

Ecole Pec'num 2015

Cours 2

Plans d'expérience pour surfaces de réponse

Walter TINSSON

Laboratoire de Mathématiques et
leurs Applications de Pau (LMAP)

LYON - Lundi 18 mai 2015

SOMMAIRE

Généralités	02
Plans composites centrés	06
Plans de Box et Behnken	12
Plans simplexes augmentés	17
Plans hybrides	21
Plans D-optimaux	24
Résumé	28
Extension : plans d'expérience en blocs	29
Références	34

Généralités

On considère ici une situation où le phénomène aléatoire étudié ne présente pas un trop grand nombre de facteurs (ou bien ils ont été réduits au préalable par technique de screening) et des informations assez précises sur la réponse sont requises.

On s'intéresse ici à un modèle statistique de la forme $Y(x)=f(x)+\varepsilon(x)$, pour m facteurs, avec f polynôme d'ordre deux donné en tout point du domaine expérimental par :

$$f(x) = f(x_1, \dots, x_m) = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \sum_{i=1}^m \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j$$

On dit que β_0 est l'effet moyen général, β_i est l'effet linéaire du facteur i , β_{ii} est l'effet **quadratique** du facteur i et β_{ij} est l'effet d'interaction entre les facteurs i et j .

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

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

Lorsque n expériences sont réalisées ceci peut être traduit globalement via l'écriture matricielle du modèle :

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

On suppose classiquement que les résidus sont centrés, indépendants et homoscédastiques donc :

$$\mathbb{E}(\varepsilon) = 0 \text{ et } \mathbb{V}(\varepsilon) = \sigma^2 I_n$$

Le vecteur β des paramètres inconnus du modèle va être ajusté ici selon la technique des **moindres carrés** ayant pour objectif de minimiser l'erreur :

$$Q(\beta) = \|Y - X\beta\|^2$$

Si la matrice du modèle X est de plein rang l'estimateur des moindres carrés est obtenu via la résolution des **équations normales** suivantes :

$$\hat{\beta} = ({}^tXX)^{-1}{}^tXY$$

On montre que sa dispersion est quantifiée par :

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}) = \sigma^2 ({}^tXX)^{-1}$$

Problème : est-il possible de réutiliser les plans factoriels ?

L'introduction d'effets quadratiques rend maintenant **impossible** l'utilisation de plans factoriels. En effet pour (par exemple) 2 facteurs la matrice du modèle serait :

Mis à part le nombre insuffisant d'expériences pour cet exemple, les colonnes associées aux effets quadratiques seront **toujours égales** à $\mathbb{I}_n$ avec ce type de plan.

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1^2} & \mathbf{2^2} & \mathbf{12} \end{array} \\ \left(\begin{array}{c|cc|cc|c} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right) \end{array}$$

Il devient impossible structurellement d'ajuster un modèle d'ordre deux à l'aide d'un plan d'expérience utilisant des facteurs à deux niveaux (tout comme géométriquement, en dimension un, il est impossible d'ajuster de manière unique une parabole à l'aide de seulement deux points).

Objectif : pour n expériences utiliser le « **meilleur** » plan d'expérience possible.

On a vu que si la matrice d'information tXX est diagonale alors le plan d'expérience obtenu est optimal selon divers critères. Une telle propriété devient cependant **impossible** à obtenir pour un modèle d'ordre deux.

L'objectif d'avoir une matrice d'information diagonale est alors allégé et on recherche des plans d'expérience ayant une matrice d'information **canonique** dans le sens où elle contient un maximum de valeurs nulles.

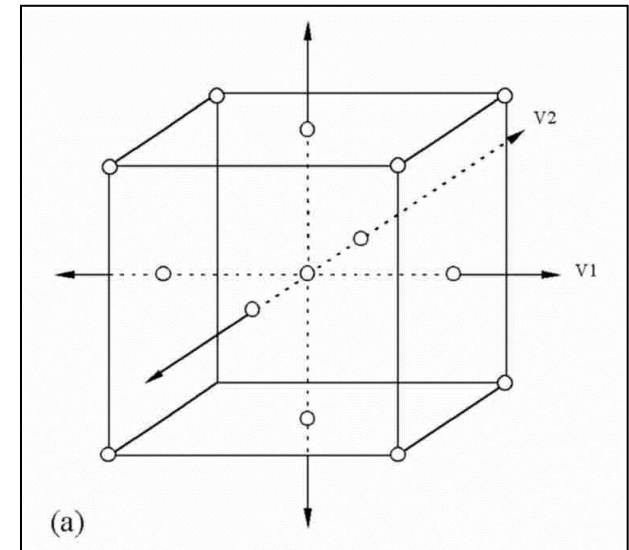
En pratique un plan d'expérience pour m facteurs est dit à matrice des moments canonique si et seulement si :

$$M = {}^tXX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \mu_2 {}^t\mathbb{I}_m & 0 \\ 0 & \mu_2 \mathbb{I}_m & 0 & 0 \\ \mu_2 \mathbb{I}_m & 0 & (c-1)\mu_4 \mathbb{I}_m + \mu_4 J_m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu_4 \frac{m(m-1)}{2} \end{pmatrix}$$

Plans composites centrés

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

- 1) la partie **factorielle** qui est un plan composite centré ou bien une fraction régulière de résolution V (ou plus),
- 2) la partie **axiale** constituée par tous les points situés sur les axes du repère et à une même distance α du centre du domaine expérimental,
- 3) la partie **centrale** constituée par $n_0 \in \mathbb{N}$ expériences au centre du domaine.



Le nombre d'expériences d'un tel plan est alors (lorsque la fraction régulière est définie à l'aide de q générateurs) :

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

Exemple : plan composite centré à 2 facteurs (avec une expérience centrale).

On veut alors ajuster le modèle :

$$f(x) = f(x_1, x_2) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

Matriciellement il vient donc $Y = X\beta + \varepsilon$ avec :

$$X = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1^2} & \mathbf{2^2} & \mathbf{12} \end{array} \\ \left(\begin{array}{c|ccc|cc} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \alpha^2 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \end{array}$$

Il vient alors :

$$t_{XX} = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 & 4 + 2\alpha^2 & 4 + 2\alpha^2 & 0 \\ 0 & 4 + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 4 + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 4 + 2\alpha^4 & 4 & 0 \\ 4 + 2\alpha^2 & 0 & 0 & 4 & 4 + 2\alpha^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

Ce type de plan d'expérience a donc bien une matrice des moments **canonique**.

Il est ici relativement économique puisque seulement $n=9$ expériences ont été réalisées (et le modèle a un total de $p=6$ paramètres inconnus).

Problème : comment choisir en pratique la valeur du paramètre α ?

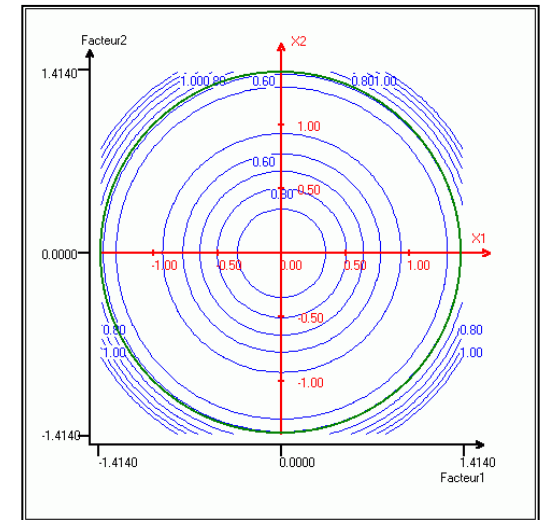
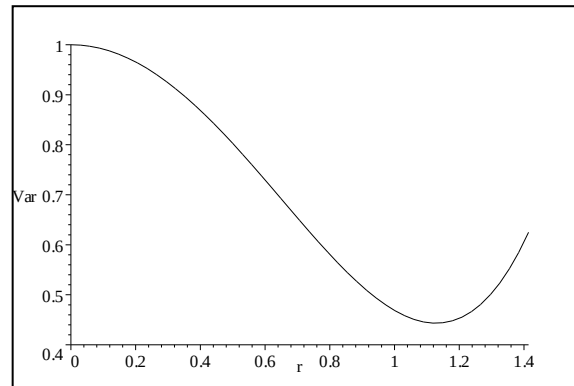
Ce paramètre laisse à l'utilisateur un « degré de liberté » permettant d'obtenir certaines propriétés. Les plus courantes sont les suivantes:

1) Plans composites centrés *isovariants*. On montre que la réponse moyenne prédite en x ne dépend que de la norme de x si et seulement si :

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

Il s'agit de la valeur de α la plus couramment utilisée (très souvent imposée par défaut dans les logiciels spécialisés).

Exemple pour un plan composite centré à deux facteurs avec $\alpha = 2^{1/2}$ (les figures représentent la variance de la réponse moyenne prédite).



2) Plans composites centrés à **faces centrées.** L'objectif est ici d'avoir le moins de niveaux possibles pour chacun des facteurs. Ceci est atteint si et seulement si $\alpha = 1$ (et il y a ainsi uniquement 3 niveaux par facteur).

3) Plans composites centrés **équiradiaux.** L'objectif est ici d'avoir tous les points du plan d'expérience situés à une même distance du centre du domaine. Ceci est atteint si et seulement si :

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

Cette propriété permet d'obtenir certains résultats mathématiques simplifiés ainsi que l'optimalité du plan d'expérience pour certains critères.

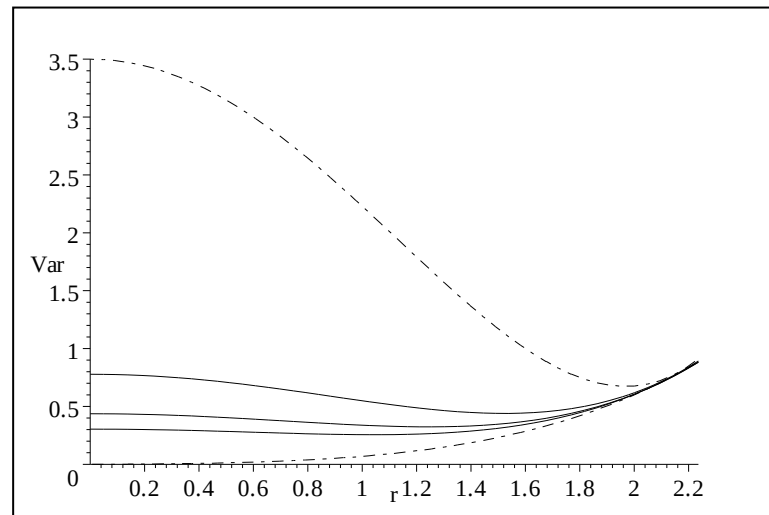
4) Plans composites centrés **presque orthogonaux.** L'objectif est ici d'annuler un maximum de termes de l'inverse de la matrice d'informations (et ceci afin de se rapprocher au maximum d'une situation d'orthogonalité). Ceci est atteint si et seulement si :

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

Problème : comment choisir en pratique le nombre n_0 d'expériences centrales ?

Lorsque les expériences sont extrêmement coûteuses il est clair qu'il est possible de ne prendre **aucune** expérience centrale. Dans tous les autres cas de figure il est conseillé d'en prendre un **petit nombre** (2,3 ou 4 dans la plupart des cas).

Justification mathématique : représentation de la variance de la réponse moyenne prédite d'un même plan composite centré pour (de haut en bas) $n_0 = 0, 1, 2, 3$ et $+\infty$.



Plans de Box et Behnken

Objectif : construire des plans d'expérience utilisant uniquement les niveaux -1,0 et 1.

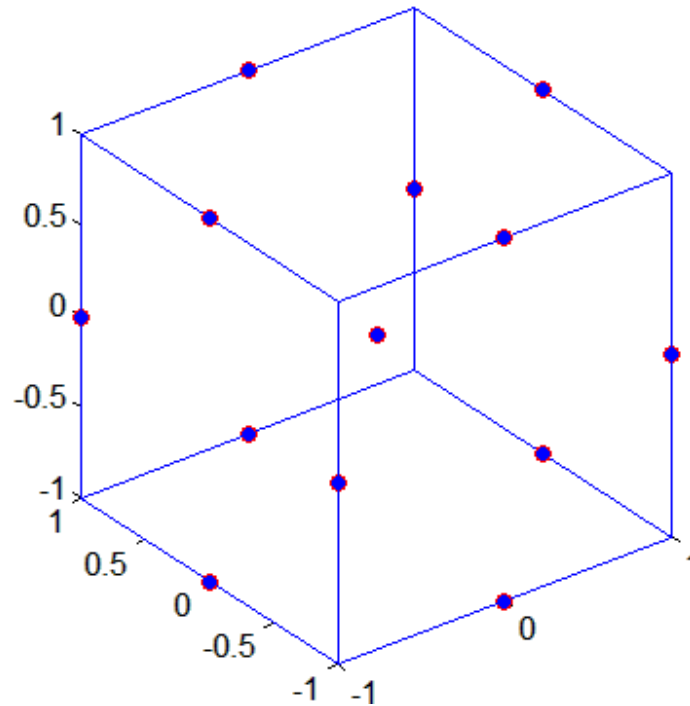
L'idée de Box et Behnken est de combiner « au mieux » des plans factoriels pour $m' < m$ facteurs afin d'obtenir au final un plan pour m facteurs à matrice d'information **canonique** (mais ce type de structure n'existe pas pour toutes les valeurs de m).

Exemple pour $m=3$ facteurs. Le plan de Box et Behnken a alors la matrice ci-contre.

On vérifie qu'un tel plan est bien à matrice des moments canonique. Il est construit à partir de 3 plans factoriels complets pour $m'=2$ facteurs.

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

Représentation graphique : les points de ce plan d'expérience sont situés **au milieu** des arêtes du cube unité.



Plans de Box et Behnken pour $m=4$ et $m=5$ facteurs :

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

$m=4$,
 $n=24$,
 $p=15$.

Ce plan d'expérience est à matrice des moments canonique. Il est de plus **isovariant**.

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

$m=5$,
 $n=40$,
 $p=21$.

Ce plan d'expérience est à matrice des moments canonique.

Un plan d'expérience très populaire : le plan de Box et Behnken pour $m=7$ facteurs.

1) sa matrice d'information est **canonique**,

2) il s'agit d'un plan d'expérience **isovariant**,

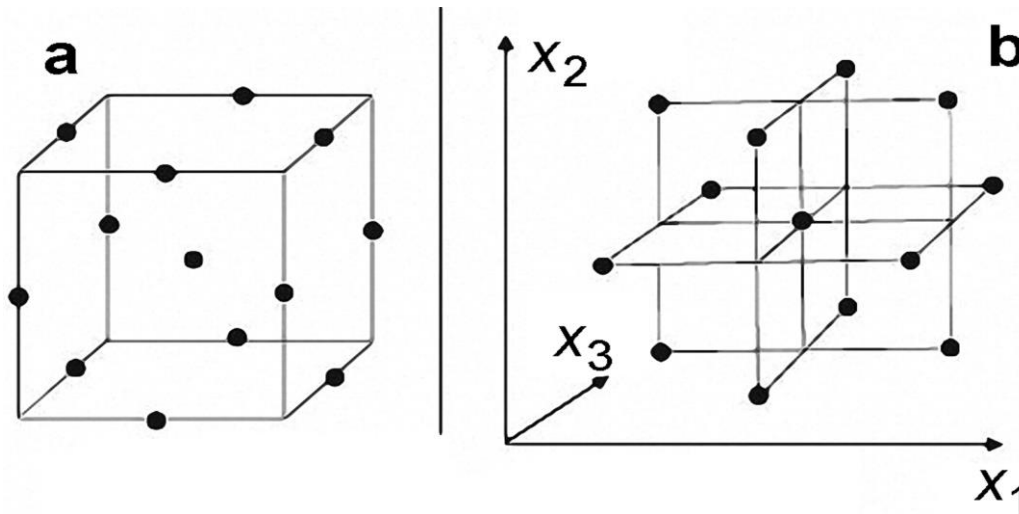
3) il n'est composé que de $n=57$ **expériences** (à comparer au plan composite centré pour 7 facteurs en $n=78$ expériences au minimum).

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

Au moins une expérience centrale doit être ajoutée afin d'assurer la régularité de ce plan d'expérience.

Qualités de ces plans d'expérience : aucun paramètre variable,
seulement 3 niveaux par facteur.

Défauts de ces plans d'expérience : aucun paramètre variable,
n'existent pas toujours !



Plans simplexes augmentés

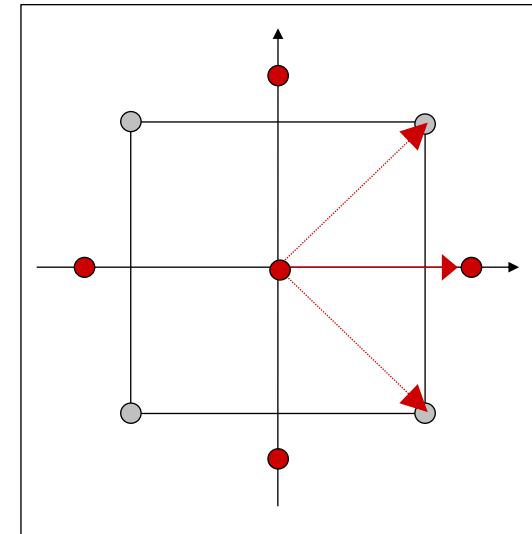
Technique des plans d'expérience **augmentés** :

à tout couple de points (z_s, z_t) du plan d'expérience initial on rajoute le point $\alpha(z_s + z_t)$.

Cette technique est généralement utilisée avec pour plan d'expérience initial un plan factoriel.

En dimension 2 augmenter de la sorte un plan factoriel complet conduit à un plan composite centré (voir la figure ci-contre).

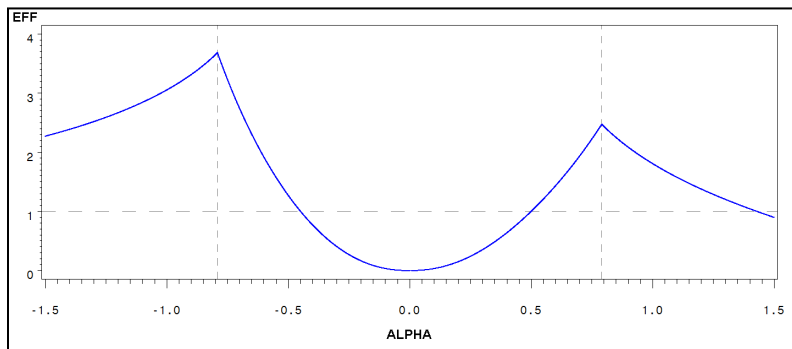
Idée : utiliser cette technique avec cette fois un plan d'expérience **simplexe** comme point de départ.



Problème : comment choisir en pratique la valeur du paramètre α ?

Il est souvent fixé (par « habitude ») à la valeur $\alpha=0,5$. Le paramètre α peut cependant être déterminé de manière à obtenir diverses propriétés d'optimalité :

- 1) des valeurs de α maximisant le critère **maximin** ont été déterminées explicitement.
- 2) des valeurs de α maximisant le **déterminant** de la matrice d'information tXX ont été déterminées numériquement.



Représentation graphique pour $m=5$ facteurs plus 3 points au centre (D-efficacités relatives par rapport à $\alpha=0,5$).

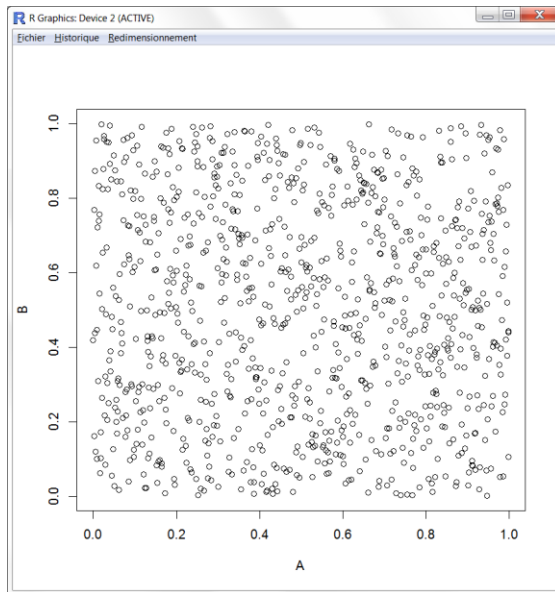


Le critère **maximin**.

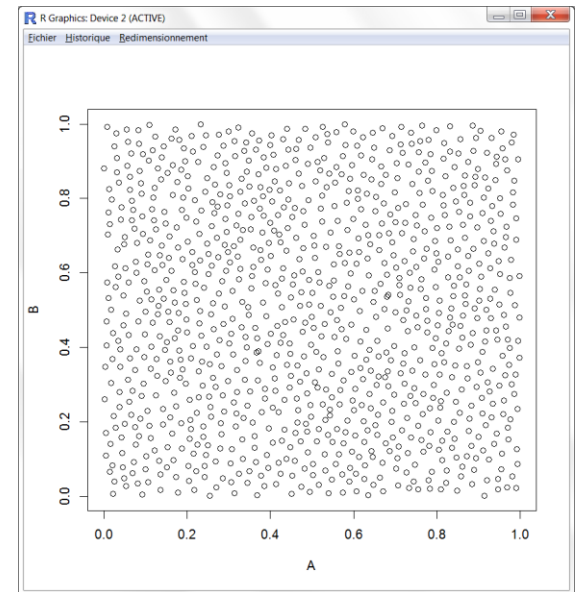
Au sein d'une classe de plans d'expérience donnée un plan est dit optimal pour le critère maximin si et seulement si il **maximise** la distance **minimale** entre tous les couples de points possibles.

Intérêt d'un tel critère (surtout pour les plans d'expérience numériques) : « éloigner » le plus possible les couples d'expériences, ne pas les répéter ...

1000 points
générés
aléatoirement.

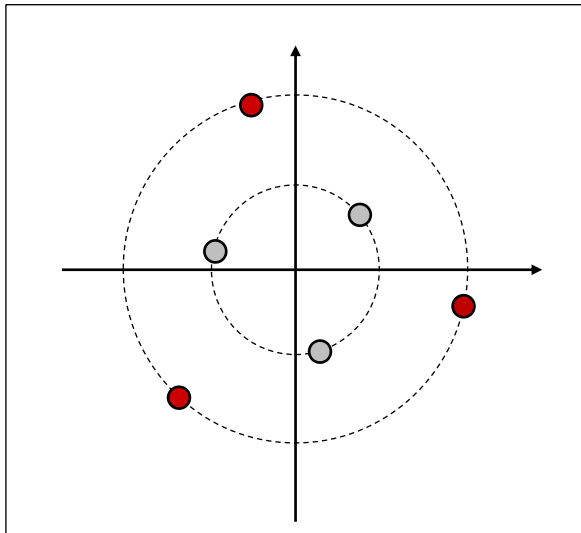


1000 points
générés
selon le
critère
maximin.



Qualités de ces plans d'expérience : plans d'expérience **saturés**, facilement constructibles, propriétés géométriques simples, existent toujours.

Défauts de ces plans d'expérience : pas de matrice d'information **canonique** niveaux des facteurs complexes.



Exemple de plan simplexe augmenté pour $m=2$ facteurs.

Plans hybrides

Objectif : construire des plans d'expérience de **petite taille**, pour m facteurs, à partir de plans d'expériences « efficaces » pour $(m-1)$ facteurs.

Exemple du plan hybride de type 311A :

*Construction à partir d'un
plan composite centré
isovariant pour $m=2$
facteurs (colonnes 1 et 2).*

$$D = \left(\begin{array}{cc|c} -1 & -1 & 1/\sqrt{2} \\ 1 & -1 & 1/\sqrt{2} \\ -1 & 1 & 1/\sqrt{2} \\ 1 & 1 & 1/\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Un plan d'expérience hybride très populaire de type 628A :

- 1) sa matrice d'information est **canonique**,
- 2) il s'agit d'un plan d'expérience **isovariant**,
- 3) il n'est composé que de $n=28$ **expériences** (à comparer au plan composite centré pour 6 facteurs en $n=44$ expériences au minimum ou encore au plan de Box et Behnken pour 6 facteurs en $n=49$ expériences au minimum sans avoir une structure canonique).

$$D = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1/\sqrt{3} \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & -2/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Qualités de ces plans d'expérience : plans d'expérience **de petite taille**, certains de ces plans d'expérience ont d'intéressantes propriétés.

Défauts de ces plans d'expérience : pas de matrice d'information **canonique** en général, n'existent pas toujours !

Plans D-optimaux

L'idée est de quantifier la « qualité » d'un plan d'expérience donné. Un critère classique consiste à utiliser le déterminant de la matrice de dispersion $({}^tXX)^{-1}$ (inverse de la matrice d'information).

DEFINITION

Etant donné un modèle linéaire à p paramètres inconnus ajusté à l'aide d'un plan d'expérience d de matrice d'information C_d la **D-efficacité** de ce plan d'expérience est quantifiée par :

$$\Phi_0(C_d) = \left(\text{Det}(C_d^{-1}) \right)^{1/p}$$

Au sein d'une classe de plans d'expérience $\mathcal{D}$ un plan d'expérience d^* est alors dit **D-optimal** si et seulement si :

$$\forall d \in \mathcal{D}, \Phi_0(C_{d^*}) \leq \Phi_0(C_d)$$

Idée générale : un plan d'expérience est d'autant « meilleur » que sa matrice de dispersion est « petite » (en introduisant ici un ordre à l'aide déterminant)

Remarquons que :

$$\begin{aligned} d^* \text{ est } \mathbf{D\text{-}optimal} \text{ dans } \mathcal{D} &\iff d^* \text{ minimise } \Phi_0(C_d) = \left(\text{Det}(C_d^{-1}) \right)^{1/p} \text{ dans } \mathcal{D} \\ &\iff d^* \text{ minimise } \text{Det}(C_d^{-1}) \text{ dans } \mathcal{D} \\ &\iff d^* \mathbf{maximise} \text{Det}(C_d) \text{ dans } \mathcal{D} \\ &\quad \text{puisque } \text{Det}(C_d^{-1}) = 1/\text{Det}(C_d) \end{aligned}$$

Il en découle qu'une des qualités du critère de D-optimalité est sa simplicité puisqu'il équivaut donc simplement à maximiser le déterminant de la matrice d'information $C_d = {}^tXX$.

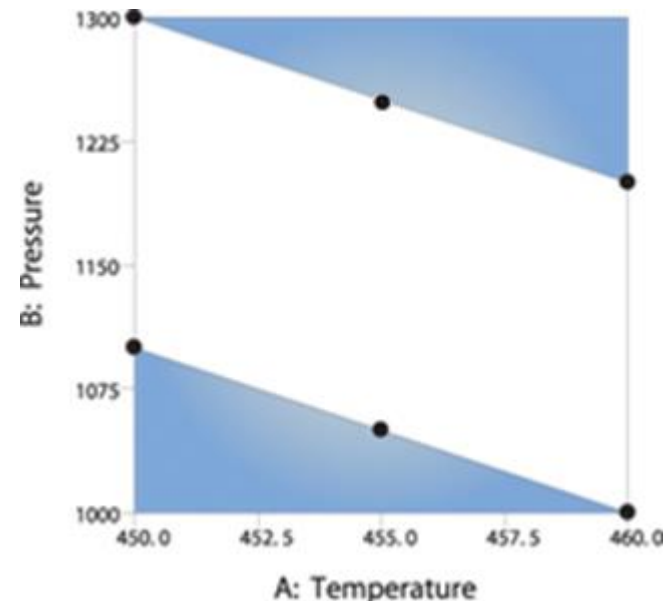
Intérêt de ce type de plans :

- 1) adaptation à des situations où le **nombre d'expériences** requis ne peut être obtenu à l'aide d'un plan d'expérience « classique »,
- 2) adaptation à des situations où le domaine expérimental doit tenir compte de **contraintes** particulières.

Exemple. On considère ici l'injection de plastique dans une pièce en fonction de la température et de la pression.

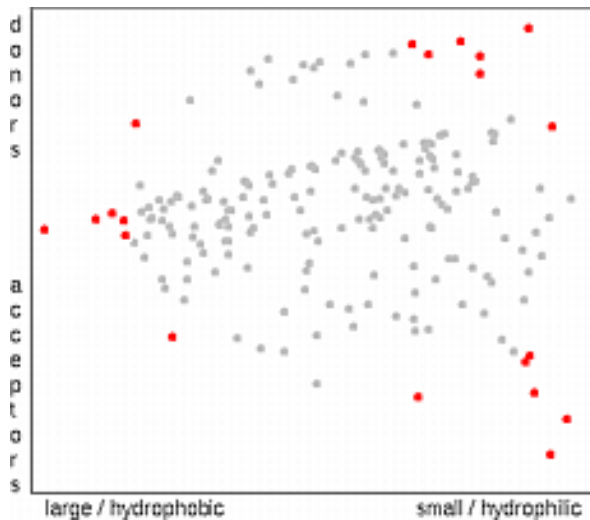
Les zones en bleu correspondent à des valeurs conduisant à du plastique trop solide ou trop liquide.

Un plan d'expérience D-optimal en $n=6$ expériences a été alors généré.



Qualités de ces plans d'expérience : grande **souplesse** d'adaptation,
critère relativement **simple** à manier,
critère **invariant** par changement de variables affine.

Défauts de ces plans d'expérience : obligation de passer par des techniques **algorithmiques** (algorithme d'échange par exemple),
problèmes éventuels de **convergence**,
géométriquement le critère de D-optimalité a
tendance à favoriser des expériences à la **limite** du
domaine expérimental.



*Sélection d'un sous-ensemble de points
maximisant le critère de D-efficacité.*

Résumé

	p	CCD	BB	Simp.	Hybr.
02 facteurs	06	08 (1.33)	x	06 (1.00)	x
03 facteurs	10	14 (1.40)	13 (1.30)	10 (1.00)	11 (1.10)
04 facteurs	15	24 (1.60)	25 (1.67)	15 (1.00)	15 (1.00)
05 facteurs	21	26 (1.24)	41 (1.95)	21 (1.00)	x
06 facteurs	28	44 (1.57)	49 (1.75)	28 (1.00)	28 (1.00)
07 facteurs	36	78 (2,17)	57 (1.58)	36 (1.00)	46 (1.28)
08 facteurs	45	80 (1.78)	x	45 (1.00)	x
09 facteurs	55	146 (2.65)	121 (2.20)	55 (1.00)	x
10 facteurs	66	148 (2.24)	161 (2,44)	66 (1.00)	x



Matrice d'information canonique



Isovariance

Extension : plans d'expérience en blocs

Une cause courante de mauvaise ajustement d'un modèle est l'**hétérogénéité** des données observées (matières premières de provenances différentes, ouvriers différents, sexe du patient, *etc....*). Dans ce cas il est naturel d'essayer de regrouper les expériences (à priori) homogènes dans des sous-ensembles appelés **blocs**.

On peut enrichir le modèle classique pour surfaces de réponses en introduisant des **effets de blocs**. En désignant par b le nombre de blocs on considère alors le modèle statistique de la forme $Y(x) = f_l(x) + \varepsilon(x)$ pour les réponses associées au bloc l , avec f_l donné en tout point du domaine expérimental par :

$$f_l(x) = f_l(x_1, \dots, x_m) = \beta_0 + \delta_l + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \sum_{i=1}^m \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j$$

On dit que δ_l est l'effet **du bloc** l ($1 \leq l \leq b$).

Difficulté liée à un tel modèle : la matrice du modèle contient les valeurs 0 ou 1 dans les colonnes associées aux effets des blocs (pour désigner respectivement une absence ou une présence dans le bloc considéré). Il en résulte que la matrice du modèle ne peut **jamais être de plein rang** (problématique identique au cas des facteurs qualitatifs).

Il en résulte l'obligation d'utiliser des contraintes d'identifiabilité. Par exemple :

$$\sum_{l=1}^b \delta_l = 0$$

Objectif classique : obtenir des plans d'expérience **bloqués orthogonalement**, c'est-à-dire tels que les estimateurs des paramètres du modèles « usuel » (effets linéaires, quadratiques et d'interaction) soient **identiques** qu'il y ait des blocs ou non. Si B désigne la matrice des indicatrices des blocs on montre qu'un plan d'expérience est bloqué orthogonalement si et seulement si :

$${}^tX \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B = 0$$

Exemple : considérons un phénomène aléatoire dépendant de $m=3$ facteurs et supposons que $b=3$ **blocs** soient requis.

L'idée la plus « économique » consiste à utiliser un plan d'expérience classique pour le modèle sans bloc (un plan de type CCD ici) et de le **partitionner** judicieusement en $b=3$ parties.

Concernant le choix des blocs les parties factorielles et axiales forment naturellement des blocs utilisables. La partie factorielle peut elle-même être encore décomposée à l'aide de fractions régulières de résolution III si nécessaire (on obtient ainsi une matrice d'information « canonique » dans un sens généralisé).

On peut alors effectuer le choix suivant ici :

bloc 1 : partie factorielle telle que $\mathbb{I}_4 = \mathbf{123}$,

bloc 2 : partie factorielle telle que $-\mathbb{I}_4 = \mathbf{123}$,

bloc 3 : partie axiale.

Décomposition en $b=3$ blocs d'un plan **composite centré**.

Exp.	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
1	1	1	1
2	-1	-1	1
3	-1	1	-1
4	1	-1	-1
5	-1	-1	-1
6	-1	1	1
7	1	-1	1
8	1	1	-1

Exp.	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
9	α	0	0
10	$-\alpha$	0	0
11	0	α	0
12	0	$-\alpha$	0
13	0	0	α
14	0	0	$-\alpha$

Supposons maintenant que n_i expériences centrales ont été ajoutées au bloc i ($i=1,2,3$). On vérifie alors que le **blocage orthogonal** est obtenu si et seulement si :

$$n_1 = n_2 \text{ et } \alpha = \sqrt{\frac{12+2n_3}{4+n_1}}$$

Il faut en fait que tous les moments purs par blocs d'ordre 2 par blocs soient égaux afin d'obtenir le blocage orthogonal.

Références

Box G.E., Hunter J.S. et Hunter W.G. (2005), ***Statistics for experimenters***. Wiley Series in Probability and Statistics.

[chapitres 11 et 12]

Khuri A.I. et Cornell J.A. (1996), ***Response surfaces: designs and analyses***. Statistics: textbooks and monographs, Vol. 152, Marcel Dekker.

[chapitres 4 et 5]

Tinsson W. (2010), ***Plans d'expérience : constructions et analyses statistiques***. Mathématiques et Applications, Vol. 67, Springer.

[chapitres 4, 5 et 6]

.....

Merci de votre attention

CONTACT

Walter TINSSON

Maître de Conférences HDR

Laboratoire de Mathématiques et de leurs
Applications de Pau (LMAP)

walter.tinsson@univ-pau.fr

Page Web : www.univ-pau.fr/~tinsson

