

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
*Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique*

*Université BLIDA 1*



*Faculté des Sciences*

*Département de Mathématiques*

## MÉMOIRE DE FIN D'ÉTUDES

*En vue de l'obtention du diplôme de Master*

*En*

*Mathématiques Appliquées*

*Option : Recherche Opérationnelle*

## THÈME

*Plans d'Expériences Numériques*

*Etude et Comparaison*

*Réalisé par :*

*M<sup>elle</sup> : AISSI IBTISSAM*

*M<sup>elle</sup> : BELAZIZ FELLA*

*Membres du jury :*

*Promoteur : Mr ELMOSSAOUI HICHEM*

*Président : Mr TAMI OMAR*

*Examineur : Mme RABER DALILA*

*Promotion\*2021/2022\**

## ملخص

تتيح منهجية الخطط التجريبية تنظيم التجارب التي تصاحب البحث العلمي أو الدراسات الصناعية على أفضل وجه. هذه المنهجية قابلة للتطبيق على العديد من البحوث العلمية وعلى جميع الدراسات الصناعية وذلك من لحظة البحث عن الرابط الموجود بين العوامل ذات الاهتمام ( $y$ ) والمتغيرات ( $x_i$ ) وتهدف أيضا إلى تحديد النماذج الرياضية بين هذه العوامل ذات الاهتمام والمتغيرات القابلة للتحكم. تم في هذه الرسالة إجراء دراسة تفصيلية للتصاميم العددية التجريبية المختلفة ومعايير الأمثل المستخدمة لتقييم جودة هذه التصاميم التجريبية. أجريت دراسة مقارنة بين الخطط الرقمية المدروسة لمصلحة كل مجرب وكل مستخدم.

**الكلمات المفتاحية:** تصميم التجارب، المعايير المثلى لتصميم التجارب، التصميم العددي للتجارب، التسلسلات منخفضة التناقض، تصميمات Strauss، تصميمات Strauss المميزة.

## RESUME

Les plans d'expériences permettent d'organiser au mieux les essais qui accompagnent une recherche scientifique ou des études industrielles. Ils sont applicables à de nombreuses disciplines et à toutes les industries à partir du moment où l'on recherche le lien qui existe entre une grandeur d'intérêt ( $y$ ) et des variables ( $x_i$ ). Elle a donc pour but de déterminer des modèles mathématiques reliant les grandeurs d'intérêt aux variables contrôlables.

Dans ce mémoire une étude détaillée sur les différents plans d'expériences numériques et les critères d'optimalités utilisés pour évaluer la qualité de tels plans d'expériences a été réalisée. Une étude comparative entre les plans numériques étudiés a été effectuée pour l'intérêt de chaque expérimentateur et chaque utilisateur.

**Mots clés :** Plans d'expériences, Critères d'optimalités pour plans d'expériences, Plans d'expériences numériques, Suites à faible discrédance, Plans de Strauss, Plans de Strauss Marqués.

## ABSTRACT

The designs of experiments make it possible to better organize the experiments that accompany scientific research or industrial studies. They are applicable to numerous disciplines and to all industries from the moment when one seeks the link which exists between a quantity of interest ( $y$ ) and variables ( $x_i$ ). It therefore aims to determine mathematical models linking the quantities of interest to the controllable variables.

In this work, a detailed study on the different computer experimental designs and the optimality criteria used to evaluate the quality of such experimental designs has been realized. A comparative study between the digital plans studied was carried out for the interest of each experimenter and each user.

**Keywords:** Design of experiments, Optimality criteria for design of experiments, computer design of experiments, Low discrepancy sequences, Strauss designs, Marked Strauss designs.

## REMERCIEMENTS

Nous remercions en premier lieu **Dieu**, le tout puissant de nous avoir donné tant de courage, de patience et de volonté pour l'élaboration de ce modeste travail.

Nous tenons à remercier Monsieur Elmoosaoui Hichem, Maitre de Conférences B à l'Université Blida1, notre directeur de mémoire, qui nous a encadré et conseillé judicieusement durant ce travail.

Nous exprimons notre profonde gratitude et nos sincères remerciements à Mr O. Tami, le Chef de département de Mathématiques à l'Université Blida1 pour toute l'aide qu'il nous donne.

Nous profitons de cette occurrence pour exprimer notre profonde gratitude et nos sincères remerciements à tous les enseignants qui ont contribué à notre formation.

Nous n'oublierons pas de remercier les membres de la scolarité du département de Mathématiques en particulier : Mr H. hadj allah, Mme N. et Mme S. Takarli

Enfin, que les membres de jury trouvent ici l'expression de toute notre gratitude pour l'honneur qu'ils nous font en acceptant de juger ce travail

## Dédicace

*Je dédie ce mémoire de fin d'étude*

*A mes très chers parents,*

*A mon père,*

*L'homme de ma vie, mon exemple éternel, celui qui s'est  
toujours sacrifié pour me voir réussir.*

*A ma mère,*

*Pour son amour, et qu'elle m'a toujours accordé en  
témoignage de ma reconnaissance envers sa confiance,*

*Ses sacrifices et sa tendresse.*

*A mes frères et à ma sœur,*

*Pour leurs encouragements permanents, et leur soutien  
moral.*

*A ma famille,*

*Pour leur soutien tout au long de mon parcours  
universitaire.*

*A tous mes amis,*

*Pour leurs amours et leurs encouragements.*

*A tous mes camarades de l'université et du département de  
mathématique.*

*Merci d'être toujours là pour moi.*

***AISSI IBTISSAM***

## Dédicace

Je dédie ce mémoire de fin d'étude,

A mes chers parents,

À mon père, qui m'a aidé à me motiver, à me guider, à construire mon caractère, ma confiance dans mes choix et à accroître ma résolution et ma détermination.

A ma mère, ma main droite a toujours été dans ma vie, ma lumière dans le noir et mon cœur à la croisée des chemins.

Oh Dieu, protège-les pour moi car, grâce à Dieu et grâce à eux, j'ai atteint ce que je suis aujourd'hui. Je n'oublierai jamais leurs efforts et leur travail acharné sur moi, et je mentionnerai toujours la phrase "J'aime votre travail, car le succès n'est pas plus important que la maîtrise de votre travail."

A mes frères, je vous remercie beaucoup pour votre soutien matériel et moral, même avec un mot gentil et une prière cachée.

À mes amis de l'université, du département de mathématiques, et à tous les professeurs qui m'ont enseigné tout au long de mes cursus universitaire de premier cycle, ainsi qu'aux employés de l'administration de ce département.

Merci à tous.

**Belaziz fella**

# TABLE DES MATIERES

RESUME

REMERCIEMENTS

TABLE DES MATIERES

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

INTRODUCTION	8
1. METHODE DES PLANS D'EXPERIENCES	11
1.1. Historique	11
1.2. Intérêt de la méthode des plans d'expériences	12
1.3. Vocabulaire de Base des plans d'expériences	13
1.4. Outils mathématiques pour les plans d'expériences	18
1.5. Différents type de plans d'expériences	27
1.6. Critères d'optimalités pour les plans d'expériences	34
1.7 Conclusion	36
2. GENERALITES SUR LES PROCESSUS PONCTUELS	37
2.1. Premières définitions et Notations	37
2.2. Processus ponctuels et loi d'un processus ponctuel	38
2.3. Processus ponctuels de référence	42
2.4. Processus ponctuels marqués	48
2.5. Processus ponctuels de Markov	49
2.6. Simulation des processus ponctuel	51
2.7. Les principaux algorithmes MCMC	55
2.8. Conclusion	57
3. NOUVEAUX PLANS D'EXPERIENCES NUMERIQUES A PARTIR DE PROCESSUS PONCTUELS MARQUE	58
3.1. Plan d'expériences numériques par processus ponctuels markovien marqués de Strauss	58
3.2. L'algorithme de construction du plan proposé	61
3.3. Etude de convergence	63
3.4. Résultats numériques et qualités des plans proposés	67
3.5. Conclusion	70
4. UTILISATION DE LA METHODE DE PLANS D'EXPERIENCES POUR LA MODELISATION D'UN PANNEAU PHOTOVOLTAÏQUE	72

4.1. Dispositif expérimental et mesures	73
4.2. Présentation de la méthode de plan des expériences et des résultats expérimentaux	74
4.3. Modèle mathématique	77
4.4. Illustration graphique des résultats et la prévision des conditions de fonctionnement du panneau PV	79
4.5. Conclusion	84
CONCLUSION	85
APPENDICE	86
A. LISTE DES SYMBOLES	88
B. CODE MATLAB POUR LES RESULTATS PRESENTES EN CHAPITRE 3	92
REFERENCES	101

## LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1.1	L'environnement du système	12
Figure 1.2	Domaine de variation du facteur	14
Figure 1.3	Définition de l'espace expérimental	14
Figure 1.4	Niveaux des facteurs définissant des points expérimentaux dans l'espace expérimental	15
Figure 1.5	Définition du domaine d'étude pour deux facteurs	15
Figure 1.6	Définition de la surface de réponse	16
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	17
Figure 1.8	un plan factoriel complet $2^3$ peut être divisée en deux Plans fractionnaires $2^{3-1}$ , un plan noir et un plan gris	29
Figure 1.9	Plan composite pour l'étude de deux facteurs	30
Figure 1.10	10 points issus d'un échantillonnage par hyper cube latin en dimension 2	32
Figure 1.11	les 100, 1000, 10000 premiers points de la suite de Halton en base 2 et 3	33
Figure 1.12	les 100, 1000 et 10000 premiers points d'une suite de Sobol	34
Figure 1.13	les 50, 250 et 250 premiers points d'une suite de Faure	34
Figure 2.1	Ensemble de points, ou configuration, de $\chi = [0,1] \times [0,1]$ .	38
Figure 2.2	Définition d'un processus ponctuel	39
Figure 2.3	Exemple d'un processus ponctuel	40
Figure 2.4	$B_n \subset \mathbb{R}^p$ une boule centrée à l'origine	43
Figure 2.5	A gauche un processus homogène de poisson pour une intensité 0,02 et à droite un processus de poisson non homogène	47
Figure 2.6	Illustration du processus de branchement	47
Figure 2.7	Exemple d'un processus ponctuel marqué	49
Figure 3.1	A gauche, une configuration initiale aléatoire de 25 points et à droite, une configuration finale pour $\beta = 2.5$ , $\gamma = 0.001$ et $r = 0.17$	62
Figure 3.2	Boxplots des critères de qualité calculés sur les 80 plans à 50 points en dimension 7	69
Figure 3.3	Boxplots des critères de qualité calculés sur les 80 plans à 40 points en dimension 5	69
Figure 3.4	Boxplots des critères de qualité calculés sur les 80 plans à 20 points en dimension 3	70
Figure 4.1	Courbes caractéristiques I-V pour les 72 cellules actives pour trois valeurs	73

	de distance de source correspondant aux essais 2, 6 et 15 du tableau 4.1	
Figure 4.2	Diagramme schématique de BP Solar, panneau BP 350	74
Figure 4.3	Répartition des points expérimentaux dans le domaine d'étude	75
Figure 4.4	Histogrammes	80
Figure 4.5	l'influence de la température et d'éclairement sur les trois réponses $P_{max}$ , $V_{oc}$ et $I_{sc}$	81
Figure 4.6	Courbes de niveau de la fonction d'erreur de prédiction sur les réponses prédites pour les trois réponses $P_{max}$ , $V_{oc}$ et $I_{sc}$	82
Figure 4.7	Courbes d'iso réponses par intervalles pour $P_{max}$ , $V_{oc}$ et $I_{sc}$	83
Figure 4.8	Courbes de contour sur le même diagramme pour les trois réponses	83
Tableau 1.1	Matrice d'expériences	18
Tableau 1.2	Matrice d'expériences $2^2 \times 3^1$	28
Tableau 1.3	Nombre d'essais d'un plan complet $2^k$	28
Tableau 1.4	Tableau orthogonal $L_4(2^3)$	30
Tableau 3.1	La valeur de la discrédance pour les plans proposés (MSD), les suites de Halton, les suites de Sobol et les suites de Faure pour trois, cinq et sept dimensions	68
Tableau 4.1	Matrice d'expériences et résultats expérimentales	76
Tableau 4.2	Comparaison entre les réponses observées et les réponses prédites	79

## Introduction

La plupart des ingénieurs et techniciens améliorent leurs produits ou leurs processus de production à partir des expériences. Malheureusement, les stratégies couramment utilisées pour mener ces expériences sont souvent coûteuses et peu performantes et elles conduisent à de nombreuses expériences difficiles exploitables. Pour toutes ces raisons, de nombreux ingénieurs et techniciens font appel à la planification des expériences ou la méthode des plans d'expériences particulièrement les plans d'expériences numériques.

Les plans d'expériences permettent d'organiser au mieux les essais qui accompagnent une recherche scientifique ou des études industrielles. Ils sont applicables à de nombreuses disciplines, on peut par exemple l'appliquer dans : l'industrie chimique, pétrochimique, pharmaceutique, l'industrie mécanique, automobiles, l'industrie métallurgiques...etc. A l'aide de cette méthode on peut faciliter la recherche de facteurs d'influence, identifier les principaux facteurs pour la fabrication d'un nouveau produit, améliorer les paramètres du processus de fabrication et beaucoup d'autres objectifs.

Les plans d'expériences ont été étudiés par des auteurs comme Fisher [1], Kiefer [2], Box [3]...etc. Les plans classiques ont tendance à positionner les points aux bords du domaine pour prendre en compte la variation aléatoire et offrir une tendance plus fiable en présence d'erreurs de mesures. La plupart des critères de ces plans utilisent l'erreur expérimentale qui existe dans le cadre d'expériences réelles, tandis qu'en numérique, l'erreur est liée au modèle et non à l'expérimentation. Aussi la répétition des expériences classiques est d'un grand intérêt pour évaluer l'erreur expérimentale. Tandis que dans le cas des expériences numériques la répétition d'une expérience dans les mêmes conditions est sans intérêt puisqu'elle fournit la même réponse.

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.

L'objectif principal de notre travail est de présenter un état d'art sur les plans d'expériences numériques existants dans la littérature puis d'étudier et comparer ces plans entre eux via différents critères d'optimalités spécifiques à ce type de plans.

Le mémoire est composé de quatre chapitres organisés comme suit :

Le premier chapitre présente la théorie de la méthodologie des plans d'expériences et un état d'art sur les plans d'expériences classiques couramment utilisés en expérimentation, ainsi que certains critères d'optimalités pour étudier la qualité de ces plans.

Le deuxième chapitre introduit les différents critères d'optimalités utilisés pour évaluer la qualité d'un plan d'expériences numériques.

Le troisième chapitre est consacré à étudier et présenter un état d'art sur les plans d'expériences numériques couramment utilisés en expérimentation numériques.

Le quatrième chapitre présente une étude comparative entre les différents plans numériques décrits dans la littérature, pour les besoins de chaque étude et chaque utilisateur.

Enfin, une conclusion termine ce travail, donnant quelques perspectives pour des travaux futures.

En annexe, nous présentons les programmes développés dans le logiciel MATLAB permettant de réaliser les tables de comparaison et les illustrations numériques fournis dans le quatrième chapitre.

## CHAPITRE 1

### Généralité sur la Méthode Des Plans d'Expériences

Dans ce chapitre sont présentées les différentes hypothèses entrant en jeu dans l'utilisation de la méthode des plans d'expériences. La compréhension de cette méthode s'appuie en général sur deux notions essentielles, celle d'espace expérimental et celle de modélisation mathématique des grandeurs à étudier. Pour cela il faut suivre des règles mathématiques et adopter une démarche rigoureuse.

#### 1.1 La Méthodologie de la Recherche Expérimentale

La méthodologie de la recherche expérimentale (MRE) est un ensemble de méthode et mode de raisonnement destiné à tout expérimentateur désirant faire de la planification expérimentale.

#### 1.2. Intérêt de la Méthode des Plans d'Expériences

Les plans d'expériences permettent de faire varier les niveaux de tous les facteurs à chaque expérience, mais de manière programmée et raisonnée. Les avantages majeurs sont les suivants :

- Diminution du nombre d'essais,
- Nombre de facteurs étudiés important,
- Détection des interactions entre facteurs,
- Détection des optimaux,
- Meilleure précision sur les résultats,
- Optimisation des résultats,
- Modélisation des résultats.

#### 1.3. Vocabulaire de Base des Plans d'Expériences

La technique des plans d'expériences possède un vocabulaire particulier en méthodologie de la recherche expérimentale. Ses termes spécifiques sont classiques mais il peut arriver que dans certains domaines des statistiques, ils aient des significations un peu

différentes. Pour que notre présentation soit bien comprise, nous préférons rappeler la signification de quelques termes importants.

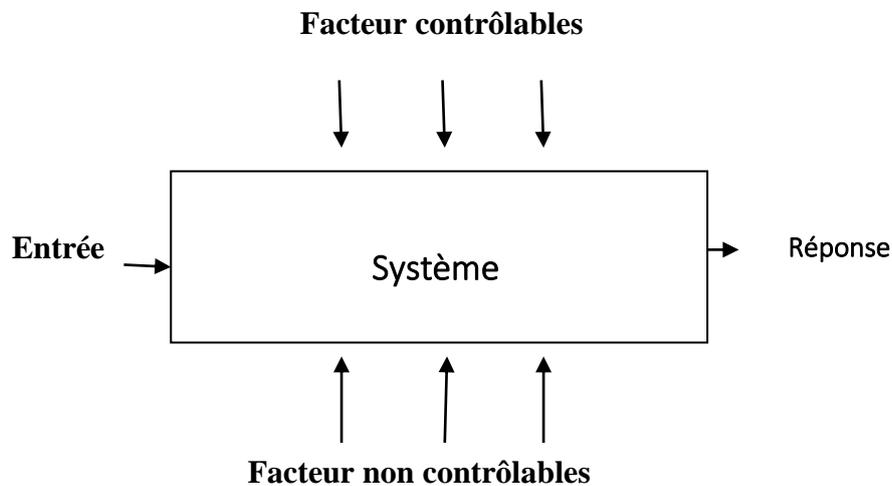


Figure 1.1:schéma d'un système

### 1.3.1. Réponse

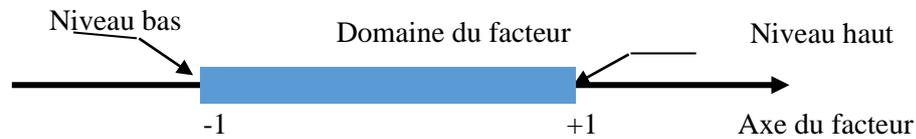
Une réponse expérimentale ou variable dépendante, est une manifestation mesurable que l'on observe lorsqu'on fait varier les facteurs étudiés. La réponse peut être de type quantitatif continu, comme un rendement, caractéristique mécanique...etc, ou de type qualitatif. Les réponses quantitatives sont en général plus faciles à traiter.

### 1. 3.2.Facteur Et espace expérimental

Les facteurs sont les paramètres qui interviennent sur le système (Figure 1.1). La valeur donnée à un facteur pour réaliser un essai est appelée **niveau**. Un facteur peut être :

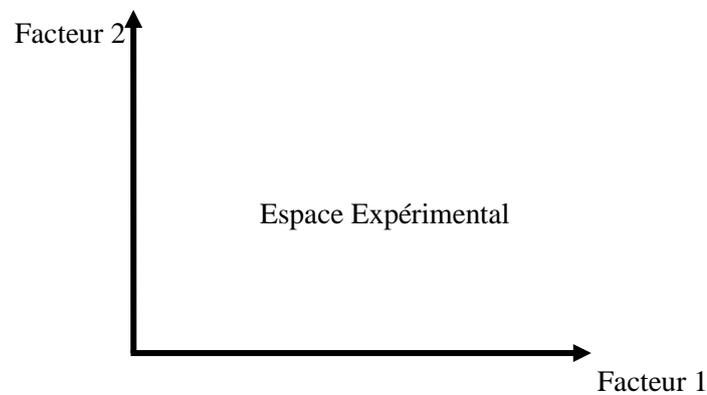
- **Un facteur contrôlable** : C'est un facteur que l'on peut maîtriser, gérer, modifier.
- **Un facteur non contrôlable** :C'est un facteur considéré comme non retenu pour l'étude, car il est non influent et laissé à sa valeur habituelle
- **Un facteur quantitatif** : Il se traduit par une grandeur numérique mesurable,ce sera une vitesse, une température, une intensité, ...etc.
- **Un facteur qualitatif** : Il ne peut pas donner lieu à une quantification directe, on peut seulement identifier ses différents niveaux: ce sera une marque, un procédé, une méthode, un fournisseur...etc.

Lorsqu'on étudie l'influence d'un facteur, en général, on limite ses variations entre deux bornes. La borne inférieure est le niveau bas. La borne supérieure est le niveau haut.



**Figure 1.2:** Domaine de variation du facteur

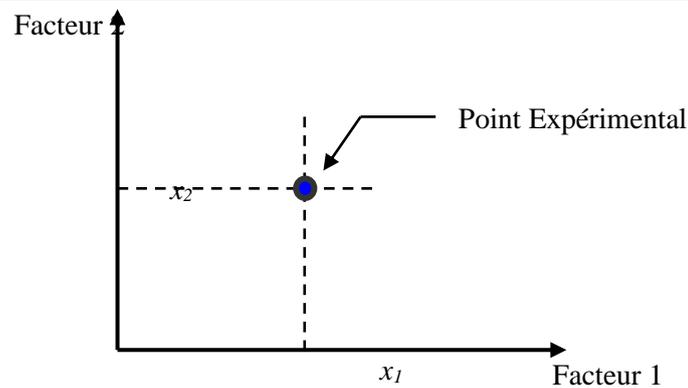
L'ensemble de toutes les valeurs que peut prendre le facteur entre le niveau bas et le niveau haut, s'appelle le domaine de variation du facteur ou plus simplement le **domaine** du facteur. On a l'habitude de noter le niveau bas par  $-1$  et le niveau haut par  $+1$ . S'il y a un second facteur, il est représenté, lui aussi, par un axe gradué et orienté. On définit, comme pour le premier facteur, son niveau haut, son niveau bas 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**) [4].



**Figure 1.3 :** l'espace expérimental pour 2 facteurs

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**).

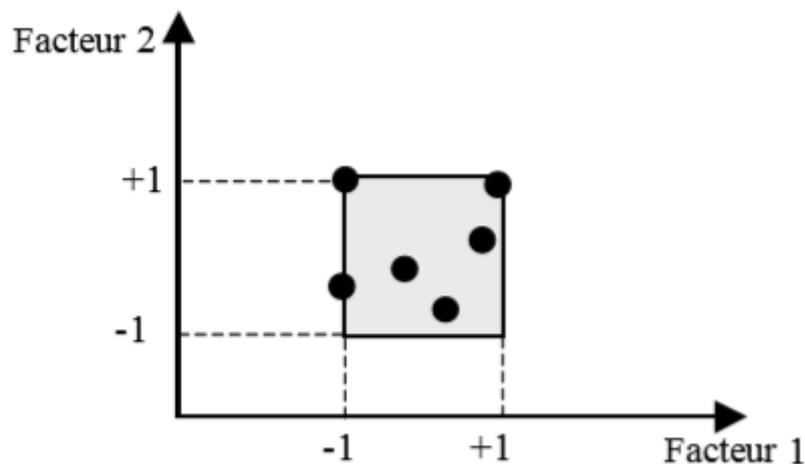
Une expérience donnée est alors représentée par un point dans ce système d'axes. Un plan d'expériences est représenté par un ensemble de points expérimentaux.



**Figure 1.4:** Dans l'espace expérimental, les niveaux des facteurs définissent des points expérimentaux.

### 1.3.3 Domaine d'étude et surface de réponse

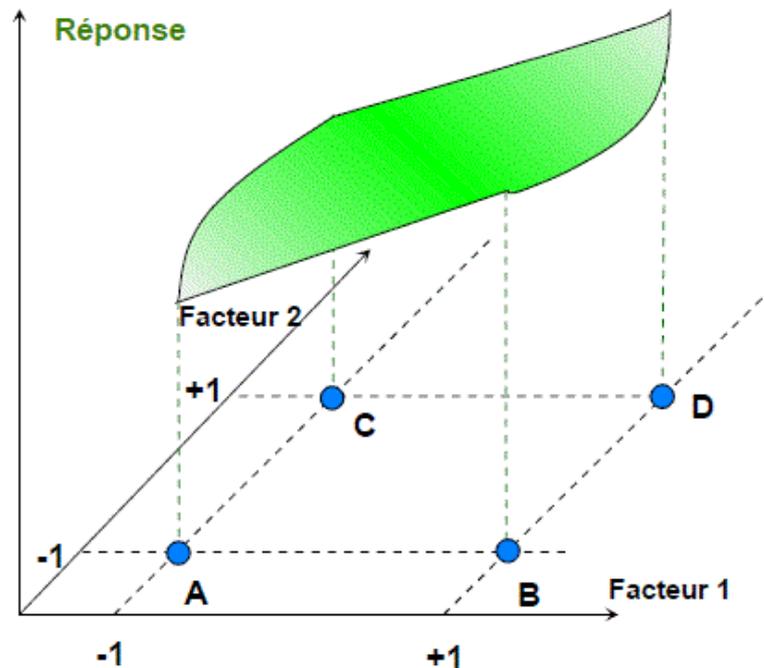
Le regroupement des domaines des facteurs définit le «**domaine d'étude**». Ce domaine d'étude est la zone de l'espace expérimental choisie par l'expérimentateur pour faire ses essais. Une étude, c'est-à-dire plusieurs expériences bien définies, est représentée par des points répartis dans le domaine d'étude (**Figure 1.5**).



**Figure 1.5 :** Les points expérimentaux sont disposés dans le domaine d'étude défini par l'expérimentateur.

A chaque point du domaine d'étude correspond une réponse. A l'ensemble de tous les points du domaine d'étude correspond un ensemble de réponses qui se localisent sur une surface appelée la surface de réponse (**Figure 1.6**).

Le nombre et de l'emplacement des points d'expériences est le problème fondamental des plans d'expériences. On cherche à obtenir la meilleure précision possible sur la surface de réponse tout en limitant le nombre d'expériences.



**Figure 1.6 :** Les réponses associées aux points du domaine d'étude forment la surface de réponse

### 1.3.4 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 :

1. On change l'unité de mesure,
2. On déplace l'origine 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,  $x$ , et inversement, est donné par la formule suivante ( $z_0$  est la valeur centrale en unités courantes) :

$$x = \frac{Z - Z_0}{PAS}$$

L'intérêt des variables centrées réduites est de pouvoir présenter les plans d'expériences de la même manière quels que soient les domaines d'étude retenus et quels que soient les facteurs. La théorie des Plans d'expériences présente ainsi une grande généralité [5].

### 1.3.5 Plans d'expériences

Le choix du nombre et de l'emplacement des points d'expériences est le problème fondamental des plans d'expériences. On cherche à réaliser le minimum d'expériences tout en réduisant l'influence de l'erreur expérimentale sur les modélisations mathématiques qui serviront à prendre des décisions. On atteint ce but en considérant les propriétés mathématiques et statistiques qui relient la réponse aux facteurs.

### 1.3.6 Matrice d'expériences

Une matrice d'expériences est un objet mathématique qui représente, sous forme codée ou normée, c'est un tableau constitué de  $n$  lignes, correspondant aux  $n$  expériences, et de  $k$  colonnes, correspondant aux  $k$  variables étudiées.

L'élément  $x_{ij}$  de la matrice ainsi formée correspond au niveau que prend la  $j^{\text{ème}}$  variable (codée ou normée) à la  $i^{\text{ème}}$  expérience [6].

N°essai	Facteur1	Facteur 2
1	-1	-1
2	+1	-1
3	-1	+1
4	+1	+1

**Tableau 1.1** : Matrice d'expériences

## 1.4. Notion de modélisation mathématique

On choisit a priori une fonction mathématique qui relie la réponse aux facteurs. On prend un développement limité de la série de Taylor-Mac Laurin. Les dérivées sont supposées constantes et le développement prend la forme d'un polynôme de degré plus ou moins élevé :

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

Où :

- $y$  : est la grandeur à laquelle s'intéresse l'expérimentateur ; c'est la réponse ou la grandeur d'intérêt,
- $x_i$ : représente un niveau du facteur  $i$ ,
- $x_j$ : représente un niveau du facteur  $j$ ,
- $a_0, a_i, a_{ij}, a_{ii}, \dots$ etc., sont les coefficients du modèle mathématique adopté a priori. Ils ne sont pas connus et doivent être calculés à partir des résultats des expériences.

L'intérêt de modéliser la réponse par un polynôme est de pouvoir calculer ensuite toutes les réponses du domaine d'étude sans être obligé de faire les expériences.

Ce modèle est appelé le modèle a priori ou le modèle postulé.

### 1.5 Système d'équation

Chaque point expérimental permet d'obtenir une valeur de la réponse. Cette réponse 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  $p$  inconnues (s'il y a  $p$  coefficients dans le modèle choisi a priori). Ce système s'écrit d'une manière simple en notation matricielle :

$$\mathbf{y} = \mathbf{XA} + \mathbf{e}$$

Avec :

- $\mathbf{Y}$  : vecteur de réponse,
- $\mathbf{X}$  : matrice de calcul, qui dépend des points expérimentaux choisis pour exécuter le plan et du modèle postulé,
- $\mathbf{A}$ : vecteur de coefficients,
- $\mathbf{e}$ : vecteur de résidus.

Ce système possède un nombre d'équations inférieur au nombre d'inconnues. Il y a  $n$  équations et  $p + n$  inconnues. Pour le résoudre, on utilise une méthode de régression basée sur le critère des moindres carrés.

### 1.6. Estimation des coefficients par la méthode des moindres carrés

Une fois le modèle posé, le problème consiste maintenant à déterminer un estimateur  $\hat{A}$  du  $A$  le meilleur possible. Une démarche classique consiste à chercher  $\hat{A}$  de manière à ce que le vecteur de réponses observées  $Y$  et le vecteur des moyenne prédites :  $\hat{Y} = X \hat{A}$  soit les plus proches possibles.

#### Définition 1.1

On dit que  $\hat{A}$  est l'estimateur des moindres carrés de  $A$  si et seulement si  $\hat{A}$  minimise la fonction :

$$Q(A) = \|Y - X\hat{A}\|^2$$

L'estimateur des moindres carrés de  $A$  donne le minimum de la fonction  $Q$  et ce minimum vaut alors :

$$Q(\hat{A}) = \|Y - X\hat{A}\|^2 = \|Y - \hat{Y}\|^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$$

Ceci montre que cette quantité est bien liée à l'erreur (quadratique) commise entre les réponses observées  $Y_i$  et les réponses moyennes prédites par le modèle  $\hat{Y}_i$ . Concernant la détermination pratique de cet estimateur, nous montrons que :

#### Proposition 1.1

Soit le modèle statistique  $Y = XA + e$  avec  $X$  matrice de plein rang. L'estimateur des moindres carrés de  $A$  est donné par :

$$\hat{A} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

- **Preuve** : Nous cherchons  $\hat{A}$  qui minimise la quantité :  $\|Y - \hat{Y}\|^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$ , pour cela, exprimons  $\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$  en fonction de  $\hat{A}$ :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 &= (Y - X\hat{A})^T (Y - X\hat{A}) \\ &= (Y^T - \hat{A}^T X^T)(Y - X\hat{A}) \\ &= Y^T Y - \hat{A}^T X^T Y - Y^T X \hat{A} - \hat{A}^T X^T X \hat{A} \end{aligned}$$

Remarquons que  $\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$  est un scalaire et il est aisé de vérifier que tous les termes de la somme sont également des scalaires. Nous avons donc :

$$Y^T X \hat{A} = (\hat{A}^T X^T Y)^T = \hat{A}^T X^T Y$$

Nous aurons,

$$\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = Y^T Y - 2\hat{A}^T X^T Y - \hat{A}^T X^T X \hat{A}$$

Calculons la dérivée de  $\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$  par rapport à l'inconnue  $\hat{A}$ .

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\partial \hat{A}} = \frac{\partial (Y^T Y)}{\partial \hat{A}} - 2 \frac{\partial (\hat{A}^T X^T Y)}{\partial \hat{A}} + \frac{\partial (\hat{A}^T X^T X \hat{A})}{\partial \hat{A}}$$

Où :  $\frac{\partial (Y^T Y)}{\partial \hat{A}} = 0$  car  $(Y^T Y)$  ne dépend pas de  $\hat{A}$  ,  $\frac{\partial (\hat{A}^T X^T Y)}{\partial \hat{A}} = X^T Y$  car  $(\hat{A}^T X^T Y)$  est une forme linéaire en  $\hat{A}$  et  $\frac{\partial (\hat{A}^T X^T X \hat{A})}{\partial \hat{A}} = 2X^T X \hat{A}$  (car  $\hat{A}^T X^T X \hat{A}$  est une forme quadratique en  $\hat{A}$ ). Il vient donc :

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\partial \hat{A}} = -2X^T Y + 2X^T X \hat{A}$$

La valeur de  $\hat{A}$  qui minimise  $\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$  doit vérifier :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\partial \hat{A}} = 0 &\Rightarrow -2X^T Y + 2X^T X \hat{A} = 0 \\ &\Rightarrow X^T X \hat{A} = X^T Y \Rightarrow \hat{A} = (X^T X)^{-1} X^T Y \end{aligned}$$

**Proposition 1.2 :** Si les hypothèses sur les résidus sont vérifiées et si  $\hat{A}$  est l'estimateur des moindres carrés de A alors :

1.  $\hat{A}$  est un estimateur sans biais de A
  2.  $\hat{A}$  admet pour matrice des covariances :  $\text{var}(\hat{A}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}$
- **preuve**

1. L'espérance mathématique de  $\hat{A}$  a pour expression :

$$E(\hat{A}) = E[(X^T X)^{-1} X^T Y] = (X^T X)^{-1} X^T E(Y) ,$$

Car les éléments de X sont considérés comme fixes. En désignant par A le vecteur des p coefficients vrais et e le vecteur des n écarts entre les résultats expérimentaux et les réponses théoriques, nous obtenons alors:

$$Y = XA + e , E(Y) = E(XA + e) = E(XA) + E(e) = X E(A)$$

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

$$E(\hat{A}) = (X^T X)^{-1} X^T X A = A$$

Le résultat que nous venons d'établir signifie que  $\hat{A}$  est un estimateur sans biais de A .

2. Par définition la variance de  $\hat{A}$  est donnée par :

$$\text{Var}(\hat{A}) = E[(\hat{A} - A)(\hat{A} - A)^T]$$

Remplaçons  $\hat{A}$  par  $(X^T X)^{-1} X^T Y$  et  $Y$  par  $XA + e$ . Nous obtenons :

$$(\hat{A} - A) = (X^T X)^{-1} X^T (XA + e) - A = A + (X^T X)^{-1} X^T e - A = (X^T X)^{-1} X^T e$$

Puisque  $(\hat{A} - A)^T = e^T X (X^T X)^{-1}$ , nous aurons donc :

$$\text{Var}(\hat{A}) = E[(X^T X)^{-1} X^T e e^T X (X^T X)^{-1}] = (X^T X)^{-1} X^T E(e e^T) X (X^T X)^{-1}$$

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

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{A}) &= (X^T X)^{-1} X^T \sigma^2 X (X^T X)^{-1} \\ &= \sigma^2 (X^T X)^{-1} X^T X (X^T X)^{-1} \\ &\Rightarrow \text{Var}(\hat{A}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1} \end{aligned}$$

## 1.7 Les différents types de plans d'expériences

Nous avons choisi de d'aborder les plans expériences les plus classiques car ils ont été développés à l'origine pour plusieurs applications, et nous présentons les principaux types de plans d'expériences ces plans peuvent être classés en deux catégories

- Les plans factoriels.
- Les plans pour surface de réponse.

### 1.7.1 Les plans factoriels

Ces plans permettent de découvrir les facteurs les plus influents sur une réponse donnée. On ne cherche pas vraiment à obtenir une relation précise entre les variations des facteurs et celle de la réponse.

#### 1.7.1.1 Plan factoriel complet

Un plan factoriel complet est un plan pour lequel toutes les combinaisons possibles aux limites du domaine d'étude auront été réalisées : c'est le nombre maximal d'essais pour un plan d'expériences factoriel. Cette méthode-là plus simple pour répondre à la problématique du remplissage de l'espace consiste à choisir les points sur une grille régulière dans le domaine expérimental, pour obtenir une grille régulière à  $k$  niveaux.

### 1.7.1.2 Plan factoriel fractionnaire

Les plans factoriels complets ne sont pas proportionnels à l'exécution d'un grand nombre d'opérations de simulation, de sorte que les plans factoriels partiels peuvent être une bonne alternative. Représente une fraction orthogonale du plan complet cette partie consiste à ne garder que certaines expériences du plan complet tout en préservant la propriété d'orthogonalité. Le principe consistant en des sous-ensembles de plans factoriels complets permet de réduire significativement le cout par rapport au nombre de simulations (plus de détails se trouvent dans Myers et Montgomery ,1995).

Le choix d'un plan factoriel fractionné peut s'avérer délicat .les tables de TAGU-CHI sont des plans factoriels fractionnés orthogonaux aux quels sont associés des graphes linéaires et qui permettent une construction avisée de ce type de plans, notamment en prenant en compte la confusion d'actions entre facteurs et interactions (alias). Les tables de TAGUCHI sont repérées par une inscription du type  $L_z(X^y)$ , ou :

- $z$  est le nombre d'expériences dans le plan,
- $X$  le nombre de niveaux retenus pour les facteurs,
- $y$  le nombre de facteurs retenus l'étude.

Et donc  $X^y$  est le nombre d'expériences que comporte le plan factoriel complet correspondant.

Le tableau 1.2 donne la table  $L_8(2^7)$ , c'est un plan factoriel fractionné de 8 expériences pour 7 facteurs à 2 niveaux chacun. Le plan factoriel complet correspondant comporte 128 essais. La figure 1.7 nous donne les graphes linéaires de cette table .

A	B	C	D	E	F	G
1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	2	2	2	2
1	2	2	1	1	2	2
2	2	2	2	2	1	1
2	1	2	1	2	1	2
2	1	2	2	1	2	1
2	2	1	1	2	2	1
2	2	1	2	1	1	2

**Tableau 1.2 :** la table  $L_8(2^7)$ .

Sur les graphes linéaires, les cercles indiquent les facteurs, ceux qui sont plus faciles à modifier sont indiqués par des cercles noirs, les traits indiquent les interactions entre deux facteurs.

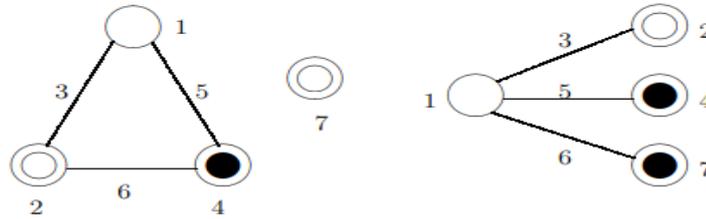


Figure 4.1: Graphes linéaires pour la table  $L_8(2^7)$

-  Facteur le plus difficile à modifier
-  Facteur difficile à modifier
-  Facteur facile à modifier
-  Facteur le plus facile à modifier

Figure 1.7 : graphe linéaires pour la table  $L_8(2^7)$

### 1.7.2 Les plans surface de réponse

L'objectif de cette catégorie est plus que de hiérarchiser les effets des différents facteurs, de décrire le plus précisément possible le comportement de la réponse en fonction des variations des facteurs. Le but de ce type d'étude est donc de parvenir à une modélisation du phénomène étudié basée sur l'expérimentation. Ces plans permettent de déterminer à quelles valeurs les facteurs d'entrée d'un dispositif doivent être ajustés pour obtenir une ou plusieurs réponses souhaitées, ils s'appuient sur l'usage de modèles de nature polynomiale. Signalons l'existence de nombreuses références sur les plans de surface de réponse [7,8,9,10,11]. Il en existe plusieurs types : les plans factoriels complets à trois niveaux, les plans de Box et Behnken, les plans composite, les plans optimaux,...etc.

#### 1.7.2.1 Plans composites

Les plans composites permettent de calculer un modèle polynomial du second degré, il est bien adapté au développement séquentiel de l'étude car les plans composite sont différentes classes :

- Si les points en étoile sont sur les faces du cube (ou hyper cube), ( $\alpha = \pm 1$ ), le plan est dit plan composite à faces centrées,

- Si les points en étoile sont à l'extérieur du domaine cubique ( $\alpha > 1$ ), le plan est composite centré extérieur (CCE),
- Si les points en étoile sont à l'intérieur du domaine cubique ( $\alpha < 1$ ), le plan est composite centré intérieur (CCI).

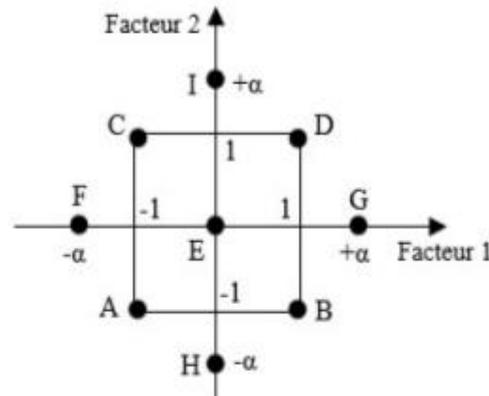


Figure 1.8 : plan composite pour l'étude de deux facteurs.

### 1.7.2.2 Plans de Box-Behnken

Box et Behnken ont proposé en 1960 [3] 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 œuvre et possèdent la propriété de séquentialité par rapport aux facteurs, c'est-à-dire que l'on peut entreprendre l'étude des  $k$  premiers facteurs en se réservant la possibilité d'en ajouter de nouveaux sans perdre les résultats des essais déjà effectués. Cette propriété est précieuse quand on veut faire une exploration rapide des deux ou trois facteurs qui paraissent les plus utiles tout en se réservant la possibilité d'en étudier d'autres plus tard.

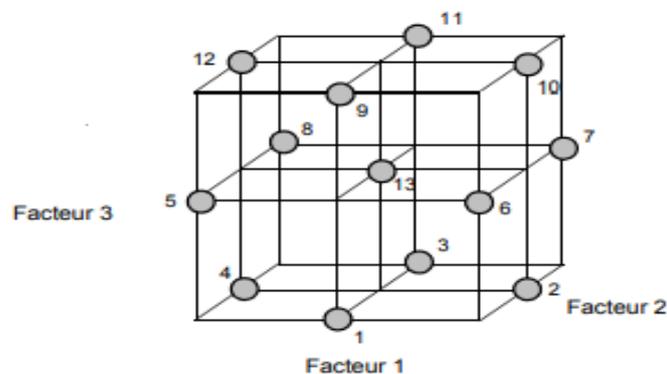


Figure 1.9: plans de Box-Behnken pour trois facteurs.

Le tableau ci-dessus, représente la matrice d'expériences de plans de Box-Behnken pour trois facteurs :

n° essai	Facteur1	Facteur2	Facteur3
1	0	-1	-1
2	+1	0	-1
3	0	+1	-1
4	-1	0	-1
5	-1	-1	0
6	+1	-1	0
7	+1	+1	0
8	-1	+1	0
9	0	-1	+1
10	+1	0	+1
11	0	+1	+1
12	-1	0	+1
13	0	0	0

**Tableau 1.3** : Plan de Box- Behnken pour 3 facteurs

### 1.7.2.3 Plans D-optimaux

Les contraintes expérimentales ne permettent pas toujours d'être dans les conditions idéales des plans d'expériences précédemment décrits. Par exemple, les réglages de l'appareil ne permettent pas d'atteindre les niveaux préconisés par la théorie ou des combinaisons de niveaux peuvent se révéler dangereuses : réaction explosive pour les chimistes, concentration toxique pour les médecins, etc. Dans cette situation, il est extrêmement commode d'utiliser les plans D-optimaux. Le choix de l'emplacement des points expérimentaux nécessite alors un logiciel de plans d'expériences. Il suffit de préciser le nombre d'expériences que l'on désire effectuer et le modèle a priori. Le logiciel calcule alors, grâce à un algorithme d'échange, le plan le mieux adapté à l'étude.

## 1.8. Critères d'optimalités pour les plans d'expériences

De nombreux critères permettent d'évaluer la qualité du plan, et selon les objectifs de l'étude, les meilleurs emplacements des points expérimentaux dans le domaine d'étude ne sont pas symétriques. La planification optimale des points de combat dépend des pertes, et ces options dépendent en elles-mêmes du domaine d'étude et d'un modèle que l'expérimentateur garde à l'avance puis elles dépendent des principaux critères d'optimisation comme suit

### 1.8.1 Critère de O-optimalité

La matrice de calcul  $X$  est une matrice orthogonale d'Hadamard. Il en résulte que la matrice  $(X^T X)^{-1}$  est une matrice diagonale. Seuls les termes diagonaux de cette matrice sont différents de zéro et l'on démontre que la variance des coefficients est la plus faible possible.

### 1.8.2 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  $(X^T X)^{-1}$  est diagonale donc quand les covariances des coefficients sont nulles.

### 1.8.3 Critère de presque-orthogonalité

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

### 1.8.4 Critère de D-optimalité

Si l'on veut la plus petite variance possible sur l'ensemble des coefficients, il faut que les termes diagonaux de la matrice de dispersion soient eux-mêmes les plus petits possibles. On obtient ce résultat en maximisant le déterminant de la matrice  $X^T X$ . Le critère correspondant s'appelle le critère de D-optimalité.

### 1.8.5 Critère de A-optimalité

La somme des variances des coefficients peut être minimisée. Dans ce cas on parle de critère de A-optimalité. Un plan est A-optimal si la position des points expérimentaux minimise la trace de la matrice  $(X^T X)^{-1}$ .

### 1.8.6 Critère de G-optimalité

Parmi les variances des coefficients il y en a une qui est plus grande que toutes les autres. On peut vouloir que cette forte variance soit la plus faible possible. Le critère correspondant s'appelle le critère de G-optimalité.

### 1.8.7 Critère de E-optimalité

Une matrice d'expériences est dite E-optimale, si elle conduit à la valeur propre maximale de  $(X^T X)^{-1}$  la plus faible possible.

### 1.8.8 Critère M (critère du déterminant de la matrice des Moments)

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 :

$$M = \frac{(X^T X)}{n}$$

### 1.8.9 Critère d'isovariance 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 isovariant par rotation (rotatable en anglais) [12]. On remarquera que ces critères conduisent à des qualités de modélisation différentes. Certains privilégient une bonne précision sur les coefficients du modèle, d'autres assurent une répartition homogène de l'erreur de prévision.

## 1.9 Conclusion

Dans le premier chapitre, nous avons étudié et présenté la méthode des plans d'expériences ainsi les différents plans d'expériences classiques existants dans la littérature. Les techniques utilisées dans cette méthode sont fondées essentiellement sur des bases statistiques et algébriques. Ces techniques permettent d'identifier les expériences, de les conduire, de comprendre les résultats obtenus et de les utiliser à travers des nombreux plans, qui ont été adaptés à tous les cas rencontrés par un expérimentateur. Nous avons remarqué que les multiples aspects de la méthode des plans d'expériences, en font une méthode d'analyse parfaitement adaptée à l'étude des systèmes.

## CHAPITRE 2

### Critères d'optimalité pour les plans d'expériences numériques

Lorsque l'objectif est de modéliser le code en phase exploratoire (quand aucune simulation n'a encore été réalisée), on recherche souvent à satisfaire les deux contraintes suivantes : D'une part, répartir les points dans l'espace le plus possible de façon à capter les non-linéarités. D'autre part, faire en sorte que ce remplissage de l'espace subsiste par réduction de la dimension. On cherche à réaliser des expérimentations en remplissant l'espace des paramètres "au mieux" Comment définir ce "au mieux" ? La qualité de la répartition spatiale est mesurée soit à l'aide de critères déterministes comme les distances Minimax ou Maximin [13], soit à l'aide de critères probabilistes comme la discrédance par exemple.

#### 2.1. Critères d'uniformité basés sur la discrédance et plans à faible discrédance

##### 2.1.1. La discrédance

Les séquences de points sont initialement utilisées pour remplacer les séquences aléatoires par la méthode de Monte-Carlo, d'où le nom des méthodes quasi-Monte Carlo dont le but est de bien remplir l'espace. La plupart de ces suites à faible discrédances [14] sont générées à l'aide d'algorithmes déterministes afin d'obtenir des points aussi uniformes que possible. Les méthodes de suite à faible discrédances sont intéressantes car elles sont faciles à mettre en œuvre.

Niederreiter H. [15] à définit la discrédance comme étant une mesure de l'écart par rapport à une distribution uniforme. Ainsi, plus l'écart est faible ou plus la discrédance est faible, plus les points sont uniformément distribués sur  $[0,1]^d$ . La discrédance est donc un indicateur permettant de mesurer la bonne répartition des points dans l'espace  $[0,1]^d$ . Autrement dit, il permet de mesurer l'irrégularité de la distribution des points.

##### Définition 2.1 [16,17]

Soit  $X$  la suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  dans  $[0,1]^d$  et soit  $J$  un sous-ensemble de  $[0,1]^d$ , avec les notations précédentes on pose:

$$D_n(J, X) = \frac{A(J, X)}{n} - \lambda_d(J)$$

où  $A(J, X)$  est le nombre d'indices  $i$ ,  $1 \leq i \leq n$ , tel que  $x^i \in J$  et  $\lambda_d(J)$  est la mesure de Lebesgue (ou volume) de  $J$ .

- **La discrétance extrême** : de  $X$ , notée  $D_n(X)$  est définie par :

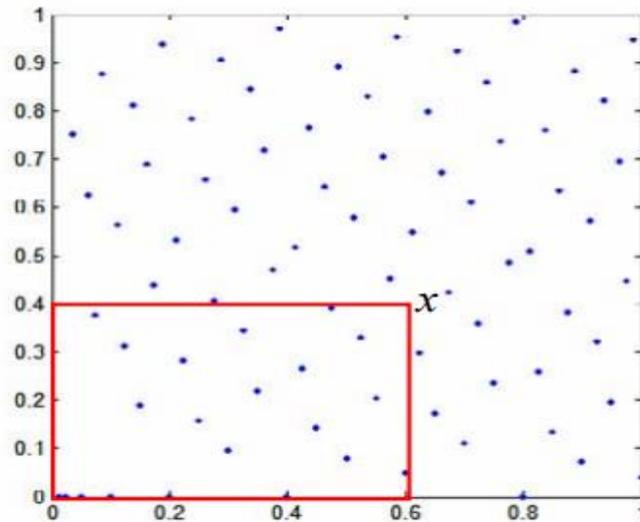
$$D_n(X) = \sup_{J \in \mathfrak{J}} |D_n(J, X)|$$

Où  $\mathfrak{J}$  est l'ensemble des parties de  $[0,1]^d$  de la forme :  $\prod_{i=1}^d [a_i, b_i]$ .

- **La discrétance à l'origine** : de  $X$ , notée  $D_n^*(X)$  est définie par :

$$D_n^*(X) = \sup_{J \in \mathfrak{J}^*} |D_n(J, X)|$$

Où  $\mathfrak{J}^*$  est l'ensemble des parties de  $[0,1]^d$  de la forme  $\prod_{i=1}^d [0, b_i]$ .



**Figure 2.1:** Un sous-ensemble  $J$  pour le calcul de la discrétance à l'origine

### 2.1.2. Approches calculatoires de la discrétance en norme infinie

Les valeurs de la discrétance sont faciles à calculer en dimension 1 et 2. Le calcul de la discrétance devient très difficile en grande dimension.

#### 2.1.2.1 La discrétance en dimension 1

##### Théorème 2.1[18]

Soit  $X$  une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  avec  $0 \leq x^1 \leq \dots \leq x^n \leq 1$ , alors :

$$D_n^*(X) = \frac{1}{2n} + \max_{1 \leq i \leq n} \left| x_i - \frac{2i+1}{2n} \right|$$

### 2.1.2.2 La discrédance en dimension 2

#### Théorème 2.2

Soit une suite  $x^1, \dots, x^n$  dans  $[0,1]^d$  dont les  $n$  points ont été préalablement triés dans l'ordre croissant de leur première composante :  $0 \leq x_1^1 \leq \dots \leq x_1^n \leq 1$ .

On se donne la paire de points auxiliaires  $x^0 = (0,0)$  et  $x^{n+1} = (1,1)$ . Pour chaque indice  $i \in \{0, \dots, n\}$ , on note  $\{\xi_0^i, \dots, \xi_{i+1}^i\}$  la séquence obtenue en réordonnant le sous-ensemble de secondes composantes  $\{x_2^0, \dots, x_2^i, x_2^{n+1}\}$  de manière à satisfaire :

$$0 = \xi_0^i \leq \xi_1^i \leq \dots \leq \xi_i^i \leq \xi_{i+1}^i = 1.$$

Avec ces notations, nous avons :

$$D_n^*(X) = \max_{0 \leq i \leq n} \max_{0 \leq k \leq i} \max \left\{ \left| \frac{k}{n} - x_1^i \xi_k^i \right|, \left| \frac{k}{n} - x_1^{i+1} \xi_{k+1}^i \right| \right\}$$

### 2.1.2.3 La discrédance en dimension quelconque

Le calcul de l'écart est très difficile avec la dimensionnalité car les algorithmes utilisés pour le calculer deviennent de plus en plus complexes [19] présentent une première théorie permettant de calculer la discrédance exacte à partir d'un échantillonnage de l'espace.

Dans la norme  $L_\infty$ , il existe plusieurs méthodes pour calculer l'écart relatif entre la valeur de la discrédance obtenue avec la méthode de Bundshu et Zhu et la valeur de la discrédance approchée en fonction du nombre d'orthants que l'on choisit. Nous avons conclu pour obtenir la meilleure précision possible, qu'il valait mieux choisir un nombre d'outils assez important, et il nous a semblé intéressant d'étudier le temps d'exécution du calcul de la discrédances en fonction de la dimension, car cela restera compétitif même dans les hautes dimensions.

### 2.1.3. Discrédance en Norme 2

Dans la norme  $L_2$ , la contradiction peut être facilement calculée quelle que soit la dimension, nous allons définir les différentes contradictions dans cette norme et connaître leurs méthodes de calcul.

### 2.1.3.1. Discrédance extrême et à l'origine

#### Définition 2.2

La discrédance  $L_2$  d'une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  sur  $[0,1]^d$  est définie par

$$DL2_n(X)^2 = \int_{[0,1]^d} (D_n(J, X))^2 da db$$

Où  $J$  est l'ensemble des parties de  $[0,1]^d$  de la forme  $\prod_{i=1}^d [a_i, b_i]$ . En dimension  $d$ , les calculs de  $DL2_n$  comme suite :

$$DL2_n(X)^2 = \left(\frac{1}{12}\right)^d - \frac{2^{1-d}}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^d x_j^i (1 - x_j^i) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^d (1 - \max(x_j^i, x_j^k)) \min(x_j^i, x_j^k)$$

#### Définition 2.3

La discrédance  $L_2$  à l'origine d'une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  sur  $[0,1]^d$  est définie par :

$$DL2_n^*(X)^2 = \int_{[0,1]^d} (D_n(J, X))^2 db$$

Où  $J$  est l'ensemble des parties de  $[0,1]^d$  de la forme  $\prod_{i=1}^d [0, b_i]$ .

En dimension  $d$ , les calculs de  $DL2_n^*$  comme suite :

$$DL2_n^*(X)^2 = \left(\frac{1}{3}\right)^d - \frac{2^{1-d}}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^d (1 - (x_j^i)^2) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^d (1 - \max(x_j^i, x_j^k)).$$

### 2.1.3.2. Discrédance modifiée

#### Définition 2.4

La discrédance  $L_2$  modifiée d'une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  sur  $[0,1]^d$  est définie par :

$$DL2_n^M(X)^2 = \sum_{u \neq \emptyset} \int_{[0,1]_u} (D_p(J_u, X))^2 db_u$$

Avec  $[0,1]_u$  la projection de l'hypercube unité sur composantes  $u$  étant un sous-ensemble de  $\{1, \dots, d\}$ ,  $p = \text{Card}(u)$  et  $J_u$  est la projection du sous-ensemble  $J$  de la forme  $\prod_{i=1}^d [0, b_i]$ .

### 2.1.3.3. Discrédance centre

#### Définition 2.5

La discrédance  $L_2$  centrée d'une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  sur  $[0,1]^d$  est définie par :

$$DL2_n^C(X)^2 = \sum_{u \neq \emptyset} \int_{[0,1]_u} (D_p(J_u, X))^2 dx_u$$

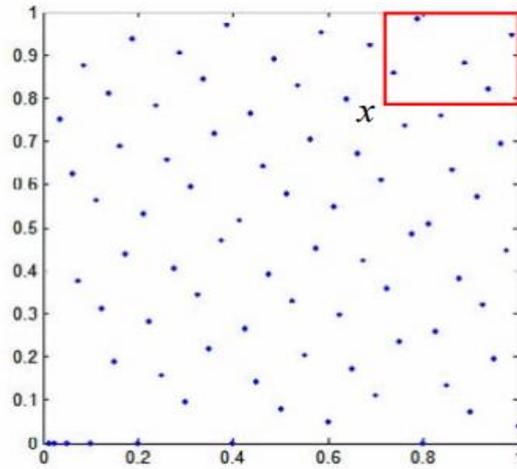
Avec  $[0,1]_u$  la projection de l'hypercube unité sur les composantes  $u$  étant un sous-ensemble de  $\{1, \dots, d\}$ ,  $p = \text{Card}(u)$  et où  $J_u$  est la projection du sous-ensemble construit à partir du point considéré  $x$  et de son sommet le plus proche.

La forme analytique s'écrit de la manière suivante :

$$DL2_n^C(X)^2 = \left(\frac{13}{12}\right)^2 - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^d \left(1 + \frac{1}{2}|x_j^i - 0.5|^2 - \frac{1}{2}|x_j^i - 0.5|\right) + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^d \left(1 + \frac{1}{2}|x_j^i - 0.5|^2 + \frac{1}{2}|x_j^k - 0.5| - \frac{1}{2}|x_j^i - x_j^k|\right)$$

**Remarque.**

En dimension 2, l'ensemble  $J_u$  peut être de 4 formes différentes dont un est représenté sur la Figure 2.2. Plus généralement, en dimension  $d$ , il existe  $2^d$  cas.



**Figure 2.2 :** Un sous-ensemble  $J$  pour le calcul de la discrétance centrée

**2.1.3.4. Discrétance symétrique**

**Définition 2.6**

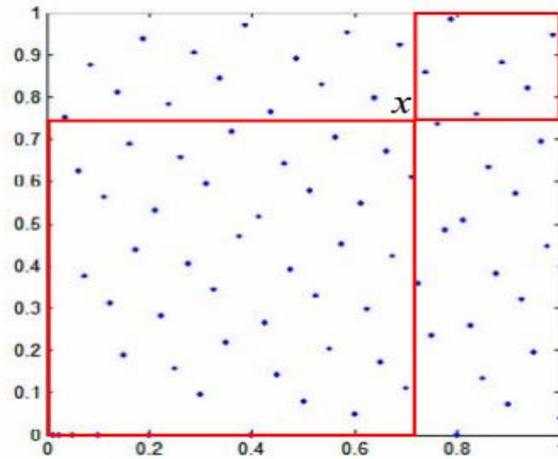
La discrétance  $L_2$  symétrique d'une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  sur  $[0,1]^d$  est définie par :

$$DL2_n^S(X)^2 = \sum_{u \neq 0} \int_{[0,1]_u} (D_p(J_u, X))^2 dx_u$$

Avec  $J_u$  la projection de l'intervalle  $J$  sur le sous-espace défini par les composantes  $u$  où  $J$  est la réunion des sous-ensembles symétriques c'est à dire dont la somme des coordonnées des sommets sont égales.

La forme analytique s'écrit de la manière suivante :

$$DL2_n^S(X)^2 = \binom{d}{3} - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^d (1 + 2x_j^i - 2(x_j^i)^2) + \frac{2^d}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^d (1 - |x_j^i - x_j^k|)$$



**Figure2.3:** Pour  $X = (0.7,0.75)$ , le volume total des 2 sous-ensembles  $J$  est 0.6 et la proportion de points totale est  $49/80=0.6125$ . La différence entre ces deux grandeurs est donc 0.0125

### 2.1.3.5. Discrédance enveloppée

#### Définition 2.7

La discrédance en  $L_2$  enveloppée d'une suite de  $n$  points  $x^1, \dots, x^n$  sur  $[0,1]^d$  est définie par :

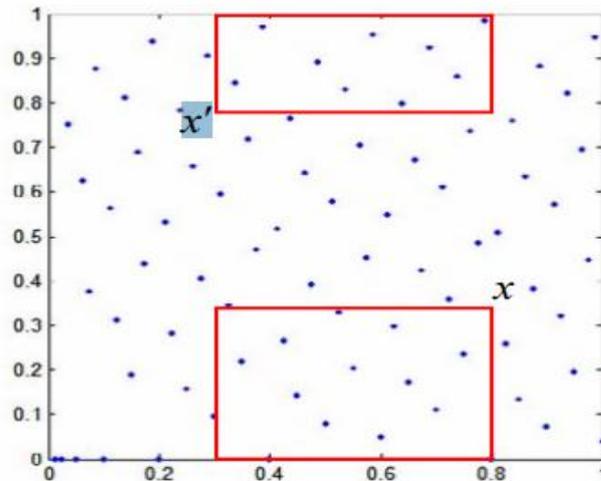
$$DL2_n^E(X)^2 = \sum_{u \neq 0} \int_{[0,1]^d} (D_n(J_u, X))^2 dx_u$$

Avec  $J_u$  la projection de  $J$  sur le sous-espace défini par les composantes  $u$ . Tel que :

$$J = \otimes_{j=1}^d K(x_j, x'_j) \text{ avec } K(x_j, x'_j) = \begin{cases} [x_j, x'_j] & \text{si } x_j \leq x'_j \\ [0, x'_j] \cup [x_j, 1] & \text{sinon} \end{cases}$$

La forme analytique s'écrit de la manière suivante :

$$DL2_n^S(X)^2 = \left[ -\left(\frac{4}{3}\right)^d + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^d \left( \frac{3}{2} - |x_j^i - x_j^k| (1 - |x_j^i - x_j^k|) \right) \right] \times n$$



**Figure 2.4:** Pour  $x = (0.8, 0.35)$  et  $x' = (0.3, 0.8)$ , le volume des 2 enveloppes est égal à 0.275, et la proportion de points totale est  $21/80=0.26$ . La différence obtenue entre ces deux grandeurs est donc 0.015

## 2.2. Critères de distance et plans optimaux

L'objectif des critères basés sur la distance entre les points est de quantifier la proximité entre une distribution de points donnée et celle d'une grille régulière. L'idée ici est de générer des plans dont les points sont proches d'une grille régulière mais pas exactement ceux d'une grille à cause des mauvais alignements que cela peut engendrer. Nous rappelle que nous recherchons des plans avec des distributions quasi-périodiques c'est à dire qui sont un bon compromis entre une grille régulière et une bonne uniformité (dictée par exemple avec le critère de discrédance).

On note  $dist(x^i, x^k)$  la distance euclidienne entre deux points  $x^i$  et  $x^k$  telle que :

$$dist(x^i, x^k) = [\sum_{j=1}^d (x_j^i - x_j^k)^2]^{1/2}$$

### 2.2.1 Mesure de recouvrement

#### Définition 2.8

Soit  $X = \{x^1, \dots, x^n\} \subset [0,1]^d$  une suite de  $n$  points en  $d$  dimensions. On définit la mesure de recouvrement  $cov$  par :

$$cov = \frac{1}{\delta} \left( \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\delta_i - \bar{\delta})^2 \right)^{1/2}$$

avec  $\delta_i = \min_{i \neq j} (\text{dis}(x^i, x^j))$  désignant la distance minimale entre le point  $x^i$  et les autres points de la suite et  $\bar{\delta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_i$  la moyenne des  $\delta_i$ .

Si les points sont sur une grille régulière, nous aurons  $\delta_1 = \delta_2 = \dots = \delta_n = \bar{\delta}$  donc  $\text{cov}=0$ . Ainsi, plus le cov est faible, et plus les points sont proches de ceux d'une grille régulière.

### 2.2.2. Le rapport de distances

#### Définition 2.9

Soit  $X = \{x^1, \dots, x^n\} \subset [0,1]^d$  une distribution de  $n$  points en  $d$  dimensions. On définit le rapport de distance par :

$$R = \frac{\max_{1 \dots n} \delta_i}{\min_{1 \dots n} \delta_i}$$

Avec  $\delta_i = \min_{k \neq i} \text{dis}(x^i, x^k)$ .

Pour une grille régulière  $R=1$ , Ainsi, plus  $R$  est proche de 1, et plus les points sont proches de ceux d'une grille régulière.

### 2.2.3. Distances Maximin et Minimax

Johnson *et al.* [20] ont introduit les distances Maximin et Minimax afin de construire des plans répondant à la question de remplissage de l'espace.

#### Définition 2.10 [21]

On définit les critères suivants au sens de la distance euclidienne par :

$$\text{MinDist} = \min_{x_i \in X} \min_{\substack{x_k \in X \\ k \neq i}} \text{dis}(x^i, x^k)$$

et

$$\text{AvgDist} = \frac{1}{n} \sum_{x_i \in X} \min_{\substack{x_k \in X \\ k \neq i}} \text{dis}(x^i, x^k)$$

Où  $X = \{x^1, \dots, x^n\}$  est le plan d'expériences à  $n$  points en  $d$  dimensions.

Maximiser le critère MinDist revient à considérer le critère de distance **Maximin**. Si la valeur de MinDist est grande, alors il n'y a aucun point qui soit proche au sens de cette grandeur.

Ainsi, plus les critères  $MinDist$  et  $AvgDist$  seront grands et plus cela traduira une distribution uniforme.

### Définition 2.11

On définit les critères suivants au sens de la distance euclidienne :

$$MaxDist(D, X) = \sup_{x_i \in D} \min_{x_k \in X} \text{dis}(x^i, x^k)$$

et

$$EDist(D, X) = \int_D \min_{x_k \in X} \text{dis}(x^i, x^k) d x^i$$

Où  $D$  est un ensemble de points du domaine expérimental et  $X = \{x^1, \dots, x^n\}$  le plan d'expériences à  $n$  points en dimension  $d$ .

### Remarque :

L'ensemble  $D$  considéré dans la définition est généralement  $D = [0, 1]^d$ . Ainsi, le supremum et l'intégrale ci-avant sont définies sur des ensembles infinis de points. Cependant, afin de calculer ces 2 expressions simplement, nous considérons un échantillonnage fini de points dans  $D$ , à savoir un plan factoriel ou un échantillonnage de ce type.

Minimiser le critère  $MaxDist$  revient à considérer le critère de distance  $Minimax$ . Le principe du critère  $Minimax$  est de mesurer la distance maximale entre un point du domaine expérimental n'appartenant pas au plan, qui varie, et les points du plan d'expériences. Afin de calculer les critères, on prend généralement pour les points de  $D$  une grille régulière. Aussi, en grande dimension il n'est plus envisageable de considérer ce critère sans prendre pour l'ensemble  $D$ , un plan aléatoire. Le critère  $EDist$  correspond au critère de dispersion introduit par Niederreiter [15].

### 2.3. Critère d'entropie [20]

Ce critère est différent de ceux présentés précédemment dans le sens où il ne permet pas à proprement parler d'étudier l'uniformité et/ou le remplissage de l'espace d'un plan en phase exploratoire. En effet, le calcul de l'entropie n'est bien souvent envisageable que si la distribution sous-jacente est connue, hypothèse que nous ne possédons généralement pas en phase exploratoire. Le souhait de définir la notion d'entropie, ici, est motivé par la présentation d'une méthode de plans optimaux au sens de ce critère (Voir le chapitre 3).

En effet, même si le critère n'est pas intrinsèque, les plans générés présentent de bonnes propriétés au regard du remplissage de l'espace. De plus, ce critère permet de prendre en compte le caractère anisotropique des variables qui lui peut être pressenti dès la phase exploratoire grâce à la connaissance du phénomène physique.

### 2.3.1. Définition de l'entropie

Historiquement, La notion d'entropie a été introduite officiellement en thermodynamique au milieu du  $XIX^{\text{ème}}$  siècle par Clausius pour compléter le principe de conservation de l'énergie. Boltzmann a été le premier à formaliser de manière probabiliste l'entropie qui fut utilisée par Shannon [22] dans le contexte de la théorie de l'information. Celui-là même a défini, dans un cadre probabiliste, une notion d'entropie, qui a des interprétations diverses en informatique, en thermodynamique et en probabilités, pourtant toutes liées par des intuitions communes. Shewry et Wynn [23] l'ont décrit comme étant la quantité d'information dans une expérience. Plus généralement, l'entropie mesure la quantité d'information contenue dans une distribution. Voilà dans le cadre probabiliste, la définition qui a été retenue.

#### Définition 2.12

L'entropie d'une variable aléatoire continue  $X$  à densité de probabilité  $f$  est définie par :

$$H(X) = - \int_{x \in \mathbb{R}} f(x) \ln(f(x)) dx = -E_X(\ln f(x))$$

Pour une étude mathématique simplifiée, on choisit le logarithme népérien, ceci n'ayant aucune influence sur les résultats énoncés car l'entropie est alors translatée d'une constante. Par ailleurs, l'entropie d'un vecteur aléatoire  $X = \{X_1, \dots, X_d\}$  à valeurs dans  $\mathbb{R}^d$  et de même densité  $f$  se définit de façon analogue à la dimension un :

$$H(X) = - \int_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) \ln(f(x)) d\mu(x)$$

Où  $f$  est la densité de probabilité et  $\mu$  la mesure de Lebesgue

**Remarque:** La valeur de l'entropie ne dépend pas des valeurs prises par  $X$ , mais uniquement de la densité de probabilité d'où l'impossibilité de la calculer directement à partir d'un plan d'expériences.

### 2.3.2 Entropie et quantité d'information

Shannon [22] décrit l'entropie comme une quantité d'information. Afin de comprendre cette notion, nous allons considérer une variable aléatoire discrète  $X$  dont la distribution est donnée par  $P(X = x_i) = p_i$ . L'entropie de  $X$  est alors définie par :

$$H(X) = - \sum_{i=1}^n p_i \ln(p_i)$$

D'une part, on remarque que si toutes les valeurs de  $X$  sont distribuées de manière régulière (c'est-à-dire  $p_1 = p_2 = \dots = p_n = \frac{1}{n}$ ), alors  $X$  est la plus imprévisible possible et  $H(X) = \ln(n)$  atteint sa valeur maximale. Cette propriété est connue comme le principe

d'entropie maximale. Si au contraire  $X$  prend une seule valeur avec la probabilité 1 alors  $X$  est complètement prévisible et l'entropie associée sera minimale avec  $H(X)=0$ .

D'autre part, on note que l'entropie doit augmenter avec le nombre d'états possibles ce qui signifie que plus il y a de choix et plus l'incertitude est grande. Cet exemple montre que la quantité d'information disponible sur la distribution peut se mesurer par  $I = -H$ . Shannon [22] montre que cette quantité d'information  $I$  apportée par un paramètre  $\theta$  est la seule fonction ayant la propriété d'additivité à une constante près et la propriété de continuité.

### 2.3.3 Gain d'une expérience

Lindley [24] utilise la notion de quantité d'information au sens de Shannon afin de mesurer l'information apportée par une expérience. Notons  $e$  une expérience d'un système aléatoire  $X$  de densité  $p(x|\theta)$  et  $\theta$  un paramètre. Généralement  $\theta$  est le paramètre du modèle statistique que nous souhaitons estimer. Selon le modèle choisi,  $\theta$  est défini différemment. Par exemple, en régression,  $\theta$  peut être le vecteur des paramètres de la régression, alors que si on considère un processus gaussien,  $\theta$  correspond au vecteur des différents paramètres (espérance, variance, corrélations). Si la distribution a priori de  $\theta$  est notée  $\pi(\theta)$  et si  $x$  est la donnée obtenue après l'expérience  $e$  alors la densité *a posteriori* de  $\theta$  est proportionnelle à :

$$p(x|\theta) = \alpha p(x|\theta)\pi(\theta)$$

L'information globale sur  $\theta$ , avant  $e$  est

$$I(\theta) = \int \pi(\theta) \log(\pi(\theta)) d\theta$$

et après  $e$ ,

$$I(\theta|x) = \int \pi(\theta|x) \log(\pi(\theta|x)) d\theta$$

L'accroissement d'information est donc donné par

$$I(\theta|x) - I(\theta)$$

Le gain d'information est défini en tenant compte de la loi conjointe de  $X$  et de  $\theta$ ,

$$g(e) = E[I(\theta|x) - I(\theta)] = E_x E_\theta \log \left( \frac{\pi(\theta|x)}{\pi(\theta)} \right).$$

### 2.3.4 Maximisation de l'entropie

Avec la définition ci-dessus, l'idée est de sélectionner une expérience  $e$  dans un ensemble  $E$  qui maximise le gain. Shewry et Wynn [23] soulignent plusieurs problèmes liés à cette stratégie et notamment sur la définition de l'ensemble  $E$ . Ils proposent de considérer  $E$  comme un ensemble fini d'expériences possibles et établissent ainsi le lien entre gain et l'entropie.

Considérons le domaine expérimental  $E$  comme discret et composé de  $N$  points aux quel son associe une réponse  $Y_i$ ,  $i=1, \dots, N$ . Partitionnons le domaine expérimental en deux

ensembles,  $D$  le plan d'expériences et  $\bar{D}$  les points restants. Alors, la décomposition classique de l'entropie s'écrit

$$H(Y_E) = H(Y_D) + E_{Y_D}[H(Y_{\bar{D}}|Y_D)].$$

L'espérance dans le membre de droite correspond à  $-g(e)$  dans le cas où  $Y_{\bar{D}}$  joue le rôle de  $\theta$  et  $e$  au plan  $D$ . On cherche donc à minimiser  $H(Y_E) - H(Y_D)$ . L'entropie totale du système,  $H(Y_E)$ , étant fixe, cela revient à maximiser l'entropie aux points du plan  $H(Y_D)$ .

Construire un plan à entropie maximale a donc pour but de maximiser la quantité d'information apportée par les expérimentations relativement à un paramètre  $\theta$ .

## CHAPITRE 3

### Différents plans d'expériences Numérique

Les plans d'expériences Numériques sont utilisés pour l'exploration du code ou la construction de méta-modèle. Nous présentons dans ce chapitre certains nombre de plans de type space filling les plus employés.

#### 3.1 Plans de Strauss

On considère le processus de Strauss avec interaction de type répulsion dans le domaine  $\Omega = [0,1]^d$  [20]. La loi  $\pi(\cdot)$  de ce processus conditionnellement au nombre  $n$  de points est donnée par :

$$\pi(x) = k \times \gamma^{s(x)}$$

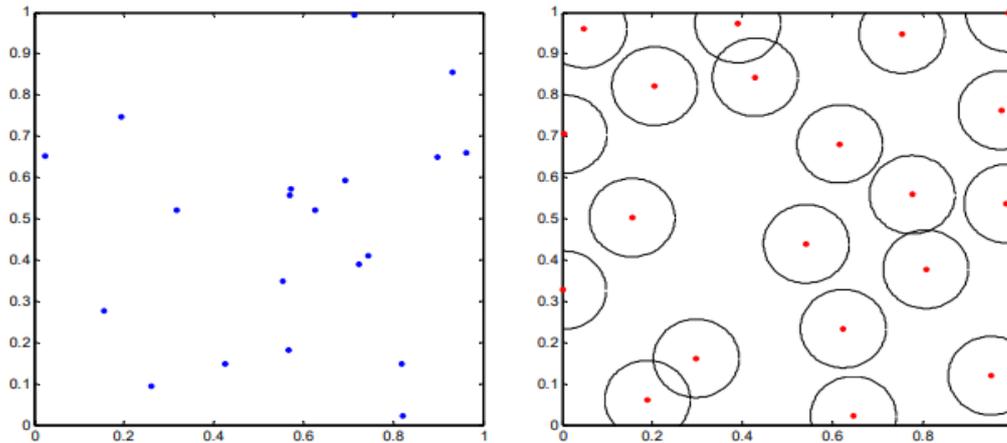
Où,  $0 < \gamma < 1$  est un coefficient de répulsion,  $k$  la constante de normalisation, et où la fonction  $s(x)$  assimilée à un potentiel global d'énergie est définie par :

$$s(x) = s(x^1, \dots, x^n) = \sum_{i < j} 1_{\|x^i - x^j\| \leq R}$$

Il s'agit simplement du nombre de paires d'expériences  $\{x^i, x^j\}$  telles que la distance entre  $x^i$  et  $x^j$  est inférieure ou égale à  $R$ . En termes de particules chargées, c'est aussi le nombre global d'interactions limité uniquement aux interactions de paires (interactions dites d'ordre 2). Chaque particule a une sphère d'influence de rayon  $\frac{R}{2}$ , l'interaction se produisant exactement lorsque 2 sphères quelconques se rencontrent.

##### 3.1.1 Etude des plans de Strauss

La figure de droite montre une distribution spatiale de  $n = 20$  points caractéristique d'un processus de Strauss obtenu après 1000 itérations. Dans ce cas-là, la distribution initiale est uniforme et les paramètres  $R$  et  $\gamma$  sont fixés respectivement à 0,19 et 0,1.



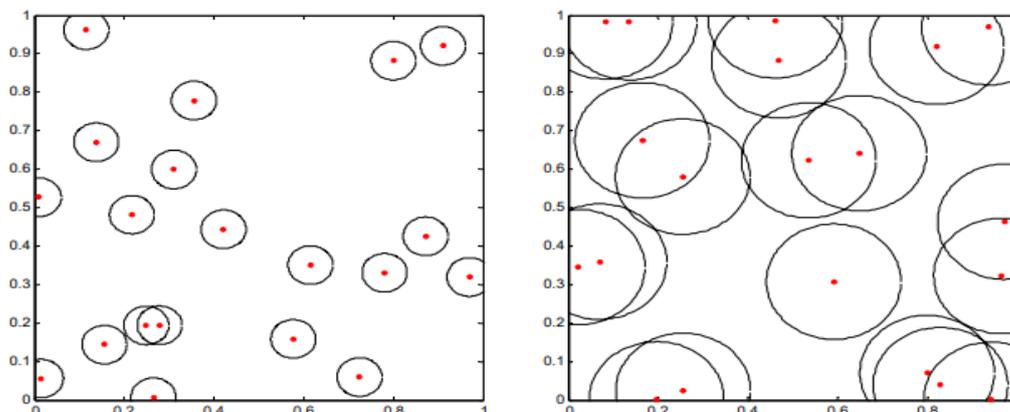
**Figure 3.1:** A gauche, un plan initial (aléatoire) de 20 points en dimension 2. A droite, le plan de Strauss obtenu à partir du plan de gauche avec la représentation des sphères de rayon  $R/2$

**Remarque**

Sur les figures, on matérialisera les interactions entre expériences en traçant les cercles de rayon  $R/2$ , l’intersection de 2 cercles correspondant précisément à une interaction.

**Influence des paramètres :** Les figures ci-dessous montrent l’influence du paramètre  $R$  sur la distribution finale. Le choix du rayon s’avère être important :

- Un rayon trop petit engendre une distribution sans interaction mais avec de nombreuses lacunes (distribution uniforme),
- Un rayon trop grand conduit à une distribution avec des agglomérats (clusters).



**Figure 3.2:** A gauche, un plan de Strauss à 20 points en dimension 2 de paramètres  $R=0.1$  et  $\gamma=0.1$ . A droite, un plan de Strauss de paramètres  $R=0.3$  et  $\gamma=0.1$ .

### 3.2. Plan de Strauss marqué [26]

L'idée principale de ces plans, est de considérer chaque expérience  $x_i$  comme un point ou particule défini sur  $[0,1]^d$  et chaque configuration  $x$  comme une matrice d'expériences où chaque point de cette configuration, sera caractérisé par une marque  $m_i$  définie sur l'espace de marques  $M$ . Le point avec sa marque forment un objet définie par  $(x_i, m_i)$ . On assimile ainsi les  $n$  objets (plan d'expériences) à la réalisation d'un processus ponctuel marqué  $X$ . Les processus de Strauss incorporent des potentiels d'interactions. Ces interactions sont assimilées à des propriétés de voisinage telles que définies par un champ de Markov au sens de Ripley-Kelly) [25]. Le potentiel d'interaction le plus utilisé est l'interaction entre paires d'objets. Ces processus objets sont importants pour la modélisation des phénomènes répulsifs. La densité de probabilité d'un processus ponctuel marqué de Strauss pour une configuration  $x$  de points est donnée par :

$$\pi(x) = \alpha \beta^{n(x)} \gamma^{s(x)}$$

Avec,

- $\alpha$  est la constante de normalisation,
- $0 < \gamma < 1$  est un coefficient d'interaction,
- $\beta > 0$  est la densité du processus,
- $s(x) = \sum_{i < j} 1_{\{x_i \sim x_j\}}$  le nombre de paires de voisins par rapport à la relation  $\sim$ . Il s'agit simplement du nombre de paires d'expériences  $(x_i, x_j)$  telles que la distance entre  $x_i$  et  $x_j$  est inférieure ou égale à  $R$ . Par conséquent  $s(x) = \sum_{i < j} 1_{\|x_i - x_j\| \leq R}$ .
- $n(x) = \sum_{i=1}^M n(x \times \{i\})$ ,  $n(x \times \{i\})$  représente le nombre de points dans la configuration  $x$  ayant la marque  $i$ .

#### 3.2.1 Choix des marques

Dans ces plans les points sont caractérisés par une seule marque qui sera la valeur de l'erreur de prédiction  $\hat{y}_{x_i}$  au point  $x_i$ . Rappelons que cette valeur est définie par:

$$\text{var}(\hat{y}_{x_i}) = f(x_i)^T (X^T X)^{-1} f(x_i)$$

Avec,

- $X = [f(x_1), \dots, f(x_n)]^T$  est la matrice de calcul, qui dépend des points expérimentaux choisis et du modèle postulé,

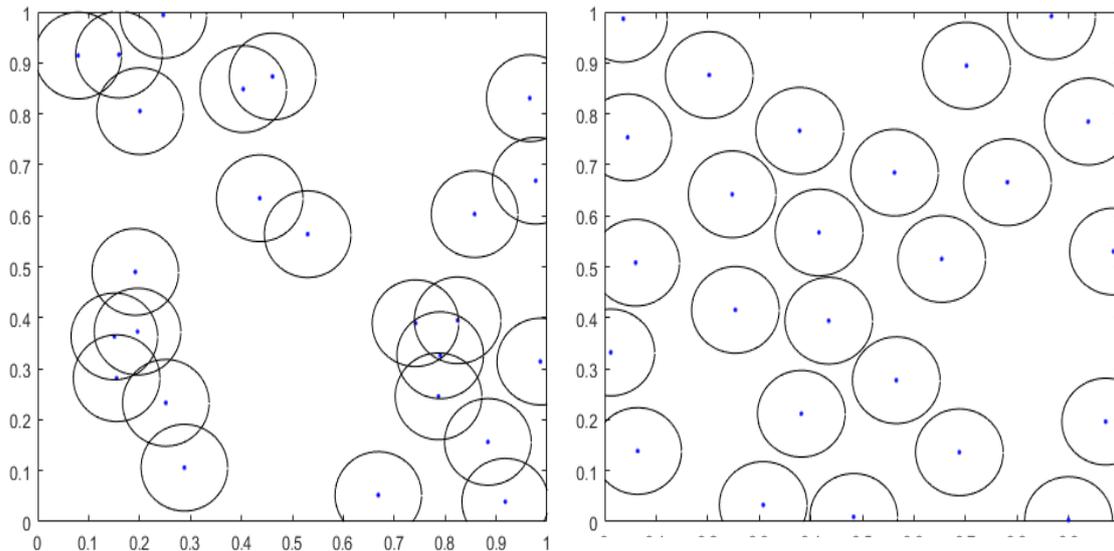
- $(X^T X)^{-1}$  la matrice de dispersion,
- $f(x_i)$  est le vecteur modélisé du point  $x_i$

Dans ce cas on définit  $n(x)$  pour une configuration  $x$  par:

$$n(x) = \sum_{i=1}^n 1_{var(\hat{y}_{x_i}) \leq \varepsilon}$$

Où  $\varepsilon$  est une précision fixée.

Pour 1000 itérations la figure 3.3, montre la convergence vers une configuration qui caractérise la réalisation d'un processus ponctuel marqué de Strauss à partir d'une configuration initiale de 25 points choisis uniformément sur  $[0,1]^2$ . Dans ce cas, le paramètre d'interaction  $\gamma$  est fixé à 0.001, l'intensité  $\beta$  à 2.5 et la distance  $R$  à 0.17.



**Figure 3.3 :** A gauche, une configuration initiale aléatoire de 25 points et à droite, une configuration finale pour  $\beta = 2.5$ ,  $\gamma = 0.001$  et  $R = 0.17$

### Remarques

- Sur la figure 3.3, on matérialisera les interactions entre expériences en traçant les cercles de rayon  $R/2$ , l'intersection de deux cercles correspond précisément à une interaction.
- Il est important de bien fixer le paramètre de répulsion  $\gamma$  qui est situé entre 0 et 1, nous avons constaté selon plusieurs exemples qu'il est facile de générer une distribution répondant au critère de remplissage de l'espace avec un paramètre de répulsion faible.

- Pour le choix du rayon  $R$ , un rayon trop petit engendre une distribution sans interaction. Par contre, un rayon trop grand conduit à une distribution avec des agglomérats.

### 3.3. Les suites à faible discrédance

Les suites à faible discrédance ont l'objectif de bien remplir l'espace expérimental. Ces suites des points sont initialement utilisées pour remplacer les suites aléatoires dans la méthode de Monte-carlo, d'où la dénomination de méthodes de quasi Monte-carlo. Ces suites comprennent les suites de Van Der Corput [27] de Halton[28], de Sobol [29], de Hammersley [30] et les suites de Faure [31].

#### 3.3.1 Les suites de Van der Corput

Les suites de van der Corput sont des suites à discrédance faible dans l'intervalle unité  $I=[0,1]$ . Tout entier  $b \geq 2$  (un tel nombre est appelé une *base*) peut être utilisé pour représenter n'importe quel  $i \in N$  de manière unique à l'aide d'une suite de coefficients de  $\mathbb{Z}_b = \{0,1, \dots, b-1\}$  :

$$i = \sum_{k=1}^{\infty} C_k(i) b^{k-1} \text{ avec } C_k(i) \in \mathbb{Z}_b \text{ pour tout } k \in N^*$$

On remarque que les coefficients  $C_k(i)$  sont nuls pour tout  $k > 1 + \lfloor \log_b i \rfloor$  si bien que la somme ci-dessus est en fait finie. On se sert de cette représentation pour définir la fonction radicale inverse  $\varphi_b$ :

$$\varphi_b(i) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k(i) b^{-k}, \text{ pour tout } i \in N$$

On s'aperçoit facilement que  $\varphi_b(i) \in [0,1]$  pour tout  $i \in N$

#### Définition 3.1

soit un entier  $b \geq 2$ , La suite  $VDC_b = \{x^0, x^1, \dots\} \in [0,1[$  donnée par:

$$x^i = \varphi_b(i)$$

est appelée suite de VanDer Corput en base  $b$ .

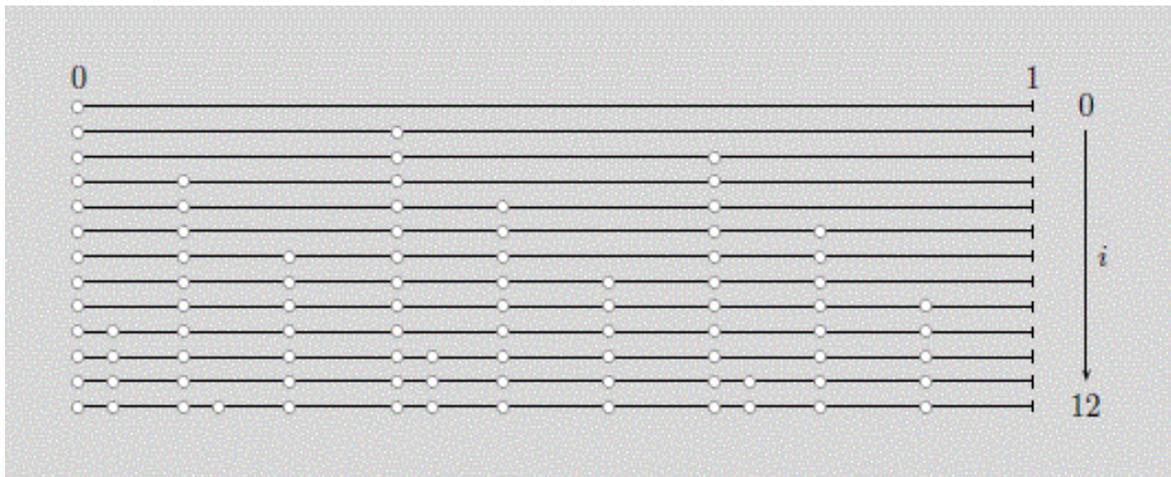


Figure 3.4 : Les 13 premiers points de la suite de Van der Corput en base 3.

### 3.3.2. Les suite de Halton

Les suites de Halton (voir figure 3.5) sont des généralisations en dimension quelconque  $k \geq 1$  des suites de Van der Corput. L'idée consiste à considérer la fonction radicale inverse dans différentes bases simultanément. Halton a démontré que ses suites sont à discrédance faible.

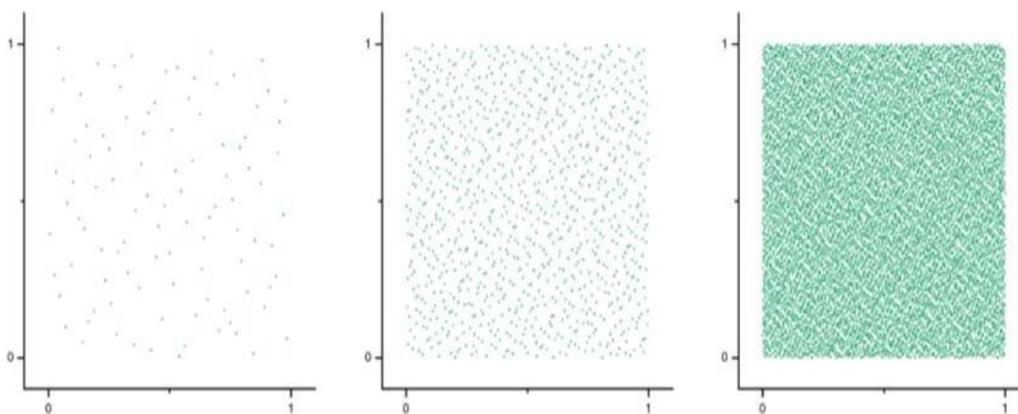


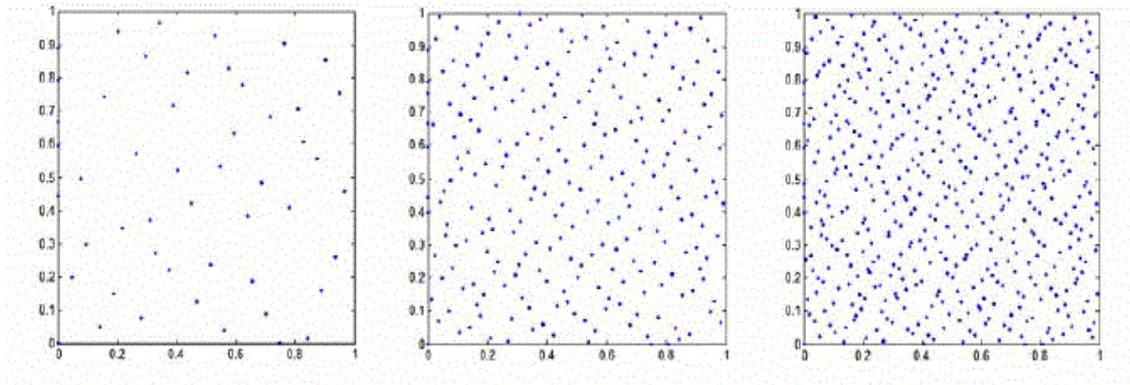
Figure 3.5 : Les 100, 1000 et 10000 premiers points de la suite de Halton en bases 2 et 3.

#### Définition 3.2

soient  $b_1, \dots, b_s$  des entiers positifs premiers entre eux deux à deux, la suite  $H_{b_1, \dots, b_s} = \{x^0, x^1, \dots\}$  donnée par  $x^i = (\varphi_{b_1}(i), \dots, \varphi_{b_s}(i)) \in I$ , est appelée suite de Halton en base  $b_1, \dots, b_s$ .

Ainsi, pour tout  $j \in \{1, \dots, s\}$ , la suite constituée des composantes  $\{x_j^0, x_j^1, \dots\}$  des points d'une suite de Halton  $H_{b_1, \dots, b_s} = \{x^0, x^1, \dots\}$  n'est autre que la suite de Van der Corput en base  $b_j$ .

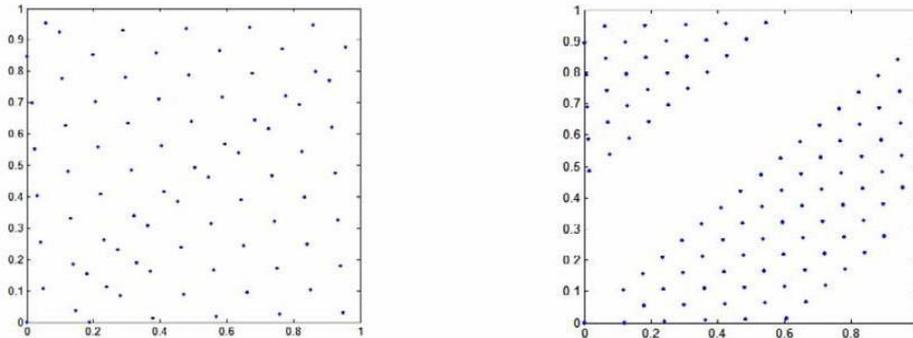
Ces suites ont l'avantage d'être faciles à implémenter et d'avoir un temps d'exécution très faible. Pour passer de  $x^i = \varphi_{b_1}(i)$  à  $x^{i+1} = \varphi_{b_1}(i+1)$  il suffit d'effectuer une addition, en base  $b$  à droite de  $\frac{1}{b}$ .



**Figure 3.6 :** (De la gauche vers la droite) Les 50, 250 et 500 premiers points d'une suite de Halton en bases 2 et 3

Malgré l'uniformité de la distribution dans le cube unité (Figure 3.6), ces suites présentent des pathologies en dimension élevée. En effet, lorsque l'on projette les points d'une telle suite dans le carré unité, l'allure de la structure est parfois décevante (Figure 3.7).

Nous pouvons observer des diagonales décalées à chaque itération, qui laissent place à de nombreuses zones lacunaires dans le carré unité. Ce phénomène résulte de la régularité des sous-suites de longueur  $b$  des suites de Van der Corput. A noter cependant que cette pathologie ne se manifeste pas pour n'importe quelle paire de bases. En général, il est plus fréquent d'observer ce phénomène en dimension élevée et lorsque la différence entre les deux bases est très petite par rapport aux bases utilisées.



**Figure 3.7 :** Des mauvaises projections en 2D. A gauche : les 80 premiers points d'une suite de Halton en bases 11 et 13. A droite : les 100 premiers points d'une suite de Halton en bases 17 et 19

### 3.3.3 Les suites de Hammersley

Une suite de Hammersley en dimension  $d$  est construite à partir d'un terme dépendant du nombre de points et d'une suite de Halton en dimension 1.

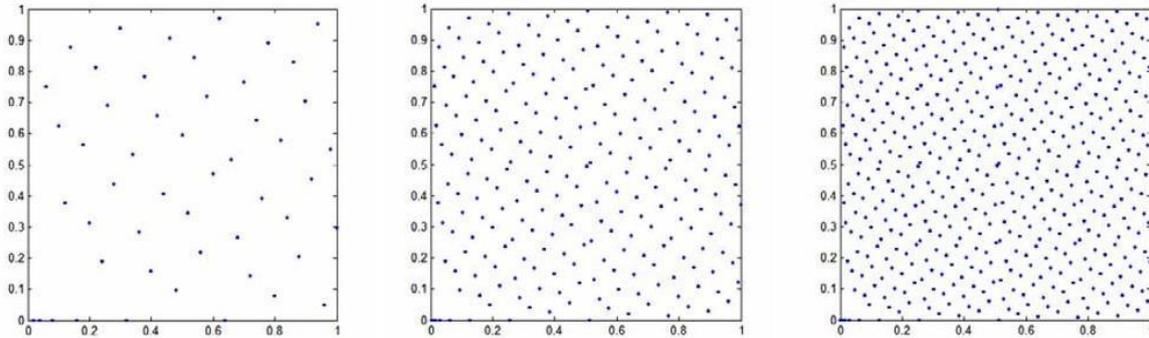
#### Définition 3.3

soient  $b_1, \dots, b_{d-1}$  des entiers positifs premiers entre eux deux à deux et  $n \in \mathbb{N}$ . la séquence  $H_{b_1, \dots, b_{d-1}}^n = \{x^0, \dots, x^{n-1}\}$  donnée par :

$$x^i = \left( \frac{i}{n}, \varphi_{b_1}(i), \dots, \varphi_{b_{d-1}}(i) \right) \in I^d$$

est appelée séquence de Hammersley en bases  $b_1, \dots, b_{d-1}$ .

Ces suites étant construites à partir de suites de Halton, elles présentent le même phénomène de diagonales successives. De plus, il est impossible de rajouter des points supplémentaires à ces suites sans pour autant perturber la discrèpance. Dans le cas où le nombre de points à générer n'est pas connu à l'avance, il est déconseillé d'utiliser une suite de Hammersley. Aussi, ces suites ont perdu l'aspect itératif des suites de Halton qui permettait de rajouter des points facilement.



**Figure 3.8 :**(De la gauche vers la droite) Les 50, 250 et 500 premiers points d’une suite de Hammersley en base 2

### 3.3.4 Les suites de Faure

Les suites de Faure sont définies à partir de la fonction radicale inverse,  $\phi_b$ , et une matrice génératrice de Pascal  $C = (c_{kl})$  donnée par

$$\binom{l-1}{k-1} = \begin{cases} \frac{(l-1)!}{(k-1)!(l-k)!} & \text{si } k \leq l \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \forall l, k \in \mathbb{N}^*$$

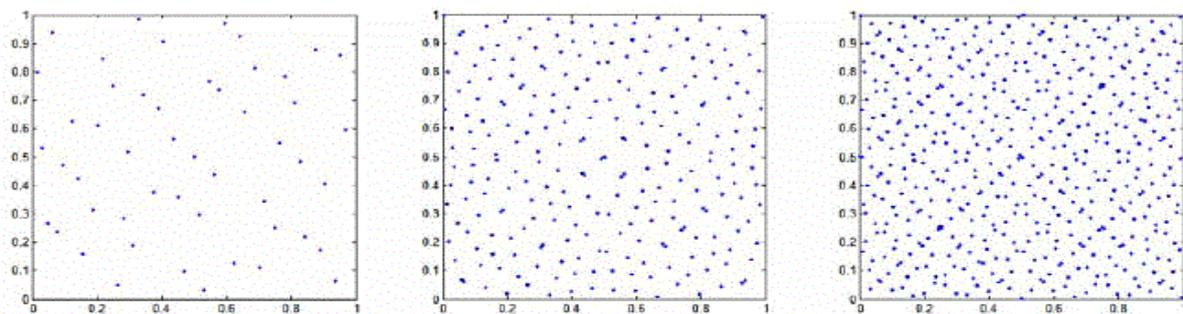
#### Définition 3.4

Soit  $b \geq d$  un nombre premier. La suite de Faure  $F = \{x^0, \dots, x^{n-1}\}$  en dimension  $d$  est définie comme suit

$$x_j^i = \phi_b(C^{j-1}i)$$

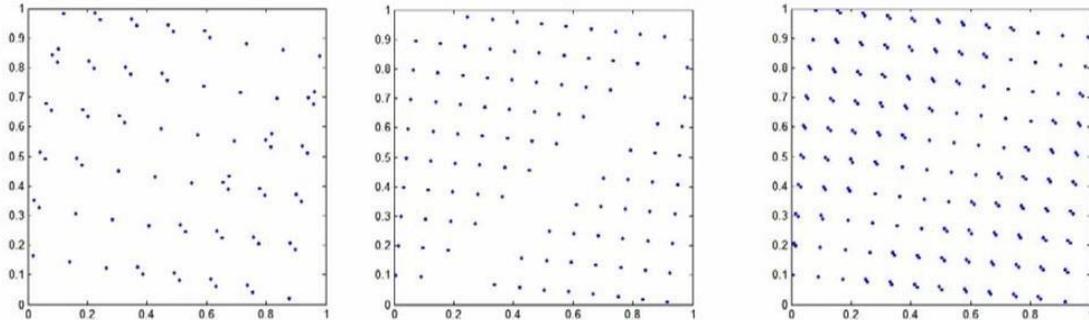
Où  $C^{j-1} = \binom{l-1}{k-1} (j-1) \text{ mod } b$ , est la matrice génératrice de la  $j$ -ième dimension d’une suite Faure en dimension  $d$ .

Ces suites sont considérées comme meilleures que celles de Halton et de Sobol. La figure ci-dessous montre une distribution de 50, 250 et 500 points d’une suite de Faure pour deux dimensions.



**Figure 3.9 :** les 50, 250 et 500 premiers points d’une suite de Faure. Les suites de Faure permettent de générer une distribution uniforme localement (Figure 3.9)

Cependant, les projections sur le carré unitaire des points de l'hyper cube sont échantillonnées en bandes (Figure 3.10). Similairement aux suites de Sobol, nous pouvons remarquer que les nouveaux points sont placés dans le voisinage de ceux produits précédemment.

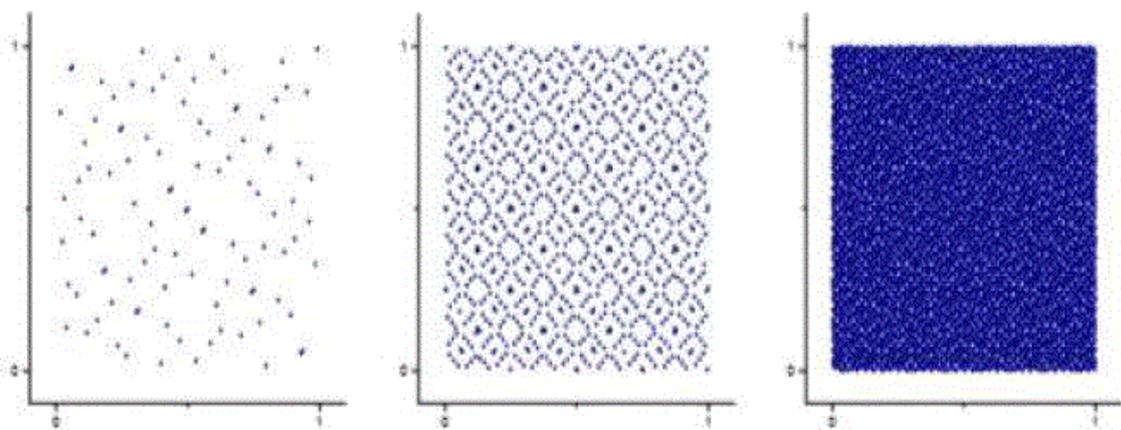


**Figure 3.10 :** Les 80 premiers points d'une suite de Faure en dimension 6, les 100 et 200 premiers points d'une suite de Faure en dimension 8, projetés sur le carré unitaire défini par les deux dernières dimensions.

### 3.3.5 Les suites de Sobol

Ces suites permettent de répartir les différents points dans l'espace en minimisant la distance entre chaque observation. Leur construction est assez compliquée, et elles s'obtiennent par des récurrences linéaires à partir de polynômes primitifs sur le corps  $Z_2 = \{0,1\}$ .

Elles sont nommées quasi-aléatoires car on peut toujours trouver les coordonnées du deuxième point à partir du premier et ainsi de suite.



**Figure 3.11 :** les 100, 1000 et 10000 premiers points d'une suite de Sobol

### 3.4. Plans à entropie maximale

La définition générale des plans à entropie maximale nécessite d'avoir la réponse aux points du plan d'expériences. Ce qui ne fait pas a priori de l'entropie un critère intrinsèque.

Shewry et Wynn [23] appliquent cette définition de façon à ne pas avoir à utiliser les réponses aux points du plan d'expériences pour construire celui-ci.

La méthode qui suit propose un remplissage de l'espace, en distribuant des points selon une matrice de corrélation spatiale. Dans le cas particulier d'un processus gaussien centré  $f$ .

Shewry et Wynn [23] démontrent que  $H(Y_X)$  dépend simplement de  $\ln(\det(C(X)))$ , où  $C(X)$  dénote la matrice de covariance. Ainsi, générer un plan à entropie maximale revient à, sous l'hypothèse de stationnarité, maximiser le déterminant de la matrice de corrélation.

**Remarque :** Si le modèle est linéaire, alors le déterminant s'exprime en fonction de la matrice du plan. Aussi, le plan obtenu à l'aide d'une méthode classique telle qu'un algorithme d'échange est, dans ce cas, D-optimal.

Cette équivalence existe uniquement si les réponses aux points suivent une loi normale multidimensionnelle, mais sans aucune condition sur la structure de covariance. Soit  $X=(X^1, \dots, X^n)^t$  un vecteur de variables aléatoires, la matrice de variance – covariance de  $X$  s'écrit:

$$C(X)=\begin{pmatrix} \sigma_1^2 & cov(X^1, X^2) & cov(X^1, X^n) \\ & \sigma_2^2 & \\ & & \sigma_n^2 \end{pmatrix}$$

où  $\sigma_i$  est l'écart-type de  $X^i$  et  $cov(X^i, X^j) = \sigma_i \sigma_j \rho_{ij}$  est la covariance de  $X^i$  et  $X^j$ .

Si les variables  $X^i$  sont réduites,  $C(X)$  s'identifie avec la matrice de corrélation :

$$C(X)=\sigma^2 \begin{pmatrix} 1 & & \rho_{ij} \\ & \dots & \\ \rho_{ij} & & 1 \end{pmatrix}$$

Définissons à présent une matrice de corrélation spatiale  $C=[\rho_{ij}]$  avec :

$$\begin{cases} \rho_{ii} = 1 \\ \rho_{ij} = 1 - \gamma(h_{ij}) \\ \rho_{ij} = 0 \text{ si } h_{ij} > a \end{cases}$$

On reconnaît en  $\gamma(h)$  le variogramme où  $h_{ij}$  est la distance entre les points  $i$  et  $j$  et  $a$  la portée du dit variogramme.

On peut alors calculer pour  $X=(X^1, \dots, X^n)^t$ , vecteur de points dans un espace à  $d$  dimensions, une matrice de corrélation spatiale par :

$$C(X) = \begin{pmatrix} 1 & & \rho_{ij} \\ & \dots & \\ \rho_{ij} & & 1 \end{pmatrix}$$

Où  $\rho_{ij}$  est une fonction de la distance entre les points  $i$  et  $j$ , calculée selon un modèle de corrélation spatiale que l'on attribue a priori à l'espace étudié.

Le déterminant de  $C(X)$  est maximum pour  $\rho_{ij} = 0$ , c'est-à-dire lorsque les points pris deux à deux sont éloignés l'un de l'autre d'une distance supérieure à la portée  $a$  de la fonction de corrélation spatiale.

### 3.5 Hyper cubes latins (LHS)

La méthode d'échantillonnage des hyper cubes latins [32] a été présentée pour évaluer numériquement les intégrales multiples par manque de duplication d'informations grâce à une bonne distribution et pour sa facilité d'utilisation et de construction.

Il s'agit d'une forme particulière d'échantillonnage stratifié où l'on s'assure que la segmentation protège les sous-espaces de traitement, et que chaque sous-espace est échantillonné de manière homogène. Plus précisément, chaque période de temps pour chacune des variables est divisée en périodes de temps de même probabilité. La valeur est déterminée uniformément à partir de chaque période.

La Figure 3.12 illustre un échantillonnage par hyper cube latin en dimension 2. Sur cette figure, on voit que l'intervalle de chaque variable a été découpé en  $n = 10$  sous-intervalles de même taille. Pour chaque variable et dans chaque sous-intervalle un point a été généré selon une loi uniforme.

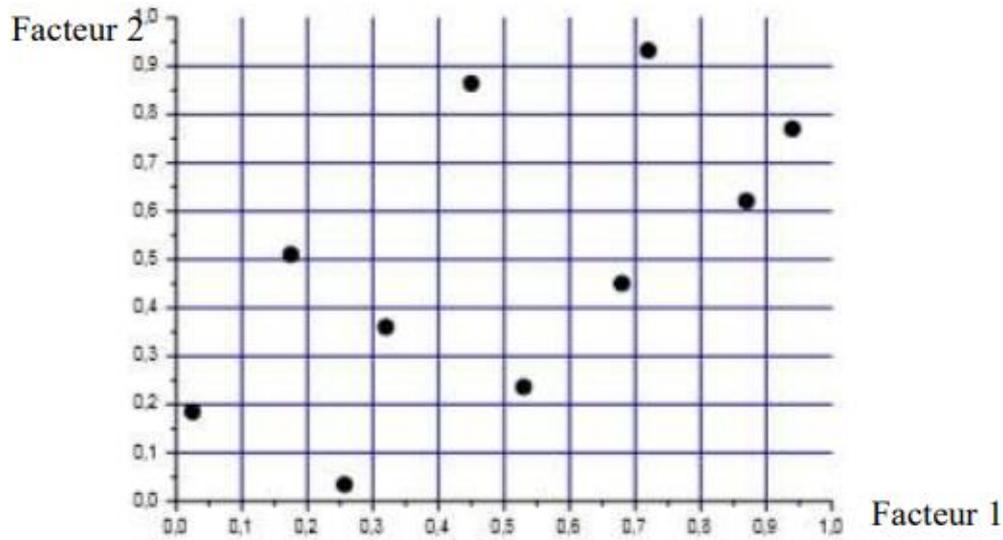


Figure 3.12: 10 points issus d'un échantillonnage par hyper cube latin en dimension 2.

**Définition 3.5**

un hyper cube latin à  $n$  points et  $d$  variables est une matrice  $n \times d$  dont chacune des colonnes est une permutation de l'ensemble  $\{1, 2, \dots, n\}$ , on le note  $LHD(n, d)$ .

Ainsi, pour un plan LHS à  $n$  observations, chaque dimension de l'espace sera découpée en  $N$  intervalles de la façon suivante  $\left\{ \left[0, \frac{1}{n}\right], \left[\frac{1}{n}, \frac{2}{n}\right], \dots, \left[\frac{n-1}{n}, 1\right] \right\}$ , et un point par intervalle sera choisi ( et ce pour chaque dimension).

Par exemple, sur  $R^2$ , un LHS à 5 points et un LHS à 10 points peuvent donner les plans suivant :

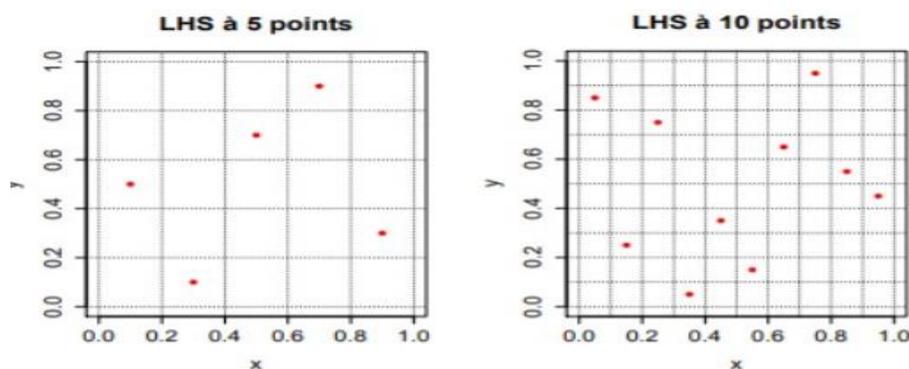


Figure 3.13 : plans LHS avec 5 et 10 points

## CHAPITRE 4

### ETUDE COMPARATIVE DES PLANS NUMERIQUE A L'AIDE DES CRITERES D'OPTIMALITES

Pour juger la qualité d'un plan d'expériences numérique, il est important d'utiliser des critères usuels permettant d'assurer un bon remplissage de l'espace et une bonne distribution uniforme. L'objectif de ce chapitre, est de calculer les valeurs de ces critères présentés dans le deuxième chapitre, sur certains nombre de plans usuellement utilisés en expériences numériques. Cette comparaison a été réalisée en développant un programme dans le logiciel Matlab présenté en annexe dans ce manuscrit. Pour cela, nous utilisons trois types de critères :

- Critère de distance
- Critère de recouvrement
- Critère de discrédance

Afin de comparer les plans en dimension supérieure à deux, nous rappelons que :

- Le critère de distance consiste à maximiser la distance minimale entre deux points du plan. Plus la valeur de ce critère est grande, plus les points seront éloignés les uns des autres.
- Le critère de recouvrement (Cov) permet de mesurer l'écart entre les points du plan et ceux d'une grille régulière. Ce critère est nul pour une grille régulière. Le bute est donc de minimiser le recouvrement pour se rapprocher d'une grille régulière, et ainsi assurer le remplissage de l'espace.
- Critère de discrédance : la discrédance permet de mesurer l'écart entre la fonction de répartition empirique des points du plan et celle de la loi uniforme. Plus la discrédance est faible, plus les points sont répartis uniformément. Il existe différentes mesures de discrédance. Nous retenons la discrédance en norme  $L_2$  .

Les plans confrontés dans ce chapitre sont généralement les suivants :

- Plans aléatoires (RD)
- Hyper cubes latins (LHS)
- Plans maximin LHS (mLHS)

- Plans à entropie maximal (Dmax)
- Plans de Strauss (SD)
- Plans Strauss Marqué (MSD)
- Les suites à faible discrédance (Suite de Halton, Suite de Sobol, suite de Faure)

#### 4.1 Résultats et discussions

Dans cette partie, nous présentons les tables regroupant les résultats d'implémentation des différents algorithmes pour les différents plans considérés. Ces tables sont divisées selon le nombre de points et la dimension de l'espace expérimental.

##### 4.1.1 Résultat pour 10 points et 2 dimensions

Nous avons représenté sur le tableau ci-dessous les critères les plus significatifs, on y trouve : la discrédance en norme  $L_2$  ainsi que les critères MinDist et de recouvrement.

**Tableau 4.1** : Critères de discrédance en norme  $L_2$ , critères de distance, critère de recouvrement en deux dimensions.

	Discrédance	Recouvrement	Distance
<b>Plans aléatoire</b>	1,12E-02	2,18E-01	0,09633974
<b>LHS</b>	1,06E-02	2,42E-01	0,1361711
<b>Sobol</b>	0.005753	0.1362939	0,1623798
<b>mLHS</b>	1,10E-02	0.584370	0,17377713
<b>Halton</b>	0.011661	0.2810232	0,1719613
<b>Dmax</b>	3,54E-03	0.240456	0,49792172
<b>Strauss</b>	2,78E-03	2,80E-01	0,47940088
<b>Strauss Marqué</b>	0.004696	2,37E-01	0.501612

Cinquante plans de chaque type de plans sera générés afin de donner un sens aux résultats. Les figures ci-dessous représentent les boxplots obtenus à la suite de cette étude.

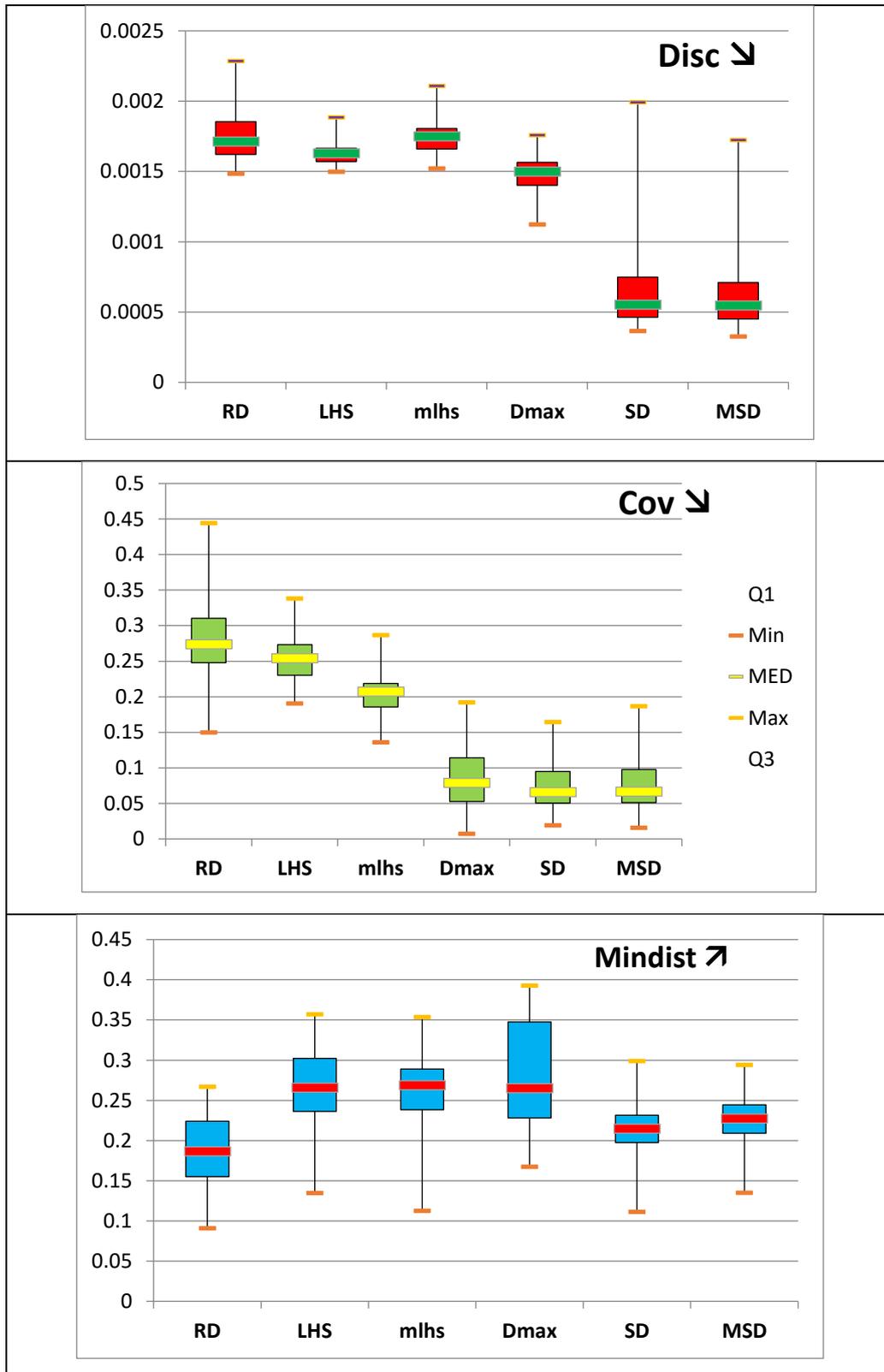


Figure 4.1: Boxplots des critères de qualité calculés sur les 50 plans à 10 points en dimension

On rappelle avant l'interprétation des boxplots que :

- Plus la discrédance est faible et plus les points sont répartis uniformément,
- Plus la mesure de recouvrement est proche de 0 et plus les points se rapprochent d'une grille régulière,
- Plus le critère MinDist est grand et plus les points seront éloignés les uns des autres.

Selon les résultats présentés dans les plots-box ci-dessus, les plans de Strauss Marqué offrent certaines améliorations en ce qui concerne les différents critères considérés dans cette étude de comparaison. Cependant, quelques remarques méritent d'être notifiées concernant ces plots box. Les plans à entropie maximale et les plans de Strauss ont de très faibles dicrédances semblables à celles des suites à faible discrédance.

Les plans à entropie maximale sont meilleurs que les hyper cubes latins et les hyper cubes latins concernant le critère de distance. Les plans ayant de mauvais résultats dans les différentes catégories de critères sont sans étonnement les plans aléatoires.

#### 4.1.2 Résultat pour 50 points et 7 dimensions

Nous avons représenté sur le tableau ci-dessous les critères les plus significatifs, on y trouve : la discrédance en norme  $L_2$  ainsi que les critères MinDist et de recouvrement pour sept dimensions.

**Tableau 4.2 :** Critères de discrédance en norme  $L_2$  , critères de distance, critère de recouvrement en 7 dimensions.

	<b>Discrédance</b>	<b>Recouvrement</b>	<b>Distance</b>
<b>Plans aléatoire</b>	2,46E-04	0,21327169	0,29388667
<b>LHS</b>	2,60E-04	0,19847517	0,31697747
<b>Sobol</b>	7,42E-05	0,1446086	0,3213588
<b>mLHS</b>	2,60E-04	0,17748838	0,36347507
<b>Halton</b>	1,25E-04	0,1577032	0,3758554
<b>Dmax</b>	1,86E-04	0,06925627	0,50763251
<b>Strauss</b>	1,51E-04	0,07542196	0,49106948
<b>Strauss Marqué</b>	1,50E-04	0,11810243	0,52108447

Quatre-vingt plans de chaque type de plans sera générés afin de donner un sens aux résultats. Les figures ci-dessous représentent les boxplots obtenus à la suite de cette étude.

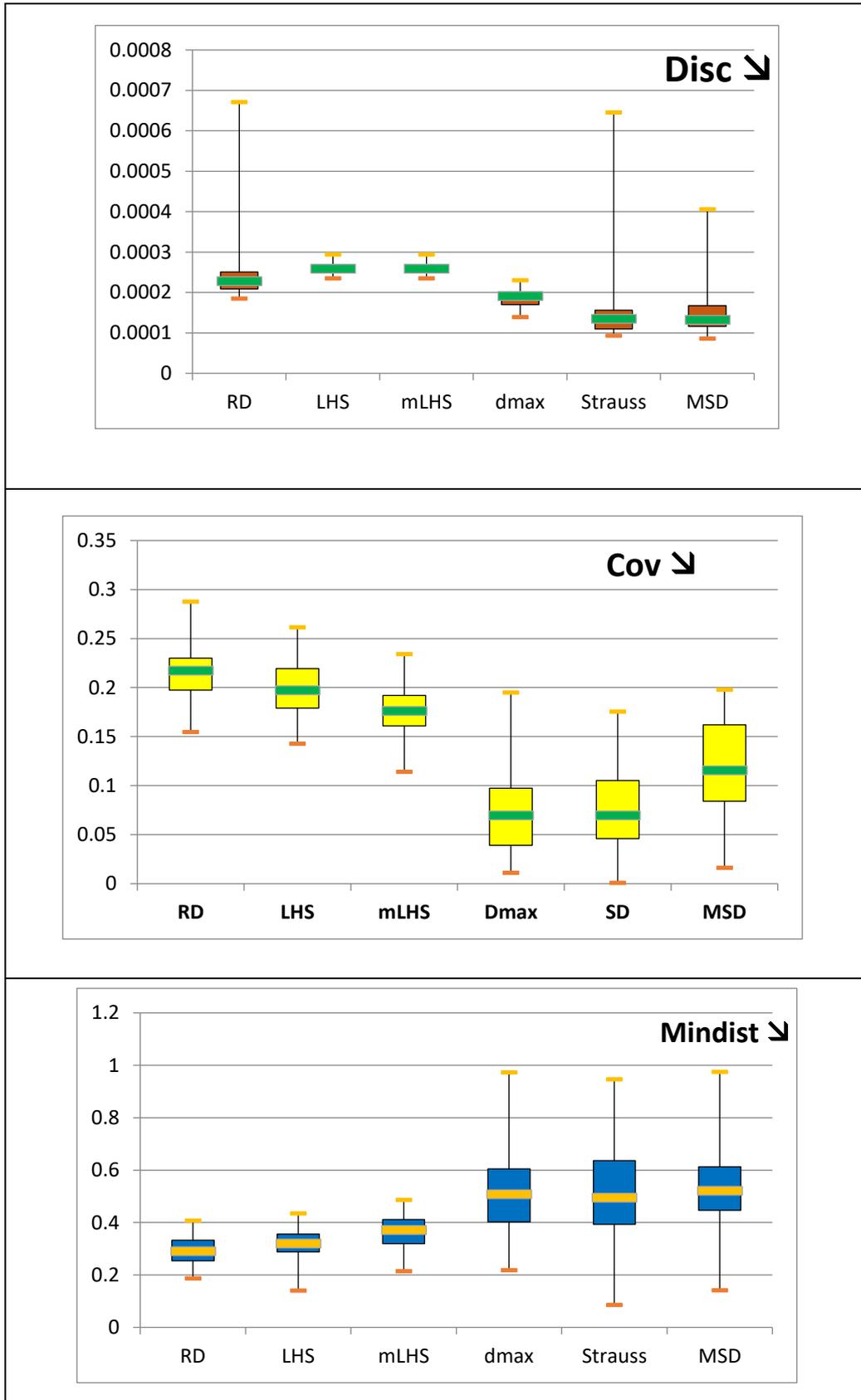


Figure 4.2: Boxplots des critères de qualité calculés sur les 80 plans à 50 points en dimension

Les résultats sont quelque peu différents de ceux obtenus en dimension 5. Par exemple, on remarque que les hyper cubes latins usuels et améliorés au regard du critère maximin (mLHs) sont de qualité semblable à celle obtenue avec des plans aléatoires que ce soit au niveau des critères de distance ou de discrédance. Les plans à entropie maximale et les plans de Strauss et Strauss marqué ont de très faibles dicrédances semblables à celles des suites à faible discrédance. Les plans à faible discrédance ne semblent pas être de bonne qualité en grande dimension sauf excepté bien évidemment vis-à-vis de la discrédanc. Ceci s'explique par le fait que l'algorithme d'échange privilégie beaucoup trop le critère que l'on souhaite optimiser. Une solution qui pourrait être de coupler ce critère à un critère de distance, ce qui amènerait à des plans de qualités médiocres au regard des 2 critères choisis.

#### 4.1.3 Résultat pour 50 points et 10 dimensions

Nous avons représenté sur le tableau ci-dessous le critère de la discrédance en norme  $L_2$  ainsi que le critère MinDist et de recouvrement pour dix dimensions.

**Tableau 4.3** : Critères de discrédance en norme  $L_2$  , critères de distance, critère de recouvrement en 10 dimensions.

	Discrédance	Recouvrement	Distance
<b>Plans aléatoire</b>	2,89573E-05	0,1677978	0,4303463
<b>LHS</b>	1,4109E-05	0,1564890	0,45180744
<b>Sobol</b>	7,4285E-06	0,110397	0,5595626
<b>Mlh</b>	2,2859E-05	0,15709116	0,46735785
<b>Halton</b>	5,6013E-05	0,1349754	0,507455
<b>Dmax</b>	8,5838E-06	0,07213461	0,5354068
<b>Strauss</b>	9,9013E-06	0,07493931	0,510194
<b>Strauss Marqué</b>	9,5741E-06	0,07278162	0,47805386

La figure ci-dessous présente les résultats obtenus pour quatre-vingt plans pour chaque type listé précédemment.

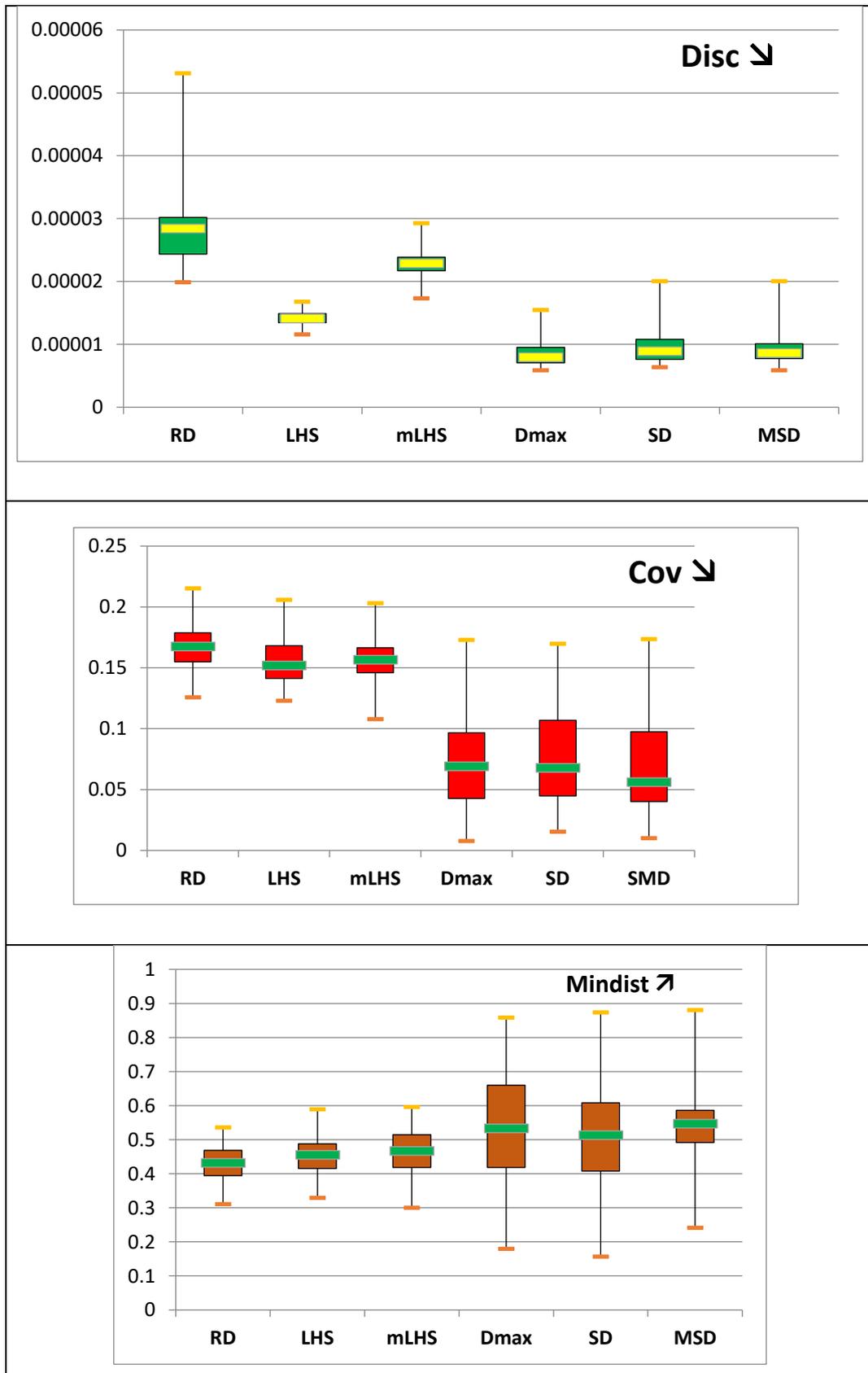


Figure 4.3: Boxplots des critères de qualité calculés sur les 80 plans à 50 points en dimension

Quelques remarques méritent d'être notifiées concernant la figure ci-dessus. Les hyper cubes latins maxmin (mLHS) sont meilleurs que les hyper cubes latins usuels concernant les critères de distance. En dimension 10, ils semblent être un bon compromis entre la bonne répartition des points dans l'espace et en projection sur les marges. Les plans de Strauss marqué sont de meilleure qualité que ces derniers notamment au regard des critères de distance. Les plans à entropie maximale, par leur très bonne discrétion et une mesure de recouvrement moyenne, semblent différents des plans de Strauss. Les critères permettent de dire que les points de ces plans sont tous éloignés les uns des autres mais qu'il n'y a pas un recouvrement de l'espace optimal. Ce qui conforte la remarque de Johnson et al [13] sur le fait que ces plans auraient tendance à mettre les points sur les bords du domaine.

## CONCLUSION

Le fait de considérer n'importe quel système comme une boîte noire, c'est-à-dire qu'on ne s'intéresse qu'aux entrées (facteurs) et aux sorties (réponses), tout en ignorant complètement la structure interne de ce système, permet de donner une puissance considérable aux Plans d'expériences, puisqu'on peut traiter n'importe quel système de n'importe quelle discipline (physique, chimie, génie civil, mécanique, biologie, etc... et même de gestion). La méthode basée sur les statistiques ne prétend pas remplacer les résultats obtenus par chacune des autres disciplines, mais elle permet d'apporter des résultats complémentaires très utiles, notamment pour valider des résultats théoriques de ces autres disciplines, d'obtenir certains résultats pratiques et de faire une optimisation. Le modèle adopté par les statisticiens, en plus de sa simplicité puisqu'il se présente toujours sous forme d'un polynôme, permet de rassembler en une seule relation l'ensemble des informations pouvant être apportées par chaque facteur séparément ou conjointement (le nombre de ces facteurs pouvant largement dépasser 2 facteurs). Les mathématiciens peuvent donc contribuer et apporter des informations supplémentaires aux études réalisées par les autres disciplines pour peu qu'ils s'imprègnent quand même du sujet et des résultats de ces dernières.

La Méthodologie de la Recherche Expérimentale, ou méthode de plans d'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.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés en premier lieu à étudier les différents plans d'expériences numériques existants sur la littérature. Ces plans permettent, en général, de bien remplir les points expérimentaux dans l'espace expérimental et de les répartir le plus uniformément possible dans le domaine d'étude .

En second lieu, une étude de comparaison a été réalisée pour évaluer la qualité des différents plans numériques selon certain nombre de critères d'optimalités.

Les résultats obtenus dans ce mémoire, permettent d'envisager de nouvelles perspectives de recherche :

1. Comparer les plans classiques selon les critères utilisés pour les plans numériques.
2. Utiliser d'autres critères comme par exemple le critère d'Arbres de Longueur Minimale [réf de jessica].

## APPENDICE A

### CODE MATLAB POUR LES RESULTATS PRESENTES DANS LE CHAPITRE 4

#### 1. Code Matlab pour le critère de déscrepance

```
%la discrepance
function y=dsc(X)
n=20; w=3;
s1=0;
for i=1:n
    p1=1;
    for j=1:w
        p1=p1*(1-X(i,j))*(1+X(i,j));
    end
    s1=s1+p1;
end
s2=0;
for i=1:n
    for j=1:n
        p2=1;
        for k=1:w
            m=max(X(i,k),X(j,k));
            p2=p2*(1-m);
        end
        s2=s2+p2;
    end
end
y=(3^(-w))+((1/(n^2))*s2-(1/(n*2^(w-1))))*s1;
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

#### 4. Code Matlab pour le critère de recouvrement

```
%le critere de recouvrement
function y=mindist(X)
n=20; w=3;
for i=1:n-1
```

```

for k=i+1:n
s=0;
for j=1:w
s=s+((X(i,j)-X(k,j))^2);
end
M(i,k)=s^0.5;
M(k,i)=s^0.5;
end
end
for i=1:n
M(i,i)=inf;
end
for i=1:n
t(i)=min(M(i,:));
end
q=0;
for i=1:n
q=q+t(i);
end
q1=q/n;
lamda=0;
for i=1:n
lamda=lamda+(t(i)-q1)^2;
end
y=(1/q1)*((1/n)*(lamda))^0.5;
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

### **3. Code Matlab pour le critère de Distance**

```

le min dist
function y=mdist(X)
n=20; w=3;
for i=1:n-1
for k=i+1:n
s=0;
for j=1:w
s=s+((X(i,j)-X(k,j))^2);

```

```

end
M(i,k)=s^0.5;
M(k,i)=s^0.5;
end
end
for i=1:n
M(i,i)=inf;
end
y=min(min(M));
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

#### **4. Code Matlab pour le rapport R de recouvrement**

```

%le rapport R
function y=rap(X)
n=20; w=3;
for i=1:(n-1)
for k=i+1:n
s=0;
for j=1:w
s=s+((X(i,j)-X(k,j))^2);
end
M(i,k)=s^0.5;
M(k,i)=s^0.5;
end
end
for i=1:n
M(i,i)=inf;
end
for i=1:n
t(i)=min(M(i,:));
end
t1=min(t);
t2=max(t);
y=t2/t1;
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

## 5. Code matlab pour le calcul de différents critères

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
Calcul des valeurs de differents critères  
% fprintf('\n');  
rb=rap(X);  
% fprintf('\n');  
resultt(nbrplan,1)=rb;  
Rap=Rap+rb;  
dc=dsc(X);  
% fprintf('discrepance=%f',dc);  
resultt(nbrplan,2)=dc;  
Desc=Desc+dc;  
% fprintf('\n');  
mn=mindist(X);  
resultt(nbrplan,3)=mn;  
Mind=Mind+mn;  
% fprintf('recouvrement=%f',mn);  
% fprintf('\n');  
ms=mdist(X);  
resultt(nbrplan,4)=ms;  
Cov=Cov+ms;  
% fprintf('distance=%f',ms);  
% fprintf('\n');  
end  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

## REFERENCES

- [1]. Fisher, R.A., “ The Design of Experiments”, 2nd edn, Oliver and Boyd, Edinburgh (1935).
- [2]. Kiefer, J., “Optimum experimental designs”, J. R. Stat. Soc. B 21, (1959), 272–319.
- [3]. Box , G.E.P., and BEHNKEN, D.W., “Some new three level designs for the study of quantitative variables”, Technometrics, vol.2, (1960), P.455-475.
- [4].Owen A.B. "orthogonal arrays for computer experiments , integration and visualiazation ". Statistica sinica 2,(1992),439-452.
- [5]. Goupy, J., ‘La méthode des plans d’expériences’’, DUNOD, Paris, (1988), 303 pages.
- [6]. Mathieu D., Phan tan-luu, R. et Sergent, M., ‘Méthodologie de la recherche expérimentale’’, LPRAI, Université d’Aix-Marseille, (1998).
- [7]. Goupy, J., ‘Plans d’expériences pour surface de réponse’’, DUNOD, Paris, (1999), 409 pages.
- [8]. Box, G.E.P. and DRAPER, N.R., ‘Empirical Model Building and response surface ‘’, John Wiley and Sons, new york, (1987).
- [9]. Morris, M. D. A., “class of three-level experimental designs for response surface modeling”, Technometrics, 42, No. 2, (2000), 111-121.
- [10]. Mathieu, D. et Phan-tan-luu, R., “ Planification d’expériences en formulation “’, Techniques de l’Ingénieur, traité Génie des procédés, Doc.J242, (2000).
- [11]. Myers, R.H. and Montgomery, D.C., “Response Surface Methodology”, Wiley New-York, (1995).
- [12].BOX George.E. P. , HUNTER William G. , HUNTER J. Stuart "Statistics for Experimenters" deuxième édition. John Wiley and Sons. New-York. 633 pages. (2005).
- [13]. Johnson M.E., Moore L.M., Ylvisaker D. *Minimax and maximin distance designs*. J. of Statis. Planning and Inference **26**,(1990), 131-148.
- [14]. Thiémard E. Sur le calcul et la majoration de la discrédance à l'origine. Thèse No 2259, Département de mathématiques, école polytechnique fédérale de Lausanne,(2000).
- [15]. Niederreiter H. Random number generation and quasi-Monte-Carlo methods. CBMS-NFS, SIAM, Philadelphia,(1992).

- [16]. Niederreiter H. Point sets and sequences with small discrepancy. *Monasth. Math.* **104**,(1987), 273-337.
- [17].Niederreiter H. Low-Discrepancy and Low-Dispersion Sequences, *Journal of number theory*, **30**,(1987), 51-70.
- [18]. Niederreiter H. Discrepancy and convex programming. *Ann. Math. Pur. Appl.* **93**,(1972), 89-97.
- [19]. Dobkin D.P., Eppstein D. Computing the discrepancy. *Proceedings of the ninth annual symposium on comutational geometry*,(1993), 47-52.
- [20]. *Jessica FRANCO* , thèse de doctorat , Planification d'expériences numériques en phase exploratoire pour la simulation des phénomènes complexes , Préparée au département Méthodes et Modèles Mathématiques pour l'Industrie (3MI) de l'ENSM-SE et au département Géomodélisation et Incertitudes (G&I) de TOTAL
- [21]. Chen V.C.P., Tsui K.L., Barton R.R, Allen J.K. A review of design and modeling incomputer experiments. *Handbookof Statistics 22*, (2003),231-261.
- [22]. Shannon C.E. A Mathematical Theory of Communication. *The Bell System Technical Journal*, **27**, 379-423,(1948), 623-656.
- [23]. Shewry M.C., Wynn H.P. Maximum Entropy Sampling. *Journal of Applied Statistics*, **14**,(1987), 165-170.
- [24]. Lindley D.V. On a Measure of the Information Provided by an Experiment. *The Annals of Mathematical Statistics*, **27**, (1956),986-1005.
- [25]. Ripley B.D., Kelly F.P. Markov point processes, *Journal of the London Mathematical Society*, **15**,(1977), 188-192.
- [26]. ELMOSSAOUI Hichem, thèse de doctorat ,"Contribution a la méthodologie de la recherche experimentale",(2020).
- [27]. Faure, H. “Discrépance quadratique de la suite de van der Corput et de sa symétrie ‘’, *ActaArith.* 55, (1990), 333–350.
- [28]. Halton, J.H., “On the efficiency of certain quasi-random sequences of points inevaluating multidimensional integrals”, *Mathematik 2*, (1960), 84–90.
- [29]. Sobol, I.M., “Uniformity distributed sequences with an additional uniform property”, *U.S.S.R, Computational Mathematics and Mathematics*, (1976).
- [30]. Hammersley J.M. “Monte-Carlo methods for solving multivariate problems”, *Annals of the New York Academy of Sciences* **86**,(1960), 844–874.
- [31]. Faure, H., “Discrepance de suites associées a un système de numération (en dimension s)”, *Acta Arith.* 41, (1982), 337–351.

[32]. Loh, W.L., “On latin hypercube sampling”, *Ann. Stat.* 24, (1996), 2058–2080.