

# **Annexes**



## 1. Principales matrices d'expériences

On rappelle les différences observées entre les expressions « liste » d'expériences, « matrice » d'expériences et « plan » d'expériences.

Une liste d'expériences contient les coordonnées d'une série d'expériences, pour lesquelles les  $k$  facteurs changent de valeurs, chacun entre ses bornes limites de variation. La liste d'expériences n'est donc pas une appellation uniquement utilisée dans le cadre de la MPE. Ainsi par exemple, une population d'individus, ou de manière équivalente une génération, dans le contexte des algorithmes génétiques, peut être assimilée à une liste d'expériences.

Quant au terme « plan d'expériences », il se rapporte entièrement à la méthode éponyme. Néanmoins, cela désigne également une liste d'expériences. Le mot « plan » s'explique par le contexte originel d'application de la méthode : l'expérimentateur doit imaginer et préparer une démarche complète avant de réaliser concrètement ses expériences. Il y a donc une étape de *planification* des tâches avant celle de l'*expérimentation* proprement dite.

Il est possible de généraliser le concept de plan d'expériences en définissant la matrice d'expériences. Celle-ci donne également la définition de  $N$  expériences mettant en jeu  $k$  facteurs, mais dans un espace d'intérêt centré réduit. Un plan devient alors une application particulière de la matrice d'expériences de base, pour laquelle les bornes limites de chaque facteur ont été changées aux valeurs du problème traité. En termes informatiques de programmation objet, un plan est une instance de l'objet matrice d'expériences.

Par facilité de langage, on désigne également par « plan » l'écriture matricielle dans laquelle cette liste de coordonnées de points est utilisée. La matrice d'expériences proprement dite ne s'en distingue alors que par les coordonnées de ces mêmes points, qui sont centrées et réduites. On parle donc d'un même objet mathématique à  $N$  lignes et  $p$  colonnes.

Ainsi, par exemple, la variable  $\mathbf{X}$  suivante est une matrice d'expériences, dans laquelle les points  $[-1, 1]$ ,  $[1, -1]$ ,  $[-1, 1]$  et  $[1, 1]$  sont successivement définis.  $\mathbf{X}$  définit dans le même temps un modèle de la forme  $y_{\text{mod}} = b_0 + b_1 \cdot x_1 + b_2 \cdot x_2 + b_{12} \cdot x_1 \cdot x_2$  (2 facteurs avec interaction).

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Dans le cas d'un problème quelconque, il y a peu de chance pour que les 2 facteurs varient également entre  $-1$  et  $1$ . Si par exemple  $2 \leq x_1 \leq 4$  et  $10 \leq x_2 \leq 20$ , alors le plan d'expériences correspondant s'écrira :

$$\begin{bmatrix} 2 & 10 \\ 4 & 10 \\ 2 & 20 \\ 4 & 20 \end{bmatrix}, \text{ et par extension } \begin{bmatrix} 1 & 2 & 10 & 20 \\ 1 & 4 & 10 & 40 \\ 1 & 2 & 20 & 40 \\ 1 & 4 & 20 & 80 \end{bmatrix}.$$

La matrice de gauche ci-dessus est également une liste d'expériences.

Dans cette partie sont présentées les principales matrices d'expériences susceptibles d'être utilisées lors d'un processus complet d'optimisation.

# Principales matrices d'expériences

Les différents plans se distinguent entre autres par :

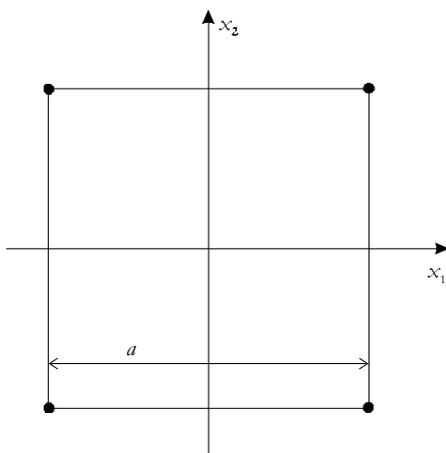
- le nombre d'expériences demandé ;
- le type de modèle qu'ils autorisent ;
- leur utilisation ;
- le placement des points d'expériences dans le domaine d'étude ;
- le volume de validité du domaine couvert par le modèle.

Ces différents aspects ne sont pas indépendants entre eux. Ainsi, par exemple, le nombre d'expériences influe fortement sur le type de modèle que l'on peut déduire ...

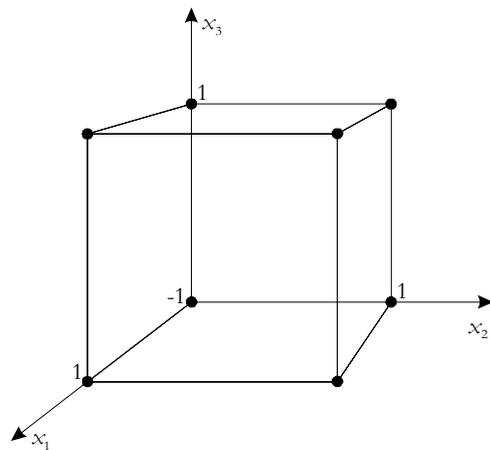
## 1.1. Matrices d'expériences de screening

### 1.1.1. Matrices factorielles complètes (2 niveaux)

#### 1.1.1.1 Représentations



Plan factoriel 2 niveaux ( $k=2$ )



Plan factoriel 2 niveaux ( $k=3$ )

#### 1.1.1.2 Placement des points

Les points d'expériences d'un plan factoriel complet 2 niveaux par facteur sont placés aux sommets d'un hyper-cube de dimension  $k$ .

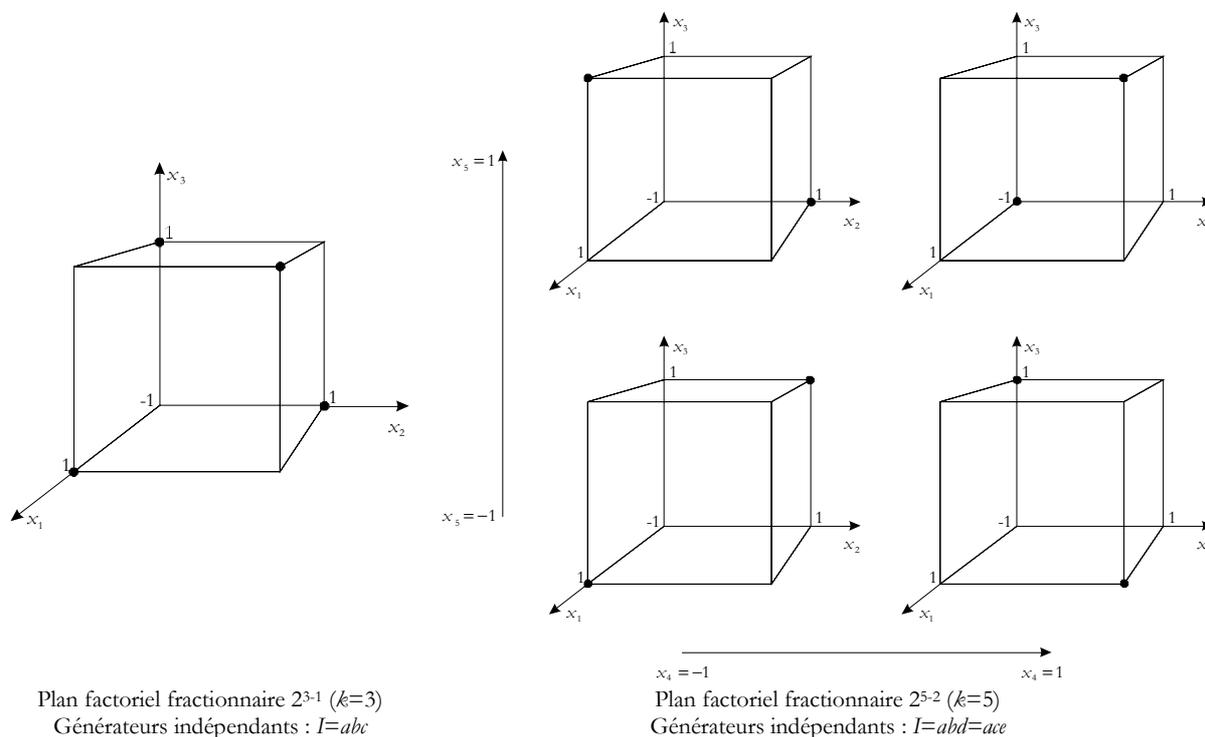
#### 1.1.1.3 Nombre d'expériences

$$|V_{j^2}| = 2^k$$

### 1.1.2. Matrices factorielles fractionnaires (2 niveaux)

# Principales matrices d'expériences

## 1.1.2.1 Représentation



## 1.1.2.2 Positionnement des points

Les coordonnées des points des plans fractionnaires sont déduits de la valeur des générateurs indépendants. Se reporter à la partie traitant de la technique du screening à ce sujet (Chapitre 1, §4. ).

## 1.1.2.3 Nombre d'expériences

$$v_{ff} = 2^{k-r}$$

Où  $r$  est le coefficient de réduction.

## 1.1.3. Matrices de Plackett - Burman

Les plans de Plackett-Burman sont construits à partir des matrices d'Hadamard  $H$ . On rappelle que de telles matrices  $H$  sont carrées, d'ordre  $N_H$ , d'éléments égaux à  $-1$  ou à  $1$  et telles que  $H' \cdot H = N_H \cdot I_{N_H}$ .  $N_H$  doit valoir 0 modulo 4.

Les matrices de Plackett-Burman associées constituent un moyen général et simplifié pour l'écriture des matrices d'Hadamard.

Ainsi, pour un nombre  $k$  de facteurs, on choisit la matrice telle que  $N_H$  soit directement supérieur ou égal à  $N=k+1$ , c'est-à-dire au nombre de coefficients de tout modèle polynomial du premier degré à  $k$  facteurs. Pour la valeur de  $N_H$  trouvée, il faut alors utiliser la suite de  $-1$  et de  $1$ , indiquée par le tableau de référence suivant .

Tableau 1 - Tableau de référence pour la construction des matrices d'Hadamard (+ mis pour 1 et - pour -1)

$N_H$	Séquences de niveaux
4	++-
8	+++---
12	+-+---+--
16	++++-+---+---
20	+-+---+---+---+---
24	++++-+---+---+---
32	-----+---+---+---

## *Principales matrices d'expériences*

Les lignes de la matrice d'expériences sont alors déduites de toutes les permutations cycliques (vers la droite ou vers la gauche) possibles de la séquence de  $-1$  et de  $1$  de la ligne correspondante du tableau précédent, pour la valeur choisie de  $N_H$ . Après cela, on vient ajouter une ligne supplémentaire de  $-1$ . Pour obtenir une matrice d'ordre  $N_H$ , il faut enfin ajouter une colonne de  $1$ , sur le côté gauche (colonne de la moyenne).

Ainsi, par exemple, pour  $k=2$ , il faut choisir  $N_H=4$ . Par permutations à droite, on obtient la matrice :

$$\begin{bmatrix} + & + & - \\ - & + & + \\ + & - & + \end{bmatrix}$$

A laquelle on vient ajouter une ligne de  $-1$  :

$$\begin{bmatrix} + & + & - \\ - & + & + \\ + & - & + \\ - & - & - \end{bmatrix}$$

Et enfin, lorsque la colonne de la moyenne est ajoutée, on obtient la matrice de Plackett-Burman, pouvant servir à la création de plans d'expériences :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

Pour  $N_H=28$ , la construction est différente. La matrice d'expériences  $\mathbf{M}$  est composée de 3 sous-matrices  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{C}$  :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{B} & \mathbf{C} & \mathbf{A} \\ \mathbf{C} & \mathbf{A} & \mathbf{B} \end{bmatrix}$$

Avec :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

## 1.1.4. Matrices de Taguchi

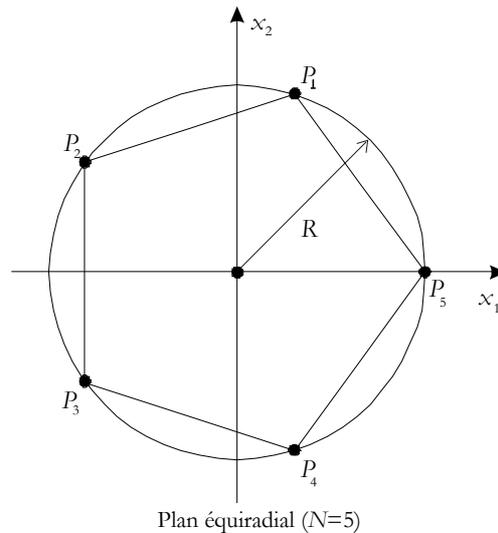
Les matrices de Taguchi ont été définies de façon univoque. Elles sont tabulées et reportées dans certains ouvrages spécialisés.

## 1.2. Matrices d'expériences de RSM (Response Surface Modelling)

### 1.2.1. Matrices pour modèles du premier degré

#### 1.2.1.1 Matrices équiradiales ( $k=2$ )

##### 1.2.1.1.a REPRESENTATIONS



##### 1.2.1.1.b PLACEMENT DES POINTS

Les expériences de ce plan sont disposées à une distance constante du centre du plan. Ainsi, comme leur nom l'indique, ces points d'expériences sont placés (de façon régulière) sur un cercle de rayon constant  $R$ .

Les coordonnées de ces points s'obtiennent par des relations angulaires :

$$x_{i1} = R \cdot \cos\left(\frac{2 \cdot \pi \cdot i}{N}\right)$$

$$x_{i2} = R \cdot \sin\left(\frac{2 \cdot \pi \cdot i}{N}\right)$$

Avec  $i=1,2, \dots, N$ , où  $N$  est le nombre de points extérieurs du plan, tel que  $N \geq k+1=3$ .

Un ou plusieurs points au centre doivent être réalisés.

##### 1.2.1.1.c NOMBRE D'EXPERIENCES

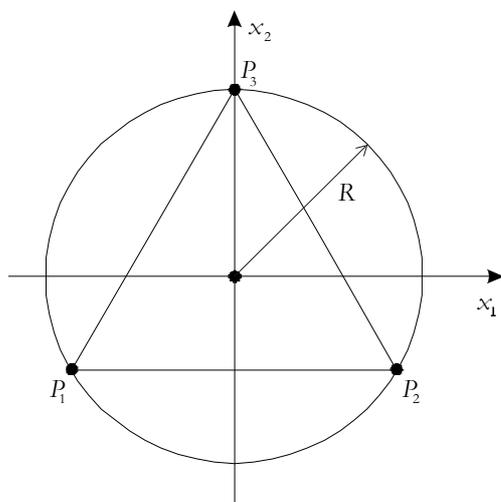
Le nombre d'expériences est l'hypothèse primaire pour la construction du plan. Par conséquent :

$$\underline{v_e = N}$$

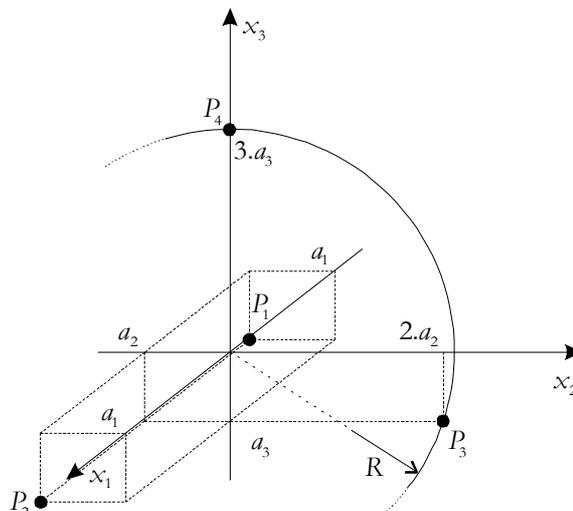
# Principales matrices d'expériences

## 1.2.1.2 Matrices simples

### 1.2.1.2.a REPRESENTATIONS



Plan simplexe ( $k=2$ ) - triangle  
 $a_1=0.866, a_2=0.5$



Plan simplexe ( $k=3$ ) - tétraèdre  
 $a_1=0.8165, a_2=0.4714, a_3=0.333$

### 1.2.1.2.b PLACEMENT DES POINTS

Les points extérieurs du plan simplexe sont disposés régulièrement sur la surface de l'hyper-sphère de rayon  $R$ .

	1	2	3	4	...	$k$	
Coordonnées des points du simplexe	1	$-a_1$	$-a_2$	$-a_3$	$-a_4$	...	$-a_k$
	2	$a_1$	$-a_2$	$-a_3$	$-a_4$	...	$-a_k$
	3	0	$2.a_2$	$-a_3$	$-a_4$	...	$-a_k$
	4	0	0	$3.a_3$	$-a_4$	...	$-a_k$
	5	0	0	0	$4.a_4$	...	$-a_k$
	$\vdots$						
	$k+1$	0	0	0	0	...	$k.a_k$

Avec  $a_i = \sqrt{\frac{k+1}{k \cdot i(i+1)}}$ .

A noter qu'il existe une infinité de façons de disposer  $k+1$  points sur une hyper-sphère de dimension  $k$ . La relation précédente donnant les  $a_i$  n'est qu'une solution particulière, et n'est donc pas unique.

### 1.2.1.2.c NOMBRE D'EXPERIENCES

Par définition, un simplexe est une forme à  $k+1$  sommets, dans un espace à  $k$  dimensions. Ainsi :

$$v_i = k+1$$

### 1.2.1.2.d REMARQUE

Les plans simplexe sont saturés par construction.

Pour  $k=2$  facteurs et  $N=3$ , à une rotation près, les plans simplexes et les plans équiradiaux se confondent.

## 1.2.1.3 Matrices factorielles (2 niveaux)

Se reporter au paragraphe précédent « Matrices factorielles complètes (2 niveaux) » pour leur description.

Les matrices factorielles 2 niveaux sont par nature idéales pour la réalisation de la technique du screening.

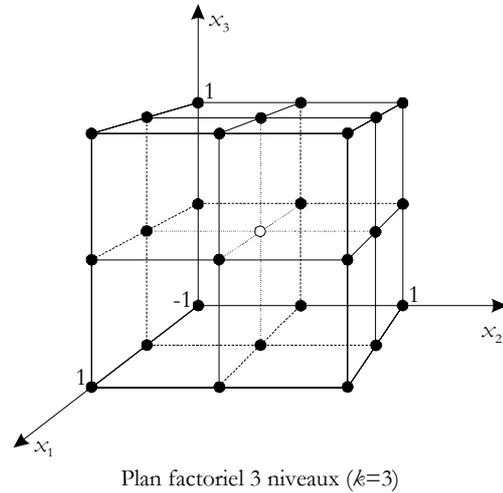
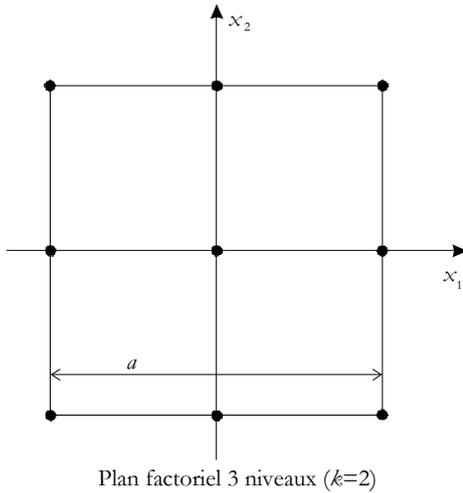
## *Principales matrices d'expériences*

Cependant, elles fournissent dans le même temps une modélisation (d'ordre 1 au maximum) pouvant être exploitée.

### **1.2.2. Matrices pour modèles du second degré**

#### **1.2.2.1 Matrices factorielles (3 niveaux)**

##### *1.2.2.1.a REPRESENTATIONS*



##### *1.2.2.1.b PLACEMENT DES POINTS*

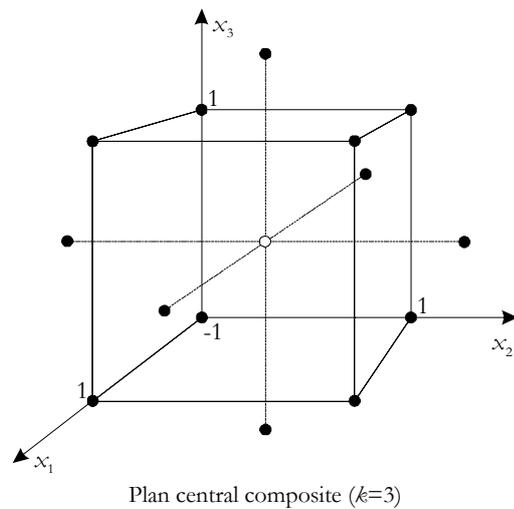
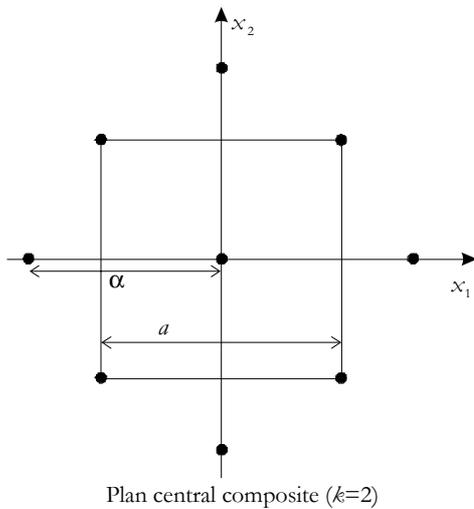
Chaque facteur prend 3 niveaux (-1, 0 et 1). La matrice d'expériences est donc l'écriture de toutes les combinaisons possibles des 3 niveaux pris par les  $k$  facteurs.

##### *1.2.2.1.c NOMBRE D'EXPERIENCES*

$$v_{j \in \mathbb{N}} = 3^k$$

#### **1.2.2.2 Matrices centrales - composites**

##### *1.2.2.2.a REPRESENTATIONS*



## Principales matrices d'expériences

### 1.2.2.2.b PLACEMENT DES POINTS

Les matrices centrales composites sont en réalité la réunion de 3 séries de points :

- les expériences d'un plan factoriel complet ou fractionnaire à 2 niveaux par facteur ;
- les expériences dites axiales (ou points axiaux) car placées sur les  $k$  axes propres au plan ; leurs coordonnées sont alors  $(\pm\alpha, 0, 0, \dots, 0)$ ,  $(0, \pm\alpha, 0, \dots, 0)$ , ...,  $(0, 0, 0, \dots, \pm\alpha)$  ;
- une ou des expériences au point central (origine du repère lié au plan).

La valeur du paramètre  $\alpha$  est calculée afin de conférer des propriétés intéressantes à la matrice centrale composite. Il en est de même avec la valeur du facteur de réduction  $r$ , pour la définition du plan factoriel fractionnaire.

Le tableau suivant reprend les calculs menés dans l'ouvrage [Droesbeke 97]. Il donne les valeurs de  $\alpha$ ,  $r$  ainsi que le nombre de répétitions du point central, dans les principaux cas.

Pour ce dernier paramètre, plusieurs valeurs sont possibles, suivant que l'on privilégie le respect de :

- l'isovariance par rotation et de la presque orthogonalité ;
- la précision uniforme.

$k$		2	3	4	5	5	6	6
$r$		0	0	0	1	0	1	0
$\alpha$		1.414	1.682	2	2	2.378	2.378	2.828
$N_0$	<i>Orth.</i>	5	7	0	0	0	0	0
	<i>Préc. unif.</i>	5	6	7	6	10	9	15

Les valeurs de  $\alpha$  ont été calculées comme étant égales à  $\alpha = 2^{\frac{k-r}{4}}$ .

### 1.2.2.2.c NOMBRE D'EXPERIENCES

S'il y a utilisation d'un plan factoriel complet :

$$v_{\alpha} = 1 + 2 \cdot k + 2^k$$

Dans le cas où un plan factoriel fractionnaire est employé :

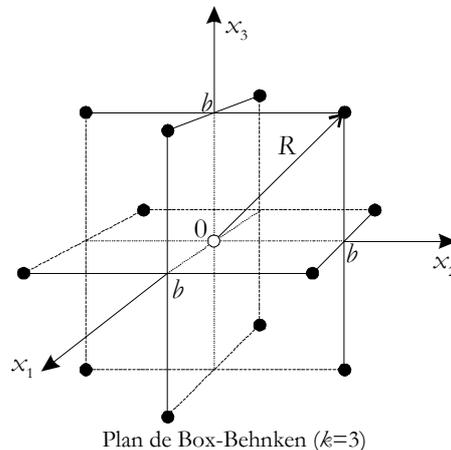
$$v_{\alpha} = 1 + 2 \cdot k + 2^{k-r}$$

### 1.2.2.2.d PROPRIETES

Ces plans permettent de construire des modèles valides d'ordre 2 à partir de plans factoriels initiaux. Ils offrent donc la possibilité de réaliser l'étude de RSM après celle de screening en récupérant entièrement les points utilisés lors de la première étude.

### 1.2.2.3 Matrices de Box-Behnken

#### 1.2.2.3.a REPRESENTATIONS



## *Principales matrices d'expériences*

### 1.2.2.3.b PLACEMENT DES POINTS

Les matrices de Box-Behnken sont caractérisées par le nombre fixe de valeurs différentes prises par chaque facteur : 3. Par la suite, les différents niveaux seront alors notés  $(-b, 0, b)$ .

De telles matrices sont construites à partir de matrices factorielles complètes, auxquelles des blocs incomplets équilibrés sont ajoutés. A noter également la présence de point(s) au centre.

La construction des matrices de Box-Behnken n'étant pas figée, pour une valeur de  $k$  à une autre, les coordonnées des points d'expériences sont tabulées pour chacune de ces configurations.

$x_1$	$x_2$	$x_3$
$\pm b$	$\pm b$	0
$\pm b$	0	$\pm b$
0	$\pm b$	$\pm b$
0	0	0

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
$\pm b$	$\pm b$	0	0
0	0	$\pm b$	$\pm b$
$\pm b$	0	0	$\pm b$
0	$\pm b$	$\pm b$	0
$\pm b$	0	$\pm b$	0
0	$\pm b$	0	$\pm b$
0	0	0	0

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$
$\pm b$	$\pm b$	0	0	0
0	0	$\pm b$	$\pm b$	0
0	$\pm b$	0	0	$\pm b$
$\pm b$	0	$\pm b$	0	0
0	0	0	$\pm b$	$\pm b$
0	$\pm b$	$\pm b$	0	0
$\pm b$	0	0	$\pm b$	0
0	$\pm b$	0	0	$\pm b$
$\pm b$	0	0	0	$\pm b$
0	$\pm b$	0	$\pm b$	0
0	0	0	0	0

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$
$\pm b$	$\pm b$	0	$\pm b$	0	0
0	$\pm b$	$\pm b$	0	$\pm b$	0
0	0	$\pm b$	$\pm b$	0	$\pm b$
$\pm b$	0	0	$\pm b$	$\pm b$	0
0	$\pm b$	0	0	$\pm b$	$\pm b$
$\pm b$	$\pm b$	0	0	0	$\pm b$
0	0	0	0	0	0

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$	$x_7$
0	0	0	$\pm b$	$\pm b$	$\pm b$	0
$\pm b$	0	0	0	0	$\pm b$	$\pm b$
0	$\pm b$	0	0	$\pm b$	0	$\pm b$
$\pm b$	$\pm b$	0	$\pm b$	0	0	0
0	0	$\pm b$	$\pm b$	0	0	$\pm b$
$\pm b$	0	$\pm b$	0	$\pm b$	0	0
0	$\pm b$	$\pm b$	0	0	$\pm b$	0
0	0	0	0	0	0	0

Les matrices précédentes sont toutes supposées comporter des répétitions de l'expérience au point central  $(0, 0, \dots, 0)$ . Le tableau ci-dessous indique le nombre d'expériences répétées en ce point à réaliser en théorie, pour les différentes valeurs de  $k$ .

$k$	3	4	5	6	7
Nombre d'expériences au point central	3	3	6	6	6

### 1.2.2.3.c NOMBRE D'EXPERIENCES

En ne prenant qu'un point au centre, le nombre d'expériences nécessaires à la réalisation d'un plan de Box-Behnken pour  $k$  facteurs est donné ci-après.

$k$	3	4	5	6	7
$v_{bb}$	13	25	41	49	57

### 1.2.2.3.d PROPRIETES

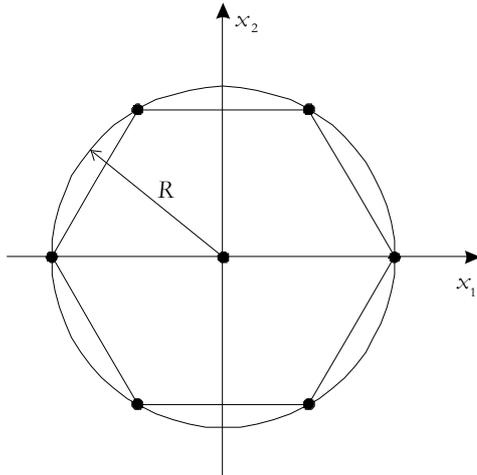
Tous les points sont en définitive placés sur la surface d'une hyper-sphère de rayon constant  $R$ . Celui-ci est différent pour les différentes matrices vues plus haut. Le tableau suivant donne sa valeur.

$k$	3	4	5	6	7
$R$		$b\sqrt{2}$		$b\sqrt{3}$	

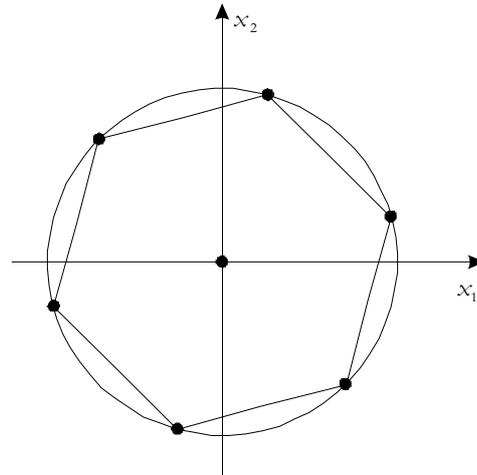
# Principales matrices d'expériences

## 1.2.2.4 Matrices de Doehlert

### 1.2.2.4.a REPRESENTATIONS



Plan de Doehlert de type 1



Plan de Doehlert de type 3

### 1.2.2.4.b PLACEMENT DES POINTS

La construction des plans de Doehlert – ou *réseaux de Doehlert* – se réalise par l'utilisation d'une matrice  $\mathbf{S}$  de coordonnées de points (dite *simplexe*), pour une valeur donnée de  $k$ .

Les coordonnées des points du plan sont alors calculées par soustraction de toutes les lignes du simplexe entre elles, 2 à 2, par toutes les combinaisons possibles.

Pour les matrices d'expériences de Doehlert de type 1, les éléments du simplexe pour  $k$  facteurs se calculent par les relations suivantes.

$$S(m,i) = \begin{cases} 0 & m \leq k \\ \sqrt{\frac{i+1}{2 \cdot i}} & m = k+1 \\ \frac{1}{\sqrt{2 \cdot i \cdot (i+1)}} & m \geq k+2 \end{cases}$$

Pour les premières valeurs de  $k$ , les valeurs des éléments de  $\mathbf{S}$  sont données ci-après.

		$k$					
		$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$
Coordonnées des points du simplexe	1	0	0	0	0	0	0
	2	1	0	0	0	0	0
	3	0.5	0.866	0	0	0	0
	4	0.5	0.289	0.816	0	0	0
	5	0.5	0.289	0.204	0.791	0	0
	6	0.5	0.289	0.204	0.158	0.775	0
	7	0.5	0.289	0.204	0.158	0.129	0.764

Les matrices de Doehlert de type 3 se calculent par :

$$S(m,i) = \begin{cases} 0 & m = 1 \\ \frac{k-1 + \sqrt{k+1}}{k \cdot \sqrt{2}} & m = i+1 \\ \frac{\sqrt{k+1} - 1}{k \cdot \sqrt{2}} & m \neq i+1 \end{cases}$$

## *Principales matrices d'expériences*

Pour les premières valeurs de  $k$ , nous avons :

$k$	2	3	4	5	6
$\frac{k-1+\sqrt{k+1}}{k\sqrt{2}}$	0.9659	0.9428	0.9256	0.9121	0.9011
$\frac{\sqrt{k+1}-1}{k\sqrt{2}}$	0.2588	0.2357	0.2185	0.2050	0.1940

Les matrices simplexe  $S$  sont de dimensions  $[(k+1) \times k]$ .

### 1.2.2.4.c NOMBRE D'EXPERIENCES

$$v_D = 1 + k + k^2$$

Il est important de remarquer que pour tout  $k \in \mathbf{N} - \{0,1\}$  :

$$v(k,2) \leq v_D < v(k,3)$$

Ce qui implique que les plans de Doehlert permettent de calculer des modèles polynomiaux d'ordre  $\sigma=2$  au maximum. De plus, il est toujours possible de calculer un modèle d'ordre  $\sigma=2$  grâce à un plan de Doehlert.

### 1.2.2.5 Matrices hybrides

Les matrices hybrides ne sont définies que pour certaines valeurs de  $k$  : 3, 4 et 6. Les meilleures sont données dans ce qui suit. Leur notation classique est  $kN_j$ , où  $j$  est une lettre afin de différencier les matrices ayant même  $k$  et  $N$ .

$x_1$	$x_2$	$x_3$
0	0	2
0	0	-2
-1.414	-1.414	1
1.414	-1.414	1
-1.414	1.414	1
1.414	1.414	1
-2	0	-1
2	0	-1
0	-2	-1
0	2	-1
0	0	0

Matrice 311A

$x_1$	$x_2$	$x_3$
0	0	2.449
0	0	-2.449
-0.751	-2.106	-1
0.751	-2.106	1
-0.751	2.106	1
0.751	2.106	-1
-2.106	-0.751	1
2.106	-0.751	-1
-2.106	0.751	-1
2.106	0.751	1
0	0	0

Matrice 311B

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
0	0	0	1.732
0	0	0	-0.269
-1	-1	-1	0.605
1	-1	-1	0.605
-1	1	-1	0.605
1	1	-1	0.605
-1	-1	1	0.605
1	-1	1	0.605
-1	1	1	0.605
1	1	1	0.605
-1.518	0	0	-1.05
1.518	0	0	-1.05
0	-1.518	0	-1.05
0	1.518	0	-1.05
0	0	-1.518	-1.05
0	0	1.518	-1.05

Matrice 416B

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$
0	0	0	1.765
-1	-1	-1	0.568
1	-1	-1	0.568
-1	1	-1	0.568
1	1	-1	0.568
-1	-1	1	0.568
1	-1	1	0.568
-1	1	1	0.568
1	1	1	0.568
-1.47	0	0	-1.051
1.47	0	0	-1.051
0	-1.47	0	-1.051
0	1.47	0	-1.051
0	0	-1.47	-1.051
0	0	1.47	-1.051
0	0	0	0

Matrice 416C

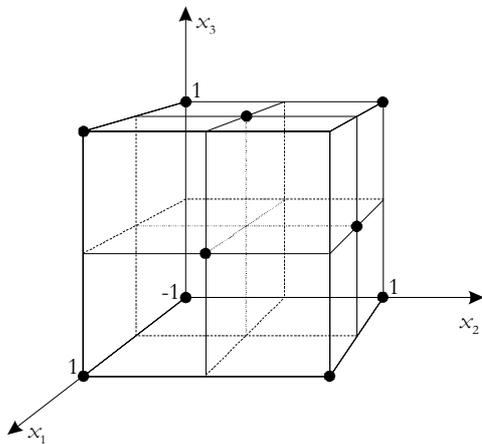
## *Principales matrices d'expériences*

$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_4$	$x_5$	$x_6$
0	0	0	0	0	2.309
-1	-1	-1	-1	-1	0.577
1	-1	-1	-1	1	0.577
-1	1	-1	-1	1	0.577
1	1	-1	-1	-1	0.577
-1	-1	1	-1	1	0.577
1	-1	1	-1	-1	0.577
-1	1	1	-1	-1	0.577
1	1	1	-1	1	0.577
-1	-1	-1	1	1	0.577
1	-1	-1	1	-1	0.577
-1	1	-1	1	-1	0.577
1	1	-1	1	1	0.577
-1	-1	1	1	-1	0.577
1	-1	1	1	1	0.577
-1	1	1	1	1	0.577
1	1	1	1	-1	0.577
-2	0	0	0	0	-1.155
2	0	0	0	0	-1.155
0	-2	0	0	0	-1.155
0	2	0	0	0	-1.155
0	0	-2	0	0	-1.155
0	0	2	0	0	-1.155
0	0	0	-2	0	-1.155
0	0	0	2	0	-1.155
0	0	0	0	-2	-1.155
0	0	0	0	2	-1.155
0	0	0	0	0	0

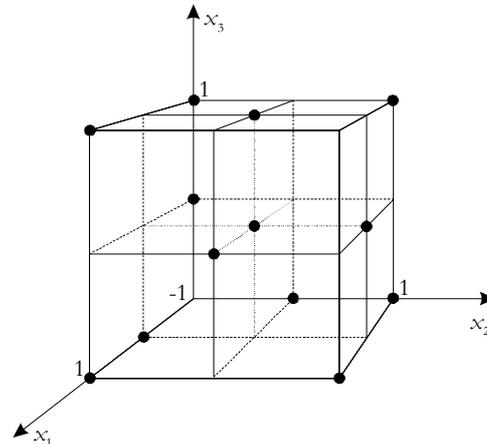
Matrice 628A

### 1.2.2.6 Matrices de Hoke

#### 1.2.2.6.a REPRESENTATIONS



Plan de Hoke, type D1 ( $k=3$ )



Plan de Hoke, type D7 ( $k=3$ )

#### 1.2.2.6.b PLACEMENT DES POINTS

Les matrices de Hoke sont des simplifications des matrices factorielles à 3 niveaux par facteur. Elles en sont donc issues.

De telles matrices sont construites par regroupement de blocs (notés  $S_{ij}$ ), c'est-à-dire d'ensembles de points.

Le bloc  $S_{ij}$  est l'ensemble des points de la matrice factorielle 3 niveaux, tels que (dans le même temps) :

- $i$  valeurs de chacune des coordonnées soient non nulles ;
- $j$  valeurs de chacune des coordonnées soient positives.

## Principales matrices d'expériences

Ces blocs sont eux-mêmes regroupés en 4 classes, en fonction du nombre d'expériences qu'ils comprennent.

Classes	Blocs	Nombre d'expériences des blocs
C1	$S_{k(0)}, S_{0(0)}, S_{k(k)}$	1
C2	$S_{1(0)}, S_{1(1)}, S_{k-1(0)}, S_{k-1(k-1)}, S_{k(1)}, S_{k(k-1)}$	$k$
C3	$S_{2(0)}, S_{2(2)}, S_{k-2(0)}, S_{k-2(k-2)}, S_{k(2)}, S_{k(k-2)}$	$k \cdot (k-1) / 2 \quad (= v(k,2) - 1 - 2 \cdot k)$
C4	$S_{3(0)}, S_{3(3)}, S_{k-3(0)}, S_{k-3(k-3)}, S_{k(3)}, S_{k(k-3)}$	$k \cdot (k-1) \cdot (k-2) / 6$

Les matrices proposées par Hoke sont alors des regroupements de blocs, dans la perspective d'obtenir un nombre total d'expériences égal à  $v(k,2)$  (nombre minimal d'expériences à réaliser pour pouvoir calculer un modèle du second ordre) au minimum.

Ces matrices sont notées de D1 à D7.

Matrice	Blocs et classes concernés		
	C1	C2	C3
D1	1	$S_{k(k-1)}, S_{1(1)}$	$S_{k(2)}$
D2	1	$S_{k(k-1)}, S_{1(0)}$	$S_{k(2)}$
D3	0	$S_{k(k-1)}, S_{k-1(1)}$	$S_{k(2)}$
D4	1	$S_{k(k-1)}, S_{1(1)}, S_{1(0)}$	$S_{k(2)}$
D5	1	$S_{k(k-1)}, S_{1(1)}, S_{k-1(0)}$	$S_{k(2)}$
D6	1	$S_{k(k-1)}, S_{1(0)}, S_{k-1(k-1)}$	$S_{k(2)}$
D7	0	$S_{k(k-1)}, S_{k-1(1)}, S_{1(1)}$	$S_{k(2)}$

### 1.2.2.6.c NOMBRE D'EXPERIENCES

Les plans D1, D2 et D3 sont construits tels que :

$$v_b = v(k,2) = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

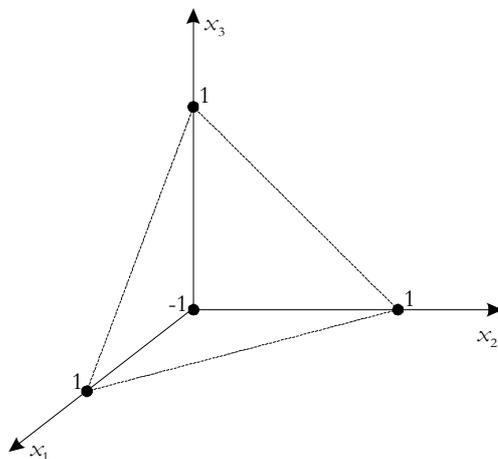
Quant aux plans D4, D5, D6 et D7, ils sont tels que :

$$v_b = v(k,2) + k = \frac{2 + 5 \cdot k + k^2}{2}$$

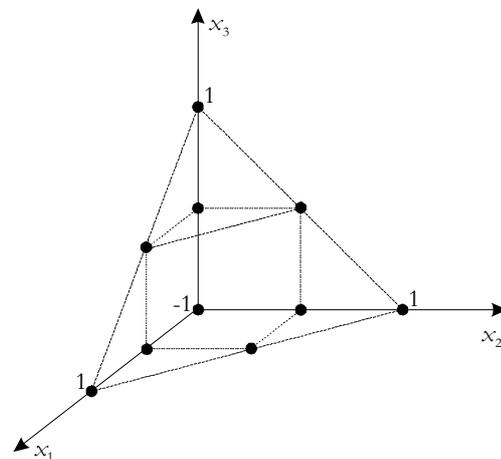
## 1.2.3. Matrices pour modèles de degré supérieur

### 1.2.3.1 Matrices de Koshal

#### 1.2.3.1.a REPRESENTATIONS



Plan de Koshal,  $k=3, o=1$



Plan de Koshal,  $k=3, o=2$

## Principales matrices d'expériences

### 1.2.3.1.b PLACEMENT DES POINTS

Le placement des points des matrices de Koshal est en réalité déduit de l'écriture du modèle polynomial que l'on veut calculer par la réalisation de ce plan.

Pour définir des telles matrices, il faut alors connaître le nombre de facteurs considérés ( $k$ ) ainsi que l'ordre du modèle polynomial visé ( $o$ ).

Chaque expérience peut alors être rattachée à un monôme particulier du modèle à calculer.

Par exemple, pour  $k=3$ , le terme  $x_3^3$  renvoie à l'expérience au point  $[0 \ 0 \ 3]$ , le terme  $x_1 x_2^2$  à  $[1 \ 2 \ 0]$ , etc. Le terme traduisant la moyenne est donc associé au point origine des axes de référence  $[0 \ 0 \ 0]$ .

Ainsi, pour des modèles d'ordre 1, le placement des points peut être résumé de la manière qui suit :

		Nombre de facteurs ( $k$ )				
		1	2	...	$k-1$	$k$
Coordonnées des points	1	0	0	...	0	0
	2	1	0	...	0	0
	3	0	1	...	0	0
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$
	$k$	0	0	...	1	0
	$k+1$	0	0	...	0	1

Pour les modèles d'ordre 2, cela devient:

		$k$						Nb. exp.	
		1	2	3	...	$k-2$	$k-1$		$k$
Coordonnées des points	0	0	0	0	...	0	0	0	1
	1	0	0	0	...	0	0	0	$k$
	0	1	0	0	...	0	0	0	
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
	0	0	0	0	...	0	1	0	
	0	0	0	0	...	0	0	1	$k$
	2	0	0	0	...	0	0	0	
	0	2	0	0	...	0	0	0	
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
	0	0	0	0	...	0	2	0	$C_k^2$
	0	0	0	0	...	0	0	2	
	1	1	0	0	...	0	0	0	
	1	0	1	0	...	0	0	0	
	0	1	1	0	...	0	0	0	$C_k^2$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
0	0	0	0	...	1	1	0		
0	0	0	0	...	1	0	1		
0	0	0	0	...	0	1	1	1	

La dernière partie de ce tableau correspond donc aux combinaisons de 2 éléments (en raison de l'ordre  $o=2$ ) parmi  $k$  éléments.

### 1.2.3.1.c NOMBRE D'EXPERIENCES

Par définition, les plans de Koshal de paramètres  $k$  et  $o$  ont autant d'expériences qu'un modèle polynomial de degré  $o$ , à  $k$  facteurs.

$$|V_k| = V(k, o)$$

## *Principales matrices d'expériences*

Vu le placement des points, on reconnaît ici  $v_k$  comme étant un nombre dit « pyramidal », et plus précisément « tétraédrique ».

### 1.3. Matrices d'expériences mixtes

On qualifie par « mixtes » les matrices d'expériences pouvant être utilisées à la fois pour réaliser des analyses de screening et calculer des surfaces de réponse.

Le placement des points d'expériences permet en effet de considérer le DE comme une juxtaposition de sous-domaines contigus dans lesquels sont réalisés :

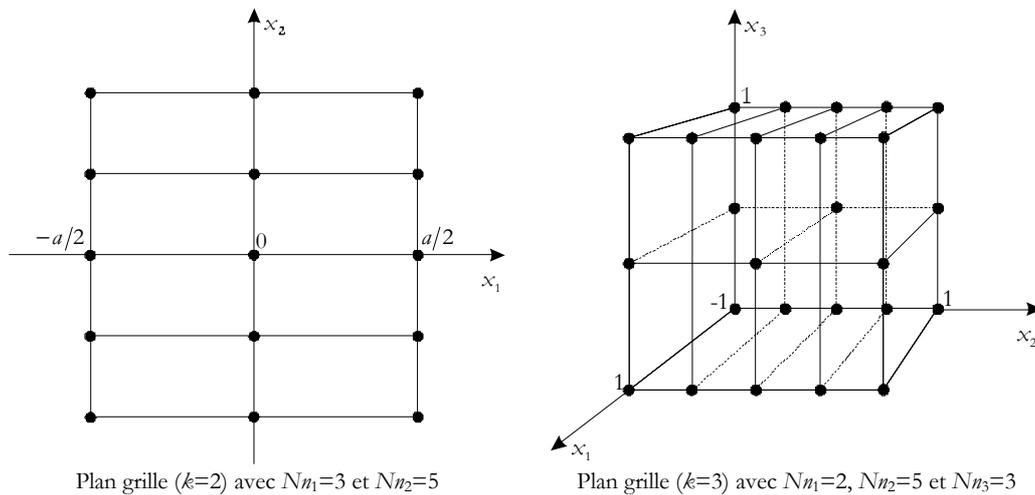
- des plans factoriels complets (globalement cela définit des matrices grilles) ;
- des plans fractionnaires (ce sont alors des matrices treillis qui sont définies).

D'un autre point de vue, la totalité des expériences peut être utilisée pour le calcul de surfaces de réponse. Si celles-ci sont des relations polynomiales, leur ordre est alors fonction du nombre de niveaux pris par chaque facteur.

#### 1.3.1. Matrices grilles

Les matrices grilles sont des extensions des matrices factorielles complètes. Le nombre de niveaux par facteur ( $Nn_i$ ) est ici un paramètre fixé par l'expérimentateur.

##### 1.3.1.1 Représentations



##### 1.3.1.2 Placement des points

Les valeurs des  $Nn_i$  niveaux d'un facteur  $i$  se déduisent par :  $-1 + 2 \cdot \frac{i-1}{Nn_i-1}$  ( $i=1,2,\dots,Nn_i$ ).

Les coordonnées des points du plan grille sont alors formées par toutes les combinaisons possibles entre les niveaux pris par les  $k$  facteurs.

##### 1.3.1.3 Nombre d'expériences

$$v_g = \prod_{i=1}^k Nn_i$$

Avec les  $Nn_i$  désignant le nombre de niveaux distincts pris par le facteur  $i$ .

##### 1.3.1.4 Remarques

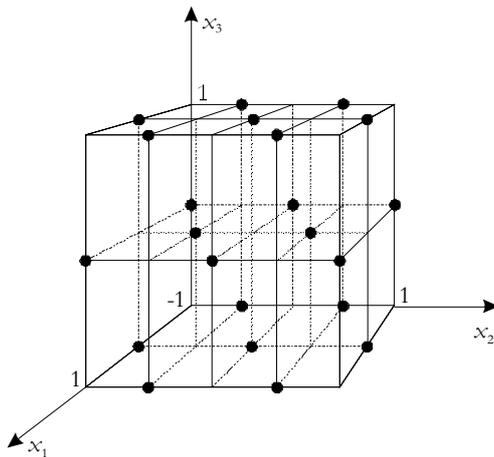
Lorsque tous les  $Nn_i$  valent 2 (ou 3), on retrouve la définition des plans factoriels à 2 niveaux (ou 3 niveaux respectivement) par facteur, présentés plus haut.

**1.3.2. Matrices treillis**

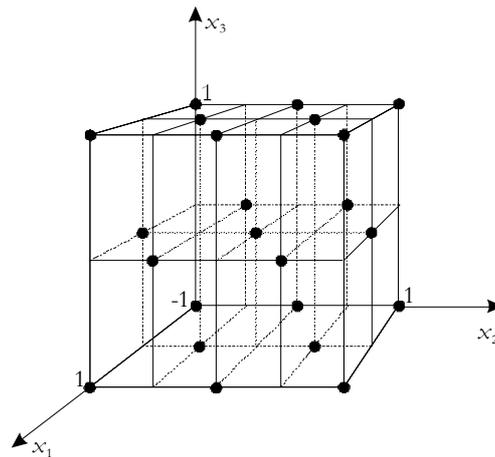
Le placement des points dans le domaine d'étude, adopté principalement par la première méthode exhaustive, peut être considéré comme une généralisation de celui pris par les matrices factorielles fractionnaires.

Dans ce contexte, il a été défini un nouveau type de matrice d'expériences, les *matrices treillis*, dont les points sont disposés dans le DE suivant la méthode détaillée lors de la présentation de la méthode d'optimisation par plans factoriels (Chapitre 2, §3.4.1.1. ). Il est conseillé de s'y reporter pour accéder à leur description complète.

**1.3.2.1 Représentations**



Plan treillis ( $k=3$ ) avec  $N_{n_1}=3, N_{n_2}=5, N_{n_3}=3$   
générateurs utilisés :  $I=abc - (N=22)$



Plan treillis ( $k=3$ ) avec  $N_{n_1}=3, N_{n_2}=5, N_{n_3}=3$   
générateurs utilisés :  $I=-abc - (N=23)$

**1.3.2.2 Placement des points**

Cet aspect est détaillé dans le second chapitre, au paragraphe 3.4.1.1. .

**1.3.2.3 Nombre d'expériences**

On rappelle ici les résultats établis au chapitre 2, en utilisant les notations courantes. Une estimation du nombre d'expériences peut être donnée par la relation suivante :

$$v_t \approx \frac{v_g}{2^r} = \frac{1}{2^r} \cdot \prod_{i=1}^k N_{n_i}$$

$v_t$  est la valeur exacte lorsque  $\sum_{i=1}^k (N_{n_i} - 1)$  est impair.

La relation précédente ne donne qu'une approximation du nombre réel d'expériences de tels plans. Les 2 figures ci-dessus font de plus apparaître la variabilité de  $v_t$  relativement à la définition des générateurs indépendants du plan fractionnaire utilisé pour former le plan de base.

De là, à défaut de pouvoir calculer simplement la valeur de  $v_t$ , il est possible de spécifier un encadrement, c'est-à-dire d'indiquer ses limites inférieure et supérieure de variation étant donné toutes les définitions possibles de la matrice fractionnaire utilisée pour former le plan de base (se reporter au paragraphe 1 de la partie Tables).

**1.3.2.4 Remarques**

Un plan treillis pour lequel tous les  $N_{n_i}$  sont égaux à 2 est réduit à son plan de base ; il s'agit alors d'un plan fractionnaire « classique » tel que décrit dans le premier chapitre.

## 2. Configurations de récupération de points entre plans

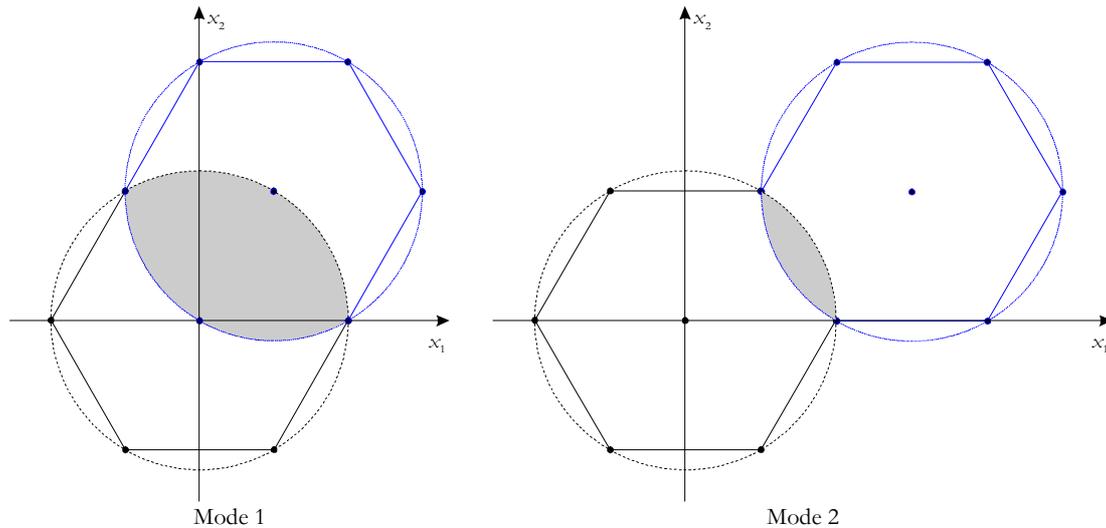
Les notations utilisées dans cette annexe sont présentées au début du Chapitre 2.

Les 2 parties considérées font apparaître la différence entre les cellules homogènes et hétérogènes vis-à-vis de la taille des plans. Dans tous les cas, les plans d'une même cellule seront supposés être du même type.

### 2.1. Plans de même taille

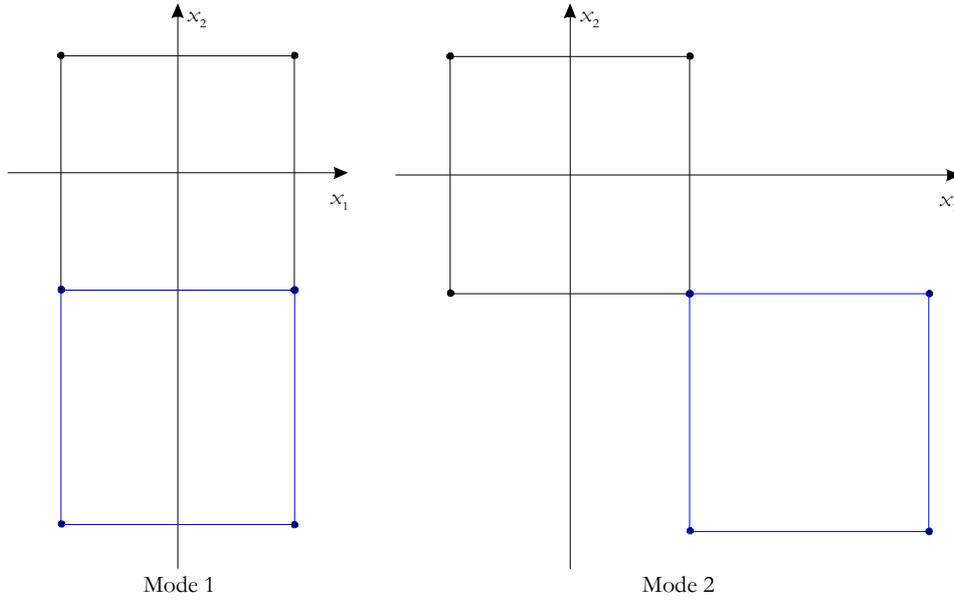
Type de plan	Mode	$N_r$	$N_g$	$N_{conf}$	$V_c$	$V_g$	$d_{max}$
Doehlert D-1 – D-3	1	$2.k$	$2.(1+k+k^2) - 2.k$	$k.(1+k)$	$v_k$ (conf. 1)	$2.V_{\text{split}}(k, R) - V_c$	3.R
	2	$k$	$2.k^2 + k + 2$	Nombre de faces hyper-triangulaires	$v_k$ (conf. 2)	$2.V_{\text{split}}(k, R) - V_c$	$R.(2+\sqrt{3})$
Factoriel complet $N_{\text{vi}}=2$	1	$2^{k-1}$	$3.2^{k-1}$	Nombre de faces $2.k$	0	$2.(a^k)$	$2.a$
	2	$2^{k-2}$	$7.2^{k-2}$	Nombre d'arêtes $k.2^{k-1}$	0	$2.(a^k)$	$2.a.\sqrt{k}$
Factoriel complet $N_{\text{vi}}=3$	1	$2^k$	$2.(3^k - 2^{k-1})$	Nombre de sommets $2^k$	$(a/2)^k$	$(a/2)^k.(2^{k+1} - 1)$	$3.a.\sqrt{k}/2$
	2	$2.3^{k-1}$	$4.3^{k-1}$	Nombre de faces $2.k$	$a^k/2$	$3.a^k/2$	$3.a/2$
	3	$3^{k-1}$	$5.3^{k-1}$	Nombre de faces $2.k$	0	$2.(a^k)$	$2.a$
	4	$3^{k-2}$	$17.3^{k-2}$	Nombre d'arêtes $k.2^{k-1}$	0	$2.(a^k)$	$2.a.\sqrt{k}$
Central Composite	1	$2^{k-1}$	$2.(1+3.2^{k-2} + 2.k)$	Nombre de faces $2.k$	$v_k$ (conf. 3)	$2.V_{\text{split}}(k, R) - V_c$	$2.R.(1+1/\sqrt{k})$
	2	2	$4.(2^{k-1} + k)$	Nombre de faces $2.k$	$v_k$ (conf. 1)	$2.V_{\text{split}}(k, R) - V_c$	3.R
Factoriel fractionnaire		$2^{k-r-1}$	$3.2^{k-r-1}$	Nombre de faces $2.k$	0	$2.(a^k)$	$2.a$

#### 2.1.1. Plans de Doehlert

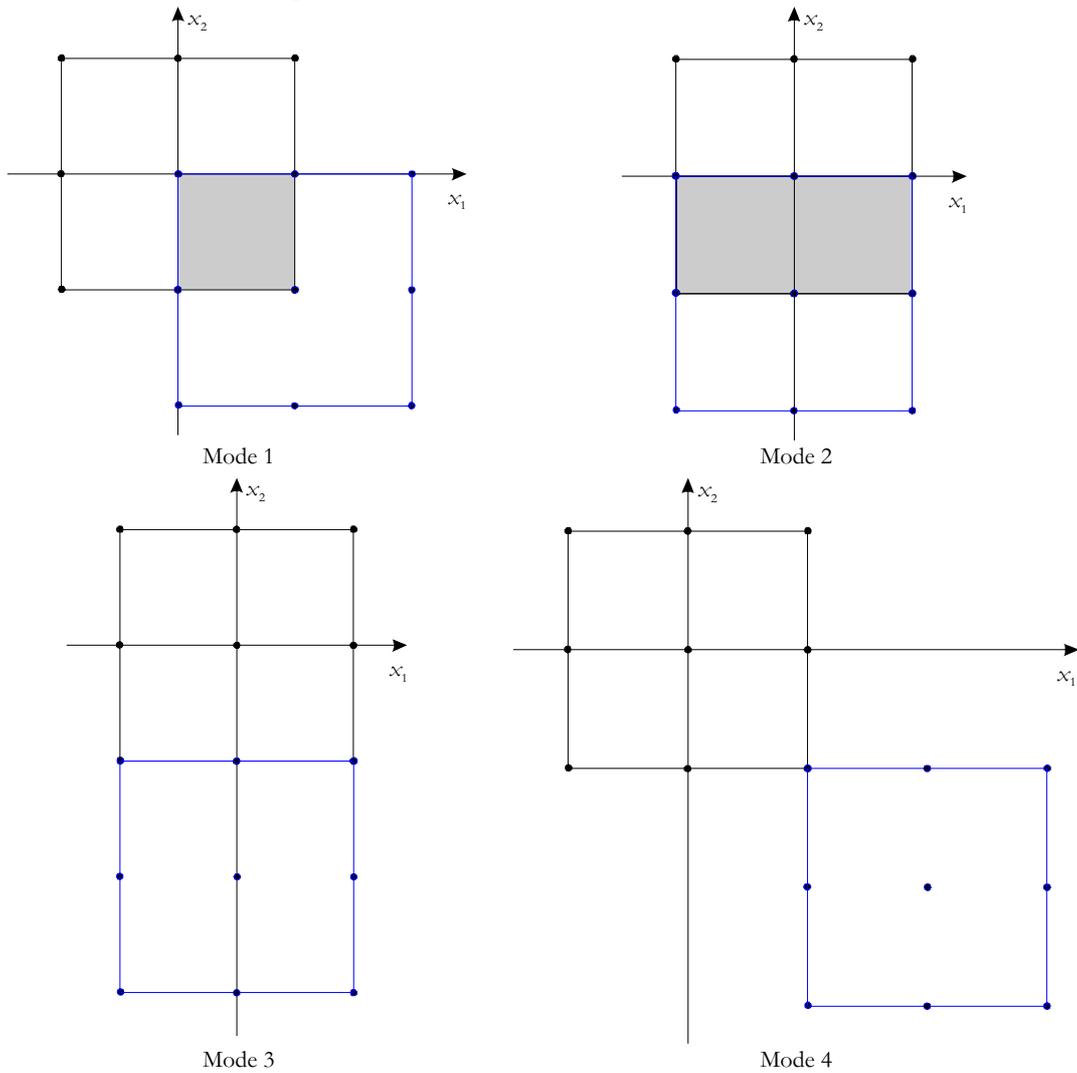


# Récupération de points entre plans

## 2.1.2. Plans factoriels complets 2 niveaux

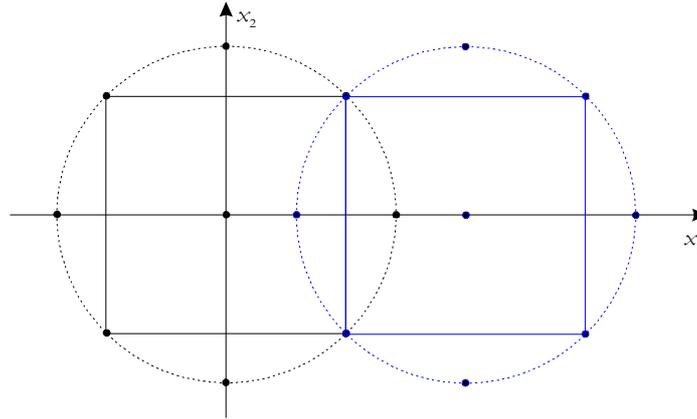


## 2.1.3. Plans factoriels complets 3 niveaux



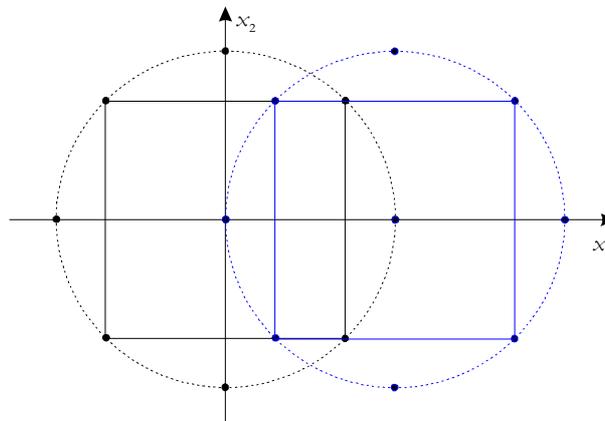
# Récupération de points entre plans

## 2.1.4. Plans Centraux-Composites



Mode 1

Lorsque  $\alpha = 2$ , il y a partage de 2 points supplémentaires entre les 2 plans.



Mode 2

## 2.1.5. Plans factoriels fractionnaires

Les paragraphes précédents se sont concentrés sur la récupération de points entre plans de RSM. Cet avantage peut être également être exploité avec des plans de screening, et en particulier avec les plans factoriels.

La récupération optimale de points entre plans fractionnaires a été détaillée au paragraphe 3.4.1.1. du second chapitre, lors de la présentation de la première méthode d'optimisation exhaustive utilisant les plans d'expériences.

Les plans treillis utilisent cette stratégie de récupérations de points comme principe de positionnement des expériences. Ces plans sont décrits dans l'Annexe 1 (§1.3.2. 2).

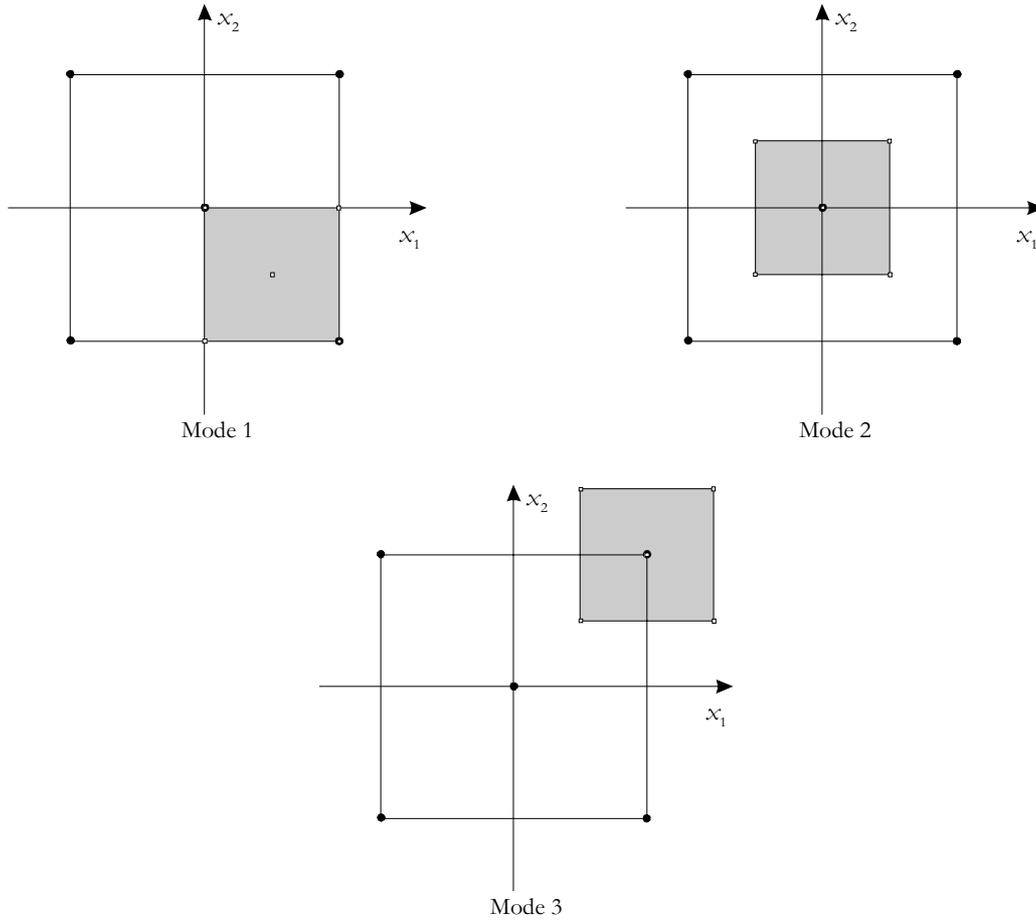
## 2.2. Plans de tailles différentes

Certaines configurations de récupération de points mettent en jeu des plans de même type, mais de tailles différentes. Elles se rencontrent typiquement dans les processus d'optimisation par zooms successifs.

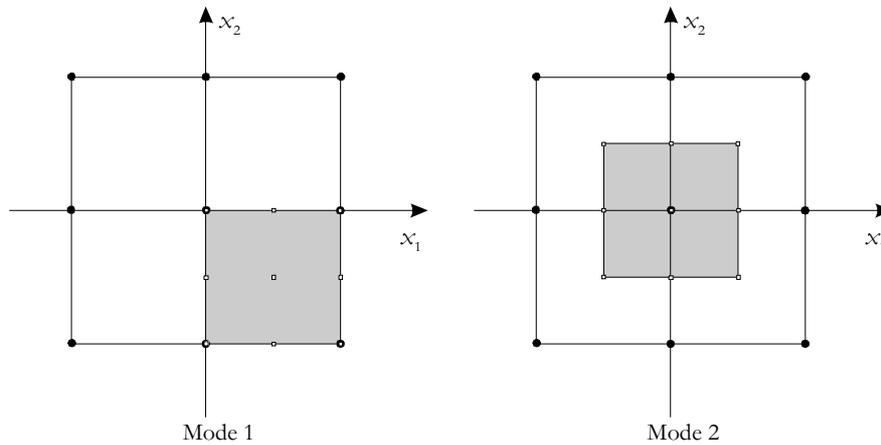
Type de plan	Mode	$N_r$	$N_g$	$N_{conf}$	$V_c$	$V_g$	$d_{max}$
Factoriel complet $N_{vi}=2$ 1 point au centre	1	2	$2^{k+1}$	$2 \cdot k$	$(a/2)^k$	$a^k$	$a \cdot \sqrt{k}$
	2	1	$2^{k+1}+1$	1	$(a/2)^k$	$a^k$	$a \cdot \sqrt{k}$
	3	1	$2^{k+1}+1$	$2^k$	$(a/4)^k$	$(a/4)^k \cdot (4^k + 2^k - 1)$	$5 \cdot a \cdot \sqrt{k} / 4$
Factoriel complet $N_{vi}=3$	1	$2^k$	$2(3^k - 2^{k-1})$	$2 \cdot k$	$(a/2)^k$	$a^k$	$a \cdot \sqrt{k}$
	2	1	$2 \cdot 3^k - 1$	1	$(a/2)^k$	$a^k$	$a \cdot \sqrt{k}$
	3	1	$2 \cdot 3^k - 1$	$3^k$	$(a/4)^k$	$(a/4)^k \cdot (4^k + 2^k - 1)$	$5 \cdot a \cdot \sqrt{k} / 4$

# Récupération de points entre plans

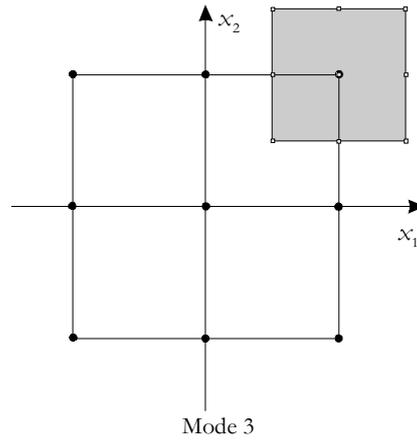
## 2.2.1. Plans factoriels complets 2 niveaux – 1 point au centre



## 2.2.2. Plans factoriels complets 3 niveaux



## Récupération de points entre plans

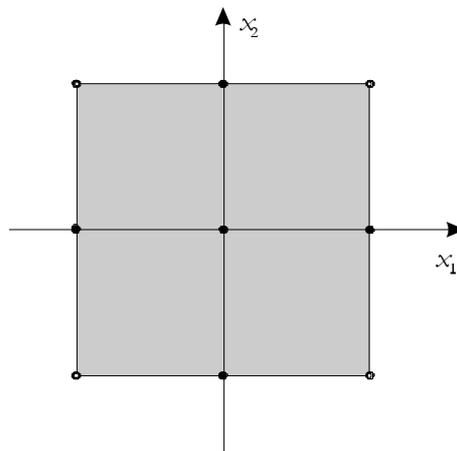


### 2.3. Plans de caractéristiques différentes

Nous donnons le cas le plus courant de récupération de points entre plans de même type, mais de caractéristiques de construction différentes. Cela concerne les plans grilles dans leur acception générale, pour lesquels les nombres de niveaux par facteurs diffèrent entre les 2 plans.

Ce cas de figure se rencontre notamment lorsque sont considérés simultanément sur la même partie de domaine, un plan factoriel à 2 niveaux et un second à 3 niveaux par facteur.

Type de plan	$N_r$	$N_g$	$N_{conf}$	$V_c$	$V_g$	$d_{max}$
Factoriels complets $N_{m1}=2$ et $N_{m2}=3$	$2^k$	$3^k$	1	$a^k$	$a^k$	$a \cdot \sqrt{k}$



## 3. Outils associés aux modèles polynomiaux

---

Dans cette partie sont présentés les principaux outils mathématiques utilisés en relation avec les modèles polynomiaux des fonctions objectifs.

### 3.1. Analyse canonique

On rappelle l'écriture matricielle des polynômes du second ordre :

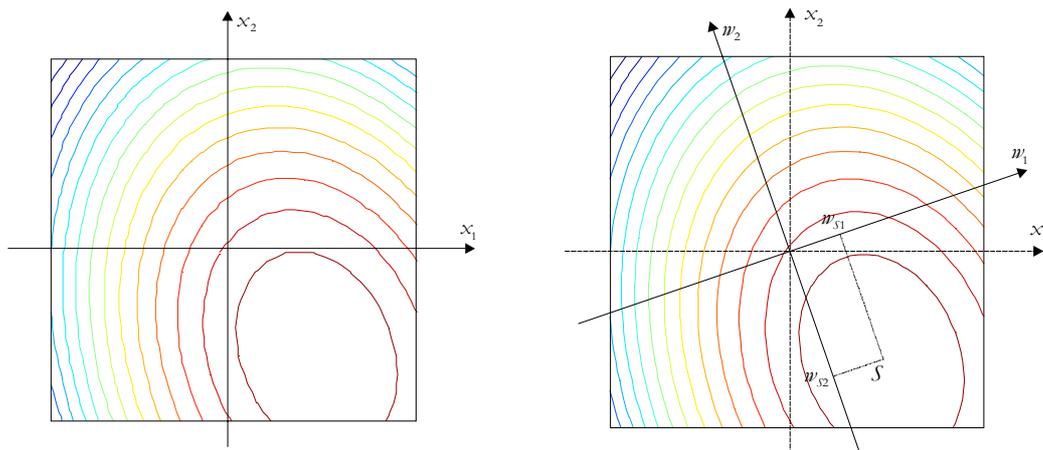
$$J_{\text{mod}} = b_0 + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{b} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}$$

Une importante simplification peut y être apportée si les modèles correspondants sont vus d'un repère particulier, translaté et tourné relativement au repère général originel fixe.

Typiquement, l'analyse canonique est composée de 2 étapes qui permettent d'aboutir aux formes dites A et B par 2 transformations appropriées. Il peut arriver qu'une de ces opérations soit inutile.

#### 3.1.1. Forme A

Dans un premier temps, on réalise une rotation des axes du repère de référence.



Axes originels

Position des axes lors de l'utilisation de la forme A

*(Les variations de la fonction réponse sont représentées par des lignes de niveau)*

Cette opération a pour but de supprimer les monômes d'interaction entre facteurs ( $x_1 \cdot x_2$  par exemple). Pour cela, la matrice  $\mathbf{B}$  doit être changée en une matrice diagonale. Les notions de vecteurs et valeurs propres interviennent alors.

On notera  $\mathbf{A}$  la matrice diagonale dont l'élément  $A_{ii}$  est la valeur propre  $\lambda_i$  de  $\mathbf{B}$ . De même, on définit par  $\mathbf{M}$  la matrice dont la  $i^{\text{ème}}$  colonne est le vecteur propre  $\mathbf{m}'_i$  de  $\mathbf{B}$ . Par définition, on peut écrire :

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{M} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{A}$$

De plus, on supposera tous les vecteurs propres tels que  $\mathbf{m}'_i \cdot \mathbf{m}_i = 1$ , c'est-à-dire la matrice  $\mathbf{M}$  unitaire. Cela implique que :

$$\mathbf{M}' = \mathbf{M}^{-1}$$

## Outils associés aux modèles polynomiaux

Ce qui permet d'aboutir à une nouvelle écriture des modèles du second degré :

$$\underline{y_{\text{mod}} = b_0 + \mathbf{w}' \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{w}' \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{w}}$$

Avec :

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{b}$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{x}$$

L'équation du modèle polynomial prend ainsi une nouvelle forme, dite A.

La nouvelle variable  $\mathbf{w}$  prend à présent les valeurs de ses composantes relativement à un nouveau système d'axes ; ceux-ci sont à présent appelés *axes principaux* du système de réponse.

Mis sous cette forme, le modèle polynomial donne de précieux renseignements simplement par l'étude des ses coefficients (cf. 3.1.4. ).

### 3.1.2. Point stationnaire

L'équation matricielle du modèle du second degré définit implicitement l'existence d'un point dit stationnaire S (unique) pour lequel, les dérivées partielles de la réponse  $y$  étudiée par rapport aux variables  $x_1, x_2, \dots, x_k$  décrivant les facteurs, sont toutes nulles.

Ses coordonnées  $\mathbf{w}_S$  sont telles que :

$$\frac{\partial y_{\text{mod}}}{\partial \mathbf{w}} = 0$$

Ce qui donne, relativement aux axes principaux :

$$\mathbf{w}_S = -\frac{1}{2} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{\theta}$$

On démontre de la même façon que les coordonnées  $\mathbf{x}_S$  de ce même point S par rapport aux axes initiaux sont données par :

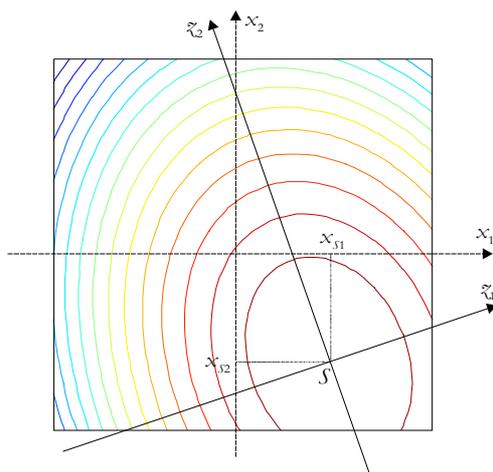
$$\mathbf{x}_S = -\frac{1}{2} \cdot \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{b}$$

La réponse en ce point est donnée par :

$$\begin{aligned} y_S &= b_0 - \frac{1}{4} \cdot \boldsymbol{\theta}' \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \boldsymbol{\theta} \\ &= b_0 - \frac{1}{4} \cdot \mathbf{b}' \cdot \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{b} \end{aligned}$$

### 3.1.3. Forme B

On réalise une translation du repère général du point origine initial  $\mathbf{w}_0 = [w_{01} \ w_{02} \ \dots \ w_{0k}]^t = [00 \ \dots \ 0]^t$  au point stationnaire, maintenant point origine destination  $\mathbf{w}_S = [w_{S1} \ w_{S2} \ \dots \ w_{Sk}]^t$ . On travaille donc maintenant avec le vecteur de translation  $\mathbf{z} = \mathbf{w}_0 - \mathbf{w}_S$ .



Position des axes lors de l'utilisation de la forme B

On en déduit la relation suivante :

$$\underline{y_{\text{mod}}} = y_S + \underline{z}' \cdot \underline{A} \cdot \underline{z}$$

Cette forme B permet de supprimer les termes d'ordre 1 du modèle polynomial. Les coefficients des monômes restants sont les valeurs propres de la matrice **B**.

Ainsi, une autre écriture pourrait être :

$$y_{\text{mod}} = y_S + \lambda_1 \cdot z_1^2 + \lambda_2 \cdot z_2^2 + \dots + \lambda_k \cdot z_k^2$$

La matrice **M** joue un rôle important puisqu'elle permet le passage des coordonnées d'origine  $\underline{x} = [x_1, x_2, \dots, x_k]$  aux coordonnées d'arrivée  $\underline{z} = [z_1, z_2, \dots, z_k]$ , et vice-versa :

$$\underline{z} = \underline{w} - \underline{w}_S = \underline{M}' \cdot (\underline{x} - \underline{x}_S)$$

$$\underline{x} = \underline{x}_S + \underline{M} \cdot \underline{z}$$

Dans le repère  $(S, z_1, z_2, \dots, z_k)$ , les coordonnées du point stationnaire sont  $\underline{z}_S = [0 \ 0 \ \dots \ 0]$ .

### 3.1.4. Nature du point stationnaire

Les formes A ou B permettent de comprendre sans calculs supplémentaires les variations de toute fonction réponse donnée par un modèle du second degré. Celles-ci s'évaluent en raisonnant dans chacune des  $k$  dimensions de l'espace couvert.

Les différentes configurations possibles offertes ne sont données que par les combinaisons de valeurs prises par les valeurs propres  $\lambda_i$ .

On ne considérera donc que les caractéristiques fondamentales du groupe  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ . Il s'agit en l'occurrence du signe de chaque élément ainsi que de leurs ordres de grandeur respectifs.

➤ Tous les  $\lambda_i$  sont positifs

Alors S est un minimum, puisque toute valeur de  $\underline{z}$  différente de  $\underline{z}_S$  donne une valeur de réponse  $y$  supérieure à  $y_S$ .

➤ Tous les  $\lambda_i$  sont négatifs

S est un maximum puisque toute valeur de  $\underline{z}$  différente de  $\underline{z}_S$  donne une valeur de réponse  $y$  inférieure à  $y_S$ .

## Outils associés aux modèles polynomiaux

### ➤ Certains $\lambda_i$ sont positifs et d'autres négatifs

S est un minimax (ou point de selle) : cette situation est un mélange des 2 cas précédents. La réponse  $y$  augmente sur les axes principaux  $i$  dont les  $\lambda_i$  sont positifs ; elle diminue sur les axes  $j$  dont les  $\lambda_j$  sont négatifs.

Les ordres de grandeur des coefficients ont également une importance. En effet, pour une même variation de la composante  $z_i$  de la variable  $\mathbf{z}$ , son effet sera d'autant plus grand que le coefficient correspondant  $\lambda_i$  est grand. A contrario, l'effet de la composante  $z_i$  sera d'autant moins important que son coefficient  $\lambda_i$  sera petit.

En comparant les valeurs propres  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$  entre elles, il est ainsi possible de déterminer les directions où les variations sont les plus fortes ou les plus faibles.

Dans un espace à  $k$  dimensions ( $k \in \mathbf{N}^*$ ), les différentes combinaisons de valeurs que peuvent prendre les valeurs propres  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$  engendrent une panoplie d'iso-surfaces (réelles ou imaginaires) de la réponse  $y$ . Ces différentes configurations sont également présentées dans l'annexe 4.

## 3.2. Analyse du chemin optimal

### 3.2.1. Principe

L'analyse du chemin optimal permet de déterminer les valeurs maximales des réponses étudiées ainsi que les conditions expérimentales correspondantes, pour toute valeur de rayon dans un domaine d'étude hyper sphérique.

On ne considère que les points expérimentaux placés sur une hyper sphère de rayon  $R$ , c'est-à-dire tels que :

$$\sum_i x_i^2 = R^2$$

Ou matriciellement :

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x} - R^2 = 0$$

$R$  est le rayon de l'hyper sphère variant entre 0 et le rayon dimensionnant du domaine d'étude.

Il s'agit ainsi de trouver la plus grande valeur de la réponse  $y$  sous la contrainte donnée par la relation précédente.

Pour opérer cette recherche, on utilise les multiplicateurs de Lagrange. De là, le problème revient à trouver l'optimum de la fonction suivante :

$$\mathcal{Q}(\mathbf{x}) = y(\mathbf{x}) - \mu(\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x} - R^2)$$

Avec  $\mu \in \mathbf{R}$ , multiplicateur de Lagrange.

On recherche donc :

$$\frac{\partial \mathcal{Q}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = 0$$

Ce qui donne :

$$\dot{\mathbf{x}} = -\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{B} - \mu \cdot \mathbf{I}_k)^{-1} \cdot \mathbf{b}$$

D'où on peut déduire la valeur du rayon de l'hyper sphère sur laquelle se trouve le point expérimental de coordonnées  $\dot{\mathbf{x}}$  :

$$R(\dot{\mathbf{x}}) = (\dot{\mathbf{x}}' \cdot \dot{\mathbf{x}})^{\frac{1}{2}}$$

## Outils associés aux modèles polynomiaux

On voit donc que si l'on donne à  $\mu$  des valeurs différentes, on obtiendra des valeurs différentes de  $\mathbf{x}$ , mais pas obligatoirement des valeurs distinctes de  $R(\mathbf{x})$ . Si un tel cas arrive, cela signifie que l'on a trouvé plusieurs optima (locaux obligatoirement) sur la surface de la même hyper sphère. Pour éviter un tel cas de figure, c'est-à-dire si l'on veut trouver à coup sûr un optimum global sur l'hyper sphère, il faut prendre les valeurs de  $\mu$  de la manière suivante :

- recherche du maximum :  $\mu > \lambda_{\max}$  ;
- recherche du minimum :  $\mu < \lambda_{\min}$ .

Avec  $\lambda_{\min}$  et  $\lambda_{\max}$  respectivement la plus petite et la plus grande des valeurs propres de la matrice  $\mathbf{B}$ .

Ainsi, on détermine avant tout la valeur de  $\mu$  répondant aux exigences ci-dessus.

On en déduit alors la valeur correspondante de  $\mathbf{x}(\dot{\mathbf{x}})$ , ce qui donne  $R(\dot{\mathbf{x}})$  et  $y(\dot{\mathbf{x}})$ .

On recommence alors la boucle en choisissant une nouvelle valeur de  $\mu$ .

On réalise autant d'itérations que nécessaire afin d'obtenir assez de points pour connaître entre autres :

- la réponse  $y(\mathbf{x})$  en fonction de  $R(\mathbf{x})$  ;
- la réponse  $y(\mathbf{x})$  en fonction des composantes de  $\mathbf{x}$ .

### 3.2.2. Recouvrement de 2 chemins optimaux

Chaque chemin optimal donne un ensemble de points pour lesquels les valeurs du modèle du second degré sont les meilleures, relativement à une distance donnée du centre du domaine courant. Ce sont donc en définitive des lignes de crête.

Mathématiquement, les chemins optimaux sont des relations mathématiques (en général non écrites explicitement) qui ne lient que les coordonnées des facteurs entre eux. Ainsi par exemple, lorsque 2 facteurs  $x_1$  et  $x_2$  sont considérés, le  $i^{\text{me}}$  chemin optimal est une relation de la forme  $x_2 = f_i(x_1)$ , où  $f_i$  représente une fonction indéterminée, liée à ce  $i^{\text{me}}$  chemin optimal.

Lorsque 2 chemins optimaux sont calculés sur des domaines légèrement décalés, il peut y avoir intersection en un point particulier  $\mathbf{x}$ . Par définition,  $\mathbf{x}$  appartient à ces 2 ensembles de points présentés ci-dessus. Il ne détermine pas la position d'un point où la réponse est optimale, mais plutôt celle du point pour lequel les 2 modèles du second degré donnent leurs meilleures valeurs de réponse, simultanément.

De ce fait,  $\mathbf{x}$  représente une estimation intéressante de la localisation d'un optimum local de la fonction objectif, car il est déduit de la connaissance de 2 modélisations différentes de la réponse.

Il faut signaler qu'il y a obligatoirement intersection entre 2 chemins optimaux lorsque  $k=2$ . C'est rarement le cas pour un nombre supérieur de facteurs. Il faut alors considérer à la place, la distance minimale entre ces 2 chemins.

La figure suivante illustre cette technique de recouvrement, pour  $k=2$ . Dans cet exemple, 2 plans de Doehlert ont été utilisés ; la récupération de points entre eux se fait par le premier mode correspondant, défini dans l'annexe 2.

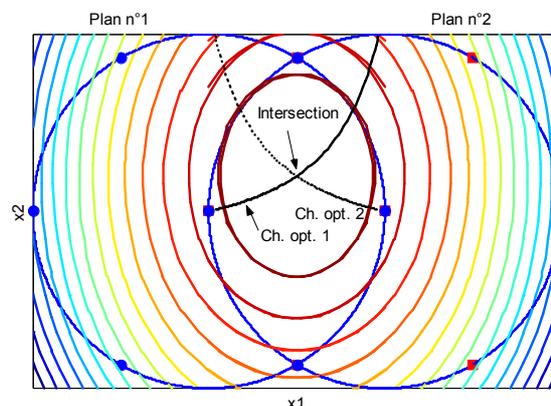


Illustration de la technique de recouvrement de 2 chemins optimaux

Cette technique de recouplement de 2 chemins optimaux peut être utilisée pour terminer certains processus d'optimisation, en particulier ceux usant de glissements de plans (chapitre 2), afin de gagner dans la précision sur l'estimation de  $\mathbf{x}_{opt}$ .

### **3.3. Calcul des valeurs extrémales de modèles dans des domaines (hyper-) rectangulaires**

La fonction objectif est dans la majorité des cas étudiée dans un espace (hyper-) rectangulaire, dont les dimensions sont déduites des bornes inférieures et supérieures des  $k$  facteurs. Les plans d'expériences de RSM permettent de calculer des modèles dans ce domaine d'intérêt.

Nous essayons alors de déterminer les valeurs extrémales prises par ces modèles dans ces domaines d'étude.

On supposera dans cette partie qu'aucune contrainte (autre que les butées) n'est active.

Les méthodes répondant à cet objectif sont différentes relativement à l'ordre du modèle rencontré.

#### **3.3.1. Modèles d'ordre 1**

La plus grande valeur (ou la plus petite valeur) donnée par un modèle d'ordre 1 à l'intérieur de l'hyper rectangle d'étude est obligatoirement prise par un sommet de cet hyper-rectangle. Par conséquent, la recherche de la valeur optimale recherchée se fait (dans le cas le plus défavorable) par le calcul de la valeur du modèle pour les  $2^k$  sommets du domaine d'étude.

Il est bien entendu possible que l'optimum ne soit pas un sommet, mais une arête ou une facette entière de l'hyper rectangle, selon les coefficients du modèle polynomial. Ceci n'invalide pas les considérations précédentes.

Cependant, ce problème est résolu beaucoup plus efficacement par la célèbre méthode dite du « simplexe ».

#### **3.3.2. Modèles d'ordre 2 : analyse canonique récursive**

Ce problème est moins trivial que le précédent. En effet, l'optimum recherché peut être :

- un sommet de l'hyper-rectangle d'étude ;
- un point dans une facette de ce domaine d'étude ;
- un point à l'intérieur de cet espace hyper-rectangulaire.

Pour résumer, et de manière plus générale, l'optimum peut se trouver dans n'importe quelle (sous-) dimension de l'espace d'étude d'origine. En effet, un sommet est un sous-espace de la facette de l'hyper-rectangle auquel il appartient. Cette (hyper-) facette est elle-même un sous-espace de l'hyper-rectangle de départ. On voit donc qu'il est nécessaire de rechercher pour chaque espace de dimension  $\delta$  (avec  $1 \leq \delta \leq k$ ) la valeur optimale du modèle, et de prendre la meilleure à la fin.

$k$	$1 + 2^{k-1} \cdot k!$	$2^k$
1	1	2
2	5	4
3	25	8
4	193	16
5	1921	32
6	23041	64
7	322561	128
8	5160961	256
9	92897281	512
10	1857945601	1024

Cette recherche est possible puisqu'il a été vu plus haut (confer annexe 2, §5.1.2.1.) qu'un modèle du second degré dans un espace de dimensions données reste un modèle du second degré dans tous ses sous-espaces.

L'algorithme envisagé est alors récursif, permettant d'étudier l'espace initial ( $\delta = k$ ), puis ses sous-dimensions, puis les sous-dimensions de ces sous-dimensions, et ainsi de suite, jusqu'à arriver à  $\delta = 1$ . Dans un domaine initial de dimension  $k$  ( $k$  facteurs), il y a donc  $1 + 2^{k-1} \cdot k!$  (ou  $1 + \frac{1}{2} \cdot \prod_{i=1}^k 2 \cdot i$ ) (sous-) espaces à considérer (en comptant l'hyper rectangle d'étude initial). Ce nombre de sous-dimensions est égal au nombre d'appels récursifs de l'algorithme traitant le problème.

L'algorithme s'appuie donc essentiellement sur l'analyse canonique (vue plus tôt) et sur l'unicité du point stationnaire.

Il faut prendre en compte le type de courbe donné par l'équation du modèle d'ordre 2 (cf. annexe 3 §3.1.4. et annexe 4). Etant donné qu'il peut s'agir soit d'un maximum, soit d'un minimum ou bien encore d'un minimax (point de selle), la recherche de la valeur optimale est donc différente d'un cas à l'autre.

Prenons l'exemple de la recherche de la plus grande valeur de  $y$ . Si le modèle (dans le sous-espace de dimension  $\delta$ ) décrit un maximum qui est dans ce sous-espace d'étude, alors il est inutile de rechercher un

## Outils associés aux modèles polynomiaux

meilleur optimum dans les sous-dimensions correspondantes (puisqu'il s'agit alors du point stationnaire et que ce point est unique). Si, par contre, le modèle décrit un minimum ou un minimax, alors il est sûr que le modèle prendra ses plus grandes valeurs sur les frontières du sous-espace d'étude, c'est-à-dire dans ses  $2.k$  sous-dimensions qu'il faut alors étudier une à une.

Lorsque l'on passe d'un espace de dimension  $\delta$  à un de ceux immédiatement inférieur (de dimensions  $\delta-1$ ), on utilise les relations données dans la partie « Réduction des dimensions des matrices » (annexe 2, §5.1.2.1.).

Dans le cas de la recherche d'un maximum, l'algorithme est donné ci-après.

Lors de son premier appel, il doit être initialisé par l'affectation  $\delta = k$ .

On travaille dans un (sous-)espace de dimension  $\delta$ .

Faire une analyse canonique sur le modèle (M) en cours d'étude :  $y_{\text{mod}} = b_0 + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{b} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}$ .

Les bornes du sous-espace (E) en cours sont données par la matrice  $\mathbf{L}$ .

> Si M décrit un maximum qui est dans E, alors l'optimum est trouvé. L'algorithme renvoie donc les coordonnées de ce point optimum, et se termine.

> Dans les autres cas (M décrit un minimum ou un minimax) :

Pour chacun des  $2.k$  sous-espaces du domaine d'étude en cours :

➤ Si  $\delta > 1$ , appel récursif de la fonction avec :

-  $\delta = \delta - 1$

- Calcul des nouvelles valeurs pour  $b_0$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{x}$  (réduction des dimensions des matrices) ;

- Redéfinition de la matrice  $\mathbf{L}$  des bornes.

➤ Si  $\delta = 1$ , l'optimum est obligatoirement situé sur une des 2 bornes.

On calcule donc la valeur du modèle pour les 2 valeurs de borne ;

l'algorithme renvoie les coordonnées du point conduisant à la plus grande valeur de la réponse.

Fin de l'algorithme.

### 3.3.3. Autres modèles

Dans le cas général, aucune méthode analytique ne semble exister.

L'utilisation de méthodes heuristiques classiques (gradient conjugué, plus grande pente, etc.) complétées de la technique des Pénalités (extérieures ou intérieures) peut être intéressante.

Le problème reste « relativement simple », étant donné, entre autres :

- la facilité et le coût négligeable de l'évaluation de la fonction (modèle polynomial) ;
- l'absence de contraintes (uniquement de butées inférieures et supérieures pour chaque dimension) ;
- les caractéristiques connues de la fonction (continuité, nombre de points stationnaires connus, ...).

### 3.4. Directions de meilleures valeurs

Dans le cas où l'on recherche le maximum de la fonction objectif (de la réponse), la situation idéale est de trouver le point stationnaire de la modélisation polynomiale directement dans le domaine d'étude.

Cependant, cela n'arrive que rarement. Il est alors en général intéressant de décaler le domaine d'étude. Le problème revient donc à calculer la (meilleure) direction de déplacement pour ce décalage.

La détermination des directions de meilleures réponses se fait avec la volonté sous-jacente d'utiliser la technique de la récupération de points d'expériences entre les plans successivement réalisés (cf. Annexe 2). Par conséquent, le nouveau plan d'expériences est supposé être contigu au premier, voire partager un volume commun avec le plan initial.

C'est dans ce cadre que sont données les solutions qui suivent. Celles-ci ne sont plus les meilleures si aucune récupération de points n'est envisagée.

La réalisation de l'analyse canonique est nécessaire pour connaître les coordonnées  $\mathbf{x}_S$  du point stationnaire  $S$ .

#### 3.4.1. Le point stationnaire est le type d'optimum recherché

Dans le cas de la recherche du point maximum (minimum), le point stationnaire obtenu par analyse canonique désigne le maximum (minimum) de la modélisation.

La meilleure droite est alors celle qui passe par le centre du domaine en cours et par le point stationnaire.

L'expression du vecteur directeur normé correspondant est donc :

$$\mathbf{d} = \frac{\mathbf{x}_S - \mathbf{x}_{\text{centre}}}{|\mathbf{x}_S - \mathbf{x}_{\text{centre}}|}$$

### 3.4.2. Le point stationnaire est l'opposé du type d'optimum recherché

Dans le cas de la recherche du point maximum (minimum), le point stationnaire obtenu par analyse canonique désigne le minimum (maximum) de la modélisation.

Il s'agit ici du cas opposé au précédent. Il faut s'éloigner du point stationnaire donnant les plus mauvaises valeurs de la réponse.

Par conséquent, le vecteur directeur normé de meilleure direction s'écrit comme :

$$\mathbf{d} = - \frac{\mathbf{x}_S - \mathbf{x}_{\text{centre}}}{|\mathbf{x}_S - \mathbf{x}_{\text{centre}}|}$$

### 3.4.3. Autres cas

Lorsque le point stationnaire désigne un minimax, des stratégies héritées de l'analyse canonique comme les précédentes ne sont plus applicables systématiquement.

La meilleure solution reste la plus évidente : définir la droite de meilleures valeurs comme celle passant par le point central du domaine en cours et par le point dont la réponse est la meilleure suivant l'optimum recherché (minimum ou maximum). Notons  $\mathbf{x}_{opt}$  les coordonnées d'un tel point.

D'où l'expression du vecteur directeur normé correspondant :

$$\mathbf{d} = \frac{\mathbf{x}_{opt} - \mathbf{x}_{\text{centre}}}{|\mathbf{x}_{opt} - \mathbf{x}_{\text{centre}}|}$$

### 3.4.4. Axes principaux

On peut être amené à devoir calculer les vecteurs directeurs des axes principaux relativement au point stationnaire (et non plus par rapport au centre du domaine courant).

Ainsi, les coefficients directeurs des  $k$  droites correspondant aux axes tournés et translétés de la forme B de déduisent de la relation matricielle :

$$\mathbf{D} = \mathbf{M} \mathbf{I}_k$$

Avec  $\mathbf{M}$  la matrice de rotation issue de l'analyse canonique.

$\mathbf{I}_k$  est la matrice identité d'ordre  $k$ . Elle est en réalité l'écriture en une unique matrice des  $k$  coefficients directeurs positifs unitaires des  $k$  axes du repère utilisé pour l'écriture sous la forme B des modèles du second degré.

$\mathbf{D}$  est alors la matrice carrée d'ordre  $k$ , dont la  $i^{\text{ème}}$  colonne donne le vecteur directeur  $\mathbf{d}_i$  de la  $i^{\text{ème}}$  droite de base du repère valide pour la forme B. Ces coefficients directeurs sont exprimés dans le repère général (non translété, non tourné).

## 3.5. Coefficients d'ajustement de modèles

Chaque modèle polynomial à  $p$  coefficients ( $p$  monômes) est déduit de la connaissance de la réponse en  $N$  points d'expériences. On doit avoir  $N \geq p$  pour que les  $p$  coefficients puissent être calculés.

Dans le cas particulier où  $N=p$ , le modèle est saturé ; il passe exactement par tous les points du support, pour lesquels on a l'égalité  $\mathbf{y} = \mathbf{y}_{\text{mod}}$ . L'ajustement du modèle aux données est donc parfait.

Lorsque  $N > p$ , dans la quasi-majorité des cas, le modèle ne peut plus passer par les  $N$  points, mais commet une erreur d'ajustement en chacun de ces points. Il y a donc existence d'un vecteur d'erreur (de résidus) non nul  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{y}_{\text{mod}}$ .

Il est alors intéressant de « mesurer » globalement l'erreur d'approximation de la fonction réponse.

### 3.5.1. Variance globale de régression

La variance globale de régression est donnée par :

$$CME = \frac{SCE}{N - p} = \frac{\mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}}{N - p}$$

La modélisation est d'autant mieux ajustée aux données expérimentales que la valeur des carrés moyens des écarts ( $CME$ ) est faible. Cette grandeur est parfois notée  $\sigma_r^2$  ou également  $\hat{\sigma}^2$  puisqu'elle constitue une estimation sans biais de la variance expérimentale  $\sigma^2$ .

### 3.5.2. Coefficients de détermination ( $R^2$ , $R^2$ ajusté)

On définit le *coefficient de détermination*  $R^2$  comme étant la fraction des variations de la réponse expliquée par le modèle seul.

Ce coefficient est généralement introduit comme suit :

$$R^2 = \frac{\mathbf{y}'_{\text{mod}} \cdot \mathbf{y}_{\text{mod}} - \bar{\mathbf{y}}' \cdot \bar{\mathbf{y}}}{\mathbf{y}' \cdot \mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}' \cdot \bar{\mathbf{y}}} = \frac{SCM_{REG}}{SCM}$$

Avec :

- $SCM_{REG}$  la somme des carrés des réponses calculées (issue de la régression) corrigée de la moyenne ;
- $SCM$  la somme des carrés des réponses mesurées (expérimentales) corrigée de la moyenne.

$R^2$  peut également s'écrire comme :

$$R^2 = \frac{SCM - SCE}{SCM}$$

Avec  $SCE$  la somme des carrés des écarts (résidus), c'est-à-dire  $SCE = \mathbf{e}' \cdot \mathbf{e}$ .

Le coefficient  $R^2$  peut s'interpréter comme le quotient de la variance expliquée par la régression par la variance des réponses mesurées. Ainsi, comme pour l'analyse de variance sur modèles complets vue précédemment, on teste toujours la somme des carrés due à la régression seule ( $SCM_{REG}$  ou  $SCR$ ). Cependant, ici, la variable  $SCM_{REG}$  est comparée à une grandeur obligatoirement de plus grande valeur ( $SCM$  qui se révèle être très similaire à la somme des carrés totaux  $SCT$ ). Dans l'analyse de variance, la variable  $SCR$  est testée relativement à une autre supposée légitimement de moindre amplitude ( $SCE$ ).

Le coefficient  $R^2$  prend ses valeurs entre 0 et 1. Une valeur proche de 1 indique un bon modèle avec un très bon pouvoir prédictif.



On définit de la même façon le *coefficient de détermination ajusté*  $R_a^2$ , comme étant la fraction des variations de la réponse expliquée par le modèle seul, relativement aux degrés de liberté correspondants.

L'expression du coefficient  $R_a^2$  se déduit de celle du  $R^2$  vue précédemment :

$$R_a^2 = \frac{CM - CME}{CM}$$

Avec :

- $CM$  les carrés moyens des réponses mesurées ; c'est-à-dire  $CM = \frac{SCM}{N - 1}$  ;

## Outils associés aux modèles polynomiaux

- $CME$  les carrés moyens des écarts (résidus) ; c'est-à-dire  $CME = \frac{SCE}{N - p}$ .

Le coefficient  $R_a^2$  est tout à fait similaire au  $R^2$  ; ses valeurs s'interprètent de la même manière. Il peut cependant prendre des valeurs négatives si le  $R^2$  est proche de 0.

Du fait de la prise en compte des degrés de liberté, on a toujours  $R_a^2 \leq R^2$ .

### 3.5.3. Coefficient Press

*PRESS* signifie « Predictive Residual Sum of Square ».

Ce coefficient est défini comme suit :

$$PRESS = \sum_{i=1}^N \frac{\left( y^{(i)}(\mathbf{x}) - y_{\text{mod}}^{(i)}(\mathbf{x}) \right)^2}{(1 - h_i)^2}$$

Avec  $h_i$  le  $i^{\text{me}}$  élément diagonal de la matrice de Hat :  $\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'$ . On notera que l'on a  $\frac{1}{N} \leq h_i \leq 1$  et que  $\sum_{i=1}^N h_i = p + 1$ .

Cette quantité n'est pas une mesure d'ajustement, mais plutôt une estimation du pouvoir prédictif du modèle. Son principal inconvénient est qu'elle ne permet pas de conclure de façon absolue mais uniquement de manière relative : elle peut ainsi être utilisée pour la comparaison de modèles entre eux.

On a toujours  $PRESS \geq SCE$ .

### 3.5.4. Coefficient $Q^2$

Le coefficient  $Q^2$  est très similaire au  $R^2$  ; il est parfois appelé  $R^2$  prédictif.

Son expression est en effet :

$$Q^2 = \frac{SCM - PRESS}{SCM}$$

Le coefficient  $Q^2$  varie généralement entre 0 et 1. Il peut être négatif pour les très mauvais modèles. Des valeurs proches de l'unité désignent de la même façon des modèles bien ajustés aux données expérimentales.

$R^2$  et  $Q^2$  sont ainsi 2 mesures de la qualité d'ajustement; le premier étant une sur-estimation, le second une sous-estimation.

Le  $R^2$  est descriptif : il mesure la relation entre le modèle et les réponses aux points initiaux, alors que le  $Q^2$  est davantage prédictif : il mesure la capacité du modèle à prévoir la réponse aux points inconnus du DE.

## 3.6. Influence des observations

Dans certains cas, certaines valeurs de la réponse peuvent être aberrantes sans que leur résidu soit important. C'est pourquoi il est préférable de passer en revue l'influence de chaque expérience sur les résultats (i.e. les coefficients du modèle).

Pour cela, on définit la *distance de Cook*  $\delta_i$  comme étant la distance entre  $\hat{\beta}$  et  $\hat{\beta}_{(-i)}$  où  $\hat{\beta}_{(-i)}$  est l'estimation de  $\hat{\beta}$  en ne prenant pas en compte la  $i^{\text{me}}$  expérience.

On calcule ainsi :

$$\delta_i = \frac{\left( \hat{\beta} - \hat{\beta}_{(-i)} \right)' (\mathbf{X}'\mathbf{X}) \left( \hat{\beta} - \hat{\beta}_{(-i)} \right)}{(p + 1)CME}$$

Ou plus simplement :

$$\delta_i = \frac{\|y_{\text{mod}} - y_{\text{mod}(-i)}\|^2}{(p+1).CME}$$

Avec  $y_{\text{mod}(-i)} = \mathbf{X} \cdot \hat{\beta}_{(-i)}$ .

Les expériences  $i$  sont jugées d'influences anormales lorsque leurs  $\delta_i$  sont supérieures à 1.

### 3.7. Autres outils statistiques

#### 3.7.1. Résidus anormaux

On définit le *résidu studentisé* de la  $i^{\text{me}}$  expérience comme étant la valeur :

$$\frac{y(\mathbf{x}) - y_{\text{mod}}(\mathbf{x})}{CME \cdot \sqrt{1 - h_i}}$$

Lorsque  $N$  est grand, les résidus studentisés doivent se concentrer dans l'intervalle  $[-2, 2]$ . De fortes valeurs peuvent indiquer des résidus anormalement élevés.

#### 3.7.2. Corrélation entre variables

Statistiquement, il est intéressant de calculer la corrélation entre les variables utilisées dans un problème d'expérimentation : c'est-à-dire entre :

- les facteurs ;
- les réponses ;
- les facteurs et les réponses.

Pour évaluer ces dépendances inter-variables, on construit une matrice  $\mathbf{M}$  dont chacune des  $p'$  colonnes donne les valeurs successives des  $p'$  variables considérées. Dans notre cas, les  $k$  premières colonnes donneront les coordonnées des  $N$  expériences ( $\mathbf{M}$  possède donc  $N$  lignes) et les  $p'-k$  dernières les valeurs des  $N_{\text{rep}} = p'-k$  réponses pour les  $N$  points d'expériences.

On calcule dans un premier temps la matrice  $\mathbf{N}$  contenant les valeurs centrées réduites de  $\mathbf{M}$  :

$$\mathbf{N} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{M}$$

Avec l'opérateur :

$$\mathbf{A} = \mathbf{I}_N - \frac{\mathbf{1}_N \mathbf{1}_N'}{N}$$

La matrice des variances et covariances se déduit alors :

$$\mathbf{V} = \frac{1}{N} \cdot \mathbf{N}' \cdot \mathbf{N}$$

On calcule finalement la matrice symétrique et positive  $\mathbf{R}$  contenant les coefficients de corrélation linéaire entre les  $p'$  variables prises 2 à 2.

$$\mathbf{R} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{D}$$

Où  $\mathbf{D}$  est une matrice diagonale, et dont les éléments  $D_{ii}$  sont tels que  $D_{ii} = \frac{1}{\sqrt{V_{ii}}}$ .

Chaque élément diagonal  $R_{ii}$  de  $\mathbf{R}$  est bien entendu unitaire puisqu'il traduit la dépendance de la  $i^{\text{me}}$  variable avec elle-même.

Une corrélation entre la variable  $i$  et la variable  $j$  est jugée significative si la valeur  $R_{ij}$  est supérieure à un seuil, dont la valeur est tabulée (il s'agit des valeurs critiques du coefficient de corrélation d'un échantillon issu d'une population normale centrée).

## *Outils associés aux modèles polynomiaux*

Une dépendance significative entre un facteur et une réponse vient en général confirmer l'influence de ce facteur sur cette réponse. Entre 2 facteurs, une corrélation avérée démontre une interaction non négligeable entre ces facteurs.

## 4. Isosurfaces du second ordre

---

On utilise l'écriture non matricielle de la forme B de  $y_{\text{mod}}$ , issue de l'analyse canonique, où les  $\lambda_i$  désignent les valeurs propres de la matrice  $\mathbf{B}$ :

$$y_{\text{mod}} = y_s + \lambda_1 \tilde{x}_1^2 + \lambda_2 \tilde{x}_2^2 + \dots + \lambda_k \tilde{x}_k^2$$

Que l'on peut écrire sous la forme équivalente :

$$\frac{\tilde{x}_1^2}{\left(\frac{\zeta}{\lambda_1}\right)} + \frac{\tilde{x}_2^2}{\left(\frac{\zeta}{\lambda_2}\right)} + \dots + \frac{\tilde{x}_k^2}{\left(\frac{\zeta}{\lambda_k}\right)} = 1$$

Avec  $\zeta = y_{\text{mod}} - y_s$ .  $\zeta$  sera considéré constant par la suite (la valeur prise par  $y_{\text{mod}}$  est supposée constante).

L'écriture précédente peut alors déboucher sur les configurations données ci-après, suivant :

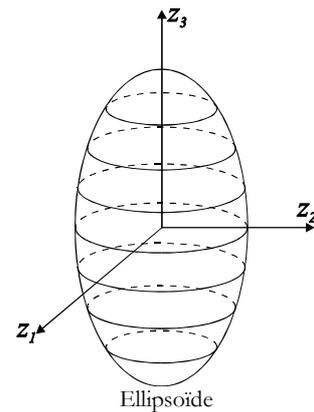
- la valeur de  $y_{\text{mod}}$  relativement à  $y_s$  (signe de  $\zeta$ ) ;
- les signes respectifs des  $\lambda_i$ .

### 4.1. Toutes les valeurs propres sont non nulles

#### 4.1.1. Ellipsoïde

$$\text{ex : } \frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} + \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = 1 \text{ dont les demi-axes sont de longueur } a, b, c.$$

De manière générale, les  $k$  demi-axes ont des longueurs respectives de  $\sqrt{\frac{\zeta}{\lambda_i}}$  (avec  $i \in [1, k]$ ).



#### 4.1.2. Ellipsoïde imaginaire

$$\text{ex : } \frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} + \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = -1$$

Les solutions de cette relation étant imaginaires, cette surface iso-valeur n'est pas représentable.

#### 4.1.3. Hyperboloïde à n nappes

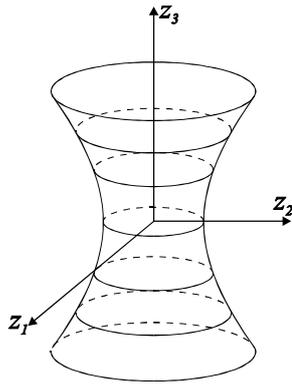
ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} - \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = -1$  décrit un hyperboloïde à 2 nappes ;  $c$  est la longueur du demi-axe caractéristique.

ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} - \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = 1$  décrit un hyperboloïde à une seule nappe ;  $a$  et  $b$  sont les longueurs des demi-axes caractéristiques.

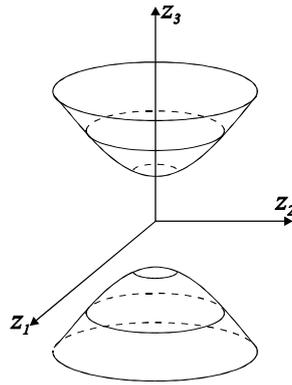
Plus généralement, s'il y a  $n_p$  éléments  $\lambda_i$  de  $\mathbf{A}$  positifs (et donc  $n_n = k - n_p$  éléments  $\lambda_j$  négatifs), alors si :

- $\zeta < 0$ , le modèle décrit un hyperboloïde à  $n_p$  nappes ; les demi-axes réels valent  $\sqrt{\frac{\zeta}{\lambda_j}}$  ( $\lambda_j < 0$ ).
- $\zeta > 0$ , le modèle décrit un hyperboloïde à  $n_n$  nappes ; les demi-axes réels valent  $\sqrt{\frac{\zeta}{\lambda_i}}$  ( $\lambda_i > 0$ ).

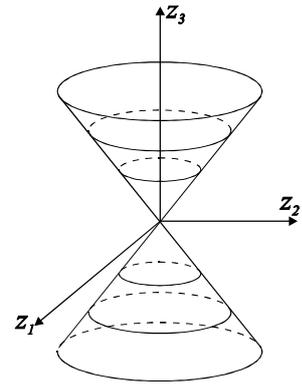
## Isosurfaces du second ordre



Hyperboloïde à une seule nappe



Hyperboloïde à 2 nappes



Cône

### 4.1.4. (Hyper-) Cône

ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} - \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = 0$ . Cette relation décrit un cône qui est la surface asymptotique des 2

hyperboloïdes d'équation  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} - \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = \pm 1$ .

### 4.1.5. (Hyper-) Cône imaginaire

ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} + \frac{\tilde{x}_3^2}{c^2} = 0$

Les solutions de cette relation étant imaginaires, cette surface iso-valeur n'est pas représentable.

## 4.2. $m_0$ valeurs propres sont nulles

### 4.2.1. (Hyper-) Cylindre elliptique

ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} = 1$

Les caractéristiques propres de ce type de surface sont les mêmes que celles prises par l'ellipsoïde. En effet, il s'agit ici d'un ellipsoïde dans tous les plans parallèles au plan  $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, 0)$ .

### 4.2.2. (Hyper-) Cylindre elliptique imaginaire

ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} = -1$

Cas particulier d'un ellipsoïde imaginaire.

Les solutions de cette relation étant imaginaires, cette surface iso-valeur n'est pas représentable.

### 4.2.3. (Hyper-) Cylindre hyperbolique à $n$ nappes

ex :  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} - \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} = 1$

Cas particulier d'un hyperboloïde à  $n$  nappes.

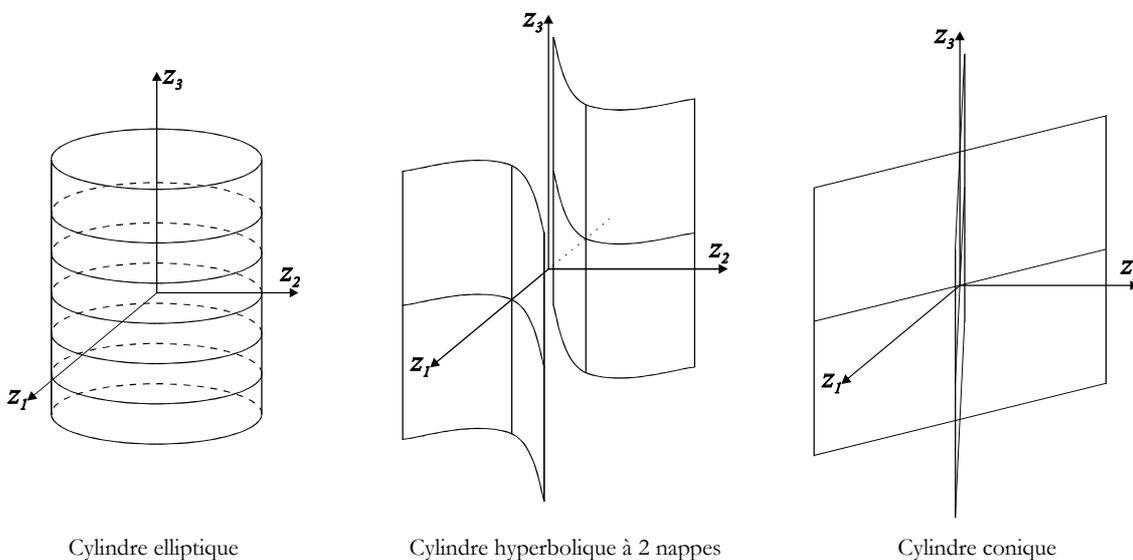
$m_0$  est le nombre d'éléments nuls de  $\mathbf{A}$ .

Ainsi, s'il y a  $m_p$  éléments  $\lambda_i$  de  $\mathbf{A}$  strictement positifs (et donc  $m_n = k - m_0 - m_p$  éléments  $\lambda_j$  strictement négatifs), alors si :

- $\zeta < 0$ , le modèle décrit un hyperboloïde à  $n'_p$  nappes ; les demi-axes réels valent  $\sqrt{\frac{\zeta}{\lambda_j}}$  ( $\lambda_j < 0$ ).

## Isosurfaces du second ordre

- $\zeta > 0$ , le modèle décrit un hyperboloïde à  $n'_n$  nappes ; les demi-axes réels valent  $\sqrt{\frac{\zeta}{\lambda_i}}$  ( $\lambda_i > 0$ ).



Cylindre elliptique

Cylindre hyperbolique à 2 nappes

Cylindre conique

### 4.2.4. (Hyper-) Cylindre conique

$$\text{ex : } \frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} - \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} = 0$$

Cas particulier d'un (hyper-) cône. Il s'agit donc de la surface asymptotique des 2 cylindres elliptiques d'équation  $\frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} - \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} = \pm 1$ .

### 4.2.5. (Hyper-) Cylindre conique imaginaire

$$\text{ex : } \frac{\tilde{x}_1^2}{a^2} + \frac{\tilde{x}_2^2}{b^2} = 0$$

Les solutions de cette relation étant imaginaires, cette surface iso-valeur n'est pas représentable.

Les différentes configurations sont résumées dans le tableau qui suit.

$\lambda_m \neq 0 \ \forall m \in [1, \kappa]$			
	$\lambda_i > 0 \ \forall i \in [1, \kappa]$	$\lambda_j < 0 \ \forall j \in [1, \kappa]$	$n_p \lambda_i > 0 \ \text{et} \ n_n \lambda_j < 0$
$\zeta > 0$	Ellipsoïde centré sur un minimum	<i>Ellipsoïde imaginaire</i>	Hyperboloïde à $n_n$ nappes
$\zeta < 0$	<i>Ellipsoïde imaginaire</i>	Ellipsoïde centré sur un maximum	Hyperboloïde à $n_p$ nappes
$\zeta = 0$	<i>(Hyper-) Cône imaginaire</i>	<i>(Hyper-) Cône imaginaire</i>	(Hyper-) Cône

$n_o \lambda_m = 0$			
	$\lambda_i \geq 0 \ \forall i \in [1, \kappa]$	$\lambda_j \leq 0 \ \forall j \in [1, \kappa]$	$n_p \lambda_i \geq 0 \ \text{et} \ n_n \lambda_j \leq 0$
$\zeta > 0$	(Hyper-) Cylindre elliptique centré sur un minimum	<i>(Hyper-) Cylindre elliptique imaginaire</i>	(Hyper-) Cylindre hyperbolique à $n_n$ nappes
$\zeta < 0$	<i>(Hyper-) Cylindre elliptique imaginaire</i>	(Hyper-) Cylindre elliptique centré sur un maximum	(Hyper-) Cylindre hyperbolique à $n_p$ nappes
$\zeta = 0$	<i>(Hyper-) Cylindre conique imaginaire</i>	<i>(Hyper-) Cylindre conique imaginaire</i>	(Hyper-) Cylindre conique

## 5. Opérations sur modèles polynomiaux

---

### 5.1. Généralités sur les modifications de modèles

#### 5.1.1. Nombre de coefficients d'un modèle d'ordre $o$ à $k$ facteurs

La manipulation des modèles demande souvent de connaître le nombre de coefficients (ou de monômes) d'un modèle polynomial d'ordre  $o$  à  $k$  facteurs.

Cette information donne implicitement le nombre minimum d'expériences à réaliser pour calculer un modèle ayant ces caractéristiques.

Notons  $\nu(k, o)$  cette fonction à 2 variables, prenant ses valeurs dans l'ensemble des entiers strictement positifs.

On peut montrer que l'on a :

$$\begin{aligned} \nu(k, o) &= \sum_{i_1=0}^k \left( \sum_{i_2=i_1}^k \left( \sum_{i_3=i_2}^k \dots \left( \sum_{i_{o-1}=i_{o-2}}^k (k+1-i_{o-1}) \right) \right) \right) \\ &= \sum_{i=1}^{k+1} \left( \left( \sum_{j_1=1}^i \sum_{j_2=1}^{j_1} \dots \sum_{j_{o-2}=1}^{j_{o-3}} j_{o-2} \right) (k+2-i) \right) \end{aligned}$$

Ce qui permet de déduire une relation beaucoup plus simple :

$$\nu(k, o) = \frac{1}{o!} \cdot \prod_{i=1}^o (k+i) = \frac{(k+o)!}{k! \cdot o!}$$

Et enfin :

$$\boxed{\nu(k, o) = C_{k+o}^k}$$

On déduit certaines propriétés intéressantes :

- $\nu(k, o) = \nu(o, k)$
- $\nu(k, o) = \nu(k-1, o) + \nu(k, o-1)$

Enfin, on retrouve les résultats connus pour quelques cas particuliers :

	$o=1$	$o=2$	$o=3$
$\nu(k, o)$	$k+1$	$\frac{(k+1)(k+2)}{2}$	$\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{6}$

#### 5.1.2. Opérations appliquées aux modèles polynomiaux de second degré

On utilise la relation matricielle originelle des modèles polynomiaux d'ordre 2 :

$$y_{\text{mod}} = b_0 + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{b} + \mathbf{x}' \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}$$

##### 5.1.2.1 Réduction des dimensions des matrices

Si cette relation est appliquée dans un espace à  $k$  dimensions ( $k$  facteurs sont considérés), alors les dimensions des variables utilisées sont données par le tableau qui suit.

## Opérations sur modèles polynomiaux

Variables	Nb lignes	Nb colonnes
$y_{\text{mod}}$	1	1
$\mathbf{x}$	$k$	1
$b_0$	1	1
$\mathbf{b}$	$k$	1
$\mathbf{B}$	$k$	$k$

Lorsqu'une sous-matrice  $\alpha$  du vecteur  $\mathbf{x}$  est connue (et que les autres éléments ne le sont pas), il est alors possible de réduire la taille du vecteur des inconnues. Décomposons les matrices précédentes comme suit :

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} p \\ \alpha \\ q \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_p \\ b_\alpha \\ b_q \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{pp} & \mathbf{B}_{p\alpha} & \mathbf{B}_{pq} \\ \mathbf{B}_{\alpha p} & \mathbf{B}_{\alpha\alpha} & \mathbf{B}_{\alpha q} \\ \mathbf{B}_{qp} & \mathbf{B}_{q\alpha} & \mathbf{B}_{qq} \end{bmatrix}.$$

Les dimensions des sous-matrices sont égales à :

Variables	Nb lignes	Nb colonnes
$p$	$a$	1
$q$	$c$	1
$\alpha$	$e$	1
$b_p$	$a$	1
$b_\alpha$	$e$	1
$b_q$	$c$	1
$\mathbf{B}_{pp}$	$a$	$a$
$\mathbf{B}_{\alpha\alpha}$	$e$	$e$
$\mathbf{B}_{qq}$	$c$	$c$
$\mathbf{B}_{p\alpha}$	$a$	$e$
$\mathbf{B}_{pq}$	$a$	$c$
$\mathbf{B}_{\alpha q}$	$e$	$c$

Avec  $a, c$  et  $e$  tels que  $a + c \leq k - 1$  et  $a + c + e = k$ .

A noter de plus que la matrice  $\mathbf{B}$  est symétrique ce qui implique que :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{pp} &= \mathbf{B}'_{pp} & \mathbf{B}_{p\alpha} &= \mathbf{B}'_{\alpha p} \\ \mathbf{B}_{qq} &= \mathbf{B}'_{qq} & \mathbf{B}_{pq} &= \mathbf{B}'_{qp} \\ \mathbf{B}_{\alpha\alpha} &= \mathbf{B}'_{\alpha\alpha} & \mathbf{B}_{\alpha q} &= \mathbf{B}'_{q\alpha} \end{aligned}$$

Une forme équivalente de la relation matricielle des modèles d'ordre 2 se déduit alors, utilisant des matrices de dimensions inférieures:

$$y_{\text{mod}} = \gamma_0 + \mathbf{w}' \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{w}' \cdot \boldsymbol{\Gamma} \cdot \mathbf{w}$$

Avec :

$$\gamma_0 = b_0 + \alpha' \cdot b_a + \alpha' \cdot \mathbf{B}_{\alpha\alpha} \cdot \alpha$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{bmatrix} b_p + 2 \cdot \mathbf{B}_{p\alpha} \cdot \alpha \\ b_q + 2 \cdot \mathbf{B}_{q\alpha} \cdot \alpha \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{pp} & \mathbf{B}_{pq} \\ \mathbf{B}_{qp} & \mathbf{B}_{qq} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix}$$

Ce vecteur  $\mathbf{w}$  est le nouveau vecteur des inconnues.

## Opérations sur modèles polynomiaux

Les dimensions des variables précédentes sont alors :

Variables	Nb lignes	Nb colonnes
$y$	1	1
$\mathbf{w}$	$k-e$	1
$\gamma_0$	1	1
$\boldsymbol{\gamma}$	$k-e$	1
$\boldsymbol{\Gamma}$	$k-e$	$k-e$



Si par contre, la sous matrice  $\boldsymbol{\alpha}$  est inconnue et  $\mathbf{w}$  connue ( $\mathbf{p}$  et  $\mathbf{q}$  sont connues), alors on obtient plutôt :

$$y_{\text{mod}} = \delta_0 + \boldsymbol{\alpha}' \cdot \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\alpha}' \cdot \boldsymbol{\Delta} \cdot \boldsymbol{\alpha}$$

Avec :

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix}$$

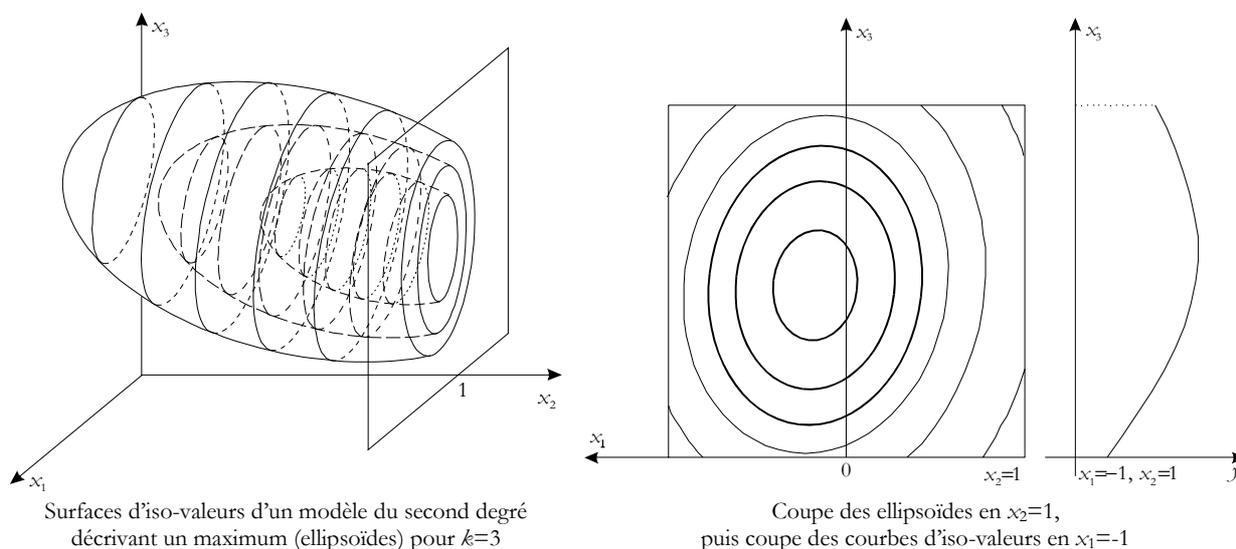
$$\delta_0 = b_0 + \mathbf{w}' \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{b}_p \\ \mathbf{b}_q \end{bmatrix} + \mathbf{w}' \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{pp} & \mathbf{B}_{pq} \\ \mathbf{B}_{qp} & \mathbf{B}_{qq} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{w}$$

$$\boldsymbol{\delta} = \mathbf{b}_\alpha + 2 \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{cp} & \mathbf{B}_{cq} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{w}$$

$$\boldsymbol{\Delta} = \mathbf{B}_{\alpha\alpha}$$

Ce dernier cas correspond par exemple à la détermination de l'expression d'un modèle du second degré, lorsque la valeur d'un facteur parmi les  $k$  est fixée. L'opération revient donc à réaliser une réduction du nombre de dimensions du problème.

Les relations précédentes montrent donc que tout modèle du second degré reste un modèle du second degré dans chacune de ses sous-dimensions (dans les cas où au moins 1 facteur reste constant).



### 5.1.2.2 Translation

Toutes les valeurs de  $\mathbf{x}$  sont soumises au changement traduit par la relation :

$$\mathbf{w} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_j$$

## Opérations sur modèles polynomiaux

Alors on aboutit à une relation quadratique :

$$y_{\text{mod}} = t_0 + \mathbf{w}' \cdot \mathbf{t} + \mathbf{w}' \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{w}$$

Avec :

$$t_0 = b_0 + \mathbf{x}'_s \cdot \mathbf{b} + \mathbf{x}'_s \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}_s$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{b} + 2 \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}_s$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{B}$$

Si  $\mathbf{x}_s$  correspond aux coordonnées du point stationnaire du modèle du second degré étudié, alors on a plus simplement  $t_0 = y_s$  et  $\mathbf{t} = \mathbf{0}_{k \times 1}$ .

### 5.1.2.3 Rotation

Toutes les valeurs de  $\mathbf{x}$  sont transformées par l'équation :

$$\mathbf{x} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{z}$$

Où  $\mathbf{M}$  est la matrice (carrée) de rotation.

D'où la relation :

$$y_{\text{mod}} = r_0 + \mathbf{z}' \cdot \mathbf{r} + \mathbf{z}' \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{z}$$

Avec :

$$r_0 = b_0$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{b}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{M}$$

### 5.1.2.4 Rotation et translation

On effectue alors une rotation puis une translation comme décrit précédemment. On aboutit à la nouvelle écriture qui suit :

$$y_{\text{mod}} = s_0 + \mathbf{v} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{v}' \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{v}$$

Avec :

$$s_0 = b_0 + \mathbf{x}'_s \cdot \mathbf{b} + \mathbf{x}'_s \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}_s$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{M}' (\mathbf{b} + 2 \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}_s)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{M}' \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{M}$$

Si  $\mathbf{x}_s$  correspond aux coordonnées du point stationnaire du modèle du second degré étudié, alors on a plus simplement  $s_0 = y_s$  et  $\mathbf{s} = \mathbf{0}_{k \times 1}$  (puisque dans ce cas  $\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2} \cdot \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{b}$ ). De plus, si  $\mathbf{M}$  est la matrice des vecteurs propres de la matrice  $\mathbf{B}$ , alors on a de plus (par définition)  $\mathbf{S} = \mathbf{A}$ .

### 5.1.3. Augmentation de l'ordre du modèle

A partir d'un modèle existant d'ordre  $o$  à  $k$  facteurs, on cherche à ajouter un certain nombre d'expériences afin qu'il soit possible de construire un nouveau modèle d'ordre  $o+n$  ( $n$  entier strictement positif) à  $k$  facteurs.

Le nombre minimum d'expériences à ajouter est  $\delta o_n = \nu(k, o+n) - \nu(k, o)$ .

Ou également  $\delta o_n = \nu(k, o) \left\{ \prod_{i=1}^n \left( \frac{k}{o+i} + 1 \right) - 1 \right\}$ .

Enfin, dans le cas habituel où  $n=1$ , on obtient  $\delta o_1 = C_{k+o}^{k-1}$ .

## Opérations sur modèles polynomiaux

### 5.1.4. Augmentation du nombre de facteurs

A partir d'un modèle existant d'ordre  $o$  à  $k$  facteurs, on cherche à ajouter un certain nombre d'expériences afin qu'il soit possible de construire un nouveau modèle de même ordre  $o$ , mais à  $k+n$  facteurs ( $n$  entier strictement positif).

Le nombre minimum d'expériences à ajouter est ici  $\delta\kappa_n = \nu(k+n, o) - \nu(k, o)$ .

Ou également  $\delta\kappa_n = \nu(k, o) \left\{ \prod_{i=1}^n \left( \frac{o}{k+i} + 1 \right) - 1 \right\}$ .

Enfin, dans le cas usuel où  $n=1$ , on obtient  $\delta\kappa_1 = C_{k+o}^{k+1}$ .

## 6. Volumes hyper-dimensionnels

### 6.1. Volumes hyper-rectangulaires

Considérons un domaine d'étude hyper-rectangulaire, défini par les bornes de variation des  $k$  facteurs de l'étude. Si tout facteur  $i$  est défini par ses bornes supérieure  $b_{\text{sup},i}$  et inférieure  $b_{\text{inf},i}$ , alors  $V_k$  se calcule comme :

$$V_{\text{cube}}(k) = \prod_{i=1}^k (b_{\text{sup},i} - b_{\text{inf},i})$$

Si, de plus, les coordonnées des points d'expériences sont centrées et homogénéisées, on aura, pour toute valeur entière  $i$  comprise entre 1 et  $k$  :

$$b_{\text{sup},i} - b_{\text{inf},i} = a$$

Le DE est alors un hyper-cube dont chaque côté est de longueur  $a$ .

Le volume du domaine d'étude est donc :

$$V_{\text{cube}}(k, a) = a^k$$

### 6.2. Volumes hyper-sphériques

On se met dans les mêmes hypothèses que dans le paragraphe précédent. On considère ainsi une hyper-sphère de rayon  $R$ , centrée sur l'origine des coordonnées.

On peut montrer que le volume  $V_k$  de cette hyper-sphère est donné par ce qui suit.

➤ Si  $k = 2 \cdot p$  ( $k$  pair) :

$$V_{\text{sphère}}(k, R) = \frac{\pi^p \cdot R^k}{p!}$$

➤ Si  $k = 2 \cdot p + 1$  ( $k$  impair) :

$$V_{\text{sphère}}(k, R) = \frac{(2 \cdot R)^k \cdot \pi^p \cdot p!}{k!}$$

On remarque la présence d'un maximum pour cette fonction  $V_{\text{sphère}}(k, R)$ , relativement au paramètre  $k$ , pour toute valeur de  $R$  maintenue constante. Ce maximum varie en fonction de la valeur de  $R$ .

Cet aspect singulier rend l'exploitation de la caractéristique du volume couvert par les plans à influence hyper-sphérique délicate, car fonction de  $k$  et de  $R$  à la fois.

		Nombre de dimensions de l'espace ( $k$ )										
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
R	1	3.141593	4.18879	4.934802	5.263789	5.167713	4.724766	4.058712	3.298509	2.550164	1.884104	1.335263
	1.1	3.801327	5.575279	7.225044	8.477385	9.154918	9.207232	8.700209	7.777711	6.614469	5.375568	4.190626

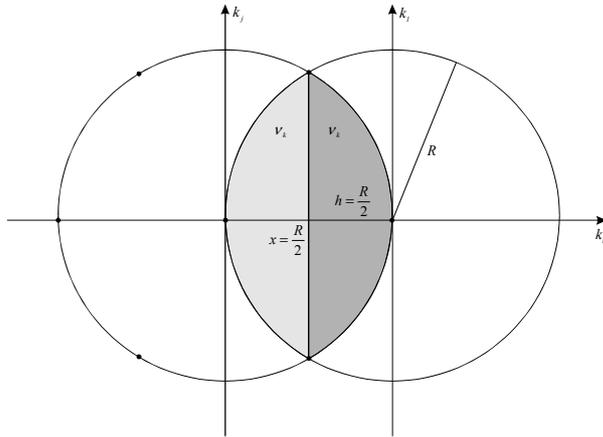
### 6.3. Volumes de secteurs hyper-sphériques

L'annexe 2 présente les configurations les plus intéressantes quant aux récupérations de points entre plans. Pour chaque possibilité est calculé le volume commun aux 2 plans partageant les points d'expériences.

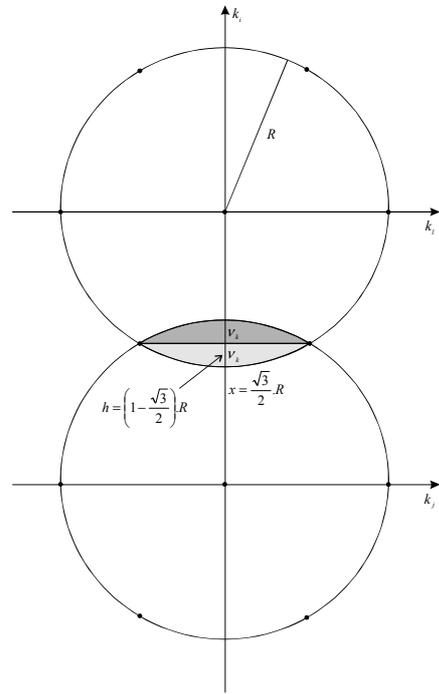
## Volumes hyper-dimensionnels

Dans le cas des plans pour lesquels les modèles sont valides sur des volumes hyper-sphériques (plans de Doehlert, centraux composites par exemple), le volume commun ( $V_c$ ) est alors l'espace partagé par 2 hyper-sphères de mêmes rayons.

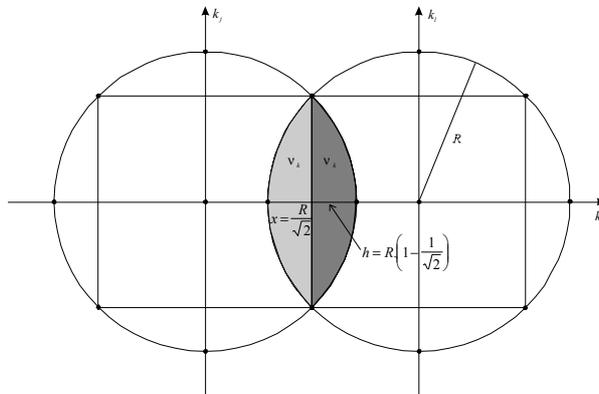
On identifie alors 3 configurations importantes. Elles sont représentées ci-après.



Configuration n°1  
*Plan de Doehlert (mode 1) – Plan central composite (mode 2)*



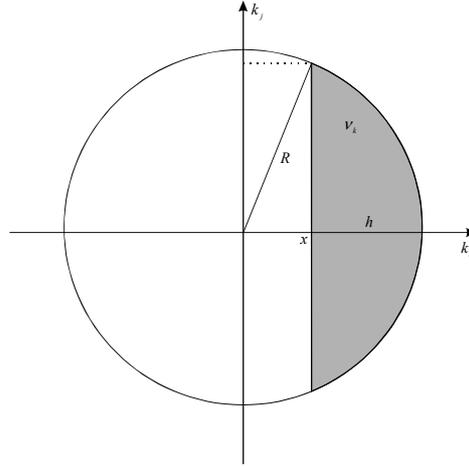
Configuration n°2  
*Plan de Doehlert (mode 2)*



Configuration n°3 – *Plan central composite (mode 1)*

Pour généraliser le problème posé, on cherche à calculer la partie  $v_k$  du volume de l'hyper-sphère comprise entre l'abscisse  $k_i = x$  et  $k_i = R$  (zone grisée dans la figure ci-dessous).

## Volumes hyper-dimensionnels



On cherche donc la valeur de :

$$v_k = \int_{x=R-h}^R V_{k-1} dx$$

Il faut donc distinguer les cas pour lesquels  $k$  est pair et les autres pour lesquels  $k$  est impair.  
La démonstration des résultats suivants n'est pas reportée ici.

➤ Si  $k = 2.p + 2$  ( $k$  pair)

$$v_k = \frac{\pi^p \cdot R^k}{(k/2)!} \left\{ \arccos(1 - \beta) - \frac{2^k \cdot ((k/2)!)^2}{k \cdot k!} \cdot (1 - \beta) \cdot \sqrt{\beta \cdot (2 - \beta)} \cdot \left[ (\beta \cdot (1 - \beta))^{\frac{k}{2} - 1} + \sum_{j=2}^{k/2} \left( \prod_{l=2}^j \frac{k - (2l - 3)}{k - (2l - 2)} \right) \cdot (\beta \cdot (1 - \beta))^{\frac{k}{2} - j} \right] \right\}$$

Avec  $\beta = \frac{h}{R}$  et  $p = \frac{k}{2} - 1$ .

Dans le cas où  $h = \frac{R}{2}$  (configuration n°1), alors  $\beta = \frac{1}{2}$ , d'où  $(1 - \beta) = \frac{1}{2}$  et  $\beta \cdot (2 - \beta) = \frac{3}{4}$ .  
 $v_k$  s'écrit alors :

$$v_k = \frac{\pi^p \cdot R^k}{(k/2)!} \left\{ \frac{\pi}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot \frac{2^k \cdot ((k/2)!)^2}{k \cdot k!} \cdot \left[ \left( \frac{3}{4} \right)^{\frac{k}{2} - 1} + \sum_{j=2}^{k/2} \left( \prod_{l=2}^j \frac{k - (2l - 3)}{k - (2l - 2)} \right) \cdot \left( \frac{3}{4} \right)^{\frac{k}{2} - j} \right] \right\}$$

➤ Si  $k = 2.p + 1$  ( $k$  impair)

$$v_k = \pi^p \cdot R^k \cdot \left[ \sum_{i=0}^p \frac{(-1)^i}{i! \cdot (p - i)! \cdot (2i + 1)} \cdot (1 - (1 - \beta)^{2i + 1}) \right]$$

Avec  $\beta = \frac{h}{R}$ ,  $p = \frac{k - 1}{2}$ .

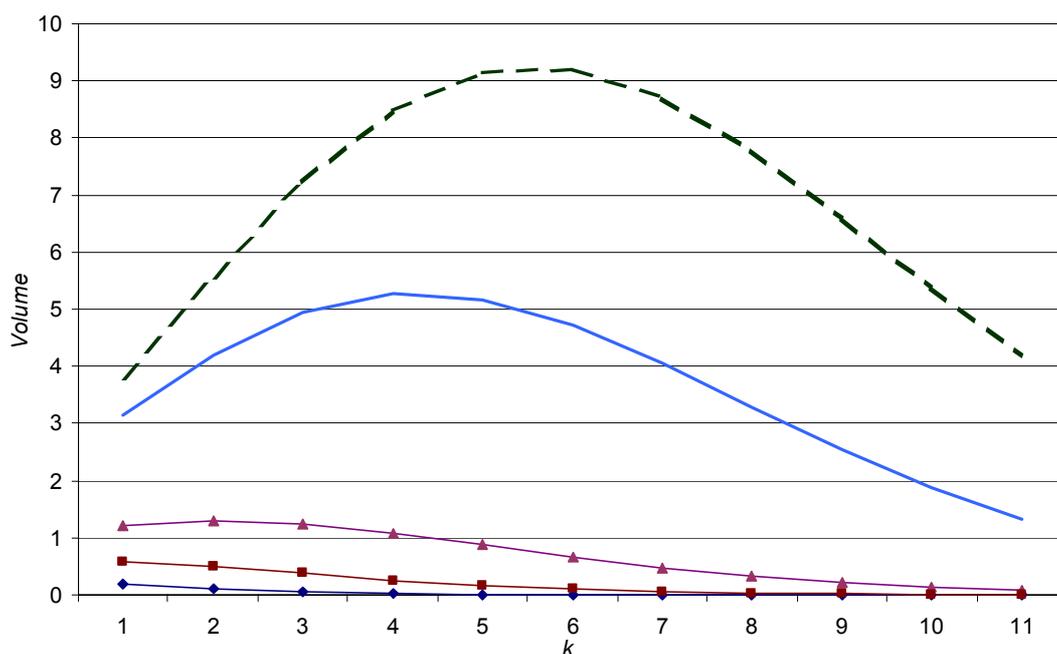
Dans le cas particulier où  $h = \frac{R}{2}$  (configuration n°1), le résultat se simplifie de la manière suivante :

## Volumes hyper-dimensionnels

$$v_k = \pi^p \cdot R^k \cdot \left[ \sum_{i=0}^p \frac{(-1)^{i+1} \cdot (1 - 2^{2i+1})}{i!(p-i)!(2i+1) \cdot 2^{2i+1}} \right]$$

Le tableau ci-dessous donne les valeurs des volumes communs dans les 2 configurations présentées précédemment. Il s'agit ainsi de la grandeur  $V_c = 2 \cdot v_k$ . Ces valeurs sont données pour  $R=1$ .

$V_c$	Nombre de dimensions de l'espace ( $k$ )										
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	
Conf	1	1.22837	1.308997	1.249344	1.089769	0.8809434	0.6667272	0.4761145	0.3227743	0.2087672	0.1293532
	2	0.1811721	0.1077416	0.0578596	0.0285505	0.0131053	0.0056475	0.0023011	8.91573e-4	3.29995e-4	1.17129e-4
	3	0.5707963	0.4863877	0.373006	0.2622697	0.1712864	0.1049082	0.0607036	0.0333794	0.0175255	0.0088206



Volume du domaine hyper-sphérique en fonction du nombre de dimensions de l'espace ( $k$ ) pour 2 valeurs du rayon  $R$  ( $R=1$  (—) et  $R=1.1$  (-.-))

Volumes communs ( $V_c$ ) en fonction du nombre de dimensions de l'espace ( $k$ ) dans les 3 configurations étudiées (configuration n°1 ( $\blacktriangle$ ), n°2 ( $\blacksquare$ ) et n°3 ( $\blacklozenge$ ) –  $R=1$ )