3^{ème} facteur : alternance de -1 et +1 de 4 en 4
- Colonne du 4^{ème} facteur : alternance de -1 et +1 de 8 en 8, ... etc.

4.1.1.2. Domaine expérimental

Le domaine d'étude peut être représenté dans l'espace expérimental des facteurs à k dimensions. Lorsque $k=2$, nous obtenons un carré. Les points expérimentaux sont situés aux quatre sommets du carré (Figure 4.1).

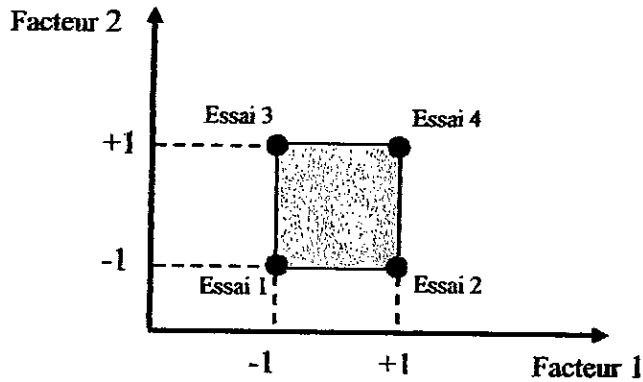


Figure 4.1 : Domaine d'étude d'un plan 2^2

Lorsque $k=3$, le domaine expérimental est représenté par un cube, dont les huit sommets représentent les huit essais du plan (Figure 4.2).

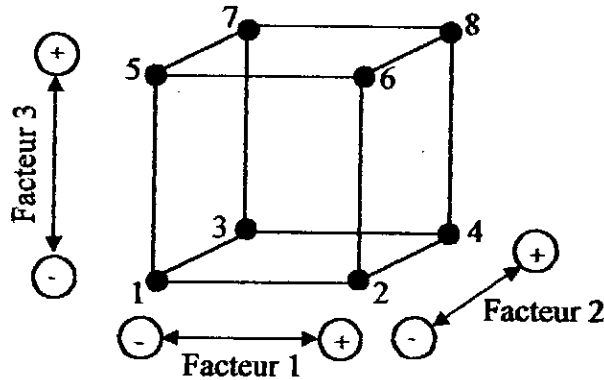


Figure 4.2 : Domaine expérimental d'un plan 2^3

Quand $k > 3$ la représentation géométrique du domaine n'est plus possible mais les points expérimentaux sont toujours aux sommets d'un hyper-cube à k dimensions.

4.1.2. Plan factoriel à deux facteurs

Pour deux facteurs, nous avons vu que le domaine d'étude est un carré. Par exemple la figure 4.1 représente un plan factoriel complet à deux facteurs. Le modèle mathématique postulé est un modèle du premier degré par rapport à chaque facteur. Le modèle est :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 \quad (4.1)$$

- y : la réponse
 x_i : niveau attribué au facteur i
 a_0 : valeur de la réponse au centre du domaine d'étude
 a_1 (resp. a_2) : l'effet principal du facteur 1 (resp. facteur 2)
 a_{12} : interaction entre les facteurs 1 et 2

4.1.2.1. Effet d'un facteur

L'expérimentateur ayant réalisé les essais est en possession de quatre valeurs de la réponse : y_1 , y_2 , y_3 , et y_4 . Il a donc un système de quatre équations à quatre inconnues. Les inconnues étant les coefficients du modèle : \hat{a}_0 , \hat{a}_1 , \hat{a}_2 , et \hat{a}_{12} . En remplaçant dans la relation (4.1) les x_i par leur valeur, on obtient :

$$y_1 = a_0 - a_1 - a_2 + a_{12}$$

$$y_2 = a_0 + a_1 - a_2 - a_{12}$$

$$y_3 = a_0 - a_1 + a_2 - a_{12}$$

$$y_4 = a_0 + a_1 + a_2 + a_{12}$$

La résolution de ce système donne :

$$a_0 = \frac{1}{4}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4) \quad (4.2)$$

$$a_1 = \frac{1}{4}(-y_1 + y_2 - y_3 + y_4) \quad (4.3)$$

$$a_2 = \frac{1}{4}(-y_1 - y_2 + y_3 + y_4) \quad (4.4)$$

$$a_{12} = \frac{1}{4}(y_1 - y_2 - y_3 + y_4) \quad (4.5)$$

4.1.2.2. Signification de a_0

Si nous donnons à x_1 et à x_2 la valeur zéro, nous définissons le centre du domaine d'étude. La relation (4.1) devient alors :

$$y = a_0$$

Le coefficient a_0 est la valeur de la réponse au centre du domaine d'étude. La formule (4.2) montre également que a_0 peut être considéré comme la moyenne des quatre réponses.

4.1.2.3. Signification de a_1

Plaçons nous maintenant au niveau moyen du facteur 2. Pour cela, donnons la valeur zéro à x_2 . La relation (4.3) devient :

$$y = a_0 + a_1 x_1$$

Cette relation permet de tracer l'évolution de la réponse prédite dans un plan de coupe $x_2=0$ (Figure 4.3). L'effet du facteur 1 apparaît comme la variation de la réponse quand on passe du niveau bas au niveau haut du facteur 1.

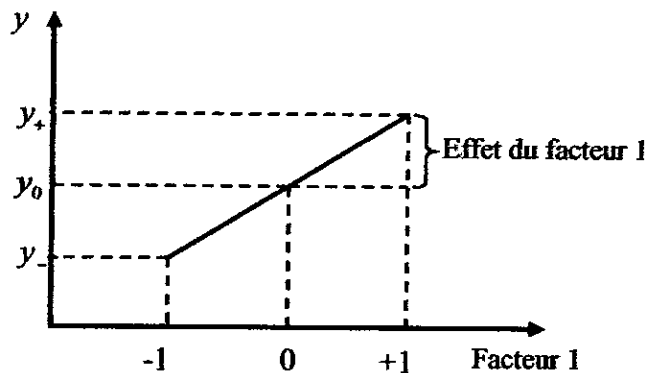


Figure 4.3 : Effet du facteur 1

Où y_+ (resp. y_-) est la valeur moyenne de la réponse au niveau haut (resp. bas) du facteur 1.

4.1.2.4. Signification de a_{12}

La relation (4.5) peut s'écrire :

$$y = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} (y_4 - y_3) - \frac{1}{2} (y_2 - y_1) \right] = \frac{1}{2} (y_+ - y_-)$$

L'interaction apparaît comme étant la demi différence entre l'effet du facteur 1 au niveau haut du facteur 2 (effet noté y_+) et l'effet du facteur 1 au niveau bas du facteur 2 (effet noté y_-). Elle traduit une variation de l'effet d'un facteur en fonction du niveau d'un autre facteur.

4.1.2.5. Calcul de l'effet d'un facteur

Reprenons la formule (4.3) qui donne l'effet du facteur 1 :

$$a_1 = \frac{1}{4} (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4)$$

On constate :

- Que toutes les réponses participent au calcul de l'effet

- Que chaque réponse est précédée d'un signe et que la suite de ces signes est la même que celle de la colonne du facteur 1 dans la matrice d'expériences (Tableau 4.1)
- Qu'il y a un coefficient, ici $\frac{1}{4}$, dont le dénominateur est égal au nombre d'expériences effectuées

Le calcul pratique d'un effet est le suivant : on multiplie chaque réponse par le signe correspondant de la colonne du facteur, on additionne les produits et l'on divise la somme par le nombre d'expériences.

4.1.2.6. Matrice des effets

Nous venons de voir que les signes de la matrice d'expériences permettent de calculer les effets, mais il faudrait pouvoir calculer aussi la moyenne et l'interaction.

A. Calcul de la moyenne

Le processus de calcul à adopter pour les effets peut s'appliquer en utilisant une colonne de signe + puisqu'il n'y a que ce signe dans la formule (4.2).

B. Calcul de l'interaction

La suite des signes de la relation (4.5) est + - - +. Chacun des ces signes provient du produit $x_1 x_2$ figurant dans la relation (4.1). On peut retrouver cette suite de signes de la manière suivante : écrit en colonne, les signes correspondants à x_1 et à x_2 , puis en faisant le produit scalaire des éléments correspondants des colonnes des facteurs.

$$\begin{array}{ccc} x_1 & x_2 & x_1 x_2 \\ \begin{pmatrix} -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 \\ -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 \end{pmatrix} \end{array}$$

Ayant la matrice d'expériences, il est facile de construire la matrice des effets (Tableau 4.3) en ajoutant une colonne de signe + pour la moyenne et en calculant celle de l'interaction comme précédemment.

Tableau 4.3 : Matrice des effets pour un plan 2^2

Essai N°	Moyenne	Facteur 1	Facteur 2	Interaction 12
1	1	-1	-1	1
2	1	1	-1	-1
3	1	-1	1	-1
4	1	1	1	1

4.1.2.7. Notation de Box

La colonne des signes du facteur 1 sera notée par un chiffre 1, celle des signes du facteur 2 par 2. La multiplication de ces deux colonnes selon le processus expliqué au paragraphe précédent nous donne la suite des signes de l'interaction entre les facteurs 1 et 2. On peut donc écrire que la colonne des signes de cette interaction est 12, on introduit ainsi une algèbre des colonnes de signes, algèbre dont nous venons de définir la multiplication. Si nous multiplions une colonne de signes par elle même, nous obtenons une colonne qui ne contient que des signes +. Cette colonne sera notée I , d'où

$$1.1 = I \text{ et on aura de même } 2.2 = I.$$

4.1.3. Plans factoriels à trois facteurs 2^3

4.1.3.1. Exemple [3]

Pour l'entretien du réseau routier, les pétroliers sont amenés à préparer des émulsions de bitume. Ces émulsions doivent rester stables depuis leurs fabrications jusqu'à leur mise en place. L'étude que nous présentons est la recherche des conditions de stabilité de l'émulsion de bitume en fonction de sa composition. Le responsable a retenu trois facteurs:

- Facteur1 : acide gras à faible et forte concentration
- Facteur2 : acide chlorhydrique très et peu dilué
- Facteur3 : nature de bitume A et B sur la stabilité d'une émulsion de bitume.

Le plan réalisé est un plan 2^3 , 3 facteurs et 2 niveaux par facteur. Ce plan totalise $2^3 = 8$ essais. La figure (4.2) donne l'image géométrique du plan d'expériences. Pour calculer les effets de chacun des facteurs, on construit la matrice de calcul des effets (Tableau 4.4)

Tableau 4.4 : Matrice des effets d'un plan 2^3

Essai N°	Moy	1	2	3	12	13	23	123	Réponses
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	38
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	37
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	26
4	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	24
5	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	30
6	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	28
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	19
8	1	1	1	1	1	1	1	1	16
Effets	27,25	-1	-6	-4	0,25	0,25	0,25	0	

Seuls les effets 2 et 3 sont significatifs.

4.1.3.2. Conclusions de l'étude

La concentration de l'acide gras est pratiquement sans influence sur la stabilité de l'émulsion. Par contre, la dilution de l'acide chlorhydrique est un facteur important à effet négatif. La nature du bitume est également importante, la meilleure stabilité sera obtenue : avec le bitume B, il n'y a aucune interaction significative.

Remarque

L'effet est négatif quand la réponse diminue lorsque le facteur correspondant passe du niveau -1 au niveau +1.

4.1.4. Plan complet à quatre facteurs 2^4

Nous pouvons généraliser la démarche précédente au cas de 4, 5 facteurs ou plus. Pour 4 facteurs le plan factoriel complet comporte $2^4 = 16$ essais. La matrice des effets permet d'obtenir seize informations qui portent sur :

- les effets de chaque facteur au nombre de 4
- les interactions de deuxième ordre 12, 13, ... etc, dont le nombre est de $C_4^2 = 6$
- les interactions du troisième ordre 123, 124, ... etc, dont le nombre est de $C_4^3 = 4$
- L'interaction du quatrième ordre 1234 qui est unique
- La moyenne qui est unique

4.1.5. Plan complet 2^k

Il s'agit de plans pour lesquels on étudie k facteurs prenant chacun deux niveaux. Le modèle mathématique adopté à priori est un polynôme prenant en compte la moyenne, les effets de chaque facteur et les interactions entre les facteurs pris deux à deux.

$$y = a_0 + \sum a_i x_i + \sum a_{ij} x_i x_j \quad (4.6)$$

Si on remplace les x_i par leurs valeurs en coordonnées centrées réduites on peut écrire sous forme matricielle :

$$y = X A \quad (4.7)$$

Si nous reprenons le système du plan 2^2 , la relation (4.7) prend la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_{12} \end{pmatrix}$$

Dans le cas des plans factoriels à deux niveaux, la matrice X qui est orthogonale est appelée matrice d'Hadamard. Elle possède l'importante propriété : $'XX = N I$ où N le nombre d'essais et I la matrice d'unité. Si l'on reporte cette expression dans la formule (2.1) on obtient :

$$\hat{A} = ('XX)^{-1} 'X_y = (NI)^{-1} 'X_y$$

D'où

$$\hat{A} = \frac{1}{N} 'X_y$$

4.1.6. Optimalité des plans 2^k

Tous les effets et les interactions sont estimés d'une manière indépendante, avec la variance minimale $\text{var}(y)/N$.

4.1.7. Avantages et inconvénients des plans factoriels complets à deux niveaux

- Les avantages [13] des plans factoriels sont nombreux et nous n'en citerons que les principaux :
- Les plans factoriels complets sont faciles à construire

- Comme chaque facteur ne prend que deux niveaux les essais sont faciles à contrôler et les risques d'erreur sont minimisés
- Le calcul des effets et des interactions est très simple
- L'interprétation des résultats est à la portée de tout expérimentateur et ne demande pas des connaissances approfondies en statistique
- Les résultats obtenus avec un premier plan peuvent être utilisés en partie ou en totalité, soit pour explorer une autre zone du domaine expérimental soit, pour établir un modèle mathématique de degré plus élevé
- L'inconvénient de ces plans est que le nombre des essais à réaliser devient rapidement important. De plus, on ne peut calculer que les effets principaux et les interactions donc on ne peut pas obtenir de modèles du second degré et plus

4.2. Plans factoriels fractionnaires à deux niveaux

Etant donné que pour un plan factoriel complet à deux niveaux, le nombre des essais devient rapidement prohibitif, on utilise les plans fractionnaires afin d'étudier le même nombre de facteurs tout en réalisant moins d'essais. Mais, pour que les résultats de tels plans soient correctement interprétés, il faut connaître la théorie des alias [14].

4.2.1. Définition des plans fractionnaires

En pratique nous remarquons que les interactions d'ordre 3 (type 123) et plus sont souvent négligeables. Ainsi pour cinq facteurs, le plan complet propose $2^5=32$ essais, alors que nous ne sommes vraiment intéressés que par 16 informations.

- la moyenne qui est unique
- les effets des facteurs
- les interactions de deuxième ordre au nombre de $C_2^5=10$

Pour recueillir seulement 16 informations, il est dommage de devoir faire 32 essais. La solution proposée par les plans fractionnaires, consiste à utiliser pour l'étude de k facteurs les matrices des effets des plans complets 2^{k-1} , 2^{k-2} , ou 2^{k-p} . L'avantage de ces plans est

évident : la charge expérimentale est divisée par 2^p car $2^{k-p} = \frac{2^k}{2^p}$.

4.2.2. Théorie des aliases

Reprenons le dernier exemple. L'expérimentateur a réalisé huit essais. Aurait-il pu en réaliser moins, par exemple, la moitié ? Supposons qu'il ne réalise que la moitié des essais soit $2^{3-1} = 2^2 = 4$ essais. La matrice d'expériences se présente selon le tableau 4.5 et les réponses sont, bien sûr les mêmes que celles de l'exemple précédent.

Tableau 4.5 : Matrice des expériences (étude d'une émulsion de bitume)

Essai N°	1	2	12	y
1	-1	-1	1	$y_1=30$
2	1	-1	-1	$y_2=37$
3	-1	1	-1	$y_3=26$
4	1	1	1	$y_4=16$

On peut comparer les effets calculés à partir de ce plan fractionnaire avec le plan complet (Tableau 4.6).

Tableaux 4.6 : Comparaison des effets calculés

Effets	Plan complet	Plan fractionnaire
Moyenne	27,25	27,25
1	-1	0,75
2	-6	-6,25
3	-4	-4,25

Ces résultats sont tout à fait comparables à ceux qui ont été obtenus avec le plan complet de huit essais. Il semble donc que, pour un effort moindre on puisse obtenir les mêmes résultats. Cela paraît surprenant et n'a-t-il pas fallu rien donner en échange des quatre essais ? Quel est donc le prix à payer pour faire moins d'essais pour faire apparaître la réponse ? Reprenons la valeur de l'effet 3 et de l'interaction 12 calculée avec le plan complet :

$$a_3 = \frac{1}{8}(-y_1 - y_2 - y_3 - y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8)$$

$$a_{12} = \frac{1}{8}(+y_1 - y_2 - y_3 + y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8)$$

Et additionnant :

$$a_3 + a_{12} = \frac{1}{4}(-y_2 - y_3 + y_5 + y_8)$$

On retrouve la quantité :

$$c_3 = a_3 + a_{12} = -4,25$$

C'est à dire que c_3 est égal à l'effet principal a_3 augmenté de l'interaction a_{12} . On dit que a_1 et a_{12} sont aliasés La quantité c_3 peut être appelée alias ou contraste ou simplement effet.

On verra de même que :

$$c_1 = a_1 + a_{23} = -0,75$$

$$c_2 = a_2 + a_{13} = -6,25$$

Le modèle du plan fractionnaire 2^{3-1} s'écrit :

$$y = c_0 + c_1x_1 + c_2x_2 + c_3x_3$$

4.2.3. Les hypothèses d'interprétation

L'interprétation des plans fractionnaires est plus complexe que celle des plans complets. Nous indiquons les hypothèses d'interprétation des plans couramment utilisés. Elles sont commodes et souvent vérifiées mais il faut toujours les garder à l'esprit car elles peuvent être mise en défaut [3].

A. Hypothèse 1

Les interactions du troisième ordre ou d'ordre plus élevé sont considérées comme négligeables.

B. Hypothèse 2

Si un contraste est nul, cela peut signifier :

- Que les effets aliasés sont tous nuls, cas le plus probable que nous retiendrons
- Que les effets aliasés se compensent. Cette hypothèse est peu probable. Elle n'est pas retenue

C. Hypothèse 3

Si deux effets sont forts, on se méfiera de leur interaction qui peut également être forte.

D. Hypothèse 4

Si deux effets sont faibles, on supposera que leur interaction l'est aussi.

4.2.4. Calcul des contrastes

Reprenons la matrice des effets d'un plan 2^3 où l'ordre des essais a été choisi pour faire ressortir deux plans 22 pour les facteurs 1 et 2. Le plan 2^3 a donc été divisé en deux demi-plans (Tableau 4.7).

Tableau 4.7 : Matrice de calcul des contrastes pour les deux demi plans fractionnaires

Essai N°	I	1	2	3	12	13	23	123	
5	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1 ^{ère} demi plan
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	
8	1	1	1	1	1	1	1	1	
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	2 ^{ème} demi plan
6	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	
7	1	1	1	1	-1	-1	1	-1	
4	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	

Considérons le demi plan supérieur. En notation de Box, on constate que 3 et 12 sont égaux puisqu'ils ont la même suite de signes + - - +, on peut écrire :

$$3 = 12$$

Or, on avait démontré

$$c_3 = a_3 + a_{12}$$

Donc $3 = 12$ est équivalent à $c_3 = a_3 + a_{12}$. Cette relation d'équivalence est valable dans les deux sens et elle constitue la base de la théorie des aliases. On montre de même

que :

$$1 = 23 \text{ est équivalent à } c_1 = a_1 + a_{23}$$

$$2 = 13 \text{ est équivalent à } c_2 = a_2 + a_{13}$$

On peut trouver ces relations toujours dans le demi plan supérieur, les deux colonnes de signe + permettent d'écrire :

$$I = 123$$

En multipliant successivement cette relation appelée le générateur des aliases par 1, 2 et 3 :

$$1. I = 1.123 = 1^2 23 = 23$$

$$2. I = 2.123 = 12^2 3 = 13$$

$$3. I = 3.123 = 123^2 = 12$$

4.2.5. Construction pratique d'un plan fractionnaire

La construction pratique des plans fractionnaires est basée sur :

- On choisit un plan complet et l'on écrit sa matrice de calcul des effets. On appelle cette matrice le plan de base
- Dans ce plan de base, on choisit une colonne de signes correspondant à une interaction la plus élevée possible (pour qu'elle ait le plus de chance d'être faible) pour étudier le facteur supplémentaire

Pour illustrer cette construction des plans fractionnaires prenons comme plan de base 2^3 , la matrice des effets comprend 3 interactions d'ordre 2 et une d'ordre 3. Le plan complet permet d'étudier trois facteurs sur les colonnes 1,2 et 3.

Essais	1	1	2	3	12	13	23	123	
1	(1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
2		1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
3		1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
4		1	1	1	-1	1	-1	-1	-1
5		1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
6		1	1	-1	1	-1	1	-1	-1
7		1	-1	1	1	-1	-1	1	-1
8		1	1	1	1	1	1	1	1

Si nous voulons étudier 4 facteurs, nous conservons les trois premières colonnes de signes pour les trois premiers facteurs et nous choisirons la colonne d'une interaction pour le quatrième facteur. Pour fixer les idées, prenons la colonne de l'interaction 12 et écrivons que l'on attribue au facteur supplémentaire 4 les niveaux définis par les signes de cette interaction :

$$4 = 12$$

D'où le générateur d'aliases

$$4.4 = 4.12$$

$$I = 124$$

En multipliant ce générateur successivement par 1, 2, 3 et 4, on obtient :

$$1 = 24 \text{ est équivalent à } c_1 = a_1 + a_{24}$$

$$2 = 14 \text{ est équivalent à } c_2 = a_2 + a_{14}$$

$$4 = 12 \text{ est équivalent à } c_4 = a_4 + a_{12}$$

$$3 = 1234 \text{ est équivalent à } c$$

On aurait pu alier le facteur 4 sur une autre interaction, on aurait eut d'autres valeurs des contrastes. Il est tout à fait possible d'étudier deux facteurs supplémentaires, plan 2^{5-2} . On peut choisir comme aliasés :

$$4 = 12$$

$$5 = 13$$

D'où les générateurs d'aliasés indépendants :

$$I = 124$$

$$I = 135$$

Si l'on multiple ces deux générateurs membre à membre, on obtient un troisième générateur :

$$I \cdot I = 124.135$$

$$I = 2345$$

Deux facteurs supplémentaires introduisent donc un groupe d'aliasés ou GGA comportant quatre termes.

$$I = 124 = 135 = 2345$$

On utilise ce GGA pour savoir comment les facteurs et les interactions sont aliasés dans les contrastes que l'on calcule avec ce plan fractionnaire. Par exemple pour déterminer le contraste c_1 on multipliant tous les termes du GGA par la colonne 1 :

$$1. I = 1.124 = 1.135 = 1.2345$$

$$1 = 24 = 25 = 12345 \text{ est équivalent à } c_1 = a_1 + a_{24} + a_{35} + a_{12345}$$

Pour un plan de base 24, la matrice des effets comprend six interactions d'ordre 2, quatre d'ordre 3, et une d'ordre 4. Le plan complet permet d'étudier quatre facteurs 1, 2, 3, et 4. Pour étudier 8 facteurs, le plan complet contient 256 effets et interactions, le plan $2^8 = 2^4$ ne permettra de calculer que 16 contrastes. Il faut quatre interactions pour étudier les quatre facteurs supplémentaires. On peut choisir comme aliasés :

$$5 = 123$$

$$6 = 124$$

$$7 = 134$$

$$8 = 1234$$

Les quatre générateurs d'alias indépendants sont :

$$I = 1235 = 1246 = 1347 = 12348$$

Les générateurs dépendants se calculent à partir des générateurs indépendants en les multipliant 2 à 2, 3 à 3, et 4 à 4.

Multiplication 2 à 2 :

$$1235.1246 = 3456$$

$$1235.1347 = 2457$$

$$1235.12348 = 458$$

$$1246.1347 = 2367$$

$$1246.12348 = 368$$

$$1347.12348 = 278$$

Multiplication 3 à 3 :

$$1235.1246.1347 = 1567$$

$$1235.1246.12348 = 12568$$

$$1235.1347.12348 = 13578$$

$$1246.12348.1347 = 14678$$

Multiplication 4 à 4 :

$$1235.1246.1347.12348 = 2345678$$

Le groupe de générateurs d'alias (GGA) sera donc :

$$I = 278 = 368 = 458 = 1235 = 1246 = 1347 = 3456 = 2457 = 2367$$

$$= 12348 = 1567 = 12568 = 13578 = 14678 = 2345678$$

Le calcul complet est présenté ici pour le facteur 1:

$$c_1 = a_1 + a_{235} + a_{246} + a_{347} + a_{567} + a_{1278} + a_{1368} + a_{1458} + a_{13456} + a_{12457} + a_{12367} + a_{2568} + a_{2348} + a_{3578} + a_{4678} + a_{12345678}$$

De même si l'on néglige les interactions d'ordre supérieur à trois on peut écrire :

$$c_1 = a_1,$$

$$c_6 = a_6 + a_{38},$$

$$c_{14} = a_{14} + a_{26} + a_{37},$$

$$c_2 = a_2 + a_{78},$$

$$c_7 = a_7 + a_{28},$$

$$c_{23} = a_{23} + a_{15} + a_{67},$$

$$c_3 = a_3 + a_{68},$$

$$c_8 = a_8 + a_{45} + a_{36} + a_{27},$$

$$c_{24} = a_{24} + a_{16} + a_{57},$$

$$c_4 = a_4 + a_{58},$$

$$c_{12} = a_{12} + a_{35} + a_{46},$$

$$c_{34} = a_{34} + a_{17} + a_{56},$$

$$c_5 = a_5 + a_{48},$$

$$c_{13} = a_{13} + a_{25} + a_{47},$$

$$c_{234} = a_{234} + a_{18},$$

4.2.6. Notion de résolution

Nous avons vu que dans un plan fractionnaire les effets principaux sont aliasés avec des interactions d'ordres différents. La résolution $[X]$ d'un plan est égale à 1 plus la valeur de l'ordre de l'interaction d'ordre le moins élevé. Par exemple si un facteur principal est aliasé avec des interactions d'ordre 2, 3 et 4, la résolution sera $1+2 = 3$. On écrit souvent la résolution en chiffres romains. On écrit résolution III.

4.2.7. Avantages et inconvénients

Les avantages des plans fractionnaires sont les mêmes que ceux des plans factoriels complets à deux niveaux. Mais, en plus ils permettent d'échapper au principal inconvénient de ces derniers : le grand nombre d'essais. Il faut ajouter un avantage considérable, celui de pouvoir mener les travaux par séquences. Par exemple on commence par un plan 2^{6-3} et s'il s'avère nécessaire de faire des essais complémentaires pour lever les ambiguïtés, on poursuivra les expériences en exécutant un deuxième plan 2^{6-3} qui, ajouté au premier donnera deux plans 2^{6-3} soit $2 \cdot 2^{6-3}$ ou 2^{6-3+1} que l'on écrira plus simplement 2^{6-2} .

En face de tous ces avantages, il y a peu d'inconvénients. Le plus important serait peut être que l'expérimentateur doit faire un effort pour apprendre à maîtriser l'emploi des plans factoriels fractionnaires.

4.3. Plans de MOZZO

Ces plans ont la particularité d'être séquentiels [15]. On peut d'abord étudier deux facteurs en trois essais dans un domaine triangulaire. Puis, si l'on décide d'étudier un troisième facteur, on fera trois essais de plus (essais 4, 5 et 6 du tableau 4.8). Cette séquentialité n'est obtenue que si on a pris la précaution de fixer les facteurs non étudiés à un niveau constant pendant l'étude des premiers facteurs. Par exemple, le facteur 3 sera fixé au niveau -1 pendant l'étude des facteurs 1 et 2. Pour étudier le facteur 3, on fixera son niveau à +1 et on exécutera un plan triangulaire avec les deux premiers facteurs. Au fur et à mesure que l'on ajoute des facteurs, on peut ajouter certaines interactions au premier modèle de base.

Tableau 4.8 : Plans de Mozzo pour 2, 3 et 4 facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4
1	0,268	1	-1	-1
2	0,732	-0,732	-1	-1
3	-1	-0,268	-1	-1
4	-0,268	-1	1	-1
5	-0,732	0,732	1	-1
6	1	0,268	1	-1
7	-0,268	-1	-1	1
8	-0,732	0,732	-1	1
9	1	0,268	-1	1
10	0,268	1	1	1
11	0,732	-0,732	1	1
12	-1	-0,268	1	1

4.3.1. Plan de Mozzo pour deux facteurs

Il s'agit d'un plan permettant d'étudier deux facteurs en trois essais. Les points expérimentaux sont disposés en triangle. La figure 4.4 indique l'une des dispositions possibles de ce triangle.

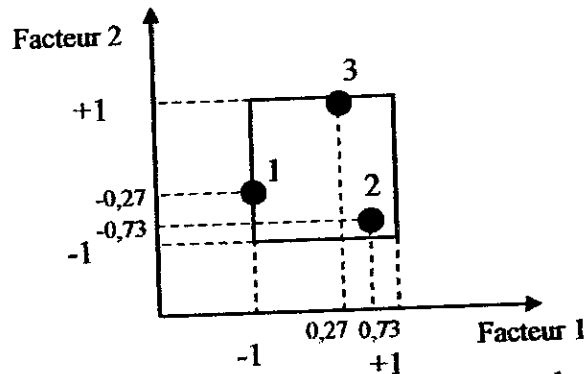


Figure 4.4 : Domaine d'étude du plan de Mozzo pour deux facteurs

Le modèle mathématique a priori est très simple puisqu'il n'y a que peu de points expérimentaux. C'est un modèle de premier degré sans interaction.

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3$$

Écrivons la matrice des effets X :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0,268 & 1 \\ 1 & 0,732 & -0,732 \\ 1 & -1 & -0,268 \end{pmatrix}$$

Le calcul de la matrice tXX se fait immédiatement :

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1,608 & 0 \\ 0 & 0 & 1,608 \end{pmatrix}$$

La matrice X est bien orthogonale. On constate que les éléments des termes du premier degré sont égaux. Il en résulte que ce plan satisfait aussi le critère d'isovariance par rotation.

4.3.2. Plan de Mozzo pour trois facteurs

Il s'agit des six premiers essais du tableau 4.7. La figure 4.5 indique la disposition des points expérimentaux dans l'espace expérimental.

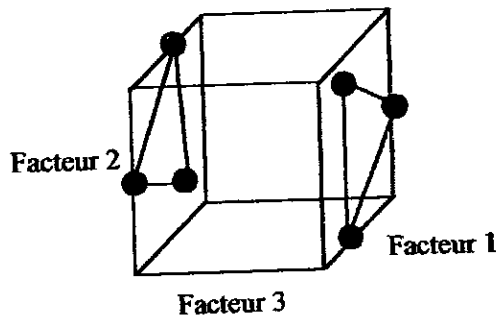


Figure 4.5 : Domaine d'étude du plan de Mozzo pour trois facteurs

Comme il y a six points expérimentaux, on peut, théoriquement, déterminer six inconnues. On peut donc adopter un modèle du premier degré avec des interactions. Mais étant donné la disposition des points, on ne peut pas obtenir d'interaction avec le troisième facteur. On ne peut introduire que l'interaction entre les facteurs 1 et 2. Soit le modèle :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2$$

Écrivons la matrice X :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0,268 & 1 & -1 & 0,268 \\ 1 & 0,732 & -0,732 & -1 & -0,536 \\ 1 & -1 & -0,268 & -1 & 0,268 \\ 1 & -0,268 & -1 & 1 & 0,268 \\ 1 & -0,732 & 0,732 & 1 & -0,536 \\ 1 & 1 & 0,268 & 1 & 0,268 \end{pmatrix}$$

On peut calculer la matrice d'information pour voir si l'orthogonalité est toujours conservée.

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 6 & & & & \\ & 3,22 & & & \\ & & 3,22 & & \\ & & & 6 & \\ & & & & 0,86 \end{pmatrix}$$

4.3.3. Avantages et inconvénients

- L'avantage principal de ces plans est le nombre d'essais à réaliser qui est très restreint. Pour deux facteurs il faut réaliser juste trois essais et chaque facteur prend trois niveaux.
- Les inconvénients des plans de Mozzo sont : le plan n'existe pas pour n'importe quel nombre de facteurs, le modèle retenu n'admet pas d'une façon générale toutes les interactions entre les facteurs.

4.4. Plans factoriels complets à trois niveaux

Ces plans permettent d'étudier k facteurs à raison de trois niveaux par facteur. La notation de ces plans est 3^k , le k en exposant signifie qu'il y a k facteurs à étudier, et le trois signifie que chaque facteur prend 3 niveaux. Cette notation indique également le nombre d'essais à effectuer.

4.4.1. Construction des plans complets à 3 niveaux

Les plans à 3 niveaux seront tous définis de la manière suivante :

- la suite des chiffres du premier facteur est -1, 0, +1; -1, 0, +1; ...
- la suite des chiffres du deuxième facteur est constituée de -1, -1, -1 suivis de 0, 0, 0 et de +1, +1, +1, ..., -1, -1, -1; 0, 0, 0; +1, +1, +1; -1, -1, -1; 0, 0, 0; +1, +1, +1; ...
- le troisième facteur aura 9 niveaux égaux à -1 suivis de 9 égaux à 0 et enfin de 9 égaux à +1

- le quatrième facteur aura 27 niveaux égaux à -1 suivis de 27 égaux à 0 et enfin de 27 égaux à +1
- etc...

Pour deux facteurs, le nombre d'essais à réaliser est $3^2 = 9$ essais. La matrice d'expériences est donnée par le tableau 4.9.

Tableau 4.9 : Matrice d'expérience pour un plan 3^2

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2
1	-1	-1
2	0	-1
3	1	-1
4	-1	0
5	0	0
6	1	0
7	-1	1
8	0	1
9	1	1

Le domaine d'étude est représenté par la figure 4.6.

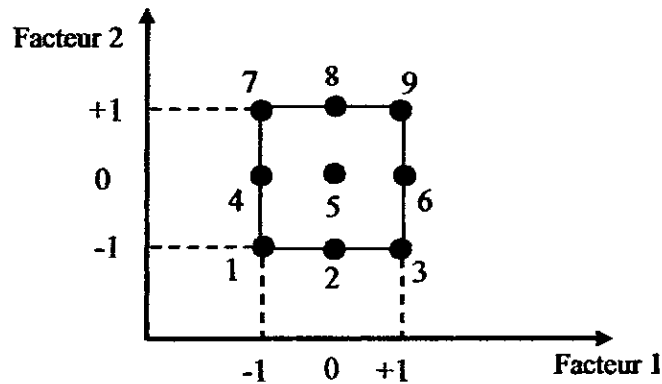


Figure 4.6 : Domaine d'étude pour un plan 3^2

Pour 3 facteurs nous obtenons un cube dont les vingt sept essais sont indiqués dans la figure 4.7.

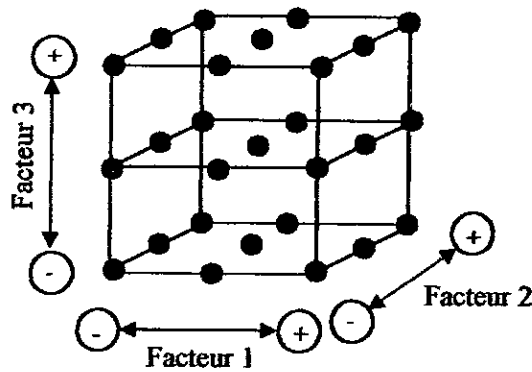


Figure 4.7 : Domaine d'étude pour un plan 3^3

4.4.2. Avantages et inconvénients

- Les avantages des plans factoriels complets à trois niveaux sont les mêmes que ceux des plans factoriels complets à deux niveaux. Mais, le modèle retenu par ces plans est du second degré
- L'inconvénient principal de ces plans est que la taille du plan peut être très grande lorsque le nombre de facteurs augmente

4.5. Plans Composites

Les plans composites [16, 17] sont des plans souvent utilisés car ils se prêtent bien au déroulement séquentiel d'une étude. La première partie de l'étude est un plan factoriel complet auquel on ajoute des points au centre afin de vérifier la validité du modèle de premier degré. Si les tests de validation sont positifs, l'étude s'achève le plus souvent, mais s'ils sont négatifs, on entreprend des essais supplémentaires pour établir un modèle du second degré. Ces essais constituent la seconde étape du déroulement de l'étude. Les essais supplémentaires sont situés sur les axes de chacun des facteurs, et sont appelés les points en étoile. Les plans composites présentent donc trois parties :

1. plan factoriel à deux niveaux par facteur analogue à ceux que nous avons précédemment décrits
2. plan en étoile où tous les points sont situés à la même distance du centre de domaine d'étude
3. on réalise au moins un essai au centre du domaine expérimental. Ces points sont importants et ils ont plusieurs rôles :
 - Ils servent à tester la validité du modèle du premier degré
 - Ils servent à s'assurer qu'il n'y a pas de glissement (stabilité) entre les deux séries

d'essais

- Ils permettent d'obtenir une estimation de l'erreur expérimentale

Le nombre total des essais N à réaliser est la somme :

- des essais du plan factoriel, soit n_f
- des essais au centre, soit n_c
- des essais du plan en étoile, soit n_0

Le nombre total des essais d'un plan composite est donné par :

$$N = n_f + n_c + n_0$$

Le nombre de niveaux d'un plan composite est de cinq par facteur : le point central, les deux niveaux du plan factoriel et les deux niveaux des points en étoile.

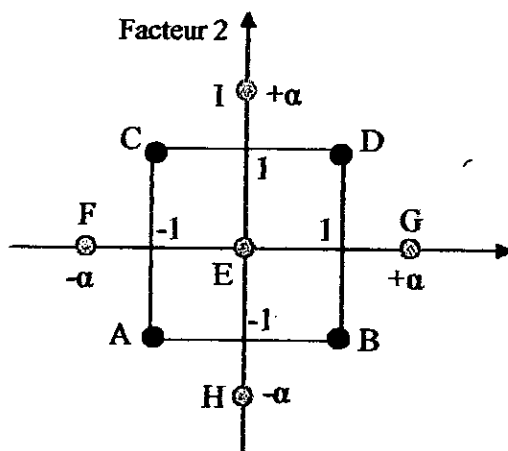


Figure 4.8 : Plan composite pour l'étude de deux facteurs

La figure 4.8 représente un plan composite pour deux facteurs.

- les points A, B, C et D sont les points expérimentaux d'un plan factoriel 2^2
- Le point E est le point central. Ce point peut avoir été répliqué une ou plusieurs fois
- Les points F, G, H et I sont les points d'un plan en étoile

La matrice d'expériences correspondante à ce plan est donnée par le tableau 4.10.

La distance des points en étoile au centre du domaine est notée par la lettre grecque α .

Tableau 4.10 : Matrice d'expériences d'un plan composite pour deux facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1
5	$-\alpha$	0
6	α	0
7	0	$-\alpha$
8	0	α
9 à 11	0	1

4.5.1. Propriétés des plan composites

4.5.1.1. Modèle mathématique postulé

Le modèle du mathématicien utilisé avec les plans composites est un modèle du second degré avec interactions. En général, on ne conserve que les interactions d'ordre deux.

Pour deux facteurs

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$

Pour trois facteurs

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2$$

4.5.1.2. Matrice de calcul

Pour deux facteurs la matrice de calcul X est une matrice (11,6) puisqu'il y a 11 expériences et 6 coefficients dans le modèle postulé :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\alpha & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & \alpha & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & 0 & \alpha^2 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & 0 & \alpha^2 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

4.5.1.3. Matrice d'information

La matrice d'information est calculée à partir de la matrice de calcul $'XX$ Pour 2 facteurs on a :

$$'XX = \begin{pmatrix} 11 & 0 & 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 4+2\alpha^2 \\ 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 4+2\alpha^4 & 4 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 4 & 4+2\alpha^4 \end{pmatrix}$$

D'une manière générale, la matrice d'information peut s'écrire :

$$'XX = \begin{pmatrix} N & 0 & 0 & 0 & n_f + 2\alpha^2 & n_f + 2\alpha^2 \\ 0 & n_f + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n_f + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n_f & 0 & 0 \\ n_f + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & n_f + 2\alpha^4 & n_f \\ n_f + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & n_f & n_f + 2\alpha^4 \end{pmatrix}$$

4.5.1.4. Critères d'optimalité

Suivant le critère d'optimalité choisi, la valeur de α ne sera pas la même.

A. Isovariance par rotation

Les éléments de la matrice d'information doivent satisfaire la relation [5] :

$$3 n_f = n_f + 2 \alpha^4$$

$$\Rightarrow 2n_f = 2\alpha^4$$

$$\Rightarrow \alpha = (n_f)^{\frac{1}{4}}$$

Dans le cas d'un plan composite pour deux facteurs ayant ses points en étoile situés à 1,414 du centre, la matrice d'information est la suivante :

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 11 & & & 8 & 8 \\ & 8 & & & \\ & & 8 & & \\ & & & 4 & \\ 8 & & & & 12 & 4 \\ 8 & & & & 4 & 12 \end{pmatrix}$$

Cette matrice respecte bien le critère d'isovariance par rotation : trois fois $4 = 12$.

B. Presque orthogonalité

Au lieu de l'isovariance par rotation, on pourrait vouloir respecter le critère d'orthogonalité. Il faudrait une disposition des points qui entraîne une matrice tXX diagonale. Cela n'est pas possible car on ne peut pas annuler les éléments correspondants aux termes constants et aux termes carrés. Rappelons qu'il faut que la sous matrice, obtenue en éliminant la première ligne et la première colonne de $({}^tXX)^{-1}$ doit être diagonale. On démontre que cela est possible si [5] :

$$\alpha = \left(\frac{n_f(\sqrt{N} - \sqrt{n_f})^2}{4} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Pour deux facteurs on a $\alpha=1.21$. Écrivons la matrice d'information correspondante :

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 12 & 0 & 0 & 0 & 6,928 & 6,928 \\ 0 & 6,928 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6,928 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 6,928 & 0 & 1 & 0 & 8,287 & 4 \\ 6,928 & 0 & 0 & 0 & 4 & 8,287 \end{pmatrix}$$

La matrice de dispersion correspondante est bien presque orthogonale puisque si l'on élimine la première ligne et la première colonne, on obtient une matrice diagonale.

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 0,239 & 0 & 0 & 0 & -0,135 & -0,135 \\ 0 & 0,144 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,144 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,25 & 0 & 0 \\ -0,135 & 0 & 1 & 0 & 0,233 & 4 \\ -0,135 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0,233 \end{pmatrix}$$

4.5.1.5. Ecart type des coefficients du modèle prédictif.

La variance de chacun des coefficients du modèle postulé est donnée par la formule (2.2).

$$\text{var}(\hat{a}_i) = \text{Diag var}(\hat{A}) = \sigma^2 \text{Diag } ({}^tXX)^{-1}$$

En prenant les racines carrées des éléments diagonaux de la matrice de variance covariance, on obtient les écarts types des coefficients.

$$\begin{array}{ll} \sigma(\hat{a}_0) = 0,500 \sigma & \sigma(\hat{a}_0) = 0,489 \sigma \\ \sigma(\hat{a}_1) = 0,353 \sigma & \sigma(\hat{a}_1) = 0,380 \sigma \\ \sigma(\hat{a}_2) = 0,353 \sigma & \sigma(\hat{a}_2) = 0,380 \sigma \\ \sigma(\hat{a}_{22}) = 0,500 \sigma & \sigma(\hat{a}_{22}) = 0,500 \sigma \\ \sigma(\hat{a}_{11}) = 0,395 \sigma & \sigma(\hat{a}_{11}) = 0,483 \sigma \\ \sigma(\hat{a}_{22}) = 0,395 \sigma & \sigma(\hat{a}_{22}) = 0,483 \sigma \end{array}$$

4.5.2. Avantages et inconvénients

Les plans composites permettent de mener un travail progressif et rationnel. L'expérimentateur peut réaliser un premier plan factoriel. Ce plan lui indiquera si le domaine retenu doit être conservé et quelle sera l'influence des différents facteurs. S'il existe encore des ambiguïtés à la fin de l'analyse de ce premier plan factoriel, l'expérimentateur pourra faire un plan complémentaire. Ayant défini le bon domaine et connaissant les facteurs influents, il doit s'assurer que le modèle du premier degré est valide. S'il l'est, il peut s'arrêter, s'il ne l'est pas, il doit passer à un modèle du second degré. C'est là que les points expérimentaux supplémentaires du plan en étoile sont précieux.

4.6. Plans de Box-Behnken

Box et Behnken ont proposé en 1960 [18] ces plans qui permettent d'établir des modèles du second degré. En effet tous les facteurs ont trois niveaux, -1 , 0 et $+1$. Ces plans sont faciles à mettre en oeuvre et possèdent la propriété de séquentialité.

4.6.1. Construction des plans de Box-Behnken

Pour 3 facteurs nous avons un cube pour 4 et 5 facteurs nous aurons des hyper cubes à 4 et 5 dimensions (lorsque le nombre de facteurs dépasse 3, nous parlerons de 4-cube, 5-cube, ..., k-cube). On place les points expérimentaux non pas aux sommets du cube ou l'hyper cube, mais au milieu des arêtes, au centre des faces (carrés) ou au centre des cubes.

- Pour trois facteurs, on a un cube. Le cube possède 12 arêtes et donc le plan à 12 essais. On ajoute 3 essais au centre du domaine d'étude. On obtient au total 15 essais (Figure 4.9)

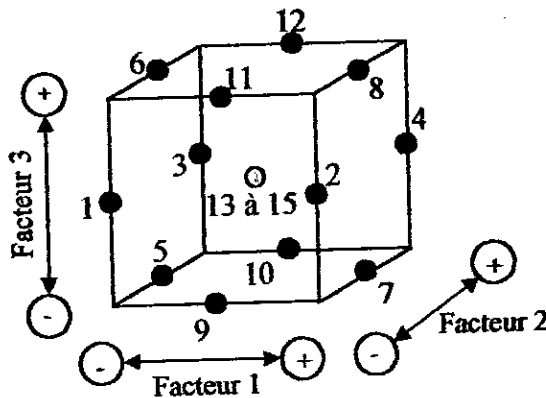


Figure 4.9 : Plan de Box-Behnken pour trois facteurs

La construction du plan suit le principe suivant : deux facteurs décrivent un carré (4 essais d'un plan 2^2) et les coordonnées correspondantes du troisième facteur valent zéro. Le tableau 4.11 indique ces essais.

Tableau 4.11 : Plan de Box-Behnken pour trois facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
1	-1	-1	0
2	1	-1	0
3	-1	1	0
4	1	1	0
5	-1	0	-1
6	1	0	-1
7	-1	0	1
8	1	0	1
9	0	-1	-1
10	0	1	-1
11	0	-1	1
12	0	1	1
13 à 15	0	0	0

- Pour 4 facteurs, le plan est bâti sur un hyper cube à 4 dimensions. Les points expérimentaux sont situés au centre des 24 carrés. La construction du plan est la suivante : deux facteurs décrivent un carré (4 essais d'un plan 2^2), le troisième et le quatrième facteur ont leurs coordonnées égales à zéro. On pourrait ajouter trois points au centre du domaine d'étude (Tableau 4.12)

Tableau 4.12 : Plan de Box-Behnken pour quatre facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4
1 à 4	± 1	± 1	0	0
5 à 8	± 1	0	± 1	0
9 à 12	± 1	0	0	± 1
13 à 16	0	± 1	± 1	0
17 à 20	0	± 1	0	± 1
21 à 24	0	0	± 1	± 1
25 à 27	0	0	0	0

Dans ce tableau les niveaux des facteurs sont indiqués par ± 1 . Cela signifie que ce facteur prend successivement les niveaux +1 et -1 et que toutes les combinaisons sont réalisées.

4.6.2. Propriété du plan de Box-Behnken

4.6.2.1. Modèle mathématique postulé

Le modèle utilisé est un modèle du second degré avec les interactions d'ordre deux. Pour 3 facteurs le modèle s'écrit :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2$$

4.6.2.2. Matrice de calcul

La matrice de calcul est construite à partir du plan d'expériences et du modèle postulé. Pour trois facteurs la matrice est donnée par :

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

4.6.2.3. Matrice d'information

Cette matrice est calculée à partir de la matrice de calcul tXX . Pour trois facteurs on a :

Tableau 4.13 : Plan de Box-Behnken pour six facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4	Facteur 5	Facteur 6
1 à 8	± 1	± 1	0	± 1	0	0
9 à 16	0	± 1	± 1	0	± 1	0
17 à 24	0	0	± 1	± 1	0	± 1
25 à 32	± 1	0	0	± 1	± 1	0
33 à 40	0	± 1	0	0	± 1	± 1
41 à 48	± 1	0	± 1	0	0	± 1
49 à 52	0	0	0	0	0	0

0

Tableau 4.14 : Plan de Box-Behnken pour sept facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4	Facteur 5	Facteur 6	Facteur 7
1 à 8	0	0	0	± 1	± 1	± 1	0
9 à 16	± 1	0	0	0	0	± 1	± 1
17 à 24	0	± 1	0	0	± 1	0	± 1
25 à 32	± 1	± 1	0	± 1	0	0	0
33 à 40	0	0	± 1	± 1	0	0	± 1
41 à 48	± 1	0	± 1	0	± 1	0	0
49 à 52	0	± 1	± 1	0	0	± 1	0
57 à 62	0	0	0	0	0	0	0

4.6.4. Avantages et inconvénients

Les plans de Box-Behnken sont faciles à construire, et permettent de réaliser un modèle du deuxième degré. Mais dès que le nombre de facteurs à étudier devient grand ces plans obligent à faire beaucoup d'essais.

4.7. Plans de Doehlert

La caractéristique principale des plans de Doehlert [19, 20] est d'avoir une répartition uniforme des points expérimentaux dans l'espace expérimental. C'est une démarche différente de celle que nous avons rencontrée jusqu'ici. On ne cherche pas le meilleur emplacement des points expérimentaux pour un modèle donné. On répartit simplement les points de manière régulière sans se poser de questions sur le critère d'optimalité.

4.7.1. Plans de Doehlert pour deux facteurs

Pour deux facteurs les points expérimentaux forment un hexagone régulier (Figure 4.10). Tous les points sont à la même distance du centre du domaine d'étude.

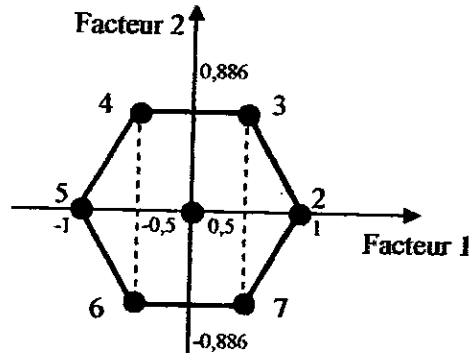


Figure 4.10 : Plan de Doehlert pour l'étude de deux facteurs

La matrice d'expériences correspondante à ce plan est donnée par le tableau 4.15.

Tableau 4.15 : Matrice d'expériences d'un plan de Doehlert pour deux facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2
1	0	0
2	1	0
3	0,5	0,866
4	-0,5	0,866
5	-1	0
6	-0,5	-0,866
7	0,5	-0,866

La disposition des points expérimentaux selon la figure 4.9 conduit à cinq niveaux pour le premier facteur x_1 et trois niveaux pour le deuxième facteur x_2 . Tous les points du plan de Doehlert sont sur un cercle de rayon unité (en grandeurs centrées réduites). Le domaine défini par les plans de Doehlert est un domaine sphérique, un cercle pour deux facteurs, une sphère pour trois facteurs et une hyper sphère pour plus de trois facteurs.

4.7.2. Module mathématique postulé

Le modèle mathématique postulé des plans de Doehlert est, en général, un modèle du second degré avec interactions d'ordre deux. Pour deux facteurs, on a :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$

4.7.3. Plan de Doehlert pour k facteurs

Les plans de Doehlert sont utilisables pour un nombre quelconque de facteurs. Nous indiquons sur un seul tableau les plans de Doehlert jusqu'à quatre facteurs. Le plan à quatre facteurs comprend les essais de 1 à 21. Le tableau 4.15 montre bien que le premier plan de Doehlert (essais 1 à 7) est au niveau zéro du troisième facteur. On peut donc traiter deux facteurs en réalisant les essais 1 à 7. Puis, si cela est nécessaire effectuer les essais 8 à 13 pour étudier le troisième facteur. Il en sera de même pour le quatrième facteur. Cette possibilité de conduite séquentielle d'une étude est fort appréciable dans certains cas. Nous n'avons signalé qu'un seul point central, mais rien n'empêche, d'en réaliser plusieurs.

Tableau 4.16 : Plans de Doehlert pour deux à quatre facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4
1	0	0	0	0
2	1	0	0	0
3	0,5	0,866	0	0
4	-1	0,866	0	0
5	-0,5	0	0	0
6	0,5	-0,866	0	0
7	0	-0,866	0	0
8	0,5	0,289	0,816	0
9	-0,5	0,289	0,816	0
10	0	-0,577	0,816	0
11	0,5	-0,289	-0,816	0
12	-0,5	-0,289	-0,816	0
13	0	0,577	-0,816	0
14	0,5	0,289	0,204	0,791
15	-0,5	0,289	0,204	0,791
16	0	-0,577	0,204	0,791
17	0	0	-0,612	0,791
18	0,5	-0,289	-0,204	-0,971
19	-0,5	-0,289	-0,204	-0,971
20	0	0,577	-0,204	-0,971
21	0	0	0,612	-0,971
22	0	0	0	0

4.7.4. Avantages et inconvénients

La multiplicité des niveaux dans les plans de Doehlert ne facilite pas la construction du plan d'expériences. Lorsqu'on passe à quatre facteurs et plus il devient difficile de définir même les niveaux de chacun des facteurs. Il faut alors avoir recours à des matrices préparées à l'avance. Les plans de Doehlert permettent d'obtenir un modèle du second degré avec un minimum d'essais. Si on les compare aux plans composites on constate un léger gain pour deux facteurs (sept essais) alors qu'il faut neuf essais avec un plan composite pour explorer le domaine expérimental et calculer les coefficients du modèle. Dans le cas où les essais sont longs et coûteux, l'économie de deux expériences peut être avantageuse.

4.8. Plans de Roquemore

Les plans d'expériences proposés par Roquemore en 1976 [21] sont conçus pour des surfaces du second degré. Ils essaient de respecter à la fois le critère d'isovariance par rotation et le critère de presque orthogonalité. C'est la raison pour laquelle on les appelle les plans hybrides. Il est impossible de respecter simultanément ces deux critères. Ces plans sont presque saturés. Ils sont donc utiles lorsqu'on veut faire le moins d'essais possible. Ces plans existent pour trois, quatre et six facteurs et portent des noms particuliers. Ces noms sont constitués de trois indicateurs :

1. Le nombre de facteurs
2. Le nombre d'expériences
3. Une lettre pour différencier deux plans ayant le même nombre d'expériences et construits pour traiter le même nombre de facteurs

Pour trois facteurs, il y a deux plans de Roquemore, le 311A et le 311B. Ils permettent d'étudier 3 facteurs en 11 essais. Pour quatre facteurs il y a deux plans de Roquemore le 416A et le 416B. Pour 6 facteurs, il y a un plan de Roquemore, le 628A. Nous étudierons en détail le plan 311A et nous indiquerons simplement les autres plans sans les analyser.

4.8.1. Plan 311A de Roquemore

Comme son nom l'indique, ce plan permet d'étudier 3 facteurs en 11 essais.

4.8.1.1. Matrice d'expériences

Les points expérimentaux sont situés comme l'indique le tableau 4.17.

Tableau 4.17 : Plans de Roquemore 311A pour trois facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
1	0	0	2
2	0	0	-2
3	-1,414	-1,414	1
4	1,414	-1,414	1
5	-1,414	1,414	1
6	1,414	1,414	1
7	-2	0	-1
8	2	0	-1
9	0	-2	-1
10	0	2	-1
11	0	0	0

4.8.1.2. Emplacement des points expérimentaux

L'examen du tableau 4.17 permet de distinguer les éléments suivants :

- Un plan 2^2 est constitué de quatre points situés aux sommets d'un carré (essais 3, 4, 5 et 6). Ces essais sont au niveau +1 pour le facteur 3.
- Quatre points situés aux sommets d'un carré (essais 7, 8, 9 et 10) décalé de 45° par rapport au carré précédent. Ces points sont au niveau -1 du facteur 3.
- Trois points situés sur un axe passant par les centres des deux carrés précédents, le premier point est situé au niveau 0 du facteurs 3, c'est le point central. Les deux autres points sont respectivement situés au niveau +2 et -2 pour le troisième facteur (Figure 4.11).

L'isovariance par rotation est respectée pour les facteurs 1 et 2 car $48=3 \times 16$. Elle ne l'est pas pour le facteurs 3 ($40 \neq 3 \times 16$).

4.8.1.6. Matrice de dispersion

La matrice de dispersion est également une matrice (10,10). Elle va nous servir à calculer les variances des coefficients.

$$({}'XX)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & -0,188 & -0,188 & -0,25 \\ & 0,0625 & & & & & & & & & \\ & & 0,0625 & & & & & & & & \\ & & & 0,0625 & & & & & & & \\ & & & & 0,0625 & & & & & & \\ & & & & & 0,0625 & & & & & \\ & & & & & & 0,0625 & & & & \\ & & & & & & & 0,0625 & & & \\ -0,188 & & & & & & & & 0,061 & 0,029 & 0,029 \\ -0,188 & & & & & & & & 0,029 & 0,061 & 0,039 \\ -0,25 & & & & & & & & 0,029 & 0,039 & 0,094 \end{pmatrix}$$

4.8.1.7. Critère d'optimalité

L'examen de la matrice d'information montre que le plan de Roquemore 311A pour 3 facteurs respecte le critère d'isovariance par rotation pour 2 facteurs et ne le respecte pas pour le troisième. L'examen de la matrice de dispersion montre que le plan de Roquemore 311A ne respecte pas le critère de presque orthogonalité. Mais les valeurs des éléments hors diagonale principale sont faibles.

4.8.2. Autres plans de Roquemore

Les principaux plans hybrides de Roquemore concernent les plans à trois ou quatre facteurs. Ils existent aussi pour six facteurs. Nous indiquons ces divers plans dans les tableaux suivants: 4.18, 4.19. Les propriétés de ces plans s'obtiennent de la même manière que le plan 311A.

Tableau 4.18 : Plans de Roquemore 311B pour trois facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
1	0	0	2,449
2	0	0	-2,449
3	-0,751	-2,106	-1
4	0,751	-2,106	1
5	-0,751	2,106	1
6	0,751	2,106	-1
7	-2,106	-0,751	1
8	2,106	-0,751	-1
9	-2,106	0,751	-1
10	2,106	0,751	1
11	0	0	0

Tableau 4.19 : Plans de Roquemore 416B pour quatre facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4
1	0	0	0	1,732
2	0	0	0	-0,269
3	-1	-1	-1	0,605
4	1	-1	-1	0,605
5	-1	1	-1	0,605
6	1	1	-1	0,605
7	-1	-1	1	0,605
8	1	-1	1	0,605
9	-1	1	1	0,605
10	1	1	1	0,605
11	-1,518	0	0	-1,050
12	1,518	0	0	-1,050
13	0	-1,518	0	-1,050
14	0	1,518	0	-1,050
15	0	0	-1,518	-1,050
16	0	0	1,518	-1,050

Tableau 4.20 : Plans de Roquemore 416C pour quatre facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4
1	0	0	0	1,765
2	-1	-1	-1	0,568
3	1	-1	-1	0,568
4	-1	1	-1	0,568
5	1	1	-1	0,568
6	-1	-1	1	0,568
7	1	-1	1	0,568
8	-1	1	1	0,568
9	1	1	1	0,568
10	-1,470	0	0	-1,050
11	1,470	0	0	-1,050
12	0	-1,470	0	-1,050
13	0	1,470	0	-1,050
14	0	0	-1,470	-1,050
15	0	0	1,470	-1,050
16	0	0	0	0

4.8.3. Avantages et inconvénients

Avec ces plans on peut étudier 4 facteurs en 16 essais seulement et réaliser un modèle du deuxième degré. Si on les compare aux plans de Doehlert, il faut réaliser 21 essais. L'inconvénient de ces plans est qu'ils existent que pour 3, 4 et 6 facteurs seulement.

CHAPITRE 5

PROPOSITION DE DEUX NOUVEAUX PLANS D'EXPERIENCES

Dans cette partie nous proposons deux plans d'expériences. Nous avons décrit et défini ces deux plans à partir de la représentation géométrique du domaine d'étude. Nous comparerons leurs caractéristiques avec celles données par d'autres plans étudiés dans ce mémoire.

5.1. Premier plan proposé

5.1.1. Domaine d'étude, matrice d'expériences

La matrice d'expériences représentant le plan est une matrice orthogonale. La matrice de dispersion est donc diagonale. Une telle matrice est dite optimale. L'idée est d'ajouter des points à l'intérieur du domaine d'étude tout en conservant l'orthogonalité des matrices des plans factoriels. Pour deux facteurs les points expérimentaux sont disposés comme l'indique la figure 5.1 : on ajoute aux quatre points expérimentaux d'un plan factoriel complet 2^2 quatre autres points intérieurs au domaine et dont les coordonnées sont égales à $+\alpha$ ou $-\alpha$. On peut généraliser cette procédure plus de trois facteurs. Nous obtiendrons alors de nouveaux cubes ou hyper cubes situés à l'intérieur du domaine initial.

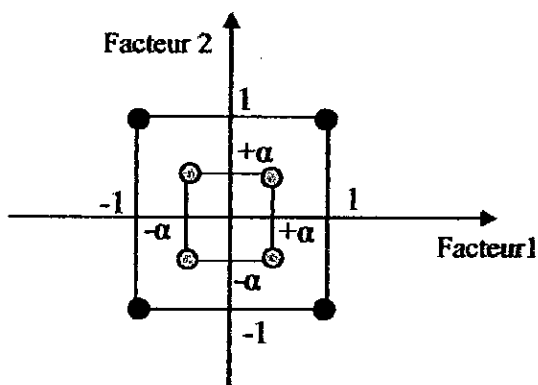


Figure 5.1 : Domaine expérimental pour deux facteurs

La plan associé à la figure 5.1 est représenté par le tableau 5.1.

Tableau 5.1 : Matrice d'expériences pour deux facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1
5	$-\alpha$	$-\alpha$
6	α	$-\alpha$
7	$-\alpha$	α
8	α	α

Le modèle mathématique postulé avec ce type de plan est un modèle du premier degré avec interactions d'ordre 2. Le calcul de la matrice d'information est immédiat :

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 8 & 0 & & \\ 0 & 4+4\alpha^2 & & \\ 0 & & 4+4\alpha^2 & \\ 0 & & & 4+4\alpha^4 \end{pmatrix}$$

5.1.2. Caractéristiques du premier plan proposé pour deux facteurs

Dans le tableau 5.2 qui regroupe les caractéristiques des matrices d'expériences, nous avons reporté pour chaque matrice d'expériences : le nombre d'expériences (Nb.exp), le nombre de niveaux par facteurs (Nb.niveaux), le déterminant de la matrice de dispersion $|({}^tXX)^{-1}|$, critère optimal-D), la trace de tXX (critère A), le déterminant de la matrice des moments noté $|M|$ (critère M), la valeur maximale de la fonction de variance de prédiction d_{max} et l'efficacité -G (critère G).

Tableaux 5.2 : Comparaison des caractéristiques du premier plan proposé avec le plan factoriel à deux niveaux et le plan de Mozzo

	Plan proposé $\alpha = 0,9$	Plan complet à niveaux Avec deux points au centre	Plan de MOZZO
Nb.exp	8	6	3
Nb.niveaux	4 ; 4	3 ; 3	3 ; 3
$ ({}^tXX)^{-1} $	$3,599 \cdot 10^{-4}$	$2,61 \cdot 10^{-3}$	0,129
$trace ({}^tXX)^{-1}$	0,552	0,92	1,5771
$ M $	0,678	0,296	0,287
d_{\max}	0,54	0,805	1,564
$Eff - G(\%)$	92,59	82,81	63,394

D'après le tableau 5.2, si on compare les propriétés des trois plans : plan proposé, plan complet à deux niveaux et plan de Mozzo, on constate qu'à part l'économie du nombre des essais à effectuer, toutes les propriétés d'optimalité sont améliorées.

- pour le plan proposé le déterminant de $({}^tXX)^{-1}$ est petit par rapport aux autres plans. Suivant le critère de D-optimalité le plan proposé est meilleur. Il en est de même pour la trace de $({}^tXX)^{-1}$ et donc le critère A est mieux respecté
- on voit que le déterminant de la matrice des moments pour le plan proposé est plus grand que celui des deux autres plans. Suivant le critère M le plan proposé est plus efficace
- de même les valeurs de d_{\max} et $Eff - G(\%)$ montrent que le plan proposé est toujours meilleur

5.2. Deuxième plan proposé

5.2.1. Domaine d'étude, Matrice d'expériences

Le premier plan proposé permet d'établir un modèle du premier degré avec interactions. Afin d'obtenir un modèle du second degré, on ajoute, comme pour les plans composites, deux points expérimentaux sur chaque axe et situés à la distance \hat{a} du centre du domaine d'étude. Pour deux facteurs le domaine d'étude est représenté par la figure 5.2.

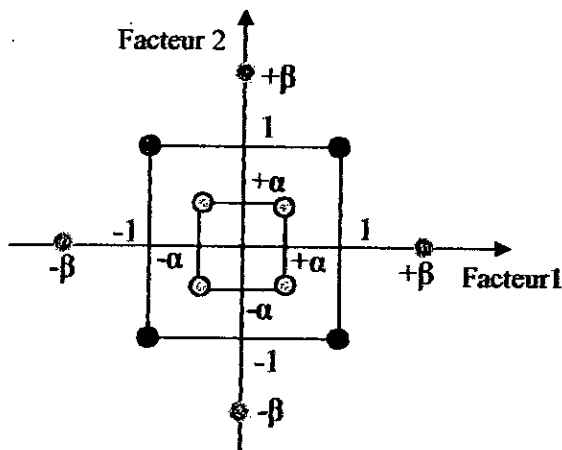


Figure 5.2 : Domaine d'étude pour deux facteurs

La matrice d'expériences correspondante est représentée par le tableau 5.3.

Tableau 5.3 : Matrice d'expériences pour deux facteurs

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1
5	$-\alpha$	$-\alpha$
6	α	$-\alpha$
7	$-\alpha$	α
8	α	α
9	$-\beta$	0
10	β	0
11	0	$-\beta$
12	0	β
13	0	0

Chaque facteur prendra sept niveaux. Le modèle mathématique postulé de ces plans est un modèle du second degré avec interactions d'ordre 2, la matrice de calcul est :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -\alpha & -\alpha & \alpha^2 & \alpha^2 & \alpha^2 \\ 1 & \alpha & -\alpha & \alpha^2 & \alpha^2 & \alpha^2 \\ 11 & -\alpha & \alpha & \alpha^2 & \alpha^2 & \alpha^2 \\ 1 & \alpha & \alpha & \alpha^2 & \alpha^2 & \alpha^2 \\ 1 & -\beta & 0 & 0 & \beta^2 & 0 \\ 1 & \beta & 0 & 0 & \beta^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\beta & 0 & 0 & \beta^2 \\ 1 & 0 & \beta & 0 & 0 & \beta^2 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ecrivons la matrice d'information 'XX :

$$\begin{pmatrix} 13 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^2+2\beta^2 & 4+4\alpha^2+2\beta^2 \\ 0 & 4+4\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4+4\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4 & 0 & 0 \\ 4+4\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4+2\beta^4 & 4+4\alpha^4 \\ 4+4\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 & 4+4\alpha^4 & 4+4\alpha^4+2\beta^4 \end{pmatrix}$$

D'une manière générale la matrice d'information s'écrit :

$$\begin{pmatrix} N & 0 & 0 & 0 & n_f+n_f\alpha^2+2\beta^2 & n_f+n_f\alpha^2+2\beta^2 \\ 0 & n_f+n_f\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n_f+n_f\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n_f+n_f\alpha^4 & 0 & 0 \\ n_f+n_f\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 & n_f+n_f\alpha^4+2\beta^4 & n_f+n_f\alpha^4 \\ n_f+n_f\alpha^2+2\beta^2 & 0 & 0 & 0 & n_f+n_f\alpha^4 & n_f+n_f\alpha^4+2\beta^4 \end{pmatrix}$$

5.2.2. Deuxième plan proposé respectant le critère d'isovariance par rotation

Pour que le plan satisfasse le critère d'isovariance par rotation il faut comme pour les plans composites que nous avons la relation suivante :

$$(n_f + n_f\alpha^4) \cdot 3 = n_f + n_f\alpha^4 + 2\beta^4$$

soit

$$2\beta^4 = 2(n_f + n_f\alpha^4)$$

ou

$$\beta = (n_f + n_f\alpha^4)^{\frac{1}{4}}$$

5.2.2.1. Caractéristiques du plan

Comme pour le premier plan, nous avons fait une comparaison avec les plans composites rotatifs et les plans complets à trois niveaux. Pour différentes valeurs de α nous avons représenté les différentes caractéristiques du deuxième plan proposé pour deux facteurs (Tableau 5.4). Nous avons rapporté, pour chaque matrice le nombre d'expériences (Nb.exp), le nombre de niveaux par variable (Nb.niveaux), et les valeurs des critères retenus.

Tableau 5.4 : Caractéristiques du deuxième plan proposé à deux facteurs en fonction de α

	Plan proposé $\alpha=0,1$	Plan proposé $\alpha=0,18$	Plan proposé $\alpha=0,5$	Plan proposé $\alpha=0,7$	Plan proposé $\alpha=0,8$	Plan proposé $\alpha=0,9$
Nb .exp	13	13	13	13	13	13
Nb .niveaux	7 ; 7	7 ; 7	7 ; 7	7 ; 7	7 ; 7	7 ; 7
$ ({}^tXX)^{-1} $	$6,096 \cdot 10^{-6}$	$6,23 \cdot 10^{-6}$	$6,313 \cdot 10^{-6}$	$4,58 \cdot 10^{-6}$	$3,27 \cdot 10^{-6}$	$1,99 \cdot 10^{-6}$
$trace({}^tXX)^{-1}$	0,991	1,003	1,125	1,29	1,392	1,4
$ M $	$3,39 \cdot 10^{-2}$	$3,34 \cdot 10^{-2}$	$3,4 \cdot 10^{-2}$	$4,53 \cdot 10^{-2}$	$6,306 \cdot 10^{-2}$	0,105
d_{\max}	0,61	0,60	0,55	0,483	0,61	0,705
Eff - G(%)	75,66	76,92	83,39	95,56	75,66	65,54
$Var(a_0)$	0,203	0,211	0,312	0,484	0,603	0,706
$Var(a_i)$	0,124	0,123	0,111	0,096	0,088	0,081
$Var(a_{ij})$	0,25	0,25	0,235	0,202	0,177	0,151
$Var(a_{i,j})$	0,145	0,148	0,178	0,209	0,218	0,211

Dans le tableau 5.5, nous avons représenté les caractéristiques pour les plans composites et plans factoriels complets à trois niveaux.

Tableau 5.5 : Caractéristiques des plans d'expériences classiques à deux facteurs

	Factoriel 3^K	Composite	Composite ($m=4$)
<i>Nb .exp</i>	9	9	12
<i>Nb .niveaux</i>	3 ; 3	5 ; 5	5 ; 5
$ ({}^tXX)^{-1} $	$1,92 \cdot 10^{-4}$	$3,051 \cdot 10^{-5}$	$7,63 \cdot 10^{-6}$
$trace({}^tXX)^{-1}$	2,1389	2,18	1,0625
$ M $	$9,754 \cdot 10^{-3}$	$6,16 \cdot 10^{-2}$	$4,38 \cdot 10^{-2}$
d_{\max}	0,81	0,99	0,84
<i>Eff - G(%)</i>	82,30	67,34	59,52
$Var(a_0)$	0,556	1	0,25
$Var(a_i)$	0,167	0,125	0,125
$Var(a_{i,j})$	0,25	0,25	0,25
$Var(a_{i,i})$	0,50	0,344	0,156

D'après ces résultats, le deuxième plan donne encore une amélioration pour les critères d'optimalité. D'après le critère M on voit que les matrices d'expériences du deuxième plan proposé pour deux facteurs sont plus efficaces que celles du plan factoriel complet à trois niveaux.

Pour trois facteurs le nombre des coefficients à estimer est dix ($q = 10$), ce qui représente le nombre minimum d'expériences à effectuer pour l'étude de trois variables. Les caractéristiques des matrices d'expériences à trois variables pour les plans composites, le deuxième plan proposé et les plans complets à trois niveaux sont rassemblés dans le tableau 5.6.

Tableau 5.6 : Comparaison des caractéristiques des plans d'expériences classiques avec le deuxième plan proposé pour trois facteurs

	Composite	Plan proposé $\alpha=0,9$	Factoriel 3^k
<i>Nb .exp</i>	15	23	27
<i>Nb .niveaux</i>	5 ; 5 ; 5	7 ; 7 ; 7	3 ; 3 ; 3
$ ({}^tXX)^{-1} $	$7,44 \cdot 10^{-11}$	$5,75 \cdot 10^{-13}$	$1,702 \cdot 10^{-11}$
$trace({}^tXX)^{-1}$	2,08	1,304	1,176
$ M $	$2,33 \cdot 10^{-2}$	$4,207 \cdot 10^{-2}$	$2,85 \cdot 10^{-4}$
d_{\max}	0,99	0,639	0,51
<i>Eff - G (%)</i>	67,34	68,04	72,62
$Var(a_0)$	0,995	0,64	0,259
$Var(a_i)$	0,073	0,045	0,055
$Var(a_{i,j})$	0,125	0,075	0,083
$Var(a_{i,i})$	0,166	0,099	0,167

On remarque qu'il y a une amélioration dans l'ensemble et plus particulièrement pour le critère M , la matrice d'expériences du deuxième plan proposé est plus efficace que celles des deux autres plans.

5.2.3. Deuxième plan proposé respectant le critère de presque orthogonalité

Nous voulons respecter le critère d'orthogonalité. Il faudrait un choix des points qui entraîne une matrice tXX diagonale. Comme pour les plans composites cela est impossible, mais on peut viser le critère de presque orthogonalité.

Proposition

Pour que le deuxième plan proposé respecte le critère de presque orthogonalité, il faut choisir un β tel que :

$$\beta = \frac{1}{2} \sqrt{-2\alpha^2 n_f - 2n_f + 2\sqrt{\alpha^4 N n_f + n_f N}}$$

Pour arriver à ce résultat nous avons suivi les étapes suivantes :

1. On calcule l'inverse de la matrice d'information tXX en fonction de α, β, N et n_f .

2. Pour que la sous matrice, obtenue en éliminant la première ligne et la première colonne de la matrice $({}^tXX)^{-1}$, soit diagonale, il faut que les termes rectangles de type

$\sum x_i^2 x_j^2$ soient nuls, c'est à dire :

$$\frac{1}{4} \frac{-n_f^2 \alpha^4 + \alpha^4 N n_f - 2n_f^2 \alpha^2 - 4n_f \alpha^2 \beta^2 - n_f^2 - 4n_f \beta^2 + N n_f - 4\beta^4}{(-n_f^2 \alpha^4 + \alpha^4 N n_f - 2n_f^2 \alpha^2 - 4n_f \alpha^2 \beta^2 - n_f^2 - 4n_f \beta^2 + N n_f + N \beta^4 - 4\beta^4) \beta^4} = 0$$

Ce qui implique l'équation bicarrée du quatrième degré en β :

$$-n_f^2 \alpha^4 + \alpha^4 N n_f - 2n_f^2 \alpha^2 - 4n_f \alpha^2 \beta^2 - n_f^2 - 4n_f \beta^2 + N n_f - 4\beta^4 = 0$$

3. On résout cette équation, en tirant β en fonction de α, N et n_f .

Pour $\alpha = 0, 1$, si on veut que le deuxième plan proposé pour deux facteurs, respecte le critère de presque orthogonalité, il faut choisir $\beta = 1, 26$. Écrivons la matrice d'information correspondante :

$${}^tXX = \begin{pmatrix} 13 & 0 & 0 & 0 & 7,2152 & 7,2152 \\ 0 & 7,2152 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7,2152 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4,0004 & 0 & 0 \\ 7,2152 & 0 & 0 & 0 & 9,0413 & 4,0004 \\ 7,2152 & 0 & 0 & 0 & 4,0004 & 9,0413 \end{pmatrix}$$

La matrice de dispersion correspondante est presque orthogonale puisque si l'on élimine la première ligne et la première colonne, on obtient une matrice diagonale.

$$({}^tXX)^{-1} = \begin{pmatrix} 0,199 & 0 & 0 & 0 & -0,111 & -0,111 \\ 0 & 0,139 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,139 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,25 & 0 & 0 \\ -0,111 & 0 & 0 & 0 & 0,199 & 0 \\ -0,111 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0,199 \end{pmatrix}$$

5.2.3.1. Caractéristiques du plan

Si nous comparons cette nouvelle matrice d'expériences avec celle du plan composite pour deux facteurs, nous trouvons les résultats suivants :

Tableau 5.7 : Comparaison des caractéristiques du plan composite avec le deuxième plan
Proposé pour deux facteurs.

	Plan composite ($m=4$)	Plan proposé ($\alpha=0,1$)
<i>Nb .exp</i>	12	13
<i>Nb .niveaux</i>	5 ; 5	7 ; 7
$ ({}^tXX)^{-1} $	$2,36 \cdot 10^{-5}$	$1,45 \cdot 10^{-5}$
$trace({}^tXX)^{-1}$	1,244	1,124
$ M $	$1,418 \cdot 10^{-2}$	$1,423 \cdot 10^{-2}$
d_{\max}	0,705	0,66
<i>Eff - G(%)</i>	71,43	69,93
$Var(a_0)$	0,238	0,199
$Var(a_j)$	0,144	0,139
$Var(a_{i,j})$	0,25	0,25
$Var(a_{i,i})$	0,233	0,199

Pour trois facteurs. Les caractéristiques des matrices d'expériences pour les plans composites, le deuxième plan proposé et les plans de Box-Behnken sont rassemblés dans le tableau 5.8.

Tableau 5.8 : Comparaison des caractéristiques des plans d'expériences classiques avec le deuxième plan proposé pour trois facteurs

	Plan proposé $\alpha=0,18$	Plan Composite	Plan Box-Behnken
<i>Nb .exp</i>	23	15	15
<i>Nb .niveaux</i>	7 ; 7 ; 7	5 ; 5 ; 5	3 ; 3 ; 3
$ ({}^tXX)^{-1} $	$1,205 \cdot 10^{-11}$	$1,194 \cdot 10^{-9}$	$3,97 \cdot 10^{-8}$
$trace({}^tXX)^{-1}$	0,926	1,769	2,270
$ M $	$2,003 \cdot 10^{-2}$	$1,452 \cdot 10^{-2}$	$4,364 \cdot 10^{-5}$
d_{\max}	0,36	0,525	0,73
$Var(a_0)$	0,117	$\alpha\alpha \Rightarrow 0,432$	0,333
$Var(a_j)$	0,074	0,091	0,125
$Var(a_{i,j})$	0,125	0,125	0,25
$Var(a_{i,i})$	0,071	0,229	0,270

D'après les résultats des tableaux 5.7 et 5.8, le plan proposé améliore les valeurs des différents critères.

CHAPITRE 6

DESCRIPTION DU LOGICIEL

La construction des plans d'expériences est facilitée par l'utilisation de logiciels spécifiques. L'interprétation des plans d'expériences nécessite de nombreux calculs et de nombreux graphiques. Là encore, le logiciel que nous avons réalisé facilite la construction des plans d'expériences les plus classiques. Il permet d'effectuer les calculs nécessaires à l'interprétation des résultats et il donne la possibilité de tracer de nombreux graphiques qui illustrent les résultats. Il est ainsi possible de se rendre compte des possibilités offertes par un logiciel des plans d'expériences. Le lecteur intéressé pourra l'utiliser, en choisissant un des plans programmés pour différentes études de domaines très variés.

Il existe plusieurs logiciels de plans d'expériences qui ont chacun leurs avantages et leurs inconvénients [22]. La version de ce logiciel donne une bonne idée de l'apport de l'informatique aux plans d'expériences et de l'aide qu'un expérimentateur peut en attendre.

6.1. Démarrage

Le logiciel étant installé sur le disque dur, dans le répertoire choisi, on effectue, pour l'ouvrir, les instructions suivantes :

- Double clic sur le répertoire du logiciel
- Double clic sur l'icône du logiciel (Figure 6.1) :



Figure 6.1 : Icône du logiciel

On obtient la fenêtre d'ouverture du logiciel (Figure 6.2) :



Figure 6.2 : Fenêtre d'ouverture

Au bout de quelques secondes, on accède à la fenêtre d'accueil (Figure 6.3) constituée de :

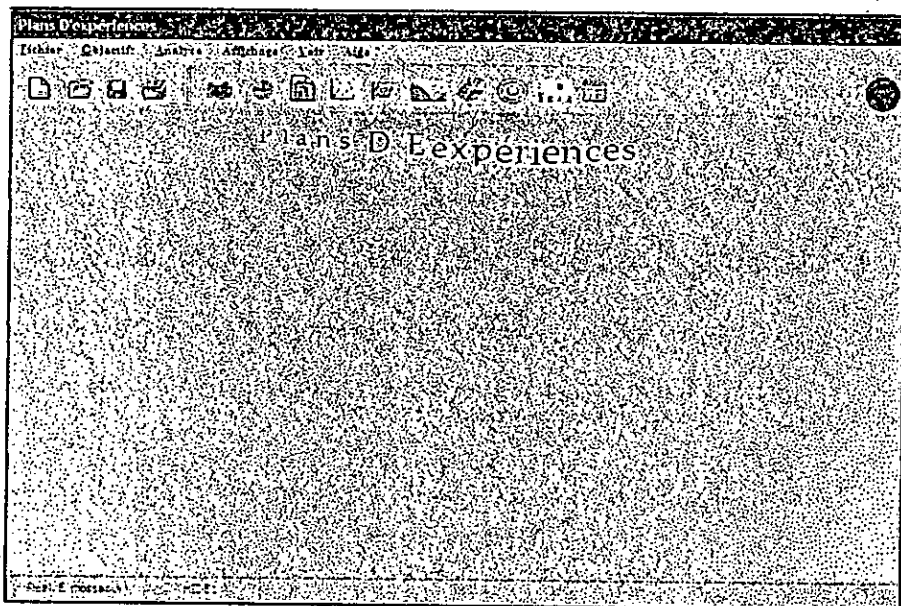


Figure 6.3 : Fenêtre d'accueil

- La barre des menus. Il y a six titres de menus : **Fichier**, **Objectifs**, **Analyse**, **Affichage**, **Voir** et **Aide**.
- La barre des outils. Plusieurs icônes sont affichées dans cette barre. Elles sont considérées comme des raccourcis des menus fichier et affichage afin de simplifier l'utilisation du logiciel.

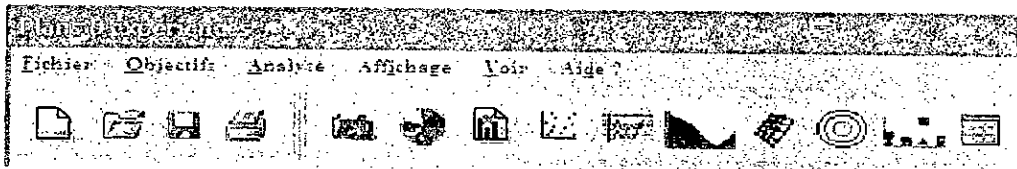


Figure 6.4 : Barre du menu, barre des outils

Nous allons décrire l'utilisation du logiciel en nous appuyant sur l'exemple suivant [5] :

6.1.1. Exemple

Un contremaître cherche à améliorer l'état de surface des pièces métalliques fabriquées dans son atelier. L'état de surface est caractérisé par la rugosité et par le nombre de pics par unité de longueur. Le contremaître serait enchanté s'il pouvait obtenir des pics de rugosité inférieur à 0,15 et un nombre de pics inférieur à 50. S'il atteint cet objectif l'état des pièces serait considéré comme parfait. La pièce est usinée à l'aide d'un outil tranchant. Cet outil est un disque abrasif qui tourne à grande vitesse et avance lentement. Les réglages en usinage dans l'atelier sont :

- La vitesse tangentielle de coupe (20 mètres par seconde)
- L'avance (0,9 mètre par minute)

Choix de facteurs : le contremaître retient deux facteurs. Le premier facteur est la vitesse d'avancement de l'outil. Le deuxième facteur est la vitesse tangentielle de coupe. Cette vitesse est liée à la vitesse de rotation et au diamètre de l'outil.

Choix des réponses :

1. La rugosité est mesurée par une méthode normalisée. Il faut obtenir une valeur la plus faible possible.
2. Nombre de pics par unité de longueur on compte le nombre de pics par unité de longueur. On vise un nombre inférieur à 50 par unité de longueur.

Le plan d'expériences utilisé est un plan composite respectant le critère de presque orthogonalité. La matrice d'expériences et les réponses observées sont indiquées dans le tableau 6.1.

Tableau 6.1: Plans d'expériences et résultats

Essai N°	Avance	Coupe	Rugosité	Pics
1	-1	-1	194	77,8
2	1	-1	282	68,4
3	-1	1	120	65,3
4	1	1	91	96,1
5	-1,21	0	154	52,3
6	1,21	0	195	60,4
7	0	-1,21	278	87
8	0	1,21	122	95,7
9	0	0	232	61,5
10	0	0	230	60,5
11	0	0	233	91,1
12	0	0	235	63,9

6.2. Description de la barre des menus

6.2.1. Menu fichier

Il comporte les champs suivants :

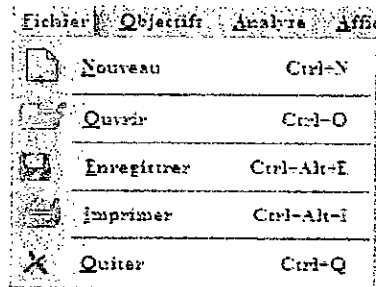


Figure 6.5 : Menu Fichier

6.2.1.1. Nouveau

Il permet l'introduction des données du problème.

- Cliquer sur nouveau, une zone apparaît dans laquelle on entre le nom de l'étude

Nom de l'étude	
La rectification du contremaître	
✓	
Valider	

Figure 6.6 : Nom de l'étude

- Cliquer sur **Valider**, une fenêtre apparaît et propose de définir successivement le nom et l'unité du facteur puis le type (Quantitatif ou Qualitatif) et enfin le niveau bas et le niveau haut de ce facteur. Valider

Facteur		Type de Facteur	
Nom et Unité			
Nom	Avance	Quantitatif	1 1
Unité	m/min	Qualitatif	
Niveaux de facteur			
Haut	2.4		
Bas	0.9		
		Suivant	

Figure 6.7 : Introduction des facteurs

- Cliquer sur le bouton **Suivant** plusieurs fois afin d'introduire tous les facteurs
- Cliquer sur **Terminer**. Une fenêtre apparaît et permet l'introduction des différentes réponses (Nom et Unité)

Réponse	
Nom	Pics
Unité	
1	
Terminer	

Figure 6.8 : Introduction des Réponses

Après l'introduction des réponses, cliquer sur le bouton **Terminer**. On fixe le nombre d'expériences à réaliser au centre du domaine d'étude afin de différencier l'erreur expérimentale de l'erreur d'ajustement du modèle (lack of Fit). Valider.

Nombre de points au centre	
n	10
Valider	

Figure 6.9 : Nombre de points au centre

6.2.1.2. Ouvrir

Ouvrir une application déjà enregistrée par l'utilisateur.

6.2.1.3. Enregistrer

Enregistre les données du problème dans un fichier.

6.2.1.4. Imprimer

Imprime les résultats de l'étude.

6.2.1.5. Quitter

Permet de quitter le logiciel.

6.2.2. Menu objectifs

Il permet le choix entre un plan de Criblage ou un plan d'Optimisation (figure 6.10).

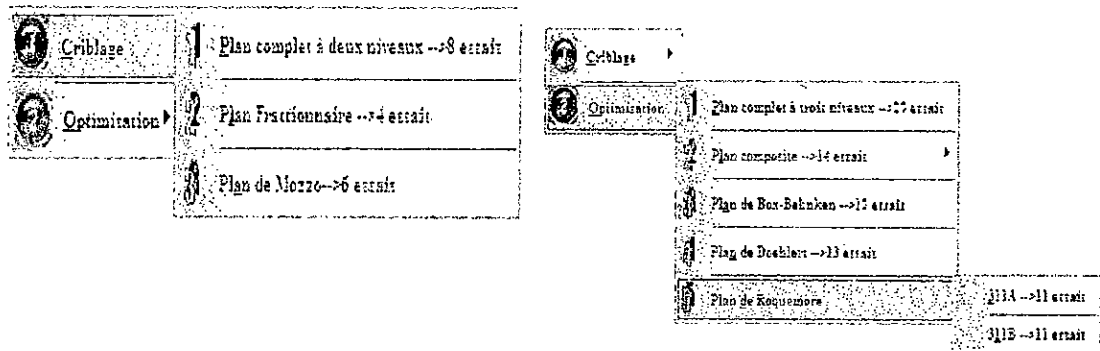


Figure 6.10 : Objectifs

En choisissant le plan d'expériences, le logiciel nous donne la matrice d'expériences ainsi que le nombre des essais à réaliser. Valider le choix du plan, puis introduire les réponses.

Plan D'Experiences			Réponses observées		
Facteurs->	Avance	C	Réponses->	Rugosité	R
Essai N°1	0.9	15	Essai N°1	194	7
Essai N°2	2.4	15	Essai N°2	282	6
Essai N°3	0.9	25	Essai N°3	120	6
Essai N°4	2.4	25	Essai N°4	91	9
Essai N°5	0.7425	20	Essai N°5	154	5
Essai N°6	2.5575	20	Essai N°6	195	6

Figure 6.11 : Plan d'expériences et introduction des réponses

Valider de nouveau, une petite fenêtre apparaît sur le haut du côté droit de la fenêtre d'accueil permettant de choisir la réponse à étudier. Valider. Le menu Analyse devient actif

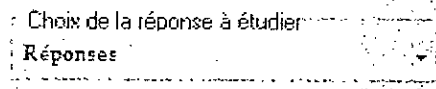


Figure 6.12 : Choix de la réponse à étudier

6.2.3. Menu analyse

Il comporte deux champs : choix entre une régression MLR ou une régression PLS.

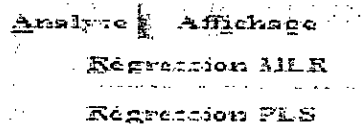


Figure 6.13 : Menu Analyse

6.2.4. Menu affichage

Il comporte les champs suivants :

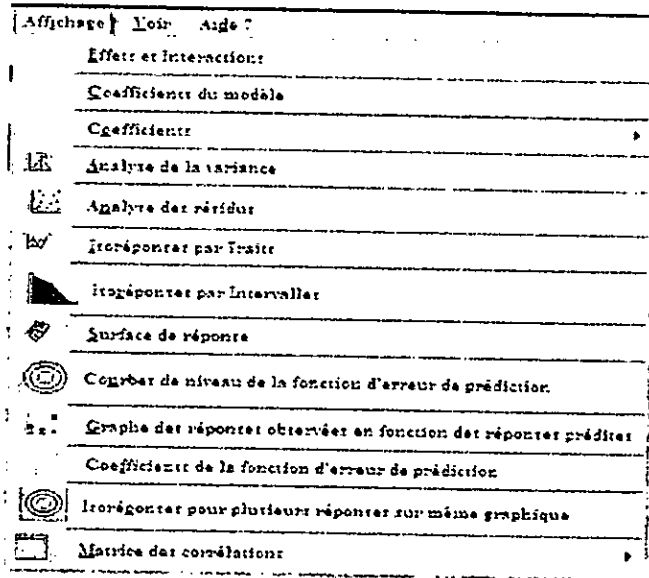


Figure 6.14 : Menu Affichage

6.2.4.1. Effets

Il permet d'afficher les valeurs des effets et des interactions d'ordre deux et de tracer les graphes correspondants.

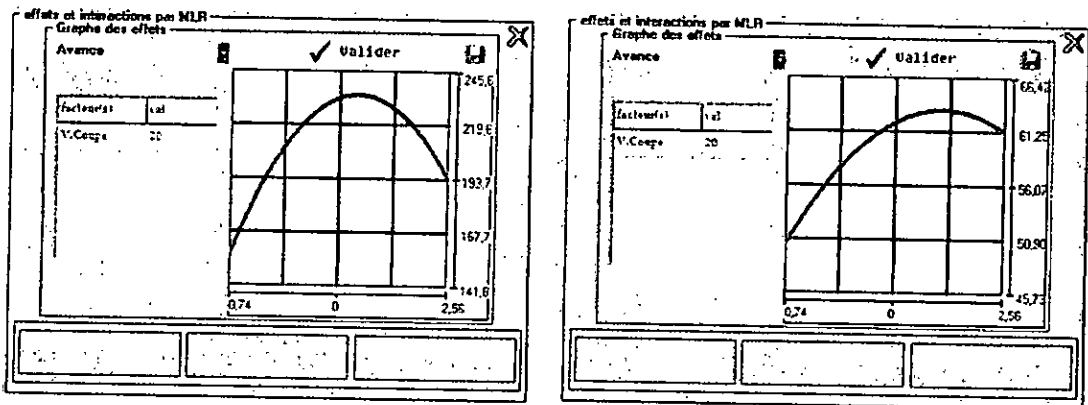


Figure 6.15 : Graphes des effets

6.2.4.2. Coefficients du modèle

Il permet d'afficher les coefficients du modèle

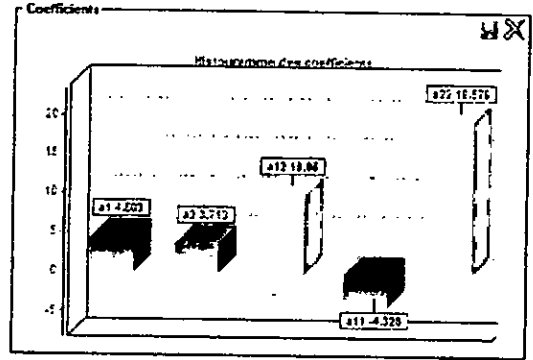
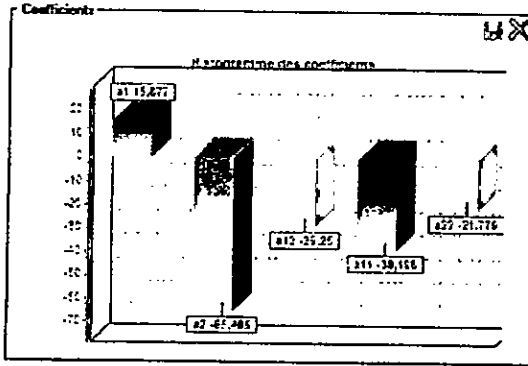
Coefficients du modèle			
Modèle du deuxième degré avec ii			
Constante	a1	a2	a12
332.3703 ± 1.05	35.6745 ± 0.52	-41.4366 ± 0.31	-29.2100 ± 1.05

Coefficients du modèle			
1e degré avec interactions d'ordre 2			
Constante	a1	a2	a12
62.0264 ± 0.77	4.5035 ± 0.60	3.7134 ± 0.60	12.0250 ± 0.79

Figure 6.16 : Coefficients du modèle

6.2.4.3. Histogramme des coefficients

Il permet d'afficher les coefficients sous la forme d'un histogramme.



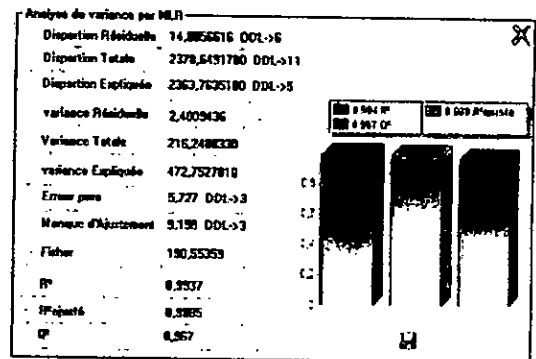
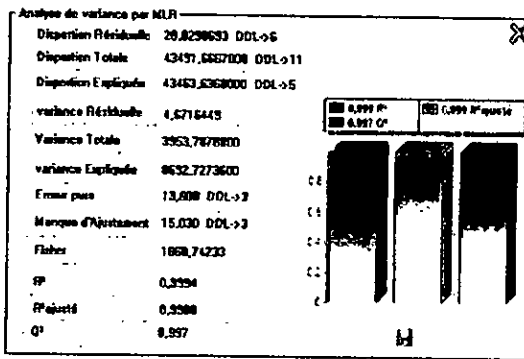
Rugosité

Pics

Figure 6.17 : Histogramme des coefficients

6.2.4.4. Analyse de la variance

Il permet d'afficher : la variance expliquée par le modèle, la variance totale, la variance des résidus, le R carré, le R carré ajusté, l'erreur expérimentale (Pure Error), manque d'ajustement (Lack of fit), la valeur de Fisher calculée, l'histogramme de la valeur de R^2 et R^2 ajusté et le coefficient de prédiction Q^2 .



Rugosité

Pics

Figure 6.18 : Analyse de la variance

6.2.4.5. Analyse des résidus

Il permet d'afficher les réponses mesurées, les réponses prédites, les résidus ainsi que le diagramme des résidus.

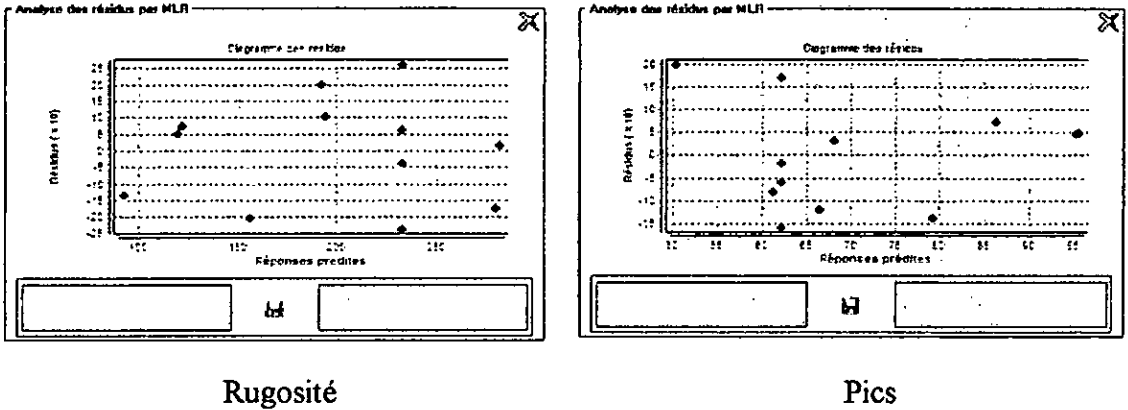


Figure 6.19 : Analyse des résidus

D’après les figures 6.18 et 6.19, les tests statistiques montrent que le modèle établis pour chacune des réponses expliquent bien les résultats expérimentaux. Ces modèles vont être utilisés pour faire des prévisions dans le domaine d’étude.

6.2.4.6. Isoréponses par traits

Il permet de tracer des courbes d’isoréponses dans un diagramme à deux dimensions. On doit choisir deux facteurs parmi tous les facteurs de l’étude. On introduit la valeur maximale et minimale entre lesquelles l’utilisateur souhaiterai tracer ses isoréponses. Pour cela il faut fixer le pas.

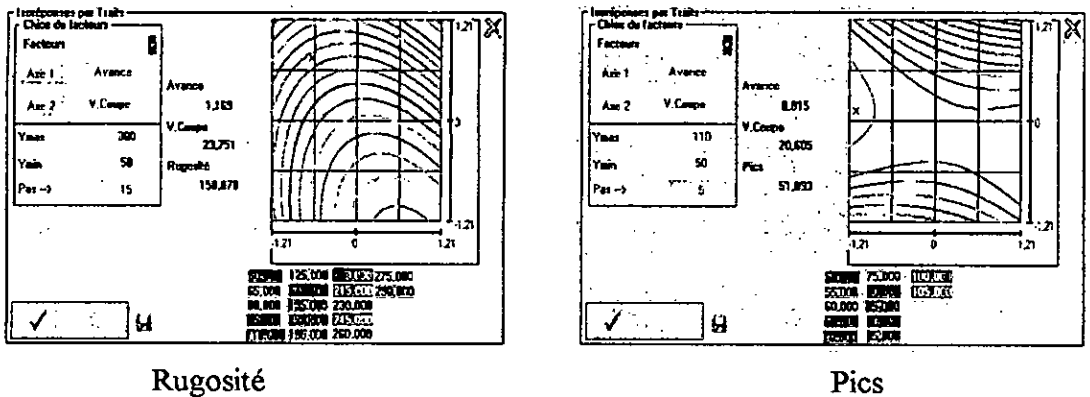


Figure 6.20 : Isoréponses par traits

On peut obtenir les coordonnées d’un point et la réponse correspondante en maintenant le clic de la souris dans le diagramme d’isoréponses.

6.2.4.7. Isoréponses par intervalles

On peut également, comme pour les isoréponses par traits obtenir les isoréponses par intervalles.

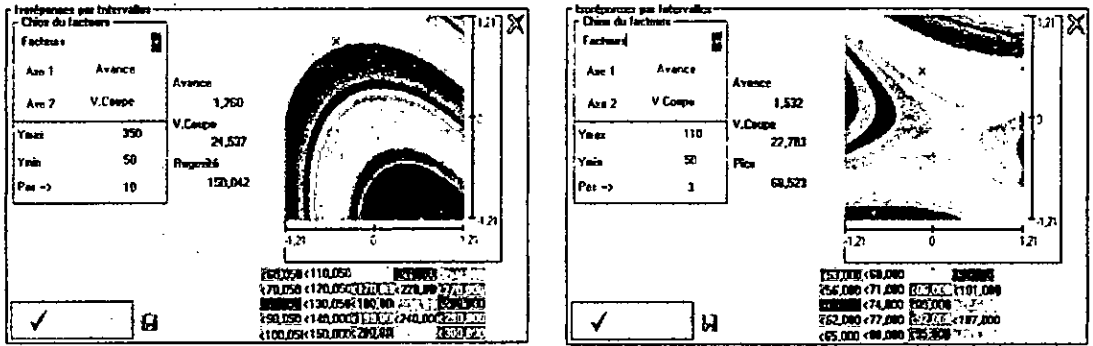
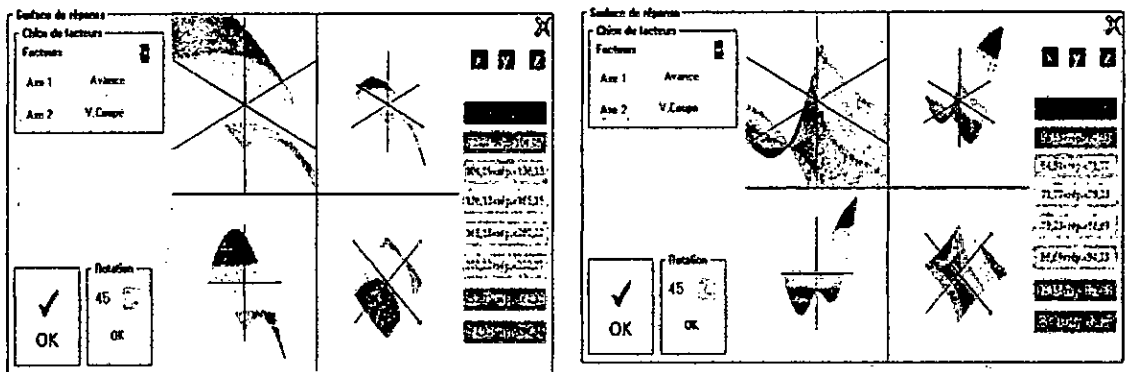


Figure 6.21 : Isoréponses par intervalles

6.2.4.8. Surface de réponse

Il permet de tracer des courbes d'isoréponses dans un diagramme à trois dimensions.



Rugosité

Pics

Figure 6.22 : Surface de réponse

6.2.4.9. Courbes de niveaux de la fonction d'erreur de prédiction

Il permet de tracer les courbes de niveaux de la fonction d'erreur de prédiction. On doit choisir deux facteurs parmi tous les facteurs de l'étude et fixer les autres.

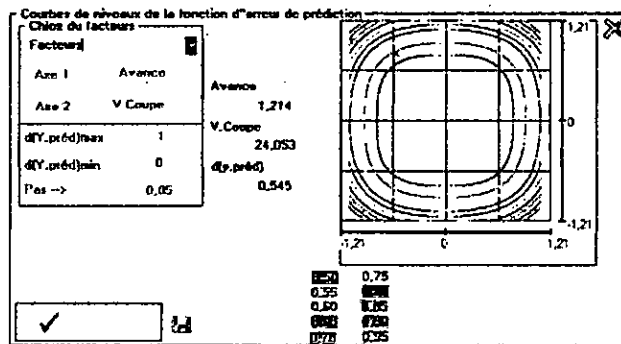


Figure 5.23 : Courbes de niveau de la fonction d'erreur de prédiction

D'après les figures 6.20, 6.21 et 6.22, on peut tirer directement les valeurs estimées de la réponse à n'importe quel point du domaine d'étude. Il suffit de choisir une vitesse d'avance et une vitesse de coupe qui ensemble, donnent une réponse se situant sous la ligne de niveaux 150 pour la rugosité et une réponse se situant sous la ligne de niveaux 50 pour le nombre de pics.

6.2.4.10. Isoréponses par traits pour plusieurs réponses sur le même diagramme

Il permet de tracer des courbes d'isoréponses dans un diagramme à deux dimensions pour plusieurs réponses

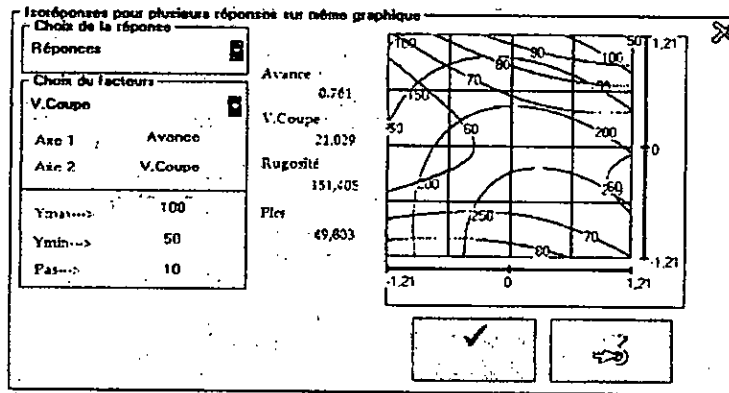


Figure 6.24 : Isoréponses par traits pour plusieurs réponses

On peut obtenir les coordonnées d'un point et les réponses correspondantes en maintenant le clic de la souris dans le diagramme d'isoréponses.

D'après la figure 6.24, on constate qu'il existe une petite surface où les deux objectifs sont respectés. Une vitesse d'avance de 0,75 m/min et une vitesse de coupe de 21 m/s.

6.2.4.11. Matrice des corrélations

Il permet d'afficher la matrice des corrélations entre la grandeur d'intérêt et les facteurs

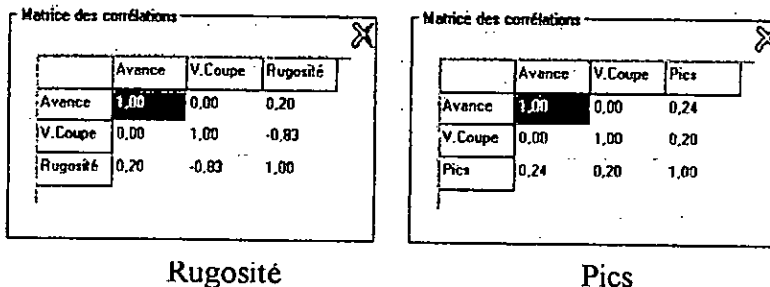


Figure 6.25 : Matrice des corrélations

6.2.4.12. Coefficients de la fonction d'erreur de prédiction

Il permet d'afficher les coefficients de la fonction d'erreur de prédiction.

6.2.4.13. Graphe des réponses observées en fonction des réponses prédites

Il permet d'afficher le graphe des réponses observées en fonction des réponses prédites.

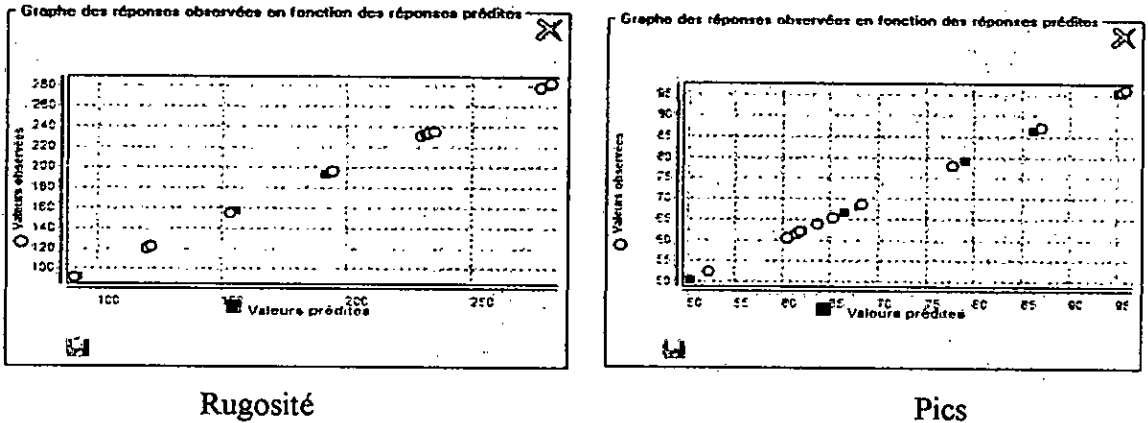


Figure 6.26 : Graphe des réponses observées en fonction des réponses prédites

6.2.5. Menu voir

Il permet de rappeler le nom des facteurs, des réponses, des unités et enfin d'afficher les trois matrices: d'expériences en variables centrées réduites, d'information et de dispersion.

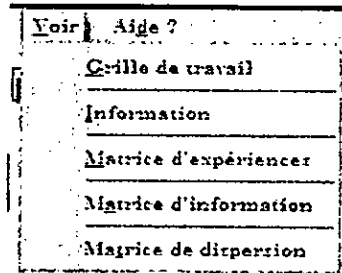


Figure 6.27 : Voir

6.2.6. Menu aide

Il contient un fichier pdf contenant la description du logiciel et la théorie des différents plans étudiés.

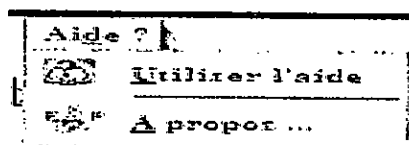


Figure 6.28 : Aide

CONCLUSION

Les mathématiciens ont toujours été à l'avant garde de la recherche aussi bien fondamentale que pratique en développant plusieurs théories scientifiques. Ils les ont constamment améliorées et perfectionnées. Mais il s'est toujours écoulé un certain temps entre la découverte de ces théories et leur application pratique dans le monde industriel. La raison en est simple, car ces théories, lors de leur application pratique, nécessitent souvent un volume considérable de calculs. C'est évidemment l'outil informatique, venu à la rescousse qui a pu débloquent la situation en évitant au chercheur des calculs fastidieux et souvent impossible à effectuer. On peut citer par exemple l'Analyse des données dont les premiers développements théoriques furent établis pour la première fois en 1930 et leur vulgarisation et utilisation pratique dans le monde industriel ne fut effective que vers les années 1960. Il en est de même de l'application de la théorie des graphes et de beaucoup d'autres théories mathématiques.

La Méthodologie de la Recherche Expérimentale, appelée aussi planification des expériences, est une discipline mathématique faisant partie de la statistique inférentielle. La théorie de la méthode des plans d'expériences reste toujours en développement et elle a pris une importance si grande, grâce à l'existence de logiciels spécifiques, que l'on est en droit de se demander si cette discipline ne pourrait pas être enseignée très tôt dans le cursus universitaire. Le travail qui nous a été proposé avait deux objectifs :

Premièrement, développer notre propre logiciel. Ce qui nous permettra non seulement de nous affranchir des calculs fastidieux et de pouvoir traiter et analyser n'importe quelle expérience pratique dans les domaines chimiques, pharmaceutiques, agronomiques, physiques etc... mais aussi d'avoir la possibilité de perfectionner ce logiciel.

Deuxièmement, essayer de contribuer modestement au développement de la théorie en proposant une certaine disposition de points expérimentaux afin d'améliorer le plus possible les critères d'optimalité. Le seul inconvénient est l'augmentation du nombre des essais à effectuer.

Il serait intéressant de développer un logiciel spécifique pour plans de mélanges très utilisés en pharmaceutique et dans beaucoup d'autres domaines. L'industrie du pétrole et du gaz naturel, constitue un vaste champ d'applications des Plans d'Expériences.

APPENDICE A
LISTE DES SYMBOLES ET ABREVIATION

- a_0 : Constant d'un modèle.
- a_i : Coefficients des termes de premier degré
- $a_{i,i}$: Coefficients des termes carrés
- $a_{i,j}$: Coefficients des termes rectangles
- \hat{a}_i : Coefficients de la variables x_i dans un modèle déterminé par la méthode des moindres carrés
- A : Vecteur des coefficients du modèle
- \hat{A} : Vecteur des coefficients déterminés par la méthode des moindres carrés
- α : Distance au centre des points en étoile dans un plan composite, niveau attribué
- β : Distance au centre des points expérimentaux pour le 2^{ème} plan proposé
- c_i : Contraste du facteur i
- α_i : Vecteur des pentes des droites des moindres carrés passant par l'origine (Régression PLS)
- $d(\hat{y}_u)$: Fonction d'erreur de prédiction
- $d^2(\hat{y}_u)$: Fonction de la variance de prédiction
- ddl : Degré de liberté
- Δ : L'écart d'ajustement
- e_i : Écart résiduel
- ε_i : Valeur vraie de l'écart e_i
- e : Vecteur des écarts
- E : Espérance mathématique
- $Eff-G$: Efficacité vis à vis du critère G
- f : Fonction
- F : F de Fisher-Snedecor
- h : Le nombre de composantes à retenir dans la régression PLS

- h_i : Le $i^{\text{ème}}$ élément diagonal de la matrice $X(X'XX)^{-1}X'$
 I : matrice unité, générateur d'aliases, moyenne dans un tableau des effets
 k : Nombre de facteurs
 $\eta(y_i)$: Réponse théorique de l'essai n° i
 n_0 : Nombre d'essais au centre du domaine d'étude
 n_f : Nombre d'essais du plan factoriel
 n_e : Nombre d'essais du plan étoile
 N : Nombre d'essais d'un plan d'expériences
 p : Nombre de facteur supplémentaires pour un plan fractionnaire
 p_h : Vecteur des pentes des droites des moindres carrés passant par l'origine
 (Régression PLS)
 q : Nombre de coefficients d'un modèle mathématique
 Q^2 : Coefficient du prédiction
 R^2 : Coefficient de corrélation
 $R^2 \text{ ajusté}$: Coefficient de corrélation ajusté
 s^2 : Estimation de variance
 σ_y : Écart-type de l'erreur sur les réponses mesurées
 σ^2 : Variance des écarts
 $\sigma(\hat{a}_i)$: Écart-type des coefficients déterminés par la méthode des moindres carrés
 t_h : Vecteur des pentes des droites des moindres carrés passant par l'origine
 (régression PLS)
 $\text{var}(\hat{A})$: Variance des coefficients estimés par la méthode des moindres carrés
 $\text{var}(\hat{y})$: Variance de l'erreur sur les réponses mesurées
 x_i : Niveau attribué aux différents facteurs et exprimé en valeurs centrées réduite, variable i
 x_{ij} : Élément de la ligne i et de la colonne j de la matrice X
 x_u : Vecteur modélisé du point u
 X : Matrice de calcul
 X : Matrice des résidus dans la régression PLS
 $'X$: Matrice transposée de X

- $({}^t XX)$: Matrice d'information
- $({}^t XX)^{-1}$: Matrice de dispersion
- w_h : Vecteur des pentes des droites des moindres carrés passant par l'origine
(Régression PLS)
- y_i : Réponse de l'essai n° i
- y : Vecteur des réponses observées
- \hat{y}_i : Réponse prédite de l'essais i
- \hat{y} : Vecteur des réponses prédites
- y_+ : Moyenne des réponses au niveau haut d'un facteur
- y_- : Moyenne des réponses au niveau bas d'un facteur
- Y : Matrice des réponses observées
- z : Niveau attribué au facteur exprimé en unité courante
- z_0 : Valeur centrale de l'intervalle $[-1, +1]$ exprimé en unité courante

REFERENCES

1. Schimmerling, P., Sisson, J.C., Zaïdi, A., "Pratique des plans d'expériences", Editions Tec Doc, Paris 526 pages (1998).
2. Goupy, J., "Plans d'expériences", Techniques de l'Ingénieur, traité analyse et caractérisation, P 230, P.1-20 (1997).
3. Goupy, J., "La méthode des plans d'expériences", DUNOD Paris, 303 pages (1988).
4. Goupy, J., "Modélisation par les plans d'expériences", Techniques de l'Ingénieur, traité mesures et contrôle, R 275, P.1-23 (2000).
5. Goupy, J., "Plans d'expériences pour surface de réponse", 409 pages, DUNOD Paris (1999).
6. Sado, G., Sado, M-C., "Les plans d'expériences. De l'expérimentation à l'assurance qualité", AFNOR Paris (2000).
7. Mathieu, D., Phan-Tan-Luu, R., Sergent, M., "Méthodologie de la recherche expérimentale", LPRAI Université d'Aix-Marseille (1998).
8. Höskuldsson, A., "PLS Regression Methods", Journal of chemometrics, vol. 2, P.211-228 (1988).
9. Tenenhaus, M., "La régression PLS théorie et pratique", Editions technique Paris, 252 pages (1998).
10. Franquart, P., "Optimisation multi-critères et méthodologie de la recherche expérimentale", Thèse en sciences, Université d'Aix-Marseille (1992).
11. Peissik, A., "Méthodologie de la Recherche Expérimentale : Propriétés et caractéristiques des matrices d'expériences pour les modèles polynomiaux du second degré", Thèse en sciences, Université d'Aix-Marseille (1995).
12. Mathieu, D., Phan-Tan-Luu, R., "Planification d'expériences en formulation", Techniques de l'Ingénieur, traité Génie des procédés, Doc.J242 (2000).
13. Goupy, J., "Étude comparative de divers plans d'expériences", Revue de statistique appliquée, vol. 38, n° 4, P.5-44 (1990).

14. Box, G.E.P., Hunter, J.S., "The 2^{k-p} fractional factorial designs", *Technometrics*, 42(1), P.28-47 (2000).
15. Mozzo, G., "Plans d'expériences séquentiel à symétrie évolutive", Document Elf-AtoChem, 18 pages (1995).
16. Box, G.E.P., Draper, N.R., "Empirical Model Building and response surface", John Wiley and Sons, New York, 669 pages (1987).
17. Dreesbeke, J.J., Fine, J., Saporta, G., "Plans d'expériences. Applications à l'entreprise", Editions Technip. 509 pages (1997).
18. Box, G.E.P., Behnken, D.W., "Some new three level designs for the study of quantitative variables", *Technometrics*, vol.2, P.455-475 (1960).
19. Dohlerlert, D.H., "Uniform shell design", *Appl.stat*, n° 19, 231 pages (1970).
20. Yuzhu, H., "Program for doehlert matrix design of experiments", *Trends in Analytical Chemistry*, vol 8, n° 4 (1989).
21. Roquemore, K.G., "Hybrid designs for Quadratic Response Surfaces", *Technometrics*, vol.18, n° 4, P.419-423 (1976).
22. Goupy, J., "Plans d'expériences. Exemples de logiciel", *Techniques de l'Ingénieur, traité analyse et caractérisation*, CD, P.230, P.1-12, (1998).
23. Mathieu, D., Phan-Tan-Luu, R., Sergent, M., "Méthodologie de la recherche expérimentale, méthodes modernes d'élaboration de matrices d'expériences optimales et qualité", LPRAI Université d'Aix-Marseille (1998).
24. Gille, L., "Plans d'expériences en gestion industrielle", Lavoisier, Paris (2003).
25. Souvary, P., "Plans d'expériences Méthode Taguchi", AFNOR, Paris (2002).
26. Draper, N., Smith, H., "Applied Regression Analysis", Second Edition, John Wiley and Sons, New York, 708 pages (1981).
27. Neuilly, M., "Modélisation et calcul de l'incertitude d'un résultat de mesure", *Techniques de l'Ingénieur, traité analyse et caractérisation*, P.260, P.1-16 (1993).
28. Myers, R.H., Khuri, A.I., Carter, W.H.jr., "Response Surface Methodology : 1966-1988", *Technometrics*, vol. 31, n° 2, P.137-157 (1989).
29. Chapouille, P., "Planification et analyse des expériences", Masson et CIE, Paris (1973).
30. Dominique, C., "Plans d'expériences factoriels", Spriger, Paris (1996).
31. Mathieu, D., "Contribution de la Méthodologie de la Recherche Expérimentale à la relation structure-activité", Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille (1981).

32. Araujo, P.W., Brereton, R.G., "Experimental design", analytical chemistry, vol. 15, n° 1, Elsevier Science (1996).