

Table des matières

1	Introduction générale	1
1.1	Premières définitions	1
1.2	Définitions formelles et notations	3
1.2.1	Cause et conséquence	3
1.2.2	Facteur expérimental	3
1.2.3	Facteur de nuisance (ou de bruit)	4
1.2.4	Codage des facteurs	4
1.2.5	Domaine expérimental	5
1.2.6	Expérience	5
1.2.7	Réponse expérimentale	6
1.3	Le modèle	7
1.3.1	Forme générale	7
1.3.2	Types de modèles postulables	8
1.3.3	Modèles d'analyse de la variance	8
1.3.4	Modèles de régression linéaire	9
1.4	Le plan d'expériences	10
1.4.1	Forme générale	10
1.4.2	Plan d'expérimentation	11
1.4.3	Les principaux types de plans d'expériences	11
1.5	Principes fondateurs de la méthode des plans d'expériences	12
1.6	Une étape du schéma hypothético-déductif	13
1.7	Quelques exemples d'application	14
1.7.1	Rendement d'une réaction chimique	15
1.7.2	Superacides	15
1.7.3	Enduction	16
1.7.4	Fongicides	16
1.7.5	Prairies	16
1.7.6	Poudres levantes	17
1.7.7	Dépôts épitaxiaux	17
1.7.8	Ressorts de suspension pour camions	18
1.7.9	Caséine dans le lait	18
1.7.10	Essais cliniques	18
1.7.11	Listeria monocytogenes dans la filière lait cru	19

1.7.12	Enoxaparine	19
1.7.13	Libération contrôlée de principe actif	20
1.8	Exemples de sensibilisation	20
1.8.1	La droite de régression	20
1.8.2	Le modèle monoexponentiel	22
2	Le plan factoriel complet 2^p	25
2.1	Le modèle postulé	25
2.2	Domaine expérimental	26
2.3	Interprétation de la notion d'interaction	26
2.3.1	Première interprétation	26
2.3.2	Seconde interprétation	29
2.4	Le plan d'expériences	29
2.5	Etude du cas à trois facteurs	29
2.5.1	Modèle et plan	29
2.5.2	Propriétés de la matrice de modèle	31
2.5.3	Estimation des effets	31
2.6	Rappels de régression linéaire	34
2.6.1	Estimation	34
2.6.2	Validité statistique	35
2.6.3	Simplification dans le cas du plan 2^p	35
2.6.4	Calcul d'une variance résiduelle	36
2.7	Validité expérimentale	44
2.7.1	Sans estimation d'une variance résiduelle	44
2.7.2	Avec estimation d'une variance résiduelle	44
2.8	Un exemple d'application du plan 2^3	46
2.8.1	Le problème à étudier	46
2.8.2	La construction du plan d'expériences et du plan d'expérimentation	46
2.8.3	Analyse des résultats	49
2.9	Conclusion sur le plan factoriel complet 2^p	55
3	Le plan factoriel 2^{p-k}	57
3.1	Introduction	57
3.2	Principe de construction des plans fractionnaires	57
3.3	Fractionnement du plan 2^3	58
3.3.1	Les fractions 2^{3-1}	58
3.3.2	Conséquences sur le modèle	59
3.3.3	Générateur de fraction du plan 2^3	61
3.3.4	Conséquences sur les estimations des effets	62
3.4	Fractionnement du plan 2^4	64
3.4.1	Les fractions 2^{4-1}	64
3.4.2	Les fractions 2^{4-2}	65
3.5	Fractionnement du plan 2^5	65
3.5.1	Les fractions 2^{5-1}	65

3.5.2	Les fractions 2^{5-2}	67
3.6	Notion de résolution	70
3.6.1	Définition	70
3.6.2	Deux fractions de même taille et de résolution différente	70
3.7	La fraction 2^{7-4} et sa fold-over	73
3.7.1	Construction	73
3.7.2	Un exemple d'application de la fraction 2^{7-4} et de sa fold-over	76
3.8	Tableaux récapitulatifs	79
3.9	Construction des fractions avec la procédure Factex	81
3.9.1	Fraction 2^{5-1} de résolution V	81
3.9.2	Fraction 2^{7-4} de résolution III	83
3.9.3	Fractions 2^{8-4} de résolutions III et IV	85
3.10	Matrices d'Hadamard	88
3.10.1	Définition	88
3.10.2	Construction de quelques matrices d'Hadamard	89
3.10.3	Etude de la matrice d'Hadamard H_{12}	92
3.10.4	Le modèle associé aux matrices d'Hadamard	93
3.10.5	Quelques exemples d'application	93
3.11	La matrice d'alias	95
3.11.1	Définition	95
3.11.2	Un exemple d'utilisation	96
3.12	Conclusion sur le plan 2^{p-k}	97
4	Le plan factoriel à trois niveaux	99
4.1	Introduction	99
4.2	Les codages	100
4.3	Le plan factoriel complet 3^2	100
4.3.1	Matrice du modèle du plan 3^2 avec le codage additif	100
4.3.2	Matrice du modèle du 3^2 avec le codage multiplicatif	102
4.3.3	Définition des effets factoriels via le codage par les racines cubiques de l'unité	102
4.4	Méthode d'analyse de la variance	104
4.4.1	Le modèle	105
4.4.2	Contraintes et tests sur les effets	106
4.4.3	Les sommes de carrés	106
4.4.4	Les nombres de degrés de liberté	107
4.4.5	Les espérances de carrés moyens	108
4.4.6	Table d'analyse de la variance	108
4.4.7	Calcul simplifié des sommes de carrés	109
4.4.8	Analyse des résidus	109
4.4.9	Estimation des effets des modalités des facteurs	110
4.4.10	Cas d'une seule observation par case ($r = 1$)	112
4.4.11	Comparaisons multiples	113

4.4.12	Conclusion sur l'analyse de variance	113
4.5	Exemple d'analyse des résultats d'un plan 3^2	114
4.5.1	Les données	114
4.5.2	Analyse de variance	116
4.5.3	Calcul des estimations des effets des modalités des facteurs	120
4.5.4	Comparaison des modalités des facteurs	121
4.5.5	Calcul des estimation des effets des facteurs	123
4.6	Le plan factoriel complet 3^3	123
4.7	Formule générale pour le 3^p	124
4.8	Le plan factoriel fractionnaire 3^{p-k}	124
4.8.1	Fractionnement du plan 3^3 avec le codage multiplicatif	124
4.8.2	Fractionnement du plan 3^3 avec le codage additif	128
4.8.3	La fraction 3^{13-10} de résolution III	128
4.9	Conclusion	131
5	Le plan factoriel asymétrique	133
5.1	Introduction	133
5.2	Plan factoriel complet asymétrique	133
5.2.1	Facteurs à deux et trois niveaux	133
5.2.2	Facteurs à deux et quatre niveaux	146
5.3	Plan factoriel fractionnaire asymétrique	147
5.3.1	Plans factoriels fractionnaires asymétrique à deux et trois niveaux	147
5.3.2	Plans factoriels fractionnaires asymétriques à deux et quatre niveaux	156
5.4	Conclusion	165
6	Plan en blocs et randomisation	167
6.1	Introduction	167
6.2	Le plan complet randomisé	168
6.3	Le plan en blocs complets et randomisés	169
6.3.1	Approche de la notion de bloc par l'exemple	169
6.3.2	Un exemple de blocs complets randomisés en milieu agronomique .	178
6.4	Le plan "split-plot" (en parcelles divisées)	179
6.4.1	Description	179
6.4.2	Un exemple formel	180
6.4.3	Traitement détaillé d'un exemple réel de split-plot	180
7	Le plan factoriel à deux niveaux en blocs	189
7.1	Introduction	189
7.2	Blocking du plan complet 2^3	189
7.2.1	Deux blocs de taille 4	189
7.2.2	Blocs de taille 2	192
7.3	Plan complet 2^6 en 8 blocs de taille 8	193
7.4	Principe général de construction des blocs pour les plans 2^p	198
7.4.1	Avec un seul facteur bloc	198

7.4.2	Avec s facteurs bloc	199
7.5	Plans factoriels fractionnaires en blocs	200
7.6	Construction des blocs avec la procédure Factex	201
8	Plans en carrés latins	211
8.1	Plan en carré latin	211
8.1.1	Plan en carré latin d'ordre 3	212
8.1.2	Plans en carrés latins 4×4 et suivants	215
8.1.3	Modèle associé au plan en carré latin	216
8.2	Plan en carré latin généralisé : gréco-latin et suivants	221
8.2.1	Définition d'un carré gréco-latin	221
8.2.2	Plan en carré gréco-latin d'ordre 3	221
8.2.3	Plans en carré gréco-latin d'ordre 4 et plus	224
8.2.4	Plans en carré hyper-gréco-latin	226
8.2.5	Modèle associé au plan en carré latin généralisé	226
8.3	Génération des carrés latins et carrés latins généralisés avec SAS	226
8.4	Exemples d'application des carrés latins et carrés latins généralisés	234
8.4.1	Carré latin d'ordre 6	234
8.4.2	Carré gréco-latin d'ordre 4	240
8.4.3	Etude pharmacocinétique à base de carré latin	241
8.4.4	Le plan split-plot en carré latin	249
8.4.5	Le plan en "cross-over"	250
9	Plans en dispositifs incomplets	257
9.1	Introduction	257
9.2	Les blocs incomplets équilibrés	257
9.2.1	Deux exemples introductifs	258
9.2.2	Condition nécessaire d'existence	259
9.2.3	Analyse de la variance des blocs incomplets	260
9.2.4	Discussion	260
9.2.5	Génération avec SAS	261
9.3	Les réseaux carrés équilibrés	267
9.4	Les carrés latins incomplets	268
9.5	Les blocs incomplets et les réseaux non équilibrés	270
9.6	Traitement d'un exemple en agronomie	270
9.6.1	Le dispositif expérimental	270
9.6.2	Analyse des résultats	271
9.7	Conclusion	274
10	Plans de surface de réponse	279
10.1	Introduction	279
10.2	Etude générale	281
10.2.1	Trois propriétés recherchées	281
10.2.2	Codage des facteurs expérimentaux	282

10.2.3	Matrice des moments	282
10.2.4	Condition nécessaire et suffisante d'isovariance par rotation	284
10.2.5	Précision uniforme et isovariance par rotation	293
10.2.6	C -orthogonalité et isovariance par rotation	293
10.2.7	Codage par polynomes orthogonaux	295
10.3	Le plan 3^p	299
10.3.1	Modèle et matrice de modèle	299
10.3.2	Un exemple de plan 3^2 pour deux facteurs continus	300
10.3.3	Propriétés du 3^p	308
10.4	Le plan composite centré	311
10.4.1	Définition	311
10.4.2	Condition sur N_0	312
10.4.3	Conditions pour l'isovariance par rotation	313
10.4.4	Relation entre N_F et α	313
10.4.5	Détermination de α et C -orthogonalité	314
10.4.6	Relation de N_0	314
10.4.7	Isovariance par rotation et précision presque uniforme	314
10.4.8	Tableaux résumés	315
10.4.9	Un exemple d'application réelle du plan composite centré	316
10.5	Le plan cuboctaèdre factoriel	324
10.5.1	Construction	324
10.5.2	Propriétés	325
10.5.3	Un exemple d'application réelle du cuboctaèdre factoriel	326
10.6	Utilisation de la matrice d'alias	333
10.6.1	Exemple 1	333
10.6.2	Exemple 2	334
11	Introduction aux plans optimaux pour modèles linéaires	337
11.1	Introduction	337
11.2	Quelques exemples de situations où les plans d'expériences usuels ne sont pas adaptés	337
11.2.1	Contraintes géométriques	337
11.2.2	Autres contraintes	339
11.3	Définitions et notations	339
11.4	Idées fondatrices de J. Kiefer	340
11.5	Types de plans	341
11.5.1	Plan approximatif	341
11.5.2	Le plan discret-exact (exact design)	342
11.6	Plans D-optimaux	343
11.6.1	Définitions	343
11.7	Autres critères d'optimalité	343
11.7.1	Critère de D_A -optimalité	343
11.7.2	Critère de D_S -optimalité	344

11.7.3	Critère de A -optimalité	344
11.7.4	Critère de E -optimalité	344
11.8	Lien avec l'ellipsoïde de confiance	345
11.9	Critère de G -optimalité	345
11.10	Équivalence entre G - et D -optimalités continues	346
11.10.1	Exemple : Plan G -optimal pour la régression simple	347
11.10.2	Exemple : Plan G -optimal pour la régression quadratique	348
11.11	Méthodes de construction des plans approximatifs D -optimaux	349
11.11.1	Généralités	349
11.11.2	Algorithmes de Wynn (1970) et Fedorov (1972)	350
11.11.3	Algorithmes de Fedorov (1972)	352
11.11.4	Algorithme de Wynn (1970)	353
11.11.5	Algorithme de Torsney (1988)	353
11.12	Méthodes de construction des plans D -optimaux discrets	358
11.12.1	Algorithmes d'échange : principe	358
11.12.2	Algorithme d'échange double de Fedorov (1972)	359
11.12.3	Inconvénients	360
11.12.4	Construction des plans D -optimaux discrets avec la procédure OP- TEX de SAS	361
12	Conclusion générale	375
12.1	Plans pour problèmes de mélange et formulation (chimique, galénique, cosmétique, alimentaire, ...)	375
12.2	Plans pour problèmes de mélange avec facteurs externes	375
12.3	Plans d'expériences numériques	376
12.4	Plans pour modèles non linéaires (régression non linéaire, réseaux de neu- rones)	376
12.5	Et d'autres,	376
A	Ouvrages sur les plans d'expériences	379
B	Sous-programme Torsney (plan continu) et programme Moptex (suite de plans D-optimaux discrets)	385

Préface

Ce document est un polycopié de cours d'introduction à la méthode des plans d'expériences qui s'inscrit dans une démarche de planification expérimentale, méthode également connue en France sous la dénomination de méthodologie de la recherche expérimentale. En anglais, les dénominations "design of experiments" et "statistical designs of experiments" sont les plus utilisées. C'est une méthode, théorique et pratique, utilisable *a priori* en toute science expérimentale, qu'on peut définir dans un premier temps simplement comme une approche générale d'optimisation de la planification des expériences sous la contrainte de postulation d'un modèle mathématique du phénomène étudié.

Ce polycopié s'adresse principalement à des étudiants d'écoles supérieures de Statistique (ISUP-Paris VI, Ecole Nationale Supérieure de l'Analyse de l'Information (ENSAI, Rennes), ...), ou de masters professionnels de Statistique. Les élèves des écoles d'ingénieurs doivent pouvoir aussi tirer profit de la lecture de ce polycopié, après avoir reçu un enseignement de base en Statistique.

Ce polycopié vise à donner un panorama introductif assez large sur cette méthode et n'est pas focalisé sur un compartiment particulier de celle-ci. Ainsi, nous n'avons pas voulu la présenter sous un angle trop mathématique, même si l'algèbre, la statistique mathématique, l'analyse convexe, et l'optimisation, sont des branches des mathématiques fondatrices des aspects théoriques de la méthode. Une présentation très mathématiquement formalisée, serait en effet plus adaptée à des étudiants de masters recherche ou d'écoles doctorales souhaitant se spécialiser sur la méthode. Donc, seules des notions de base en statistique sont nécessaires pour appréhender le sujet de ce polycopié.

Cette méthode constitue maintenant un sujet d'enseignement et de recherche bien vaste, depuis les recherches théoriques pionnières de R.A. Fisher, pour des applications essentiellement agronomiques, dans les années 1925 à 1935, jusqu'à aujourd'hui où les expériences peuvent être simulées sur ordinateur.

Les principaux objectifs de ce polycopié sont :

- un exposé des principes théoriques et pratiques,
- de montrer les modes de construction et d'analyse des principaux plans d'expériences, à l'aide des procédures FACTEX, PLAN, OPTEX, ANOVA, GLM, REG du logiciel SAS, et quelques procédures de l'auteur écrites en langage SAS/IML.
- de présenter de nombreux exemples d'application inspirés de situations réelles pour démontrer l'efficacité de la méthode.

Enfin, ce polycopié de cours n'étant qu'une introduction, les explications données

oralement doivent éclairer plusieurs des aspects abordés ici.

On trouvera une bibliographie conséquente à la fin du document, et notamment une liste d'ouvrages dont le niveau de difficulté est indiqué par des étoiles. Parmi les ouvrages de cette liste plusieurs ont servi, avec de larges emprunts pour certains – que leurs auteurs respectifs en soient ici remerciés – à la rédaction de ce polycopié. Ce sont principalement, par ordre alphabétique :

- Atkinson, A.C., Donev, A.N., 1992. Optimum experimental designs. Oxford : Clarendon Press.
- Box G.E.P., Hunter, W.G., Hunter, J. S., 1980. Statistics for experimenters. John Wiley & Sons, New York.
- Box, G.E.P., Draper, N. R. , 1987. Empirical Model-Building and Response Surfaces. John Wiley & Sons, New York.
- Cochran, W.G., Cox, G.M., 1957. Experimental Designs. John Wiley & Sons, New York.
- Dagnelie, P., 1981. Principes d'expérimentation. Les Presses Agronomiques de Gembloux, ASBL, Gembloux, Belgique.
- Dreesbeke, J.-J., Fine, J., Saporta, G., Dagnelie, P., Kobilinsky, A., Mathieu, D., Phan-Tan-Luu, R., Gauchi, J.-P., 1997. Plans d'expériences-Applications à l'entreprise. Technip, Paris.
- Fedorov, V. V., 1972. Theory of optimal Experiments. Academic Press, New-York.
- Khuri, A.I., Cornell, J.A., 1987. Response surfaces : Designs and analyses. Marcel Dekker.
- Montgomery, D.C., 1991. Design and Analysis of Experiments. Third Edition. John Wiley & Sons, New York.
- Silvey, S. D., 1980. Optimal Design, Chapman and Hall, Londres.
- Snedecor, G.W., Cochran, W.G., 1957. Méthodes statistiques. Association de Co-ordination Technique Agricole, Paris.
- Vessereau, A., 1988. Méthodes statistiques en biologie et en agronomie. Technique et Documentation (Lavoisier), Paris.

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Premières définitions

La méthode des plans d'expériences **visent à optimiser le recueil d'information quantifiable** sur un phénomène physique, au sens large, c'est-à-dire du type que l'on rencontre dans les sciences expérimentales (physique, chimie, biologie, médecine, agronomie,), toujours supposé empreint d'une **variabilité "naturelle" irréductible**, expression que nous expliciterons plus loin. Généralement, cette méthode est mise en oeuvre dans les laboratoires de recherche et développement, mais on peut aussi la trouver mise en pratique dans un milieu plus franchement industriel, par exemple pour aider à résoudre les problèmes de qualité. Aux phénomènes physiques on pourrait rajouter aujourd'hui les phénomènes simulés sur ordinateur, via des modèles dits "numériques", pour lesquels la méthode des plans d'expériences s'est adaptée en proposant de nouveaux outils (avec une redéfinition de la variabilité) mais cet aspect ne sera pas traité dans ce polycopié.

Optimiser signifie ici que l'on va déterminer un ensemble (un plan) d'expériences défini par :

- le "bon" nombre d'expériences à réaliser, en espérant qu'il soit le plus faible possible,
- le nombre de répétitions de chacune de ces "bonnes" expériences,
- les coordonnées, dans l'espace des facteurs expérimentaux, de ces "bonnes" expériences,
- la réalisation de celles-ci en les répartissant par blocs à structure particulière ou non ,
- l'ordre dans lequel les réaliser (aléatoire ou non), en présence de blocs ou non.

sous les **contraintes** suivantes :

- les contraintes physiques (typiquement sur les plages de variation des facteurs expérimentaux, indépendants ou non), économiques (toute expérience a un coût !), éthiques (par exemple pour les expériences dans le cadre d'essais cliniques sur animaux et humains); ces contraintes définissent le cadre général du phénomène étudié,

- la postulation d'un modèle mathématique (de nature statistique ou stochastique) – qui peut être simplissime si très peu d'information est disponible sur le phénomène étudié, au début de l'étude – de forme analytique ou sous forme d'une ou plusieurs équations différentielles.

Les outils utilisés pour conduire cette optimisation sont des **ensembles** d'expériences à structure particulière, appelés **plans d'expériences, optimaux** – en plusieurs sens possibles qui vont permettre de préciser l'acception "bonnes expériences" – **par rapport à un modèle statistique postulé a priori**. Une fois le plan mathématiquement parfaitement défini, les expériences elles-mêmes sont réalisées dans le monde réel (ou sur ordinateur) dans le cadre d'un plan d'expérimentation, forme physiquement utilisable du plan d'expériences.

Ces plans d'expériences sont donc des ensembles – de cardinal le plus faible possible (les contraintes budgétaires y obligent) – de "bonnes" expériences. L'acception de "bonnes" signifie qu'elles sont **organisées** selon un critère d'optimalité choisi *a priori* pour estimer "**au mieux**" le modèle statistique postulé *a priori*. L'espérance de ce modèle est supposée approcher le mieux possible le phénomène étudié pour lequel le "vrai" modèle est en général inconnu. D'autre part, des hypothèses (qui peuvent être minimales dans certaines situations) doivent être posées sur la loi de probabilité du terme d'erreur traduisant la variabilité expérimentale, ainsi que sur la nature de celle-ci. Selon que la variabilité sera uniforme ou non sur le domaine expérimental, constante ou non dans le temps, on fera l'hypothèse d'une variance d'erreur (ou des observations) homoscédastique ou hétéroscédastique, basée sur des erreurs indépendantes ou corrélées.

L'expression "au mieux" peut recouvrir plusieurs acceptions, mais typiquement ce peut être le souhait légitime d'obtenir *in fine* des estimations à biais nuls (ou faibles) ou de faible variance, ou à erreurs quadratiques moyennes faibles, pour les paramètres du modèle postulé. Plus largement, en plus de cette estimation "optimisée" des paramètres, on peut énumérer quelques **objectifs méthodologiques majeurs** de la méthode des plans d'expériences :

- l'obtention de modèles à variance de prédiction minimisée, relativement à son maximum ou en moyenne,
- l'obtention d'un optimum d'une combinaison des niveaux des facteurs qui soit stable (robuste à des variations faibles de leurs niveaux nominaux ou de consigne),
- la discrimination optimisée entre deux ou plusieurs modèles postulés,
- la sélection d'expériences informatives dans des grands ensembles discrets d'expériences (lorsque des bases de données pré-existent à l'étude),
- l'optimisation de la construction de certains types de modèles non linéaires (réseaux de neurone, modèles dynamiques ...).

Pour terminer ce paragraphe nous voulons souligner qu'il est donc très important de comprendre que **le modèle et le plan sont consubstantiels**, le second ne pouvant pas être construit indépendamment du premier.

1.2 Définitions formelles et notations

Il faut souligner tout d'abord que chaque secteur d'application a, dans une certaine mesure, ses définitions propres, ce qui rend particulièrement difficile une normalisation du vocabulaire. Néanmoins, la norme AFNOR X06080 de Novembre 1989 relative au vocabulaire des plans d'expériences concrétise l'effort de plusieurs spécialistes qui ont cherché à progresser dans cette voie. On s'inspirera de cette norme pour proposer les quelques définitions de base suivantes, tout en les mettant à jour si besoin est.

1.2.1 Cause et conséquence

La formulation première d'un problème consiste la plupart du temps à énoncer des hypothèses quant aux relations entre des phénomènes observés et leurs origines. L'objet de la planification expérimentale consiste alors à mettre en évidence des relations entre les causes **présumées** et leurs conséquences **observées**. De façon plus formalisée, la méthode des plans d'expériences elle-même fournit un guide pour traduire une assez large catégorie de problèmes, en termes de travaux expérimentaux et de modalités d'analyse des résultats de ces essais.

1.2.2 Facteur expérimental

En général on utilisera simplement le terme de facteur. C'est une cause *a priori* possible des variations du phénomène étudié. C'est un facteur contrôlable qui peut participer à la construction du plan d'expériences, c'est-à-dire qu'on peut le fixer (avec une erreur de réglage négligeable) à certains **niveaux** ou **modalités** (ce dernier terme étant réservé parfois aux facteurs qualitatifs définis ci-dessous). Le nombre de facteurs qui peut être étudié n'est pas limité *a priori*, d'un point de vue théorique. Avec un seul facteur, on peut déjà faire un plan d'expériences non trivial, particulièrement quand le facteur est continu.

Un facteur peut être :

- de nature intrinsèquement qualitative (c'est un facteur discret) ; c'est par exemple le facteur "sexe" dans les essais cliniques,
- de nature intrinsèquement quantitative (c'est un facteur continu) ; c'est par exemple la température,
- de nature quantitative ordonnable, par exemple un produit pharmaceutique ou agricole utilisé à des doses bien déterminées (pas forcément équidistantes) ; dans ce cas le facteur "dose" sera considéré comme un facteur discret.

On notera X_j un facteur, quelle que soit sa nature, et on considérera p facteurs expérimentaux, X_1, \dots, X_p , choisis par l'expérimentateur comme facteurs pouvant **potentiellement** influencer le phénomène.

Remarques :

- Parfois, on utilise la dénomination de variable explicative pour indiquer que le facteur s'exprime dans une échelle particulière et qu'il intervient dans la formulation

du modèle. On ne fera pas cette distinction dans ce polycopié, et on se contentera du terme plus explicite de facteur codé (voir ci-dessous).

- On précise parfois la nature du facteur en utilisant la dénomination de facteur d'intérêt quand il y a présence de facteurs de nuisance comme définis ci-dessous.

1.2.3 Facteur de nuisance (ou de bruit)

C'est un facteur (continu ou discret) que l'on ne contrôle pas du tout, *a priori*. C'est donc une variable aléatoire qui contribue à la dispersion expérimentale des résultats. C'est par exemple un facteur météorologique "température de l'atmosphère", "hygrométrie ambiante", etc. Trois méthodes existent pour limiter ses conséquences sur la fiabilité des résultats finaux de la modélisation : les techniques de randomisation (voir plus loin), de blocking – partition du plan d'expériences en blocs, notion détaillée au chapitre 6 – et de "fixation expérimentale". Celle-ci consiste, mais ce n'est pas toujours possible, à contrôler le mieux possible, par un appareillage et un mode opératoire adaptés, le facteur en question pendant la durée de la réalisation expérimentale du plan. Par exemple, en médecine (essais cliniques), un facteur aléatoire discret typique est le facteur "hôpital" : si ce facteur est postulé dans un modèle c'est évidemment un facteur de nuisance car on espère que son influence sera négligeable sur l'efficacité du nouveau médicament en test. Pour vérifier cette hypothèse de non-nuisance il est alors introduit facilement dans le plan d'expériences en sélectionnant aléatoirement quelques unes de ses modalités, c'est-à-dire quelques hôpitaux parmi la centaine existante. Le facteur sera alors en quelque sorte "contrôlé" pendant la durée de la réalisation du plan. Toutefois, l'analyse des résultats devra prendre en compte la variance de ce facteur aléatoire. Un autre exemple est celui du facteur continu "température ambiante", facteur aléatoire plus difficile à contrôler. Pour ce faire on réalisera, si c'est possible bien sûr, les expériences du plan dans une enceinte isotherme, à consigne de température à la précision requise : on opère donc dans ce cas une "fixation expérimentale" de ce facteur "température ambiante".

1.2.4 Codage des facteurs

Les facteurs d'intérêt et de nuisance s'expriment dans des échelles naturelles : un facteur température en degrés Celsius, un facteur pression en bars, un facteur discret en agronomie "nature de l'engrais" qui prend les deux modalités "chimique" ou "biologique", etc. Le codage des facteurs est le moyen d'exprimer leurs variations respectives en dehors de toute unité et de pouvoir ainsi comparer leurs effets de façon pertinente : par exemple comparer des effets linéaires de deux facteurs, ou un effet linéaire d'un facteur continu à son propre effet quadratique.

A titre d'illustration un codage possible (on en verra d'autres) pour un facteur continu prenant les deux niveaux "naturels" *niv1* (le plus bas) et *niv2* (le plus haut) sera de transformer les valeurs de *niv1* et *niv2* en -1 et +1 comme suit :

$$-1 = \frac{\textit{niv1} - \text{milieu de l'intervalle } [\textit{niv1} ; \textit{niv2}]}{1/2 \text{ longueur de } [\textit{niv1} ; \textit{niv2}]}$$

$$+1 = \frac{\text{niv2} - \text{milieu de l'intervalle } [niv1 ; niv2]}{1/2 \text{ longueur de } [niv1 ; niv2]}$$

Par exemple le facteur température qui prend les niveaux $50^{\circ}C$ et $100^{\circ}C$ deviendra un facteur codé prenant les niveaux :

$$\frac{50 - 75}{50/2} = -1 \quad \text{et} \quad \frac{100 - 75}{50/2} = +1$$

Tout facteur continu (ou discret) prenant deux niveaux pourra ainsi être codé par les niveaux formels -1 et +1.

1.2.5 Domaine expérimental

On le notera Ω , quelle que soit la nature des facteurs, continus ou discrets, mais sa définition précise dépend de la nature des facteurs étudiés.

Avec des facteurs continus

Pour des facteurs tous continus, Ω est le domaine (ainsi que sa frontière) formé par les plages de variation des facteurs, ceux-ci variant de façon indépendante entre eux, ou non. Par exemple pour deux facteurs continus variant indépendamment entre deux niveaux codés -1 et +1, le domaine expérimental sera le carré (et sa frontière) dont les quatre sommets auront pour coordonnées (-1,1), (-1,+1), (+1,-1), et (+1,+1). Pour trois facteurs représentés par des proportions liés entre eux par le fait que la somme des proportions vaut évidemment 1, le domaine expérimental sera un triangle équilatéral dont les sommets auront pour coordonnées (1,0,0), (0,1,0), et (0,0,1) dans un repère triangulaire. En général, on s'arrangera pour que le domaine expérimental, déjà compact par définition, reste aussi convexe, régulier ou non, sachant qu'un domaine expérimental (régulier) en forme de "pavé" ou sphérique permettra une construction plus simple des plans d'expériences.

Avec des facteurs discrets

Pour des facteurs discrets – on rappelle qu'ils sont soit de nature qualitative, soit de nature continue mais que l'on a discrétisés – le domaine n'est évidemment plus compact, mais formé par le produit cartésien des modalités des différents facteurs. Par exemple, pour deux facteurs discrets X_1 et X_2 prenant respectivement les trois modalités A, B, C , et les quatre modalités, a, b, c, d , le domaine expérimental est représenté par l'ensemble des 12 points suivants $\{x_{Aa}, x_{Ab}, x_{Ac}, x_{Ad}, x_{Ba}, \dots, x_{Cd}\}$.

1.2.6 Expérience

Une expérience est définie par l'application d'un **traitement** à une **unité expérimentale**. Un traitement ("treatment" en anglais) – on utilise aussi le terme anglais de

"pattern" – est défini par une combinaison unique de niveaux (ou modalités) de tous les facteurs contrôlables. Par exemple pour une étude à trois facteurs prenant chacun deux niveaux -1 et +1 un traitement peut être la combinaison $\{-1, +1, -1\}$. Une combinaison est donc l'ensemble des coordonnées d'un point x_i dans l'espace expérimental p -dimensionnel Ω , donc un vecteur ligne $(1 \times p)$. Le point x_i est donc défini par

$$x_i^T = (X_{i1}, \dots, X_{ij}, \dots, X_{ip})$$

où X_{ij} représente le niveau i pris par le facteur X_j , par exemple -1. Mais attention, chacune de toutes les combinaisons possibles des facteurs de l'étude ne constituera pas obligatoirement un traitement du plan, certaines combinaisons pourront ne jamais être considérées ; c'est la notion de fractionnement de plan qui est alors sous-jacente, notion très détaillée au chapitre 3.

On désigne par unité expérimentale l'objet (ou individu) sur lequel s'applique le traitement. La définition de cet objet comporte l'énoncé complet des conditions expérimentales dans lesquelles le traitement sera réalisé. Celles-ci devraient varier le moins possible au cours de l'étude. Exemples : l'unité expérimentale peut être le malade dans des essais cliniques, la parcelle d'un champ d'expérimentation agronomique, la pièce cuite dans un four pour essais de céramique, l'automobile pour des essais de consommation d'essence, l'échantillon prélevé pour analyse chimique, etc. La définition de l'unité expérimentale est parfois moins claire : quand on réalise la synthèse d'une molécule en chimie par exemple, ou quand l'expérimentation consiste à changer les réglages d'un appareil en physique. On peut toujours considérer l'unité expérimentale comme étant le mode opératoire lui-même dans ce type d'expérience en chimie, et l'appareil lui-même dans cette expérimentation de physique.

Dans certains domaines le traitement, l'expérience et l'unité expérimentale ne sont pas parfaitement distinguables. Le point crucial est que l'on puisse définir des coordonnées d'un point dans l'espace des facteurs, celles-ci formant le traitement (ou la combinaison), et en ce point sera réalisée l'expérience.

Remarque : En présence de facteurs discrets, se présente la question de savoir s'il y a lieu, ou non, d'introduire dans le protocole un ou plusieurs témoins, et le cas échéant de définir le ou les témoins, et d'en fixer le nombre. Un témoin peut en effet être soit une absence totale de traitement (absence de traitement herbicide par exemple), soit la pratique en usage ou un traitement classique (application de l'herbicide utilisé le plus fréquemment, à sa dose habituelle), soit encore toute autre pratique ou tout autre traitement de référence (désherbage manuel par exemple). Dans le domaine médical, le témoin est très souvent un « placebo ».

1.2.7 Réponse expérimentale

C'est la manifestation du phénomène choisie pour le décrire. Par exemple en chimie, la viscosité du milieu réactionnel sera la réponse choisie pour traduire l'avancement d'une polymérisation, celui-ci étant le phénomène à étudier. En pharmacocinétique, ce sera par

exemple la concentration d'un principe actif dans le sang. D'un point de vue statistique cette réponse est une variable aléatoire dont on observera des réalisations, les résultats mesurés. Il est clair qu'il faut parfois plusieurs réponses pour appréhender pleinement le phénomène en question.

1.3 Le modèle

1.3.1 Forme générale

Le modèle postulable est un modèle statistique de forme générale (usuelle) :

$$Y = f(X_1, \dots, X_p, \theta) + \varepsilon \quad (1.1)$$

où :

- Y est une variable aléatoire, réponse aléatoire du phénomène étudié, dont les réalisations y_i seront les résultats des expérimentations,
- $f(X_1, \dots, X_p, \theta)$ fonction continue, linéaire ou non linéaire par rapport aux X_j et/ou θ , est l'espérance du modèle, supposée représenter le comportement du phénomène étudié,
- X_1, \dots, X_p désignent les p facteurs expérimentaux (contrôlables ou de nuisance),
- θ est le paramètre vectoriel (inconnu) de dimension k (avec $k = p$ pour les modèles linéaires en les paramètres), certain ou aléatoire, que l'on cherche à estimer "au mieux" dans l'un des sens indiqués au paragraphe 1.1 ; on notera Θ le domaine paramétrique (compact), avec $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^p$.
- ε est un terme d'erreur aléatoire dont la loi de probabilité devra parfois être supposée connue ; on supposera au moins que l'espérance de cette loi sera toujours nulle et que la variance (de valeur inconnue) sera de nature en revanche connue (homoscédastique ou non, ...).

Remarque 1 :

Dans le contexte des plans d'expériences on est concerné par une erreur de nature expérimentale (une dispersion), c'est l'erreur inhérente non seulement à la mesure expérimentale elle-même mais aussi à la réalisation physique de l'expérience. En général on ne peut pas faire la distinction entre ces deux origines. L'erreur expérimentale est due aux actions simultanées d'une myriade de faibles causes variant de façon aléatoire (l'univers n'est ni uniforme, ni constant). C'est donc une variable aléatoire dont les manifestations observées seront les résidus du modèle. Dans ce polycopié, on considérera que la loi de probabilité de cette erreur expérimentale est gaussienne, de variance constante (homoscédastique), et que les erreurs sont indépendantes d'une expérience à l'autre.

Remarque 2 :

On utilise parfois le terme de coefficient au lieu de paramètre, mais on préférera ici le terme de paramètre. Les paramètres, considérés comme certains (non aléatoires) dans ce polycopié, permettent, une fois estimés, de quantifier les effets (linéaires, quadratiques, d'interactions, ...) des facteurs.

1.3.2 Types de modèles postulables

Les modèles les plus fréquemment postulés sont :

- les modèles d'**analyse de variance** pour les facteurs discrets (dits à effets fixes, ou aléatoires, ou mixtes si ces deux derniers sont simultanément présents), avec $f(X_1, \dots, X_p, \theta)$ linéaire par rapport à θ ,
- les modèles de **régression linéaire** pour les facteurs continus, si $f(X_1, \dots, X_p, \theta)$ est linéaire par rapport à θ , et linéaire ou non par rapport aux X_j , c'est-à-dire les polynômes de degré quelconque par rapport aux facteurs,
- les modèles de **régression non linéaire**, si $f(X_1, \dots, X_p, \theta)$ est non linéaire par rapport à θ , et linéaire ou non par rapport aux X_j ,
- les modèles sous forme d'**équations différentielles ordinaires**, ou aux **dérivées partielles**, quand il n'existe pas de forme analytique explicite.

Explicitons maintenant les deux premiers types de modèles qui nous serviront dans ce polycopié.

1.3.3 Modèles d'analyse de la variance

Exemple 1

Pour un facteur discret fixe A présentant a modalités à étudier et un facteur discret fixe B présentant b modalités à étudier, on peut postuler le modèle :

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad (1.2)$$

où

- μ est un effet moyen global,
- α_i est un paramètre traduisant l'effet de la modalité A_i , $i = 1, \dots, a$, du facteur A ,
- β_j est un paramètre traduisant l'effet de la modalité B_j , $j = 1, \dots, b$, du facteur B ,
- γ_{ij} est un paramètre traduisant l'interaction entre les modalités A_i et B_j , respectivement des deux facteurs A et B ,
- Y_{ijk} est une variable aléatoire de réalisation y_{ijk} , $k = 1, \dots, r_{ij}$, celle-ci étant le $k^{\text{ième}}$ résultat, parmi les r_{ij} , obtenu par répétition de l'expérience définie par le traitement (i, j) .

Le nombre total d'expériences est $N = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b r_{ij}$, avec $r_{ij} \geq 1$.

Exemple 2

Un autre exemple, plus compliqué, est le modèle :

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \gamma_k + (\beta\gamma)_{jk} + (\alpha\gamma)_{ik} + (\alpha\beta\gamma)_{ijk} + \varepsilon_{ijk} \quad (1.3)$$

où :

- μ est un effet moyen global,

- α_i est un paramètre traduisant l'effet de la modalité A_i , pour $i = 1, \dots, a$, d'un facteur fixe A ,
- β_j est un paramètre traduisant l'effet de la modalité B_j , pour $j = 1, \dots, q$, d'un facteur bloc aléatoire B (la notion de bloc sera complètement explicitée aux chapitres 6 à 9),
- $(\alpha\beta)_{ij}$ est un paramètre traduisant l'effet de l'interaction (aléatoire) entre les modalités i et j , respectivement entre le facteur fixe A et le facteur bloc B aléatoire, les paramètres $(\alpha\beta)_{ij}$ étant utilisés pour estimer l'erreur dans les q blocs,
- γ_k est un paramètre traduisant l'effet de la modalité k , $k = 1, \dots, l$, d'un autre facteur fixe C ,
- $(\beta\gamma)_{jk}$ est un paramètre traduisant l'effet de l'interaction (aléatoire) entre les modalités j et k , respectivement entre le facteur bloc aléatoire B et le facteur C , cette interaction étant alors aléatoire mais pas forcément utilisée pour estimer l'erreur expérimentale,
- $(\alpha\gamma)_{ik}$ est un paramètre traduisant l'effet de l'interaction (fixe) entre les modalités i et k , respectivement entre le facteur fixe A et le facteur fixe C , interaction dont on souhaite estimer l'effet,
- $(\alpha\beta\gamma)_{ijk}$ est un terme triple qui sera utilisé pour estimer l'erreur expérimentale mais uniquement dans les sous-blocs formés par les croisements des modalités des facteurs B et C ,
- le terme d'erreur $\varepsilon_{ijk\ell}$ est en général, dans ce type de modèle, non estimable.

Le calcul des estimations des paramètres de ce type de modèle peut s'avérer délicat. On l'illustrera au chapitre 6 avec un exemple, mais la théorie complète (analyse de variance pour modèles mixtes) ne sera pas exposée dans ce polycopié.

Remarque : Si on introduit à côté des facteurs discrets des facteurs continus on postulera un modèle d'analyse de covariance (hors programme).

1.3.4 Modèles de régression linéaire

Plus particulièrement adaptés aux facteurs continus, les modèles de régression linéaire (par rapport aux paramètres), sont d'inspiration issue du développement en série de Taylor, usuellement de degré 1 ou 2, plus rarement 3, dans les facteurs.

Si on se limite au cas usuel d'interactions d'ordre deux et d'effets quadratiques, on les écrira de façon générale pour p facteurs :

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j X_j + \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{k=j+1}^p \beta_{jk} X_j X_k + \sum_{j=1}^p \beta_{jj} X_j^2 + \varepsilon \quad (1.4)$$

où :

- β_0 est un terme constant qui pourra aussi être vu comme un effet moyen global,
- les β_j sont les paramètres traduisant les effets "linéaires" (on dit aussi "principaux") des facteurs,

- les β_{jk} sont les paramètres traduisant les effets des interactions doubles $X_j X_k$ entre facteurs,
- les β_{jj} sont les paramètres traduisant les effets quadratiques des facteurs.

Un exemple pour trois facteurs pourrait être le modèle quadratique (incomplet) suivant :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + \beta_{33} X_3^2 + \varepsilon \quad (1.5)$$

Finalement, **tout polynôme de degré quelconque dans les variables**, complet ou incomplet, est postulable.

Nous terminerons ce paragraphe en rappelant la phrase célèbre de G.E.P. Box : "**All the models are wrong, some are useful**", qui doit nous rendre modeste dans notre désir de modéliser les phénomènes physiques de la Nature.

1.4 Le plan d'expériences

1.4.1 Forme générale

Formellement, le plan d'expériences lui-même, noté ξ , est un objet mathématique caractérisable par deux composantes :

- une matrice d'expériences X dont chaque ligne i , $i = 1, \dots, N_S$, représente les p coordonnées d'un **point de support** x_i dans le domaine expérimental Ω , continu ou non ; les éléments des p colonnes de X sont les niveaux des p facteurs étudiés,
- un **schéma de répétition** $\{r\} = \{r_1, \dots, r_{N_S}\}$ indiquant les nombres r_i de répétitions de chaque expérience en chacun des N_S points de support. Le nombre total d'expériences à réaliser est $N = \sum_{i=1}^{N_S} r_i$.

On note alors le plan sous une forme très générale comme :

$$\xi_{N, N_S, \{r\}} = \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & , \dots , & x_i & , \dots , & x_{N_S} \\ r_1 & , \dots , & r_i & , \dots , & r_{N_S} \end{array} \right\} \quad (1.6)$$

avec :

$$x_i^T = (X_{i1}, \dots, X_{ij}, \dots, X_{ip}) \quad (1.7)$$

où X_{ij} représente le niveau i pris par le facteur X_j .

Construire un plan d'expériences c'est donc déterminer la structure de $\xi_{N, N_S, \{r\}}$, c'est-à-dire définir le nombre et les valeurs de ses éléments. On démontrera dans les chapitres suivants que la qualité du modèle estimé \hat{y} **dépend fortement** des coordonnées des points de support x_i dans Ω , selon les types de plans envisagés et du schéma de répétition $\{r\}$.

La construction de $\xi_{N, N_S, \{r\}}$ va être gouvernée par un critère d'optimalité. Le plus simple et le plus usuel – quand il est possible de l'appliquer – est le critère d'orthogonalité qui revient à faire des prendre des niveaux (codés) aux facteurs tels que les colonnes

de la matrice X soient des vecteurs orthogonaux. Les facteurs varieront donc de façon indépendante dans le plan d'expériences.

Cependant, certaines contraintes techniques peuvent parfois compliquer beaucoup la construction du plan d'expériences. Ce sont :

- certaines expériences du domaine expérimental qui sont impossibles à réaliser car trop dangereuses, ou physiquement irréalisables, ou éthiquement non envisageables, impliquant ainsi un domaine expérimental non symétrique,
- une évolution dans le temps des matières premières de l'étude,
- des facteurs de bruit difficilement contrôlables,
- des modèles polynomiaux incomplets,
- des modèles non linéaires en les paramètres.

1.4.2 Plan d'expérimentation

Le plan d'expérimentation est la forme opérationnelle (dans le monde réel ou sur ordinateur) du plan d'expériences, caractérisée par :

- la description du mode opératoire expérimental,
- la description du système de mesure des réponses,
- les niveaux (ou modalités) des facteurs dans leurs unités physiques,
- l'ordre de réalisation des expériences, aléatoire (en général), ou par blocs (eux-mêmes randomisés),
- un rajout d'expériences tests pour valider le futur modèle,
- un protocole de contrôle des facteurs de bruit pendant la durée de réalisation du plan,
- une (ou plusieurs) mesure(s) de la réponse à chaque expérience (elle-même répétée ou non).

1.4.3 Les principaux types de plans d'expériences

Il n'existe pas de nomenclature "officielle", mais on trouve les types suivants dont on traitera certains dans le détail dans ce polycopié :

- les plans factoriels complets à même nombre de niveaux par facteur ou non,
- les plans factoriels fractionnaires issus d'un fractionnement judicieux des plans précédents,
- les plans factoriels en blocs,
- les plans factoriels de criblage (matrices d'Hadamard),
- les plans en blocs complets (carrés latins et dérivés),
- les plans en blocs incomplets (blocs incomplets équilibrés ou partiellement équilibrés, lattices, ...),
- les plans de surface de réponse,
- les plans de mélange (plans spécialisés pour formulations chimiques, pharmaceutiques, cosmétiques, ...),
- les plans optimaux pour modèles de régression linéaire pour les situations à contraintes sur le modèle et/ou le domaine expérimental,

- les plans optimaux pour modèles de régression non linéaire, typiquement quand la connaissance sur le phénomène est suffisante pour postuler un modèle de connaissance,
- les plans d’exploration de l’espace des facteurs pour expériences simulées sur ordinateur, tels les hypercubes latins et diverses variantes, les plans pour métamodèles (hors programme ici).

1.5 Principes fondateurs de la méthode des plans d’expériences

Les principes fondateurs de la méthode :

- **Le couple modèle-plan** : un plan ne peut être construit que si on postule un modèle **a priori** ; même dans les situations où cette postulation est impossible (caractère très non linéaire du phénomène par exemple), le choix d’un plan spécifique d’exploration de l’espace des facteurs est dicté en un certain sens par ce "non-modèle".
- **La répétition des expériences** : il s’agit de répéter tout ou partie des expériences pour :
 - satisfaire au principe de l’augmentation de l’information par rapport au bruit expérimental,
 - permettre concomitamment l’estimation d’une variance d’erreur "pure" (voir chapitre 2), et conduire *in fine* à des test statistiques sur le modèle estimé plus puissants.

Précisons que la répétition d’une expérience (différente de la répétition d’une mesure) est la réalisation d’un même traitement sur des unités expérimentales différentes.

Par ailleurs, selon la norme NF ISO 5725-1 la répétabilité est la fidélité sous des conditions de répétabilité. En adaptant la définition donnée par cette norme à la situation du plan d’expériences, on peut dire que celles-ci sont des conditions où les résultats d’expériences indépendants sont obtenus par la même méthode, avec les mêmes traitements sur des unités expérimentales du même type, dans le même lieu (laboratoire, usine, ...), par le même opérateur, utilisant le même équipement et pendant un intervalle de temps où l’on peut supposer que l’ensemble de ces conditions n’a pas varié. Selon cette même norme la reproductibilité est la fidélité sous des conditions de reproductibilité. Celles-ci sont des conditions où les résultats d’essai sont obtenus par la même méthode, avec les mêmes traitements mais dans différents laboratoires, avec des opérateurs et des équipements différents.

- **La randomisation** : c’est un principe dû à Fisher ; une fois les expériences à réaliser bien définies, il faut les effectuer selon, soit un ordre aléatoire, soit par regroupements (les blocs) bien définis, pour ne pas biaiser les résultats, et surtout pour être dans les conditions exigées par la théorie statistique pour mener à bien les tests statistiques de validation des estimations des paramètres du modèle.
- **Le contrôle de la variabilité** : appelé en anglais le « blocking » dont le but

est d'agencer les expériences de telle façon que l'interprétation des résultats finaux ne soit pas perturbée par les facteurs de bloc (maîtrisables a priori) assimilables à des facteurs de nuisance. Cependant, ce « blocking » est une restriction à la randomisation générale de l'ensemble des expériences.

- **L'orthogonalité** : il s'agit de faire varier (quand c'est possible) les facteurs expérimentaux de telle façon qu'ils varient indépendamment les uns des autres ; les vecteurs représentatifs sont alors de produit scalaire nul et sont donc orthogonaux. On verra que cette orthogonalité est un critère d'optimalité d'une grande importance pour conduire à un modèle de qualité. D'autres critères d'optimalité existent, comme on le verra aux chapitres 10 et 11.
- **La confusion** : traduction des termes anglais « confounding » et « aliasing » ; on peut dire aussi concomitance. Dans le but de diminuer le nombre d'expériences total, on n'en réalise qu'une partie – qui est une fraction du plan complet, définie rigoureusement – et la conséquence est la confusion des effets, c'est-à-dire qu'on ne peut plus alors estimer les paramètres traduisant les effets influents individuellement mais seulement par groupes (alias).
- **La séquentialité** : propriété d'un second plan d'expériences qui permet de compléter optimalement l'information obtenue à la suite d'un premier plan, parfois sans redondance ni perte d'information excessive.
- **La précision des prédictions** : idée générale de la modélisation ; cette précision repose notamment sur la structure du plan d'expériences et la plus ou moins grande hétérogénéité de la variance expérimentales sur Ω .
- **La stabilité de l'optimum** : il est en effet peu utile d'obtenir un optimum à ce point instable que la moindre variation des facteurs influant le phénomène puisse le déplacer grandement. On visera à trouver des optimum stables.

1.6 Une étape du schéma hypothético-déductif

Pour mettre en œuvre la méthode des plans d'expériences de façon idéale on l'inclut en tant qu'étape bien identifiée parmi les grandes étapes du schéma traditionnel hypothético-déductif de la recherche expérimentale :

1. On définit le cadre scientifique du phénomène physique à étudier, et la (ou les) réponse(s) à mesurer.
2. On pose des hypothèses dans le cadre scientifique idoine.
3. On choisit la nature et le nombre des facteurs à prendre en compte qui semblent potentiellement influents du phénomène.
4. On énumère les contraintes (scientifiques, technologiques, économiques, éthiques, ...).
5. On postule un modèle du phénomène (qui peut être simplissime, ou de représentation, ou théorique, selon le degré d'information dont on dispose), dépendant des facteurs choisis à l'étape 3.

6. On construit un plan d'expériences cohérent avec les 5 étapes précédentes, solution d'un critère d'optimalité particulier qu'il faut optimiser soit par une méthode algébrique, soit par une méthode algorithmique.
7. On réalise le plan d'expérimentation, traduction dans le monde réel du plan d'expériences.
8. On calcule le modèle postulé à partir des résultats issus de l'étape précédente, et on en fait une validation statistique.
9. On vérifie expérimentalement le modèle obtenu en réalisant des expériences nouvelles, dites expériences-tests c'est-à-dire judicieusement choisies dans Ω .
10. Si l'on est satisfait on arrête la démarche, sinon on la réitère à partir de l'étape 1 ou 2 ou 3 ou 4 ou 5, selon le niveau d'insatisfaction.

On remarque évidemment que l'étape 6 est la seule étape qui en réalité ne fasse pas partie du déroulement traditionnel (originaire du milieu du 19ème siècle) de ce schéma. L'étape 8, basée sur la modélisation statistique, n'est pas toujours présente dans le déroulement traditionnel de ce schéma. Les étapes présentées ici constituent donc un **nouveau schéma hypothético-déductif** de la recherche expérimentale où l'innovation est apportée par le couple modèle-plan. Pour faire entrer dans la pratique expérimentale ce nouveau schéma, des chercheurs scientifiques français, les Professeurs R. Phan-Tan-Luu et D. Mathieu de l'Université Aix-Marseille III ont proposé, dans les années 70, de dénommer cette méthode plutôt comme "Méthodologie de la Recherche Expérimentale" vue alors comme une approche de modélisation optimisée en sciences expérimentales.

La méthode des plans d'expériences emprunte, pour se forger, à plusieurs branches des mathématiques appliquées :

- l'algèbre linéaire pour la construction de certains types de plans,
- la statistique pour l'analyse et la validation des résultats expérimentaux,
- la recherche opérationnelle pour sa démarche par étapes et la définition claire des objectifs,
- l'analyse convexe et l'algorithmique pour la construction de certains types de plans,
- et plus récemment : la théorie de la mesure pour la définition des critères d'optimalité, les méthodes d'optimisation déterministe et stochastique pour la minimisation de tels critères,
- la géométrie différentielle pour l'approche non linéaire.

1.7 Quelques exemples d'application

De nombreux domaines des sciences expérimentales sont susceptibles de faire appel à cette méthode, typiquement :

- La Chimie : synthèse, formulation, analyse, matériaux, procédé,...
- L'Agronomie : rendements, qualité, sélection, génétique,...

- La Biologie : structure-activité, dose-réponse, biostatistique (essais cliniques, pharmacocinétique, pharmacodynamie),
- La Physique : électronique, mécanique, construction automobile,
- Le Calcul Numérique : validation des grands codes de calcul, expériences simulées,
- Le Contrôle de Qualité, transversal à tous les domaines précédents,
-

Indiquons maintenant quelques exemples d'applications réelles, mais simplifiées ici, pour donner un aperçu de l'immense diversité des problèmes expérimentaux qui peuvent profiter de cette méthode efficace.

1.7.1 Rendement d'une réaction chimique

- **Objectif** : On cherche à augmenter le rendement d'une réaction chimique catalysée.
- **Facteurs** : On pense que les trois facteurs suivants peuvent influencer ce rendement : la température du milieu réactionnel (facteur continu maîtrisable), la concentration d'un des réactifs dans le milieu (facteur continu maîtrisable), et la nature du catalyseur (facteur discret (qualitatif) à deux modalités seulement, maîtrisable).
- **Contraintes** : 20 expériences au maximum peuvent être réalisées.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle de régression avec les trois effets linéaires, les trois interactions doubles, et l'interaction triple.
- **Type de plan réalisé** : Un plan factoriel complet et répété à $2^3 \times 2 = 16$ expériences + 4 expériences au centre de Ω (compact), soit un total de 20 expériences.
- Remarque : ce type de problème traité au chapitre 2.

1.7.2 Superacides

- **Objectif** : On fait de l'activation du *n*-pentane par des superacides perfluorosulfoniques et on cherche à détecter les facteurs expérimentaux vraiment influents sur une vitesse de conversion particulière.
- **Facteurs** : On sélectionne six facteurs continus que l'on fixe à deux niveaux, et un facteur discret à deux modalités comme susceptibles d'influencer cette vitesse de conversion.
- **Contraintes** : Il faut respecter une contrainte particulière à savoir réaliser le plan d'expériences en deux fractions de huit expériences chacune.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle de régression avec les effets linéaires des sept facteurs
- **Type de plan réalisé** : Un plan factoriel fractionnaire de 16 expériences lui-même fractionné en deux fractions de huit expériences.
- Remarque : ce type problème traité au chapitre 3.

1.7.3 Enduction

- **Objectif** : Lors de la fabrication de bandes magnétiques pour ordinateurs on dépose un polymère d'enduction, qui contiendra les particules métalliques magnétisables, sur un film synthétique en PET. Le polymère est obtenu par polymérisation radicalaire d'un mélange de six monomères bien spécifiques. On mesure ensuite la résistance à l'arrachement du polymère déposé sur le film à l'aide d'un test normalisé. Le but est de diminuer les proportions relatives de trois monomères parmi les six, ceux là mêmes qui sont beaucoup plus coûteux que les trois autres.
- **Facteurs** : Ce sont les proportions des six monomères.
- **Contraintes** : Chaque monomère n'est évidemment utilisable que dans une plage de proportions bien définie et ainsi on ne peut pas faire varier indépendamment les six facteurs.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle de Scheffé pour mélanges.
- **Type de plan réalisé** : Un plan D-optimal.
- Remarque : ce type de plan est explicité au chapitre 11.

1.7.4 Fongicides

- **Objectif** : On souhaite comparer quatre produits fongicides avec un témoin ne subissant aucun traitement fongicide, et entre eux, sur une culture de pommes de terre réalisée en petites parcelles. La réponse est le rendement en pommes de terre.
- **Facteurs** : On est en présence d'un facteur d'intérêt purement qualitatif à 4 modalités (nature du fongicide) et on suppose un facteur bloc fixe lié à l'hétérogénéité de la terre cultivée.
- **Contraintes** : Les unités expérimentales sont des parcelles rectangulaires, de 3 mètres de largeur sur 15 mètres de longueur.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance avec un facteur bloc fixe lié à l'hétérogénéité de la terre cultivée.
- **Type de plan réalisé** : Les 5 objets (4 traitements et un témoin), sont tous répétés 4 fois, l'étude comportant 20 parcelles.
- Remarque : ce type de plan est explicité au chapitre 6.

1.7.5 Prairies

- **Objectif** : On souhaite comparer le rendement fourrager sur deux types donnés de prairie, dans chacun desquels trois prairies ont été choisies au hasard et indépendamment.
- **Facteurs** : On est en présence de deux facteurs hiérarchisés, le facteur "Type de prairie", facteur qualitatif fixe à deux modalités et le facteur qualitatif "Prairie" à trois modalités, aléatoire.
- **Contraintes** : le facteur "Prairie" doit être hiérarchisé par rapport au facteur "Type de prairie".
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance à deux facteurs

hiérarchiques.

- **Type de plan réalisé** : les rendements fourragers sont déterminés en cinq endroits différents (les parcelles), eux-mêmes choisis au hasard et indépendamment dans chacune des six prairies.
- Remarque : ce type de plan n'est pas explicité dans ce polycopié.

1.7.6 Poudres levantes

- **Objectif** : On cherche à évaluer l'efficacité de quatre nouvelles poudres levantes en boulangerie industrielle pour augmenter le gonflement. La réponse est le taux de gaz carbonique mesuré par un dispositif particulier.
- **Facteurs** : On est en présence d'un facteur d'intérêt discret, fixe, à quatre modalités et de trois facteurs de bloc à quatre modalités chacun, discrets et considérés comme fixes ou aléatoires selon le type d'étude envisagé.
- **Contraintes** : Pour se rapprocher des conditions réelles d'utilisation, on choisit quatre types de pains représentatifs de l'ensemble de la production de l'industriel concerné, quatre types de fours représentatifs et quatre types de farines ; 16 expériences répétées une fois sont possibles, soit 32 expériences au total.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance à un facteur d'intérêt et trois facteurs de nuisance (trois facteurs blocs).
- **Type de plan réalisé** : Un plan en blocs particulier appelé carré gréco-latin.
- Remarque : ce type de plan est explicité au chapitre 8.

1.7.7 Dépôts épitaxiaux

- **Objectif** : Une installation servant à réaliser des dépôts épitaxiaux est réglée pour obtenir des dépôts entre 14 et 15 microns. Les dépôts épitaxiaux sont effectués sur des plaques appelées "wafers" dans une enceinte chauffée. Les wafers sont disposés sur un suscepteur, sorte de support qui peut tourner ou osciller. Quatorze plaques sont traitées simultanément. Les dépôts ne sont pas homogènes, certains sont plus minces que 14 microns, d'autres plus épais que 15 microns. Bien que la valeur moyenne de 14.5 microns soit recherchée, on constate de nombreux rebuts qui entraînent des surcoûts inacceptables. L'objectif est de trouver de nouveaux réglages de l'installation pour que la dispersion autour de la valeur nominale soit la plus faible possible. On étudie les réponses épaisseur moyenne et dispersion de l'épaisseur.
- **Facteurs** : Huit facteurs sont pris en compte, et on dispose de 70 mesures par expérience.
- **Contraintes** : Mode opératoire très précis à respecter.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance à 8 facteurs d'intérêt.
- **Type de plan réalisé** : Un plan factoriel complet avec répétitions.
- Remarque : ce type de plan est explicité dans le chapitre 2.

1.7.8 Ressorts de suspension pour camions

- **Objectif** : On cherche à améliorer la fabrication des ressorts de suspension pour camions. Les ressorts se présentent sous forme de lames ayant une courbure bien précise. La flèche doit être de huit pouces avec une dispersion faible autour de cette valeur. Au cours de la fabrication les lames subissent plusieurs traitements, dont les trois suivants : un chauffage à haute température dans un four, un cintrage dans une machine spéciale, et enfin une trempe à huile. L'objectif de l'étude est de déterminer les facteurs qui influent sur la flèche et sur la dispersion de la flèche au cours des trois phases décrites précédemment, puis de donner des consignes pour que : la flèche moyenne soit de huit pouces, et la dispersion de la flèche autour de huit pouces soit la plus faible possible.
- **Facteurs** : Quatre facteurs continus sont pris en compte, ainsi qu'un facteur aléatoire (la température du bain de trempe mal contrôlée).
- **Contraintes** : Mode opératoire très précis à respecter, avec un facteur aléatoire.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance à 4 facteurs d'intérêt, et un facteur de nuisance.
- **Type de plan réalisé** : Un plan factoriel complet avec répétitions
- Remarque : ce type de plan est explicité dans le chapitre 2.

1.7.9 Caséine dans le lait

- **Objectif** : On étudie la dissociation des micelles de caséine dans le lait de chèvre. La réponse est la fraction de caséine dissociée.
- **Facteurs** : Les cinq facteurs sont : le pH, facteur continu discrétisé selon 8 niveaux, la température, facteur continu discrétisé selon 4 niveaux, la force ionique, facteur continu discrétisé selon 2 niveaux, le taux de calcium, facteur continu discrétisé selon 2 niveaux, et enfin le temps de stabilisation, facteur continu discrétisé selon 2 niveaux.
- **Contraintes** : Les difficultés dans cette étude sont dues à plusieurs contraintes structurelles : a/ l'évolution du pH n'est pas du tout linéaire, b/ on ne peut placer que quatre échantillons de lait à la fois dans la centrifugeuse, c/ on ne peut faire que deux centrifugations par jour, d/ comme le lait évolue dans le temps on doit considérer des stocks de lait différents.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance à cinq facteurs d'intérêt.
- **Type de plan réalisé** : Un plan factoriel fractionnaire en blocs.
- Remarque : ce type de plan est partiellement explicité au chapitre 5.

1.7.10 Essais cliniques

- **Objectif** : Il s'agit de comparer les performances de conduite automobile entre trois traitements : placebo, traitement A, traitement B. Sur chaque individu on mesure un temps de réaction (la réponse) à un test de conduite successivement à

trois périodes de temps, sous les trois traitements.

- **Facteurs** : Les facteurs sont : la période, facteur discret à trois modalités, le groupe, facteur discret à trois modalités (six sujets par groupe), et le traitement, facteur discret à trois modalités (placebo, traitement A, traitement B).
- **Contraintes** : Les mesures sont répétées sur un sujet donné, c'est-à-dire que les observations associées à un même sujet peuvent être corrélées.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle d'analyse de variance pour mesures répétées.
- **Type de plan réalisé** : Un plan en blocs particulier.
- Remarque : ce type de plan est explicité au chapitre 8.

1.7.11 *Listeria monocytogenes* dans la filière lait cru

- **Objectif** : On cherche à estimer les paramètres d'un modèle de régression non linéaire supposé traduire la relation entre la vitesse de croissance maximale de la bactérie alimentaire *Listeria monocytogenes* et la température. La réponse est la vitesse de croissance maximale.
- **Facteurs** : Le seul facteur est la température, facteur continu.
- **Contraintes** : Prise en compte d'une variance non homogène sur le domaine expérimental.
- **Type de modèle postulé** : Un modèle de régression non linéaire de connaissance.
- **Type de plan réalisé** : Un plan optimal pour un modèle non linéaire en les paramètres.
- Remarque : ce type de plan n'est pas explicité dans ce polycopié.

1.7.12 Enoxaparine

- **Objectif** : Il s'agit de déterminer les paramètres d'un modèle décrivant l'évolution de l'activité anti-Xa de l'énoxaparine pour une dose administrée de 20 mg. L'énoxaparine est une héparine de bas poids moléculaire (poids moléculaire moyen 4500 daltons), dérivée de l'héparine conventionnelle (poids moléculaire moyen 15000 daltons). L'activité anti-Xa plasmatique générée par l'administration de l'énoxaparine est proportionnelle à la dose injectée et est un marqueur du passage de ce médicament dans l'organisme. Cette réponse, l'activité anti-Xa, est donc un signal pertinent pour étudier la typologie pharmacocinétique d'un tel médicament.
- **Facteurs** : Les facteurs sont le temps (continu) et le facteur sujet (facteur discret aléatoire).
- **Contraintes** : La connaissance a priori sur les paramètres du modèle est obtenue à partir des données recueillies chez dix individus seulement.
- **Type de modèle postulé** : Le modèle utilisé (en fonction du temps t) pour décrire les données est décrit, pour chaque individu, comme un modèle à 5 paramètres, non linéaire relativement à ceux-ci.
- **Type de plan réalisé** : Un plan optimal particulier pour un modèle non linéaire en les paramètres.

- Remarque : ce type de plan n’est pas explicité dans ce polycopié.

1.7.13 Libération contrôlée de principe actif

- **Objectif** : Il s’agit de déterminer les temps optimaux de mesure lors de la libération contrôlée d’un principe actif. La réponse est le taux de principe actif libéré.
- **Facteurs** : Le facteur est le temps (continu).
- **Contraintes** : Très peu d’expériences sont réalisables.
- **Type de modèle postulé** : Cette libération obéit à un modèle de régression intrinsèquement non linéaire à deux paramètres, en fonction du temps.
- **Type de plan réalisé** : Un plan optimal particulier pour un modèle non linéaire en les paramètres.
- Remarque : ce type de plan n’est pas explicité dans ce polycopié.

1.8 Exemples de sensibilisation

1.8.1 La droite de régression

Enoncé

Quelques observations d’un phénomène entâché de variabilité suggèrent une augmentation de la réponse Y quand les valeurs du facteur X augmente. On postule un modèle statistique de droite de régression pour formaliser cette liaison :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon \quad (1.8)$$

On réalise des expériences, c’est-à-dire que l’on fixe le facteur X à certains niveaux positionnés à l’intérieur du domaine expérimental (ou sur ses bornes X_{\min} et X_{\max}), pour disposer de quelques y_i qui permettront le calcul d’estimations $\hat{\beta}_0$ et $\hat{\beta}_1$ de bonne qualité (typiquement à variances faibles).

Question

Quels sont les niveaux auxquels fixer X pour atteindre cet objectif ?

Réponse

On peut imaginer deux plans d’expériences possibles indiqués dans la figure 1.1. Dans le plan 1 on fixe X à trois niveaux équidistants, les deux niveaux extrêmes se positionnant à l’intérieur du domaine expérimental, et on réalise en chacun des trois niveaux 3 répétitions d’expériences. Dans le plan 2 on réalise trois expériences aux deux niveaux extrêmes seulement.

La meilleure solution est le plan 2 car un souhait légitime ici est qu’au moins **la variance de l’estimation de la pente** de la droite de régression qu’on calculera soit **la plus faible possible**. En effet (voir un livre de cours sur la régression linéaire) une estimation de la variance de l’estimation de cette pente s’écrit comme :

$$\widehat{var}(\hat{\beta}_1) = \frac{\hat{\sigma}^2}{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2} \quad (1.9)$$

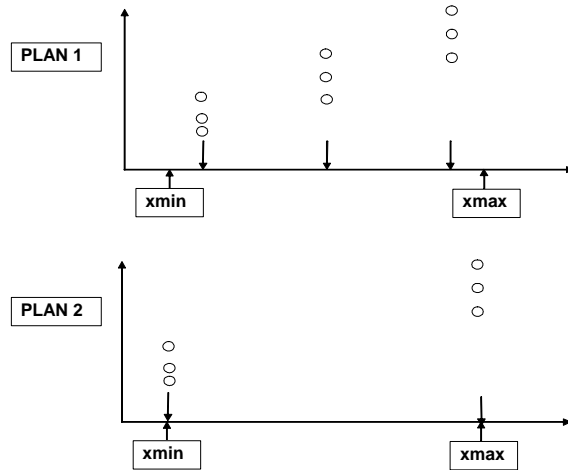


FIG. 1.1 – Deux plans possibles pour un modèle de droite de régression.

où $\hat{\sigma}^2$ est une estimation de la variance σ^2 (inconnue) de l'erreur, et \bar{X} est la moyenne des N_S niveaux (répétés) X_i que l'on choisit pour le facteur X . Pour minimiser cette variance il faut donc que les niveaux X_i soient les plus écartés possible de leur moyenne, et donc il faut tous les **placer aux extrémités** du domaine expérimental $[X_{\min}; X_{\max}]$.

Simulation

Simulons maintenant des plans concurrents. On suppose pour ce faire le modèle :

$$Y = 2 + 6x + \varepsilon \quad (1.10)$$

avec $X \in [0 ; 1]$ et $Y \in [2 ; 8]$, et une simulation de ε basée sur une $\mathcal{N}(0, 0.25^2)$. On obtient les résultats des neuf plans concurrents (tous leurs points de support sont équidistants) donnés au tableau 1.1.

n° plan	N	N_S	Positionnement	$\widehat{var}(\hat{\beta}_0)$	$\widehat{var}(\hat{\beta}_1)$	$\hat{\rho}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_0)$
1	4	4	1 - -1 - -1 - -1	0.04374	0.1125	-0.80
2	8	8	1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1	0.02604	0.0729	-0.84
3	12	12	111111111111	0.01840	0.0529	-0.85
4	8	4	2 - -2 - -2 - -2	0.02187	0.0562	-0.80
5	12	4	3 - -3 - -3 - -3	0.01458	0.0375	-0.80
6	2	2	1 ← → 1	0.06250	0.1250	-0.71
7	4	2	2 ← → 2	0.03120	0.0625	-0.71
8	8	2	4 ← → 4	0.01560	0.0312	-0.71
9	12	2	6 ← → 6	0.01042	0.0208	-0.71

Tableau 1.1. Résultats de simulation pour le modèle de droite de régression (en dernière colonne figure une estimation du coefficient de corrélation entre les deux estimateurs $\hat{\beta}_1$ et $\hat{\beta}_0$).

Le tableau 1.1 appelle le commentaire suivant. Si on se concentre sur l'estimation de la variance de l'estimation de la pente, $\widehat{\text{var}}(\hat{\beta}_1)$, on observe en effet qu'il est difficile de concurrencer les plans où les expériences sont concentrées aux extrémités. Ainsi le plan 3 avec 12 expériences est moins bon que le plan 8 avec 8 expériences seulement mais bien placées.

Remarque importantes :

- on a supposé que le modèle de droite était vrai ; le plan optimal aurait été différent si on avait suspectait un effet de courbure possible, auquel cas un autre critère (typiquement un critère de biais-variance) aurait dû être minimisé.
- on a supposé aussi que la variance de l'erreur était homoscédastique (homogène) ; les répétitions n'auraient plus été réparties équitablement si elle avait été supposée hétéroscédastique.

1.8.2 Le modèle monoexponentiel

Soit deux plans pour le modèle

$$\eta = \exp(-\theta^*x) + \varepsilon; \quad \text{avec } \theta^* = \theta_0 = 5 \quad (1.11)$$

L'un, dit naïf, est illustré en figure 1.2 où 4 niveaux du facteur X sont étudiés ($N_S = 4$), et l'autre, dit D -optimal (voir chapitre 11) en figure 1.3, où un seul niveau (!) est visité ($N_S = 1$).

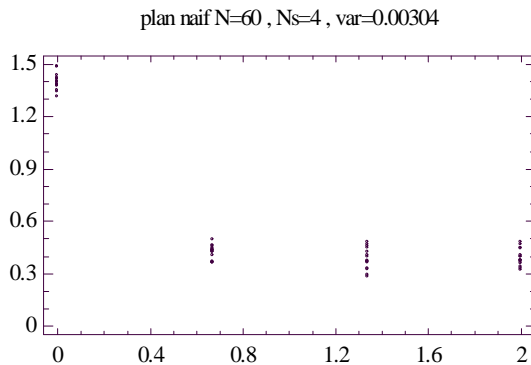


FIG. 1.2 – Un plan naïf pour le modèle monoexponentiel.

Par simulation on génère des résultats y_i avec un bruit gaussien d'espérance $\exp(-\theta_0)$, et de variance 0.0034. Pour calculer le plan D -optimal, il faut disposer d'une valeur a priori θ_0 du paramètre inconnu θ^* . Supposons que $\theta^* = \theta_0$. On obtient les résultats du tableau 1.2.

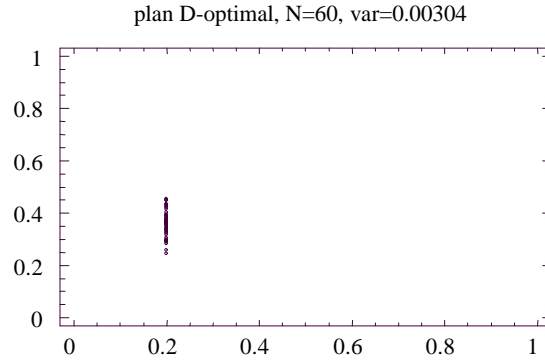


FIG. 1.3 – Un plan D-optimal (local) pour le modèle monoexponentiel.

N	$\hat{\theta}$	$B_{\text{inf}}(IC_{t;95\%})$	$B_{\text{sup}}(IC_{t;95\%})$
Plan naïf			
$N = 60$	6.08	3.80	8.36
$N = 100$	6.22	4.16	8.29
$N = 1000$	5.27	4.93	5.61
$N = 50000$	5.00	4.96	5.04
Plan D-optimal ($\theta_0 = 5$)			
$N = 60$	5.17	4.99	5.35
$N = 100$	5.14	4.99	5.29
$N = 1000$	5.03	4.99	5.08
$N = 50000$	4.99	4.99	5.00

Tableau 1.2 : résultats de simulation pour le modèle monoexponentiel, avec $\theta^* = \theta_0$.

La différence est encore plus éclatante que pour le modèle de droite de régression : même avec 60 résultats le plan D-optimal procure déjà une estimation très acceptable pour le paramètre (faible biais et intervalle de confiance très serré), alors qu'il faut au moins 1000 résultats avec le plan naïf pour disposer d'un intervalle de confiance qui reste encore médiocre.

Remarque importante : Une critique sévère peut être faite à propos du plan D-optimal puisque son calcul nécessite la connaissance d'un θ_0 . Cette attitude semble paradoxale : il faut connaître la solution du problème pour résoudre le problème!!! En réalité, dans la pratique on dispose souvent d'une information préalable de qualité raisonnable pour fournir des valeurs ou des lois de densité de probabilité a priori pour les paramètres inconnus.

En outre l'information n'a pas besoin d'être très précise sur les paramètres, pour qu'un plan d'expériences D-optimal, même peu robuste par rapport à θ_0 , apporte beaucoup plus qu'un plan naïf. On peut aussi vérifier si les dérivées par rapport aux paramètres varient lentement sur Ω . Si, malgré tout, ce type de plan ne fonctionne pas on s'oriente alors vers de plans optimaux particulièrement adaptés à la nature intrinsèquement non linéaire du modèle (hors programme).

Chapitre 2

Le plan factoriel complet 2^p

2.1 Le modèle postulé

Ce type de plan, très simple, permet l'étude d'un problème à p facteurs **continus** ou **discrets**, ou la présence simultanée de ces deux types de facteurs, pour peu que tous les facteurs ne prennent que deux niveaux. Dans ce chapitre les facteurs sont tous **contrôlables** (non aléatoires) avec une erreur négligeable lors du réglage de leurs niveaux ; on appelle aussi leurs effets des **effets fixes**. Ce sont tous des facteurs d'intérêt, il n'y aura pas de facteurs de nuisance.

Le principe du couple "modèle-plan", comme il a été exposé dans le chapitre précédent, nous conduit à choisir ce type de plan parce que l'on suppose *a priori* un phénomène modélisable uniquement par des effets linéaires des facteurs et des effets d'interaction entre facteurs. Ainsi on ne postule pas la présence de termes quadratiques ou autres.

Sous une forme saturée – c'est-à-dire que tous les termes d'interaction possibles sont présents – ce modèle s'écrit de façon générique et formelle comme :

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j X_j + \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{k=j+1}^p \beta_{jk} X_j X_k + \sum_{j=1}^{p-2} \sum_{k=j+1}^{p-1} \sum_{r=k+1}^p \beta_{jkr} X_j X_k X_r + \dots + \beta_{12\dots p} X_1 X_2 \dots X_p + \varepsilon \quad (2.1)$$

où :

- les β_j sont les paramètres traduisant les effets linéaires (on dit aussi principaux) des p facteurs X_j ,
- les β_{jk} sont les paramètres traduisant les effets d'interaction double $X_j X_k$,
- les β_{jkr} sont les paramètres traduisant les effets d'interaction triple $X_j X_k X_r$,
- etc.

On renvoie le lecteur au chapitre précédent pour des précisions sur Y et ε . Pour la variable aléatoire Y_{iu} – associée à l'erreur ε_{iu} , – correspondant à une expérience u réalisée en un point x_i de l'espace expérimental on écrit :

$$Y_{iu} = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j X_{ij} + \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{k=j+1}^p \beta_{jk} X_{ij} X_{ik} + \dots + \beta_{12\dots p} X_{i1} X_{i2} \dots X_{ip} + \varepsilon_{iu} \quad (2.2)$$

où X_{ij} représente le niveau i pris par le facteur X_j .

Le premier objectif de ce modèle est donc modeste en termes de modélisation, mais essentiel pour éviter de chercher à construire trop vite des modèles trop compliqués et sans intérêt pratique. On rappelle que l'on est ici dans une situation où toute ébauche de modèle théorique pour le phénomène est impossible. On verra dans les autres chapitres de nombreuses autres situations.

Soulignons que, même si toutes les interactions, jusqu'à l'interaction d'ordre p , peuvent être présentes dans ce type de modèle, en pratique on s'intéresse en général plus particulièrement aux effets linéaires des X_j et aux effets des interactions doubles $X_j X_k$ car ces effets sont plus facilement interprétables par le spécialiste scientifique du problème étudié.

2.2 Domaine expérimental

Ce domaine a été défini de façon générale dans le chapitre précédent. Comme on supposera dans ce chapitre que les facteurs peuvent varier indépendamment les uns des autres, le domaine expérimental, Ω , sera un pavé ou un hypercube de dimension p , noté $[-1, +1]^p$, si on considère les facteurs codés sur deux niveaux -1 et +1.

Si les p facteurs sont tous continus Ω est constitué de l'intérieur et de la frontière de $[-1, +1]^p$, on écrit $\Omega = [-1, +1]^p$. Si les p facteurs sont tous discrets (codés également -1 et +1) Ω sera alors restreint à l'ensemble discret constitué des p sommets de $[-1, +1]^p$, on notera $\Omega = \{-1, +1\}^p$. Dans un cas mixte, c'est-à-dire la présence simultanée de $p - k$ facteurs continus et k discrets, on aura :

$$\Omega = \left\{ [-1, +1]^{p-k} \right\} \cup \left\{ \{-1, +1\}^k \right\} \quad (2.3)$$

où $\{-1, +1\}^k$ représente les $2^p - 2^{p-k}$ sommets de $[-1, +1]^p$. On ne s'intéressera qu'aux sommets de Ω dans ce chapitre.

2.3 Interprétation de la notion d'interaction

2.3.1 Première interprétation

Une interaction $X_j X_k$ signifie que l'effet de X_j sur la réponse Y va dépendre du niveau pris par X_k . Parfois l'interaction est si importante qu'elle peut inverser le sens de variation de la réponse. Illustrons les trois situations possibles avec les figures 2.1, 2.2 et 2.3. En figure 2.1, pour le modèle très simple

$$\hat{Y} = 4 + X_1 + 2X_2 \quad (2.4)$$

où il n'y a pas d'interaction, quel que soit le niveau de X_2 l'influence de X_1 sur \hat{Y} présente toujours la même pente.

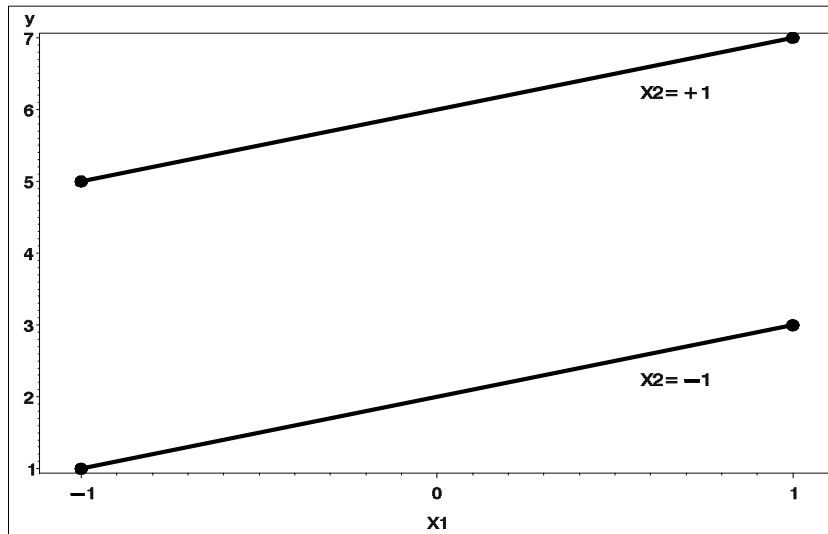


FIG. 2.1 – Pas d'interaction entre X_1 (en abscisse) et X_2 .

Supposons maintenant la présence d'une interaction positive, le modèle (2.4) devient

$$\hat{Y} = 4 + X_1 + 2X_2 + 2X_1X_2 \quad (2.5)$$

et la figure 2.2 montre clairement la modification très importante de comportement de la réponse, alors que le paramètre de l'interaction prend une valeur -2 , du même ordre de grandeur que les effets principaux.

Supposons maintenant la présence d'une interaction de même force que précédemment mais négative, le modèle (2.4) devient

$$\hat{Y} = 4 + X_1 + 2X_2 - 2X_1X_2 \quad (2.6)$$

et la figure 2.3 montre clairement la nouvelle modification spectaculaire de comportement de la réponse.

Remarques importantes :

- Il ne faut pas confondre la notion d'interaction avec la notion d'orthogonalité : deux variables orthogonales peuvent présenter entre elles une interaction significative.
- Une interaction significative X_jX_k entre X_j et X_k cache souvent l'action d'une troisième variable (cachée!) X_r .

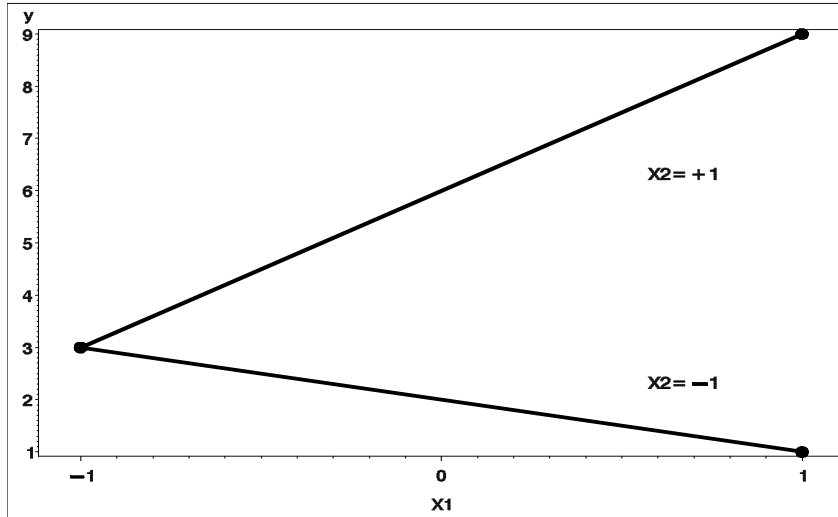


FIG. 2.2 – Interaction positive entre X_1 (en abscisse) et X_2 .

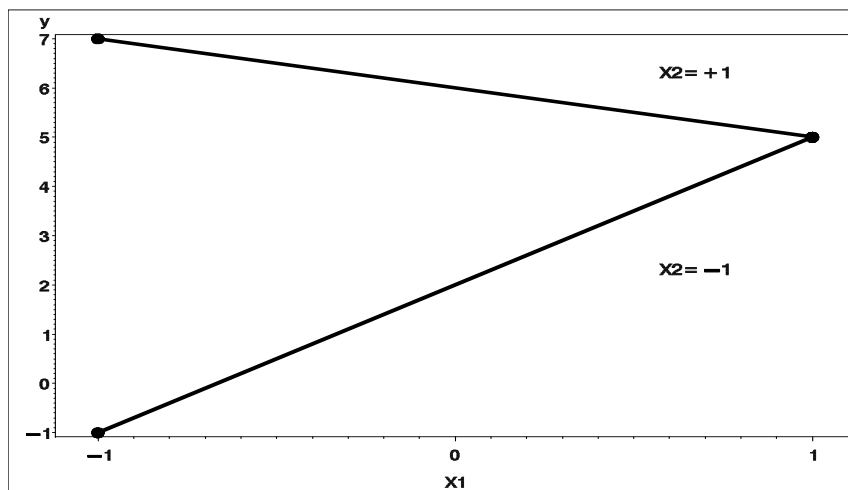


FIG. 2.3 – Interaction négative entre X_1 (en abscisse) et X_2 .

2.3.2 Seconde interprétation

On peut aussi illustrer la notion d'interaction entre deux variables à partir du tableau croisé (Tableau 2.1) de deux facteurs discrets A et B à deux modalités chacun ($A1$ et $A2$, $B1$ et $B2$), où figurent dans chaque case la moyenne de r résultats de la réponse.

A/B	$B1$	$B2$
$A1$	\bar{y}_{11}	\bar{y}_{12}
$A2$	\bar{y}_{21}	\bar{y}_{22}

Tableau 2.1. Tableau croisé pour deux facteurs discrets A et B à deux modalités chacun, les résultats moyennés \bar{y}_{ij} sont donnés dans les cases.

Il y a interaction entre les facteurs A et B si la différence $\bar{y}_{11} - \bar{y}_{21}$ est significativement (statistiquement) différente de la différence $\bar{y}_{12} - \bar{y}_{22}$, ou si la différence $\bar{y}_{11} - \bar{y}_{12}$ est significativement différente de la différence $\bar{y}_{21} - \bar{y}_{22}$. Quand les facteurs discrets mis en jeu présentent plus de deux modalités, on peut encore, avec le tableau croisé, illustrer facilement les interactions entre les modalités elles-mêmes des facteurs. On reviendra sur ce point au chapitre 4.

2.4 Le plan d'expériences

Les N_S points de support du plan d'expériences $\xi_{N, N_S, \{r\}}$ sont les sommets de Ω . Les coordonnées de ceux-ci sont obtenues par tous les croisements possibles des deux niveaux de chacun des p facteurs. On obtient ainsi une matrice, appelée matrice d'expériences, notée X , de dimensions ($N_S = 2^p \times p$). On supposera dans ce paragraphe une seule expérience par point de support, c'est-à-dire que $r_i = 1, \forall i \implies N = N_S$.

Chaque ligne de X est donc un point expérimental (un traitement ou un pattern comme explicité dans le chapitre précédent). Le plan ξ_{N_S, N_S} est appelé un plan factoriel complet 2^p parce que toutes les combinaisons des deux niveaux par facteur sont visitées.

On remarque que Ω n'est exploré qu'en ses sommets car on verra que deux niveaux suffisent pour estimer optimalement les paramètres du modèle (2.2). Cette construction du plan 2^p est valide $\forall p$. Illustrons la au moyen de l'exemple à trois facteurs.

2.5 Etude du cas à trois facteurs

2.5.1 Modèle et plan

Postulons pour trois facteurs le modèle suivant :

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^3 \beta_j X_j + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{123} X_1 X_2 X_3 + \varepsilon \quad (2.7)$$

Ce modèle est dit saturé car son nombre de termes P est égal au nombre total d'expériences du plan factoriel complet 2^3 ($P = 8 = N = N_S = 2^3$). La matrice d'expériences X est donnée au tableau 2.2 pour un codage -1/+1.

var	X_1	X_2	X_3
1	-1	-1	-1
2	-1	-1	+1
3	-1	+1	-1
4	-1	+1	+1
5	+1	-1	-1
6	+1	-1	+1
7	+1	+1	-1
8	+1	+1	+1

Tableau 2.2. Matrice X du plan factoriel complet 2^3 avec un codage -1/+1 des trois facteurs.

Remarque :

On trouve plusieurs façons de coder les facteurs, les deux plus fréquentes étant le codage dit multiplicatif -1/+1 et le codage dit additif 0/1. Quand il n'y a que deux niveaux nous conseillons de n'utiliser que le codage -1/+1, plutôt que le codage 0/1, qui présente des avantages comme on va le voir ci-dessous à propos de la mise en évidence des propriétés du plan. Un autre avantage apparaît également lors de la phase d'analyse des résultats pour laquelle le codage -1/+1 conduira à n'utiliser qu'une seule méthode de modélisation, à savoir la régression même en présence de facteurs discrets. En revanche, on verra dans d'autres chapitres que le problème du codage est moins trivial selon que les facteurs sont continus ou discrets avec trois niveaux ou plus.

A partir de la matrice d'expériences X on construit la matrice de modèle X_M (tableau 2.3) en adjoignant à X les colonnes correspondant aux termes non linéaires (non principaux) du modèle. Chaque élément d'une nouvelle colonne est formé par le produit des éléments correspondant aux facteurs mis en jeu dans cette nouvelle colonne. Dans X_M on observe la colonne X_0 qui représente le facteur "muet" associé au paramètre β_0 du modèle (on devrait écrire $\beta_0 X_0$ au lieu de β_0). On peut faire l'analogie avec la tare lors de l'étalonnage d'une balance de laboratoire.

exp	X_0	X_1	X_2	X_3	$X_1 X_2$	$X_1 X_3$	$X_2 X_3$	$X_1 X_2 X_3$
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1
2	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
4	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1
5	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1
7	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 2.3. Matrice de modèle X_M pour le plan factoriel complet 2^3 et le modèle saturé (2.7).

2.5.2 Propriétés de la matrice de modèle

Même si ce plan 2^3 semble très simple il conduit toutefois à des propriétés tout à fait remarquables. En effet :

- chaque vecteur de X_M , représentatif d'un facteur ou d'une interaction, est de moyenne nulle, ce qui implique que tous les facteurs et leurs interactions sont centrés,
- chaque vecteur est de même norme, égale à $\sqrt{2^3}$, ce qui implique que tous les facteurs et leurs interactions sont de même dispersion,
- tous les vecteurs sont orthogonaux deux à deux (produits scalaires nuls), ce qui implique que tous les facteurs et leurs interactions varient de façon indépendamment,
- l'ordre des colonnes et l'ordre des lignes sont indifférents.

Ces propriétés vont donc permettre une interprétabilité et une comparaison aisées entre les facteurs eux-mêmes et avec leurs interactions, caractérisant le phénomène.

2.5.3 Estimation des effets

Cette estimation des effets, c'est-à-dire des paramètres du modèle (2.7), peut se faire très simplement par la méthode usuelle de régression linéaire une fois obtenus les huit résultats y_1, \dots, y_8 de la réponse Y , correspondant aux expériences respectives 1, ..., 8 du tableau 2.2. Cependant, pour comprendre la structuration de ces effets, il est très utile de les définir et les calculer comme suit, avec une méthode "manuelle".

Par définition, l'effet principal (ou linéaire) estimé, $\hat{\beta}_j$, d'un facteur X_j , est la demi-différence entre les moyennes des quatre résultats aux deux niveaux +1 et -1 de X_j . Ainsi on obtient les trois effets principaux estimés suivants.

Calcul de l'effet principal estimé de X_1 :

$$\hat{\beta}_1 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{y_5 + y_6 + y_7 + y_8}{4} \right) - \left(\frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4} \right) \right] \quad (2.8)$$

$$= \frac{1}{8} (-y_1 - y_2 - y_3 - y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8) \quad (2.9)$$

Remarque : en effet les 4 résultats y_5, y_6, y_7, y_8 , correspondant aux 4 expériences 5 à 8 du tableau 2.2 sont tous associés au niveau +1 de X_1 d'une part, et les 4 résultats y_1, y_2, y_3, y_4 , correspondant aux 4 expériences 1 à 4 sont tous associés au niveau -1 de X_1 d'autre part, comme on l'observe dans le tableau 2.2.

On a de façon analogue :

Calcul de l'effet principal estimé de X_2 :

$$\hat{\beta}_2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{y_3 + y_4 + y_7 + y_8}{4} \right) - \left(\frac{y_1 + y_2 + y_5 + y_6}{4} \right) \right] \quad (2.10)$$

$$= \frac{1}{8} (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8) \quad (2.11)$$

Calcul de l'effet principal estimé de X_3 :

$$\hat{\beta}_3 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{y_2 + y_4 + y_6 + y_8}{4} \right) - \left(\frac{y_1 + y_3 + y_5 + y_7}{4} \right) \right] \quad (2.12)$$

$$= \frac{1}{8} (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8) \quad (2.13)$$

Par définition, l'effet (estimé) de l'interaction X_1X_2 – identique à celui de l'interaction X_2X_1 – est la demi-différence entre la moyenne des résultats dus à l'effet de X_1 quand X_2 est au niveau +1, alors que X_3 prend ses deux niveaux -1 et +1 d'une part, et la moyenne des résultats dus à l'effet de X_1 quand X_2 est au niveau -1, alors que X_3 prend ses deux niveaux -1 et +1. Ainsi on obtient l'effet estimé de l'interaction double X_1X_2 comme suit.

Calcul de l'effet estimé de l'interaction double X_1X_2 :

Tout d'abord on écrit l'effet estimé de X_1 quand X_2 est au niveau +1, alors que X_3 prend ses deux niveaux -1 et +1 comme

$$\hat{\beta}_{1|X_2=+1} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{y_7 + y_8}{2} \right) - \left(\frac{y_3 + y_4}{2} \right) \right] \quad (2.14)$$

Remarque : en effet les résultats y_7 et y_8 , correspondent aux 2 résultats où X_1 prend son niveau +1 tandis que X_2 reste fixé à son niveau +1, alors que X_3 prend ses 2 niveaux -1 et +1 ; les résultats y_3 et y_4 , correspondent aux 2 résultats où X_1 prend son niveau -1 tandis que X_2 reste toujours fixé à son niveau +1, alors que X_3 prend ses 2 niveaux -1 et +1, comme on l'observe dans le tableau 2.2.

On a de façon analogue :

$$\hat{\beta}_{1|X_2=-1} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{y_5 + y_6}{2} \right) - \left(\frac{y_2 + y_1}{2} \right) \right] \quad (2.15)$$

Remarque : en effet les résultats y_5 et y_6 , correspondent aux 2 résultats où X_1 prend son niveau +1 tandis que X_2 reste fixé à son niveau -1, alors que X_3 prend ses 2 niveaux -1 et +1 ; les résultats y_2 et y_1 , correspondent aux 2 résultats où X_1 prend son niveau -1 tandis que X_2 reste toujours fixé à son niveau -1, alors que X_3 prend ses 2 niveaux -1 et +1, comme on l'observe dans ce tableau 2.2.

et donc par définition :

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{1}{2} \left[\hat{\beta}_{1|X_2=+1} - \hat{\beta}_{1|X_2=-1} \right] \quad (2.16)$$

c'est-à-dire :

$$\hat{\beta}_{12} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{y_7 + y_8}{2} \right) - \left(\frac{y_3 + y_4}{2} \right) - \left(\frac{y_5 + y_6}{2} \right) + \left(\frac{y_2 + y_1}{2} \right) \right] \quad (2.17)$$

$$= \frac{1}{8} (+y_1 + y_2 - y_3 - y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8) \quad (2.18)$$

Avec le même principe on obtient :

Calcul de l'effet estimé de l'interaction double X_1X_3 :

$$\hat{\beta}_{13} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{y_6 + y_8}{2} \right) - \left(\frac{y_2 + y_4}{2} \right) - \left(\frac{y_5 + y_7}{2} \right) + \left(\frac{y_1 + y_3}{2} \right) \right] \quad (2.19)$$

$$= \frac{1}{8} (+y_1 - y_2 + y_3 - y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8) \quad (2.20)$$

Calcul de l'effet estimé de l'interaction double X_2X_3 :

$$\hat{\beta}_{23} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{y_4 + y_8}{2} \right) - \left(\frac{y_2 + y_6}{2} \right) - \left(\frac{y_3 + y_7}{2} \right) + \left(\frac{y_1 + y_5}{2} \right) \right] \quad (2.21)$$

$$= \frac{1}{8} (+y_1 - y_2 - y_3 + y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8) \quad (2.22)$$

Calcul de l'effet estimé de l'interaction triple $X_1X_2X_3$:

$$\hat{\beta}_{123} = \frac{1}{8} (-y_1 + y_2 + y_3 - y_4 + y_5 - y_6 - y_7 + y_8) \quad (2.23)$$

Pour calculer des écart-types de ces 8 effets estimés il nous faut disposer d'une estimation $\hat{\sigma}^2$ de la variance σ^2 (inconnue) des erreurs – c'est-à-dire une estimation de la variance de chaque y_i – qu'on supposera constante ici. En effet d'après les expressions précédentes on a, l'indice k représentant les indices des 8 effets :

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{\beta}_k) &= \left(\frac{1}{8} \right)^2 \text{var}(y_1 + \dots + y_8) & (2.24) \\ &= \left(\frac{1}{8} \right)^2 [\text{var}(y_1) + \dots + \text{var}(y_8)] \\ &= \left(\frac{1}{8} \right)^2 \times 8\sigma^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{8} \end{aligned}$$

les 8 résultats étant supposés indépendants. Et donc :

$$\widehat{\text{var}}(\hat{\beta}_k) = \frac{\hat{\sigma}^2}{8}$$

On verra dans une section prochaine les différentes méthodes pour calculer $\hat{\sigma}^2$, mais auparavant il est utile de faire quelques rappels sur la régression linéaire pour nous permettre un calcul automatique des effets estimés d'une part, et parce que, si au moins un des niveaux (dans le cas d'un facteur continu) aura été mal contrôlé (par exemple 0.9 au lieu de 1), cette méthode de régression devient indispensable.

2.6 Rappels de régression linéaire

2.6.1 Estimation

Ecrivons d'abord le modèle (2.7) sous forme matricielle :

$$\underset{(N \times 1)}{Y} = \underset{(N \times P)}{X_M} \underset{(P \times 1)}{\beta} + \underset{(N \times 1)}{\varepsilon} \quad (2.25)$$

avec :

- Y vecteur des N résultats y_i (on rappelle qu'on a ici $N = N_S = 8$),
- X_M la matrice de modèle (ici $P = 8$),
- β le vecteur des paramètres,
- ε le vecteur des N erreurs.

On cherche à estimer ce modèle sous la forme :

$$\underset{(N \times 1)}{\hat{Y}} = \underset{(N \times P)}{X_M} \underset{(P \times 1)}{\hat{\beta}} \quad (2.26)$$

On utilise la méthode dite aux moindres carrés ordinaires ("ordinary least squares" ou OLS en anglais). La solution cherchée $\hat{\beta}$ est obtenue en minimisant la somme S des carrés résiduels par annulation des dérivées premières de S par rapport aux composantes de β .

On a :

$$S = \varepsilon^T \varepsilon = (Y - X_M \beta)^T (Y - X_M \beta) \quad (2.27)$$

et la minimisation de S conduit au système d'équations dites normales :

$$(X_M^T X_M) \hat{\beta} = X_M^T Y$$

C'est bien un minimum que l'on obtient en vérifiant facilement que la matrice hessienne de S par rapport à β est définie positive. Dans les plans factoriels la matrice $X^T X$, appelée matrice d'information, est toujours inversible et donc on peut écrire

$$\hat{\beta} = (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T Y \quad (2.28)$$

La variance de $\hat{\beta}$ s'obtient par :

$$\text{var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X_M^T X_M)^{-1} \quad (2.29)$$

Lors d'une utilisation usuelle de la régression on dispose de N résultats avec $N > P$ et donc on a coutume d'estimer σ^2 par la formule dite de la variance résiduelle :

$$\hat{\sigma}_{N-P}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N - P} \quad (2.30)$$

où les \hat{y}_i sont les prédictions faites avec le modèle (2.26), et les écarts $y_i - \hat{y}_i$ sont les résidus e_i du modèle. Au final on a donc :

$$\widehat{\text{var}}(\hat{\beta}) = \hat{\sigma}_{N-P}^2 (X_M^T X_M)^{-1}$$

Remarque : On a vu que dans le plan factoriel complet on a $N = P$, et donc cette formule est inapplicable.

2.6.2 Validité statistique

Elle se fait avec des tests sur le modèle estimé et les paramètres estimés. Pour valider globalement le modèle \hat{Y} on réalise un test de Fisher-Snedecor, licite sous réserve d'accepter l'hypothèse de gaussianité des résidus e_i . Pour ce faire, on calcule d'abord la statistique observée

$$F_{obs} = \frac{\text{Variance expliquée}}{\text{Variance résiduelle}} = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2 / P}{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 / N - P} \quad (2.31)$$

Comme sous l'hypothèse H_0 le modèle n'explique rien – c'est-à-dire que tous les β_k sont supposés nuls – F_{obs} suit alors une loi de Fisher à P et $N - P$ degrés de liberté. Le test revient à comparer la valeur de la statistique observée à la valeur du quantile de la table de Fisher-Snedecor $\mathcal{F}(P, N - P; \alpha)$ pour un risque α choisi *a priori* (typiquement en pratique de 1, 5 ou 10%). Si $F_{obs} > \mathcal{F}(P, N - P; \alpha)$ alors on décide que le modèle est (globalement) statistiquement valide. Ensuite, si le modèle est valide on peut exprimer le taux d'explication du modèle par $R^2\% = 100 \times R^2$, où R est le coefficient de corrélation usuel de la régression, ou bien par un taux ajusté $R_a^2\% = 100 \times R_a^2$, avec $R_a^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{(N - 1)}{(N - P)}$.

Pour les paramètres on effectue un test de Student en comparant la statistique observée :

$$t_{obsk} = \frac{\hat{\beta}_k}{\sqrt{\widehat{\text{var}}(\hat{\beta}_k)}} \quad (2.32)$$

au quantile de Student $t(N - 1, \alpha)$ ou $t(N - 1, \alpha/2)$ selon le choix d'un test unilatéral ou bilatéral. Si $t_{obsj} > t(N - 1, \alpha)$ ou $t(N - 1, \alpha/2)$ alors on décide que le paramètre β_k est significativement différent de zéro, en d'autres termes que le facteur (ou l'interaction) correspondant(e) a une influence sur la réponse, la force de cette influence étant quantifiée par $\hat{\beta}_k$.

La validité statistique se continue ensuite, comme usuellement en régression, par une analyse globale des résidus (vérification d'une normalité approximative par un graphique Quantile-Quantile (Q-Q plot en anglais)), et également une analyse individuelle des résidus et de leur influence au moyen de statistiques basées sur la matrice des leviers, c'est-à-dire le projecteur de la régression $H = X_M(X_M^T X_M)^{-1} X_M^T$ (voir par exemple Draper & Smith, 1981, [15]).

2.6.3 Simplification dans le cas du plan 2^p

Dans ce cas tous les vecteurs constituant la matrice de modèle X sont orthogonaux, et donc X est orthogonale, ce qui conduit à des matrices $X^T X$ et $(X^T X)^{-1}$ diagonales. On a :

$$(X_M^T X_M)^{-1} = \frac{1}{N} I_N \quad (2.33)$$

où I_N est la matrice identité ($N \times N$) avec $N = 2^p$. Le calcul du vecteur $\hat{\beta}$ est donc très simple car il n'y a pas de matrice à inverser :

$$\hat{\beta} = \frac{1}{N} X_M^T Y \quad (2.34)$$

Pour toute composante $\hat{\beta}_k$ de $\hat{\beta}$ on a :

$$\hat{\beta}_k = \frac{1}{N} X_{Mk}^T Y \quad (2.35)$$

Par exemple pour $\hat{\beta}_3$, on a :

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_3 &= \frac{1}{8} (X_{1,3}, \dots, X_{8,3}) \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_8 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{8} (-1, +1, -1, +1, -1, +1, -1, +1) \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_8 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{8} (-y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8) \end{aligned} \quad (2.36)$$

résultat qui correspond bien sûr à l'équation (2.13). Le résultat remarquable est donc qu'un effet estimé $\hat{\beta}_k$ est une combinaison linéaire – c'est même un contraste car la somme des coefficients de cette combinaison linéaire vaut zéro – qui met en jeu tous les résultats du plan. On note que $\hat{\beta}_0$ est la moyenne des résultats y_i .

Remarque : nous avons donc bien montré que deux niveaux suffisaient pour estimer les effets des termes X_k dans le modèle (2.7).

Il nous reste dans le paragraphe suivant à examiner les différentes méthodes pour calculer une estimation $\hat{\sigma}^2$ dans le cadre du plan factoriel complet pour permettre un test statistique sur les paramètres estimés.

2.6.4 Calcul d'une variance résiduelle

Plusieurs méthodes sont possibles pour calculer une variance résiduelle dans le plan factoriel complet 2^p pour un modèle saturé.

Méthode A (méthode de Daniel, 1959)

Le modèle est saturé en nombre de termes ($P = 2^3$). On ne dispose donc pas de répétitions d'expériences, et on ne dispose pas non plus d'une estimation indépendante de la variance expérimentale. Dans cette situation plusieurs méthodes ont été proposées : la méthode de Daniel (1959, [12]), la méthode de Lenth (1989, [26]), les méthodes de Box et Meyer (1986, [8]; 1993, [9]). Nous n'exposons ici que la méthode de Daniel [12],

simple d'emploi et facile à programmer, en se basant sur Kobilinsky (1997, [24]) pour l'exposer. Cette méthode de Daniel est la plus ancienne, mais toujours utilisée. C'est une procédure graphique où l'on examine un graphique des quantiles demi-normaux ("half normal probability plots" en anglais) des $P - 1$ estimations $\hat{\beta}_k$ (le terme $\hat{\beta}_0$ étant exclu). Soit Δ_k la valeur absolue d'un $\hat{\beta}_k$. En classant les Δ_k en ordre croissant, on obtient les statistiques d'ordre $\Delta_{(1)} \leq \dots \leq \Delta_{(P-1)}$ associées qui sont les ordonnées du graphique de Daniel. Les abscisses correspondantes Z_1, \dots, Z_{P-1} sont calculées par la formule

$$Z_k = F^{-1} \left(\frac{k - 0.5}{P - 1} \right) \quad (2.37)$$

où F est la fonction de répartition de la valeur absolue $|\Delta|$ d'une variable aléatoire Δ de loi $\mathcal{N}(0, 1)$. La fonction F^{-1} se déduit immédiatement de l'inverse Φ^{-1} de la fonction de répartition de la loi $\mathcal{N}(0, 1)$:

$$F^{-1}(u) = \Phi^{-1} \left(\frac{u + 1}{2} \right) \quad (2.38)$$

et Φ^{-1} peut être approchée à 0.0005 près par un développement limité ad hoc (Abramowitz et al., 1970, [1]). Alors Z_k est le quantile théorique $(k - 0.5)/(P - 1)$ de cette loi Δ , et $\Delta_{(k)}$ peut être assimilé au quantile correspondant de la loi empirique définie par les $P - 1$ valeurs absolues Δ_k .

Sous l'hypothèse de normalité et si tous les effets sont nuls, les $P - 1$ estimations $\hat{\beta}_k$ forment un échantillon de taille $P - 1$ d'une $\mathcal{N}(0, \sigma^2/P)$. L'ordonnée $\Delta_{(k)}$ du point $(Z_k, \Delta_{(k)})$ a alors approximativement $\sigma Z_k/4$ pour espérance (David, 1981, [13]) :

$$E(\Delta_{(k)}) \approx \frac{\sigma}{4} Z_k \quad (2.39)$$

et les points du graphique tendent à s'aligner sur la droite de pente $\sigma/4$ passant par l'origine. Lorsqu'il y a des effets non nuls, il n'y a plus d'alignement, ceux-ci se détachent de cet alignement vers le haut du graphique, ce qui permet de les détecter. Une fois ainsi détectés les effets significativement différents de zéro, ceux-ci sont éliminés un par un, en refaisant un nouveau graphique des quantiles à chaque fois.

On peut obtenir un graphique de Daniel à l'aide du code SAS Daniel01 suivant basé sur un problème à cinq facteurs.

```

/***** DANIEL01 *****/
;
options ps=500 ls=80 nodate nonumber nocenter;
title ' ' ;

data d0; input beta @@ ; datalines;
-0.002 0.002 -0.006 -0.007 -0.009 -0.010 -0.012
-0.012 0.019 -0.024 0.026 0.026 0.027 0.028 -0.027

```

```

-0.029 -0.031 -0.034 -0.034 -0.036 -0.037 0.038
0.039 -0.041 -0.047 -0.051 -0.069 -0.083 -0.122
-0.151 -0.219
;
data d1; set d0; beta=abs(beta);
proc sort data=d1 out=trie; by beta;
data d2;
do i=1 to 31 by 1;
    p=(i-0.5)/31;
    Z=probit((p+1)/2);
output;
end;

data label; input effet $ @@; datalines;
ABCE BCDE ACDE ABDE ABCDE
BCD BCE CDE ACD ACE BDE ABCD ADE
BD BE CD CE DE ABC ABD ABE
AB AC AD AE BC A B C D E
;

data d3; merge trie(keep=beta) d2(keep=Z) label;
data labels; set d3;
retain xsys '2' ysys '2' ;
length text $7 function $8;
function='LABEL';
x=Z; y=beta;
text=effet;
size=1.2;
position='8';

goptions device=win reset=global gunit=pct
        border reset=axis ftext=swissb htitle=4 htext=3;
title ' ';
symbol v=dot h=1.2 color='black';
axis1 label=('Quant. emp.' h=1.5 a=0 r=0 f=swissb)
      value=(h=3 f=swissb) ;
axis2 label=('Quantile theorique demi-normal' h=1.5 f=swissb)
      value=(h=3 f=swissb) ;
run; quit; run;

proc gplot data=d3;
    plot beta*Z /
        annotate=labels

```

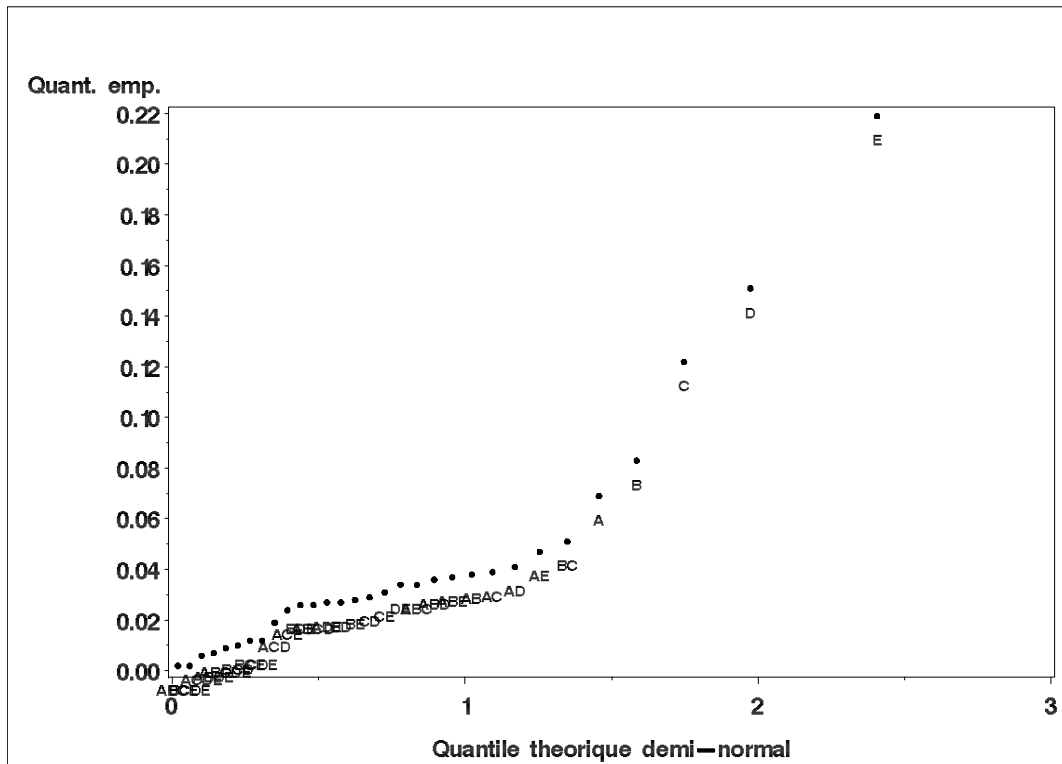



FIG. 2.4 – Un exemple de graphique de Daniel pour un plan complet 2^5 avec modèle saturé.

```
vaxis=axis1 haxis=axis2
hminor=1 vminor=1 frame;
run; quit; run;
/*****/;
```

L'exécution de ce code conduit au graphique de Daniel de la figure 2.4.

Commentaire sur la figure 2.4 :

- Il apparaît que les 5 effets principaux A, ..., E s'écartent de la droite qui pourrait être formée par les autres termes (interactions doubles, triples, ...).
- On enlève ces 5 effets, on calcule la pente de la droite de régression ajustée sur les 26 points restants, et on retrace un graphique avec avec la droite; on réalise ceci avec le code Daniel02.sas suivant.

```
/***** DANIEL02 *****/
data new; set d3;
```

```

if _n_ > 26 then delete;
proc reg data=new;
model beta=Z;
output out=resul predicted=pred;
data final ; merge d3 resul(keep=pred);

proc gplot data=final;
  plot beta*Z pred*Z/overlay
  annotate=labels
  vaxis=axis1 haxis=axis2
  hminor=1 vminor=1 frame;
run; quit; run;
/*****/

```

qui conduit à la droite de régression :

```

/*****/
Parameter Estimates

```

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	0.00439	0.00113	3.87	0.0007
Z	1	0.03492	0.00160	21.78	<.0001

```

/*****/

```

et à la figure 2.5.

Finalement comme la pente vaut 0.03492, on dispose d'une estimation de l'écart-type résiduel qui vaut 0.03492×4 soit à peu près 0.14.

Méthode B

Le modèle est saturé en nombre de termes, on ne dispose toujours pas de répétitions d'expériences, mais on dispose d'une estimation indépendante de la variance expérimentale. C'est typiquement la situation du laboratoire d'analyse (biologique, chimique, matériaux,...) qui pratique une méthode d'analyse depuis longtemps, toujours dans les mêmes conditions, et dont on connaît donc bien la reproductibilité et la répétabilité. Alors, la variance calculée sur les longues séries de résultats peut être utilisée comme estimation de σ^2 .

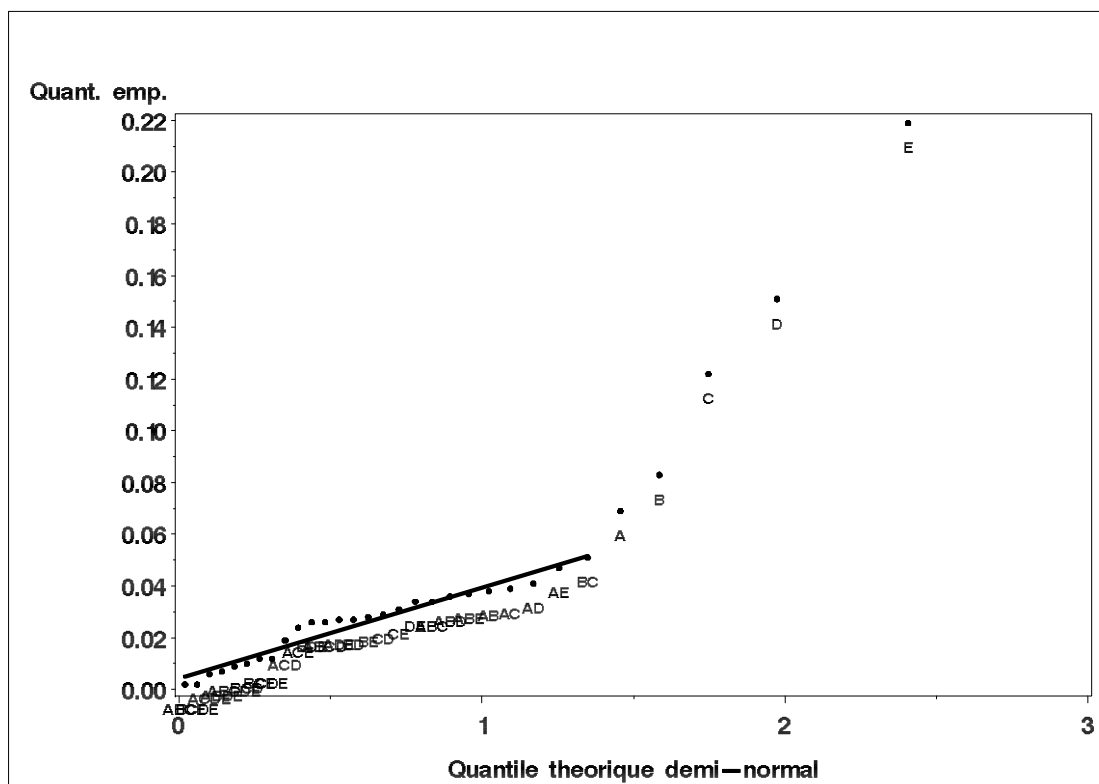


FIG. 2.5 – Graphique de Daniel correspondant à celui de la figure 2.4 mais avec rajout de la droite de pente $\sigma/4$.

Méthode C

Le modèle est saturé en nombre de termes, mais on peut répéter un même nombre r de fois toutes les expériences, on alors $N = rN_S$. Comme chaque expérience est répétée r fois, la structure orthogonale de X n'est pas changée. Si on note les r résultats y_{iu} , $u = 1, \dots, r$, obtenus en chaque point expérimental x_i , $i = 1, \dots, N_S$, une erreur dite pure sera estimée par $y_{iu} - \bar{y}_i$, où \bar{y}_i est la moyenne des r résultats en x_i . Ainsi une estimation non biaisée $\hat{\sigma}_e^2$ de la variance d'erreur pure σ_e^2 se définit par :

$$\hat{\sigma}_e^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_S} \sum_{u=1}^r (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{N_S (r - 1)} \quad (2.40)$$

et $\hat{\sigma}_e^2$ servira de variance résiduelle pour faire les tests sur les paramètres. Le terme "d'erreur pure" est la traduction du terme "pure error" de Box (1978, [5]). En effet comme ce sont des vraies répétitions d'expériences, c'est-à-dire que le procédé opératoire n'a pas changé et que les coordonnées de chaque expérience sont rigoureusement inchangées d'une répétition à l'autre, alors on dispose d'une erreur dite pure, c'est-à-dire non provoquée par une variation des facteurs ou d'une étape du mode opératoire, mais uniquement à la variabilité "naturelle" du phénomène étudié.

En outre, cette méthode à même nombre de répétitions par expérience est la plus adaptée pour tester le manque d'ajustement du modèle ("lack-of-fit" ou lof en anglais) par rapport aux résultats. En effet on peut décomposer la somme des carrés résiduelle totale en somme des carrés de l'erreur pure et la somme des carrés du lof. Détaillons la procédure. On commence par écrire le résidu pour l'observation y_{iu} comme :

$$y_{iu} - \hat{y}_i = (y_{iu} - \bar{y}_i) - (\hat{y}_i - \bar{y}_i) \quad (2.41)$$

En élevant au carré puis en sommant sur les indices i et u (le double produit s'annule) on obtient :

$$\sum_{i=1}^{N_S} \sum_{u=1}^r (y_{iu} - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{N_S} \sum_{u=1}^r (y_{iu} - \bar{y}_i)^2 + r \sum_{i=1}^{N_S} (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2 \quad (2.42)$$

soit

$$SCR_{tot} = SCR_e + SCR_{lof} \quad (2.43)$$

et en associant les degrés de liberté respectifs ddl_{tot} , ddl_e , ddl_{lof} , avec

$$ddl_{tot} = ddl_e + ddl_{lof} \quad (2.44)$$

$$rN_S - P = N_S (r - 1) + (N_S - P) \quad (2.45)$$

on peut construire une statistique F_{lof} de Fisher-Snedecor :

$$F_{lof} = \frac{SCR_{lof}/(N_S - P)}{SCR_e/N_S (r - 1)} \quad (2.46)$$

puis la comparer au quantile $\mathcal{F}(ddl_{lof}, ddl_e; 1 - \alpha)$ d'une table de F-S.

Si $F_{lof} > \mathcal{F}(ddl_{lof}, ddl_e; 1 - \alpha)$ alors le manque d'ajustement est déclaré significatif, et par conséquent le modèle postulé n'est pas le meilleur modèle pour approcher le phénomène, c-a-d qu'il manque des termes dans le modèle (ou le modèle linéaire en les facteurs n'est pas adapté, le phénomène étant trop complexe).

Méthode D (facteurs continus)

Le modèle est saturé en nombre de termes, on ne dispose pas de répétitions, mais on peut rajouter des expériences au centre du domaine expérimental. Dans ce cas Ω est compact, et il est donc possible (sauf contraintes particulières) de réaliser r_0 (> 1) expériences au centre de Ω , donc de coordonnées $(0, \dots, 0)$ pour facteurs codés en $+1/+1$. Si la variance σ^2 est supposée homogène, alors les résultats y_{ok} , $k = 1$ à r_0 correspondants peuvent permettre d'estimer une variance résiduelle basée sur une erreur pure analogue au cas précédent (où \bar{y}_0 est la moyenne des r_0 résultats au centre) :

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{\sum_{k=1}^{r_0} (y_{ok} - \bar{y}_0)^2}{r_0 - 1} \quad (2.47)$$

Méthode E

On considère dans le modèle saturé que certains effets sont *a priori* négligeables, par exemple les interactions d'ordre élevé. C'est la situation où l'on sait, en général après une analyse scientifique du phénomène, que les interactions d'ordre élevé n'ont pas lieu d'être, ou sont négligeables, ou assimilables à du "bruit". Alors P est diminué en P' , et $N - P' > 0$.

Méthode F

C'est une approche assimilable à la méthode du "pooling" de Box *et al* ([5]). On fait le calcul de tous les effets estimés, on les classe, et on décide arbitrairement de supprimer dans le modèle le terme correspondant à l'effet estimé le plus faible (en valeur absolue). On recalcule un modèle sans ce terme, donc à $P' (= P - 1)$ termes. La variance résiduelle devient calculable puisque $N - P' = 1$, et ainsi les tests de Student sont réalisables. Bien sûr ceux-ci sont très peu puissants, on peut alors préférer retirer un deuxième terme, celui dont l'effet estimé correspondant est le nouveau plus faible.

Remarque :

Finalement, on observe que les cas C et D se complètent : l'idéal serait donc de pouvoir répéter les expériences en chaque x_i et aussi réaliser des expériences au centre du domaine Ω .

2.7 Validité expérimentale

En présence de facteurs continus on demande souvent au modèle, en plus de détecter les facteurs et interactions influents, d'être aussi un outil de prédiction. Il est donc tout à fait important de compléter la validité statistique par une validité expérimentale. Celle-ci consiste à réaliser de nouvelles expériences "bien placées" dans Ω pour vérifier la qualité des prédictions du modèle estimé. Typiquement, le centre de Ω , comme dans la méthode D, est un endroit adéquat pour placer des expériences tests. Ces expériences vont permettre d'utiliser les résultats obtenus pour tester la présence d'un éventuel effet de courbure globale comme on le montre ci-dessous.

Remarque : En présence de facteurs discrets, le modèle n'a pas d'objectif de prédiction, mais seulement de détecter les facteurs et interactions influents.

2.7.1 Sans estimation d'une variance résiduelle

On peut dans cette situation extrême où $N = N_S = 2^p$, procéder à une approche simple et très empirique pour suspecter un éventuel effet de courbure globale. Le terme "globale" traduit le fait qu'en se plaçant au centre du domaine expérimental on ne peut pas distinguer de façon individuelle le facteur (ou les facteurs) responsable(s) de cet écart à la linéarité.

Après avoir réalisé au moins une expérience au centre, on compare la moyenne \bar{y}_0 des résultats en ce centre avec la valeur $\hat{\beta}_0$ obtenue avec le plan 2^p , valeur égale à la prédiction au centre, soit \hat{y}_0 (celle-ci étant la moyenne des 2^p résultats y_i du plan). Si l'écart semble très petit on déduit donc avec très peu d'expériences supplémentaires par rapport à N qu'aucune variable n'est responsable d'un défaut au modèle. Bien entendu, cette constatation n'est valable qu'au centre, et il est possible que des écarts à la linéarité puissent exister ailleurs qu'au centre. Si l'écart semble grand on peut suspecter qu'on pourrait améliorer le modèle linéaire initialement postulé par un ou plusieurs termes quadratiques, mais évidemment on ne sait pas lesquels choisir. Il est donc conseillé de compléter le plan 2^p par des expériences particulières pour conduire à un plan adapté pour estimer des effets quadratiques : c'est l'objet des plans dits de surface de réponse étudiés au chapitre 10.

Remarque :

Il est préférable de réaliser plus d'une expérience au centre pour éviter un résultat aberrant. Dans la pratique, il est recommandé d'en réaliser au moins trois ($r_0 = 3$) et d'en faire la moyenne ensuite.

2.7.2 Avec estimation d'une variance résiduelle

Si on dispose d'une variance résiduelle, une approche statistique est celle présentée dans les deux paragraphes suivants.

Un seul résultat au centre

Soit :

- y_0 le résultat de la réponse au centre du domaine.
- \hat{y}_0 la réponse calculée en ce centre avec le modèle \hat{Y} .

Alors, l'intervalle de confiance de la prédiction de y_0 est donné dans le cadre de la régression multiple par :

$$IC_{1-\alpha} = \left[\hat{y}_0 - t_{N-P;1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{1 + h_x}; \hat{y}_0 + t_{N-P;1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{1 + h_x} \right] \quad (2.48)$$

- avec :

$$h_x = \frac{1}{N} + (x - \bar{x}) \left(\tilde{X}_M^T \tilde{X}_M \right)^{-1} (x - \bar{x})^T \quad (2.49)$$

où \bar{x} est le vecteur ligne ($1 \times P$) des moyennes de toutes les colonnes de X_M . Ici on a $\bar{x} = x_0 = (0, \dots, 0)$, et \tilde{X}_M est la matrice X_M centrée (c'est-à-dire que chaque colonne de X_M est centrée par rapport à sa moyenne). On a donc $\tilde{X}_M = X_M$, et

$$h_{x_0} = \frac{1}{N} + (x_0 - x_0) (X_M^T X_M)^{-1} (x_0 - x_0)^T = \frac{1}{N} \quad (2.50)$$

Si $y_0 \in IC_{1-\alpha}$ on conclut que le modèle ne présente pas de courbure globale, plus exactement ne présente pas d'écart à la linéarité telle qu'elle s'exprime dans l'espérance de (2.7).

Plusieurs résultats au centre

Soit :

- y_{0k} le k ème résultat expérimental obtenu au centre, $k = 1, \dots, r_0$,
- $\bar{y}_0 = 1/r_0 \sum_{k=1}^{r_0} y_{0k}$ la moyenne des r_0 résultats au centre

Alors, l'intervalle de confiance de la prédiction de \bar{y}_0 est donné par la régression multiple :

$$IC_{1-\alpha} = \left[\hat{y}_0 - t_{N-P;1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{\frac{1}{r_0} + h_x}; \hat{y}_0 + t_{N-P;1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{\frac{1}{r_0} + h_x} \right] \quad (2.51)$$

$$\left[\hat{y}_0 - t_{N-P;1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{\frac{1}{r_0} + \frac{1}{N}}; \hat{y}_0 + t_{N-P;1-\alpha/2} \hat{\sigma} \sqrt{\frac{1}{r_0} + \frac{1}{N}} \right] \quad (2.52)$$

Si $\bar{y}_0 \in IC_{1-\alpha}$ on conclut que le modèle ne présente pas de courbure globale, plus exactement ne présente pas d'écart à la linéarité telle qu'elle s'exprime dans l'espérance de (2.7).

2.8 Un exemple d'application du plan 2^3

2.8.1 Le problème à étudier

Ce problème est exposé dans Box (1978, page 307-318, [5]). C'est un exemple particulièrement pédagogique pour initier le débutant à la mise en oeuvre et l'analyse d'un plan 2^p .

Soit un rendement (en %) d'une réaction chimique supposé dépendre de trois facteurs explicatifs : le facteur température (facteur continu) T , le facteur concentration (facteur continu) C , et le facteur catalyseur (facteur discret) K . La réponse Y est le rendement en % de la réaction chimique.

2.8.2 La construction du plan d'expériences et du plan d'expérimentation

Un plan 2^3 est envisagé, la matrice d'expérience est celle du tableau 2.2. Le plan d'expérimentation et les résultats y_i sont donnés au tableau 2.4.

n° exp	K	$C(\%)$	$T(^{\circ}C)$	$Rdt(\%)$
1	A	20	160	60
2	A	20	180	72
3	A	40	160	54
4	A	40	180	68
5	B	20	160	52
6	B	20	180	83
7	B	40	160	45
8	B	40	180	80

Tableau 2.4. Plan d'expérimentation 2^3 et les résultats.

On observe au tableau 2.4 que l'ordre affiché, pour des raisons de clarté, est l'ordre de construction, mais on rappelle que la réalisation effective des expériences doit se faire dans un ordre aléatoire ou par blocs.

La procédure FACTEX du logiciel SAS/QC permet facilement la construction du plan d'expériences avec le code Factex01 suivant :

```
/****** FACTEX01.SAS *****/;
proc factex;
  factors K C T;
  output out=resul;

proc print data=resul;
run;
/****** */;
```


Commentaire sur Factex01 :

- Par défaut chacun des 3 facteurs aura 2 niveaux codés -1 et +1.

La sortie correspondante est :

Obs	K	C	T
1	-1	-1	-1
2	-1	-1	1
3	-1	1	-1
4	-1	1	1
5	1	-1	-1
6	1	-1	1
7	1	1	-1
8	1	1	1

La construction du plan d'expérimentation se fait avec le code Factex02 suivant :

```
/****** FACTEX02.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1 x2 x3;
  output out=resul K cvals=("A" "B")
             C nvals=(20 40)
             T nvals=(160 180);
proc print data=resul;
run;
/****** */;
```

Commentaires sur Factex02 :

- La commande *cvals* permet d'indiquer des modalités en mode caractère (avec des guillemets).
- La commande *nvals* permet d'indiquer des valeurs numériques pour les niveaux des facteurs continus.

La sortie correspondante est :

Obs	K	C	T
1	A	20	160
2	A	20	180
3	A	40	160

4	A	40	180
5	B	20	160
6	B	20	180
7	B	40	160
8	B	40	180

Si on souhaite répéter une fois le plan on peut utiliser le code Factex03 :

```

/***** FACTEX03.SAS *****/;
proc factex;
  factors K C T;
  size design=16;
  output out=resul K cvals=("A" "B")
             C nvals=(20 40)
             T nvals=(160 180);
proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

Commentaire sur Factex03 :

- La commande "size design=" permet de donner la taille du plan souhaité : si elle est absente le plan complet est fourni, sinon une taille multiple de la taille du plan complet conduira à la répétition ad hoc du plan complet, ici on demande de doubler chaque expérience comme il apparaît ci-dessous.

La sortie correspondante est :

Obs	K	C	T
1	A	20	160
2	A	20	180
3	A	40	160
4	A	40	180
5	B	20	160
6	B	20	180
7	B	40	160
8	B	40	180
9	A	20	160
10	A	20	180
11	A	40	160
12	A	40	180

13	B	20	160
14	B	20	180
15	B	40	160
16	B	40	180

2.8.3 Analyse des résultats

Méthode manuelle

Comme expliqué au paragraphe 2.5.3 on calcule les effets estimés comme suit :

Calcul de l'effet principal estimé de T :

$$\hat{\beta}_T = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{68 + 80 + 72 + 83}{4} \right) - \left(\frac{54 + 45 + 60 + 52}{4} \right) \right] = 11.50 \quad (2.53)$$

Calcul de l'effet principal estimée de C :

$$\hat{\beta}_C = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{45 + 80 + 54 + 68}{4} \right) - \left(\frac{52 + 83 + 60 + 72}{4} \right) \right] = -2.50 \quad (2.54)$$

Calcul de l'effet principal estimée de K :

$$\hat{\beta}_K = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{45 + 80 + 52 + 83}{4} \right) - \left(\frac{54 + 68 + 60 + 72}{4} \right) \right] = 0.75 \quad (2.55)$$

Calcul de l'effet de l'interaction double estimé T × C :

$$\hat{\beta}_{T \times C} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{68 + 80}{2} \right) - \left(\frac{54 + 45}{2} \right) - \left(\frac{72 + 83}{2} \right) + \left(\frac{60 + 52}{2} \right) \right] = 0.75 \quad (2.56)$$

Calcul de l'effet de l'interaction double estimé T × K :

$$\hat{\beta}_{T \times K} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{83 + 80}{2} \right) - \left(\frac{68 + 72}{2} \right) - \left(\frac{45 + 52}{2} \right) + \left(\frac{60 + 54}{2} \right) \right] = 5 \quad (2.57)$$

Calcul de l'effet de l'interaction double estimé C × K :

$$\hat{\beta}_{C \times K} = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{45 + 80}{2} \right) - \left(\frac{54 + 68}{2} \right) - \left(\frac{52 + 83}{2} \right) + \left(\frac{60 + 72}{2} \right) \right] = 0 \quad (2.58)$$

Calcul de l'effet de l'interaction triple estimé T × C × K :

$$\hat{\beta}_{T \times C \times K} = \frac{1}{8} [72 - 60 + 54 - 68 + 52 - 83 - 45 + 80] = 0.25 \quad (2.59)$$

Méthode de régression

Au moyen de la procédure REG de SAS, le code Reg01 suivant :

```
/****** REG01.SAS *****/;
data don0; input K C T KC KT CT KCT y;
datalines;
....
;

proc reg data=don0;
  model y=K C T KC KT CT KCT;
run;quit;run;
/****** */;
```

conduit à la sortie suivante :

The REG Procedure
Model: MODEL1
Dependent Variable: y

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	7	1317.50000	188.21429	.	.
Error	0	0	.		
Corrected Total	7	1317.50000			

Root MSE	.	R-Square	1.0000
Dependent Mean	64.25000	Adj R-Sq	.
Coeff Var	.		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
----------	----	--------------------	----------------	---------	---------

Intercept	1	64.25000	.	.	.
K	1	0.75000	.	.	.
C	1	-2.50000	.	.	.
T	1	11.50000	.	.	.
KC	1	0	.	.	.
KT	1	5.00000	.	.	.
CT	1	0.75000	.	.	.
KCT	1	0.25000	.	.	.

Commentaire :

- *On observe évidemment l'impossibilité d'obtenir des tests sur le modèle et les coefficients de régression (les effets) puisqu'il n'y a aucun degré de liberté.*

Au vu des valeurs des estimations des paramètres, on suppose que *KC* et *KCT* ont des effets négligeables (c'est la méthode F évoquée au paragraphe 2.6.4), et on recommence l'analyse sans *KC* ni *KCT* dans le modèle. On obtient :

The REG Procedure

Model: MODEL1

Dependent Variable: y

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	5	1317.00000	263.40000	1053.60	0.0009
Error	2	0.50000	0.25000		
Corrected Total	7	1317.50000			

Root MSE	0.50000	R-Square	0.9996
Dependent Mean	64.25000	Adj R-Sq	0.9987
Coeff Var	0.77821		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
----------	----	--------------------	----------------	---------	---------

Intercept	1	64.25000	0.17678	363.45	<.0001
K	1	0.75000	0.17678	4.24	0.0513
C	1	-2.50000	0.17678	-14.14	0.0050
T	1	11.50000	0.17678	65.05	0.0002
KT	1	5.00000	0.17678	28.28	0.0012
CT	1	0.75000	0.17678	4.24	0.0513

Commentaires :

- *Au risque de 5%, l'effet de la température T apparaît majeur, et les effets de C et KT sont importants.*
- *Il est difficile de décider pour K et CT car avec deux degrés de liberté seulement les tests sont peu puissants.*
- *Des répétitions des expériences auraient permis de disposer de plus de ddl et obtenir ainsi une conclusion plus nette pour K et CT.*

Méthode d'analyse de la variance

On peut aussi réaliser l'analyse des résultats avec la procédure ANOVA (ou GLM que l'on utilisera plus loin). Avec le code Anova01 ci-dessous :

```

/***** ANOVA01.SAS *****/;
proc anova data=don0;
  class K C T;
  model y=K|C|T@3;
run;quit;run;
/*****/;

```

Commentaire :

- *Le symbole @3 permet de demander l'étude des interactions jusqu'à l'ordre 3.*

on obtient :

The ANOVA Procedure

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
--------	----	----------------	-------------	---------	--------

Model	7	1317.500000	188.214286	.	.
Error	0	0.000000	.	.	.
Corrected Total	7	1317.500000			

R-Square	Coeff Var	Root MSE	y Mean
1.000000	.	.	64.25000

Source	DF	Anova SS	Mean Square	F Value	Pr > F
K	1	4.500000	4.500000	.	.
C	1	50.000000	50.000000	.	.
K*C	1	0.000000	0.000000	.	.
T	1	1058.000000	1058.000000	.	.
K*T	1	200.000000	200.000000	.	.
C*T	1	4.500000	4.500000	.	.
K*C*T	1	0.500000	0.500000	.	.

Avec la procédure GLM, le code Glm01 suivant :

```

/***** GLM01.SAS *****/;
proc glm data=don0;
  class K C T;
  model y=K C T K*T C*T / solution ssl;
run;quit;run;
/*****/;

```

conduit à :

The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	5	1317.000000	263.400000	1053.60	0.0009
Error	2	0.500000	0.250000		

Corrected Total 7 1317.500000

R-Square	Coeff Var	Root MSE	y Mean
0.999620	0.778210	0.500000	64.25000

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
K	1	4.500000	4.500000	18.00	0.0513
C	1	50.000000	50.000000	200.00	0.0050
T	1	1058.000000	1058.000000	4232.00	0.0002
K*T	1	200.000000	200.000000	800.00	0.0012
C*T	1	4.500000	4.500000	18.00	0.0513

Parameter		Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept		79.75000000 B	0.43301270	184.17	<.0001
K	-1	-11.50000000 B	0.50000000	-23.00	0.0019
K	1	0.00000000 B	.	.	.
C	-1	3.50000000 B	0.50000000	7.00	0.0198
C	1	0.00000000 B	.	.	.
T	-1	-34.50000000 B	0.61237244	-56.34	0.0003
T	1	0.00000000 B	.	.	.
K*T	-1 -1	20.00000000 B	0.70710678	28.28	0.0012
K*T	-1 1	0.00000000 B	.	.	.
K*T	1 -1	0.00000000 B	.	.	.
K*T	1 1	0.00000000 B	.	.	.
C*T	-1 -1	3.00000000 B	0.70710678	4.24	0.0513
C*T	-1 1	0.00000000 B	.	.	.
C*T	1 -1	0.00000000 B	.	.	.
C*T	1 1	0.00000000 B	.	.	.

NOTE: The X'X matrix has been found to be singular, and a generalized inverse was used to solve the normal equations. Terms whose estimates are followed by the letter 'B' are not uniquely estimable.

Commentaires :

- Cette sortie est plus compliquée que celle de la régression usuelle, car dans cette

procédure GLM la régression se fait sur les indicatrices des facteurs : la matrice de modèle X_M va comporter des colonnes qui seront des sommes d'autres colonnes, et par conséquent la matrice d'information $X_M^T X_M$ sera non inversible, d'où la note de la sortie précédente.

- Donc pour deux niveaux seulement par facteur on peut se contenter de l'utilisation, plus simple, de la régression par la procédure REG
- L'utilisation de la procédure GLM, **très utile quand les facteurs discrets auront plus de 2 niveaux**, sera abordée lors de l'étude du plan 3^p , au chapitre 4.

2.9 Conclusion sur le plan factoriel complet 2^p

On peut faire une liste des avantages cruciaux que procure cette structure, pourtant si simple qu'est le plan 2^p :

- on peut s'attendre à une compensation des erreurs si celle-ci suit une loi de probabilité centrée, lors de l'estimation de chaque paramètre,
- tous les effets font intervenir l'ensemble des résultats,
- $\hat{\beta}_0$ n'est autre que la moyenne des résultats y_i , c'est l'effet moyenne,
- l'effet $\hat{\beta}_k$ n'est vraiment dû qu'à l'action du facteur (ou de l'interaction) correspondant ; il n'y a pas de confusion possible avec l'action d'un autre facteur, raisonnablement similaire avec les interactions,
- la variance de chaque estimateur est minimisée, et les estimateurs ont tous le même écart-type,
- les intervalles de confiance individuels seront plus petits,
- la région de confiance des paramètres est une boule de volume plus petit que celui de la région ellipsoïdale, conduisant donc à une incertitude globale plus petite,
- les covariances entre les estimateurs sont toutes nulles.

Ces avantages proviennent tous du **critère d'orthogonalité** qui caractérise le plan factoriel.

Si le nombre de facteurs à considérer est grand, situation que l'on rencontre dans la pratique, par exemple 6 à 10 facteurs, ce type de plan complet implique trop d'expériences à réaliser. L'objet du chapitre suivant est de fractionner le plan complet 2^p en fractions répondant à la contrainte du nombre trop grand d'expériences du plan complet, sous des hypothèses de modèle adaptées.

En outre, s'il est connu par avance que des effets au moins quadratiques sont nécessaires à introduire dans le modèle, deux niveaux ne suffisent pas pour une modélisation correcte, cette situation sera traitée au chapitre 10.

Chapitre 3

Le plan factoriel 2^{p-k}

3.1 Introduction

Si on suppose que les effets principaux (linéaires) et les effets de toutes les interactions possibles (doubles, triples, ...) sont suffisants pour décrire le phénomène, le plan 2^p apparaît alors comme un outil très puissant puisqu'il permet l'estimation de tous ces effets de façon optimale grâce à l'orthogonalité de sa structure. Cependant, le nombre d'expériences qui devront être réalisées va croître rapidement avec p , et atteindre des valeurs totalement rédhibitoires vis-à-vis d'un objectif de réalisation (physique) : des études à dix facteurs impliqueraient $2^{10} = 1024$ expériences à conduire. Pour p facteurs le nombre P de termes qui saturent le modèle est en effet égal à :

$$P = 1 + C_p^1 + C_p^2 + \dots + C_p^p = 2^p \quad (3.1)$$

ce qui donne $P = 128, 256, 512, 1024$ pour p respectivement égal à 7, 8, 9, 10.

L'idée de base du **plan factoriel fractionnaire** est de ne réaliser qu'une **fraction** des expériences exigées par un plan factoriel complet, mais en essayant de garder au maximum des bonnes conditions d'estimation et d'interprétabilité des effets : il y aura **conservation de l'orthogonalité** entre certains facteurs, mais **perte d'information**, sachant que la nature de cette perte sera parfaitement connue. Dans ce chapitre on considère le fractionnement du plan complet 2^p qui mène à la construction d'un **plan factoriel fractionnaire à deux niveaux par facteur**, plan que l'on notera plan 2^{p-k} . Cette notation est basée sur le principe de construction du plan pour p facteurs, qui s'appuie sur $p - k$ facteurs, dits de **base** ou d'**intérêt**, et k facteurs dits **complémentaires** (on dit aussi facteurs ajoutés). La section suivante explicite complètement ce principe.

3.2 Principe de construction des plans fractionnaires

Le principe du fractionnement du plan complet est de faire une partition de l'ensemble des expériences en fractions (appelées aussi plans fractionnaires) toutes de **même taille**, telle que les deux propriétés fondatrices suivantes soient respectées dans chacune des fractions construites :

1. Les k facteurs de complément prennent les mêmes niveaux que certaines interactions des $p - k$ facteurs de base.
2. Aucun facteur ne prend simultanément les mêmes niveaux qu'un autre.

Bien entendu, à première vue ceci peut sembler très troublant puisque l'on va créer intentionnellement une structure de **concomitance** – on utilise aussi les termes de **confusion**, et en anglais les termes "**aliasing**" ou "**confounding**" – c'est-à-dire que les effets correspondant aux facteurs confondus avec des interactions ne seront plus estimables indépendamment de ces interactions. Remarquons que l'on ne doit pas dire corrélation puisque les facteurs ne sont pas des variables aléatoires mais sont contrôlés.

D'un point de vue général, si des facteurs sont considérés moins importants que d'autres pour l'expérimentateur, ceux que l'on appelle ici complémentaires, il est alors assez naturel de supposer que les interactions entre ceux-ci, seront *a fortiori* encore moins dignes d'intérêt. Ainsi on cherchera toujours, pour construire la partition des fractions, à confondre les interactions d'ordre le plus élevé possible avec les facteurs jugés importants (les facteurs de base). Toutefois, il faut garder à l'esprit que ce principe ne garantit jamais de ne pas se tromper : des interactions entre facteurs complémentaires peuvent parfois être plus significatives que certains facteurs de base. L'intérêt du type de fractionnement que nous allons expliciter tout au long de ce chapitre est justement de toujours pouvoir compléter une ou plusieurs fractions, ayant déjà conduit à des plans d'expérimentation, par d'autres fractions particulières pour lever l'ambiguïté de la confusion consubstantielle à la première fraction utilisée.

3.3 Fractionnement du plan 2^3

3.3.1 Les fractions 2^{3-1}

Si on examine la matrice de modèle X de ce plan donnée au tableau 2.3, on observe pour les quatre expériences 2, 3, 5 et 8 que **le facteur X_3 prend les mêmes niveaux que l'interaction X_1X_2** . Pour les quatre expériences restantes 1, 4, 6, et 7 le facteur X_3 prend les niveaux opposés de ceux de l'interaction X_1X_2 . Chacun de ces groupes de quatre expériences constitue une fraction (ou un plan fractionnaire, noté 2^{3-1}). Le facteur X_3 joue le rôle de facteur de complément puisqu'on accepte de le confondre avec une interaction. Le signe \leftrightarrow signifie que les termes de part et d'autre vont prendre les mêmes niveaux simultanément. On donne les fractions I et II ainsi formées au tableau 3.1.

Fraction I				Fraction II			
$X_3 \leftrightarrow X_1X_2$				$X_3 \leftrightarrow -X_1X_2$			
<i>n°or</i>	X_1	X_2	X_3	<i>n°or</i>	X_1	X_2	X_3
2	-1	-1	+1	1	-1	-1	-1
3	-1	+1	-1	4	-1	+1	+1
5	+1	-1	-1	6	+1	-1	+1
8	+1	+1	+1	7	+1	+1	-1

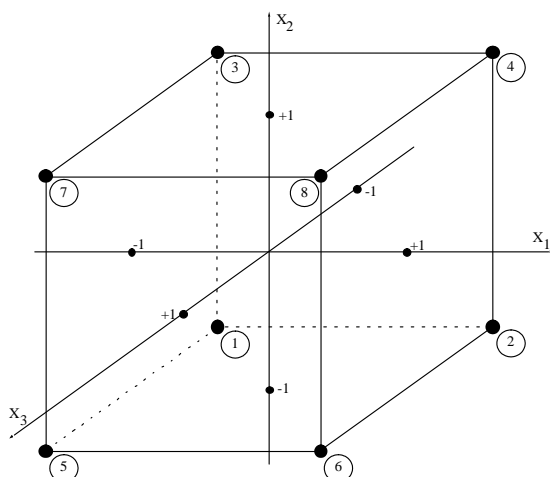


FIG. 3.1 – Cube représentatif du domaine expérimental du plan complet 2^3 .

Tableau 3.1. Les deux fractions du plan 2^3 . Les numéros *n°or* correspondent aux numéros originels du tableau 2.3.

On peut mettre en évidence l'équité du partage des huit expériences sur les deux fractions avec un point de vue géométrique : les quatre expériences de chaque fraction sont aux sommets respectifs de deux tétraèdres parfaitement équivalents (typiquement de même volume) positionnés sur le cube $[-1, +1]^3$ comme il apparaît clairement sur les figure 3.1, 3.2 et 3.3.

3.3.2 Conséquences sur le modèle

Le modèle postulé associé à la fraction I devrait s'écrire :

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta'_3 (X_3 \text{ "ou" } X_1 X_2) + \varepsilon \quad (3.2)$$

avec le "ou" qui est un "ou" inclusif utilisé provisoirement dans cette phase pédagogique. On ne pourra donc pas attribuer sans ambiguïté l'effet β'_3 à X_3 ou à $X_1 X_2$, la variable X_3 et l'interaction $X_1 X_2$ ayant varié de façon concomitante dans la fraction I.

De façon similaire le modèle postulé associé à la fraction II devrait s'écrire :

$$y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta'_3 (X_3 \text{ "ou" } - X_1 X_2) + \varepsilon \quad (3.3)$$

En réalité, les conséquences sont encore plus importantes comme on le verra un peu plus loin, mais définissons d'abord la notion de générateur de fraction.

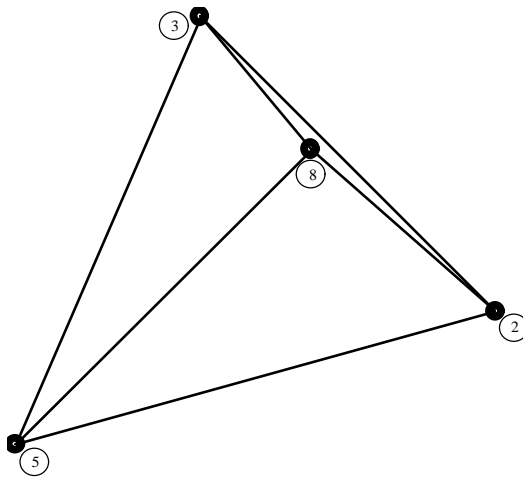


FIG. 3.2 – Tétraèdre inscrit dans le cube de la figure 3.1, représentatif de la fraction 2^{3-1} générée par l'équation symbolique $x_3 \leftrightarrow x_1x_2$.

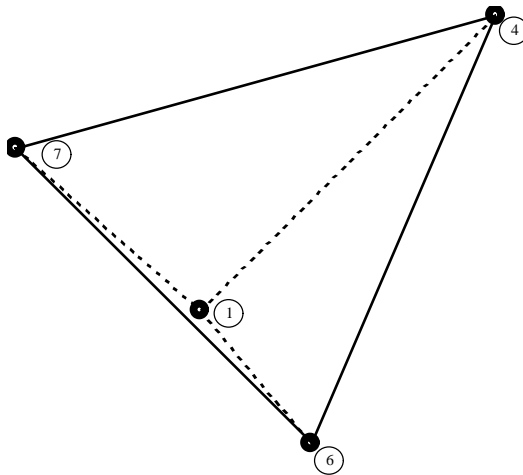


FIG. 3.3 – Tétraèdre inscrit dans le cube de la figure 3.1, représentatif de la fraction 2^{3-1} générée par l'équation symbolique $x_3 \leftrightarrow -x_1x_2$.

3.3.3 Générateur de fraction du plan 2^3

On appelle une équation du type $X_3 \leftrightarrow X_1X_2$ une équation de concomitance génératrice. A chacun de ses membres est associé un vecteur constitué de -1 et de $+1$. Elle signifie que les vecteurs des deux membres sont strictement identiques. Si on multiplie terme à terme chacun des deux membres par un même troisième vecteur on pourra faire apparaître de nouvelles équations de concomitance. Ainsi si on pré- ou post-multiplie (terme à terme, opération symbolisée par \bullet) l'équation $X_3 \leftrightarrow X_1X_2$ par le vecteur X_3 on peut écrire :

$$X_3 \bullet X_3 \leftrightarrow X_1X_2 \bullet X_3 \iff \mathbf{1} \leftrightarrow X_1X_2X_3 \quad (3.4)$$

où, en d'autres termes, le vecteur de uns, noté $\mathbf{1}$, est identique au vecteur associé à l'interaction triple. La relation $\mathbf{1} \leftrightarrow X_1X_2X_3$ est appelée un **générateur** de fraction parce qu'il permet de générer des fractions comme on l'illustrera plus loin. Si on itère la procédure de pré-multiplication sur le générateur on obtient toutes les équations de concomitance possibles pour ce fractionnement du plan complet en deux fractions I et II :

$$X_2 \bullet \mathbf{1} \leftrightarrow X_2 \bullet X_1X_2X_3 \iff X_2 \leftrightarrow X_1X_3 \quad (3.5)$$

$$X_3 \bullet \mathbf{1} \leftrightarrow X_3 \bullet X_1X_2X_3 \iff X_3 \leftrightarrow X_1X_2 \quad (3.6)$$

$$X_1 \bullet \mathbf{1} \leftrightarrow X_1 \bullet X_1X_2X_3 \iff X_1 \leftrightarrow X_2X_3 \quad (3.7)$$

La matrice de modèle correspondant à la fraction I est donnée au tableau 3.2 :

$n^{\circ}or$	n°	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1X_2X_3$
2	1	1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	1
3	2	1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	1
5	3	1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	1
8	4	1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	1

Tableau 3.2. Matrice de modèle de la fraction I.

Finalement, les trois facteurs X_1 , X_2 , X_3 ont un statut de facteurs de complément puisque tous sont concomitants à des interactions comme le montrent les équations (3.5)-(3.7) : on ne pourra pas estimer leurs effets propres. Donc le modèle, pour la fraction I devrait s'écrire non pas comme (3.2) mais plutôt comme :

$$y = \beta'_0(\mathbf{1} \text{ "ou" } X_1X_2X_3) + \beta'_1(x_1 \text{ "ou" } X_2X_3) + \beta'_2(X_2 \text{ "ou" } X_1X_3) + \beta'_3(X_3 \text{ "ou" } X_1X_2) \quad (3.8)$$

L'ambiguïté s'accroît ! Les effets des deux termes de part et d'autre du "ou" ne seront pas estimables indépendamment l'un de l'autre.

Pour la fraction II le générateur est $\mathbf{1} \leftrightarrow -X_1X_2X_3$ et l'ensemble des relations de concomitance qui s'en déduit est :

$$X_2 \bullet \mathbf{1} \leftrightarrow X_2 \bullet -X_1X_2X_3 \iff X_2 \leftrightarrow -X_1X_3 \quad (3.9)$$

$$X_3 \bullet \mathbf{1} \leftrightarrow X_3 \bullet -X_1X_2X_3 \iff X_3 \leftrightarrow -X_1X_2 \quad (3.10)$$

$$X_1 \bullet \mathbf{1} \leftrightarrow X_1 \bullet -X_1X_2X_3 \iff X_1 \leftrightarrow -X_2X_3 \quad (3.11)$$

et la matrice de modèle correspondant à la fraction II est donnée au tableau 3.3

$n^{\circ}or$	n°	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1X_2X_3$
1	1	1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1
4	2	1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
6	3	1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
7	4	1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1

Tableau 3.3. Matrice de modèle de la fraction II.

Les fractions I et II sont dites de résolution III, ce qui signifie que les effets principaux des facteurs ne sont pas estimables indépendamment des interactions. La notion de résolution sera développée en section 3.5.

Conventionnellement, on appelle fraction principale une fraction définie par un jeu de générateurs (ici le jeu se réduit à un seul générateur) tous signés positivement. Ici la fraction I, définie par $X_3 \leftrightarrow X_1X_2$ est une fraction principale. On nommera fraction II la fraction complémentaire définie par $X_3 \leftrightarrow -X_1X_2$.

Le modèle associé s'écrit :

$$y = \beta_0''(\mathbf{1} \text{ "ou"} - X_1X_2X_3) + \beta_1''(X_1 \text{ "ou"} - X_2X_3) + \beta_2''(X_2 \text{ "ou"} - X_1X_3) + \beta_3''(X_3 \text{ "ou"} - X_1X_2) \quad (3.12)$$

Détaillons maintenant les conséquences de cette confusion sur l'estimabilité des effets.

3.3.4 Conséquences sur les estimations des effets

Si on considère le modèle (3.8) les estimations des effets, dits globaux, s'écrivent :

$$\begin{aligned} \hat{\beta}'_0 &= \widehat{\beta_0 + \beta_{123}} \\ \hat{\beta}'_1 &= \widehat{\beta_1 + \beta_{23}} \\ \hat{\beta}'_2 &= \widehat{\beta_2 + \beta_{13}} \\ \hat{\beta}'_3 &= \widehat{\beta_3 + \beta_{12}} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Le signe + provient du fait que les facteurs associés aux effets concernés prennent le même signe simultanément comme on peut le voir au tableau 3.2 : par exemple X_1 et X_2X_3 prennent les mêmes signes en même temps.

Si on considère maintenant le modèle (3.12) les estimations des autres effets globaux s'écrivent :

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_0'' &= \widehat{\beta_0 - \beta_{123}} \\ \hat{\beta}_1'' &= \widehat{\beta_1 - \beta_{23}} \\ \hat{\beta}_2'' &= \widehat{\beta_2 - \beta_{13}} \\ \hat{\beta}_3'' &= \widehat{\beta_3 - \beta_{12}}\end{aligned}\tag{3.14}$$

Le signe $-$ provient du fait que les facteurs associés aux effets concernés prennent le signe contraire simultanément comme on peut le voir au tableau 3.3 : par exemple X_1 et X_2X_3 prennent des signes contraires en même temps.

Les huit fonctions (des résultats y_i) $\beta'_0, \dots, \beta'_3, \beta''_0, \dots, \beta''_3$ s'appellent des fonctions estimables, tandis que les huit fonctions $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{123}$ ne sont pas estimables.

Si un plan d'expérimentation est conduit à partir de la fraction I ou II on ne pourra donc pas, en toute rigueur, attribuer les estimations des fonctions estimables $\hat{\beta}'_0, \dots, \hat{\beta}'_3, \hat{\beta}''_0, \dots, \hat{\beta}''_3$ à un effet principal ou une interaction. Cependant, si une connaissance antérieure sur le phénomène est disponible il sera possible dans certains cas de faire cette attribution : par exemple pour des raisons d'impossibilité physique telle ou telle interaction, ou toutes, ne pourront pas exister. Dans ces conditions on aura étudié 3 facteurs avec 4 expériences seulement. Si le doute persiste malgré tout après la réalisation effective de la fraction I, un second plan d'expérimentation sera réalisé à partir de la fraction II, et alors en réunissant les résultats issus des deux fractions, on retrouvera les estimations des effets originels comme suit :

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_0 &= \frac{\widehat{\beta'_0 + \beta''_0}}{2} \\ \hat{\beta}_1 &= \frac{\widehat{\beta'_1 + \beta''_1}}{2}; \hat{\beta}_2 = \frac{\widehat{\beta'_2 + \beta''_2}}{2}; \hat{\beta}_3 = \frac{\widehat{\beta'_3 + \beta''_3}}{2} \\ \hat{\beta}_{12} &= \frac{\widehat{\beta'_3 - \beta''_3}}{2}; \hat{\beta}_{13} = \frac{\widehat{\beta'_2 - \beta''_2}}{2}; \hat{\beta}_{23} = \frac{\widehat{\beta'_1 - \beta''_1}}{2}; \hat{\beta}_{123} = \frac{\widehat{\beta'_0 - \beta''_0}}{2}\end{aligned}\tag{3.15}$$

Bien sûr pour réunir les deux jeux d'estimations il faut supposer que les expérimentations ont été menées dans les mêmes conditions et qu'aucun effet parasite n'est venu perturbé la réalisation de la seconde fraction. Si tel n'est pas le cas on dit qu'il y a un effet "bloc" et on teste la significativité éventuelle de cet effet bloc en comparant les moyennes des résultats des deux fractions. Si cet effet s'avère significatif il faudra en tenir compte pour l'analyse des résultats (voir les chapitres 6 et 7 pour un développement de cette notion importante de bloc).

Remarque : Par la suite, par souci de simplifier les notations et pour utiliser les notations en vigueur dans les autres ouvrages, dans les équations de concomitance, on remplacera le signe " \leftrightarrow " par le signe "=", on supprimera le symbole " \bullet ", et on supprimera la lettre X .

3.4 Fractionnement du plan 2^4

3.4.1 Les fractions 2^{4-1}

En appliquant le principe évoqué plus haut on peut chercher à rendre concomitantes les effets principaux et les interactions d'ordre le plus élevé à savoir les interactions triples. Par exemple on écrit, en allégeant les notations, l'équation de concomitance génératrice :

$$4 = 123 \quad (3.16)$$

de laquelle on déduit le générateur :

$$\mathbf{1} = 1234 \quad (3.17)$$

qui permet de générer les autres équations de concomitance circulairement :

$$\mathbf{31} = 31234 \iff 3 = 124 \quad (3.18)$$

$$\mathbf{21} = 21234 \iff 2 = 134$$

$$\mathbf{11} = 11234 \iff 1 = 234$$

Les facteurs de base apparaissent alors confondus avec des interactions triples. Si on suppose négligeables les interactions triples, ce qui est très souvent vérifié dans la pratique, on pourra estimer les effets des facteurs de base malgré cette confusion. On peut continuer à pré-multiplier symboliquement les équations précédentes, on obtient les équations :

$$13 = 1124 \iff 13 = 24 \quad (3.19)$$

$$32 = 3134 \iff 23 = 14$$

$$21 = 2234 \iff 12 = 34$$

qui montrent que, même si on suppose négligeables les effets des interactions triples, on ne peut pas empêcher les confusions entre les effets des interactions doubles. La fraction 2^{4-1} , fraction I, correspondante à ce fractionnement est donnée au tableau 3.4.

n°	X_1	X_2	X_3	X_4
1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	+1	+1
3	-1	+1	-1	+1
4	-1	+1	+1	-1
5	+1	-1	-1	+1
6	+1	-1	+1	-1
7	+1	+1	-1	-1
8	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.4. Fraction I du plan 2^4 construite à partir du générateur $\mathbf{1}=1234$.

On remarque au tableau 3.4 que les 3 premiers facteurs forment un plan complet 2^3 . Si on examine au tableau 3.5 la matrice de modèle correspondante à la fraction I donnée au tableau 3.4, on vérifie bien que X_4 prend les mêmes niveaux que l'interaction triple $X_1X_2X_3$, et de même les interactions doubles varient bien selon les équations de concomitance (3.19).

n°	X_0	X_1	X_2	X_3	X_4	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1X_2X_3$
						= X_3X_4	= X_2X_4	= X_1X_4	= X_4
1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1
2	+1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
4	+1	-1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	-1
5	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1
6	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	-1
7	+1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	-1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.5. Matrice de modèle de la fraction I du plan 2^4 construite à partir du générateur $\mathbf{1}=1234$.

La fraction II est obtenue de façon analogue à la fraction I mais à partir du générateur $1 = -1234$. Les deux fractions I et II sont dites de résolution IV, c'est-à-dire que les effets principaux sont estimables indépendamment des effets des interactions doubles en supposant négligeables toutes les interactions d'ordre supérieur à deux.

3.4.2 Les fractions 2^{4-2}

Peut-on faire des fractions plus petites pour le plan 2^4 ? c'est-à-dire des fractions de taille 4. La réponse est positive, mais elles ne sont pas utilisables en l'état puisque nous avons au minimum 5 effets à estimer (β_0 et les quatre effets globaux).

3.5 Fractionnement du plan 2^5

3.5.1 Les fractions 2^{5-1}

Puisque l'on fractionne un plan complet en fractions de taille égale, on peut penser fractionner le plan complet 2^5 en fractions de taille $16 = 2^{5-1}$, mais aussi en fractions de taille $8 = 2^{5-2}$. Examinons d'abord le fractionnement de premier niveau à savoir la construction de fractions de taille 16.

Si l'on obéit toujours au principe de construction évoqué en section 3.2 on construit les fractions I et II en postulant l'équation de concomitance génératrice :

$$5 = 1234 \tag{3.20}$$

conduisant au générateur :

$$\mathbf{1} = 12345 \quad (3.21)$$

qui lui même conduit aux équations de concomitance suivantes :

$$\begin{aligned} 1 &= 2345 \\ 2 &= 1345 \\ 3 &= 1245 \\ 4 &= 1235 \\ 5 &= 1234 \end{aligned} \quad (3.22)$$

On observe que les effets principaux seront confondus aux effets des interactions quadruples, ce qui représente cependant une confusion peu dérangeante, la probabilité que le phénomène soit influencé par des interactions quadruples entre facteurs étant très faible (aucune publication n'a à notre connaissance fait mention de telles interactions réellement significatives).

Continuons la pré-multiplication circulaire et on obtient aussi les équations de concomitance suivantes :

$$\begin{aligned} 12 &= 345 \\ 13 &= 245 \\ 14 &= 235 \\ 15 &= 234 \\ 23 &= 145 \\ 24 &= 135 \\ 25 &= 134 \\ 34 &= 125 \\ 35 &= 124 \\ 45 &= 123 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Les interactions doubles sont confondues avec les interactions triples. Celles-ci étant rarement significatives, cette confusion est encore peu dérangeante pour l'interprétabilité finale des effets des interactions doubles. La fraction I correspondante est obtenue en écrivant la matrice X du plan 2^4 à laquelle on concatène un vecteur représentant les signes de l'interaction quadruple définie par (3.20). On obtient la fraction II en changeant le signe du générateur (3.21).

Finalement on peut étudier assez correctement (d'un point de vue de la confusion) cinq facteurs, relativement à leurs effets principaux et à leurs dix interactions doubles, avec seulement 16 expériences. Ce type de fraction est très utilisée en pratique. Ces

deux fractions 2^{5-1} sont dites de résolution V, c'est-à-dire que les effets principaux sont estimables indépendamment des interactions doubles, et les interactions doubles sont elles-mêmes estimables indépendamment les unes des autres, à la condition que les interactions d'ordre supérieur à deux soient supposées négligeables.

Au titre d'exemple d'application on trouve dans [19] la mise en oeuvre d'une fraction 2^{5-1} pour étudier la stabilité d'un composant de test immunologique. Les cinq facteurs sont le pH, et la nature de quatre additifs dont les deux niveaux -1 et $+1$ de ces facteurs représentent l'absence ou la présence de l'additif concerné.

3.5.2 Les fractions 2^{5-2}

Envisageons maintenant le fractionnement du 2^5 en quatre fractions de taille huit. Posons les équations de concomitance génératrices suivantes :

$$\begin{aligned} 5 &= 123 \\ 4 &= 23 \end{aligned} \tag{3.24}$$

qui conduisent d'abord aux deux générateurs :

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= 1235 \\ \mathbf{1} &= 234 \end{aligned} \tag{3.25}$$

qui donnent en les combinant eux-mêmes le troisième générateur :

$$\mathbf{1} = 145 \tag{3.26}$$

On écrira :

$$I_1 = 1235 ; I_2 = 234 ; I_3 = 145 \tag{3.27}$$

En fait on montre que **pour k variables de complément et un jeu d'équations de concomitance de base (posées a priori) il existe $2^k - 1$ générateurs**, soit ici $2^2 - 1 = 3$ générateurs.

Pour trouver toutes les concomitances utilisons la méthode suivante :

1. on construit un tableau dont le nombre de lignes est égal à la taille de la fraction souhaitée, ici huit,
2. on écrit dans la première colonne les termes correspondant au plan complet $2^3 = 8$,
3. on écrit dans les autres colonnes les intitulés des 3 générateurs.
4. on remplit les cases du tableau avec le résultat du produit symbolique de la ligne et la colonne correspondante.

Le tableau 3.6 illustre cette méthode.

X/G	$I_1= 1235$	$I_2= 234$	$I_3= 145$
1	= 235	= 1234	= 45
2	= 135	= 34	= 1245
3	= 125	= 24	= 1345
12	= 35	= 134	= 245
13	= 25	= 124	= 345
23	= 15	= 4	= 12345
123	= 5	= 14	= 2345

Tableau 3.6. Tableau de toutes les équations de concomitance correspondant aux 3 générateurs (3.27).

On observe que les effets principaux ne sont pas confondus entre eux, mais sont confondus avec les interactions doubles et plus, ainsi :

- X_1 est confondu avec l'interaction X_4X_5 ,
- X_2 est confondu avec l'interaction X_3X_4 ,
- X_3 est confondu avec l'interaction X_2X_4 ,
- X_4 est confondu avec l'interaction X_2X_3 , et aussi avec l'interaction X_1X_5 ,
- X_5 est confondu avec l'interaction X_1X_4 .

La fraction correspondante est donnée au tableau 3.7.

n°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
1	-1	-1	-1	+1	-1
2	-1	-1	+1	-1	+1
3	-1	+1	-1	-1	+1
4	-1	+1	+1	+1	-1
5	+1	-1	-1	+1	+1
6	+1	-1	+1	-1	-1
7	+1	+1	-1	-1	-1
8	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.7. Fraction de taille $2^{5-2} = 8$ du 2^5 correspondant aux générateurs (3.27).

Reprenons maintenant les équations de concomitance précédentes mais en changeant les signes ; on obtient les équations

$$\begin{aligned} 5 &= -123 \\ 4 &= -23 \end{aligned} \tag{3.28}$$

qui conduisent d'abord aux deux générateurs $I_1^{(-)}$ et $I_2^{(-)}$ qui redonnent en les combinant eux-mêmes le générateur I_3 :

$$I_1^{(-)} = -1235 ; I_2^{(-)} = -234 ; I_3 = 145 \tag{3.29}$$

Le tableau 3.6 devient le tableau 3.8

X/G	$I_1 = -1235$	$I_2 = -234$	$I_3 = 145$
1	-235	-1234	45
2	-135	-34	1245
3	-125	-24	1345
12	-35	-134	245
13	-25	-124	345
23	-15	-4	12345
123	-5	-14	2345

Tableau 3.8. Tableau de toutes les équations de concomitance correspondant aux 3 générateurs (3.29).

Ainsi à partir du tableau 3.8 :

- X_1 est confondu avec l'interaction X_4X_5 ,
- X_2 est confondu avec l'interaction $-X_3X_4$,
- X_3 est confondu avec l'interaction $-X_2X_4$,
- X_4 est confondu avec l'interaction $-X_2X_3$, et aussi avec l'interaction X_1X_5 ,
- X_5 est confondu avec l'interaction X_1X_4 .

Au total, en jouant sur le signe des équations de concomitance on forme 4 jeux possibles d'équations de concomitance.

Mais si maintenant on pose le système des deux équations de concomitance génératrices suivantes :

$$\begin{aligned} 4 &= 12 \\ 5 &= 13 \end{aligned} \tag{3.30}$$

on aboutit au système des 3 générateurs :

$$I_1 = 124 ; I_2 = 135 ; I_3 = 2345 \tag{3.31}$$

qui conduira bien sûr à quatre nouvelles fractions de taille huit, différentes des quatre fractions générées plus haut. En utilisant la méthode exposée plus haut on obtient le tableau 3.9.

X/G	$I_1 = 124$	$I_2 = 135$	$I_3 = 2345$
1	24	35	12345
2	14	1235	345
3	1234	15	245
12	4	235	1345
13	234	5	1245
23	134	125	45
123	34	25	145

Tableau 3.9. Tableau de toutes les équations de concomitance correspondant aux 3 générateurs (3.31).

Toutes les fractions 2^{5-2} de taille huit sont de résolution III.

3.6 Notion de résolution

On a vu que la notion de résolution est utile pour résumer la structure de confusion d'une fraction quelconque ; on a rencontré les résolutions III, IV, et V. Pour des fractions à deux niveaux, on donne ci-dessous une définition plus générale.

3.6.1 Définition

Cas 1 : Résolution R pour R pair

Soit R entier pair ≥ 4 et $S = R/2$. Une fraction est dite de résolution R si, sous l'hypothèse que les interactions de $S + 1$ facteurs ou plus sont nulles (négligeables), elle permet d'estimer tous les effets principaux et interactions comportant au maximum $S - 1$ facteurs.

Rq : dans une telle fraction, les interactions de S facteurs ne sont donc pas obligatoirement estimables, mais leur présence dans le modèle n'empêche pas l'estimation des effets impliquant moins de $S - 1$ facteurs.

Cas 2 : Résolution R pour R impair

Soit R entier impair ≥ 3 et $S = (R - 1)/2$. Une fraction est dite de résolution R si, sous l'hypothèse que les interactions de $S + 1$ facteurs ou plus sont nulles (négligeables), elle permet d'estimer tous les effets principaux et interactions comportant au maximum S facteurs.

3.6.2 Deux fractions de même taille et de résolution différente

Pour illustrer la difficulté du choix des équations de concomitance génératrices pour construire une fraction de résolution donnée on peut montrer le cas de huit facteurs. On souhaite une fraction de taille 16, soit 2^{8-4} , et on suppose les interactions d'ordre trois et plus négligeables.

Choix 1

On pose les équations de concomitance génératrices suivantes :

$$\begin{aligned} 5 &= 1234 \\ 6 &= 234 \\ 7 &= 134 \\ 8 &= 34 \end{aligned} \tag{3.32}$$

qui conduisent aux équations de concomitances suivantes :

$$\begin{aligned}
1 &= 56 = 78 \\
2 &= 57 = 68 \\
3 &= 48 \\
4 &= 38 \\
5 &= 16 = 27 \\
6 &= 15 = 28 \\
7 &= 18 = 25 \\
8 &= 17 = 26 = 34
\end{aligned}
\tag{3.33}$$

et :

$$\begin{aligned}
12 &= 58 = 67 \\
13 &= 47 \\
14 &= 37 \\
23 &= 46 \\
24 &= 36 \\
35 &= \emptyset \\
45 &= \emptyset
\end{aligned}
\tag{3.34}$$

où \emptyset désigne l'ensemble vide. On observe que les 28 interactions doubles apparaissent toutes. La fraction résultante (tableau 3.10) sera bien de résolution III puisque les effets principaux sont confondus à des interactions doubles dans les équations précédentes.

n°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8
1	-1	-1	-1	-1	+1	-1	-1	+1
2	-1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1
3	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	-1
4	-1	-1	+1	+1	+1	-1	-1	+1
5	-1	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1
6	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1
7	-1	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
8	-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1	+1
9	+1	-1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
10	+1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	-1
11	+1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	-1
12	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1
13	+1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	+1
14	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1
15	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1
16	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.10. Fraction 2^{8-4} de résolution III. Les 4 colonnes x_1 à x_4 correspondent à un plan complet 2^4 .

Choix 2

On pose les équations de concomitance génératrices suivantes :

$$\begin{aligned}
 5 &= 234 & (3.35) \\
 6 &= 134 \\
 7 &= 124 \\
 8 &= 123
 \end{aligned}$$

qui conduisent à aux équations de concomitances suivantes :

$$\begin{aligned}
 1 &= \emptyset & (3.36) \\
 2 &= \emptyset \\
 3 &= \emptyset \\
 4 &= \emptyset \\
 5 &= \emptyset \\
 6 &= \emptyset \\
 7 &= \emptyset \\
 8 &= \emptyset
 \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
 12 &= 38 = 47 = 56 & (3.37) \\
 13 &= 28 = 46 = 57 \\
 14 &= 27 = 36 = 58 \\
 15 &= 26 = 37 = 48 \\
 16 &= 25 = 34 = 78 \\
 17 &= 24 = 35 = 68 \\
 18 &= 23 = 45 = 67
 \end{aligned}$$

La fraction résultante (tableau 3.11) sera bien de résolution IV puisque les effets principaux ne sont pas confondus à des interactions doubles dans les équations précédentes. Les interactions seront estimables par "paquets", tous de même taille. C'est une fraction dite **régulière**.

n°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1
3	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1
4	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1
5	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1
6	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
7	-1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1
8	-1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1
9	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1
10	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
11	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
12	+1	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1
13	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
14	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1
15	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1
16	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.11. Fraction 2^{8-4} de résolution IV.

On comprend la nécessité de disposer d'algorithmes efficaces pour construire une fraction de résolution donnée, et de structure donnée. On verra à la section 3.7 comment la procédure FACTEX du logiciel SAS/QC permet de construire facilement une fraction de résolution donnée.

3.7 La fraction 2^{7-4} et sa fold-over

3.7.1 Construction

Pour certaines fractions de résolution donnée, on peut construire une seconde fraction qu'on appelle sa "fold-over" et qui, jointe à la première, forme une fraction d'une taille double et de résolution supérieure. Avant de l'illustrer au paragraphe suivant avec un exemple réel ayant fait l'objet d'une publication, explicitons ce cas avec un problème à sept facteurs pour lequel on cherche une fraction de huit expériences. Les trois premiers facteurs sont les facteurs de base et les quatre suivants sont les facteurs de complément.

Les équations de concomitance génératrices suivantes :

$$\begin{aligned}
 7 &= 123 & (3.38) \\
 4 &= 12 \\
 5 &= 23 \\
 6 &= 13
 \end{aligned}$$

conduisent aux 4 générateurs :

$$\begin{aligned}
I_1 &= 1237 \\
I_2 &= 124 \\
I_3 &= 235 \\
I_4 &= 136
\end{aligned} \tag{3.39}$$

qui, combinés deux à deux, trois à trois, et tous les quatre, conduisent aux 11 autres générateurs :

$$\begin{aligned}
\mathbf{1} &= 456 = 1256 = 347 = 1234567 = 157 \\
&= 2457 = 267 = 1467 = 1345 = 3567 = 2346
\end{aligned} \tag{3.40}$$

On a bien obtenu au total les $2^4 - 1 = 15$ générateurs prévus. Selon la méthode proposée au §3.4.2 on peut écrire le tableau 3.12 de toutes les équations de concomitance.

X/G	$I_1=124$	$I_2=235$	$I_3=136$	$I_4=456$	$I_5=347$	$I_6=157$	$I_7=267$...
1	24	1235	36	1456	1347	57	1267	...
2	14	35	1236	2456	2347	1257	67	...
3	1234	25	16	3456	47	1357	2367	...
12	4	135	236	12456	12347	257	167	...
13	234	125	6	13456	147	357	12367	...
23	134	5	126	23456	247	12357	367	...
123	34	15	26	123456	1247	2357	1367	...

Tableau 3.12. Extrait des les équations de concomitance correspondant aux 15 générateurs (3.39) et (3.31).

On observe dans le tableau 3.12 que chaque effet principal est confondu à un groupe de 3 interactions, et les interactions doubles se retrouvent par paquets de 3. En négligeant les interactions triples on pourra donc estimer les effets globaux suivants :

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \beta_1 + (\beta_{24} + \beta_{36} + \beta_{57}) \\
\gamma_2 &= \beta_2 + (\beta_{14} + \beta_{35} + \beta_{67}) \\
\gamma_3 &= \beta_3 + (\beta_{25} + \beta_{16} + \beta_{47}) \\
\gamma_4 &= \beta_4 + (\beta_{12} + \beta_{56} + \beta_{37}) \\
\gamma_5 &= \beta_5 + (\beta_{23} + \beta_{46} + \beta_{17}) \\
\gamma_6 &= \beta_6 + (\beta_{13} + \beta_{45} + \beta_{27}) \\
\gamma_7 &= \beta_7 + (\beta_{34} + \beta_{15} + \beta_{26})
\end{aligned} \tag{3.41}$$

à partir de la fraction de résolution III du tableau 3.13 obtenue avec le système des 15 générateurs donnés plus haut :

n°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7
1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1
2	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
3	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1
4	-1	+1	+1	-1	+1	-1	-1
5	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1
6	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1
7	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.13. Fraction I de taille $2_{III}^{7-4} = 8$ du 2^7 correspondant aux générateurs (3.39) et (3.40).

En changeant les signes des lignes de la fraction I, donnée au tableau 3.13, on obtient la fraction II de résolution III apparaissant au tableau 3.14, fraction dite "dépliée" ("fold over"). Au tableau 3.14, selon l'usage, les lignes (changées de signe) sont placées dans un ordre inversé par rapport au tableau 3.13. Ainsi la ligne 1 du tableau 3.14 est la ligne 8 (changée de signes) du tableau 3.13, et ainsi de suite. Cette fraction II correspond aux générateurs :

$$\begin{aligned}
I_1 &= 1237 & (3.42) \\
I_2 &= -124 \\
I_3 &= -235 \\
I_4 &= -136
\end{aligned}$$

n°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	+1	-1	+1	+1	+1
3	-1	+1	-1	+1	+1	-1	+1
4	-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1
5	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1
6	+1	-1	+1	+1	+1	-1	-1
7	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1
8	+1	+1	+1	-1	-1	-1	+1

Tableau 3.14. Fraction II de taille $2_{III}^{7-4} = 8$ du 2^7 correspondant aux 15 générateurs : (3.42) et ceux qui découlent de ceux-ci.

La fraction II permet l'estimation des effets globaux suivants :

$$\begin{aligned}
 \gamma'_1 &= \beta_1 - (\beta_{24} + \beta_{36} + \beta_{57}) \\
 \gamma'_2 &= \beta_2 - (\beta_{14} + \beta_{35} + \beta_{67}) \\
 \gamma'_3 &= \beta_3 - (\beta_{25} + \beta_{16} + \beta_{47}) \\
 \gamma'_4 &= \beta_4 - (\beta_{12} + \beta_{56} + \beta_{37}) \\
 \gamma'_5 &= \beta_5 - (\beta_{23} + \beta_{46} + \beta_{17}) \\
 \gamma'_6 &= \beta_6 - (\beta_{13} + \beta_{45} + \beta_{27}) \\
 \gamma'_7 &= \beta_7 - (\beta_{34} + \beta_{15} + \beta_{26})
 \end{aligned}
 \tag{3.43}$$

Si la réunion des deux fractions est possible (absence d'effet "bloc", voir le commentaire à la fin du paragraphe 3.3), elle conduit à une fraction de taille 16 de résolution IV. L'estimation des β_j sera accessible par demi-somme des γ_j et des γ'_j , et l'estimation des groupes d'interactions doubles sera accessible par demi-différence des γ_j et des γ'_j . Appliquons maintenant cette stratégie à un exemple réel.

3.7.2 Un exemple d'application de la fraction 2^{7-4} et de sa fold-over

Cet exemple d'application relève de la chimie et plus particulièrement de l'activation du n-pentane par des acides perfluorosulfoniques, application qui a fait l'objet de deux publications. Nous évoquerons ici seulement la première (Bruner et al. 1979, [11]) qui a traité à la recherche des facteurs réactionnels influents parmi sept facteurs considérés pour l'étude. Compte tenu du danger relatif à ces expériences, de leur délicate mise en oeuvre et de leur coût, les chercheurs ont envisagé dans un premier temps un plan factoriel fractionnaire de taille minimale, à savoir huit expériences pour sept facteurs.

Les sept facteurs considérés :

Ce sont les six facteurs continus X_1 à X_6 et le facteur discret X_7 :

- X_1 : le rapport molaire $\text{SbF}_5/\text{R}_F\text{SO}_3\text{H}$, plage de variation : 20 à 150, unité : (mole/mole) \times 100,
- X_2 : le rapport molaire $\text{SbF}_5/\text{n-C}_5$, plage de variation : 1.5 à 3, unité : (mole/mole) \times 100,
- X_3 : la pression totale dans le réacteur, plage de variation : 5 à 10, unité : bar,
- X_4 : la pression d'hydrogène, unité : plage de variation : 1 à 4, unité : bar,
- X_5 : la température de réaction, plage de variation : 25 à 30, unité : $^\circ\text{C}$,
- X_6 : la vitesse d'agitation dans le réacteur, plage de variation : 350 à 500, unité : tours/minute,
- X_7 : la nature du groupement perfluoré R_F de l'acide sulfonique, les 2 modalités sont
 $\text{R}_F = \text{CF}_3$ ou $\text{R}_F = \text{C}_4\text{F}_9$.

Les réponses analysées

Quatre ont été étudiées par les auteurs, on ne s'intéressera ici qu'à une seule : Y_1 , la constante de vitesse initiale.

Résultats obtenus avec la fraction I

Les huit résultats obtenus pour la réponse Y_1 après réalisation au laboratoire des expériences décrites par la fraction I du tableau 3.13 sont :

$$\begin{aligned} y_1 &= 0.0232 ; y_2 = 0.4500 ; y_3 = 0.0320 ; y_4 = 0.1900 \\ y_5 &= 0.0090 ; y_6 = 0.2030 ; y_7 = 0.0530 ; y_8 = 0.7630 \end{aligned}$$

Après calcul avec la méthode de régression, comme indiqué au chapitre précédent on obtient les estimations des effets globaux (fonctions estimables) :

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_1 &= \frac{1}{8} (-0.0232 - 0.4500 - 0.0320 - 0.1900 + 0.0090 + 0.2030 + 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.0410 \\ \hat{\gamma}_2 &= \frac{1}{8} (-0.0232 - 0.4500 + 0.0320 + 0.1900 - 0.0090 - 0.2030 + 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.0435 \\ \hat{\gamma}_3 &= \frac{1}{8} (-0.0232 + 0.4500 - 0.0320 + 0.1900 - 0.0090 + 0.2030 - 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.1861 \\ \hat{\gamma}_4 &= \frac{1}{8} (+0.0232 + 0.4500 - 0.0320 - 0.1900 - 0.0090 - 0.2030 + 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.1075 \\ \hat{\gamma}_5 &= \frac{1}{8} (+0.0232 - 0.4500 - 0.0320 + 0.1900 + 0.0090 - 0.2030 - 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.0305 \\ \hat{\gamma}_6 &= \frac{1}{8} (+0.0232 - 0.4500 + 0.0320 - 0.1900 - 0.0090 + 0.2030 - 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.0390 \\ \hat{\gamma}_7 &= \frac{1}{8} (-0.0232 + 0.4500 + 0.0320 - 0.1900 + 0.0090 - 0.2030 - 0.0530 + 0.7630) \\ &= 0.0990 \\ \hat{\gamma}_0 &= \text{la moyenne arithmétique des huit résultats} = 0.2154 \end{aligned}$$

Au vu des estimations $\hat{\gamma}_j$ précédentes, il apparaît trois effets globaux importants par rapport à la moyenne de 0.2154, soit : $\hat{\gamma}_3$, $\hat{\gamma}_4$, $\hat{\gamma}_7$. On rappelle que ces effets globaux estimés traduisent les estimations des sommes d'effets suivants (voir équations 3.25) :

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_3 &= Est[\beta_3 + (\beta_{25} + \beta_{16} + \beta_{47})] \\ \hat{\gamma}_4 &= Est[\beta_4 + (\beta_{12} + \beta_{56} + \beta_{37})] \\ \hat{\gamma}_7 &= Est[\beta_7 + (\beta_{34} + \beta_{15} + \beta_{26})] \end{aligned}$$

Le symbole $Est[.]$ signifie estimation globale du groupe d'interactions à l'intérieur du crochet. Comme il apparaît β_{34} dans $\hat{\gamma}_7$ et que $\hat{\gamma}_3$ et $\hat{\gamma}_4$ semblent importants il est difficile de trancher pour savoir si c'est l'effet de X_7 qui est mesuré par $\hat{\gamma}_7$ ou celui de l'interaction entre X_3 et X_4 . On voit toutefois l'intérêt d'avoir utilisé une fraction de huit expériences seulement qui permet déjà de dégager à elle-seule ces trois effets globaux, et de classer les quatre autres effets globaux (plus faibles).

Résultats obtenus avec la fraction II

Pour lever l'ambiguïté la fraction II, fraction fold-over, donnée au tableau 3.14 a été réalisée au laboratoire. Les résultats obtenus sont :

$$\begin{aligned}y_9 &= 0.4240 ; y_{10} = 0.0260 ; y_{11} = 0.1650 ; y_{12} = 0.0550 \\y_{13} &= 0.3040 ; y_{14} = 0.04010 ; y_{15} = 0.2700 ; y_{16} = 0.0390\end{aligned}$$

Les effets globaux estimés correspondants valent :

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}'_1 &= \frac{1}{8} (-0.4240 - 0.0260 - 0.1650 - 0.0550 + 0.3040 + 0.04010 + 0.2700 + 0.0390) \\&= -0.00211 \\ \hat{\gamma}'_2 &= \frac{1}{8} (-0.4240 - 0.0260 + 0.1650 + 0.0550 - 0.3040 - 0.04010 + 0.2700 + 0.0390) \\&= -0.0333 \\ \hat{\gamma}'_3 &= \frac{1}{8} (-0.4240 + 0.0260 - 0.1650 + 0.0550 - 0.3040 + 0.04010 - 0.2700 + 0.0390) \\&= -0.1254 \\ \hat{\gamma}'_4 &= \frac{1}{8} (-0.4240 - 0.0260 + 0.1650 + 0.0550 + 0.3040 + 0.04010 - 0.2700 - 0.0390) \\&= -0.0244 \\ \hat{\gamma}'_5 &= \frac{1}{8} (-0.4240 + 0.0260 + 0.1650 - 0.0550 - 0.3040 + 0.04010 + 0.2700 - 0.0390) \\&= -0.0401 \\ \hat{\gamma}'_6 &= \frac{1}{8} (-0.4240 + 0.0260 - 0.1650 + 0.0550 + 0.3040 - 0.04010 + 0.2700 - 0.0390) \\&= -0.0016 \\ \hat{\gamma}'_7 &= \frac{1}{8} (-0.4240 + 0.0260 + 0.1650 - 0.0550 + 0.3040 - 0.04010 - 0.2700 + 0.0390) \\&= -0.0319 \\ \hat{\gamma}'_0 &= \text{la moyenne arithmétique des huit résultats} = 0.1654\end{aligned}$$

Par demi-somme on obtient ($\hat{\beta}_0$ est la moyenne arithmétique des 16 résultats) :

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_1 &= 0.0194 \\ \hat{\beta}_2 &= 0.0050 \\ \hat{\beta}_3 &= 0.0303 \\ \hat{\beta}_4 &= 0.0415 \\ \hat{\beta}_5 &= -0.0048 \\ \hat{\beta}_6 &= 0.0187 \\ \hat{\beta}_7 &= 0.0330 \\ \hat{\beta}_0 &= 0.1904\end{aligned}$$

et par demi-différence :

$$\begin{aligned}
 Est(\beta_{24} + \beta_{36} + \beta_{57}) &= 0.0215 \\
 Est(\beta_{14} + \beta_{35} + \beta_{67}) &= 0.0384 \\
 Est(\beta_{25} + \beta_{16} + \beta_{47}) &= 0.1560 \\
 Est(\beta_{12} + \beta_{56} + \beta_{37}) &= 0.0660 \\
 Est(\beta_{23} + \beta_{46} + \beta_{17}) &= 0.0353 \\
 Est(\beta_{13} + \beta_{45} + \beta_{27}) &= 0.0203 \\
 Est(\beta_{34} + \beta_{15} + \beta_{26}) &= 0.0654
 \end{aligned}$$

En conclusion, on peut classer les facteurs influents dans l'ordre décroissant comme suit :

$$X_4 > X_7 > X_3 > X_1 > X_6 > X_2 > X_5$$

et on observe que $Est(\beta_{25} + \beta_{16} + \beta_{47})$ qui vaut 0.1560 contient l'effet de l'interaction X_4X_7 . Les facteurs X_4 et X_7 étant classés comme les deux facteurs les plus influents, on peut faire l'hypothèse que dans 0.1560 une part importante est due à cette interaction. Cette hypothèse a été faite par les chercheurs, qui ont pu la confirmer par un travail complémentaire. Ainsi, pour un problème à 7 facteurs, 16 expériences seulement ont été réalisées au lieu de $2^7 = 128$ expériences, nombre auquel aurait conduit le plan factoriel complet .

3.8 Tableaux récapitulatifs

Malgré l'existence des programmes informatiques, il n'est pas toujours facile d'obtenir toutes les fractions d'un fractionnement d'un plan complet donné. Les tableaux suivants tirés de [5] restent encore très utiles grâce aux équations de concomitances pertinentes qui sont fournies, et permettent à un utilisateur, même novice, de construire des fractions de résolution donnée (p est le nombre de facteurs et R signifie résolution).

Taille de la fraction = 4
$p = 3$
$\pm 3 = 12$
$R = \text{III}$

Tableau 3.15. Caractéristiques de fractions de taille 4.

Taille de la fraction = 8			
$p = 4$	$p = 5$	$p = 6$	$p = 7$
$\pm 4 = 123$	$\pm 4 = 12$ $\pm 5 = 13$	$\pm 4 = 12$ $\pm 5 = 13$ $\pm 6 = 23$	$\pm 4 = 12$ $\pm 5 = 13$ $\pm 6 = 23$ $\pm 7 = 123$
$R = IV$	$R = III$	$R = III$	$R = III$

Tableau 3.16. Caractéristiques de fractions de taille 8.

Taille de la fraction = 16			
$p = 5$	$p = 6$	$p = 7$	$p = 8$
$\pm 5 = 1234$	$\pm 5 = 123$ $\pm 6 = 234$	$\pm 5 = 123$ $\pm 6 = 234$ $\pm 7 = 134$	$\pm 5 = 234$ $\pm 6 = 134$ $\pm 7 = 123$ $\pm 8 = 124$
$R = V$	$R = IV$	$R = IV$	$R = IV$

Tableau 3.17. Caractéristiques de fractions de taille 16.

Taille de la fraction = 16		
$p = 9$	$p = 10$	$p = 11$
$\pm 5 = 123$ $\pm 6 = 234$ $\pm 7 = 134$ $\pm 8 = 124$ $\pm 9 = 1234$	$\pm 5 = 123$ $\pm 6 = 234$ $\pm 7 = 134$ $\pm 8 = 124$ $\pm 9 = 1234$ $\pm \overline{10} = 12$	$\pm 5 = 123$ $\pm 6 = 234$ $\pm 7 = 134$ $\pm 8 = 124$ $\pm 9 = 1234$ $\pm \overline{10} = 12$ $\pm \overline{11} = 13$
$R = III$	$R = III$	$R = III$

Tableau 3.18. Caractéristiques de fractions de taille 16 (suite).

Taille de la fraction = 32		
$N_F = 6$	$N_F = 7$	$N_F = 8$
$\pm 6 = 12345$	$\pm 6 = 1234$ $7\pm = 1245$	$\pm 6 = 123$ $\pm 7 = 124$ $\pm 8 = 2345$
$R = VI$	$R = IV$	$R = IV$

Tableau 3.19. Caractéristiques de fractions de taille 32 pour $N_F = 6$ à 8.

Taille de la fraction = 32		
$p = 9$	$p = 10$	$p = 11$
$\pm 6 = 2345$	$\pm 6 = 1234$	$\pm 6 = 123$
$\pm 7 = 1345$	$\pm 7 = 1235$	$\pm 7 = 234$
$\pm 8 = 1245$	$\pm 8 = 1245$	$\pm 8 = 345$
$\pm 9 = 1235$	$\pm 9 = 1345$	$\pm 9 = 134$
	$\pm \overline{10} = 2345$	$\pm \overline{10} = 145$
		$\pm \overline{11} = 245$
$R = IV$	$R = IV$	$R = IV$

Tableau 3.20. Caractéristiques de fractions de taille 32.

Taille de la fraction = 64				
$p = 7$	$p = 8$	$p = 9$	$p = 10$	$p = 11$
$\pm 7 = 123456$	$\pm 7 = 1234$	$\pm 7 = 1234$	$\pm 7 = 2346$	$\pm 7 = 345$
	$\pm 8 = 1256$	$\pm 8 = 1356$	$\pm 8 = 1346$	$\pm 8 = 1234$
		$\pm 9 = 3456$	$\pm 9 = 1245$	$\pm 9 = 126$
			$\pm \overline{10} = 1235$	$\pm \overline{10} = 2456$
				$\pm \overline{11} = 1456$
$R = VII$	$R = V$	$R = IV$	$R = IV$	$R = IV$

Tableau 3.21. Caractéristiques de fractions de taille 64.

Taille de la fraction = 128			
$p = 8$	$p = 9$	$p = 10$	$p = 11$
$\pm 8 = 1234567$	$\pm 8 = 13467$	$\pm 8 = 1237$	$\pm 8 = 1237$
	$\pm 9 = 23567$	$\pm 9 = 2345$	$\pm 9 = 2345$
		$\pm \overline{10} = 1346$	$\pm \overline{10} = 1346$
			$\pm \overline{11} = 1234567$
$R = VIII$	$R = VI$	$R = V$	$R = V$

Tableau 3.22. Caractéristiques de fractions de taille 128.

3.9 Construction des fractions avec la procédure Factex

On présente dans cette section quelques exemples de construction de fractions avec la procédure Factex du logiciel SAS/QC.

3.9.1 Fraction 2^{5-1} de résolution V

On utilise le programme Factex04 suivant :

```

/***** FACTEX04.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1 x2 x3 x4 x5;
  model resolution=5;

```

```

size design=16 ;
examine aliasing(3) confounding;
output out=resul;

proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

Commentaires

- La commande "model resolution=" permet de choisir la résolution souhaitée.
- L'intérêt de disposer simultanément de la commande "size design=" et de la commande précédente est de simuler plusieurs fractions possibles en jouant sur la résolution et la taille; en effet pour certains nombres de facteurs une fraction d'une taille donnée peut conduire à deux résolutions dont l'une sera beaucoup plus intéressante que l'autre (voir plus loin le cas de 8 facteurs avec Factex06 et Factex07).
- La commande "examine aliasing(3) confounding" permet d'obtenir la structure de concomitance entre tous les effets principaux et interactions jusqu'à l'ordre 3.

On obtient la sortie suivante :

Factor Confounding Rules

x5 = x1*x2*x3*x4 ----> Equation de concomitance generatrice

Aliasing Structure ----> Toutes les equations de concomitance

```

x1
x2
x3
x4
x5
x1*x2 = x3*x4*x5
x1*x3 = x2*x4*x5
x1*x4 = x2*x3*x5
x1*x5 = x2*x3*x4
x2*x3 = x1*x4*x5
x2*x4 = x1*x3*x5
x2*x5 = x1*x3*x4
x3*x4 = x1*x2*x5
x3*x5 = x1*x2*x4
x4*x5 = x1*x2*x3

```

Commentaire : On observe bien que les effets principaux sont libres, et que les interactions doubles aussi, sous l'hypothèse que les interactions triples sont négligeables : la fraction qui suit sera bien de résolution V.

Obs	x1	x2	x3	x4	x5
1	-1	-1	-1	-1	1
2	-1	-1	-1	1	-1
3	-1	-1	1	-1	-1
4	-1	-1	1	1	1
5	-1	1	-1	-1	-1
6	-1	1	-1	1	1
7	-1	1	1	-1	1
8	-1	1	1	1	-1
9	1	-1	-1	-1	-1
10	1	-1	-1	1	1
11	1	-1	1	-1	1
12	1	-1	1	1	-1
13	1	1	-1	-1	1
14	1	1	-1	1	-1
15	1	1	1	-1	-1
16	1	1	1	1	1

3.9.2 Fraction 2^{7-4} de résolution III

On utilise le programme Factex05 suivant :

```

/***** FACTEX05.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1 x2 x3 x7 x5 x6 x4;
  model resolution=3;
  size design=8;
  examine aliasing(3) confounding;
  output out=resul;

proc print data=resul; var x1-x7;
run;
/*****/;

```

Commentaire : Dans ce programme Factex05 les facteurs x_4 et x_7 sont intervertis pour pouvoir retrouver les mêmes équations de concomitance du paragraphe 3.6.3, ils sont ensuite remis dans l'ordre pour l'impression.

Factor Confounding Rules

$$\begin{aligned}x_7 &= x_1*x_2*x_3 \\x_5 &= x_2*x_3 \\x_6 &= x_1*x_3 \\x_4 &= x_1*x_2\end{aligned}$$

Aliasing Structure

$$\begin{aligned}0 &= x_1*x_2*x_4 = x_1*x_3*x_6 = x_1*x_7*x_5 = x_2*x_3*x_5 \\ &= x_2*x_7*x_6 = x_3*x_7*x_4 = x_5*x_6*x_4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_1 &= x_2*x_4 = x_3*x_6 = x_7*x_5 \\ &= x_2*x_3*x_7 = x_2*x_5*x_6 = x_3*x_5*x_4 = x_7*x_6*x_4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_2 &= x_1*x_4 = x_3*x_5 = x_7*x_6 \\ &= x_1*x_3*x_7 = x_1*x_5*x_6 = x_3*x_6*x_4 = x_7*x_5*x_4\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_3 &= x_1*x_6 = x_2*x_5 = x_7*x_4 \\ &= x_1*x_2*x_7 = x_1*x_5*x_4 = x_2*x_6*x_4 = x_7*x_5*x_6\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_7 &= x_1*x_5 = x_2*x_6 = x_3*x_4 \\ &= x_1*x_2*x_3 = x_1*x_6*x_4 = x_2*x_5*x_4 = x_3*x_5*x_6\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_5 &= x_1*x_7 = x_2*x_3 = x_6*x_4 \\ &= x_1*x_2*x_6 = x_1*x_3*x_4 = x_2*x_7*x_4 = x_3*x_7*x_6\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_6 &= x_1*x_3 = x_2*x_7 = x_5*x_4 \\ &= x_1*x_2*x_5 = x_1*x_7*x_4 = x_2*x_3*x_4 = x_3*x_7*x_5\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_4 &= x_1*x_2 = x_3*x_7 = x_5*x_6 \\ &= x_1*x_3*x_5 = x_1*x_7*x_6 = x_2*x_3*x_6 = x_2*x_7*x_5\end{aligned}$$

Commentaires :

- *Le 0 qui apparaît ci-dessus est le symbole utilisé par la procédure FACTEX pour représenter notre vecteur de uns que nous avons noté **1**, il est suivi par la liste des termes d'interactions triples (en général négligeables) confondus avec ce vecteur **1**.*

- Dans les lignes qui suivent cette liste on vérifie que les effets principaux sont tous confondus avec des groupes de trois interactions doubles.
- Lors de l'impression, les facteurs sont remis dans l'ordre et on obtient exactement la fraction I du tableau 3.13.

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
2	-1	-1	1	1	-1	-1	1
3	-1	1	-1	-1	-1	1	1
4	-1	1	1	-1	1	-1	-1
5	1	-1	-1	-1	1	-1	1
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1
7	1	1	-1	1	-1	-1	-1
8	1	1	1	1	1	1	1

3.9.3 Fractions 2^{8-4} de résolutions III et IV

On utilise le programme Factex06 suivant :

```

/***** FACTEX06.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1-x8;
  model resolution=3;
  size design=16;
  examine aliasing(2) confounding;
  output out=resul;

proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

qui conduit à la sortie suivante :

Factor Confounding Rules

```

x5 = x1*x2*x3*x4
x6 = x2*x3*x4

```

$x_7 = x_1 * x_3 * x_4$
 $x_8 = x_3 * x_4$

Aliasing Structure

$x_1 = x_5 * x_6 = x_7 * x_8$
 $x_2 = x_5 * x_7 = x_6 * x_8$
 $x_3 = x_4 * x_8$
 $x_4 = x_3 * x_8$
 $x_5 = x_1 * x_6 = x_2 * x_7$
 $x_6 = x_1 * x_5 = x_2 * x_8$
 $x_7 = x_1 * x_8 = x_2 * x_5$
 $x_8 = x_1 * x_7 = x_2 * x_6 = x_3 * x_4$
 $x_1 * x_2 = x_5 * x_8 = x_6 * x_7$
 $x_1 * x_3 = x_4 * x_7$
 $x_1 * x_4 = x_3 * x_7$
 $x_2 * x_3 = x_4 * x_6$
 $x_2 * x_4 = x_3 * x_6$
 $x_3 * x_5$
 $x_4 * x_5$

Commentaire : La structure de concomitance ci-dessus correspond bien à une résolution III.

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8
1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1
2	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1
3	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
4	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
5	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
6	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
7	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1
8	-1	1	1	1	-1	1	-1	1
9	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
10	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
11	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1
12	1	-1	1	1	-1	-1	1	1
13	1	1	-1	-1	1	1	1	1
14	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1
15	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
16	1	1	1	1	1	1	1	1

Si on utilise maintenant le programme Factex07 suivant :

```
/****** FACTEX07 *****/;
proc factex;
  factors x1-x8;
  model resolution=4;
  size design=16;
  examine aliasing(2) confounding;
  output out=resul;

proc print data=resul;
run;
/****** */;
```

on obtient la sortie suivante :

Factor Confounding Rules

```
x5 = x2*x3*x4
x6 = x1*x3*x4
x7 = x1*x2*x4
x8 = x1*x2*x3
```

Aliasing Structure

```
x1
x2
x3
x4
x5
x6
x7
x8
x1*x2 = x3*x8 = x4*x7 = x5*x6
x1*x3 = x2*x8 = x4*x6 = x5*x7
x1*x4 = x2*x7 = x3*x6 = x5*x8
x1*x5 = x2*x6 = x3*x7 = x4*x8
```

$$\begin{aligned}
x_1x_6 &= x_2x_5 = x_3x_4 = x_7x_8 \\
x_1x_7 &= x_2x_4 = x_3x_5 = x_6x_8 \\
x_1x_8 &= x_2x_3 = x_4x_5 = x_6x_7
\end{aligned}$$

Commentaire : La structure de concomitance ci-dessus correspond bien à une résolution IV.

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1
3	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1
4	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
5	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1
6	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
7	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1
8	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1
9	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
10	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
11	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
12	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1
13	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
14	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1
15	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
16	1	1	1	1	1	1	1	1

3.10 Matrices d'Hadamard

Bien que ces matrices, appelées aussi plans de Plackett & Burman, ne s'obtiennent pas par fractionnement d'un plan complet avec les méthodes des sections précédentes, on les présente toutefois dans ce chapitre car ce sont des plans à deux niveaux de résolution III.

3.10.1 Définition

Une matrice d'Hadamard est une matrice carrée, notée H_N , à N éléments -1 et $+1$, telle que

$$H_N^T H_N = N I_N$$

avec I_N matrice identité ($N \times N$).

Cette définition implique que les matrices d'Hadamard sont des matrices **orthogonales**. Remarquons que les fractions de résolution III rencontrées dans les sections précédentes respectent cette définition et sont donc des matrices d'Hadamard. Cependant les matrices d'Hadamard ne sont pas toutes des plans de taille en puissance de 2.

Condition nécessaire

Leur condition nécessaire d'existence repose sur la contrainte $N = 0$ modulo 4, mais elles n'ont pas été toutes trouvées pour toutes ces valeurs de N .

Leur intérêt pratique est l'utilisation en criblage (en anglais "screening") de facteurs quand ceux-ci sont très nombreux (par exemple 12 à 40 dans le monde réel, jusqu'à plusieurs centaines pour les simulations sur ordinateur). On peut étudier avec $N = 4m$ (m entier non nul) expériences au maximum $p = 4m - 1$ effets principaux de facteurs, mais pas d'interactions puisque la résolution est de III.

Leur principe de construction est basé sur des raisonnements d'algèbre, publiés notamment dans [30], [31], [20], et [14].

3.10.2 Construction de quelques matrices d'Hadamard

Matrice H_4

Elle correspond à la fraction 2^{3-1} obtenue par $I_1 = +123$, avec une colonne de +1 :

n°	x_0	x_1	x_2	x_3
1	+1	-1	-1	+1
2	+1	-1	+1	-1
3	+1	+1	-1	-1
4	+1	+1	+1	+1

Tableau 3.23. Matrice d'Hadamard H_4 .

Matrices H_8 à H_{24}

Elles sont obtenues par permutation circulaire des éléments d'une ligne génératrice, puis par rajout final d'une ligne de +1, et d'une colonne de +1.

Par exemple la H_8 est obtenue à partir de la ligne 1 génératrice suivante :

+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	→
----	----	----	----	----	----	----	---

La ligne 2 est obtenue en déplaçant le huitième élément à droite de la ligne 1 sur la position 1 de la ligne 2, "poussant" vers la droite l'ancien élément de cette position :

→	-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1
---	----	----	----	----	----	----	----

et ainsi de suite :

+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1
-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1
-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1
			+1	+1	+1	-1
				+1	+1	+1
					+1	+1
						+1

pour arriver à la ligne 7 :

+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1
----	----	----	----	----	----	----

Après rajout d'une ligne de -1 , et d'une colonne de $+1$, on obtient finalement la matrice d'hadamard H_8 au tableau 3.24.

+1	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1
+1	-1	+1	+1	+1	-1	+1	-1
+1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	+1
+1	+1	-1	-1	+1	+1	+1	-1
+1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	+1
+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	+1
+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	+1
+1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

Tableau 3.24. Matrice d'Hadarnard H_8 .

Comme une matrice d'Hadarnard est orthogonale on peut utiliser n'importe qu'elle colonne pour construire une matrice d'expérience.

Avec le même principe de construction, on obtient les H_{12} , H_{16} , H_{20} , H_{24} , à partir des lignes génératrices respectives suivantes :

- $N = 12$: + + - + + + - - - + -
- $N = 16$: + + + + - + - + + - - + - - -
- $N = 20$: + + - - + + + + - + - + - - - - + + -
- $N = 24$: + + + + + - + - + + - - + + - - + - + - - - - -

D'autres méthodes de construction existent, par exemple on montre ci-dessous deux H_{24} différentes :

										x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2
1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	1	2	3	4			

```

1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1
2 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1
3 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1
4 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1
5 1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1
6 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1
7 1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1
8 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1
9 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1
10 1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1
11 1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1
12 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1
13 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1
14 1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1
15 1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1
16 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1
17 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 -1
18 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1
19 1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1
20 1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1
21 1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1 -1 -1
22 1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 -1 -1
23 1 -1 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 1 1 1 1 1
24 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1

```

```

x x x x x x x x x x x x x x x x x x x x x
x x x x x x x x x 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2
1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 1 2 3 4

```

```

1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1
3 1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1
4 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1 -1 -1 1 1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1
5 1 1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1
6 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 1 1 -1
7 1 1 -1 -1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1 1 1 -1
8 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1 -1 -1 1
9 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1
10 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 1
11 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1
12 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 1

```

13 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1
14 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1 -1 1
15 1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 -1 1 -1 1 1 -1 1 -1 -1 1 -1 1
16 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1
17 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1
18 1 -1 1 -1 -1 1 -1 1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1
19 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1 -1 1 -1 1 -1 1 1 -1 1 -1 1 -1
20 1 -1 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 1 -1 -1 1
21 1 -1 -1 1 -1 1 -1 1 1 -1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1
22 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1
23 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1
24 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 -1 1 1 -1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1

On peut trouver sur le site Web suivant :

<http://www2.research.att.com/~njas/hadamard/>

de nombreuses matrices d'Hadamard de différentes tailles et de différents types.

Enfin on souligne que, même si elles sont toujours de résolution III, les matrices d'Hadamard n'ont pas toutes la même structure de concomitance avec les interactions doubles. Ainsi, par exemple, on montre dans le paragraphe suivant que la matrice H_{12} est particulièrement efficace.

3.10.3 Etude de la matrice d'Hadamard H_{12}

La matrice H_{12} , pour 11 facteurs, est particulièrement efficace, au sens où les biais de modèle (par "oubli" des éventuels effets d'interaction) sur les estimations finales des paramètres seront tous équivalents car chaque effet principal de facteur est concomitant à un groupe d'interactions doubles de même taille. En outre le coefficient de corrélation (osons ici cet abus de langage) entre les effets principaux des facteurs et les interactions vaut soit $-1/3$, soit $+1/3$: on trouve pour chaque facteur 30 coefficients qui valent $-1/3$ et 15 coefficients qui valent $+1/3$. On donne ci-dessous la matrice H_{12} pour 11 facteurs.

La matrice H_{12} :

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11
1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1
2	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
3	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1
4	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1

5	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1
6	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1
7	-1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1
8	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1
9	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	-1	1
10	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	-1
11	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1
12	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

3.10.4 Le modèle associé aux matrices d'Hadamard

Le modèle postulable est donc purement additif. Pour toute H_N avec $N - 4 \leq p \leq N - 1$ on peut postuler le modèle :

$$Y = \sum_{j=0}^p \beta_j x_j + \varepsilon$$

et les estimations des β_j seront obtenues comme :

$$\hat{\beta}_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i X_{ij}$$

L'estimation de leurs variances sera obtenue comme :

$$\widehat{\text{var}}(\hat{\beta}_j) = \frac{\hat{\sigma}^2}{N}$$

On renvoie le lecteur au paragraphe 6.4 du chapitre 2 pour le calcul de $\hat{\sigma}^2$.

3.10.5 Quelques exemples d'application

On peut en citer de nombreux. Par exemple pour l'utilisation d'une H_{12} on peut citer la publication en chimie de Elguero et al. [16] où le criblage permet l'analyse d'un cas d'alcoylation dans les conditions de la catalyse par transfert de phase.

Curieusement, le programme Factex08 suivant :

```

/***** FACTEX08.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1-x19;
  model est=(x1-x19);
  size design=minimum ;
  output out=resul;

```

```
proc print data=resul;
run;
/*****;/
```

ne conduit pas à la matrice d'Hadamard H_{20} à laquelle on s'attend (puisque'il est demandé une taille minimum pour 19 facteurs, et que la commande *model est=(x1-x19)* signifie que l'on veut estimer seulement les effets principaux des 19 facteurs), mais conduit à la fraction 2^{19-14} suivante de 32 expériences :

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	x12	x13	x14	x15	x16	x17	x18	x19
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1
2	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1
3	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
4	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
5	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1
6	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
7	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
8	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1
9	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1
10	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1
12	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1
13	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1
14	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
15	-1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
16	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
17	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1
18	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1
19	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
20	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
21	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1	1
22	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1
23	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
24	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
25	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1
26	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
27	1	1	-1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1
28	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
29	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
30	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
31	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

Remarque : Cependant on peut accéder aux matrices d'Hadamard (appelés "Plackett-Burman designs") dans le logiciel SAS via l'interface ADX.

3.11 La matrice d'alias

3.11.1 Définition

C'est un outil matriciel commode pour évaluer *a priori*, donc avant toute expérience physique, les **biais de modèle** provoqué sur les futures estimations des effets quand le modèle postulé n'est pas le "vrai" modèle. Ainsi elle peut aider à la discrimination *a priori* de deux ou plusieurs modèles postulables. Explicitons le raisonnement.

Supposons le modèle postulé pour une matrice de modèle X_M :

$$Y = X_M \beta_X + \varepsilon$$

qui conduit à l'estimation :

$$\hat{\beta}_X = (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T Y$$

Si ce modèle est correct (vrai) on a :

$$E(\hat{\beta}_X) = (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T E(Y) = (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T X_M \beta_X = \beta_X$$

et donc $\hat{\beta}_X$ est un estimateur **non biaisé** de β_X .

Supposons maintenant que le vrai modèle est en fait :

$$Y = X_M \beta_X + Z_M \beta_Z + \varepsilon$$

où Z_M est la matrice de modèle constitué de termes différents de ceux de X_M , par exemple des termes d'interaction "oubliés" et non pris en compte dans X_M . On a alors :

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}_X) &= (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T E(Y) = (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T (X_M \beta_X + Z_M \beta_Z) \\ &= \beta_X + (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T Z_M \beta_Z \\ &= \beta_X + A \beta_Z \end{aligned}$$

La matrice d'alias est par définition :

$$A = (X_M^T X_M)^{-1} X_M^T Z_M$$

et le terme $A \beta_Z$ constitue le biais de modèle de β_X .

3.11.2 Un exemple d'utilisation

Supposons un premier modèle postulé pour sept facteurs où seuls les effets principaux sont présents :

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{11} \beta_j X_j + \varepsilon$$

Un choix économique d'une matrice d'expériences adaptée à ce modèle peut se constituer à partir des sept premières colonnes d'une matrice d'Hadamard H_{12} . On a donc la première matrice de modèle :

$$X_M = X_0 || H_{12}$$

où le symbole $||$ signifie la concaténation en colonne entre vecteurs ou matrices. Ici le vecteur de uns X_0 est concaténé à droite de la matrice H_{12} .

Supposons maintenant qu'en réalité les quatre interactions doubles particulières X_1X_2 , X_2X_5 , X_3X_7 et X_4X_7 doivent être ajoutées pour mieux représenter le phénomène étudié. Le "vrai" modèle s'écrit alors :

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^7 \beta_j X_j + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{25} X_2 X_5 + \beta_{37} X_3 X_7 + \beta_{47} X_4 X_7 + \varepsilon$$

La matrice de modèle correspondant aux quatre interactions ajoutées s'écrit :

$$Z_M = X_1 X_2 || X_2 X_5 || X_3 X_7 || X_4 X_7$$

où les colonnes représentant les interactions sont construites usuellement comme au chapitre 2.

Tous calculs faits la matrice d'alias de dimensions 8×4 s'écrit :

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -0.33 & 0.33 \\ 0 & 0.33 & 0 & 0.33 \\ 0 & -0.33 & 0.33 & 0 \\ 0 & 0 & -0.33 & 0.33 \\ 0 & -0.33 & -0.33 & -0.33 \\ 0 & -0.33 & 0 & 0 \\ 0 & -0.33 & 0.33 & -0.33 \end{bmatrix}$$

Supposons maintenant les 12 résultats suivants :

$$1, 5, 0, 2, 3, 4, 6, 8, 1, 6, 10, 2$$

Pour le premier modèle on a :

$$\hat{\beta}_X = (4, -0.5, 0.67, -0.5, 0.17, -0.33, 0.83, 1.67)^T$$

Pour les termes oubliés on a :

$$\hat{\beta}_Z = (0.067, 0.23, 1.27, -0.43)^T$$

Le vecteur des biais est :

$$A\hat{\beta}_Z = (0, -0.5, -0.067, 0.34, -0.57, -0.36, -0.08, 0.49)^T$$

On constate que les biais sont très importants, les effets principaux estimés par $\hat{\beta}_X$ ne traduisent donc pas vraiment les vrais effets principaux des facteurs X_1 à X_7 .

3.12 Conclusion sur le plan 2^{p-k}

Il faut souligner que ce chapitre sur les fractions de plans complets à deux niveaux n'est qu'une introduction sur un sujet bien vaste. Nous pensons néanmoins qu'elle est suffisante pour permettre à un utilisateur de mettre en jeu, manuellement ou avec un logiciel, une fraction qui conduira à la réalisation effective d'un plan d'expérimentation. Pour approfondir ce chapitre nous recommandons au lecteur le chapitre 3 d'A. Kobilinsky, assez technique, édité dans l'ouvrage collectif de Dreesbeke *et al.* référencé dans la préface. A. Kobilinsky est l'auteur du logiciel PLANOR, un des logiciels les plus performants sur le fractionnement des plans. Ce logiciel a été récemment transcrit en langage R par H. Monod et A. Bouvier (INRA/ Unité MIA de Jouy-en-Josas) et est disponible gratuitement sur le site web du CRAN.

Chapitre 4

Le plan factoriel à trois niveaux

4.1 Introduction

Ce chapitre considère uniquement des facteurs discrets. Si deux niveaux pour chaque facteur, qu'il soit discret ou continu, permettraient de définir simplement et naturellement les effets linéaires des facteurs et leurs interactions, comme on l'a vu aux chapitres précédents, on sent intuitivement qu'il devient plus délicat d'exhiber une définition commune à propos des effets quadratiques et des interactions entre facteurs si ceux-ci sont discrets ou continus.

En effet, un effet quadratique pour un facteur discret ne peut pas, *stricto sensu*, être défini puisque l'espace expérimental n'existe pas entre les modalités (espace non connexe). De même, la notion d'interaction, comme on l'a exposée aux chapitres 2 et 3, a besoin d'être généralisée puisqu'on peut facilement imaginer par exemple que si deux facteurs discrets présente chacun trois modalités, on souhaitera s'intéresser aux effets des **neuf interactions possibles** impliquées par les trois modalités de chacun d'eux.

A contrario, si deux facteurs x_j et x_k sont continus, même avec trois niveaux, l'interaction peut toujours s'exprimer par le seul terme $x_j x_k$ comme s'ils avaient deux niveaux. Par ailleurs, on peut facilement pressentir la définition d'un effet quadratique x^2 du facteur quand on observe un effet de courbure sur un graphique où l'on positionne les points de coordonnées (x_i, y_i) , avec les x_i représentant les niveaux pris par le facteur continu et les y_i les résultats observés correspondants de la réponse y . L'effet quadratique traduira **l'écart à la linéarité du lien entre y et x** , écart visible sur le graphique pour le niveau du milieu. Cependant, même si pour un facteur continu on peut se poser la question du nombre de niveaux à lui affecter pour estimer un tel effet quadratique (trois niveaux ou plus?), on peut malgré tout utiliser des plans à 3 niveaux pour les facteurs continus. Toutefois des aspects typiquement liés aux facteurs continus ne peuvent pas être exposés dans ce chapitre; ils le seront au chapitre 10 dédié aux plans à facteurs continus, les plans dits de surface de réponse.

Après ces propos liminaires, il devient compréhensible qu'il est pertinent de distinguer la nature des facteurs, continue ou discrète, dès que ceux-ci vont prendre au moins trois niveaux (ou modalités), quant à la définition des effets et l'analyse des résultats. Le plan

factoriel complet à p facteurs sera noté 3^p , et pour $p = 2$ c'est le plan le plus simple que l'on puisse construire. On notera A et B les facteurs, la notation avec les lettres étant plus particulièrement réservée dans ce polycopié aux facteurs discrets, pour des raisons de clarté pédagogique.

4.2 Les codages

Pour écrire les matrices d'expériences et de modèle des plans 3^p on peut utiliser les deux codages différents suivants pour représenter les trois modalités des facteurs :

- le codage additif : $[0, 1, 2]$ modulo 3,
- le codage multiplicatif par racines cubiques de l'unité : $[1, j, j^2]$ modulo 3, avec

$$j = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right) = \cos\frac{2\pi}{3} + i \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) \implies 1 + j + j^2 = 0$$

Les deux codages ont des avantages spécifiques, même si on trouve surtout le premier dans les logiciels. On considérera d'abord le plan 3^2 pour bien mettre en évidence la nature des effets.

4.3 Le plan factoriel complet 3^2

Le modèle postulé associé est un modèle d'analyse de la variance à deux facteurs dont la formulation générale sera détaillée au sous-paragraphe 4.4.1 ; elle n'est pas nécessaire pour la compréhension des trois sous-paragraphe suivants.

4.3.1 Matrice du modèle du plan 3^2 avec le codage additif

La matrice de modèle s'écrit, en codant les modalités A_i , $i = 1, \dots, 3$ et B_j , $j = 1, \dots, 3$ des facteurs A et B respectifs, comme au tableau 4.1 (où la matrice d'expériences D proprement dite est constituée des deux colonnes A et B).

n°	A	B	A^2	B^2	AB	A^2B	AB^2	A^2B^2
1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	1	0	2	1	1	2	2
3	0	2	0	1	2	2	1	1
4	1	0	2	0	1	2	1	2
5	1	1	2	2	2	0	0	1
6	1	2	2	1	0	1	2	0
7	2	0	1	0	2	1	2	1
8	2	1	1	2	0	2	1	0
9	2	2	1	1	1	0	0	2

Tableau 4.1. Matrice de modèle pour le plan 3^2 pour deux facteurs discrets avec le codage additif.

Dans cette matrice les facteurs A et B sont orthogonaux, et d'autres colonnes sont également orthogonales. Il nous faut préciser ce que signifie l'orthogonalité en présence de facteurs discrets. Celle-ci se manifeste entre deux facteurs (colonnes) quand toutes les modalités de l'un se trouvent associées à toutes les modalités de l'autre, et ceci un même nombre de fois. Pour rendre visible plus facilement cette orthogonalité on peut recoder le tableau 4.1 en y remplaçant 0 par -1 , 1 par 0, et 2 par $+1$. La matrice précédente s'écrit maintenant comme au tableau 4.2 :

n°	A	B	A^2	B^2	AB	A^2B	AB^2	A^2B^2
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	0	-1	+1	0	0	+1	+1
3	-1	+1	-1	0	+1	+1	0	0
4	0	-1	+1	-1	0	+1	0	+1
5	0	0	+1	+1	+1	-1	-1	0
6	0	+1	+1	0	-1	0	+1	-1
7	+1	-1	0	-1	1	0	+1	0
8	+1	0	0	+1	-1	+1	0	-1
9	+1	+1	0	0	0	-1	-1	+1

Tableau 4.2. Matrice de modèle pour le plan 3^2 pour deux facteurs discrets avec le codage additif modifié.

On voit alors facilement apparaître la structure d'orthogonalité suivante en vérifiant que les produits scalaires des vecteurs (centrés), représentés par les colonnes de cette matrice, sont nuls :

- Pour le facteur A :
 - $A \perp B$, $A \perp AB$, $A \perp B^2$, $A \perp A^2B$, $A \perp AB^2$, $A \perp A^2B^2$,
 - $A^2 \perp B$, $A^2 \perp AB$, $A^2 \perp B^2$, $A^2 \perp A^2B$, $A^2 \perp AB^2$, $A^2 \perp A^2B^2$,
 - mais comme $\langle A, A^2 \rangle = +3$ les deux colonnes A et A^2 sont liées et donc indissociables : elles représentent **conjointement** l'effet du facteur A , et ainsi deux degrés de liberté lui seront attachés lors de l'analyse de la variance finale ; on remarque dans le tableau 4.1 qu'en effet les 3 zéros de la colonne A ne sont associés qu'à la valeur zéro de la colonne A^2 , de même la valeur 1 de la colonne A n'est associée qu'à la valeur 2 de la colonne A^2 , etc..., comme attendu les 9 combinaisons n'apparaissent donc pas.
- Pour le facteur B :
 - $B \perp A$, $B \perp AB$, $B \perp A^2$, $B \perp A^2B$, $B \perp AB^2$, $B \perp A^2B^2$,
 - $B^2 \perp A$, $B^2 \perp AB$, $B^2 \perp A^2$, $B^2 \perp A^2B$, $B^2 \perp AB^2$, $B^2 \perp A^2B^2$,
 - mais comme $\langle B, B^2 \rangle = +3$ les deux colonnes B et B^2 sont indissociables : elles représentent **conjointement** l'effet du facteur B , et comme pour A , deux degrés de liberté lui seront attachés lors de l'analyse de la variance finale,
- Pour l'interaction AB :
 - $AB \perp A^2$, $AB \perp B^2$, $AB \perp A^2B$, $AB \perp AB^2$, $A^2B^2 \perp A^2B$, $A^2B^2 \perp AB^2$,
 - mais comme $\langle AB, A^2B^2 \rangle = +3$, et $\langle A^2B, AB^2 \rangle = +3$, alors les deux colonnes AB , A^2B^2 sont indissociables, et les deux colonnes A^2B et AB^2 sont in-

dissociables également. Comme elles sont constituées toutes les quatre de termes mettant en jeu à la fois A et B , alors elles représentent **conjointement** l'effet de l'**interaction double généralisée**, notée $A * B$, portée par les quatre termes AB, A^2B, AB^2, A^2B^2 , et ainsi quatre degrés de liberté lui seront attachés lors de l'analyse de la variance finale.

4.3.2 Matrice du modèle du 3^2 avec le codage multiplicatif

La matrice de modèle s'écrit maintenant en codant les modalités $A_u, u = 1, \dots, 3$ et $B_v, v = 1, \dots, 3$, avec $1, j, j^2$, comme au tableau 4.3.

n°	A	B	A^2	B^2	AB	A^2B	AB^2	A^2B^2
1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	j	1	j^2	j	j	j^2	j^2
3	1	j^2	1	j	j^2	j^2	j	j
4	j	1	j^2	1	j	j^2	j	j^2
5	j	j	j^2	j^2	j^2	1	1	j
6	j	j^2	j^2	j	1	j	j^2	1
7	j^2	1	j	1	j^2	j^2	j^2	j
8	j^2	j	j	j^2	1	j	j	1
9	j^2	j^2	j	j	j	1	1	j^2

Tableau 4.3. Matrice de modèle pour le plan 3^2 pour deux facteurs discrets avec le codage multiplicatif.

Comme $1 + j + j^2 = 0$ les vecteurs sont centrés, et on obtient la même structure d'orthogonalité qu'avec le codage $[0, 1, 2] \bmod 3$, même si les valeurs des produits scalaires non nuls sont différents de celles du codage précédent (par exemple $\langle AB, A^2B^2 \rangle = 9$).

Un avantage de ce codage par les racines cubiques de l'unité est qu'il permet une définition mathématiquement élégante des effets factoriels, c-a-d les effets correspondant à chaque colonne de la matrice précédente comme on le voit au paragraphe suivant.

4.3.3 Définition des effets factoriels via le codage par les racines cubiques de l'unité

Notons :

- $y(A_u, B_v)$ le résultat de la réponse pour un traitement (A_u, B_v) ; on rappelle que le terme "traitement" est synonyme de "combinaison de niveaux ou de modalités", ou de "pattern",
- $\bar{y}(\cdot, \cdot)$ une moyenne des résultats y_{uv} , calculée sur tous les 9 traitements possibles $(A_u, B_v), u, v = 1, \dots, 3$,
- $\bar{y}(A_u, \cdot)$ une moyenne des résultats y_{uv} , calculée sur les 3 traitements $(A_u, B_1 = 1), (A_u, B_2 = j), (A_u, B_3 = j^2)$, et soit $\bar{y}(\cdot, B_v)$ la définition équivalente pour le facteur B ,

- $\alpha(A), \alpha(A^2), \beta(B), \beta(B^2), \gamma(AB), \gamma(A^2B), \gamma(AB^2), \gamma(A^2B^2)$ les effets (factoriels) correspondant à chaque colonne de la matrice précédente,
- $\bar{j}, \bar{j}^2, \bar{A}_u, \bar{B}_v, u, v = 1, \dots, 3$, les complexes conjugués respectifs de $j, j^2, A_u, B_v, u, v = 1, \dots, 3$.

Rappelons aussi que, **pour une racine cubique de l'unité, le conjugué, l'inverse et le carré sont égaux**, donc par exemple pour les modalités $A_u, i = 1, \dots, 3$, du facteur A on a :

$$\bar{A}_u = A_u^2 = A_u^{-1} \quad \text{et} \quad A_u = \bar{A}_u^2 \quad (4.1)$$

En utilisant ce formalisme le modèle postulé s'écrit :

$$y = \mu + \alpha(A) + \alpha(A^2) + \beta(B) + \beta(B^2) + \gamma(AB) + \gamma(A^2B) + \gamma(AB^2) + \gamma(A^2B^2) + \varepsilon \quad (4.2)$$

et les estimations des effets factoriels seront définies avec des coefficients complexes. On aura ainsi pour quelques uns d'entre eux :

- Pour l'effet général (la moyenne des N résultats) :

$$\hat{\mu} = \bar{y}(\dots) = \frac{1}{9} \sum_{u,v=1}^{u,v=3} y(A_u, B_v) \quad (4.3)$$

- Pour l'effet factoriel $\alpha(A)$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}(A) &= \frac{1}{3} \sum_{u=1}^{u=3} \bar{A}_u \bar{y}(A_u, \dots) \\ &= \frac{1}{3} [\bar{y}(1, \dots) + \bar{j} \bar{y}(j, \dots) + \bar{j}^2 \bar{y}(j^2, \dots)] \end{aligned} \quad (4.4)$$

- Pour l'effet factoriel $\alpha(A^2)$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}(A^2) &= \frac{1}{3} \sum_{u=1}^{u=3} \bar{A}_u^2 \bar{y}(A_u, \dots) \\ &= \frac{1}{3} [\bar{y}(1, \dots) + \bar{j}^2 \bar{y}(j, \dots) + \bar{j} \bar{y}(j^2, \dots)] \end{aligned} \quad (4.5)$$

- Pour l'effet factoriel $\beta(A)$

$$\begin{aligned} \hat{\beta}(B) &= \frac{1}{3} \sum_{v=1}^{v=3} \bar{B}_v \bar{y}(\dots, B_v) \\ &= \frac{1}{3} [\bar{y}(\dots, 1) + \bar{j} \bar{y}(\dots, j) + \bar{j}^2 \bar{y}(\dots, j^2)] \end{aligned} \quad (4.6)$$

– Pour l'effet factoriel $\gamma(AB)$

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}(AB) &= \frac{1}{9} \sum_{u,v=1}^{u,v=3} \overline{A_u B_v} y(A_u, B_v) \\ &= \frac{1}{9} [y(1, 1) + \bar{j}y(1, j) + \bar{j}^2 y(1, j^2)] \\ &\quad + \frac{1}{9} [\bar{j}y(j, 1) + \bar{j}^2 y(j, j) + y(j, j^2)] \\ &\quad + \frac{1}{9} [\bar{j}^2 y(j^2, 1) + y(j^2, j) + \bar{j}y(j^2, j^2)]\end{aligned}\tag{4.7}$$

Bien sûr on peut revenir facilement à des effets réels car $\hat{\alpha}(A)$ et $\hat{\alpha}(A^2)$ sont conjugués :

– l'effet réel estimé de A est :

$$\hat{\tau}(A) = \hat{\alpha}(A) + \hat{\alpha}(A^2)\tag{4.8}$$

$$= \frac{1}{3} [2\bar{y}(1, \cdot) - \bar{y}(j, \cdot) - \bar{y}(j^2, \cdot)]\tag{4.9}$$

on remarque que l'on retrouve bien la contribution des colonnes des deux colonnes A et A^2 qui définissent conjointement l'effet principal du facteur A , comme il apparaissait lors du codage additif,

– l'effet réel estimé de A^2 est :

$$\hat{\tau}(A^2) = -i\hat{\alpha}(A) + i\hat{\alpha}(A^2)\tag{4.10}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} [-\bar{y}(j, \cdot) + \bar{y}(j^2, \cdot)]\tag{4.11}$$

mais on conviendra qu'en travaillant sur $\hat{\alpha}(A)$ et $\hat{\alpha}(A^2)$ les propriétés sont plus visibles. Les formules sont analogues pour le facteur B et pour l'interaction.

4.4 Méthode d'analyse de la variance

Pour les plans à deux niveaux des chapitres précédents la méthode de régression suffisait pour analyser les résultats. En revanche, avec des facteurs discrets à plus de deux niveaux, la méthode d'analyse de la variance est incontournable, notamment pour une estimation claire des effets des modalités des facteurs. Dans la section précédente on a vu comment estimer les effets des facteurs, mais non pas les modalités de ceux-ci. En outre nous n'avons pas encore obtenu clairement une décomposition de la variabilité totale des résultats. Ceci est l'objet de la méthode d'analyse de la variance que nous exposons maintenant. Toutefois, pour rester pédagogique et permettre le détail de tous les calculs on présentera la méthode pour deux facteurs discrets (ou considérés comme

discrets) et fixes, étudiés au moyen d'un plan factoriel équilibré, avec a et b niveaux par facteur, le plan 3^2 vu plus haut n'étant qu'un cas particulier ($a = 3$ et $b = 3$). La généralisation des équations ci-dessous à tout nombre de facteurs supérieur à deux, sera immédiate.

4.4.1 Le modèle

Pour bien mettre en évidence cette fois-ci les modalités des facteurs, on écrit le modèle postulé comme :

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \varepsilon_{ijk} \quad (4.12)$$

où

- μ est l'effet moyen global,
- α_i est un paramètre traduisant l'effet de la modalité A_i , $i = 1, \dots, a$, du facteur A ,
- β_j est un paramètre traduisant l'effet de la modalité B_j , $j = 1, \dots, b$, du facteur B ,
- γ_{ij} est un paramètre traduisant l'interaction entre les modalités A_i et B_j , respectivement des deux facteurs A et B ,
- y_{ijk} , $k = 1, \dots, r_{ij}$, est le $k^{\text{ième}}$ résultat, parmi les r_{ij} résultats obtenus par répétition de l'expérience définie par le traitement (i, j) , mais ici comme on considère des plans équilibrés on aura toujours $r_{ij} = r \geq 2$, $\forall i, j$, et en conséquence le nombre total d'expériences sera $N = a \times b \times r$,
- ε_{ijk} est un terme d'erreur aléatoire dont il n'est pas nécessaire de connaître la loi de probabilité pour réaliser les calculs des différentes sommes de carrés, mais pour réaliser les tests statistiques de significativité il nous faudra supposer que cette loi est une $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ avec σ^2 inconnue et constante, et que les ε_{ijk} sont i.i.d.

On peut présenter le plan factoriel complet comme au tableau 4.4.

A/B	1	...	b
1	y_{111}, \dots, y_{11r}	...	y_{1b1}, \dots, y_{1br}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
a	y_{a11}, \dots, y_{a1r}	...	y_{ab1}, \dots, y_{abr}

Tableau 4.4. Présentation générale d'un plan factoriel complet à deux facteurs avec les résultats.

L'ordre dans lequel les N résultats sont obtenus étant aléatoire (les raisons sont données au §2.6), cette caractéristique en fait donc un plan factoriel complet randomisé.

4.4.2 Contraintes et tests sur les effets

Les effets des différentes modalités des facteurs sont définis comme des écarts (algébriques) à l'effet moyen global μ , et donc on a :

$$\sum_{i=1}^a \alpha_i = 0 ; \quad \sum_{j=1}^b \beta_j = 0 ; \quad \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \gamma_{ij} = 0 \quad (4.13)$$

Les tests d'hypothèses usuels sont les suivants :

$$\begin{aligned} H_0^{(A)} &: \alpha_1 = \dots = \alpha_a = 0 \\ H_1^{(A)} &: \exists \alpha_i \neq 0 \\ H_0^{(B)} &: \beta_1 = \dots = \beta_b = 0 \\ H_1^{(B)} &: \exists \beta_j \neq 0 \\ H_0^{(AB)} &: \gamma_{ij} = 0, \forall i, j \\ H_1^{(AB)} &: \exists \gamma_{ij} \neq 0 \end{aligned} \quad (4.14)$$

4.4.3 Les sommes de carrés

Notons :

$$\begin{aligned} y_{i..} &= \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r y_{ijk} \rightarrow \bar{y}_{i..} = \frac{y_{i..}}{br} ; \quad i = 1, \dots, a \\ y_{.j.} &= \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^r y_{ijk} \rightarrow \bar{y}_{.j.} = \frac{y_{.j.}}{ar} ; \quad j = 1, \dots, b \\ y_{ij.} &= \sum_{k=1}^r y_{ijk} \rightarrow \bar{y}_{ij.} = \frac{y_{ij.}}{r} ; \quad i = 1, \dots, a ; \quad j = 1, \dots, b \\ y_{...} &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r y_{ijk} \rightarrow \bar{y}_{...} = \frac{y_{...}}{abr} \end{aligned} \quad (4.15)$$

La somme de carrés (centrés) totale SCT se décompose en :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r (y_{ijk} - \bar{y}_{...})^2 &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r [(\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...}) + ((\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...})) \\ &\quad + (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...}) + (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})]^2 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Comme les six produits croisés du membre de droite de (4.16) sont tous nuls on

obtient :

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r (y_{ijk} - \bar{y}_{...})^2 &= br \sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 + ar \sum_{j=1}^b (\bar{y}_{.j} - \bar{y}_{...})^2 \\
&+ r \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{...})^2 \\
&+ \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2
\end{aligned} \tag{4.17}$$

équation que l'on peut noter :

$$SCT = SC_A + SC_B + SC_{A \times B} + SCR \tag{4.18}$$

4.4.4 Les nombres de degrés de liberté

Les nombres de degrés de liberté associés aux sommes de carrés précédentes sont donnés au tableau 4.5.

Effet	ddl
A	$a - 1$
B	$b - 1$
$A \times B$	$(a - 1)(b - 1)$
Erreur	$ab(r - 1)$
Total	$abr - 1$

Tableau 4.5. Nombres de ddl associés aux sommes de carrés.

Remarquons que le nombre de $ddl = (a - 1)(b - 1)$ de l'interaction se déduit du nombre total de case moins un, soit $ab - 1$ auquel on enlève les ddl de chaque facteur A et B , soit $ab - 1 - (a - 1) - (b - 1) = (a - 1)(b - 1)$. Remarquons aussi qu'il faut $r \geq 2$ pour pouvoir définir le ddl de l'erreur. Si $r = 1$ on verra plus loin qu'alors le terme d'interaction ne peut plus être postulé. Remarquons enfin qu'avec les facteurs à deux niveaux, aux chapitres 2 et 3, on postulait des termes d'interaction dans le modèle avec $r = 1$, mais en conséquence on ne disposait pas de ddl pour estimer une variance résiduelle (modèle saturé). En divisant les sommes de carrés par leurs ddl respectifs on obtient les carrés moyens CM_A , CM_B , $CM_{A \times B}$, CMR .

4.4.5 Les espérances de carrés moyens

On peut montrer facilement que ces espérances sont :

$$E(CM_A) = E\left(\frac{SC_A}{(a-1)}\right) = \sigma^2 + \frac{br \sum_{i=1}^a \alpha_i^2}{a-1} \quad (4.19)$$

$$E(CM_B) = E\left(\frac{SC_B}{(b-1)}\right) = \sigma^2 + \frac{ar \sum_{j=1}^b \beta_j^2}{b-1} \quad (4.20)$$

$$E(CM_{AB}) = E\left(\frac{SC_{AB}}{(a-1)(b-1)}\right) = \sigma^2 + \frac{r \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \gamma_{ij}^2}{(a-1)(b-1)} \quad (4.21)$$

$$E(CMR) = E\left(\frac{SCR}{ab(r-1)}\right) = \sigma^2 \quad (4.22)$$

Sous les hypothèses H_0 respectives de (4.14), on remarque que les carrés moyens des équations (4.19), (4.20) et (4.21) estiment sans biais σ^2 . Alors, si H_0 est vraie et si le modèle (4.12) est correct, les trois rapports (observés), notés \mathcal{F}_{obs} , CM_A/CMR , CM_B/CMR , CM_{AB}/CMR suivent des lois de Fisher-Snedecor (F-S) avec respectivement $(a-1)$, $(b-1)$, $(a-1)(b-1)$ ddl au numérateur et $ab(r-1)$ ddl au dénominateur. Pour un risque α (de première espèce) la région critique du test sera la partie droite de la densité de la loi de Fisher-Snedecor, bornée à gauche par le fractile correspondant, c-a-d $\mathcal{F}(\nu_1, \nu_2; \alpha)$ où ν_1 et ν_2 sont les ddl du numérateur et du dénominateur. Dès qu'un \mathcal{F}_{obs} calculé à partir des résultats sera supérieur à ce fractile, le facteur testé sera déclaré significatif au risque α de se tromper.

4.4.6 Table d'analyse de la variance

On réunit tous les éléments des paragraphes précédents dans la table d'analyse de la variance du tableau 4.6.

Source de variation	SC	ddl	CM	\mathcal{F}_{obs}
Facteur A	SC_A	$a-1$	$CM_A = \frac{SC_A}{a-1}$	$\mathcal{F}_{obs} = \frac{CM_A}{CMR}$
Facteur B	SC_B	$b-1$	$CM_B = \frac{SC_B}{b-1}$	$\mathcal{F}_{obs} = \frac{CM_B}{CMR}$
Interaction	SC_{AB}	$(a-1)(b-1)$	$CM_{AB} = \frac{SC_{AB}}{(a-1)(b-1)}$	$\mathcal{F}_{obs} = \frac{CM_{AB}}{CMR}$
Erreur	SCR	$ab(r-1)$	$CMR = \frac{SCR}{ab(r-1)}$	
Total	SCT	$abr-1$		

Tableau 4.6. Table d'analyse de la variance pour deux facteurs fixes avec interaction.

4.4.7 Calcul simplifié des sommes de carrés

On a, en développant les formules (??) :

$$SCT = \left[\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r y_{ijk}^2 \right] - \frac{y_{...}^2}{abr} \quad (4.23)$$

$$SC_A = \left[\sum_{i=1}^a \frac{y_{i..}^2}{br} \right] - \frac{y_{...}^2}{abr} \quad (4.24)$$

$$SC_B = \left[\sum_{j=1}^b \frac{y_{.j.}^2}{ar} \right] - \frac{y_{...}^2}{abr} \quad (4.25)$$

Il est commode de calculer SC_{AB} en deux temps. On calcule d'abord la somme des carrés entre les ab cases du tableau 4.1, somme des carrés intercases que l'on notera SC_{inter}

$$SC_{inter} = \left[\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{y_{ij.}^2}{r} \right] - \frac{y_{...}^2}{abr} \quad (4.26)$$

Puis, comme cette SC_{inter} contient aussi SC_A et SC_B , on a donc :

$$SC_{AB} = SC_{inter} - SC_A - SC_B \quad (4.27)$$

Enfin on obtient SCR par soustraction :

$$SCR = SCT - SC_{AB} - SC_A - SC_B \quad (4.28)$$

Remarques

- Le terme $y_{...}^2/abr$, terme de centrage, est appelé terme correctif dans les ouvrages de langue anglaise où SCT est appelée "corrected total".
- On remarque que l'analyse de variance est totalement indépendante du codage des modalités quant au calcul des sommes de carrés.

4.4.8 Analyse des résidus

Sur ce point aussi on renvoie le lecteur à un cours complet sur la régression ou l'analyse de variance, où on trouve les analyses globales sur les résidus, ainsi que les analyses particulières. Les premières permettent de vérifier la distribution des résidus et leurs éventuelles corrélations (non souhaitées) avec des termes présents dans le modèle ou d'autres termes supposés. Les secondes permettent de détecter les éventuels outliers dans les données, et même de tester leurs influences individuelles sur les estimations des effets, estimations qu'on aborde maintenant dans le paragraphe suivant.

4.4.9 Estimation des effets des modalités des facteurs

Montrons comment obtenir l'estimation des effets des modalités des facteurs, c-a-d les paramètres du modèle (2.13). Au départ on procède par moindres carrés ordinaires comme si on était face à un problème de régression. La matrice de modèle X prend l'allure d'une matrice d'indicatrices : chaque facteur discret X_j à n_j modalités y étant représenté par n_j indicatrices usuelles (0 pour absence, 1 pour présence). On doit donc minimiser la fonction L suivante :

$$L = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r (\varepsilon_{ijk})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^r (y_{ijk} - \mu - \alpha_i - \beta_j - \gamma_{ij})^2 \quad (4.29)$$

La condition de stationnarité conduit à annuler les dérivées premières de L par rapport aux paramètres μ , α_i , β_j , et γ_{ij} , et sachant par ailleurs que la matrice hessienne formée des dérivées secondes de L par rapport à ces paramètres est définie positive (voir cours de régression), l'annulation des dérivées premières permet bien d'obtenir un minimum de L . En développant et en arrangeant l'ensemble des équations basées sur les dérivées premières annulées, on tombe facilement sur les équations $X^T X \hat{\theta} = X^T y$, dites normales, où $\hat{\theta}$ est le vecteur colonne des estimations $\hat{\mu}$, $\hat{\alpha}_i$, $\hat{\beta}_j$, et $\hat{\gamma}_{ij}$, c-a-d les inconnues recherchées :

$$\mu \rightarrow abr\hat{\mu} + br \sum_{i=1}^a \hat{\alpha}_i + ar \sum_{j=1}^b \hat{\beta}_j + r \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \hat{\gamma}_{ij} = y_{...} \quad (4.30)$$

$$\alpha_i \rightarrow br\hat{\mu} + br\hat{\alpha}_i + r \sum_{j=1}^b \hat{\beta}_j + r \sum_{j=1}^b \hat{\gamma}_{ij} = y_{i..} \quad ; \quad i = 1, \dots, a \quad (4.31)$$

$$\beta_j \rightarrow ar\hat{\mu} + ar\hat{\beta}_j + r \sum_{i=1}^a \hat{\alpha}_i + r \sum_{i=1}^a \hat{\gamma}_{ij} = y_{.j.} \quad ; \quad j = 1, \dots, b \quad (4.32)$$

$$\gamma_{ij} \rightarrow r\hat{\mu} + r\hat{\alpha}_i + r\hat{\beta}_j + r\hat{\gamma}_{ij} = y_{ij.} \quad ; \quad \begin{cases} i = 1, \dots, a \\ j = 1, \dots, b \end{cases} \quad (4.33)$$

Le modèle (2.13) comportant $1 + a + b + ab$ paramètres (inconnues) à estimer on dispose des $1 + a + b + ab$ équations précédentes. Mais on observe que les a équations (4.31) somment à l'équation (4.30), les b équations (4.32) somment à l'équation (4.30), les équations (4.33), pour un i donné, somment à l'équation (4.31), et enfin les équations (4.33), pour un j donné, somment à l'équation (4.32). Ces sommations conduisent à :

$$1 + 1 + a + b - 1 = 1 + a + b$$

équations dépendantes, et donc le système des équations (4.30) à (4.33) ne comporte que ab équations indépendantes. Le modèle est dit **surparamétré** ($X^T X$ n'est pas inversible). Il nous faut donc trouver $1 + a + b$ contraintes pour que le système ait une solution unique. En posant les contraintes (4.13), dont le choix fait au départ se trouve

ainsi fondé très rigoureusement, on obtient le nombre de contraintes nécessaire, soit :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^a \alpha_i &= 0 \implies 1 \\ \sum_{j=1}^b \beta_j &= 0 \implies 1 \\ \sum_{i=1}^a \gamma_{ij} &= 0 ; j = 1, \dots, b \implies b \\ \sum_{j=1}^b \gamma_{ij} &= 0 ; i = 1, \dots, a \implies a \end{aligned}$$

c-a-d un total de $1 + 1 + a + b$ auquel il faut retrancher 1 car une contrainte est comptée deux fois dans les termes d'interaction, soit finalement $1 + a + b$ contraintes.

Par exemple, pour l'interaction entre deux facteurs, l'un à quatre niveaux ($a = 3$) et l'autre à trois niveaux ($b = 4$), on obtiendra :

$$\begin{aligned} \gamma_{11} + \gamma_{21} + \gamma_{31} + \gamma_{41} &= 0 \\ \gamma_{12} + \gamma_{22} + \gamma_{32} + \gamma_{42} &= 0 \\ \gamma_{13} + \gamma_{23} + \gamma_{33} + \gamma_{43} &= 0 \\ \gamma_{11} + \gamma_{12} + \gamma_{13} &= 0 \\ \gamma_{21} + \gamma_{22} + \gamma_{23} &= 0 \\ \gamma_{31} + \gamma_{32} + \gamma_{33} &= 0 \\ \gamma_{41} + \gamma_{42} + \gamma_{43} &= 0 \end{aligned}$$

En appliquant ces contraintes au système des équations (4.30) à (4.33) on exhibe immédiatement les solutions :

$$\begin{aligned} \hat{\mu} &= \bar{y}_{...} \\ \hat{\alpha}_i &= \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...} ; i = 1, \dots, a \\ \hat{\beta}_j &= \bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...} ; j = 1, \dots, b \\ \hat{\gamma}_{ij} &= \bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...} ; \left\{ \begin{array}{l} i = 1, \dots, a \\ j = 1, \dots, b \end{array} \right\} \end{aligned}$$

On remarque le fort aspect intuitif de ces solutions :

- l'effet d'une modalité i du facteur "ligne" est estimé par la moyenne des résultats de la ligne i à laquelle on a ôté la moyenne générale,
- l'effet d'une modalité j du facteur "colonne" est estimé par la moyenne des résultats de la colonne j à laquelle on a ôté la moyenne générale,
- l'effet du terme d'interaction γ_{ij} est estimé par la moyenne de la case à laquelle on a ôté la moyenne générale et aussi les moyennes marginales correspondantes.

A titre d'illustration, les moyennes marginales apparaissent sur le tableau 3×3 suivant :

			$\bar{y}_{1..}$
			$\bar{y}_{2..}$
			$\bar{y}_{3..}$
$\bar{y}_{.1.}$	$\bar{y}_{.2.}$	$\bar{y}_{.3.}$	$\bar{y}_{...}$

Une valeur prédite (on devrait dire reconstituée car on ne cherche pas à faire de la prédiction au sens commun du terme) s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \hat{y}_{ijk} &= \hat{\mu} + \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_j + \hat{\gamma}_{ij} & (4.34) \\
 &= \bar{y}_{...} + (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...}) \\
 &= \bar{y}_{ij.}
 \end{aligned}$$

Remarque importante :

Les estimations des paramètres du modèle obtenues à partir du système des équations (4.30) à (4.33) sous les contraintes (4.13), sont uniques, **mais** seront différentes si on adopte un autre système de contraintes que (4.13). Cependant, certaines fonctions des paramètres sont dites estimables, les **fonctions estimables de base**, c-a-d estimables de façon unique, indépendamment du système de contraintes choisi : ce sont des combinaisons linéaires de moyennes.

4.4.10 Cas d'une seule observation par case ($r = 1$)

Cette situation est fréquente, notamment quand les expériences sont très chères ou difficiles à réaliser. Montrons alors que les termes d'interaction γ_{ij} ne sont pas accessibles.

La table d'analyse de variance s'écrit alors comme au tableau 4.7.

Source	SC	ddl	CM	$E(CM)$
A	$SC_A = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i.}^2}{a} - \frac{y_{..}^2}{ab}$	$a - 1$	$CM_A = \frac{SC_A}{a-1}$	$\sigma^2 + \frac{b \sum \alpha_i^2}{a-1}$
B	$SC_B = \sum_{j=1}^b \frac{y_{.j}^2}{b} - \frac{y_{..}^2}{ab}$	$b - 1$	$CM_B = \frac{SC_B}{b-1}$	$\sigma^2 + \frac{a \sum \beta_j^2}{b-1}$
Erreur	SCR (par soustraction)	$(a - 1)(b - 1)$	$CMR = \frac{SCR}{(a-1)(b-1)}$	$\sigma^2 + \frac{\sum \sum \gamma_{ij}^2}{(a-1)(b-1)}$
Total	SCT	$ab - 1$		

Tableau 4.7. Table d'analyse de la variance pour deux facteurs fixes sans interaction.

Si on compare à l'équation (??) on observe au tableau 4.7 que σ^2 n'est plus estimable maintenant : l'effet de l'interaction et l'erreur ne peuvent plus être séparées. Donc pour faire des tests sur les effets (principaux) des facteurs il faut supposer que l'effet de l'interaction est nul, et ainsi le modèle postulé dans cette situation, où $r = 1$, doit être :

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (4.35)$$

et alors le *CMR* du tableau 4.7 sera une estimation sans biais de σ^2 , ce qui conduira à pouvoir réaliser des tests des effets principaux en comparant CM_A et CM_B à *CMR*.

Toutefois dans cette situation particulière un test a été développé par Tukey (1949), le test de non-additivité, pour aider à déterminer l'éventuelle présence d'une interaction, en supposant malgré tout une forme simple telle :

$$\gamma_{ij} = K\alpha_i\beta_j$$

où K est une constante inconnue. En définissant ainsi le terme d'interaction on peut utiliser une approche de régression pour tester sa significativité. Le test de Tukey revient à partitionner la *SCR* en une composante à un seul ddl, due à la non-additivité (interaction) et une composante pour l'erreur à $(a-1)(b-1) - 1$ ddl. La somme des carrés relative à la non-additivité, notée SC_N , s'écrit :

$$SC_N = \frac{\left[\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b y_{ij}y_{i..}y_{.j} - y_{..} \left(SC_A + SC_B + \frac{y_{..}^2}{ab} \right) \right]^2}{abSC_A SC_B} \quad (4.36)$$

et :

$$SC_{erreur} = SCR - SC_N \quad (4.37)$$

Pour le test il suffit de comparer la valeur observée

$$\mathcal{F}_{obs} = \frac{SC_N}{SC_{erreur} / [(a-1)(b-1) - 1]} \quad (4.38)$$

au fractile $\mathcal{F}(1, (a-1)(b-1) - 1; \alpha)$.

4.4.11 Comparaisons multiples

Quand l'analyse de variance conduit à rejeter au moins une des hypothèses H_0 indiquées en (2.29), on sait seulement qu'un des effets d'une modalité, par exemple du facteur A , est différent de zéro. Pour aller plus loin dans l'analyse il faut faire des comparaisons entre les effets des modalités de ce facteur, soit par paires, soit par des comparaisons dites multiples, soit encore par rapport à l'effet d'une modalité témoin (test de Dunnett). Plusieurs méthodes de comparaisons multiples de moyennes existent, on renvoie le lecteur à un cours complet sur l'analyse de variance pour avoir une présentation des différentes méthodes. Toutefois, nous montrons sur l'exemple du §4.5.4 une application de l'une d'entre elles, la méthode REGWQ.

4.4.12 Conclusion sur l'analyse de variance

Dans l'exposé de cette méthode nous n'avons pas évoqué les modèles d'analyse de variance où sont présents simultanément des effets de facteurs fixes et des effets de facteurs aléatoires, pour lesquels les modalités choisies dans le plan d'expériences sont des modalités aléatoirement sélectionnées dans un ensemble infini (ou un grand ensemble).

Rappelons, dans le cadre d'une mise au point de dosage biologique par plan d'expériences, l'exemple d'un facteur "laboratoire d'analyses biologiques", facteur de nuisance d'ailleurs, pour lequel 10 laboratoires seront choisis aléatoirement parmi les centaines de laboratoire existants dans un pays donné. Dans une telle étude, l'effet sujet sera aussi un facteur déclaré aléatoire dans le modèle d'analyse de variance.

Par ailleurs, nous n'avons pas développé l'aspect puissance des tests en fonction de r , ou bien le calcul de r pour un pouvoir discriminant, entre les modalités, choisi a priori.

Pour combler ces deux lacunes on renvoie le lecteur au chapitre 7 de Montgomery (1991). On présente maintenant un exemple de traitement par analyse de variance d'un plan 3^2 .

4.5 Exemple d'analyse des résultats d'un plan 3^2

4.5.1 Les données

On mesure les résultats d'une réponse continue suite à la réalisation d'un plan factoriel complet à 3 modalités pour deux facteurs discrets, chaque expérience étant répétée 4 fois pour chaque combinaison (chaque case). On peut utiliser le code Factex24 suivant pour créer le plan :

```

/***** FACTEX24.SAS *****/;
proc factex;
  factors A B/nlev=3;
  output out=plan
    pointrep=4
    A cvals=('A1' 'A2' 'A3')
    B cvals=('B1' 'B2' 'B3');
run;
/*****/;

```

Commentaire :

- La commande "pointrep" permet de répéter l'expérience, ici quatre répétitions sont demandées.

On dispose des 36 résultats donnés au tableau 4.8.

A/B	B			$y_{i..}$
	1	2	3	
1	130, 155, 74, 180 → 539	34, 40, 80, 75 → 229	20, 70, 82, 58 → 230	998
2	150, 188, 159, 126 → 623	136, 122, 106, 115 → 479	25, 70, 58, 45 → 198	1300
3	138, 110, 168, 160 → 576	174, 120, 150, 139 → 583	96, 104, 82, 60 → 342	1501
$y_{.j.}$	1738	1291	770	3799 = $y_{...}$

Tableau 4.8. Résultats du plan (les totaux par case apparaissent à droite des flèches).

Après saisie des résultats de la réponse et concaténation avec le plan comme suit :

```
/*******/;
data rep; input y @@; datalines;
130 155 74 180 34 40 80 75 20 70 82 58 150 188 159 126 136 122
106 115 25 70 58 45 138 110 168 160 174 120 150 139 96 104 82 60
;

data total; merge plan rep;
proc print data=total;
run;
/*******/;
```

on obtient la sortie suivante :

```
*****
 1   A1   B1   130
 2   A1   B1   155
 3   A1   B1    74
 4   A1   B1   180
 5   A1   B2    34
 6   A1   B2    40
 7   A1   B2    80
 8   A1   B2    75
 9   A1   B3    20
10   A1   B3    70
11   A1   B3    82
12   A1   B3    58
13   A2   B1   150
14   A2   B1   188
15   A2   B1   159
16   A2   B1   126
17   A2   B2   136
18   A2   B2   122
19   A2   B2   106
20   A2   B2   115
21   A2   B3    25
22   A2   B3    70
23   A2   B3    58
```

24	A2	B3	45
25	A3	B1	138
26	A3	B1	110
27	A3	B1	168
28	A3	B1	160
29	A3	B2	174
30	A3	B2	120
31	A3	B2	150
32	A3	B2	139
33	A3	B3	96
34	A3	B3	104
35	A3	B3	82
36	A3	B3	60

4.5.2 Analyse de variance

En utilisant les formules (4.23) à (4.28) le calcul des différentes sommes de carrés est le suivant :

$$\begin{aligned}
SCT &= (130)^2 + (155)^2 + \dots + (60)^2 - \frac{3799^2}{36} = 77646.97 \\
SC_A &= \frac{998^2 + 1300^2 + 1501^2}{3 \times 4} - \frac{3799^2}{36} = 10683.72 \\
SC_B &= \frac{1738^2 + 1291^2 + 770^2}{3 \times 4} - \frac{3799^2}{36} = 39118.72 \\
SC_{AB} &= \frac{539^2 + 229^2 + \dots + 342^2}{4} - \frac{3799^2}{36} - 10683.72 - 39118.72 \\
&= 9613.78 \\
SCR &= 77646.97 - 10683.72 - 39118.72 - 9613.78 = 18230.75
\end{aligned}$$

qui conduit à la table du tableau 4.9.

Source de variation	SC	ddl	CM	F_{obs}
Facteur A	10683.72	2	5341.86	7.91
Facteur B	39118.72	2	19559.36	28.97
Interaction $A \times B$	9613.78	4	2403.44	3.56
Erreur	18230.75	27	675.21	
Total	77646.97	35		$F(2, 27; 0.05) = 3.35$

Tableau 4.9. Table de l'analyse de la variance de l'exemple.

Il en résulte que les deux facteurs et leur interaction sont significatifs, au risque $\alpha = 5\%$ de se tromper.

On peut obtenir ces résultats avec le code SAS suivant :

```

/***** GLMO2.SAS *****/;
proc glm data=total;
  class A B ;
  model y=A|B@2/ss1;
quit;run;
/*****/;

```

qui conduit à la sortie :

```

*****
Dependent Variable: y

Source                DF          Sum of
                    Squares      Mean Square  F Value  Pr > F

Model                 8          59416.22222  7427.02778   11.00   <.0001
Error                27          18230.75000   675.21296
Corrected Total      35          77646.97222

R-Square             Coeff Var      Root MSE      y Mean
0.765210             24.62372      25.98486      105.5278

Source                DF          Type I SS      Mean Square  F Value  Pr > F

A                     2          10683.72222    5341.86111    7.91    0.0020
B                     2          39118.72222   19559.36111   28.97   <.0001
A*B                   4           9613.77778    2403.44444    3.56    0.0186
*****

```

Commentaire :

- On observe bien les ddl annoncés dans la partie table d'analyse de la variance : 2 pour chacun des effets principaux des facteurs, et quatre pour l'interaction (généralisée), soit 8 au total pour le modèle.

L'illustration de l'interaction significative peut se faire avec le graphique de la figure 4.1 obtenu avec le code SAS suivant :

```

/*****GRAFO1.SAS*****/;
data graf; input A $ B $ ymoy; datalines;
A1 B1 134.75
A1 B2 57.25
A1 B3 57.50
A2 B1 155.75
A2 B2 119.75
A2 B3 49.50
A3 B1 144
A3 B2 145.75
A3 B3 85.50
;
data moda1; set graf;
if A ^= 'A1' then delete;
rename ymoy=ymoya1;

data moda2; set graf;
if A ^= 'A2' then delete;
rename ymoy=ymoya2;

data moda3; set graf;
if A ^= 'A3' then delete;
rename ymoy=ymoya3;

data total;
merge moda1(keep=B ymoya1) moda2(keep=ymoya2) moda3(keep=ymoya3);

proc print data=total;
run; quit; run;

data label;
xsys='1' ; ysys='20';
x=80 ; size=2;
position='2';
function = 'LABEL';
style='swissb';
y=90; color='black'; text='A3'; output;
y=60; color='black'; text='A2'; output;
y=45; color='black'; text='A1'; output;

options device=win reset=global gunit=pct border reset=axis

```

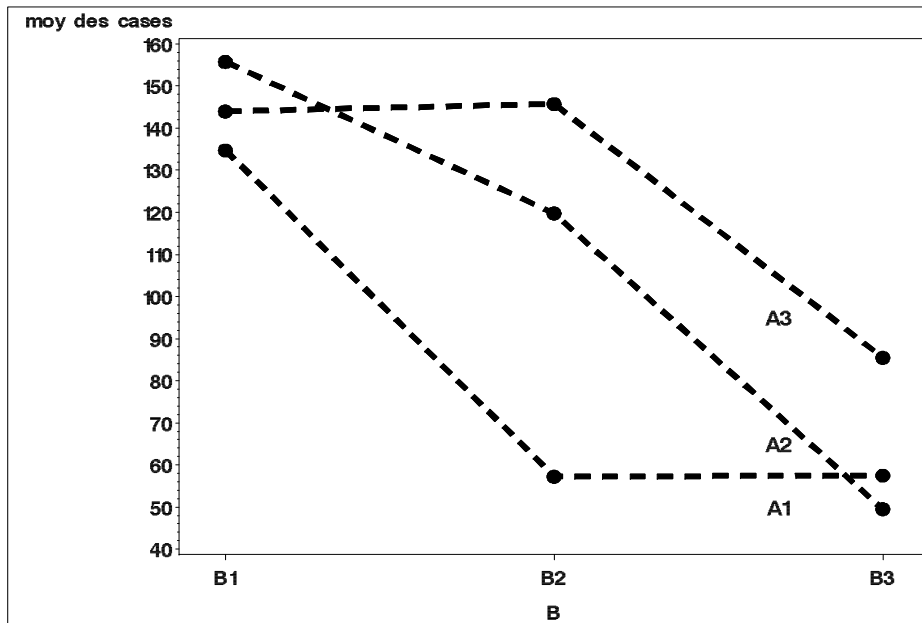



FIG. 4.1 – Illustration de l'interaction des 2 facteurs discrets (d'où les lignes pointillées et non pas pleines comme pour les facteurs continus) à 3 modalités.

```

      ftext=swissb htitle=4 htext=3;
symbol1 interpol=join c=black value=dot height=4 width=6 line=3;
symbol2 interpol=join c=black value=dot height=4 width=6 line=3;
symbol3 interpol=join c=black value=dot height=4 width=6 line=3;

axis1 value=('B1' 'B2' 'B3') offset=(5);
axis2 label=('moy des cases') ;

run; quit; run;

proc gplot data=total;
  plot ymoya1*B ymoya2*B ymoya3*B/
      overlay haxis=axis1 vaxis=axis2 frame annotate=label;
run;quit;run;
/*****/;

```

L'effet de l'interaction se traduit par le non-parallélisme des segments pointillés de la figure 4.1.

4.5.3 Calcul des estimations des effets des modalités des facteurs

On peut obtenir ces estimations avec le code SAS suivant :

```

/***** GLMO2.SAS *****/;
proc glm data=total;
  class A B ;
  model y=A|B@2/ss1 solution;
quit;run;
/*****/;

```

Commentaire :

– Il suffit de rajouter l'option "solution" dans l'instruction "model"

On donne ci-dessous uniquement l'extrait de la sortie correspondant à l'option "solution" :

```

*****

```

Parameter		Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept		85.50000000 B	12.99243013	6.58	<.0001
A	A1	-28.00000000 B	18.37407090	-1.52	0.1392
A	A2	-36.00000000 B	18.37407090	-1.96	0.0605
A	A3	0.00000000 B	.	.	.
B	B1	58.50000000 B	18.37407090	3.18	0.0036
B	B2	60.25000000 B	18.37407090	3.28	0.0029
B	B3	0.00000000 B	.	.	.
A*B	A1 B1	18.75000000 B	25.98486026	0.72	0.4768
A*B	A1 B2	-60.50000000 B	25.98486026	-2.33	0.0276
A*B	A1 B3	0.00000000 B	.	.	.
A*B	A2 B1	47.75000000 B	25.98486026	1.84	0.0771
A*B	A2 B2	10.00000000 B	25.98486026	0.38	0.7034
A*B	A2 B3	0.00000000 B	.	.	.
A*B	A3 B1	0.00000000 B	.	.	.
A*B	A3 B2	0.00000000 B	.	.	.
A*B	A3 B3	0.00000000 B	.	.	.

NOTE: The X'X matrix has been found to be singular, and a generalized inverse was used to solve the normal equations. Terms whose estimates are followed by the letter 'B' are not uniquely estimable.

```

*****

```

Commentaire :

- Grâce à l'approche régression (avec utilisation d'inverse généralisée) de l'analyse de variance de la procédure GLM, on obtient des estimations des effets de toutes les modalités des facteurs, et aussi des estimations de chaque compartiment de l'interaction généralisée : $A_1B_1, A_1B_2, A_1B_3, \dots, A_3B_3$.
- L'utilisation de l'inverse généralisée conduit à des estimations nulles pour certaines modalités.
- Cependant on constate que, pour estimer les paramètres (les effets des modalités), GLM choisit comme contraintes de mettre une modalité à zéro pour chaque paramètre (ici la dernière) au lieu d'imposer à zéro la somme des modalités comme indiqué au §4.4.2. Le système de contraintes proposé par GLM est tout à fait licite mais conduira à des estimations différentes. On rappelle en effet que ces paramètres ne sont pas estimables de façon unique, on renvoie à la remarque du §4.4.10.
- Enfin, GLM utilise quand même la contrainte de la somme à zéro des modalités mais seulement pour réaliser les tests.

Finalement, on peut écrire le modèle estimé de façon condensée comme :

$$\hat{y} = 85.0 + \begin{bmatrix} \hat{\alpha}_1 = -28 \\ \hat{\alpha}_2 = -36 \\ \hat{\alpha}_3 = 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\beta}_1 = 58.50 \\ \hat{\beta}_2 = 60.25 \\ \hat{\beta}_3 = 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\gamma}_{11} = 18.75 & \hat{\gamma}_{12} = -60.50 & \hat{\gamma}_{13} = 0 \\ \hat{\gamma}_{21} = 47.75 & \hat{\gamma}_{22} = 10.00 & \hat{\gamma}_{23} = 0 \\ \hat{\gamma}_{31} = 0 & \hat{\gamma}_{32} = 0 & \hat{\gamma}_{33} = 0 \end{bmatrix}$$

4.5.4 Comparaison des modalités des facteurs

Comme annoncé au §4.4.8 cette comparaison se fait par les techniques de comparaisons de moyennes. Avec la méthode REGWQ disponible dans la procédure, que l'on obtient en rajoutant la ligne suivante dans le code GLM02 précédent :

```

/*****/;
means A B/regwq;
/*****/;

```

on obtient la sortie suivante :

```

*****
Ryan-Einot-Gabriel-Welsch Multiple Range Test for y

NOTE: This test controls the Type I experimentwise error rate.

Alpha                                0.05

```

Error Degrees of Freedom	27
Error Mean Square	675.213

Number of Means	2	3
Critical Range	21.766382	26.302344

Means with the same letter are not significantly different.

	Mean	N	A
A	125.08	12	A3
A			
A	108.33	12	A2
B	83.17	12	A1

The GLM Procedure

Ryan-Einot-Gabriel-Welsch Multiple Range Test for y

NOTE: This test controls the Type I experimentwise error rate.

Alpha	0.05
Error Degrees of Freedom	27
Error Mean Square	675.213

Number of Means	2	3
Critical Range	21.766382	26.302344

Means with the same letter are not significantly different.

	Mean	N	B
A	144.83	12	B1
B	107.58	12	B2

Commentaire :

- *On conclut au vu de cette sortie que les effets des deux modalités A1 et A2 du facteur A sont équivalents, tandis que l'effet de la modalité A3 est significativement plus faible d'une part, et que les trois modalités du facteur B ont des effets significativement différents d'autre part.*

4.5.5 Calcul des estimation des effets des facteurs

On peut aussi s'intéresser à des estimations, non pas des modalités elles-mêmes comme on l'a vu plus haut, mais des effets (globaux) des facteurs. Pour ce faire on peut utiliser la formule (4.9) pour le facteur A, et les formules analogues pour le facteur B et l'interaction AB. Pour des facteurs qualitatifs l'utilisation de la formule (4.11) n'a guère de sens, mais on peut l'utiliser pour des facteurs continus (voir chapitre 10).

4.6 Le plan factoriel complet 3^3

On ne détaillera pas la construction du plan 3^3 car elle procède du même principe que le plan 3^2 ; on résume ci-dessous les termes relatifs aux 26 colonnes de sa matrice de modèle :

- les termes relatifs aux effets principaux des 3 facteurs A, B, C sont représentés par les colonnes A, B, C, A^2, B^2, C^2 , soit deux ddl attachés à chaque effet principal de facteur,
- les termes relatifs à l'interaction généralisée de A avec B sont représentés par les colonnes AB, A^2B, AB^2 , et A^2B^2 , soit quatre ddl attachés à cette interaction généralisée $A * B$,
- les termes relatifs à l'interaction généralisée de A avec C sont représentés par les colonnes AC, A^2C, AC^2 , et A^2C^2 , soit quatre ddl attachés à cette interaction généralisée $A * C$,
- les termes relatifs à l'interaction généralisée de B avec C sont représentés par les colonnes BC, B^2C, BC^2 , et B^2C^2 , soit quatre ddl attachés à cette interaction généralisée $B * C$,
- les termes relatifs à l'**interaction triple généralisée** entre A, B et C sont représentés par les colonnes $ABC, A^2BC, AB^2C, ABC^2, AB^2C^2, A^2B^2C, A^2BC^2, A^2B^2C^2$, soit huit ddl attachés à cette interaction triple généralisée $A * B * C$.

4.7 Formule générale pour le 3^p

Pour un plan 3^p on pourra estimer l'effet $\hat{e}(\cdot)$ correspondant à chaque colonne de la matrice de modèle avec la formule générale suivante, où chaque facteur est noté X_j :

$$\hat{e}(X_1^{u_1} X_2^{u_2} \dots X_p^{u_p}) = \frac{1}{3^p} \sum_{X_1, \dots, X_p} \overline{X_1^{u_1} X_2^{u_2} \dots X_p^{u_p}} y(X_1, \dots, X_p) \quad (4.39)$$

avec $u_1, \dots, u_p = 0$, ou 1, ou 2.

Les exposants non nuls indiquent la nature de l'effet factoriel considéré. Par exemple, les effets associés aux 4 ddl de l'interaction entre les facteurs A et B sont $e(AB)$, $e(A^2B)$, $e(AB^2)$, $e(A^2B^2)$. En outre, comme $A^2 = A^{-1}$ on peut remplacer les exposants 2 par des -1 et écrire par exemple $e(A^{-1}BC^{-1})$ au lieu de $e(A^2BC^2)$. On remarque aussi que, par exemple, les effets $e(A^a B^b C^c)$ et $e(A^{-a} B^{-b} C^{-c})$ sont conjugués : on peut donc les combiner pour former deux effets factoriels réels appartenant à la même interaction.

4.8 Le plan factoriel fractionnaire 3^{p-k}

On le notera plan 3^{p-k} , et on examinera d'abord le premier fractionnement possible, à savoir le fractionnement du plan 3^3 en trois fractions 3^{3-1} de neuf expériences chacune. On étudiera le fractionnement avec les deux codages multiplicatif (par racines cubiques de l'unité), puis additif.

4.8.1 Fractionnement du plan 3^3 avec le codage multiplicatif

Fraction I

Posons l'équation de concomitance $C = AB$. En multipliant les deux membres par C , on obtient :

$$C^2 = ABC$$

et encore une fois par C , et comme $C^3 = 1$ (racines cubiques de l'unité), on obtient le générateur :

$$I_1 = ABC^2$$

Ce générateur conduit donc aux équations de concomitance suivantes :

$$\begin{aligned} A &= B^2C \\ B &= A^2C \\ C &= AB \\ C^2 &= A^2B^2; AC = A^2B; AB^2 = BC; AB = A^2B^2C^2, \dots \end{aligned}$$

Le point important est que les colonnes A , A^2 , B , B^2 , C , C^2 constitutives des effets principaux respectifs de A , B et C sont orthogonales entre elles : la fraction sera de

résolution (généralisée) III. Cette fraction, appelée la fraction I, est donnée au tableau 4.10; elle est construite en sélectionnant dans le plan complet 3^3 les expériences telles que $C = AB$.

exp	A	B	C
1	1	1	1
2	j	1	j
3	j^2	1	j^2
4	1	j	j
5	j	j	j^2
6	j^2	j	1
7	1	j^2	j^2
8	j	j^2	1
9	j^2	j^2	j

Tableau 4.10. Fraction I du plan 3^3 obtenue par l'équation de concomitance $C = AB$.

En écrivant cette fraction comme suit :

A/B	Facteur A		
Facteur B	1	j	j^2
1	1	j	j^2
j	j	j^2	1
j^2	j^2	1	j

Tableau 4.11. Carré latin 3×3 .

on verra au chapitre suivant que les neuf cases du tableau 4.11 forment un carré latin 3×3 .

Fraction II

Posons l'équation de concomitance $C = jAB$. En multipliant les deux membres par C , on obtient :

$$C^2 = jABC$$

et encore une fois par C , on obtient le générateur :

$$I_2 = jABC^2$$

Ce générateur conduit donc aux équations de concomitance suivantes :

$$\begin{aligned} A &= j^2 B^2 C \\ B &= j^2 A^2 C \\ C &= jAB \\ A^2 &= jBC^2; B^2 = jAC^2, C^2 = jAB^2, \dots \end{aligned}$$

Le point important est que les colonnes A, A^2, B, B^2, C, C^2 constitutives des effets principaux respectifs de A, B et C sont orthogonales entre elles : la fraction sera de résolution (généralisée) III. Cette fraction, appelée la fraction II, est donnée au tableau 4.12, elle est construite en sélectionnant dans le plan complet 3^3 les expériences telles que $C = jAB$.

exp	A	B	C
1	1	1	j
2	j	1	j^2
3	j^2	1	1
4	1	j	j^2
5	j	j	1
6	j^2	j	j
7	1	j^2	1
8	j	j^2	j
9	j^2	j^2	j^2

Tableau 4.12 Fraction II du plan 3^3 obtenue par l'équation de concomitance $C = jAB$.

En écrivant cette fraction comme suit :

A/B	Facteur A		
Facteur B	1	j	j^2
1	j	j^2	1
j	j^2	1	j
j^2	1	j	j^2

Tableau 4.13. Carré latin 3×3 .

on verra au chapitre suivant que les neuf cases du tableau 4.13 forment un autre carré latin 3×3 .

Fraction III

Posons l'équation de concomitance $C = j^2AB$. En multipliant les deux membres par C , on obtient :

$$C^2 = j^2ABC$$

et encore une fois par C , on obtient le générateur :

$$I_3 = j^2ABC^2$$

Ce générateur conduit donc aux équations de concomitance suivantes :

$$\begin{aligned} A &= j^2 A^2 B C^2 \\ B &= j^2 A B^2 C^2 \\ C &= j^2 A B \\ A^2 &= j^2 B C^2; B^2 = j^2 A C^2, C^2 = j^2 A^2 B, \dots \end{aligned}$$

Le point important est que les colonnes A , A^2 , B , B^2 , C , C^2 constitutives des effets principaux respectifs de A , B et C sont orthogonales entre elles : la fraction sera de résolution (généralisée) III. Cette fraction, appelée la fraction III, est donnée au tableau 4.14, elle est construite en sélectionnant dans le plan complet 3^3 les expériences telles que $C = j^2 A B$.

exp	A	B	C
1	1	1	j^2
2	j	1	1
3	j^2	1	j
4	1	j	1
5	j	j	j
6	j^2	j	j^2
7	1	j^2	j
8	j	j^2	j^2
9	j^2	j^2	1

Tableau 4.14 Fraction III du plan 3^3 obtenue par l'équation de concomitance $C = j^2 A B$.

En écrivant la fraction comme suit :

A/B	Facteur A		
Facteur B	1	j	j^2
1	j^2	1	j
j	1	j	j^2
j^2	j	j^2	1

Tableau 4.15. Carré latin 3×3 .

on verra au chapitre suivant que les neuf cases du tableau 4.15 forment un autre carré latin 3×3 .

Finalement les modalités 1, j , j^2 jouent un rôle équivalent aux niveaux -1 et $+1$ lors de la construction des fractions.

4.8.2 Fractionnement du plan 3^3 avec le codage additif

Posons l'équation de concomitance $C = 2A + 2B$. En additionnant C aux deux membres on obtient :

$$2C = 2A + 2B + C$$

et encore une fois C , on obtient le générateur :

$$0_1 = 2A + 2B + 2C$$

ou plus simplement :

$$0_1 = A + B + C$$

Ce générateur conduit donc aux équations de concomitance suivantes :

$$\begin{aligned} A &= 2B + 2C \\ B &= 2A + 2C \\ C &= 2A + 2B \\ 2A + B &= A + 2C = 2B + C \\ A + 2B &= 2A + C = B + 2C \end{aligned}$$

Bien entendu on retrouve une résolution III pour la fraction correspondante donnée au tableau 4.16.

exp	A	B	C
1	0	0	0
2	0	1	2
3	0	2	1
4	1	0	2
5	1	1	1
6	1	2	0
7	2	0	1
8	2	1	0
9	2	2	2

Tableau 4.16. Fraction III du plan 3^3 obtenue par l'équation de concomitance $C = 2A + 2B$.

On obtiendra de façon analogue les autres fractions.

4.8.3 La fraction 3^{13-10} de résolution III

A titre d'exemple, avec le codage multiplicatif par les racines cubiques de l'unité on peut obtenir le fractionnement du plan complet (gigantesque) 3^{10} en une fraction de 27 expériences de résolution III qui permet d'étudier jusqu'à 13 facteurs à 3 niveaux chacun. Ce type de fraction, utilisable en criblage de facteurs, est l'équivalent d'une

matrice d'Hadamard pour les facteurs à deux niveaux, vue au chapitre 3. On donne cette fraction au tableau 4.17.

<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	<i>H</i>	<i>I</i>	<i>J</i>	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
<i>j</i>	1	1	1	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>
<i>j</i> ²	1	1	1	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²
1	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i>	1	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²
<i>j</i>	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	1	1
<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	1	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>
1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>
<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	1	1	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²
<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	1	1	1
1	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²
<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1
<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>
1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>
<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²
<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	1	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1
1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1
<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	1	<i>j</i>
<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i>	1	<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	1	<i>j</i>	<i>j</i> ²
1	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>
<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²
<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1
1	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1
<i>j</i>	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>
<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²
1	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²
<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1
<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i> ²	<i>j</i>	1	<i>j</i>	1	<i>j</i>	1	<i>j</i> ²	1	<i>j</i> ²	<i>j</i>

Tableau 4.17. Fraction 3^{13-10} à 27 expériences de résolution III.

On donne au tableau 4.18 les confusions entre les interactions des 3 facteurs de base *A*, *B* et *C*, avec tous les facteurs de complément étudiés :

$D = BC$	$E = BC^2$	$F = AC$	$G = AC^2$	$H = AB$
$I = ABC$	$J = ABC^2$	$K = AB^2$	$L = AB^2C$	$M = AB^2C^2$

Tableau 4.18. Confusions dans la fraction du tableau 4.17.

Avec le code Factex25 suivant :

```

/***** FACTEX25.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1-x13 / nlev=3;
  model resolution=3;
  size design=27;
  output out=resul;
proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

on obtient aussi une fraction de résolution III à 27 expériences, avec le codage additif -1,0,-1 :

```

*****
Obs   x1   x2   x3   x4   x5   x6   x7   x8   x9   x10  x11  x12  x13

```

1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1
3	-1	-1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1
4	-1	0	-1	1	1	1	0	0	0	-1	-1	1	1
5	-1	0	0	0	0	0	-1	-1	-1	1	1	1	1
6	-1	0	1	-1	-1	-1	1	1	1	0	0	1	1
7	-1	1	-1	0	0	0	1	1	1	-1	-1	0	0
8	-1	1	0	-1	-1	-1	0	0	0	1	1	0	0
9	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	0	0	0	0
10	0	-1	-1	1	0	-1	1	0	-1	1	0	1	0
11	0	-1	0	0	-1	1	0	-1	1	0	-1	1	0
12	0	-1	1	-1	1	0	-1	1	0	-1	1	1	0
13	0	0	-1	0	-1	1	-1	1	0	1	0	0	-1
14	0	0	0	-1	1	0	1	0	-1	0	-1	0	-1
15	0	0	1	1	0	-1	0	-1	1	-1	1	0	-1
16	0	1	-1	-1	1	0	0	-1	1	1	0	-1	1
17	0	1	0	1	0	-1	-1	1	0	0	-1	-1	1
18	0	1	1	0	-1	1	1	0	-1	-1	1	-1	1
19	1	-1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	0	1
20	1	-1	0	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	0	1
21	1	-1	1	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1
22	1	0	-1	-1	0	1	1	-1	0	0	1	-1	0
23	1	0	0	1	-1	0	0	1	-1	-1	0	-1	0
24	1	0	1	0	1	-1	-1	0	1	1	-1	-1	0
25	1	1	-1	1	-1	0	-1	0	1	0	1	1	-1
26	1	1	0	0	1	-1	1	-1	0	-1	0	1	-1
27	1	1	1	-1	0	1	0	1	-1	1	-1	1	-1

```

*****

```

On vérifie qu'elle est parfaitement orthogonale.

L'analyse des résultats des plans factoriels fractionnaires à 3 niveaux se fait par analyse de variance, comme pour les plans factoriels complets à 3 niveaux (voir section 4.4), toujours en prenant soin d'attribuer les nombres de degrés de liberté aux différents termes. Pour l'interprétation on se rappellera la structure de confusion pour conclure correctement sur les facteurs et interaction responsables de l'influence sur la réponse.

4.9 Conclusion

A la différence des plans à deux niveaux pour lesquels des fractions de taille raisonnable avec des bonnes résolutions existent, les plans à trois niveaux sont vite décevants quand le nombre de facteurs augmente car la résolution est rarement élevée, disons au moins IV, pour des tailles raisonnables. De fait, dans la pratique, les fractions de plans à trois niveaux sont rarement utilisées, ou bien il faut être dans des situations où l'on est sûr (ou presque) que les interactions sont négligeables.

Chapitre 5

Le plan factoriel asymétrique

5.1 Introduction

Dans ce chapitre on considère le cas où les nombres de niveaux (ou modalités) des facteurs en présence ne sont pas forcément tous identiques pour tous les facteurs – contrairement aux plans des chapitres précédents – le plan factoriel, complet ou fractionnaire, est dit alors **asymétrique**. Comme dans les chapitres précédents, les facteurs étudiés sont tous discrets (on rappelle que des facteurs continus peuvent être discrétisés si besoin est). Si les facteurs sont continus on renvoie le lecteur aux chapitres 10 et 11 plus particulièrement dédiés à ces facteurs.

Même si on peut aborder la situation du plan factoriel asymétrique complet selon deux approches comme on va le voir en section 5.2, la vraie difficulté est de trouver des plans factoriels fractionnaires asymétriques pour des nombres quelconques de niveaux, qui soient à chaque fois optimaux par rapport à des modèles postulés a priori. En effet, une théorie générale n'existe pas pour résoudre ce problème dans tous les cas de figure. Toutefois, pour les nombres mixtes de niveaux suivants : 2 et 3 niveaux, ou 2 et 4 niveaux, ou 3 et 4 niveaux, il existe quelques procédés qui conduisent à des plans efficaces qu'on examinera en section 5.3.

5.2 Plan factoriel complet asymétrique

5.2.1 Facteurs à deux et trois niveaux

Première approche

Lors de cette première approche, la plus naturelle, la construction du plan est immédiate : le plan factoriel complet asymétrique, comme s'il était symétrique, est un plan factoriel complet obtenu par croisement de tous les niveaux, c-a-d que tous les traitements des p facteurs doivent apparaître. Le plan est alors orthogonal. Si on note n_j ($= 2$ ou 3) le nombre de niveaux d'un facteur X_j alors le nombre total d'expériences sera évidemment :

$$N = r(n_1 \times \dots \times n_p)$$

où $r \geq 2$, est le nombre de répétitions d'expériences pour chaque pattern. On considère dans ce chapitre r constant (plan équilibré qui restera donc orthogonal) sur tous les patterns. Ce nombre r peut varier, par exemple dans le cas d'expériences ratées ne conduisant pas à un résultat de la réponse étudiée, mais alors l'analyse de variance à mettre en oeuvre est plus compliquée (voir par exemple Searle, 1987).

Exemple

Examinons l'exemple suivant, tiré de Dagnelie (1977). On veut étudier l'influence de deux facteurs discrets, fixes, la sonde (3 modalités) et le type de sol (2 modalités), sur la teneur en P2O5. Quatre expériences ($r = 4$) sont réalisées pour chacun des 6 traitements, soit 24 résultats enregistrés au total.

Le code SAS suivant permet une analyse de premier niveau :

```
***** GLM03.SAS *****
proc format;
value fsol 1='sol1'
           2='sol2';

proc format;
value fsonde 1='sonde1'
            2='sonde2'
            3='sonde3';

data sonde;
input sol sonde p2o5;
format sol fsol.;
format sonde fsonde.;
cards;
1 1 43
1 1 45
1 1 46
1 1 53
1 2 41
1 2 42
1 2 43
1 2 44
1 3 42
1 3 44
1 3 46
1 3 48
2 1 40
```



```

2 1 40
2 1 40
2 1 43
2 2 35
2 2 37
2 2 40
2 2 40
2 3 37
2 3 39
2 3 40
2 3 40
;

proc print data=sonde;
run;

proc glm data=sonde;
class sol sonde;
model p2o5=sol sonde sol*sonde / solution e3 ;
means sol sonde sol*sonde / regwq lines;
output out=a residual=residu predicted=ycalcule rstudent=rstudent
        h=levier;
run;

data a;set a;
absres=abs(residu);

proc print data=a;
title1 'tableau des resultats';
var sol sonde p2o5 ycalcule residu absres levier rstudent;
run;

proc univariate data=a normal plot;
title1 'Normalite des residus';
var residu;
run;
*****

```

Ce programme conduit à la sortie suivante :

```
*****
```

OBS	SOL	SONDE	P205
1	sol1	sonde1	43
2	sol1	sonde1	45
3	sol1	sonde1	46
4	sol1	sonde1	53
5	sol1	sonde2	41
6	sol1	sonde2	42
7	sol1	sonde2	43
8	sol1	sonde2	44
9	sol1	sonde3	42
10	sol1	sonde3	44
11	sol1	sonde3	46
12	sol1	sonde3	48
13	sol2	sonde1	40
14	sol2	sonde1	40
15	sol2	sonde1	40
16	sol2	sonde1	43
17	sol2	sonde2	35
18	sol2	sonde2	37
19	sol2	sonde2	40
20	sol2	sonde2	40
21	sol2	sonde3	37
22	sol2	sonde3	39
23	sol2	sonde3	40
24	sol2	sonde3	40

General Linear Models Procedure

Dependent Variable: P205

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	5	233.500000	46.700000	7.47	0.0006
Error	18	112.500000	6.250000		
Corrected Total	23	346.000000			

R-Square	C.V.	Root MSE	P205 Mean
0.674855	5.952381	2.50000	42.0000

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
--------	----	-------------	-------------	---------	--------

SOL	1	181.500000	181.500000	29.04	0.0001
SONDE	2	49.000000	24.500000	3.92	0.0386
SOL*SONDE	2	3.000000	1.500000	0.24	0.7891

Parameter	Estimate	T for H0: Parameter=0	Pr > T	Std Error of Estimate
INTERCEPT	39.00000000 B	31.20	0.0001	1.25000000
SOL sol1	6.00000000 B	3.39	0.0032	1.76776695
SOL sol2	0.00000000 B	.	.	.
SONDE sonde1	1.75000000 B	0.99	0.3353	1.76776695
SONDE sonde2	-1.00000000 B	-0.57	0.5786	1.76776695
SONDE sonde3	0.00000000 B	.	.	.
SOL*SONDE sol1 sonde1	0.00000000 B	0.00	1.0000	2.50000000
SOL*SONDE sol1 sonde2	-1.50000000 B	-0.60	0.5560	2.50000000
SOL*SONDE sol1 sonde3	0.00000000 B	.	.	.
SOL*SONDE sol2 sonde1	0.00000000 B	.	.	.
SOL*SONDE sol2 sonde2	0.00000000 B	.	.	.
SOL*SONDE sol2 sonde3	0.00000000 B	.	.	.

NOTE: The X'X matrix has been found to be singular and a generalized inverse was used to solve the normal equations. Estimates followed by the letter 'B' are biased, and are not unique estimators of the parameters.

General Linear Models Procedure

Ryan-Einot-Gabriel-Welsch Multiple Range Test for variable: P205

NOTE: This test controls the type I experimentwise error rate.

Alpha= 0.05 df= 18 MSE= 6.25

Number of Means 2
Critical Range 2.1442451

Means with the same letter are not significantly different.

REGWQ Grouping	Mean	N	SOL
A	44.750	12	sol1
B	39.250	12	sol2

General Linear Models Procedure

Ryan-Einot-Gabriel-Welsch Multiple Range Test for variable: P205

NOTE: This test controls the type I experimentwise error rate.

Alpha= 0.05 df= 18 MSE= 6.25

Number of Means 2 3
Critical Range 2.6261532 3.1902043

Means with the same letter are not significantly different.

REGWQ Grouping	Mean	N	SONDE
A	43.750	8	sonde1
A			
B A	42.000	8	sonde3
B			
B	40.250	8	sonde2

Level of SOL	Level of SONDE	N	-----P205----- Mean	SD
--------------	----------------	---	------------------------	----

sol1	sonde1	4	46.7500000	4.34932945
sol1	sonde2	4	42.5000000	1.29099445
sol1	sonde3	4	45.0000000	2.58198890
sol2	sonde1	4	40.7500000	1.50000000
sol2	sonde2	4	38.0000000	2.44948974
sol2	sonde3	4	39.0000000	1.41421356

tableau des resultats

OBS	SOL	SONDE	P205	YCALCULE	RESIDU	ABSRES	LEVIER	RSTUDENT
1	sol1	sonde1	43	46.75	-3.75	3.75	0.25	-1.84391
2	sol1	sonde1	45	46.75	-1.75	1.75	0.25	-0.80017
3	sol1	sonde1	46	46.75	-0.75	0.75	0.25	-0.33778
4	sol1	sonde1	53	46.75	6.25	6.25	0.25	3.82821
5	sol1	sonde2	41	42.50	-1.50	1.50	0.25	-0.68246
6	sol1	sonde2	42	42.50	-0.50	0.50	0.25	-0.22477
7	sol1	sonde2	43	42.50	0.50	0.50	0.25	0.22477
8	sol1	sonde2	44	42.50	1.50	1.50	0.25	0.68246
9	sol1	sonde3	42	45.00	-3.00	3.00	0.25	-1.42473
10	sol1	sonde3	44	45.00	-1.00	1.00	0.25	-0.45155
11	sol1	sonde3	46	45.00	1.00	1.00	0.25	0.45155
12	sol1	sonde3	48	45.00	3.00	3.00	0.25	1.42473
13	sol2	sonde1	40	40.75	-0.75	0.75	0.25	-0.33778
14	sol2	sonde1	40	40.75	-0.75	0.75	0.25	-0.33778
15	sol2	sonde1	40	40.75	-0.75	0.75	0.25	-0.33778
16	sol2	sonde1	43	40.75	2.25	2.25	0.25	1.04168
17	sol2	sonde2	35	38.00	-3.00	3.00	0.25	-1.42473
18	sol2	sonde2	37	38.00	-1.00	1.00	0.25	-0.45155
19	sol2	sonde2	40	38.00	2.00	2.00	0.25	0.91980
20	sol2	sonde2	40	38.00	2.00	2.00	0.25	0.91980
21	sol2	sonde3	37	39.00	-2.00	2.00	0.25	-0.91980
22	sol2	sonde3	39	39.00	0.00	0.00	0.25	0.00000
23	sol2	sonde3	40	39.00	1.00	1.00	0.25	0.45155
24	sol2	sonde3	40	39.00	1.00	1.00	0.25	0.45155

Normalite des residus

Univariate Procedure

Variable=RESIDU

Moments

N	24	Sum Wgts	24
Mean	0	Sum	0
Std Dev	2.211629	Variance	4.891304
Skewness	0.779351	Kurtosis	1.441289
USS	112.5	CSS	112.5
CV	.	Std Mean	0.451447
T:Mean=0	0	Pr> T	1.0000
Num ^= 0	23	Num > 0	10
M(Sign)	-1.5	Pr>= M	0.6776
Sgn Rank	-4	Pr>= S	0.9061
W:Normal	0.953855	Pr<W	0.3351

Quantiles(Def=5)

100% Max	6.25	99%	6.25
75% Q3	1.25	95%	3
50% Med	-0.625	90%	2.25
25% Q1	-1.25	10%	-3
0% Min	-3.75	5%	-3
		1%	-3.75
Range	10		
Q3-Q1	2.5		
Mode	-0.75		

Extremes

Lowest	Obs	Highest	Obs
-3.75(1)	2(19)
-3(17)	2(20)
-3(9)	2.25(16)
-2(21)	3(12)
-1.75(2)	6.25(4)

Stem Leaf	#	Boxplot
6 2	1	0
5		

```

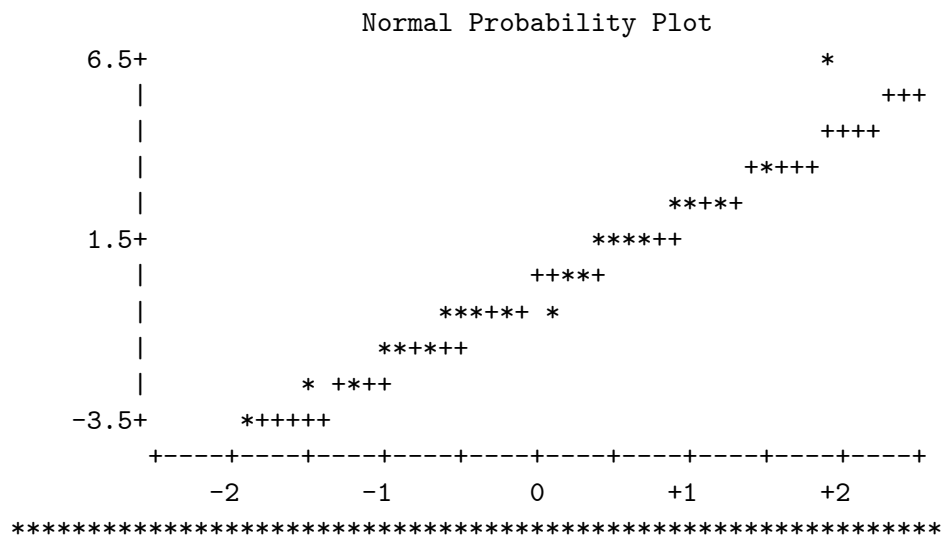
4
3 0          1 |
2 002        3 |
1 0005       4 +-----+
0 05         2 | + |
-0 88885     5 *-----*
-1 8500      4 +-----+
-2 0         1 |
-3 800       3 |
-----+-----+-----+-----+

```

Normalite des residus

Univariate Procedure

Variable=RESIDU



Seconde approche

Si le nombre d'expériences à réaliser, impliqué par le croisement des facteurs comme ci-dessus, est trop grand, il existe des solutions particulières selon les niveaux respectifs des facteurs. Dans l'exemple précédent, on rappelle que r doit être au moins égal à 2 pour l'estimation des termes d'interaction, soit $2 \times 3 \times 2 = 12$ expériences. Peut-on faire moins d'expériences tout en estimant proprement les mêmes paramètres que précédemment. La réponse est positive, examinons la construction du plan factoriel asymétrique de résolution maximum, pour 2 et 3 niveaux, de taille minimum. La résolution maximum signifie que toutes les interactions sont postulables dans le modèle. On remarque que

le questionnement sur le codage n'est pas intervenu lors de la première approche, il réapparaît maintenant dans cette seconde approche.

Construction du plan 2^{13^1}

On part du plan factoriel complet 2^3 étudié au chapitre 2, dont les niveaux sont -1 et $+1$, et pour lequel la matrice d'expériences est donnée au tableau 5.1.

n° exp	A	B	C
1	-	-	-
2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

Tableau 5.1. Matrice d'expériences du plan factoriel complet 2^3 .

Si on considère dans le tableau 5.1 les 4 traitements différents formés par B et C (lignes 1, 3, 5, 7) on peut s'en servir pour coder les 3 niveaux d'un facteur X , comme au tableau 5.2. Les facteurs B et C seront appelés pseudo-facteurs, car ils ne servent qu'à la construction du facteur X .

n° exp	B	C	X
1	-	-	$x1$
3	+	-	$x2$
5	-	+	$x2$
7	+	+	$x3$

Tableau 5.2. Codage du facteur X à 3 niveaux, au moyen des pseudofacteurs B et C .

Le facteur X ayant 3 niveaux, 2 ddl lui associés, et on peut le voir comme formé de deux composantes : une composante linéaire X_L et une composante quadratique X_Q (acceptons pour le moment cette dénomination si la nature de ce facteur X est qualitative), chacune ayant un ddl. On peut alors associer aux colonnes de la matrice de modèle du plan factoriel complet 2^3 les composantes A , X_L , $A \times X_L$, X_Q et $A \times X_Q$ comme au tableau 5.3.

	A	X_L	X_Q	$A \times X_L$	$A \times X_Q$	X_L	$A \times X_L$	$A \times X_Q$	modalités effectives	
n° exp	A	B	C	AB	AC	BC	ABC	A	X	
1	-	-	-	+	+	+	-	-	-	$x1$
2	+	-	-	-	-	+	+	+	+	$x1$
3	-	+	-	-	+	-	+	-	-	$x2$
4	+	+	-	+	-	-	-	+	+	$x2$
5	-	-	+	+	-	-	+	-	-	$x2$
6	+	-	+	-	+	-	-	+	+	$x2$
7	-	+	+	-	-	+	-	-	-	$x3$
8	+	+	+	+	+	+	+	+	+	$x3$

Tableau 5.3. Matrice de modèle du plan factoriel complet 2^3 avec les composantes associées des 2 facteurs A et X . On observe que le plan est bien orthogonal sur les facteurs A et X , chacun des deux niveaux de A "voyant" les quatre niveaux de X .

La matrice d'expériences du plan asymétrique cherché est constitué des deux dernières colonnes du tableau 5.3.

Propriétés du tableau 5.3

On remarque que :

- Le codage et l'estimation de l'effet linéaire de X nécessitent les 2 colonnes B et C .
- L'effet de A ne pourra être calculé qu'avec les expériences 1, 2, 7 et 8, c-a-d où X est soit au niveau bas, soit au niveau haut ; en effet pour les expériences 1 et 2, X étant fixé à $x1$, A prend les 2 niveaux -1 et $+1$, on peut estimer un effet linéaire de A ; de même pour les expériences 7 et 8.
- L'effet $A \times X_L$ est la somme des deux effets attachés aux colonnes AB et AC .
- Les expériences 3 et 5 sont des répétitions puisque A y reste au niveau -1 et X au niveau $x2$, ce qui conduit à estimer une variance d'erreur avec 1 ddl.
- Les expériences 4 et 6 sont des répétitions puisque A y reste au niveau $+1$ et X au niveau $x2$, ce qui conduit à estimer une variance d'erreur avec 1 ddl.
- La moyenne des 2 variances précédentes conduit à une SCR à 2 ddl.

On donne au tableau 5.4 le squelette de la table d'analyse de la variance correspondant à la matrice de modèle du tableau 5.3 .

Source	SC	ddl
A	SC_A	1
$X(X_L + X_Q)$	SC_X	2
$AX(A \times X_L + A \times X_Q)$	SC_{AX}	2
Erreur (exp 3, 5 et 4, 6)	SCR	2
Total	SCT	7

Tableau 5.4. Table d'analyse de variance pour le plan asymétrique.

Exemple

Pour comparer avec l'exemple traité dans la première approche, refaisons les calculs en moyennant les résultats donnés dans le code GLM03 (avec une petite variation additionnelle sur les expériences 3 et 5). On obtient le tableau 5.5.

n° exp	A	X	\bar{y}_{ij}
1	-	x_1	46.75
2	+	x_1	40.75
3	-	x_2	43.50
4	+	x_2	38
5	-	x_2	42.50
6	+	x_2	38
7	-	x_3	45
8	+	x_3	39

Tableau 5.5. Plan factoriel asymétrique obtenu par pseudofacteurs, avec les résultats.

Avec le code SAS suivant :

```
/****** GLM04.SAS *****/;
data plan;
input A $ B $ ; datalines;
a1 b1
a2 b1
a1 b2
a2 b2
a1 b2
a2 b2
a1 b3
a2 b3
;

data rep; input y @@; datalines;
46.75 40.75 43.50 38 42.50 38 45 39
;

data total; merge plan rep;
proc print data=total;
run;

proc glm data=total;
class a b;
model y=a b a*b / ss1 solution ;
```

```
run; quit; run;
/******/;
```

on obtient la sortie suivante :

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	5	75.34375000	15.06875000	60.27	0.0164
Error	2	0.50000000	0.25000000		
Corrected Total	7	75.84375000			

R-Square	Coeff Var	Root MSE	y Mean
0.993407	1.199400	0.500000	41.68750

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
A	1	60.50000000	60.50000000	242.00	0.0041
B	2	14.34375000	7.17187500	28.69	0.0337
A*B	2	0.50000000	0.25000000	1.00	0.5000

Parameter	Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	39.00000000 B	0.50000000	78.00	0.0002
A a1	6.00000000 B	0.70710678	8.49	0.0136
A a2	0.00000000 B	.	.	.
B b1	1.75000000 B	0.70710678	2.47	0.1318
B b2	-1.00000000 B	0.61237244	-1.63	0.2441
B b3	0.00000000 B	.	.	.
A*B a1 b1	0.00000000 B	1.00000000	0.00	1.0000
A*B a1 b2	-1.00000000 B	0.86602540	-1.15	0.3675
A*B a1 b3	0.00000000 B	.	.	.
A*B a2 b1	0.00000000 B	.	.	.
A*B a2 b2	0.00000000 B	.	.	.
A*B a2 b3	0.00000000 B	.	.	.

NOTE: The $X'X$ matrix has been found to be singular, and a generalized inverse was used to solve the normal equations. Terms whose estimates are followed by the letter 'B' are not uniquely estimable.

Commentaire :

- On vérifie que les ddl sont les mêmes que lors de la première approche.
- L'estimation (non unique) de tous les termes est possible.
- Les estimations des modalités des facteurs sont les mêmes qu'au paragraphe précédent (sauf celle de γ_{12} car on a bruité légèrement les données).
- Bien sûr le passage par les termes X_Q et $A \times X_Q$, in fine, n'est utile que pour comprendre comment les différents ddl sont associés.

Remarque

Finalement, pour gagner deux ddl pour l'erreur, alors que le nombre de ddl serait nul pour un plan croisé 2×3 avec $r = 1$, on double les deux expériences relatives aux niveaux intermédiaires du facteur à 3 niveaux.

5.2.2 Facteurs à deux et quatre niveaux

Pour construire les plans avec ces facteurs, on part encore des plans factoriels complets à 2 niveaux, 2^p , avec les niveaux codés -1 et $+1$, dans lesquels 2 pseudofacteurs à 2 niveaux serviront à construire un facteur à 4 niveaux.

Supposons deux facteurs A et B à 2 niveaux chacun, et un facteur X à 4 niveaux x_1, x_2, x_3, x_4 . Alors les 4 traitements différents formés par les pseudofacteurs A et B codent les 4 niveaux du facteur X comme au tableau 5.6.

A	B	X
–	–	x_1
+	–	x_2
–	+	x_3
+	+	x_4

Tableau 5.6. Codage du facteur X à 4 niveaux au moyen des 2 pseudofacteurs A et B .

Si on souhaite étudier tous les effets principaux et toutes les interactions de 2 facteurs à 2 niveaux (hormis les pseudofacteurs bien sûr) et du facteur X on peut utiliser un plan factoriel complet 2^4 où les colonnes A et B seront les pseudofacteurs pour coder le facteur X . Les sommes de carrés seront calculées pour chaque colonne $A, B, \dots, ABCD$ comme dans le cas standard d'utilisation d'un plan 2^4 . Puis les sommes de carrés pour les facteurs X, C, D – les deux facteurs C et D jouant le rôle des 2 facteurs (d'intérêt) à 2 niveaux puisque les facteurs A et B sont les pseudofacteurs – sont formées comme suit, avec leurs ddl respectifs :

$$\begin{aligned}
SC_X &= SC_A + SC_B + SC_{AB} && \longrightarrow 3 \text{ ddl} \\
SC_C &= SC_C && \longrightarrow 1 \text{ ddl} \\
SC_D &= SC_D && \longrightarrow 1 \text{ ddl} \\
SC_{CD} &= SC_{CD} && \longrightarrow 1 \text{ ddl} \\
SC_{XC} &= SC_{AC} + SC_{BC} + SC_{ABC} && \longrightarrow 3 \text{ ddl} \\
SC_{XD} &= SC_{AD} + SC_{BD} + SC_{ABD} && \longrightarrow 3 \text{ ddl} \\
SC_{XCD} &= SC_{ACD} + SC_{BCD} + SC_{ABCD} && \longrightarrow 3 \text{ ddl}
\end{aligned}$$

5.3 Plan factoriel fractionnaire asymétrique

On se contentera de citer quelques fractionnements possibles, et montrer comment les générer avec le logiciel SAS.

5.3.1 Plans factoriels fractionnaires asymétrique à deux et trois niveaux

Toujours en partant des plans factoriels complets 2^p on peut construire de telles fractions. Ainsi avec le même principe qu'à la seconde approche de la section 5.2, on peut construire :

- avec un plan 2^4 des fractions de résolution V à deux facteurs à 2 niveaux en présence de 2 ou facteurs à 3 niveaux,
- avec un plan 2^4 une fraction de résolution V à trois facteurs à 2 niveaux en présence d'un facteur à 3 niveaux,
- avec un plan 2^4 une fraction de résolution III à quatre facteurs à 2 niveaux en présence d'un facteur à 3 niveaux.

On obtient des fractions similaires avec les plans 2^5 et 2^6 (voir Addleman, 1962). Nous donnons un exemple ci-dessous d'un plan à 2 facteurs à 2 niveaux et 3 facteurs à 3 niveaux.

Un exemple : construction d'un plan à deux facteurs à deux niveaux et trois facteurs à trois niveaux

Problème à résoudre Supposons 5 facteurs continus à étudier avec un plan asymétrique de 16 expériences : 2 facteurs X_1 et X_2 prennent 2 niveaux et 3 facteurs X_3 , X_4 , X_5 prennent 3 niveaux. Le plan complet nécessiterait $2^2 \times 3^3 = 108$ expériences. On postule le modèle polynomial (non complet) suivant :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^5 \beta_j x_j + \beta_{12} x_1 x_2 + \sum_{j=3}^5 \beta_{jj} x_j^2 + \varepsilon \quad (5.1)$$

Construction du plan On part d'un plan factoriel fractionnaire 2^{5-1} de résolution V, construit avec les 5 facteurs (de construction) A, B, C, D, E . La matrice d'expériences de cette fraction a déjà été donnée au §3.7.1. Donnons ci-dessous la matrice de modèle

de cette fraction pour un modèle avec les 5 effets principaux de A, B, C, D, E et leurs 10 interactions doubles :

Obs	A	B	C	D	E	AB	AC	AD	AE	BC	BD	BE	CD	CE	DE
1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
3	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1
4	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
5	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1
6	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1
7	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
8	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1
9	-1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1
10	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
12	1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
13	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
14	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1
15	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	-1
16	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Attribuons les différentes colonnes de cette matrice de modèle (orthogonale) aux effets (principaux, d'interaction, et quadratiques) des facteurs X_1, \dots, X_5 , en appliquant le principe d'agrégation des niveaux comme indiqué aux paragraphes précédents.

Donc :

- Les deux colonnes A et B sont attribuées aux effets principaux respectifs des facteurs X_1 et X_2 puisque ceux-ci prennent 2 niveaux.
- Les deux colonnes C et D représentent **conjointement** l'effet principal de X_3 ; en effet : a) sur les expériences 1 à 4 C et D prennent le niveau -1 qui va correspondre au niveau -1 de X_3 , b) sur les expériences 5 à 12 ils prennent des niveaux différents qui vont correspondre au niveau 0 de X_3 , c) sur les expériences 13 à 16 ils prennent le niveau +1 qui va correspondre au niveau +1 de X_3 . Deux ddl seront affectés à X_3 dans la table d'analyse de variance.
- Les deux colonnes E et AC représentent **conjointement** l'effet principal de X_4 ; en effet, comme pour X_3 , on fait correspondre le niveau -1 simultanément pris par E et AC au niveau -1 de X_4 , et pour les deux autres niveaux de X_4 on opère de façon analogue. Deux ddl seront affectés à X_4 dans la table d'analyse de variance.
- Les deux colonnes AD et AE représentent **conjointement** l'effet principal de X_5 de façon analogue à X_3 et X_4 . Deux ddl seront affectés à X_5 dans la table d'analyse de variance.
- La colonne AB représente l'interaction X_1X_2 .

- La colonne CD représente l'effet quadratique X_3 , car en tant que tel cet effet nécessite seulement 2 niveaux pour s'exprimer si l'effet principal de X_3 s'exprime déjà de façon orthogonale dans la matrice de modèle.
- La colonne BD représente l'effet quadratique X_4 .
- La colonne DE représente l'effet quadratique X_5
- Les trois colonnes BC , BE et CE restent "libres" : elles forment 3 ddl.

Suite à ces affectations de colonne on peut écrire maintenant la matrice de modèle pour le modèle (5.1) comme suit (X_{3q} , X_{4q} , X_{5q} y représentent les termes X_3^2 , X_4^2 , X_5^2) :

Obs	X1	X2	X3	X4	X5	X1X2	X3q	X4q	X5q
1	-1	-1	-1	1	0	1	1	1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
3	-1	1	-1	0	1	-1	1	-1	1
4	1	1	-1	0	0	1	1	-1	-1
5	-1	-1	0	-1	1	1	-1	1	1
6	1	-1	0	1	0	-1	-1	1	-1
7	-1	1	0	0	0	-1	-1	-1	-1
8	1	1	0	0	-1	1	-1	-1	1
9	-1	-1	0	0	0	1	-1	-1	-1
10	1	-1	0	0	1	-1	-1	-1	1
11	-1	1	0	1	-1	-1	-1	1	1
12	1	1	0	-1	0	1	-1	1	-1
13	-1	-1	1	0	-1	1	1	-1	1
14	1	-1	1	0	0	-1	1	-1	-1
15	-1	1	1	-1	0	-1	1	1	-1
16	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Propriétés On vérifie aisément que cette matrice de modèle est parfaitement orthogonale, même par rapport au terme constant X_0 (vecteur de uns).

Si besoin est, pour satisfaire à la logique naturelle que les termes des colonnes X_j^2 , $j = 3, 4, 5$, s'obtiennent en élevant au carré les termes des colonnes respectives X_j , il suffit de remplacer les -1 des colonnes X_j^2 par des zéros, et on obtient la matrice de modèle finale ci-dessous (encore orthogonale, sauf que les 3 termes quadratiques ne sont plus maintenant orthogonaux au terme constant, ce qui n'est vraiment pas gênant puisque X_0 n'est concomitant qu'à l'interaction quintuple des 5 facteurs de construction) :

Obs	X1	X2	X3	X4	X5	X1X2	X3q	X4q	X5q
1	-1	-1	-1	1	0	1	1	1	0
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1

3	-1	1	-1	0	1	-1	1	0	1
4	1	1	-1	0	0	1	1	0	0
5	-1	-1	0	-1	1	1	0	1	1
6	1	-1	0	1	0	-1	0	1	0
7	-1	1	0	0	0	-1	0	0	0
8	1	1	0	0	-1	1	0	0	1
9	-1	-1	0	0	0	1	0	0	0
10	1	-1	0	0	1	-1	0	0	1
11	-1	1	0	1	-1	-1	0	1	1
12	1	1	0	-1	0	1	0	1	0
13	-1	-1	1	0	-1	1	1	0	1
14	1	-1	1	0	0	-1	1	0	0
15	-1	1	1	-1	0	-1	1	1	0
16	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Fraction $L_{18}(2^1 \times 3^7)$

Nous donnons au tableau 5.7 un autre exemple de fraction pour un facteur à 2 niveaux et 7 facteurs à 3 niveaux, en 18 expériences. Cette fraction, notée $L_{18}(2^1 \times 3^7)$, de résolution III, est appelée "orthogonal array design ou OA" en anglais.

n°\facteurs	A	B	C	D	E	F	G	H
1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	2	2	2	2	2	2
3	1	1	3	3	3	3	3	3
4	1	2	1	1	2	2	3	3
5	1	2	2	2	3	3	1	1
6	1	2	3	3	1	1	2	2
7	1	3	1	2	1	3	2	3
8	1	3	2	3	2	1	3	1
9	2	3	3	1	3	2	1	2
10	2	1	1	3	3	2	2	1
11	2	1	2	1	1	3	3	2
12	2	1	3	2	2	1	1	3
13	2	2	1	2	3	1	3	2
14	2	2	2	3	1	2	1	3
15	2	2	3	1	2	3	2	1
16	2	3	1	3	2	3	1	2
17	2	3	2	1	3	1	2	3
18	2	3	3	2	1	2	3	1

Tableau 5.7. Table $L_{18}(2^1 \times 3^7)$.

On trouve sur le site Web suivant de nombreux OA construits par des spécialistes de cette question :

Génération avec le logiciel SAS de plans asymétriques fractionnaires

Avec la procédure Factex de SAS on peut aussi obtenir des plans de façon différente, par exemple avec les deux codes suivants :

```

/*****FACTEX10.SAS *****/
;
/**/ Construction d'une matrice factorielle fractionnaire asymetrique ***/
/**/ par la methode du croisement des niveaux, avec facteurs de ***/
/**/ bruit : 3 facteurs a 2 niveaux et 4 facteurs a 3 niveaux. ***/
;

proc factex; ---> pas de rubrique model : le plan complet est genere
  factors time temperat humidity;
  output out=first time      nvals=(24 120)
          temperat nvals=(72 150)
          humidity nvals=(.25 .75);
run;
  factors interfer connwall idepth glue / nlev=3;
  size design=9; ---> plan greco-latin
  model resolution=3;
  output out=final pointrep=first ---> autre facon de former le produit direct
    interfer cvals=('low'      'medium'  'high'   )
    connwall cvals=('thin'     'medium'  'thick'  )
    idepth   cvals=('shallow'  'deep'    'medium' )
    glue     cvals=('low'      'high'    'medium' );
run;
proc print data=final;
run;
/*****/
```

qui conduit à :

```

*****
Obs    interfer    connwall    idepth     glue       time       temperat   humidity
1      low         thin        shallow    low        24         72         0.25
2      low         thin        shallow    low        24         72         0.75
3      low         thin        shallow    low        24         150        0.25
```

4	low	thin	shallow	low	24	150	0.75
5	low	thin	shallow	low	120	72	0.25
6	low	thin	shallow	low	120	72	0.75
7	low	thin	shallow	low	120	150	0.25
8	low	thin	shallow	low	120	150	0.75
9	low	medium	medium	medium	24	72	0.25
10	low	medium	medium	medium	24	72	0.75
11	low	medium	medium	medium	24	150	0.25
12	low	medium	medium	medium	24	150	0.75
13	low	medium	medium	medium	120	72	0.25
14	low	medium	medium	medium	120	72	0.75
15	low	medium	medium	medium	120	150	0.25
16	low	medium	medium	medium	120	150	0.75
17	low	thick	deep	high	24	72	0.25
18	low	thick	deep	high	24	72	0.75
19	low	thick	deep	high	24	150	0.25
20	low	thick	deep	high	24	150	0.75
21	low	thick	deep	high	120	72	0.25
22	low	thick	deep	high	120	72	0.75
23	low	thick	deep	high	120	150	0.25
24	low	thick	deep	high	120	150	0.75
25	medium	thin	medium	high	24	72	0.25
26	medium	thin	medium	high	24	72	0.75
27	medium	thin	medium	high	24	150	0.25
28	medium	thin	medium	high	24	150	0.75
29	medium	thin	medium	high	120	72	0.25
30	medium	thin	medium	high	120	72	0.75
31	medium	thin	medium	high	120	150	0.25
32	medium	thin	medium	high	120	150	0.75
33	medium	medium	deep	low	24	72	0.25
34	medium	medium	deep	low	24	72	0.75
35	medium	medium	deep	low	24	150	0.25
36	medium	medium	deep	low	24	150	0.75
37	medium	medium	deep	low	120	72	0.25
38	medium	medium	deep	low	120	72	0.75
39	medium	medium	deep	low	120	150	0.25
40	medium	medium	deep	low	120	150	0.75
41	medium	thick	shallow	medium	24	72	0.25
42	medium	thick	shallow	medium	24	72	0.75
43	medium	thick	shallow	medium	24	150	0.25
44	medium	thick	shallow	medium	24	150	0.75
45	medium	thick	shallow	medium	120	72	0.25
46	medium	thick	shallow	medium	120	72	0.75

47	medium	thick	shallow	medium	120	150	0.25
48	medium	thick	shallow	medium	120	150	0.75
49	high	thin	deep	medium	24	72	0.25
50	high	thin	deep	medium	24	72	0.75
51	high	thin	deep	medium	24	150	0.25
52	high	thin	deep	medium	24	150	0.75
53	high	thin	deep	medium	120	72	0.25
54	high	thin	deep	medium	120	72	0.75
55	high	thin	deep	medium	120	150	0.25
56	high	thin	deep	medium	120	150	0.75
57	high	medium	shallow	high	24	72	0.25
58	high	medium	shallow	high	24	72	0.75
59	high	medium	shallow	high	24	150	0.25
60	high	medium	shallow	high	24	150	0.75
61	high	medium	shallow	high	120	72	0.25
62	high	medium	shallow	high	120	72	0.75
63	high	medium	shallow	high	120	150	0.25
64	high	medium	shallow	high	120	150	0.75
65	high	thick	medium	low	24	72	0.25
66	high	thick	medium	low	24	72	0.75
67	high	thick	medium	low	24	150	0.25
68	high	thick	medium	low	24	150	0.75
69	high	thick	medium	low	120	72	0.25
70	high	thick	medium	low	120	72	0.75
71	high	thick	medium	low	120	150	0.25
72	high	thick	medium	low	120	150	0.75

Le code suivant :

```

/*****FACTEX11.SAS *****/
/** Construction d'une matrice factorielle fractionnaire mixte **/
/** par la methode du croisement des niveaux : **/
/** 1 facteur a 3 niveaux et 4 facteurs a 2 niveaux **/
;
proc factex;
  factors x1-x4;
  model resolution=4;
  size design=8;
  examine aliasing(2) confounding design;
  output out=first;
run;

```

```

factors x5/nlev=3;
output out=final designrep=first;---> chaque experience de first est
                                         repete pour la matrice formee par
                                         factors x5/nlev=3 : produit direct

proc print data=final;
run;
/*****/

```

conduit à :

```

*****
Obs    x1    x2    x3    x4    x5
1      -1    -1    -1    -1    -1
2      -1    -1    -1    -1    0
3      -1    -1    -1    -1    1
4      -1    -1    1     1     -1
5      -1    -1    1     1     0
6      -1    -1    1     1     1
7      -1    1     -1    1     -1
8      -1    1     -1    1     0
9      -1    1     -1    1     1
10     -1    1     1     -1    -1
11     -1    1     1     -1    0
12     -1    1     1     -1    1
13     1     -1    -1    1     -1
14     1     -1    -1    1     0
15     1     -1    -1    1     1
16     1     -1    1     -1    -1
17     1     -1    1     -1    0
18     1     -1    1     -1    1
19     1     1     -1    -1    -1
20     1     1     -1    -1    0
21     1     1     -1    -1    1
22     1     1     1     1     -1
23     1     1     1     1     0
24     1     1     1     1     1
*****

```

On peut aussi construire un plan asymétrique, dit $3/4$, par la méthode du collapsing des niveaux de certains facteurs. Donnons ci-dessous le code Factex qui permet la

construction d'un plan à 36 expériences pour 2 facteurs à 2 niveaux et 2 niveaux à 3 niveaux.

```

/*****FACTEX16.SAS *****/
/* Construction d'une matrice factorielle 3/4 et asymetrique par la */
/** methode du collapsing des niveaux de certains facteurs :    ***/
/** 2 facteurs a 2 niveaux et 2 facteurs a 3 niveaux.          ***/
;
;
options ps=65 ls=75 nodate nocenter;
title ' ' ;

proc factex;
  factors x1-x4 / nlev=3;
  size design=27;
  model res=4;
  output out=final
          x1 nvals=(-1 1 -1)
          x2 nvals=(-1 1 -1); -->passage de 3 niveaux a 2 niveaux
                                pour x1 et x2, c'est le collapsing

  examine aliasing(2) confounding;
run;
proc print data=final;
run;
/*****/

```

On obtient :

```

*****
OBS    X1    X2    X3    X4

  1    -1    -1    -1    -1
  2    -1    -1     0     1
  3    -1    -1     1     0
  4    -1     1    -1     1
  5    -1     1     0     0
  6    -1     1     1    -1
  7    -1    -1    -1     0
  8    -1    -1     0    -1
  9    -1    -1     1     1

```

10	1	-1	-1	1
11	1	-1	0	0
12	1	-1	1	-1
13	1	1	-1	0
14	1	1	0	-1
15	1	1	1	1
16	1	-1	-1	-1
17	1	-1	0	1
18	1	-1	1	0
19	-1	-1	-1	0
20	-1	-1	0	-1
21	-1	-1	1	1
22	-1	1	-1	-1
23	-1	1	0	1
24	-1	1	1	0
25	-1	-1	-1	1
26	-1	-1	0	0
27	-1	-1	1	-1

Commentaire :

- Le resultat final est bien une matrice 3/4 puisque la matrice complète comporte 36 experiences.

5.3.2 Plans factoriels fractionnaires asymétriques à deux et quatre niveaux

On part des plans factoriels complets 2^p , et après avoir réservé deux pseudofacteurs, parmi les p , pour représenter le facteur à 4 niveaux, on effectue le fractionnement selon la résolution souhaitée comme pour les fractions 2^{p-k} du chapitre 3.

Exemple du plan à un facteur à quatre niveaux et trois facteurs à deux niveaux

Par exemple pour une fraction à 16 expériences, pour un facteur A à 4 niveaux et 3 facteurs B, C, D à 2 niveaux, le facteur A est décomposé en 2 pseudofacteurs A_1 et A_2 à 2 niveaux, et ainsi la fraction 1/2 du plan factoriel complet $4^1 2^3$ est définie par la relation de concomitance :

$$D = A_1 A_2 B C$$

conduisant au générateur (unique) :

$$\mathbf{1} = A_1 A_2 B C D$$

qui ne contient que 4 facteurs, et non pas 5, ce qui implique que le plan est de résolution IV et non V.

La structure de confusion est la suivante :

- L'effet principal B est confondu avec une interaction de 3 facteurs A_1A_2CD .
- L'effet principal A_1 est confondu avec une interaction de 4 facteurs A_2BCD .
- L'interaction BC est confondue avec une autre interaction de 2 facteurs A_1A_2D .
- L'interaction A_1B est confondue seulement avec une autre interaction de 3 facteurs A_2CD .
- etc...

On trouvera dans le chapitre 3 de Dreesbeke *et al.* (1997) un développement complet sur les fractions de plans pour facteurs à 4 niveaux et 2 niveaux.

Génération avec SAS du plan à un facteur à 4 niveaux et 3 facteurs à 2 niveaux

Avec le code SAS suivant :

```

/*****FACTEX12.SAS *****/
/*Construction d'une matrice factorielle fractionnaire asymetrique */
/** par la methode OUTPUT : 1 facteur a 4 niveaux et 3 facteurs */
/** a 2 niveaux ****/
;
options ps=65 ls=75 nodate nocenter;
title ' ' ;
;
proc factex;
  factors a1 a2 x1 x2 x3; ---> on utilise les 2 facteurs a1 et a2 a 2 niveaux
                          pour construire le facteur a 4 niveaux

  model estimate=(x1 x2 x3 a1|a2) --> l'interaction a1*a2 va servir a
                          construire le facteur a 4 niveaux

  nonneg=(x1|x2|x3@2 a1|a2|x1 a1|a2|x2 a1|a2|x3);
  size design=16;
  output out=mixed [a1 a2]=x4 nvals=(-3 -1 1 3);
  examine aliasing(3) confounding design;
proc print data=mixed;
data final; set mixed(drop=a1 a2); --> finalement on supprime a1 et a2
                          qui ne servent plus a rien maintenant

proc print data=final;
run;
/*****/

```

on obtient :

-> Etape 1 : la fraction $2^5 - 1$:

```
*****
Experiment
Number      A1      A2      X1      X2      X3
-----
   1         -1      -1      -1      -1       1
   2         -1      -1      -1       1      -1
   3         -1      -1       1      -1      -1
   4         -1      -1       1       1       1
   5         -1       1      -1      -1      -1
   6         -1       1      -1       1       1
   7         -1       1       1      -1       1
   8         -1       1       1       1      -1
   9          1      -1      -1      -1      -1
  10          1      -1      -1       1       1
  11          1      -1       1      -1       1
  12          1      -1       1       1      -1
  13          1       1      -1      -1       1
  14          1       1      -1       1      -1
  15          1       1       1      -1      -1
  16          1       1       1       1       1
```

Factor Confounding Rules

$$X3 = A1*A2*X1*X2$$

Aliasing Structure

- A1
- A2
- X1
- X2
- X3
- A1*A2 = X1*X2*X3
- A1*X1 = A2*X2*X3
- A1*X2 = A2*X1*X3
- A1*X3 = A2*X1*X2
- A2*X1 = A1*X2*X3

$A2 \cdot X2 = A1 \cdot X1 \cdot X3$
 $A2 \cdot X3 = A1 \cdot X1 \cdot X2$
 $X1 \cdot X2 = A1 \cdot A2 \cdot X3$
 $X1 \cdot X3 = A1 \cdot A2 \cdot X2$
 $X2 \cdot X3 = A1 \cdot A2 \cdot X1$

-> Etape 2 : le facteur X4 à 4 niveaux est construit :

OBS	A1	A2	X1	X2	X3	X4
1	-1	-1	-1	-1	1	-3
2	-1	-1	-1	1	-1	-3
3	-1	-1	1	-1	-1	-3
4	-1	-1	1	1	1	-3
5	-1	1	-1	-1	-1	1
6	-1	1	-1	1	1	1
7	-1	1	1	-1	1	1
8	-1	1	1	1	-1	1
9	1	-1	-1	-1	-1	-1
10	1	-1	-1	1	1	-1
11	1	-1	1	-1	1	-1
12	1	-1	1	1	-1	-1
13	1	1	-1	-1	1	3
14	1	1	-1	1	-1	3
15	1	1	1	-1	-1	3
16	1	1	1	1	1	3

-> Etape 3 : le plan final cherché :

OBS	X1	X2	X3	X4
1	-1	-1	1	-3
2	-1	1	-1	-3

```

3      1      -1      -1      -3
4      1       1       1      -3
5     -1     -1     -1       1
6     -1      1       1       1
7      1     -1      1       1
8      1      1      -1       1
9     -1     -1     -1     -1
10    -1      1       1     -1
11     1     -1      1     -1
12     1      1      -1     -1
13    -1     -1      1       3
14    -1      1     -1       3
15     1     -1     -1       3
16     1      1      1       3
*****

```

Le codage {-3 , -1 , +1 , +3} permet de mettre en évidence l'orthogonalité de la matrice du modèle via le code suivant :

```

/*****/

data final2;set final;
  c12=x1*x2;c13=x1*x3;c14=x1*x4;c23=x2*x3;c24=x2*x4;c34=x3*x4;
proc corr data=final2;
run;
/*****/

```

qui conduit à :

```

*****
Correlation Analysis (Pearson Correlation Coefficients)

          X1          X2          X3          X4          C12
X1      1.00000      0.00000      0.00000      0.00000      0.00000
X2      0.00000      1.00000      0.00000      0.00000      0.00000
X3      0.00000      0.00000      1.00000      0.00000      0.00000
X4      0.00000      0.00000      0.00000      1.00000      0.00000
C12     0.00000      0.00000      0.00000      0.00000      1.00000
C13     0.00000      0.00000      0.00000      0.00000      0.00000
C14     0.00000      0.00000      0.00000      0.00000      0.00000

```

C23	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
C24	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
C34	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

	C13	C14	C23	C24	C34
X1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
X2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
X3	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
X4	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
C12	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
C13	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
C14	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
C23	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
C24	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
C34	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000

/*****/

Génération avec SAS du plan à deux facteurs à 4 niveaux et 1 facteur à 2 niveaux

Avec le code SAS suivant :

```

/*****FACTEX13.SAS *****/
/** Construction d'une matrice factorielle fractionnaire mixte ***/
/** par la methode OUTPUT : 2 facteurs a 4 niveaux et 1 facteur ***/
/** a 2 niveaux ***/
;
options ps=65 ls=75 nodate nocenter;
title ' ' ;
;
proc factex;
  factors a1 a2 b1 b2 x3;
  model estimate=(b1|b2 x3 a1|a2)
    nonneg=(b1|b2|x3 a1|a2|x3);
  size design=32;
  output out=mixed [a1 a2]=a nvals=(-3 -1 1 3)
    [b1 b2]=b nvals=(-3 -1 1 3);
  examine aliasing(3) confounding design;
proc print data=mixed;
data final; set mixed(drop=a1 a2 b1 b2);
proc print data=final;

```

```

run;

data final2;set final;
  ab=a*b;ax3=a*x3;bx3=b*x3;
proc corr data=final2;
run;
/*****/

```

On obtient :

```

*****
Design Points

```

Experiment Number	A1	A2	B1	B2	X3
1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	-1	1
3	-1	-1	-1	1	-1
4	-1	-1	-1	1	1
5	-1	-1	1	-1	-1
6	-1	-1	1	-1	1
7	-1	-1	1	1	-1
8	-1	-1	1	1	1
9	-1	1	-1	-1	-1
10	-1	1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1	-1
12	-1	1	-1	1	1
13	-1	1	1	-1	-1
14	-1	1	1	-1	1
15	-1	1	1	1	-1
16	-1	1	1	1	1
17	1	-1	-1	-1	-1
18	1	-1	-1	-1	1
19	1	-1	-1	1	-1
20	1	-1	-1	1	1
21	1	-1	1	-1	-1
22	1	-1	1	-1	1
23	1	-1	1	1	-1
24	1	-1	1	1	1

25	1	1	-1	-1	-1
26	1	1	-1	-1	1
27	1	1	-1	1	-1
28	1	1	-1	1	1
29	1	1	1	-1	-1
30	1	1	1	-1	1
31	1	1	1	1	-1
32	1	1	1	1	1

OBS	A1	A2	B1	B2	X3	A	B
1	-1	-1	-1	-1	-1	-3	-3
2	-1	-1	-1	-1	1	-3	-3
3	-1	-1	-1	1	-1	-3	1
4	-1	-1	-1	1	1	-3	1
5	-1	-1	1	-1	-1	-3	-1
6	-1	-1	1	-1	1	-3	-1
7	-1	-1	1	1	-1	-3	3
8	-1	-1	1	1	1	-3	3
9	-1	1	-1	-1	-1	1	-3
10	-1	1	-1	-1	1	1	-3
11	-1	1	-1	1	-1	1	1
12	-1	1	-1	1	1	1	1
13	-1	1	1	-1	-1	1	-1
14	-1	1	1	-1	1	1	-1
15	-1	1	1	1	-1	1	3
16	-1	1	1	1	1	1	3
17	1	-1	-1	-1	-1	-1	-3
18	1	-1	-1	-1	1	-1	-3
19	1	-1	-1	1	-1	-1	1
20	1	-1	-1	1	1	-1	1
21	1	-1	1	-1	-1	-1	-1
22	1	-1	1	-1	1	-1	-1
23	1	-1	1	1	-1	-1	3
24	1	-1	1	1	1	-1	3
25	1	1	-1	-1	-1	3	-3
26	1	1	-1	-1	1	3	-3
27	1	1	-1	1	-1	3	1
28	1	1	-1	1	1	3	1
29	1	1	1	-1	-1	3	-1
30	1	1	1	-1	1	3	-1

31	1	1	1	1	-1	3	3
32	1	1	1	1	1	3	3

OBS	X3	A	B
1	-1	-3	-3
2	1	-3	-3
3	-1	-3	1
4	1	-3	1
5	-1	-3	-1
6	1	-3	-1
7	-1	-3	3
8	1	-3	3
9	-1	1	-3
10	1	1	-3
11	-1	1	1
12	1	1	1
13	-1	1	-1
14	1	1	-1
15	-1	1	3
16	1	1	3
17	-1	-1	-3
18	1	-1	-3
19	-1	-1	1
20	1	-1	1
21	-1	-1	-1
22	1	-1	-1
23	-1	-1	3
24	1	-1	3
25	-1	3	-3
26	1	3	-3
27	-1	3	1
28	1	3	1
29	-1	3	-1
30	1	3	-1
31	-1	3	3
32	1	3	3

Correlation Analysis (Pearson Correlation Coefficients)

	X3	A	B	AB	AX3	BX3
X3	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
A	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
B	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
AB	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
AX3	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
BX3	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000

5.4 Conclusion

Les constructions des plans fractionnaires asymétriques peuvent s'avérer difficiles pour certaines combinaisons de niveaux, voire impossible pour satisfaire à la fois à une résolution et une taille décidées a priori. Si on change de type de méthodes pour les construire – elles sont ici algébriques ou d'inspiration algébrique – pour aller vers des méthodes algorithmiques, certaines fractions seront plus faciles à obtenir (mais pour un temps ordinateur parfois long). En outre, ces méthodes algorithmiques permettront de trouver des fractions, non parfaitement orthogonales, mais malgré tout très intéressantes relativement à leur taille modérée en regard de fractions orthogonales mais parfois trop grandes. Ces méthodes constituent le mode de construction de base de la théorie des plans optimaux dont nous donnons une introduction au chapitre 11.

Chapitre 6

Plan en blocs et randomisation

6.1 Introduction

On l'a déjà mentionné, un avantage majeur d'un plan d'expériences est de limiter l'impact de la variabilité intrinsèque et incompressible – regroupant la variabilité des mesures, celle des modes opératoires, celle des bruits inhérents aux facteurs aléatoires ou mal contrôlés, ... – sur les estimations des paramètres et de leurs variances, ainsi que sur les prédictions réalisées avec le modèle estimé *in fine*.

Pour limiter cet impact défavorable un des moyens à disposition du statisticien est le "contrôle" de cette variabilité par une répartition astucieuse (appelée en anglais le "blocking") des expériences en regroupements appelés "blocs" (en anglais "blocks"). Ce regroupement en blocs revient à réaliser une partition de l'ensemble complet des expériences prévues. Cette partition consiste à définir un facteur artificiel (lui-même dit fixe ou aléatoire) qu'on appelle un "facteur bloc" (en anglais "blocking factor") qui prendra un certain nombre de modalités (niveaux) selon la situation considérée. Ce facteur bloc est en général considéré comme un facteur de nuisance. Illustrons maintenant cette notion en considérant deux situations :

- D'un point de vue général, il faut réaliser les expériences dans un ordre aléatoire différent de l'ordre de construction, pour éviter la mise en concomitance d'un des facteurs avec un facteur de dérive dans le temps. Par exemple, dans la matrice D du plan 2^3 du tableau 2.2 donnée dans un ordre logique de construction, la variable x_3 représentant le facteur X_3 , prend alternativement les niveaux -1 et $+1$. Pour illustrer le problème soulevé imaginons un phénomène expérimental sensible à la lumière : si, par inadvertance, la première expérience du plan d'expérimentation est réalisée le jour, puis la deuxième la nuit, et ainsi de façon alternative jusqu'à la dernière expérience à réaliser, il est facile de comprendre que les quatre expériences réalisées le jour seront concomitantes au niveau -1 du facteur X_3 et les quatre suivantes, réalisées la nuit, au niveau $+1$ de ce facteur X_3 . On aura donc créé ainsi une concomitance ou une "confusion" (on dirait corrélation si ces facteurs étaient aléatoires) entre le facteur X_3 et le facteur "jour/nuit". Si ce dernier, comme on l'a supposé au départ, a une action non négligeable sur le résultat des expériences, on

ne pourra pas, lors de l'analyse des résultats attribuer sans ambiguïté l'effet β_3 à x_3 . Une autre raison, théorique celle-la, pour réaliser les expériences dans un ordre aléatoire est de satisfaire aux conditions de mise en oeuvre des tests statistiques lors de l'analyse ultérieure des résultats.

- Une seconde situation possible est de ne pas pouvoir réaliser les expériences dans un ordre aléatoire, car les expériences ne peuvent être réalisées que par bloc. C'est le cas par exemple où un réactif chimique dont la concentration est un facteur du plan provient de deux lots de fabrication différents. Il faut alors s'arranger pour que les expériences soient réparties d'une certaine façon dans les blocs pour, qu'à nouveau, comme dans la situation précédente, il y ait le moins de concomitance possible (le moins de confusion possible). Cet arrangement se fait à partir de règles mathématiques très strictes qu'on explicitera aux chapitres 7 et 8.

La partition d'un plan d'expériences en blocs, basés sur une technique rigoureuse, permet de répondre (partiellement) à l'objectif indiqué. Dans un bloc donné, le facteur bloc présente une seule modalité.

Pour finir cette introduction donnons quelques définitions importantes et utiles pour la suite.

- Le plan est dit complet si toutes les modalités des facteurs sont présentes dans chaque bloc : donc chaque plan rencontré dans les chapitres précédents était un bloc,
- Le plan est équilibré s'il y a le même nombre de répétitions pour chaque traitement,
- Le plan est randomisé si, dans chaque bloc, les traitements lui sont affectés de façon aléatoire.

Dans ce chapitre on approche la notion de plan en blocs complets et randomisés par un exemple simple et pédagogique, et on montrera son avantage par rapport au plan complet randomisé. Enfin, on présentera une extension très courante du plan en blocs complets randomisés, à savoir le plan en parcelles divisées, plus connu sous son appellation anglaise de plan "split-plot".

6.2 Le plan complet randomisé

C'est le plan le plus "naturel" – pas forcément le plus performant comme on le verra – en présence de facteurs discrets ou continus, et sans contraintes particulières. Le principe est de croiser toutes les modalités (ou niveaux équidistants) des facteurs, et pour chaque combinaison de ces modalités (niveaux) formant un "pattern" (synonyme : traitement) le même nombre de répétitions d'expériences (plan équilibré) sera réalisé. Les expériences seront réalisées dans un ordre aléatoire (voir remarques du paragraphe 6 du chapitre 2). Le plan factoriel complet exposé au chapitre 2 était un plan complet randomisé, mais à deux niveaux seulement par facteur. On considère dans ce chapitre un nombre quelconque de niveaux par facteur.

D'une façon générale les résultats d'un plan complet randomisé seront traités par la méthode d'analyse de la variance détaillée au chapitre 4.

6.3 Le plan en blocs complets et randomisés

6.3.1 Approche de la notion de bloc par l'exemple

Avant de détailler la technique de construction de cette partition nous proposons de présenter l'exemple simplissime suivant, mais très "parlant" (tiré de l'ouvrage de Montgomery, 1984), pour mettre en évidence la pertinence de cette question. Imaginons un plan d'expériences où un seul facteur discret est étudié, et qui présente quatre modalités.

Les quatre modalités de ce facteur sont représentés par quatre poinçons possibles que l'on doit utiliser dans une machine à mesurer la dureté Rockwell d'éprouvettes de métal. C'est le facteur "poinçon". L'objectif du plan est de savoir si ce facteur "poinçon" est significatif, autrement dit pouvoir conclure que les quatre poinçons sont équivalents ou non (c'est-à-dire qu'au moins un poinçon serait différent des trois autres). Le test d'hypothèses s'écrit alors :

$$\begin{aligned} H_0 & : \tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau_4 = 0 \\ H_1 & : \exists \tau_i \neq 0 \ ? \ \forall i \end{aligned}$$

où τ_i est l'effet d'un poinçon i . Comme on sait qu'il existe une variabilité entre les différentes plaques de métal que l'on doit utiliser pour réaliser cette étude de comparaison des quatre poinçons (seule comparaison qui nous intéresse vraiment, et non pas la comparaison des plaques), on va donc chercher à séparer les trois sources de variabilité suivantes : la variabilité des plaques, la variabilité des quatre poinçons, et la variabilité naturelle inhérente à la nature aléatoire de l'étude expérimentale. Si on peut faire cette séparation on pourra décider sans ambiguïté de l'existence d'un éventuel effet "poinçon" significatif.

On réalise deux plans d'expériences différents que l'on va comparer : le plan A, plan complètement randomisé, et le plan B, en blocs, où les expériences sont randomisées à l'intérieur de chaque bloc.

Structure et analyse du plan A complètement randomisé Sa structure et ses résultats sont donnés au tableau 6.1

n° plaque	n° poinçon	dureté
1	1	9.3
2	4	9.7
3	2	9.4
4	1	9.4
5	1	9.6
6	4	9.6
7	3	9.2
8	2	9.3
9	3	9.4
10	3	9.5
11	1	10
12	4	10
13	2	9.8
14	4	10.2
15	2	9.9
16	3	9.7

Tableau 6.1. Plan A : plan complètement randomisé.

On a donc utilisé pour ce plan A 16 plaques de métal, et pour chaque poinçon on a fait 4 mesures de dureté, en utilisant une plaque différente pour chaque mesure. L'ordre d'utilisation des 4 poinçons apparaissant dans la colonne 2 du tableau 6.1 est aléatoire.

Le modèle d'analyse de variance à un facteur s'écrit :

$$y_{ik} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ik}$$

avec μ effet (de la dureté) global moyen ; $i = 1, \dots, a$ modalités du facteur (ici $a = 4$ poinçons) ; $k = 1, \dots, r$ répétitions (ici $r = 4$), sous la contrainte usuelle :

$$\sum_{i=1}^a \tau_i = 0$$

La décomposition orthogonale de la somme des carrés totale (avec leurs *ddl* associés : $ar - 1 = (a - 1) + (r - 1)a$) s'écrit ici :

$$SCT_{16-1} = SC_{poinçon}_{4-1} + SCR_{12}$$

c'est-à-dire en développant :

$$\sum_{i=1}^{a=4} \sum_{k=1}^{r=4} (y_{ik} - \bar{y}_{..})^2 = r \sum_{i=1}^{a=4} (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 + \sum_{i=1}^{a=4} \sum_{k=1}^{r=4} (y_{ik} - \bar{y}_{i.})^2$$

et le test consiste à comparer la variable de Fisher observée :

$$F_{obs} = \frac{SC_{poincon}/3}{SCR/12}$$

au fractile $\mathcal{F}(3, 12; \alpha)$ de la table de Fisher-Snedecor. Toute cette analyse est réalisée par le programme ANOVA02 suivant :

```
/****** ANOVA02.SAS *****/;
data don;input poincon durete;
datalines;
1 9.3
4 9.7
2 9.4
1 9.4
1 9.6
4 9.6
3 9.2
2 9.3
3 9.4
3 9.5
1 10.0
4 10.0
2 9.8
4 10.2
2 9.9
3 9.7
;

proc anova;
class poincon;
model durete=poincon;
run;
/*******/;
```

qui conduit à la sortie suivante :

```
/*******/;
The ANOVA Procedure

Dependent Variable: durete
```

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	3	0.38500000	0.12833333	1.70	0.2196
Error	12	0.90500000	0.07541667		
Corrected Total	15	1.29000000			

R-Square	Coeff Var	Root MSE	rep Mean
0.298450	2.853205	0.274621	9.625000

Source	DF	Anova SS	Mean Square	F Value	Pr > F
poincon	3	0.38500000	0.12833333	1.70	0.2196

/*****/;

La probabilité associée au F observé ("F value"=1.70) de 0.2196 nous conduit à conclure que l'effet poinçon n'est absolument pas significatif, c'est-à-dire tous les poinçons sont équivalents.

Structure et analyse du plan B en blocs randomisés Sa structure et ses résultats sont donnés au tableau 6.2

n° plaque	n° poinçon	dureté
1	3	9.2
1	4	9.7
1	2	9.4
1	1	9.3
2	1	9.4
2	4	9.6
2	3	9.4
2	2	9.3
3	4	10
3	3	9.5
3	2	9.8
3	1	9.6
4	1	10
4	2	9.9
4	4	10.2
4	3	9.7

Tableau 6.2. Plan B : plan en blocs randomisés.

On a donc utilisé pour ce plan 4 plaques de métal seulement, et sur chaque plaque on a utilisé les 4 poinçons. L'ordre d'utilisation des 4 poinçons est aléatoire sur chaque plaque. Le facteur bloc est le facteur "plaque", il est dit randomisé, et comme ce facteur bloc a 4 modalités il y a 4 blocs numérotés de 1 à 4 dans la colonne 1 du tableau 6.2.

Le modèle d'analyse de variance à un facteur et un facteur bloc (fixe, c-a-d non aléatoire) s'écrit maintenant :

$$y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk}$$

avec $j = 1, \dots, b$ modalités du facteur bloc dont l'effet d'un niveau j est représenté par β_j (ici $b = 4$ blocs), $k = 1, \dots, r$ répétitions dans le bloc j (ici $r = 1$) sous les contraintes usuelles :

$$\sum_{i=1}^a \tau_i = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{j=1}^b \beta_j = 0$$

La décomposition orthogonale de la somme des carrés totale (avec leurs *ddl* associés) s'écrit maintenant :

$$SCT_{16-1} = SC_{poinçon}_{4-1} + SC_{bloc}_{4-1} + SCR_{(4-1) \times (4-1)}$$

On observe maintenant la séparation de la *SC* due au bloc et la *SC* due au facteur poinçon. Le test consiste à comparer la variable de Fisher observée :

$$F_{obs} = \frac{SC_{poinçon}/3}{SC_{résiduelle}/9}$$

au fractile $\mathcal{F}(3, 9; \alpha)$ de la table de Fisher-Snedecor. Toute cette analyse est réalisée par le programme ANOVA03 suivant :

```

/***** ANOVA03.SAS *****/;
data don;input bloc poincon durete;
datalines;
  1 3 9.2
  1 4 9.7
  1 2 9.4
  1 1 9.3
  2 1 9.4
  2 4 9.6
  2 3 9.4
  2 2 9.3
  3 4 10.0
  3 3 9.5
  3 2 9.8
  3 1 9.6
  4 1 10.0
  4 2 9.9
  4 4 10.2
  4 3 9.7
;
proc anova;
class bloc poincon;
model durete=poincon bloc;
run;
/*****/;

```

qui conduit à la sortie suivante :

```

/*****/;
The ANOVA Procedure

Dependent Variable: durete


```

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	6	1.21000000	0.20166667	22.69	<.0001
Error	9	0.08000000	0.00888889		

Corrected Total 15 1.29000000

R-Square	Coeff Var	Root MSE	rep Mean
0.937984	0.979542	0.094281	9.625000

Source	DF	Anova SS	Mean Square	F Value	Pr > F
poincon	3	0.38500000	0.12833333	14.44	0.0009
bloc	3	0.82500000	0.27500000	30.94	<.0001

/*****/;

La probabilité associée au F_{obs} ("F value"=14.44) inférieure à 0.0001, nous conduit à conclure que l'effet poinçon est fortement significatif, ainsi que l'effet bloc d'ailleurs. C'est parce ce que l'effet bloc est significatif que le plan A n'a pas permis de séparer son effet de l'effet poinçon. **La conclusion, correcte, du plan B, est donc exactement contraire à celle obtenue avec le plan A.**

Remarque :

On peut générer directement le plan en blocs randomisés avec le code PLAN01 suivant :

```
/****** PLAN01.SAS *****/;
proc plan ;
factors block=4 ordered poincon=4 ;
run;
/******/;
```

qui conduit à :

```
/******/;
The PLAN Procedure
```

Factor	Select	Levels	Order
--------	--------	--------	-------

```

block          4          4   Ordered
poincon       4          4   Random

```

```

      block  --poincon-
      1      3  4  2  1
      2      4  3  2  1
      3      1  4  2  3
      4      2  4  1  3

```

```

/*****/;

```

Commentaire sur le code PLAN01.SAS : la commande "ordered" dans l'instruction "factors" signifie que le numérotage des blocs se fera dans l'ordre numérique. Ainsi, sur la sortie le bloc 1 est d'abord défini (par les 4 poinçons numérotés au hasard 3, 4, 2, 1), puis le bloc 2 est défini, etc.

Efficacité du plan B par rapport au plan A On peut calculer l'efficacité relative du dispositif en blocs randomisés par rapport au dispositif complètement randomisé par la formule :

$$Eff = \frac{(ddl_{res-bloc} + 1) (ddl_{res-rand} + 3)}{(ddl_{res-bloc} + 3) (ddl_{res-rand} + 1)} \times \frac{\sigma_{res-rand}^2}{\sigma_{res-bloc}^2}$$

avec :

- $\sigma_{res-rand}^2$: la variance résiduelle du plan complètement randomisé,
- $\sigma_{res-bloc}^2$: la variance résiduelle du plan en blocs randomisés,
- et leurs degrés de liberté *ddl* respectifs.

On obtient ici, en remplaçant les quantités par leurs estimations respectives issues des sorties SAS précédentes :

$$Eff = \frac{(9 + 1) (12 + 3)}{(9 + 3) (12 + 1)} \times \frac{0.062}{0.0089} = 6.7$$

où la valeur 0.062 est obtenue par moyenne pondérée des 2 CMR comme suit :

$$\sigma_{res-rand}^2 = \frac{[(4 - 1) \times 0.275] + [4(4 - 1) \times 0.0089]}{(4 \times 4) - 1} = 0.062$$

Donc il faudrait environ 7 fois plus de plaques (112) avec un plan complètement randomisé pour obtenir la même sensibilité, donc un budget 7 fois plus important pour les plaques.

Autre façon de générer un plan en blocs complètement randomisés

Le code suivant :

```

/***** FACTEX18.SAS *****/
proc factex;
  factors bloc / nlev=3;
  output out=genbloc bloc nvals=(1 2 3) randomize; --> on randomise
                                                    les 3 valeurs 1,2,3
run;

  factors trait / nlev=10;
  output out=pbcr
    trait cvals=('a' 'b' 'c' 'd' 'e' 'f' 'g' 'h' 'j' 'k')
    designrep=genbloc randomize; --> les 10 lettres seront
                                randomisees dans chaque bloc

run;
proc print data=pbcr;
run;
/*****/

```

conduit à :

```

/*****/
Obs    bloc    trait

  1     2     h
  2     2     k
  3     2     c
  4     2     f
  5     2     a
  6     2     d
  7     2     j
  8     2     b
  9     2     e
 10     2     g
 11     1     g
 12     1     h
 13     1     k
 14     1     c
 15     1     j
 16     1     a

```

17	1	f
18	1	e
19	1	b
20	1	d
21	3	a
22	3	k
23	3	b
24	3	d
25	3	g
26	3	f
27	3	e
28	3	j
29	3	c
30	3	h

/*****/

Conclusion

En général l'efficacité est plus grande pour le plan en blocs randomisés, le plan complètement randomisé conduisant à une perte de sensibilité pour détecter l'effet du facteur d'intérêt. Le plan en blocs randomisés permet de "contrôler" les sources de nuisance, le facteur bloc est ici un facteur de nuisance.

6.3.2 Un exemple de blocs complets randomisés en milieu agricole

Nous avons choisi de présenter un exemple agricole bien connu (Dagnelie, 1996) qui nous permettra de préciser le vocabulaire attaché aux plans en blocs en général :

– **But et conditions :**

Le but de l'expérience est de comparer 4 produits fongicides par rapport à un témoin, ne subissant aucun traitement fongicide, et aussi entre eux, sur une culture de pomme de terre réalisée en petites parcelles.

– **Objets et facteur d'intérêt :**

Les objets sont les 4 fongicides, désignés par les chiffres 1 à 4, et le témoin, désigné par le chiffre 5. Le facteur d'intérêt est le facteur "fongicide" qui prend 5 niveaux (le témoin correspondant au niveau "absence de fongicide").

– **Unités expérimentales et blocs :**

Les unités expérimentales sont des parcelles rectangulaires de 3 mètres de largeur sur 15 mètres de longueur. On décide de répéter les 5 objets 4 fois, le facteur bloc présente ainsi 4 niveaux, chaque niveau définissant un bloc. Le plan comporte donc 20 parcelles réparties en 4 blocs.

– **Observations :**

Les observations (résultats) sont les rendements en pommes de terre.

– **Dispositif expérimental :**

Les expériences – les cultures de pommes dans chaque parcelle – sont réalisées

en blocs complets randomisés ; on dit que chaque bloc correspond à une répétition car dans chacun n'apparaît qu'une fois chaque niveau du facteur d'intérêt (un fongicide), et il y a 4 répétitions car il y a 4 blocs. On peut schématiser ce dispositif avec le tableau 6.3.

BLOC 1	BLOC 2	BLOC 3	BLOC 4
3	1	2	5
2	4	3	4
1	5	5	3
4	3	1	1
5	2	4	2

Tableau 6.3 : Un dispositif à base de blocs complets et randomisés.

– **Analyse des résultats :**

- a) L'interprétation globale des résultats est basée sur l'analyse de la variance usuelle à deux facteurs selon le squelette du tableau 6.4.

Sources de variation	ddl	SC	carrés moyens	F_{obs}	proba
fongicides	4
blocs	3
interaction	12
totaux	19

Tableau 6.4 : Squelette d'analyse de la variance du dispositif basé sur le tableau 6.3.

- b) Si le facteur fongicides est déclaré significatif, cette analyse de variance sera complétée par le test de Dunnett qui permet la comparaison de chaque fongicide avec le témoin d'une part, et par des tests de comparaison multiple de moyennes pour comparer les 4 fongicides entre eux avec le niveau correct de risque d'autre part.

6.4 Le plan "split-plot" (en parcelles divisées)

6.4.1 Description

Il est plus connu sous son appellation anglaise "split-plot" que sous l'appellation "plan en parcelles divisées". L'idée est de diviser les blocs, ou les parcelles formant les blocs, définis par chaque niveau du facteur bloc, pour former des sous-parcelles (sous-blocs), et à y placer le facteur le plus intéressant à étudier car il y aura ainsi le moins de risque de confusion possible avec les facteurs de nuisance. Donc dans le cas standard l'analyse conduit à une précision plus grande du facteur associé aux sous-parcelles et à l'interaction des 2 facteurs, au détriment du facteur associé aux parcelles.

Le principe des parcelles divisées ne s'applique pas seulement au dispositif en blocs complets randomisés, mais peut intervenir aussi en association avec des dispositifs en carré latin ou en crossover (voir chapitre 8).

6.4.2 Un exemple formel

On considère un plan complet à deux facteurs d'intérêt à trois niveaux chacun, que l'on répète 4 fois, donc 4 blocs sont formés. Chaque bloc est divisé en 3 grandes parcelles, et chacune de celle-ci est divisée en 3 petites parcelles. Enfin on doit distribuer aléatoirement les niveaux des deux facteurs à l'intérieur des 3 petites parcelles. Le tableau 6.5 illustre clairement ce dispositif.

BLOC 1	2,2	2,3	2,1	1,2	1,3	1,1	3,3	3,2	3,1
BLOC 2	3,2	3,3	3,1	2,3	2,1	2,2	1,2	1,3	1,1
BLOC 3	3,3	3,2	3,1	1,3	1,2	1,1	2,3	2,1	2,2
BLOC 4	1,3	1,2	1,1	2,1	2,2	2,3	3,2	3,1	3,3

Tableau 6.5. Plan split-plot à 2 facteurs d'intérêt à 3 niveaux, en 4 blocs de 3 grandes parcelles divisées en 3 petites parcelles.

Commentons le tableau 4.1 : par exemple la première ligne représente tout le bloc 1, réparti en 3 grandes parcelles (séparées par des doubles barres verticales). La première de ces grandes parcelles est constituée des petites parcelles symbolisées par les couples 2,2 puis 2,3 puis 2,1. Le premier chiffre de ces couples fait allusion à la modalité du premier facteur d'intérêt, et le second chiffre à la modalité du second facteur d'intérêt. Ainsi dans la suite 2,2 ; 2,3 ; 2,1 les 2 correspondent à la modalité 2 du premier facteur et les 1, 2 et 3 sont les modalités du second facteur.

On observe bien que chaque bloc est complet car dans chacun toutes les modalités des 2 facteurs d'intérêt sont vues.

La répartition au hasard est effectuée en 2 étapes :

1) on affecte au hasard les diverses modalités du premier facteur aux grandes parcelles, et on fait ceci pour chaque bloc,

2) on affecte au hasard les diverses modalités du second facteur aux petites parcelles, et on fait ceci pour chaque grande parcelle, puis pour chaque bloc.

6.4.3 Traitement détaillé d'un exemple réel de split-plot

Description du problème

Un fabricant de papier étudie 3 préparations de pulpe à 4 températures de fabrication (220, 225, 250, 275 °C) pour améliorer la force de résistance du papier. Il souhaite faire 3 répétitions, mais en une journée il ne peut réaliser que 12 expériences, et en conséquence 3 jours seront nécessaires pour conduire tout le plan d'expérimentation.

Chaque jour sera un bloc, et dans chaque bloc les 3 grandes parcelles correspondront aux 3 préparations de pulpe, et dans chaque grande parcelle 4 petites parcelles seront définies par les 4 niveaux choisis du facteur température. Le plan split-plot apparaîtra au tableau 6.6 avec les résultats de la réponse.

BLOC1 (jour 1)			BLOC2 (jour2)			BLOC3 (jour3)		
3,4 : 36	1,1 : 30	2,2 : 41	1,3 : 40	3,1 : 31	2,2 : 36	1,3 : 41	2,1 : 35	3,3 : 39
3,1 : 29	1,3 : 37	2,1 : 34	1,2 : 32	3,3 : 32	2,1 : 31	1,2 : 37	2,3 : 39	3,4 : 45
3,2 : 26	1,2 : 35	2,3 : 38	1,4 : 41	3,2 : 30	2,3 : 42	1,4 : 40	2,2 : 40	3,1 : 32
3,3 : 33	1,4 : 36	2,4 : 42	1,1 : 28	3,4 : 40	2,4 : 40	1,1 : 31	2,4 : 44	3,2 : 34

Tableau 6.6. Plan split-plot à 2 facteurs d'intérêt à 3 et 4 niveaux, en 3 blocs de 3 grandes parcelles divisées en 4 petites parcelles, avec les résultats de la réponse.

Ainsi sur le tableau 6.6, la case 3,4 :36 est une petite parcelle où le chiffre 3 fait référence à la pulpe 3, le chiffre 4 fait référence au niveau 4 de la température ($275^{\circ}C$), et 36 est le résultat de la réponse. Ainsi les 4 petites parcelles 3,4 ; 3,1 ; 3,2 et 3,3 définies par les niveaux respectifs 4, 1, 2 , 3 du facteur température forment une grande parcelle associée à la pulpe 3. Les 3 grandes parcelles vont former le bloc 1, et de même pour les autres blocs.

Remarquons que ce plan split-plot est un plan orthogonal relativement aux trois facteurs jour (bloc), pulpe, température, et à leurs interactions doubles, et à leur interaction triple, car ce dispositif croise tous les niveaux des 3 facteurs : $3 \times 4 \times 3 = 36$ expériences.

Le modèle postulé

C'est un modèle d'analyse de variance avec effets fixes et effets aléatoires qu'on écrit :

$$Y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + (\tau\beta)_{ij} + \gamma_k + (\tau\gamma)_{ik} + (\beta\gamma)_{jk} + (\tau\beta\gamma)_{ijk} \quad (6.1)$$

avec :

- μ : effet moyen global,
- τ_i : effet de la modalité i , $i = 1, \dots, a$, du facteur bloc **aléatoire** "jour" noté facteur A,
- β_j : effet de la modalité j , $j = 1, \dots, b$, du facteur d'intérêt fixe "pulpe" noté facteur B,
- $(\tau\beta)_{ij}$: terme d'erreur aléatoire de la grande parcelle,
- γ_k : effet de la modalité k , $k = 1, \dots, c$, du facteur d'intérêt fixe "température" noté facteur C,
- $(\tau\gamma)_{ik}$ et $(\beta\gamma)_{jk}$ effets des interactions (aléatoires),
- $(\tau\beta\gamma)_{ijk}$: terme d'erreur aléatoire de la petite parcelle.

Espérances des carrés moyens

Ces espérances doivent être calculées pour pouvoir choisir les sommes de carrés correctes pour les tests de significativité. On a les formules suivantes pour les grandes

parcelles :

$$\begin{aligned}
 (A) &= \tau_i \text{ (aléatoire)} \rightarrow E(CM_A) = \sigma^2 + bc\sigma_\tau^2 \\
 (B) &= \beta_j \text{ (fixe)} \rightarrow E(CM_B) = \sigma^2 + c\sigma_{\tau\beta}^2 + \frac{ac \sum_{j=1}^b \beta_j^2}{b-1} \\
 (AB) &= (\tau\beta)_{ij} \text{ (erreur)} \rightarrow E(CM_{AB}) = \sigma^2 + c\sigma_{\tau\beta}^2
 \end{aligned}$$

et pour les petites parcelles :

$$\begin{aligned}
 (C) &= \gamma_k \text{ (fixe)} \rightarrow E(CM_C) = \sigma^2 + b\sigma_{\tau\gamma}^2 + \frac{ab \sum_{k=1}^c \gamma_k^2}{c-1} \\
 (AC) &= (\tau\gamma)_{ik} \text{ (aléatoire)} \rightarrow E(CM_{AC}) = \sigma^2 + b\sigma_{\tau\gamma}^2 \\
 (BC) &= (\beta\gamma)_{jk} \text{ (fixe)} \rightarrow E(CM_{BC}) = \sigma^2 + \sigma_{\tau\beta\gamma}^2 + \frac{a \sum_{j,k} (\beta\gamma)_{jk}^2}{(b-1)(c-1)} \\
 (ABC) &= (\tau\beta\gamma)_{ijk} \text{ (erreur)} \rightarrow E(CM_{ABC}) = \sigma^2 + \sigma_{\tau\beta\gamma}^2
 \end{aligned}$$

Remarque importante : la variance résiduelle σ^2 est donc non estimable isolément.

Analyse de variance

Elle est donnée au tableau 6.7.

Sources de variation	<i>SC</i>	<i>ddl</i>	<i>CMR</i>	<i>F_{obs}</i>
(A) bloc (jour)	77.55	2	38.78	
(B) pulpe	128.39	2	64.20	64.20/9.07 = 7.08*
(AB) erreur gde parcelle	36.28	4	9.07	
(C) température	434.08	3	144.69	144.69/3.45 = 41.94***
(AC)	20.67	6	3.45	
(BC)	75.17	6	12.53	12.53/4.24 = 2.96
(ABC) erreur petite parcelle	50.83	12	4.24	
Total	822.97	35		

Tableau 6.7. Table d'analyse de la variance de l'exemple split-plot "papier".

La valeur de 9.07 est à comparer à 4.24 : la précision est donc plus grande dans les petites parcelles.

Traitement avec le logiciel SAS

Le code SAS suivant :


```

/***** GLM05 *****/
data d1; input y pulpe temp $ bloc ; datalines;
30 1 t1 1
34 2 t1 1
29 3 t1 1
35 1 t2 1
41 2 t2 1
26 3 t2 1
37 1 t3 1
38 2 t3 1
33 3 t3 1
36 1 t4 1
42 2 t4 1
36 3 t4 1
28 1 t1 2
31 2 t1 2
31 3 t1 2
32 1 t2 2
36 2 t2 2
30 3 t2 2
40 1 t3 2
42 2 t3 2
32 3 t3 2
41 1 t4 2
40 2 t4 2
40 3 t4 2
31 1 t1 3
35 2 t1 3
32 3 t1 3
37 1 t2 3
40 2 t2 3
34 3 t2 3
41 1 t3 3
39 2 t3 3
39 3 t3 3
40 1 t4 3
44 2 t4 3
45 3 t4 3
;
proc glm data=d1;
  class pulpe temp bloc ;
  model y=pulpe bloc pulpe*bloc temp pulpe*temp temp*bloc;

```

```

random bloc pulpe*bloc temp*bloc/test;
means temp/lsd e=temp*bloc;
means pulpe/lsd e=pulpe*bloc;
run;
/*****

```

Commentaire sur le code GLM05.SAS : dans l'instruction "model" l'interaction triple n'apparaît pas car elle est utilisée pour estimer la variance résiduelle, celle-ci n'étant pas estimable isolément.

Ce code GLM05.SAS conduit à la sortie suivante où les lignes appelant à des commentaires importants sont signalées par C1, ... C4 :

```

*****

```

The GLM Procedure

Class Level Information

Class	Levels	Values
pulpe	3	1 2 3
temp	4	t1 t2 t3 t4
bloc	3	1 2 3

Number of Observations Read	36
Number of Observations Used	36

The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	23	772.1388889	33.5712560	7.93	0.0003

Error 12 50.8333333 4.2361111 -----> C1
 Corrected Total 35 822.9722222

R-Square Coeff Var Root MSE y Mean
 0.938232 5.712763 2.058182 36.02778

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
pulpe	2	128.3888889	64.1944444	15.15	0.0005
bloc	2	77.5555556	38.7777778	9.15	0.0039
pulpe*bloc	4	36.2777778	9.0694444	2.14	0.1382
temp	3	434.0833333	144.6944444	34.16	<.0001
pulpe*temp	6	75.1666667	12.5277778	2.96	0.0520
temp*bloc	6	20.6666667	3.4444444	0.81	0.5797

The GLM Procedure

Source	Type III Expected Mean Square
pulpe	Var(Error) + 4 Var(pulpe*bloc) + Q(pulpe,pulpe*temp)
bloc	Var(Error) + 3 Var(temp*bloc) + 4 Var(pulpe*bloc) + 12 Var(bloc)
pulpe*bloc	Var(Error) + 4 Var(pulpe*bloc)
temp	Var(Error) + 3 Var(temp*bloc) + Q(temp,pulpe*temp)
pulpe*temp	Var(Error) + Q(pulpe*temp)
temp*bloc	Var(Error) + 3 Var(temp*bloc)

The GLM Procedure

Tests of Hypotheses for Mixed Model Analysis of Variance

Dependent Variable: y

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
* pulpe	2	128.388889	64.194444	7.08	0.0485
Error	4	36.277778	9.069444	-----> C2	

Error: MS(pulpe*bloc)
* This test assumes one or more other fixed effects are zero.

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
bloc	2	77.555556	38.777778	4.68	0.1256
Error	2.8507	23.597762	8.277778		

Error: MS(pulpe*bloc) + MS(temp*bloc) - MS(Error)

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
pulpe*bloc	4	36.277778	9.069444	2.14	0.1382
pulpe*temp	6	75.166667	12.527778	2.96	0.0520
temp*bloc	6	20.666667	3.444444	0.81	0.5797
Error: MS(Error)	12	50.833333	4.236111	-----> C3	

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
* temp	3	434.083333	144.694444	42.01	0.0002
Error: MS(temp*bloc)	6	20.666667	3.444444	-----> C4	

* This test assumes one or more other fixed effects are zero.

Commentaires sur la sortie du code GLM05.sas :

- C1 : ce carré moyen est une estimation de $\sigma^2 + \sigma_{\tau\beta\gamma}^2$ (erreur "petite parcelle") où σ^2 n'est pas estimable seule.
- C2 : le terme "Error : MS(pulpe*bloc)" dont le carré moyen est égal à 9.0694

- est l'estimation de l'erreur "grande parcelle", il sert à tester la significativité du facteur B ("pulpe").*
- C3 : le terme "Error : MS(Error)", déjà vu en C1, sert à tester la significativité de l'interaction B×C ("pulpe×temp").*
 - C4 : le terme "Error : MS(temp*bloc)" dont le carré moyen est égal à 3.444 sert à tester la significativité du facteur C ("temp").*

Chapitre 7

Le plan factoriel à deux niveaux en blocs

7.1 Introduction

On a vu au chapitre précédent la notion de bloc illustrée par un exemple, mais sans aborder de façon générale la difficulté de construire les blocs, ceux-ci étant évidents à déterminer au travers des exemples présentés. Toutefois, pour certains types de plans la détermination du bloc n'est pas toujours immédiate, et mérite une étude particulière ; c'est déjà le cas, notamment, de la partition en blocs pour les plans factoriels, complets et fractionnaires, à deux niveaux par facteur. Avant de présenter cette partition de façon générale en fin de ce chapitre, on commence à examiner quelques cas particuliers de partition en blocs, pour mettre en évidence les différentes questions qui se posent et les solutions apportées.

Remarquons qu'on peut aussi s'intéresser au partitionnement en blocs pour des plans (complets ou fractionnaires) à plus de 2 niveaux par facteur, et même pour certains plans asymétriques.

7.2 Blocking du plan complet 2^3

7.2.1 Deux blocs de taille 4

La notion de bloc étant maintenant bien explicitée avec les exemples du chapitre 6, dans le cadre général – celui des plans en blocs complets randomisés – examinons maintenant un cadre particulier qui est la structuration en blocs d'un plan factoriel complet ou fractionnaire à deux niveaux. Chaque bloc sera maintenant incomplet dans le sens où tous les traitements – toutes les combinaisons des facteurs – n'apparaîtront pas dans un bloc donné. On abordera cette question à partir de plans de faible taille pour mieux comprendre le principe. D'un point de vue pratique imaginons en milieu industriel pharmaceutique qu'une même matière première ait été livrée en deux lots, par deux fournisseurs différents, pour la réalisation d'un plan d'expériences factoriel complet

2^3 . Bien que le cahier des charges est rigoureusement respecté par les deux fournisseurs, il est possible malgré tout qu'une légère différence existe entre les deux lots de matière première. Pour ne pas risquer de "biaiser" les estimations finales, on préfère répartir les 8 expériences en deux blocs de taille 4 : on considère donc un facteur bloc à deux niveaux. Pour construire les blocs, on s'arrangera que chaque bloc sera tel qu'à l'intérieur l'interaction triple prendra le même niveau que le niveau du facteur bloc, c'est-à-dire dans notre exemple que les 4 expériences d'un bloc seront toutes réalisées avec un même lot (d'un seul fournisseur). Ce cas est simple à traiter car on sait déjà construire une fraction 2^{3-1} (voir chapitre 3) dans laquelle l'interaction triple garde le même niveau. Il suffit donc ici de déclarer que chaque bloc est une fraction 2^{3-1} . Il faut supposer alors que l'interaction triple est négligeable pour pouvoir estimer l'effet bloc.

On peut obtenir les blocs avec le programme Factex13 suivant :

```

/***** FACTEX13.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1 x2 x3 ;
  blocks size=4;
  model est=(x1|x2|x3@2);
  examine aliasing(2) confounding design;
  output out=resul;

proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

Commentaire :

- La commande "blocks size=" permet de définir la taille des blocs choisie.
- La commande "model est=(x1|x2|x3@2)" indique que l'on souhaite estimer (en propre) les effets principaux et les interactions doubles.

La sortie est la suivante :

```

/*****/;
          Design Points

```

Experiment Number	x1	x2	x3	Block
1	-1	-1	-1	1
2	-1	-1	1	2

3	-1	1	-1	2
4	-1	1	1	1
5	1	-1	-1	2
6	1	-1	1	1
7	1	1	-1	1
8	1	1	1	2

Block Pseudo-factor Confounding Rules

$$[B1] = x1*x2*x3$$

Aliasing Structure

x1
x2
x3
x1*x2
x1*x3
x2*x3

Obs	BLOCK	x1	x2	x3
1	1	-1	-1	-1
2	1	-1	1	1
3	1	1	-1	1
4	1	1	1	-1
5	2	-1	-1	1
6	2	-1	1	-1
7	2	1	-1	-1
8	2	1	1	1

/*****/;

Commentaire :

- Comme attendu les blocs sont des fractions 2^{3-1} .
- SAS dénomme le facteur bloc "Block Pseudo-factor", le préfixe pseudo signalant bien que le facteur bloc n'est pas un vrai facteur comme les autres.

7.2.2 Blocs de taille 2

On peut aller plus loin, on peut structurer le plan 2^3 en 4 blocs de taille 2. Utiliser des blocs de taille 2 permet l'étude de 2 facteurs blocs à 2 niveaux chacun ou l'étude d'un facteur bloc à 4 niveaux. A titre d'illustration pour 2 facteurs blocs, l'un peut par exemple représenter un effet "opérateur", et l'autre un effet "fournisseur". Pour un facteur bloc à 4 niveaux, chacun des niveaux de celui-ci peut représenter une période de temps, le plan devant se réalisant sur 4 périodes de temps. Il est clair que l'on souhaitera contrôler ces facteurs de nuisance.

Pour structurer en blocs de taille 2 le plan 2^3 on pose les équations de concomitance suivantes :

$$4 = \pm 12 \quad ; \quad 5 = \pm 13$$

Pour un facteur bloc à 4 niveaux :

Pour un facteur bloc à 4 niveaux, 4 blocs sont donc à construire. En affectant chacun des 4 blocs à une des 4 combinaisons déduites de ces équations on déduit le tableau 7.1. Par exemple le bloc I prend le niveau de $4 = -12$ et $5 = +13$.

n°	x_1	x_2	x_3	$4 = 12$	$5 = 13$	F. Bloc	x_1	x_2	x_3	n°
1	-	-	-	+	+	I	+	-	-	2
2	+	-	-	-	-	I	-	+	+	7
3	-	+	-	-	+	II	-	+	-	3
4	+	+	-	+	-	II	+	-	+	6
5	-	-	+	+	-	III	+	+	-	4
6	+	-	+	-	+	III	-	-	+	5
7	-	+	+	-	-	IV	-	-	-	1
8	+	+	+	+	+	IV	+	+	+	8

Tableau 7.1. Structure en blocs de taille 2 pour le plan 2^3 , et un facteur bloc à 4 niveaux.

Dans chaque bloc les deux expériences sont de signe opposé, on dit qu'elles forment une paire "fold-over". Les "signatures" respectives des 4 blocs I, II, III, IV sont $(-, -)$, $(-, +)$, $(+, -)$, $(+, +)$.

Pour deux facteurs blocs à 2 niveaux chacun :

C'est la même structure que celle du tableau 7.1 mais en changeant les identifiants des colonnes, ce qui conduit au tableau 7.2.

n°	x_1	x_2	x_3	F.bloc 1	F. bloc 2	Bloc	x_1	x_2	x_3	n°
1	-	-	-	+	+	I	+	-	-	2
2	+	-	-	-	-	I	-	+	+	7
3	-	+	-	-	+	II	-	+	-	3
4	+	+	-	+	-	II	+	-	+	6
5	-	-	+	+	-	III	+	+	-	4
6	+	-	+	-	+	III	-	-	+	5
7	-	+	+	-	-	IV	-	-	-	1
8	+	+	+	+	+	IV	+	+	+	8

Tableau 7.2. Structure en blocs de taille 2 pour le plan 2^3 , et deux facteurs blocs à 2 niveaux.

Les 4 signatures précédentes indiquent aussi les niveaux des 2 facteurs blocs à 2 niveaux chacun. Par exemple la signature $(-, -)$ signifie que dans le bloc I le facteur bloc 1 prend le niveau -1 et le facteur bloc 2 prend le niveau -1 .

Généralisation :

Tout plan factoriel complet 2^p peut être structuré en 2^{p-1} blocs de taille 2 dans lesquels les 2 expériences sont de signes opposés. La conséquence est que les effets principaux ne seront pas concomitants aux effets des facteurs blocs, mais seront concomitants aux interactions doubles.

7.3 Plan complet 2^6 en 8 blocs de taille 8

Avant de généraliser, étudions encore un exemple, moins trivial celui-ci, et qui est utilisable en pratique, à savoir la structuration en blocs du plan 2^6 en 8 blocs de taille 8.

Soit B_1, B_2, B_3 , les facteurs blocs. On pose les équations :

$$B_1 = 3456 \quad ; \quad B_2 = 1256 \quad ; \quad B_3 = 246$$

qui permettent de construire les blocs. L'affectation aux 8 blocs de chacune des 64 expériences, ainsi que la structure de chaque bloc, sont fournies par le programme Factex14 suivant.

```

/***** FACTEX14.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1-x6 ;
  blocks size=8;
  model res=5;
  examine aliasing(3) confounding design;
  output out=result;

proc print data=result;

```

```
run;  
/*****/;
```

qui conduit à la sortie suivante :

```
/*****/;
```

Design Points

Experiment Number	x1	x2	x3	x4	x5	x6	Block
1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	4
2	-1	-1	-1	-1	-1	1	5
3	-1	-1	-1	-1	1	-1	1
4	-1	-1	-1	-1	1	1	8
5	-1	-1	-1	1	-1	-1	7
6	-1	-1	-1	1	-1	1	2
7	-1	-1	-1	1	1	-1	6
8	-1	-1	-1	1	1	1	3
9	-1	-1	1	-1	-1	-1	3
10	-1	-1	1	-1	-1	1	6
11	-1	-1	1	-1	1	-1	2
12	-1	-1	1	-1	1	1	7
13	-1	-1	1	1	-1	-1	8
14	-1	-1	1	1	-1	1	1
15	-1	-1	1	1	1	-1	5
16	-1	-1	1	1	1	1	4
17	-1	1	-1	-1	-1	-1	6
18	-1	1	-1	-1	-1	1	3
19	-1	1	-1	-1	1	-1	7
20	-1	1	-1	-1	1	1	2
21	-1	1	-1	1	-1	-1	1
22	-1	1	-1	1	-1	1	8
23	-1	1	-1	1	1	-1	4
24	-1	1	-1	1	1	1	5
25	-1	1	1	-1	-1	-1	5
26	-1	1	1	-1	-1	1	4
27	-1	1	1	-1	1	-1	8
28	-1	1	1	-1	1	1	1
29	-1	1	1	1	-1	-1	2
30	-1	1	1	1	-1	1	7

31	-1	1	1	1	1	-1	3
32	-1	1	1	1	1	1	6
33	1	-1	-1	-1	-1	-1	2
34	1	-1	-1	-1	-1	1	7
35	1	-1	-1	-1	1	-1	3
36	1	-1	-1	-1	1	1	6
37	1	-1	-1	1	-1	-1	5
38	1	-1	-1	1	-1	1	4
39	1	-1	-1	1	1	-1	8
40	1	-1	-1	1	1	1	1
41	1	-1	1	-1	-1	-1	1
42	1	-1	1	-1	-1	1	8
43	1	-1	1	-1	1	-1	4
44	1	-1	1	-1	1	1	5
45	1	-1	1	1	-1	-1	6
46	1	-1	1	1	-1	1	3
47	1	-1	1	1	1	-1	7
48	1	-1	1	1	1	1	2
49	1	1	-1	-1	-1	-1	8
50	1	1	-1	-1	-1	1	1
51	1	1	-1	-1	1	-1	5
52	1	1	-1	-1	1	1	4
53	1	1	-1	1	-1	-1	3
54	1	1	-1	1	-1	1	6
55	1	1	-1	1	1	-1	2
56	1	1	-1	1	1	1	7
57	1	1	1	-1	-1	-1	7
58	1	1	1	-1	-1	1	2
59	1	1	1	-1	1	-1	6
60	1	1	1	-1	1	1	3
61	1	1	1	1	-1	-1	4
62	1	1	1	1	-1	1	5
63	1	1	1	1	1	-1	1
64	1	1	1	1	1	1	8

Block Pseudo-factor Confounding Rules

$$[B1] = x_3 * x_4 * x_5 * x_6$$

$$[B2] = x_1 * x_2 * x_5 * x_6$$

$$[B3] = x_2 * x_4 * x_6$$

Aliasing Structure

x1
x2
x3
x4
x5
x6
x1*x2
x1*x3
x1*x4
x1*x5
x1*x6
x2*x3
x2*x4
x2*x5
x2*x6
x3*x4
x3*x5
x3*x6
x4*x5
x4*x6
x5*x6
x1*x2*x3
x1*x2*x4
x1*x2*x5
x1*x2*x6
x1*x3*x4
x1*x3*x5
[B] = x1*x3*x6
[B] = x1*x4*x5
x1*x4*x6
x1*x5*x6
x2*x3*x4
[B] = x2*x3*x5
x2*x3*x6
x2*x4*x5
[B] = x2*x4*x6
x2*x5*x6
x3*x4*x5
x3*x4*x6
x3*x5*x6

x4*x5*x6

Obs	BLOCK	x1	x2	x3	x4	x5	x6
1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1
2	1	-1	-1	1	1	-1	1
3	1	-1	1	-1	1	-1	-1
4	1	-1	1	1	-1	1	1
5	1	1	-1	-1	1	1	1
6	1	1	-1	1	-1	-1	-1
7	1	1	1	-1	-1	-1	1
8	1	1	1	1	1	1	-1
9	2	-1	-1	-1	1	-1	1
10	2	-1	-1	1	-1	1	-1
11	2	-1	1	-1	-1	1	1
12	2	-1	1	1	1	-1	-1
13	2	1	-1	-1	-1	-1	-1
14	2	1	-1	1	1	1	1
15	2	1	1	-1	1	1	-1
16	2	1	1	1	-1	-1	1
17	3	-1	-1	-1	1	1	1
18	3	-1	-1	1	-1	-1	-1
19	3	-1	1	-1	-1	-1	1
20	3	-1	1	1	1	1	-1
21	3	1	-1	-1	-1	1	-1
22	3	1	-1	1	1	-1	1
23	3	1	1	-1	1	-1	-1
24	3	1	1	1	-1	1	1
25	4	-1	-1	-1	-1	-1	-1
26	4	-1	-1	1	1	1	1
27	4	-1	1	-1	1	1	-1
28	4	-1	1	1	-1	-1	1
29	4	1	-1	-1	1	-1	1
30	4	1	-1	1	-1	1	-1
31	4	1	1	-1	-1	1	1
32	4	1	1	1	1	-1	-1
33	5	-1	-1	-1	-1	-1	1
34	5	-1	-1	1	1	1	-1
35	5	-1	1	-1	1	1	1
36	5	-1	1	1	-1	-1	-1
37	5	1	-1	-1	1	-1	-1

38	5	1	-1	1	-1	1	1
39	5	1	1	-1	-1	1	-1
40	5	1	1	1	1	-1	1
41	6	-1	-1	-1	1	1	-1
42	6	-1	-1	1	-1	-1	1
43	6	-1	1	-1	-1	-1	-1
44	6	-1	1	1	1	1	1
45	6	1	-1	-1	-1	1	1
46	6	1	-1	1	1	-1	-1
47	6	1	1	-1	1	-1	1
48	6	1	1	1	-1	1	-1
49	7	-1	-1	-1	1	-1	-1
50	7	-1	-1	1	-1	1	1
51	7	-1	1	-1	-1	1	-1
52	7	-1	1	1	1	-1	1
53	7	1	-1	-1	-1	-1	1
54	7	1	-1	1	1	1	-1
55	7	1	1	-1	1	1	1
56	7	1	1	1	-1	-1	-1
57	8	-1	-1	-1	-1	1	1
58	8	-1	-1	1	1	-1	-1
59	8	-1	1	-1	1	-1	1
60	8	-1	1	1	-1	1	-1
61	8	1	-1	-1	1	1	-1
62	8	1	-1	1	-1	-1	1
63	8	1	1	-1	-1	-1	-1
64	8	1	1	1	1	1	1

/*****/;

Commentaire :

- On observe dans la sortie précédente que les facteurs blocs ne sont concomitants qu'à des interactions triples (ou plus), ce qui rend cette structure en blocs très efficace.

7.4 Principe général de construction des blocs pour les plans 2^p

7.4.1 Avec un seul facteur bloc

Soit un seul facteur bloc à 2^q niveaux, avec $q = 1, 2, 3, \dots$. La procédure en 4 étapes est la suivante :

- 1 : Choisir une taille de bloc égale à $2^p/2^q$

- 2 : Avec le tableau 7.3 en déduire les q générateurs de blocs
- 3 : Construire le plan factoriel complet 2^q
- 4 : A chaque combinaison du 2^q associer les expériences du 2^p satisfaisant les interactions constituant les générateurs de blocs.

7.4.2 Avec s facteurs bloc

Soit s ($s \neq 1$) facteurs de bloc à 2 niveaux chacun. La procédure en 3 étapes est la suivante :

- 1 : Choisir dans le tableau 7.3 la solution à s facteurs de bloc (qui vont générer les blocs)
- 2 : Construire le plan factoriel complet 2^s
- 3 : A chaque combinaison du 2^s associer les expériences du 2^p satisfaisant les interactions constituant les générateurs de blocs.

N_F	T_B	G_B
3	4	$B_1 = 123$
	2	$B_1 = 12; B_2 = 13$
4	8	$B_1 = 1234$
	4	$B_1 = 124; B_2 = 134$
	2	$B_1 = 12; B_2 = 23; B_3 = 34$
5	16	$B_1 = 12345$
	8	$B_1 = 123; B_2 = 345$
	4	$B_1 = 125; B_2 = 235; B_3 = 345$
	2	$B_1 = 12; B_2 = 13; B_3 = 34; B_4 = 45$
6	32	$B_1 = 123456$
	16	$B_1 = 1236; B_2 = 3456$
	8	$B_1 = 135; B_2 = 1256; B_3 = 1234$
	4	$B_1 = 126; B_2 = 136; B_3 = 346; B_4 = 456$
	2	$B_1 = 12; B_2 = 23; B_3 = 34; B_4 = 45; B_5 = 56$
7	64	$B_1 = 1234567$
	32	$B_1 = 12367; B_2 = 34567$
	16	$B_1 = 123; B_2 = 456; B_3 = 167$
	8	$B_1 = 1234; B_2 = 567; B_3 = 345; B_4 = 147$
	4	$B_1 = 127; B_2 = 237; B_3 = 347; B_4 = 457; B_5 = 567$
	2	$B_1 = 12; B_2 = 23; B_3 = 34; B_4 = 45; B_5 = 56; B_6 = 67$

Tableau 7.3. Générateurs de blocs pour 3 à 7 facteurs (d'après Box et al., 1980). N_F : nombre de facteurs; T_B : taille du bloc; G_B : générateur de blocs.

N_F	T_B	interactions confondues avec les blocs
3	4	123
	2	12, 13, 23
4	8	1234
	4	124, 134, 23
	2	12, 23, 34, 13, 1234, 24, 14
5	16	12345
	8	123, 345, 1245
	4	125, 235, 345, 13, 1234, 24, 145
	2	12, 13, 34, 45, 23, 1234, 1245, 14, 1345 35, 24, 2345, 1235, 15, 25
6	32	123456
	16	1236, 3456, 1245
	8	126, 136, 346, 456, 23, 1234, 1245
	4	14, 1345, 35, 246, 23456, 12356 156, 25
	2	<i>toutes les 2fi, 4fi, 6fi</i>
7	64	1234567
	32	12367, 34567, 1245
	16	123, 456, 167, 123456, 2367, 1457, 23457
	8	1234, 567, 345, 147, 1234567, 125, 237, 3467, 1456 1357, 1267, 2356, 2457, 136, 246
	4	127, 237, 347, 457, 567, 13, 1234, 1245, 1256, 24 2345, 2356, 3456, 35, 1234567, 46, 147, 13457, 13567 12467, 12357, 257, 24567, 367, 15, 1456 1346, 1236, 26, 167
	2	<i>toutes les 2fi, 4fi, 6fi</i>

Tableau 7.4 (d'après Box et al., 1980). Interactions confondues pour le tableau 7.3. NB : *kfi* : signifie interactions d'ordre k .

7.5 Plans factoriels fractionnaires en blocs

On peut également structurer les plans factoriels fractionnaires en blocs. Donnons quelques exemples ci-après.

Plan fractionnaire 2_V^{5-1} en 2 blocs de taille 8

Supposons une des interactions de ce plan négligeable, par exemple x_1x_3 . Alors celle-ci peut servir à définir un facteur bloc à 2 niveaux qui conduit à définir les 2 blocs suivants :

- Bloc I : les 8 expériences du 2_V^{5-1} pour lesquelles $x_1x_3 = -1$
- Bloc II : les 8 expériences du 2_V^{5-1} pour lesquelles $x_1x_3 = +1$

Plan fractionnaire 2_V^{5-1} en 4 blocs de taille 4

Supposons 2 interactions négligeables x_1x_3 et x_2x_3 . Alors 2 facteurs blocs sont possibles à 2 niveaux chacun, donc 4 blocs peuvent être construits comme suit :

$x_1x_3 = +1$	III (+, -)	IV (+, +)
$x_1x_3 = -1$	I (-, -)	II (-, +)
	$x_2x_3 = -1$	$x_2x_3 = +1$

Tableau récapitulatif

Le tableau 7.5 fournit les éléments pour construire quelques fractions en structures de blocs, à partir de fractions de résolution V ou plus. Les facteurs blocs ne sont pas concomitants aux effets principaux, ni aux interactions doubles.

N_F	nbre exp	Fraction	Eq. conco	blocs	G_B
5	16	2_{V}^{5-1}	$\pm 5 = 1234$	\emptyset	
6	32	2_{VI}^{6-1}	$\pm 6 = 12345$	2×16	$B_1 = 123$
7	64	2_{VII}^{7-1}	$\pm 7 = 123456$	8×8	$B_1 = 1357$ $B_2 = 1256$ $B_3 = 1234$
8	64	2_{V}^{8-2}	$\pm 7 = 1234$ $\pm 8 = 1256$	4×16	$B_1 = 135$ $B_2 = 348$
9	128	2_{VI}^{9-2}	$\pm 8 = 13467$ $\pm 9 = 23567$	8×16	$B_1 = 138$ $B_2 = 129$ $B_3 = 789$
10	128	2_{V}^{10-3}	$\pm 8 = 1237$ $\pm 9 = 2345$ $\pm \bar{10} = 1346$	8×16	$B_1 = 149$ $B_2 = 12\bar{10}$ $B_3 = 89\bar{10}$
11	128	2_{V}^{11-4}	$\pm 8 = 1237$ $\pm 9 = 2345$ $\pm \bar{10} = 1346$ $\pm \bar{11} = 1234567$	8×16	$B_1 = 149$ $B_2 = 12\bar{10}$ $B_3 = 89\bar{10}$

Tableau 7.5 (d'après Box et al., 1981). Quelques fractions en blocs.

7.6 Construction des blocs avec la procédure Factex

On donne ci-après quelques exemples de construction de blocs avec le code Factex15 suivant :

```

/***** FACTEX15.SAS *****/;
/*-----*/;
/*--- facteur bloc a 4 modalites ---*/;
proc factex;
  factors x1 x2 x3 x4 x5;

```

```

blocks size=8 ;
model res=5 ;
examine aliasing(2) confounding;
output out=resul1
blockname=reacteur cvals=('r1' 'r2' 'r3' 'r4');

proc print data=resul1;
run;
/*-----*/;

/*-----*/;
/** 2 facteurs blocs a 2 modalites chacun **/;
proc factex;
  factors operat lot;
  output out=resul2 operat cvals=('jean' 'paul')
        lot cvals=('bayer' 'rp')
        pointrep=8;

data resul3; merge resul1(drop=reacteur) resul2;
proc print data=resul3;
run;
/*-----*/;
/*****/;

```

Commentaire :

– la commande "pointrep=" permet d'indiquer le nombre de répétitions de chaque expérience.

Les sorties correspondantes sont :

```

/*****/;
Block Pseudo-factor Confounding Rules

[B1] = x2*x3*x4*x5
[B2] = x1*x4*x5

```

Aliasing Structure

```

x1
x2
x3

```

x4
 x5
 x1*x2
 x1*x3
 x1*x4
 x1*x5
 x2*x3
 x2*x4
 x2*x5
 x3*x4
 x3*x5
 x4*x5

Obs	reacteur	x1	x2	x3	x4	x5
1	r1	-1	-1	1	-1	-1
2	r1	-1	-1	1	1	1
3	r1	-1	1	-1	-1	-1
4	r1	-1	1	-1	1	1
5	r1	1	-1	-1	-1	1
6	r1	1	-1	-1	1	-1
7	r1	1	1	1	-1	1
8	r1	1	1	1	1	-1
9	r2	-1	-1	-1	-1	-1
10	r2	-1	-1	-1	1	1
11	r2	-1	1	1	-1	-1
12	r2	-1	1	1	1	1
13	r2	1	-1	1	-1	1
14	r2	1	-1	1	1	-1
15	r2	1	1	-1	-1	1
16	r2	1	1	-1	1	-1
17	r3	-1	-1	-1	-1	1
18	r3	-1	-1	-1	1	-1
19	r3	-1	1	1	-1	1
20	r3	-1	1	1	1	-1
21	r3	1	-1	1	-1	-1
22	r3	1	-1	1	1	1
23	r3	1	1	-1	-1	-1
24	r3	1	1	-1	1	1
25	r4	-1	-1	1	-1	1
26	r4	-1	-1	1	1	-1
27	r4	-1	1	-1	-1	1

28	r4	-1	1	-1	1	-1
29	r4	1	-1	-1	-1	-1
30	r4	1	-1	-1	1	1
31	r4	1	1	1	-1	-1
32	r4	1	1	1	1	1

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	operat	lot
1	-1	-1	1	-1	-1	jean	bayer
2	-1	-1	1	1	1	jean	bayer
3	-1	1	-1	-1	-1	jean	bayer
4	-1	1	-1	1	1	jean	bayer
5	1	-1	-1	-1	1	jean	bayer
6	1	-1	-1	1	-1	jean	bayer
7	1	1	1	-1	1	jean	bayer
8	1	1	1	1	-1	jean	bayer
9	-1	-1	-1	-1	-1	jean	rp
10	-1	-1	-1	1	1	jean	rp
11	-1	1	1	-1	-1	jean	rp
12	-1	1	1	1	1	jean	rp
13	1	-1	1	-1	1	jean	rp
14	1	-1	1	1	-1	jean	rp
15	1	1	-1	-1	1	jean	rp
16	1	1	-1	1	-1	jean	rp
17	-1	-1	-1	-1	1	paul	bayer
18	-1	-1	-1	1	-1	paul	bayer
19	-1	1	1	-1	1	paul	bayer
20	-1	1	1	1	-1	paul	bayer
21	1	-1	1	-1	-1	paul	bayer
22	1	-1	1	1	1	paul	bayer
23	1	1	-1	-1	-1	paul	bayer
24	1	1	-1	1	1	paul	bayer
25	-1	-1	1	-1	1	paul	rp
26	-1	-1	1	1	-1	paul	rp
27	-1	1	-1	-1	1	paul	rp
28	-1	1	-1	1	-1	paul	rp
29	1	-1	-1	-1	-1	paul	rp
30	1	-1	-1	1	1	paul	rp
31	1	1	1	-1	-1	paul	rp
32	1	1	1	1	1	paul	rp

/*****/;

Un autre exemple avec le code Factex16 suivant :

```
/****** FACTEX16.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1 x2 x3 x4 x5;
  size fraction=2;
  blocks size=minimum;
  model est=(x1 x2 x3 x4 x5)
  nonneg=(x1|x2|x3|x4|x5@2);
  examine aliasing(3) confounding design;
  output out=resul;
proc print data=resul;
run;
/*******/;
```

Commentaire :

- La commande "nonneg=(x1|x2|x3|x4|x5@2)" indique qu'on ne souhaite pas estimer les interactions doubles indépendamment mais on souhaite qu'elles soient présentes dans le modèle.

La sortie correspondante est la suivante :

```
/*******/;
Design Points

Experiment
  Number      x1      x2      x3      x4      x5      Block
      1      -1      -1      -1      -1      1        1
      2      -1      -1      -1      1      -1        4
      3      -1      -1      1      -1      -1        4
      4      -1      -1      1      1      1        1
      5      -1      1      -1      -1      -1        2
      6      -1      1      -1      1      1        3
      7      -1      1      1      -1      1        3
      8      -1      1      1      1      -1        2
      9      1      -1      -1      -1      -1        3
     10      1      -1      -1      1      1        2
     11      1      -1      1      -1      1        2
```

12	1	-1	1	1	-1	3
13	1	1	-1	-1	1	4
14	1	1	-1	1	-1	1
15	1	1	1	-1	-1	1
16	1	1	1	1	1	4

Factor Confounding Rules

$$x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$$

Block Pseudo-factor Confounding Rules

$$[B1] = x_2 x_3 x_4$$

$$[B2] = x_1 x_3 x_4$$

Aliasing Structure

$$\begin{aligned} &x_1 \\ &x_2 \\ &x_3 \\ &x_4 \\ &x_5 \\ [B] = &x_1 x_2 = x_3 x_4 x_5 \\ &x_1 x_3 = x_2 x_4 x_5 \\ &x_1 x_4 = x_2 x_3 x_5 \\ [B] = &x_1 x_5 = x_2 x_3 x_4 \\ &x_2 x_3 = x_1 x_4 x_5 \\ &x_2 x_4 = x_1 x_3 x_5 \\ [B] = &x_2 x_5 = x_1 x_3 x_4 \\ &x_3 x_4 = x_1 x_2 x_5 \\ &x_3 x_5 = x_1 x_2 x_4 \\ &x_4 x_5 = x_1 x_2 x_3 \end{aligned}$$

Obs	BLOCK	x1	x2	x3	x4	x5
1	1	-1	-1	-1	-1	1
2	1	-1	-1	1	1	1
3	1	1	1	-1	1	-1
4	1	1	1	1	-1	-1

5	2	-1	1	-1	-1	-1
6	2	-1	1	1	1	-1
7	2	1	-1	-1	1	1
8	2	1	-1	1	-1	1
9	3	-1	1	-1	1	1
10	3	-1	1	1	-1	1
11	3	1	-1	-1	-1	-1
12	3	1	-1	1	1	-1
13	4	-1	-1	-1	1	-1
14	4	-1	-1	1	-1	-1
15	4	1	1	-1	-1	1
16	4	1	1	1	1	1

/*****/;

Commentaire :

- Les deux $[B_1]$ et $[B_2]$ indiquent les deux facteurs blocs, donc 4 blocs sont à construire
- Rappel : un plan à q niveaux (ici 2) partitionné en q^s blocs (ici $q^s = 4$) contient s facteurs blocs (ici $s = 2$) notés ici $[B_1]$ et $[B_2]$.
- Question : comment retrouver à quel bloc appartient une expérience donnée i ?
- Réponse :
 - $n^\circ \text{Bloc}(i) = B_1 + qB_2 + q^2B_3 + \dots + q^{s-1}B_s$ le bloc étant codé de 0 à q^{s-1} dans *Factex*.
 - B_1, \dots, B_s prennent les valeurs prises par les facteurs blocs (modulo q), obtenues par les équations de concomitance, les niveaux des facteurs eux-mêmes étant codés de 0 à $q - 1$ dans *Factex* : $-1 \rightarrow 0$ et $+1 \rightarrow 1$
 - exemples d'application au cas présent (où la première parenthèse du membre de gauche fait référence à $[B_1] = 234$ et la seconde parenthèse fait référence à $[B_2] = 134$)
 - $n^\circ \text{Bloc}(1) = (0 + 0 + 0) \times 1 + (0 + 0 + 0) \times 2 = 0 \implies \text{Bloc noté } 1$
 - $n^\circ \text{Bloc}(5) = (1 + 0 + 0) \times 1 + (0 + 0 + 0) \times 2 = 1 \implies \text{Bloc noté } 2$
 - $n^\circ \text{Bloc}(16) = (1 + 1 + 1) \times 1 + (1 + 1 + 1) \times 2 = 3 \implies \text{Bloc noté } 4$

Un exemple encore avec le code *Factex17* suivant :

```

/***** FACTEX17.SAS *****/;
proc factex;
  factors x1-x6;
  model est=(x1-x6);
  size design=minimum;
  blocks size=4;

```

```

    examine aliasing(2) confounding;
    output out=resul;

proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

Commentaire :

- *On ne peut pas demander en même temps l'option "minimum" aux instructions "size" et "blocks".*

La sortie correspondante est la suivante :

```

/*****/;
Factor Confounding Rules

```

```

x4 = x1*x2*x3
x5 = x2*x3
x6 = x1*x3

```

Block Pseudo-factor Confounding Rules

```
[B1] = x1*x2
```

Aliasing Structure

```

    x1 = x3*x6 = x4*x5
    x2 = x3*x5 = x4*x6
    x3 = x1*x6 = x2*x5
    x4 = x1*x5 = x2*x6
    x5 = x1*x4 = x2*x3
    x6 = x1*x3 = x2*x4
[B] = x1*x2 = x3*x4 = x5*x6

```

Obs	BLOCK	x1	x2	x3	x4	x5	x6
1	1	-1	1	-1	1	-1	1
2	1	-1	1	1	-1	1	-1

3	1	1	-1	-1	1	1	-1
4	1	1	-1	1	-1	-1	1
5	2	-1	-1	-1	-1	1	1
6	2	-1	-1	1	1	-1	-1
7	2	1	1	-1	-1	-1	-1
8	2	1	1	1	1	1	1

/*****/

Chapitre 8

Plans en carrés latins

Dans ce chapitre on considère des plans d'expériences plus particulièrement adaptés à des facteurs discrets, à nombre de niveaux supérieur ou égal à 3, mais toujours le même nombre pour chaque facteur, et où le nombre de répétitions sera toujours le même quelle que soit la combinaison des niveaux. Ce sont des plans dits en carrés latins, et leur généralisation (pour plus de trois facteurs) se nomment des plans gréco-latins.

Comme ces plans présupposent des modèles où seuls les effets principaux des facteurs peuvent être pris en compte, on peut les voir comme des plans de criblage pour facteurs discrets, c'est donc aussi des plans fractionnaires de résolution III.

Enfin, on rappelle qu'un facteur discret peut être initialement un facteur continu qu'on décide de traiter comme un facteur discret à un nombre de niveaux donné.

8.1 Plan en carré latin

Un carré latin, inventé par Euler en 1782, est un tableau à n lignes et n colonnes dont les n^2 cases sont occupées par n motifs différents (chiffres, lettres, symboles, ...) répartis de manière que chacun des n motifs n'apparaisse qu'une fois et une seule dans chaque ligne et chaque colonne. Le carré est dit d'ordre n . Son nom est simplement dû à l'utilisation historique de lettres latines pour représenter les motifs, et le différencier de sa généralisation en carré gréco-latin (étudié en section suivante) où les lettres grecques interviennent. On peut évidemment utiliser des chiffres à la place des lettres.

Un plan d'expériences à trois facteurs pour lequel les expériences sont agencées comme les motifs d'un carré latin est appelé indifféremment par les synonymes suivants : plan en carré latin ou dispositif en carré latin. Nous allons examiner ci-dessous comment un tel plan permet donc l'étude de **trois facteurs discrets**, chacun prenant **trois niveaux ou plus**.

8.1.1 Plan en carré latin d'ordre 3

Construction

Selon la définition ci-dessus on montre un exemple de carré latin d'ordre 3 ou carré latin 3×3 au tableau 8.1. On observe en effet que chaque lettre n'apparaît qu'une fois et une seule dans chaque ligne et chaque colonne.

A	B	C
B	C	A
C	A	B

Tableau 8.1 : Un exemple de carré latin 3×3 .

Un premier facteur X prendra trois niveaux X_1, X_2, X_3 symbolisés par les trois lignes du carré, un deuxième facteur Y prendra trois niveaux Y_1, Y_2, Y_3 symbolisés par les trois colonnes du carré, et un troisième facteur Z prendra trois niveaux Z_1, Z_2, Z_3 symbolisés par les trois lettres dans le carré. Pour être plus clair on peut rajouter au tableau 8.1 les intitulés des lignes (niveaux du facteur X), des colonnes (niveaux du facteur Y), les niveaux du facteur Z dans le carré, et les numéros des neuf expériences. On obtient le tableau 8.2.

	Y_1	Y_2	Y_3
X_1	exp n°1 : $Z_1 = A$	exp n°2 : $Z_2 = B$	exp n°3 : $Z_3 = C$
X_2	exp n°4 : $Z_2 = B$	exp n°5 : $Z_3 = C$	exp n°6 : $Z_1 = A$
X_3	exp n°7 : $Z_3 = C$	exp n°8 : $Z_1 = A$	exp n°9 : $Z_2 = B$

Tableau 8.2 : Carré latin 3×3 du tableau 8.1 avec information complémentaire.

Pour retrouver une présentation comme dans les chapitres précédents on peut présenter ce dispositif de plan d'expériences en carré latin sous une forme factorielle (fractionnaire), comme au tableau 8.3.

n° exp	X	Y	Z
1	X_1	Y_1	$Z_1 = A$
2	X_1	Y_2	$Z_2 = B$
3	X_1	Y_3	$Z_3 = C$
4	X_2	Y_1	$Z_2 = B$
5	X_2	Y_2	$Z_3 = C$
6	X_2	Y_3	$Z_1 = A$
7	X_3	Y_1	$Z_3 = C$
8	X_3	Y_2	$Z_1 = A$
9	X_3	Y_3	$Z_2 = B$

Tableau 8.3 : Carré latin 3×3 sous la forme d'un plan d'expériences factoriel (fractionnaire).

Le terme de carré fut très approprié pour les premières utilisations pratiques du carré latin, à savoir en agronomie, où les expériences étaient réalisées sur les parcelles d'un champ carré (ou rectangle). Par exemple le facteur Z est le facteur "nature de l'engrais" (trois engrais différents sont testés), le facteur X est la "nature de l'herbicide" (trois herbicides différents sont testés), et le facteur Y la "nature du pesticide" (trois pesticides sont testés).

Ce plan en carré latin permet donc l'étude des trois situations suivantes : trois facteurs d'intérêt, ou deux facteurs d'intérêt en présence d'un facteur de nuisance, ou un seul facteur d'intérêt en présence de deux facteurs de nuisance. Un exemple très illustratif est le cas où le facteur Z est le facteur "nature de l'engrais" comme ci-dessus mais où les deux autres facteurs X et Y seraient respectivement "l'effet ligne" et "l'effet colonne" du champ. Ces deux derniers seraient des facteurs de nuisance car, par exemple, le taux de calcaire du sol augmenterait de la ligne 1 à 3, et une pente non négligeable (favorisant plus le ruissellement de l'eau de pluie) de la colonne 1 à 3. À l'évidence on souhaite que la conclusion sur l'efficacité des 3 engrais testés ne soit pas "biaisée" par des effets éventuellement significatifs de ces deux facteurs de nuisance. Quand les facteurs "ligne" et "colonne" sont des facteurs de nuisance on parle de dispositif en blocs, dans le même esprit qu'au chapitre 6.

On verra plus loin une application en biostatistique

Propriétés

Orthogonalité Ce dispositif permet l'estimation non biaisée des effets des trois facteurs considérés (d'intérêt ou de nuisance). En effet ce dispositif en carré latin 3×3 est un dispositif orthogonal. On peut l'illustrer très facilement en recodant d'abord les niveaux des facteurs en $-1, 0, +1$, le tableau 8.2 devenant le tableau 8.4.

	-1	0	+1
-1	-1	0	+1
0	0	+1	-1
+1	+1	-1	0

Tableau 8.4 : Carré latin 3×3 du tableau 8.2 codé.

Ensuite on développe le plan ainsi codé au tableau 8.4 pour aboutir au plan d'expériences sous forme factorielle du tableau 8.5.

n° exp	X	Y	Z
1	-1	-1	-1
2	-1	0	0
3	-1	+1	+1
4	0	-1	0
5	0	0	+1
6	0	+1	-1
7	-1	-1	+1
8	-1	0	-1
9	-1	+1	0

Tableau 8.5 : Carré latin 3×3 sous la forme d'un plan d'expériences factoriel (fractionnaire) codé.

Enfin, il ne reste plus qu'à calculer les produits scalaires des vecteurs colonnes entre eux et on trouve :

$$\langle X, Y \rangle = \langle X, Z \rangle = \langle Y, Z \rangle = 0$$

Donc si on fait varier trois facteurs expérimentaux selon ce dispositif en carré latin on pourra obtenir des estimations non biaisées et indépendantes des effets principaux de ces trois facteurs. Ce résultat sera obtenu en ne réalisant que 9 expériences au lieu de 27 si on avait utilisé un plan factoriel complet 3^3 : en réalité ce carré latin n'est autre qu'une fraction de ce plan complet que l'on peut aussi obtenir par les techniques exposées en section 4.8.

Répétitions On remarque que chaque expérience n'est pas répétée. On peut répéter chacune de ces neuf expériences, mais en nombre égal : l'orthogonalité du dispositif ne sera pas modifiée, et l'estimation de la variance expérimentale ainsi que celle des variances des effets estimés sera meilleure puisque basée sur un plus grand nombre de degrés de liberté. Le carré latin répété est un dispositif dit équilibré (même nombre de répétitions dans chaque case).

On verra au paragraphe 1.3 du chapitre 8 trois autres façons de répéter le carré latin.

Nombre total de carrés latins 3×3 Un carré latin est dit **normalisé** si les lettres (ou les chiffres) successives apparaissent dans l'ordre en première ligne, et en première colonne, comme au tableau 8.1. A l'évidence il n'y a qu'une seule manière de répartir les 3 lettres dans les 4 cases restantes pour obtenir un carré latin. **Il n'existe donc qu'un seul carré latin normalisé d'ordre 3.**

Si on ne cherche pas à normaliser le carré latin il apparaît $3!$ façons de répartir les 3 lettres dans la première ligne, et donc $(3-1)!$ façons de répartir les 2 lettres restantes dans la première colonne. Au total on obtient donc $3! \times (3-1)! = 12$ possibilités et pour

chacune desquelles une seule façon sera possible pour répartir les 3 lettres dans les 4 cases restantes. **Ainsi il existe au total 12 carrés latins d'ordre 3.** Remarquons qu'on peut tous les obtenir par le procédé de fractionnement des plans complets exposé au chapitre 4.

Il peut être parfois utile de disposer de plusieurs carrés latins différents de même ordre quand on souhaite prendre en compte un autre facteur de bloc sans rendre concomittante sa variation avec les variations des facteurs constitutifs des carrés latins.

8.1.2 Plans en carrés latins 4×4 et suivants

De la même façon que pour les carrés latins d'ordre 3, on obtient des carrés latins d'ordre n quelconque. Ainsi il existe 4 carrés latins normalisés d'ordre 4 que l'on donne au tableau 8.6. Au total il existe 576 carrés latins d'ordre 4.

1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
2	3	4	1	2	1	4	3	2	1	4	3	2	4	1	3
3	4	1	2	3	2	1	4	3	4	2	1	3	1	4	2
4	1	2	3	4	3	2	1	4	3	1	2	4	3	2	1

Tableau 8.6 : Les 4 carrés latins normalisés d'ordre 4.

Il existe 56 carrés latins normalisés d'ordre 5 et au total 161280 carrés latins d'ordre 5. On donne au tableau 8.7 un exemple de carré latin normalisé d'ordre 5.

1	2	3	4	5
2	1	5	3	4
3	4	1	5	2
4	5	2	1	3
5	3	4	2	1

Tableau 8.7 : Un exemple de carré latin normalisé d'ordre 5.

Il existe 9408 carrés latins normalisés d'ordre 6 et au total 818851200 carrés latins d'ordre 6. On donne un exemple de carré latin normalisé d'ordre 6 au tableau 8.8.

1	2	3	4	5	6
2	3	6	1	4	5
3	6	2	5	1	4
4	5	1	2	6	3
5	1	4	6	3	2
6	4	5	3	2	1

Tableau 8.8 : Un exemple de carré latin normalisé d'ordre 6.

De façon générale pour q carrés latins normalisés d'ordre n il existe au total $q \times n! \times (n-1)!$ carrés latins d'ordre n .

On trouvera d'autres éléments sur la construction des carrés latins sur le site :

http://www.recrepmath.qc.ca/dict_latin_carre.htm

Enfin remarquons que n^2 expériences seulement sont à réaliser au lieu de n^3 expériences quand un plan d'expériences à 3 facteurs est agencé selon un carré latin, ce qui représente une diminution drastique du coût expérimental dès que $n \geq 3$.

Propriété d'orthogonalité

Illustrons-la avec le carré latin d'ordre 5, donné au tableau 8.7. En développant ce carré et en codant les niveaux des trois facteurs par -2, -1, 0, +1, +2 on vérifie que les produits scalaires des colonnes deux à deux sont nuls.

8.1.3 Modèle associé au plan en carré latin

Cas standard

Le modèle statistique associé au plan en carré latin d'ordre n s'écrit :

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \tau_k + \varepsilon_{ijk} \quad (8.1)$$

avec :

- $i, j, k = 1, \dots, n$,
- Y_{ijk} la variable aléatoire représentant la réponse du phénomène étudié, on notera y_{ijk} une réalisation (\equiv une observation du phénomène \equiv un résultat expérimental) de cette variable aléatoire,
- μ un effet moyen global,
- $\alpha_i, \beta_j, \tau_k$ les effets (principaux) des modalités des trois facteurs respectivement étudiés : le facteur "ligne", le facteur "colonne", et le troisième facteur qu'on appellera dorénavant, comme c'est l'usage, le facteur traitement,
- ε_{ijk} un terme d'erreur aléatoire (erreur expérimentale) qu'on supposera suivre une loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, avec σ^2 inconnue.

C'est un modèle purement additif, aucun terme d'interaction n'est présent. L'estimation (sans biais) des termes $\mu + \alpha_i$, $\mu + \beta_j$, $\mu + \tau_k$, ainsi que les prédictions \hat{y}_{ijk} sont obtenues usuellement dans le cadre de l'Analyse de Variance (voir chapitre 4), et des résultats complémentaires sont obtenus avec la régression (voir un exemple traité au paragraphe suivant).

On aboutit dans ce cadre à la décomposition de la somme des carrés totale (SCT) qui s'exprime comme la somme des carrés expliquée (SCE) et la somme des carrés résiduelle (SCR), de la façon suivante (en indices apparaissent les ddl associés à chaque somme de carrés) :

$$SCT_{(n^2-1)} = SCE_{3(n-1)} + SCR_{(n-2)(n-1)} \quad (8.2)$$

La *SCE* elle-même se décompose en somme de sommes de carrés expliquées par chaque facteur : facteur ligne, facteur colonne, et le facteur traitement. On obtient donc :

$$SCT_{(n^2-1)} = SC(\text{ligne})_{(n-1)} + SC(\text{colonne})_{(n-1)} + SC(\text{traitement})_{(n-1)} + SCR_{(n-2)(n-1)} \quad (8.3)$$

et l'équation aux ddl :

$$n^2 - 1 = (n - 1) + (n - 1) + (n - 1) + (n - 2)(n - 1) \quad (8.4)$$

En explicitant les différents termes de (8.3) on obtient respectivement :

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,k} (y_{ijk} - \bar{y}_{...})^2 &= n \sum_{i=1}^n (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 + n \sum_{j=1}^n (\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...})^2 + n \sum_{k=1}^n (\bar{y}_{..k} - \bar{y}_{...})^2 \\ &+ \sum_{i,j,k} (\hat{y}_{ijk} - y_{ijk})^2 \end{aligned} \quad (8.5)$$

De façon équivalente à la section 4.4 on a :

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i,j,k} y_{ijk}^2 \right) - (n^2 \bar{y}_{...}^2) &= \left(n \sum_{i=1}^n \bar{y}_{i..}^2 \right) - (n^2 \bar{y}_{...}^2) \\ &+ \left(n \sum_{j=1}^n \bar{y}_{.j.}^2 \right) - (n^2 \bar{y}_{...}^2) \\ &+ \left(n \sum_{k=1}^n \bar{y}_{..k}^2 \right) - (n^2 \bar{y}_{...}^2) \\ &+ \sum_{i,j,k} (\hat{y}_{ijk} - y_{ijk})^2 \end{aligned} \quad (8.6)$$

où :

- $y_{...} = \sum_{i,j,k} y_{ijk}$
- $\bar{y}_{...} = \frac{1}{n^2} \sum y_{...}$
- $\sum y_{i..}$ est la somme des n résultats de la ligne i , tandis que toutes les modalités des facteurs colonne et traitement ont été visitées,
- $\sum y_{.j.}$ est la somme des n résultats de la colonne j , tandis que toutes les modalités des facteurs ligne et traitement ont été visitées,
- $\sum y_{..k}$ est la somme des n résultats correspondant aux n modalités du facteur traitement tandis que toutes les modalités des facteurs ligne et colonne ont été visitées,
- $\bar{y}_{i..} = \frac{1}{n} \sum y_{i..}$ et $\bar{y}_{.j.}$ et $\bar{y}_{..k}$ sont définies de façon analogue.

On a aussi

$$\hat{y}_{ijk} = \bar{y}_{...} + (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{..k} - \bar{y}_{...}) \quad (8.7)$$

et un écart au modèle sera :

$$e_{ijk} = y_{ijk} - \hat{y}_{ijk} = y_{ijk} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{..k} + 2\bar{y}_{...} \quad (8.8)$$

En prenant la convention habituelle $\sum \alpha_i = \sum \beta_j = \sum \gamma_k = 0$ on sait que :

- $\bar{y}_{...}$ est une estimation sans biais de μ
- $\bar{y}_{i..}$ est une estimation sans biais de $\mu + \alpha_i$
- $\bar{y}_{.j.}$ est une estimation sans biais de $\mu + \beta_j$
- $\bar{y}_{..k}$ est une estimation sans biais de $\mu + \gamma_k$

On sait aussi que pour les carrés moyens CM on a :

- $CM(\text{ligne}) = SC(\text{ligne}) / (n - 1)$ est une estimation sans biais de $\sigma^2 + n\sigma_{\text{ligne}}^2$,
- $CM(\text{colonne}) = SC(\text{colonne}) / (n - 1)$ est une estimation sans biais de $\sigma^2 + n\sigma_{\text{colonne}}^2$,
- $CM(\text{traitement}) = SC(\text{traitement}) / (n - 1)$ est une estimation sans biais de $\sigma^2 + n\sigma_{\text{traitement}}^2$,
- $CMR = SCR / (n - 1)(n - 2)$ est une estimation sans biais de σ^2 .

La statistique de test utilisée pour décider de la significativité d'un des 3 facteurs est définie par :

$$F_{obs} = \frac{\frac{SC_{facteur}}{n-1}}{\frac{SCR}{(n-2)(n-1)}} = \frac{CM_{facteur}}{CMR} \quad (8.9)$$

valeur que l'on comparera au quantile $\mathcal{F}((n - 1), (n - 2)(n - 1); \alpha)$, pour un risque donné α , de la table de Fisher-Snedecor.

Un exemple d'application de dispositif en carré latin d'ordre 6 est traité en section 8.4.

Remarque

En toute rigueur il ne faut pas oublier que ce test présuppose la randomisation complète dans le dispositif. Or le principe de construction du carré latin implique que les facteurs ligne et colonne forment une restriction à la randomisation, et donc le test précédent est discutable s'il sert à tester la significativité de ces deux facteurs. On restera donc prudent si F_{obs} s'avère proche de la valeur de la table de F-S. Dans la pratique, si ce F_{obs} est nettement plus grand que $\mathcal{F}((n - 1), (n - 2)(n - 1); \alpha)$ il sera toutefois légitime de suspecter des effets significatifs de ces facteurs ligne et colonne.

Carré latin avec une donnée manquante

Le plan d'expériences en carré latin défini depuis le début de ce chapitre ne conduit qu'à un résultat expérimental par case. Lors de la réalisation des expériences il peut arriver qu'une des cases ne produise pas un résultat y_{ijk} . Par exemple la parcelle du champ correspondant à une des cases du carré latin a été dévastée (orage, grêle, ...), ou, dans un protocole biopharmaceutique, le patient correspondant à une des cases est perdu de vue, etc...

Cette donnée manquante va provoquer un très grand déséquilibre du dispositif notamment la perte de l'orthogonalité parfaite initiale. On peut limiter la gravité de ces conséquences en faisant une estimation de la donnée manquante quand celle-ci est unique. L'estimation de la donnée manquante \check{y}_{ijk} peut se faire par la formule suivante :

$$\check{y}_{ijk} = \frac{n(y'_{i..} + y'_{.j.} + y'_{..k}) - 2y'_{...}}{(n-2)(n-1)} \quad (8.10)$$

où les primes signalent les totaux définis comme au paragraphe précédent mais calculés sans la valeur manquante.

Toutefois, dans le cas d'ordre 3 il ne faudra pas espérer tirer des conclusions fiables car la *SCR* ne sera associée qu'à $(3-2)(3-1)$ soit 2 ddl.

Pour éviter ce type de difficulté, quand c'est possible, on réalisera un dispositif en carré latin répété, dispositif que l'on étudie maintenant.

Carré latin répété

Il y a trois façons de répéter un plan en carré latin, chaque façon conduisant à un nombre de ddl différents à associer à chaque somme de carrés. Explicitons les trois schémas de répétition correspondants ci-après.

Schéma 1 : les modalités des facteurs ligne et colonne sont inchangées C'est le schéma le plus "naturel" : les modalités des facteurs lignes et colonnes sont inchangées, et on répète les expériences à l'intérieur de chaque case ; on dispose ainsi de r expériences répétées dans chaque case, soit rn^2 résultats au total. Les nombres de ddl à associer aux différentes sources de variation sont :

- $(n-1)$ à chacun des trois facteurs,
 - $(r-1)$ aux répétitions de chaque case,
 - $(n-1)[r(n+1)-3]$ pour la résiduelle,
- ce qui conduit à l'équation des ddl suivante :

$$rn^2 - 1 = 3(n-1) + (r-1) + (n-1)[r(n+1)-3] \quad (8.11)$$

et conduit à modifier en conséquence les ddl dans la statistique de test (8.9).

Schéma 2 : les modalités du facteur ligne ou colonne sont changées Par exemple, si les lignes sont répétées avec des modalités modifiées à chaque fois, les nombres de ddl à associer aux différentes sources de variation sont :

- $(n-1)$ au facteur colonne,
- $r(n-1)$ au facteur ligne,
- $(n-1)$ au facteur traitement,
- $(r-1)$ aux répétitions,
- $(n-1)(rn-1)$ pour la résiduelle,

ce qui conduit à l'équation des ddl suivante :

$$rn^2 - 1 = (n - 1) + r(n - 1) + (n - 1) + (r - 1) + (n - 1)(rn - 1) \quad (8.12)$$

et conduit à modifier en conséquence les ddl dans la statistique de test (8.9).

Schéma 3 : les modalités des facteur ligne et colonne sont changées Les nombres de ddl à associer aux différentes sources de variation sont :

- $r(n - 1)$ au facteur colonne,
- $r(n - 1)$ au facteur ligne,
- $(n - 1)$ au facteur traitement,
- $(r - 1)$ aux répétitions,
- $(n - 1)[r(n - 1) - 1]$ pour la résiduelle,

ce qui conduit à l'équation des ddl suivante :

$$rn^2 - 1 = r(n - 1) + r(n - 1) + (n - 1) + (r - 1) + (n - 1)[r(n - 1) - 1] \quad (8.13)$$

et conduit à modifier en conséquence les ddl dans la statistique de test (8.9).

Un exemple

Ce serait la situation d'un expérimentateur souhaitant étudier l'effet dose d'un produit pharmaceutique prenant n niveaux de dose (pas forcément équidistants puisque cet effet dose serait un effet traitement considéré comme un facteur discret) sur des rats de laboratoire, en faisant varier aussi la nature de l'excipient du produit (le facteur ligne) et l'opérateur (le facteur colonne).

Dans un plan en carré latin simple le nombre total d'expériences à réaliser serait n^2 sur n^2 rats, et donc un seul rat ne serait testé dans chaque case du carré latin, ce qui semble un plan bien fragile.

Un usage répandu est de répéter ce plan selon le schéma 1 : r rats (par exemple $r = 5$) seront testés dans chaque case. On peut aussi répéter selon le schéma 2 ou 3 en fonction de la variabilité supposée a priori (ou posteriori après analyse des résultats d'un premier plan) du facteur nature de l'excipient ou du facteur opérateur.

Cet exemple permet d'illustrer aussi la nature d'un facteur aléatoire, ici un facteur bloc aléatoire. En effet, si on suppose disposer de nombreux opérateurs, les n choisis (au hasard) pour le plan constituent un échantillon aléatoire : le facteur opérateur est un facteur bloc aléatoire. C'est un facteur de nuisance car l'intérêt du plan n'est pas d'étudier les opérateurs (!) mais bien l'effet dose qui est le facteur d'intérêt. On peut considérer ici que le facteur excipient est un aussi un facteur de nuisance, mais on peut imaginer que seuls ces n excipients différents sont disponibles sur le marché pour ce produit pharmaceutique, et alors ce facteur sera un facteur bloc fixe.

8.2 Plan en carré latin généralisé : gréco-latin et suivants

La question suivante à se poser est très naturelle. Le plan en carré latin vu ci-dessus ne permet d'étudier que trois facteurs à n modalités chacun, mais est-il généralisable pour plus de trois facteurs? La réponse n'est pas complètement positive mais il existe quelques dispositifs efficaces qui traitent certains nombres de facteurs supérieurs à 3.

8.2.1 Définition d'un carré gréco-latin

Le plan en gréco-latin permet d'étudier quatre facteurs à n modalités chacun, en n^2 expériences seulement, mais pour certaines valeurs de n seulement. Définissons d'abord un carré gréco-latin.

Un carré gréco-latin, appelé aussi carré deux fois latin, ou carré eulérien, est un tableau à n lignes et n colonnes, s'il existe, dont les cases n^2 cases sont occupées par n^2 couples de motifs différents (chiffres, lettres, symboles, ...) répartis de manière que chacun des couples n'apparaisse qu'une fois et une seule dans chaque ligne et chaque colonne. On dit que le carré gréco-latin, dit d'ordre n , est formé de deux carrés latins **orthogonaux**.

Son nom est simplement dû à l'utilisation historique de lettres latines pour représenter la première série de motifs et de lettres grecques pour représenter la seconde série de motifs. On peut évidemment utiliser des chiffres à la place des lettres s'ils sont donnés dans un ordre fixé.

Examinons dans le détail le carré gréco-latin 3×3 dans le paragraphe suivant, et comment un plan basé sur ce carré permet l'étude de **quatre facteurs discrets**, chacun prenant **trois niveaux ou plus**.

8.2.2 Plan en carré gréco-latin d'ordre 3

Construction

Soit les deux carrés latins 3×3 donnés au tableau 8.9.

a	b	c	α	β	γ
b	c	a	γ	α	β
c	a	b	β	γ	α

Tableau 8.9 : Deux carrés latins orthogonaux 3×3 .

Ils sont orthogonaux car si on les superpose on obtient le carré gréco-latin au tableau 8.10.

$a\alpha$	$b\beta$	$c\gamma$
$b\gamma$	$c\alpha$	$a\beta$
$c\beta$	$a\gamma$	$b\alpha$

Tableau 8.10 : Carré gréco-latin 3×3 .

On observe effectivement que chaque couple n'apparaît qu'une fois et une seule dans chaque ligne et chaque colonne.

En utilisant la notation par les chiffres on peut partir des carrés latins orthogonaux du tableau 8.11 :

1	2	3	1	2	3
2	3	1	3	1	2
3	1	2	2	3	1

Tableau 8.11 : Deux carrés latins orthogonaux 3×3 .

et arriver au carré gréco-latin du tableau 8.12 identique au carré gréco-latin du tableau 8.10.

1, 1	2, 2	3, 3
2, 3	3, 1	1, 2
3, 2	1, 3	2, 1

Tableau 8.12 : Carré gréco-latin 3×3 .

En effet, on observe dans le tableau 8.12 qu'aucune paire n'est répétée.

Un premier facteur X prendra trois niveaux X_1, X_2, X_3 symbolisés par les trois lignes du carré, un deuxième facteur Y prendra trois niveaux Y_1, Y_2, Y_3 symbolisés par les trois colonnes du carré, un troisième facteur Z prendra trois niveaux Z_1, Z_2, Z_3 symbolisés par la première série de chiffres à l'intérieur des cases, et enfin un quatrième facteur W symbolisés par trois niveaux W_1, W_2, W_3 symbolisés par la seconde série de chiffres à l'intérieur des cases.

De façon analogue au carré latin d'ordre 3, et en gardant la même numérotation, on peut donner au tableau 8.13 la forme factorielle (fractionnaire) du carré gréco-latin d'ordre 3.

n° exp	X	Y	Z	W
1	1	1	1	1
2	1	2	2	2
3	1	3	3	3
4	2	1	2	3
5	2	2	3	1
6	2	3	1	2
7	3	1	3	2
8	3	2	1	3
9	3	3	2	1

Tableau 8.13 : Carré gréco-latin 3×3 sous la forme d'un plan d'expériences factoriel (fractionnaire).

Propriétés

Orthogonalité Ce dispositif en carré gréco-latin 3×3 est un dispositif orthogonal. On peut l'illustrer très facilement en recodant d'abord les niveaux des facteurs en -1 , 0 , $+1$, le tableau 8.10 devenant le tableau 8.14.

$-1, -1$	$0, 0$	$+1, +1$
$0, +1$	$+1, -1$	$-1, 0$
$+1, 0$	$-1, +1$	$0, -1$

Tableau 8.14 : Carré gréco-latin 3×3 du tableau 8.10 avec codage.

En développant le plan ainsi codé au tableau 8.14 on aboutit au plan d'expériences sous forme factorielle du tableau 8.15.

n° exp	X	Y	Z	W
1	-1	-1	-1	-1
2	-1	0	0	0
3	-1	$+1$	$+1$	$+1$
4	0	-1	0	$+1$
5	0	0	$+1$	-1
6	0	$+1$	-1	0
7	$+1$	-1	$+1$	0
8	$+1$	0	-1	$+1$
9	$+1$	$+1$	0	-1

Tableau 8.15 : Carré gréco-latin 3×3 sous la forme d'un plan d'expériences factoriel (fractionnaire) codé.

On trouve zéro pour les produits scalaires des vecteurs-colonnes du tableau 8.15 :

Donc on peut étudier quatre facteurs à trois niveaux chacun en 9 neuf expériences seulement, au lieu des 81 expériences d'un plan factoriel complet 3^4 .

Répétitions Comme pour les carrés latins on peut aussi répéter le plan en carré gréco-latin en attribuant les bons ddl lors de l'analyse de la variance.

Nombre total de carrés gréco-latins 3×3 Il n'existe qu'un seul carré gréco-latin d'ordre 3. On démontre que si chaque facteur admet n niveaux alors il existe au maximum $n - 1$ carrés latins mutuellement orthogonaux, et ainsi le nombre maximum de facteurs que l'on peut étudier avec des carrés gréco-latins est $(n - 1) + 2 = n + 1$, le chiffre 2 étant dû aux deux facteurs ligne et colonne.

8.2.3 Plans en carré gréco-latin d'ordre 4 et plus

Carré gréco-latin d'ordre 4

Avec les carrés latins d'ordre 4 du tableau 8.16, orthogonaux deux à deux, on peut construire trois carrés gréco-latins d'ordre 4.

1	2	3	4
2	1	4	3
3	4	1	2
4	3	2	1

1	2	3	4
4	3	2	1
2	1	4	3
3	4	1	2

1	2	3	4
3	4	1	2
4	3	2	1
2	1	4	3

Tableau 8.16 : Trois carrés latins orthogonaux 2 à 2, d'ordre 4.

On donne au tableau 8.17 les trois carrés gréco-latins d'ordre 4 possibles à partir du tableau 8.16.

1, 1	2, 2	3, 3	4, 4
2, 4	1, 3	4, 2	3, 1
3, 2	4, 1	1, 4	2, 3
4, 3	3, 4	2, 1	1, 2

1, 1	2, 2	3, 3	4, 4
2, 3	1, 4	4, 1	3, 2
3, 4	4, 3	1, 2	2, 1
4, 2	3, 1	2, 4	1, 3

1, 1	2, 2	3, 3	4, 4
4, 3	3, 4	2, 1	1, 2
2, 4	1, 3	4, 2	3, 1
3, 2	4, 1	1, 4	2, 3

Tableau 8.17 : Trois carrés gréco-latins orthogonaux d'ordre 4.

Carré gréco-latin d'ordre 5

Avec les quatre carrés latins orthogonaux d'ordre 5 du tableau 8.18 on obtient un carré gréco-latin d'ordre 5 en prenant au hasard deux carrés latins parmi ces quatre.

1	2	3	4	5
2	3	4	5	1
3	4	5	1	2
4	5	1	2	3
5	1	2	3	4

1	2	3	4	5
3	4	5	1	2
5	1	2	3	4
2	3	4	5	1
4	5	1	2	3

1	2	3	4	5
4	5	1	2	3
2	3	4	5	1
5	1	2	3	4
3	4	5	1	2

1	2	3	4	5
5	1	2	3	4
4	5	1	2	3
3	4	5	1	2
2	3	4	5	1

Tableau 8.18 : Quatre carrés latins orthogonaux 2 à 2, d'ordre 5.

Par exemple avec les deux premiers on obtient le carré gréco-latin du tableau 8.19.

1, 1	2, 2	3, 3	4, 4	5, 5
2, 3	3, 4	4, 5	5, 1	1, 2
3, 5	4, 1	5, 2	1, 3	2, 4
4, 2	5, 3	1, 4	2, 5	3, 1
5, 4	1, 5	2, 1	3, 2	4, 3

Tableau 8.19 : Un carré gréco-latin 5×5 .

Carré gréco-latin d'ordre 6

Il n'existe pas de carré gréco-latin d'ordre 6, la démonstration (difficile) a été faite et publiée.

Carré gréco-latin d'ordre 7

La superposition des deux carrés latins d'ordre 7 du tableau 8.20 conduit à un carré gréco-latin d'ordre 7.

1	2	3	4	5	6	7
2	3	4	5	6	7	1
3	4	5	6	7	1	2
4	5	6	7	1	2	3
5	6	7	1	2	3	4
6	7	1	2	3	4	5
7	1	2	3	4	5	6

1	2	3	4	5	6	7
3	4	5	6	7	1	2
5	6	7	1	2	3	4
7	1	2	3	4	5	6
2	3	4	5	6	7	1
4	5	6	7	1	2	3
6	7	1	2	3	4	5

Tableau 8.20 : Deux carrés latins orthogonaux, d'ordre 7.

Carré gréco-latin d'ordre 8

La superposition des deux carrés latins d'ordre 8 du tableau 8.21 conduit à un carré gréco-latin d'ordre 8.

1	2	3	4	5	6	7	8
2	1	4	3	6	5	8	7
3	4	1	2	7	8	5	6
4	3	2	1	8	7	6	5
5	6	7	8	1	2	3	4
6	5	8	7	2	1	4	3
7	8	5	6	3	4	1	2
8	7	6	5	4	3	2	1

1	2	3	4	5	6	7	8
5	6	7	8	1	2	3	4
2	1	4	3	6	5	8	7
6	5	8	7	2	1	4	3
7	8	5	6	3	4	1	2
3	4	1	2	7	8	5	6
8	7	6	5	4	3	2	1
4	3	2	1	8	7	6	5

Tableau 8.21 : Deux carrés latins orthogonaux, d'ordre 8.

Carré gréco-latin d'ordre 9

La superposition des deux carrés latins d'ordre 9 du tableau 8.22 conduit à un carré gréco-latin d'ordre 9.

1	2	3	4	5	6	7	8	9
2	3	1	5	6	4	8	9	7
3	1	2	6	4	5	9	7	8
4	3	6	7	8	9	1	2	3
5	6	4	8	9	7	2	3	1
6	4	5	9	7	8	3	1	2
7	8	9	1	2	3	4	5	6
8	9	7	2	3	1	5	6	4
9	7	8	3	1	2	6	4	5

1	2	3	4	5	6	7	8	9
7	8	9	1	2	3	4	5	6
4	5	6	7	8	9	1	2	3
2	4	1	5	6	4	8	9	7
8	9	7	2	3	1	5	6	4
5	6	4	8	9	7	2	3	1
3	1	2	6	4	5	9	7	8
9	7	8	3	1	2	6	4	5
6	4	5	9	7	8	3	1	2

Tableau 8.22 : Deux carrés latins orthogonaux, d'ordre 9.

8.2.4 Plans en carré hyper-gréco-latin

Cinq facteurs et plus peuvent être étudiés avec la généralisation des plans gréco-latins ce qui conduit aux plans hyper-gréco-latins. Ceux-ci seront obtenus aussi par superposition de carrés latins orthogonaux.

Ainsi la superposition des 3 carrés latins orthogonaux d'ordre 4 du tableau 8.16 donne un carré hyper-gréco-latin d'ordre 4 permettant l'étude de 5 facteurs à 4 niveaux chacun, en 16 expériences seulement.

La superposition de 3 carrés latins orthogonaux d'ordre 5 pris au hasard dans le tableau 8.18 donne un carré hyper-gréco-latin d'ordre 5 permettant l'étude de 5 facteurs à 5 niveaux chacun, en 16 expériences seulement. Mais on a aussi avec la superposition des 4 carrés latins de ce même tableau 8.18 un carré hyper-hyper-gréco-latin d'ordre 5 permettant l'étude de 6 facteurs à 5 niveaux chacun, en 16 expériences seulement.

Toutefois, le nombre de carrés gréco-latins et hyper-gréco-latins (et suivants) possibles diminue très vite avec le nombre de facteurs et le nombre de niveaux. On appellera carré latin généralisé tout carré gréco-latin et suivants (hyper une fois, hyper deux fois, etc....), tous étant toujours obtenus par superposition de carrés latins orthogonaux.

On verra au plus loin comment générer avec le logiciel SAS un carré latin généralisé pour étudier 9 facteurs, à 8 niveaux chacun, en 64 expériences seulement.

8.2.5 Modèle associé au plan en carré latin généralisé

C'est un modèle du même type que celui postulé pour le carré latin (voir équation (8.1)), il suffit de rajouter les termes correspondant aux facteurs supplémentaires.

8.3 Génération des carrés latins et carrés latins généralisés avec SAS

Avec le logiciel SAS on peut générer ces plans au moyen de deux procédures : la procédure Factex et la procédure Plan. Les deux procédures ont des avantages complé-

mentaires.

Carré latin d'ordre 3

Avec la procédure Factex, si on utilise le programme FACTEX18 suivant :

```
/****** FACTEX18 *****/;
proc factex;
  factors x1-x3 / nlev=3;
  size design=9;
  model res=3;
  output out=resul;
proc print data=resul;
run;
/*******/;
```

on obtient :

Obs	x1	x2	x3
1	-1	-1	-1
2	-1	0	1
3	-1	1	0
4	0	-1	1
5	0	0	0
6	0	1	-1
7	1	-1	0
8	1	0	-1
9	1	1	1

Avec la procédure Plan, si on utilise le programme PLAN01 suivant :

```
/****** PLAN01 *****/;
proc plan;
  factors
    rowsx1=3 ordered
    colsx2=3 ordered;
  treatments x3=3 cyclic;

  output out=latin03
    rowsx1 cvals=('-1' '0' '+1')
    colsx2 cvals=('-1' '0' '+1')
```

```

x3      cvals=(' -1' ' 0' ' +1');

proc print data=latin03;

run; quit ; run;
/*****/;

```

Commentaire

- C'est la commande ordered sur les facteurs ligne et colonne qui permet d'avoir un carré latin normalisé.
- La commande cyclic indique que les modalités du facteur x3 seront obtenues par permutation circulaire.

on obtient :

```

/*****/

```

The PLAN Procedure

Plot Factors

Factor	Select	Levels	Order
rowsx1	3	3	Ordered
colsx2	3	3	Ordered

Treatment Factors

Factor	Select	Levels	Order	Initial Block / Increment
x3	3	3	Cyclic	(1 2 3) / 1

rowsx1	--colsx2--			--x3--		
1	1	2	3	1	2	3
2	1	2	3	2	3	1
3	1	2	3	3	1	2

Obs	rowsx1	colsx2	x3
1	-1	-1	-1
2	-1	0	0
3	-1	+1	+1
4	0	-1	0
5	0	0	+1
6	0	+1	-1
7	+1	-1	+1
8	+1	0	-1
9	+1	+1	0

/******
 /*****
 /*****

Carré gréco-latin d'ordre 3

Avec la procédure Factex, si on utilise le programme FACTEX19 suivant :

```

/***** FACTEX19 *****/;
proc factex;
  factors x1-x4 / nlev=3;
  size design=9;
  model res=3;
  output out=resul
    x1 nvals=(1 2 3)
    x2 nvals=(1 2 3)
    x3 nvals=(1 2 3)
    x4 nvals=(1 2 3);

proc print data=resul;
run;
/*****

```

on obtient le carré gréco-latin 3×3 suivant :

```

/*****

Obs    x1    x2    x3    x4

1      1     1     1     1
2      1     2     3     3
3      1     3     2     2

```

4	2	1	3	2
5	2	2	2	1
6	2	3	1	3
7	3	1	2	3
8	3	2	1	2
9	3	3	3	1

/*****/

Avec la procédure Plan, si on utilise le programme PLAN02 suivant :

```

/***** Plan02.SAS *****/
proc plan;
  factors
    rowsx1=3 ordered
    colsx2=3 ordered ;
    treatments x3=3 cyclic
              x4=3 cyclic2;
  output out=g103;

proc print data=g103;
run; quit; run;
/*****/

```

Commentaire

- La commande *cyclic2* indique que l'incrément de la permutation pour générer les modalités du facteur x_4 sera 2.

on obtient :

```

/*****/

Obs    x1    x2    x3    x4

1      1     1     1     1
2      1     2     3     3
3      1     3     2     2
4      2     1     3     2
5      2     2     2     1
6      2     3     1     3
7      3     1     2     3

```


8	3	2	1	2
9	3	3	3	1

/******
 /*****

Carré latin généralisé d'ordre 8

L'intérêt de la procédure Factex se fait sentir quand on cherche à savoir s'il existe un carré latin généralisé d'un ordre donné ; la procédure indiquera alors à coup sûr si le carré demandé existe ou pas, et bien entendu le fournira s'il existe. Par exemple, il est difficile de savoir si un carré latin généralisé d'ordre 8 pour 9 facteurs existe ! Avec la procédure Factex, si on utilise le programme Factex20 suivant :

```

/***** FACTEX20 *****/;
proc factex;
  factors x1-x9 / nlev=8;
  size design=64;
  model res=3;
  output out=resul ;
proc print data=resul;
run;
/*****
```

on obtient dans la sortie suivante le carré demandé :

/******

Obs	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	1	7	7	7	7	7	7	7
3	0	2	3	3	3	3	3	3	3
4	0	3	4	4	4	4	4	4	4
5	0	4	6	6	6	6	6	6	6
6	0	5	1	1	1	1	1	1	1
7	0	6	5	5	5	5	5	5	5
8	0	7	2	2	2	2	2	2	2
9	1	0	7	6	5	4	3	2	1
10	1	1	0	1	2	3	4	5	6
11	1	2	4	5	6	7	0	1	2
12	1	3	3	2	1	0	7	6	5
13	1	4	1	0	3	2	5	4	7

14	1	5	6	7	4	5	2	3	0
15	1	6	2	3	0	1	6	7	4
16	1	7	5	4	7	6	1	0	3
17	2	0	3	1	7	5	6	4	2
18	2	1	4	6	0	2	1	3	5
19	2	2	0	2	4	6	5	7	1
20	2	3	7	5	3	1	2	0	6
21	2	4	5	7	1	3	0	2	4
22	2	5	2	0	6	4	7	5	3
23	2	6	6	4	2	0	3	1	7
24	2	7	1	3	5	7	4	6	0
25	3	0	4	7	2	1	5	6	3
26	3	1	3	0	5	6	2	1	4
27	3	2	7	4	1	2	6	5	0
28	3	3	0	3	6	5	1	2	7
29	3	4	2	1	4	7	3	0	5
30	3	5	5	6	3	0	4	7	2
31	3	6	1	2	7	4	0	3	6
32	3	7	6	5	0	3	7	4	1
33	4	0	6	2	3	7	1	5	4
34	4	1	1	5	4	0	6	2	3
35	4	2	5	1	0	4	2	6	7
36	4	3	2	6	7	3	5	1	0
37	4	4	0	4	5	1	7	3	2
38	4	5	7	3	2	6	0	4	5
39	4	6	3	7	6	2	4	0	1
40	4	7	4	0	1	5	3	7	6
41	5	0	1	4	6	3	2	7	5
42	5	1	6	3	1	4	5	0	2
43	5	2	2	7	5	0	1	4	6
44	5	3	5	0	2	7	6	3	1
45	5	4	7	2	0	5	4	1	3
46	5	5	0	5	7	2	3	6	4
47	5	6	4	1	3	6	7	2	0
48	5	7	3	6	4	1	0	5	7
49	6	0	5	3	4	2	7	1	6
50	6	1	2	4	3	5	0	6	1
51	6	2	6	0	7	1	4	2	5
52	6	3	1	7	0	6	3	5	2
53	6	4	3	5	2	4	1	7	0
54	6	5	4	2	5	3	6	0	7
55	6	6	0	6	1	7	2	4	3
56	6	7	7	1	6	0	5	3	4

57	7	0	2	5	1	6	4	3	7
58	7	1	5	2	6	1	3	4	0
59	7	2	1	6	2	5	7	0	4
60	7	3	6	1	5	2	0	7	3
61	7	4	4	3	7	0	2	5	1
62	7	5	3	4	0	7	5	2	6
63	7	6	7	0	4	3	1	6	2
64	7	7	0	7	3	4	6	1	5

/*****/

et on peut vérifier l'orthogonalité de ce dispositif, après codage (centrage des colonnes), avec le programme suivant :

```
proc corr nosimple noprob;run;
```

qui conduit, comme attendu, à la matrice de corrélation suivante (diagonale) :

Pearson Correlation Coefficients, N = 64

	x1	x2	x3	x4	x5
x1	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x2	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x3	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
x4	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
x5	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000
x6	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x7	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x8	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x9	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Pearson Correlation Coefficients, N = 64

	x6	x7	x8	x9
x1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x3	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x4	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

x5	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x6	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x7	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
x8	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
x9	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000

En revanche un carré latin généralisé d'ordre 10 pour 6 facteurs n'existe pas comme on le voit avec le programme suivant :

```

/***** FACTEX24 *****/;
proc factex;
  factors x1-x10 / nlev=6;
  size design=36;
  model res=3;
  output out=resul ;
proc print data=resul;
run;
/*****/;

```

qui conduit à :

```

/*****/
ERROR: For a fractional or blocked design,
       factors must have a prime power
       number of levels.
WARNING: No design to output.
/*****/

```

8.4 Exemples d'application des carrés latins et carrés latins généralisés

8.4.1 Carré latin d'ordre 6

Enoncé du problème à résoudre

On cherche à étudier assez finement la stabilité thermique d'une formulation galénique (pharmaceutique, par exemple un comprimé) en fonction de trois facteurs : le facteur température de l'enceinte (un facteur d'intérêt), le facteur "nature du stabilisant"

dans la formulation (un deuxième facteur d'intérêt), et le facteur "taux de porosité" (un facteur de nuisance, mais contrôlable). Les trois facteurs présente 6 niveaux (ou modalités) chacun. Comme l'expérimentateur suppose une absence d'interactions entre les facteurs il opte pour un plan en carré latin 6×6 pour mettre en évidence les effets (principaux) des niveaux de ces 3 facteurs : le facteur ligne sera le facteur "taux de porosité", le facteur colonne sera le facteur température, et les 6 lettres A, ..., F représenteront les 6 niveaux du facteur "nature du stabilisant", chaque lettre correspondant à un nouveau stabilisant dont l'expérimentateur cherche à évaluer l'effet. Une réponse physico-chimique spécialisée est mesurée lors de chacune des 36 expériences, ses valeurs figurent sur le carré latin donné au tableau 8.23, ainsi que les totaux des lignes et des colonnes. Ces données sont tirées de Cochran & Cox (1957, page 122).

F : 3.5	B : 4.2	A : 6.7	D : 6.6	C : 4.1	E : 3.8	28.9
B : 8.9	F : 1.9	D : 5.8	A : 4.5	E : 2.4	C : 5.8	29.3
C : 9.6	E : 3.7	F : -2.7	B : 3.7	D : 6.0	A : 7.0	27.3
D : 10.5	C : 10.2	B : 4.6	E : 3.7	A : 5.1	F : 3.8	37.9
E : 3.1	A : 7.2	C : 4.0	F : -3.3	B : 3.5	D : 5.0	19.5
A : 5.9	D : 7.6	E : -0.7	C : 3.0	F : 4.0	B : 8.6	28.4
41.5	34.8	17.7	18.2	25.1	34.0	171.3

Tableau 8.23. Carré latin 6×6 avec les résultats, et les totaux par ligne et par colonne.

Les totaux pour les lettres sont :

A : 36.4	B : 33.5	C : 36.7	D : 41.5	E : 16.0	F : 7.2
----------	----------	----------	----------	----------	---------

Analyse manuelle détaillée des résultats

On calcule les différentes sommes de carrés comme définies dans l'équation (8.5) à partir des totaux donnés au tableau 8.23 et des totaux attachés aux lettres :

- Terme correctif $= (171.3)^2 / 36 = 815.10$
- $SCT = (3.5)^2 + (4.2)^2 + \dots + (8.6)^2 - 815.10 = 329.63$
- $SC(\text{lignes : "taux de porosité"}) = (1/6) [(28.9)^2 + \dots + (28.4)^2] - 815.10 = 28.60$
- $SC(\text{colonnes : "température"}) = (1/6) [(41.5)^2 + \dots + (34.0)^2] - 815.10 = 78.87$
- $SC(\text{lettres : "nature stabilisant"}) = (1/6) [(36.4)^2 + \dots + (7.2)^2] - 815.10 = 155.60$
- $SCR = 329.63 - 28.60 - 78.87 - 155.60 = 66.56$

ce qui conduit à la table d'analyse de variance du tableau 8.24.

Source de variation	ddl	SC	CM	F_{obs}
lignes : taux de porosité	5	28.60	5.720	1.72
colonnes : température	5	78.87	15.774	4.74**
lettres : nature stab	5	155.60	31.120	9.35**
variation résiduelle	20	66.56	3.328	
total	35	329.63		

Tableau 8.24. Analyse de variance correspondant au tableau 8.23.

Les deux étoiles signalent une significativité d'au moins 1% (p-value < 0.01). Les effets des deux facteurs d'intérêt – facteurs "nature du stabilisant" et "température" – sont donc significatifs.

On peut étudier maintenant plus finement les effets des 6 stabilisants. Les moyennes correspondant aux 6 stabilisants sont :

A : 6.07	B : 5.58	C : 6.12	D : 6.92	E : 2.67	F : 1.20
----------	----------	----------	----------	----------	----------

et l'erreur standard estimée de chacune de ces moyennes est calculée par la formule usuelle :

$$\hat{\sigma}_m = \sqrt{CMR/n} \quad \text{soit ici } \sqrt{3.328/6} = 0.745$$

Pour tester la différence entre une paire de moyennes l'erreur standard est $0.745\sqrt{2} = 1.053$. Avec un risque α de 5% la valeur du T de Student de la table vaut $\mathcal{T}(20; 0.05) = 2.086$, et donc la différence entre deux moyennes doit être au moins de $2.086 \times 1.053 = 2.20$ pour atteindre un tel niveau de significativité. Ainsi les 6 stabilisants se répartissent en deux groupes : A, B, C, D d'une part et E, F d'autre part. On peut conclure en disant que les effets des stabilisants E et F sont équivalents, mais différents des 4 autres, ceux-ci étant équivalents entre eux.

Toutefois, Il faut signaler qu'il existe d'autre méthodes de comparaison de moyennes, celle utilisée ici étant la méthode LSD ("least squares difference"). Ces autres méthodes existent dans la procédure GLM du logiciel SAS comme on l'a vu au §4.5.4.

Programme SAS de génération du carré latin 6×6

Le code suivant :

```

/***** PLAN03 *****/
proc plan;
  factors poro=6 ordered temp=6 ordered/noprint;
  treatments stab=6 cyclic;
  output out=latin
    poro cvals=('1' '2' '3' '4' '5' '6')
    temp cvals=('1' '2' '3' '4' '5' '6')
    stab cvals=('A' 'B' 'C' 'D' 'E' 'F') ;
run;
data rep ;input y @@ ;cards;
  3.5 4.2 6.7 6.6 4.1 3.8
  8.9 1.9 5.8 4.5 2.4 5.8
  9.6 3.7 -2.7 3.7 6.0 7.0
  10.5 10.2 4.6 3.7 5.1 3.8
  3.1 7.2 4.0 -3.3 3.5 5.0
  5.9 7.6 -0.7 3.0 4.0 8.6

```

```

;
data total;merge latin rep;
proc print data=total;
run; quit; run;
/*****/

```

permet d'obtenir la sortie suivante :

```

/*****/
Obs      poro      temp      stab      y
1         1         1         A         3.5
2         1         2         B         4.2
3         1         3         C         6.7
4         1         4         D         6.6
5         1         5         E         4.1
6         1         6         F         3.8
7         2         1         B         8.9
8         2         2         C         1.9
9         2         3         D         5.8
10        2         4         E         4.5
11        2         5         F         2.4
12        2         6         A         5.8
13        3         1         C         9.6
14        3         2         D         3.7
15        3         3         E        -2.7
16        3         4         F         3.7
17        3         5         A         6.0
18        3         6         B         7.0
19        4         1         D        10.5
20        4         2         E        10.2
21        4         3         F         4.6
22        4         4         A         3.7
23        4         5         B         5.1
24        4         6         C         3.8
25        5         1         E         3.1
26        5         2         F         7.2
27        5         3         A         4.0
28        5         4         B        -3.3
29        5         5         C         3.5
30        5         6         D         5.0

```

31	6	1	F	5.9
32	6	2	A	7.6
33	6	3	B	-0.7
34	6	4	C	3.0
35	6	5	D	4.0
36	6	6	E	8.6

/*-----*/

Analyse des résultats avec le logiciel SAS

Le code SAS suivant :

```

/*-----*/
proc glm data=total;
    class poro temp stab;
    model y=poro temp stab/ss3 solution;
run;

```

/*-----*/

conduit à la sortie suivante :

/*-----*/

The GLM Procedure

Class Level Information

Class	Levels	Values
poro	6	1 2 3 4 5 6
temp	6	1 2 3 4 5 6
stab	6	A B C D E F

Number of Observations Read	36
Number of Observations Used	36

The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	15	125.7008333	8.3800556	0.82	0.6462
Error	20	203.9266667	10.1963333		
Corrected Total	35	329.6275000			

R-Square	Coeff Var	Root MSE	y Mean
0.381342	67.10690	3.193170	4.758333

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
poro	5	28.59916667	5.71983333	0.56	0.7286
temp	5	78.86916667	15.77383333	1.55	0.2204
stab	5	18.23250000	3.64650000	0.36	0.8712

Parameter	Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	5.483333333 B	2.12877986	2.58	0.0180
poro 1	0.083333333 B	1.84357744	0.05	0.9644
poro 2	0.150000000 B	1.84357744	0.08	0.9360
poro 3	-0.183333333 B	1.84357744	-0.10	0.9218
poro 4	1.583333333 B	1.84357744	0.86	0.4006
poro 5	-1.483333333 B	1.84357744	-0.80	0.4305
poro 6	0.000000000 B	.	.	.
temp 1	1.250000000 B	1.84357744	0.68	0.5055
temp 2	0.133333333 B	1.84357744	0.07	0.9431
temp 3	-2.716666667 B	1.84357744	-1.47	0.1562
temp 4	-2.633333333 B	1.84357744	-1.43	0.1686
temp 5	-1.483333333 B	1.84357744	-0.80	0.4305
temp 6	0.000000000 B	.	.	.

```

stab   A      0.500000000 B      1.84357744      0.27      0.7890
stab   B     -1.066666667 B      1.84357744     -0.58      0.5693
stab   C      0.150000000 B      1.84357744      0.08      0.9360
stab   D      1.333333333 B      1.84357744      0.72      0.4779
stab   E      0.033333333 B      1.84357744      0.02      0.9858
stab   F      0.000000000 B      .              .              .

```

NOTE: The X'X matrix has been found to be singular, and a generalized inverse was used to solve the normal equations. Terms whose estimates are followed by the letter 'B' are not uniquely estimable.

/*****/

Remarque :

Dans le domaine biologique ou biomédical, un plan en carré latin est d'utilisation fréquente quand on cherche à étudier l'effet "dose" d'un traitement donné tout en contrôlant deux autres facteurs (de nuisance ou d'intérêt), par exemple les facteurs "jour" et "heure".

8.4.2 Carré gréco-latin d'ordre 4

L'analyse d'un carré latin généralisé d'ordre n se fait comme pour un carré latin, en utilisant les nombres de degré de liberté donnés au tableau 8.25.

Source de variation	Degrés de liberté
Colonnes (répétitions)	$n - 1$
Lignes (période)	$n - 1$
Traitement 1	$n - 1$
Traitement 2	$n - 1$
Variation résiduelle	$(n - 1)(n - 3)$
Total	$n^2 - 1$

Tableau 8.25. Degrés de liberté d'un carré gréco-latin d'ordre 4.

Citons deux exemples pour illustrer son utilisation.

Exemple 1

Cet exemple est inspiré d'une étude réelle. On cherche à évaluer l'effet de nouveaux additifs (effet "traitement") pour l'essence de voiture sur la réduction d'émission d'oxydes d'azote. Quatre additifs sont à tester, mais il existe trois facteurs de nuisance évidents qui peuvent biaiser les estimations des effets de ces additifs s'ils ne sont pas contrôlés lors des expériences : ce sont la façon de conduire (effet "conducteur"), le type de voiture utilisé (effet "voiture"), et la période du test (hiver, été, pluie, ...effet "période"). Un

plan d'expériences en carré gréco-latin 4×4 a été réalisé en choisissant 4 modalités pour chacun des facteurs de nuisance.

Exemple 2

Cet exemple est également inspiré d'une étude réelle en milieu industriel. Pour préparer un matériau réfractaire une phase de calcination par passage dans un four-tunnel est nécessaire. Le matériau se présente sous forme de "gazettes", sorte de petites briques très plates et assez longues. Les gazettes sont placées à plat, en couches, à 4 par couche, et on peut mettre jusqu'à 16 gazettes dans un wagonnet qui en comporte 4. On cherche à savoir si le taux de calcination dépend de la position de la gazette dans le wagonnet, et du wagonnet lui-même, quand le train, constitué des 4 wagonnets A-B-C-D (dans cet ordre immuable), traverse le tunnel de calcination. Il y a 64 gazettes pour un passage du train. Pour des raisons de coût on ne peut analyser que 16 échantillons qui seront prélevés dans 16 gazettes différentes.

Cinq facteurs sont à prendre en compte :

- le facteur "wagonnet" à quatre modalités A, B, C et D,
- le facteur "abscisse du centre de gravité de la gazette dans le repère wagonnet", 4 abscisses équidistantes sont possibles,
- le facteur "ordonnée du centre de gravité de la gazette dans le repère wagonnet", 4 ordonnées équidistantes sont possibles,
- le facteur "abscisse de la partie échantillonnée dans une gazette par rapport au centre de gravité de cette gazette", 4 abscisses équidistantes sont possibles,
- le facteur "ordonnée de la partie échantillonnée dans une gazette par rapport au centre de gravité de cette gazette", 4 ordonnées équidistantes sont possibles.

Un plan d'expériences en carré hyper-gréco-latin 4×4 a été réalisé avec ces 5 facteurs.

8.4.3 Etude pharmacocinétique à base de carré latin

Cette étude basée sur un carré latin dont les unités expérimentales sont des sujets humains permet de montrer le traitement d'un modèle mixte, c'est-à-dire à effets fixes et effets aléatoires dans le modèle.

Enoncé du problème et carré latin

On étudie une réponse pharmacocinétique dans le sang suite à l'absorption d'un médicament, sur des sujets humains. Les 12 sujets a, b, ..., l sont répartis aléatoirement en 4 groupes de 3 selon le plan en carré latin 4×4 apparaissant au tableau 8.26 avec les résultats de la réponse pharmacocinétique.

G/P	Période			
Groupe ↓	1	2	3	4
G1	Dose B (a,f,l)	Dose C (a,f,l)	Dose A (a,f,l)	Dose D (a,f,l)
	52, 25, 25	54, 41, 45	11, 6, 9	57, 51, 54
G2	Dose A (b,g,i)	Dose B (b,g,i)	Dose D (b,g,i)	Dose C (b,g,i)
	16, 10, 13	39, 28, 37	74, 63, 77	49, 41, 59
G3	Dose D (c,e,j)	Dose A (c,e,j)	Dose C (c,e,j)	Dose B (c,e,j)
	68, 70, 97	12, 12, 16	44, 45, 67	27, 26, 39
G4	Dose C (d,h,k)	Dose D (d,h,k)	Dose B (d,h,k)	Dose A (d,h,k)
	55, 38, 54	92, 57, 89	27, 22, 37	14, 7, 15

Tableau 8.26. Carré latin avec sujets humains.

On utilisera les notations suivantes :

- A : facteur période (i)
- B : facteur dose (j)
- G : facteur groupe (k)
- y_{ijkm} : mesure observée de la réponse sur l'individu m du groupe k pendant la période j sous la dose i .
- \bar{A}_i : moyenne de la réponse sur la période i
- \bar{B}_j : moyenne de la réponse pour la dose j
- \bar{G}_k : moyenne de la réponse pour le groupe k
- \bar{G} : moyenne générale de la réponse
- \overline{AB}_{ij} : moyenne de la réponse sur la case ij
- $\bar{P}_{m(k)}$: moyenne de la réponse pour l'individu $m(k)$, c-a-d l'individu m dans le groupe k
- s : nombre de sujets par groupe (=3)
- n : nombre de groupes = nombre de périodes = nombre de doses = 4

Le modèle postulé

C'est un modèle d'analyse de variance avec effets fixes et effets aléatoires :

$$Y_{ijkm} = \mu + \delta_k + \pi_{m(k)} + \alpha_i + \beta_j + \alpha\beta_{ij} + \varepsilon_{ijkm}$$

avec :

- Y_{ijkm} : la variable aléatoire représentant la réponse du phénomène étudié, d'observation y_{ijkm}
- μ : un effet moyen global,
- δ_k : l'effet de la modalité k du facteur groupe, aléatoire, de loi supposée $\mathcal{N}(0, \sigma_\delta^2)$, avec $\sigma_\delta^2 = (1/(n-1)) \sum_{k=1}^n \delta_k^2$,
- $\pi_{m(k)}$: l'effet du sujet m dans le groupe k , aléatoire, de loi supposée $\mathcal{N}(0, \sigma_\pi^2)$,
- α_i : l'effet de la modalité i du facteur période α (fixe), dont l'estimateur $\hat{\alpha}$ aura une variance estimée $\hat{\sigma}_\alpha^2 = (1/(n-1)) \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i^2$,

- β_j : l'effet de la modalité j du facteur dose β (fixe), dont l'estimateur $\hat{\beta}$ aura une variance estimée $\hat{\sigma}_{\beta}^2 = (1/(n-1)) \sum_{j=1}^n \hat{\beta}_j^2$,
- $\alpha\beta_{ij}$: l'effet de l'interaction $\alpha\beta$ (fixe) entre les modalités α_i et β_j , dont l'estimateur $\widehat{\alpha\beta}$ aura une variance estimée $\hat{\sigma}_{\alpha\beta}^2 = (1/(n-1))^2 \sum_{i,j=1}^n \widehat{\alpha\beta}_{ij}$,
- ε_{ijkm} : terme d'erreur de loi supposée $\mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon}^2)$.

Les quatre décompositions de sommes de carrés

On donne ci-après les 4 décompositions de carrés utiles pour les tests ultérieurs. A chaque fois apparaît en première ligne les termes de la décomposition, en deuxième ligne les formules correspondantes de ces termes, en troisième ligne le calcul effectif des ces sommes de carrés, et en quatrième les ddl associés à celles-ci.

1. Décomposition de la somme des carrés totale par rapport au facteur sujet

$$\begin{aligned}
SCT &= SC(\text{intersujets}) + SC(\text{intrasujets}) & (8.14) \\
\sum_{i,j,k,m} (y_{ijkm} - \bar{G})^2 &= \sum_{k,m} n (\bar{P}_{m(k)} - \bar{G})^2 + \sum_{i,j,k,m} (y_{ijkm} - \bar{P}_{m(k)})^2 \\
27116 &= 2589 + 24527 \\
sn^2 - 1 &= sn - 1 + sn(n-1)
\end{aligned}$$

2. Décomposition de la somme des carrés totale par rapport aux facteurs période et dose

$$SCT = SC(\text{période}) + SC(\text{dose}) + SC(\text{période} \times \text{dose}) + SC(\text{intracases}) \quad (8.15)$$

soit :

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j,k,m} (y_{ijkm} - \bar{G})^2 &= \sum_i sn (\bar{A}_i - \bar{G})^2 + \sum_j sn (\bar{B}_j - \bar{G})^2 + \sum_{i,j} s (\overline{AB}_{ij} - \bar{A}_i - \bar{B}_j + \bar{G})^2 \\
&\quad + \sum_{i,j,k,m} (y_{ijkm} - \overline{AB}_{ij})^2 \\
27116 &= 397 + 22693 + 995 + 3031 \\
sn^2 - 1 &= (n-1) + (n-1) + (n-1)^2 + n^2(s-1)
\end{aligned}$$

3. Décomposition de la somme des carrés inter-sujets par rapport au facteur groupe

$$\begin{aligned}
 SC(\text{intersujets}) &= SC(\text{groupe}) + SC(\text{sujet}(\text{groupe})) & (8.16) \\
 n \sum_{k,m} (\bar{P}_{m(k)} - \bar{G})^2 &= n \sum_k s (\bar{G}_k - \bar{G})^2 + n \sum_{k,m} (\bar{P}_{m(k)} - \bar{G}_k)^2 \\
 2589 &= 435 + 2154 \\
 ns - 1 &= (n - 1) + n(s - 1)
 \end{aligned}$$

4. Décomposition de la somme des carrés intra-sujets

$$\begin{aligned}
 SC(\text{intrasujets}) &= SCT - SC(\text{intersujets}) \\
 \sum_{i,j,k,m} (y_{ijkm} - \bar{P}_{m(k)})^2 &= \sum_{i,j,k,m} (y_{ijkm} - \bar{G})^2 - n \sum_{k,m} (\bar{P}_{m(k)} - \bar{G})^2
 \end{aligned}$$

mais on a aussi :

$$\begin{aligned}
 SCT &= SC(\text{période}) + SC(\text{dose}) + SC(\text{période} \times \text{dose}) + SC(\text{intracases}) \\
 SC(\text{intersujets}) &= SC(\text{groupe}) + SC(\text{sujet}(\text{groupe}))
 \end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned}
 SC(\text{intrasujets}) &= SC(\text{période}) + SC(\text{dose}) + SC(\text{période} \times \text{dose})' + SC(\text{erreur}(\text{intra})) \\
 24526 &= 397 + 22693 + 559 + 877 \\
 sn(n - 1) &= (n - 1) + (n - 1) + (n - 1)(n - 2) + n(s - 1)(n - 1)
 \end{aligned}$$

avec :

$$SC(\text{période} \times \text{dose})' = SC(\text{période} \times \text{dose}) - SC(\text{groupe}) - SC(\text{sujet}(\text{groupe}))$$

Le programme SAS

```

/***** GLM08.SAS *****/;
data d1;
input y dose sujet $ periode groupe; datalines;
11 20 a 3 1
16 20 b 1 2
12 20 c 2 3
14 20 d 4 4
12 20 e 2 3

```

6 20 f 3 1
10 20 g 1 2
7 20 h 4 4
13 20 i 1 2
16 20 j 2 3
15 20 k 4 4
9 20 l 3 1
52 40 a 1 1
39 40 b 2 2
27 40 c 4 3
27 40 d 3 4
26 40 e 4 3
25 40 f 1 1
28 40 g 2 2
22 40 h 3 4
37 40 i 2 2
39 40 j 4 3
37 40 k 3 4
25 40 l 1 1
54 60 a 2 1
49 60 b 4 2
44 60 c 3 3
55 60 d 1 4
45 60 e 3 3
41 60 f 2 1
41 60 g 4 2
38 60 h 1 4
59 60 i 4 2
67 60 j 3 3
54 60 k 1 4
45 60 l 2 1
57 80 a 4 1
74 80 b 3 2
68 80 c 1 3
92 80 d 2 4
70 80 e 1 3
51 80 f 4 1
63 80 g 3 2
57 80 h 2 4
77 80 i 3 2
97 80 j 1 3
89 80 k 2 4
54 80 l 4 1

```

;

proc glm data=d1;
class dose sujet periode groupe;
model y=groupe sujet(groupe) periode dose periode*dose ;
random sujet(groupe);
test h=groupe e=sujet(groupe)/htype=1 etype=1;
run; quit; run;

/*****/

```

La sortie SAS

```

/*****/
The GLM Procedure

```

Class Level Information

Class	Levels	Values
dose	4	20 40 60 80
sujet	12	a b c d e f g h i j k l
periode	4	1 2 3 4
groupe	4	1 2 3 4

```

Number of Observations Read      48
Number of Observations Used      48

```

The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	23	26239.25000	1140.83696	31.23	<.0001

Error 24 876.66667 36.52778 -----> C1

Corrected Total 47 27115.91667

R-Square Coeff Var Root MSE y Mean
0.967670 14.75602 6.043821 40.95833

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
groupe	3	435.41667	145.13889	3.97	0.0197 --->C2
sujet(groupe)	8	2154.00000	269.25000	7.37	<.0001
periode	3	397.41667	132.47222	3.63	0.0274
dose	3	22692.75000	7564.25000	207.08	<.0001
dose*periode	6	559.66667	93.27778	2.55	0.0468 --->C3

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
groupe	0	0.00000	.	.	. --->C4
sujet(groupe)	8	2154.00000	269.25000	7.37	<.0001 -->C5
periode	3	397.41667	132.47222	3.63	0.0274 -->C6
dose	3	22692.75000	7564.25000	207.08	<.0001
dose*periode	6	559.66667	93.27778	2.55	0.0468

The GLM Procedure

Source	Type III Expected Mean Square
groupe	0
sujet(groupe)	Var(Error) + 4 Var(sujet(groupe)) ---> C7
periode	Var(Error) + Q(periode,dose*periode) --> C8
dose	Var(Error) + Q(dose,dose*periode) --> C9
dose*periode	Var(Error) + Q(dose*periode) ---> C10

The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Tests of Hypotheses Using the Type I
MS for sujet(groupe) as an Error Term

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
groupe	3	435.4166667	145.1388889	0.54	0.6687 --> C11

/*****

Commentaires sur le code Glm05.sas :

- C1 : c'est l'estimation de l'erreur "intra", on a $E(\text{carré moyen}) = \sigma_{\varepsilon}^2$.
- C2 : cette ligne "groupe" est fausse.
- C3 : la valeur 559.66667 correspond non pas au terme "dose×période" indiqué mais au terme $SC(\text{période} \times \text{dose})'$ développé plus haut.
- C4 : cette ligne "groupe" est fausse.
- C5 : cette ligne "groupe" est fausse ; mais les 2 lignes "groupe" et "sujet(groupe)" concernent la variabilité inter-sujets.
- C6 : les 3 lignes "periode", "dose", et "dose*periode" concernent la variabilité intra-sujets, et notons aussi la même remarque qu'en C3 pour "dose*periode".
- C7 : dans cette ligne $\text{Var}(\text{error}) = \sigma_{\varepsilon}^2$ et $\text{Var}(\text{sujet}(\text{groupe})) = \sigma_{\pi}^2$.
- C8 : dans cette ligne $Q(\text{periode}, \text{dose} * \text{periode}) = 12\sigma_{\alpha}^2$.
- C9 : dans cette ligne $Q(\text{dose}, \text{dose} * \text{periode}) = 12\sigma_{\beta}^2$.
- C10 : dans cette ligne $Q(\text{dose} * \text{periode}) = 3\sigma_{\alpha\beta}^2$.
- C8, C9, C10 : ces 3 lignes seront testées par rapport à σ_{ε}^2 .
- C11 : dans cette ligne on trouve le test correct pour le facteur "groupe" (bloc) ; on a en effet :

$$E(\text{carré moyen}) = \sigma_{\varepsilon}^2 + 4\sigma_{\pi}^2 + 22\sigma_{\delta}^2 \text{ estimé par } 145.1389$$

et on a aussi :

$$\mathcal{F}_{obs} = 0.54 = 145/269$$

avec :

$$269 = \text{estimation de la variabilité "sujet(groupe)"} = \sigma_{\varepsilon}^2 + 4\sigma_{\pi}^2$$

8.4.4 Le plan split-plot en carré latin

On a vu en section 6.4 ce plan sous forme standard. Il peut aussi être mis en oeuvre sous forme de carré latin. Considérons l'exemple formel suivant à 3 facteurs pour le carré latin 4×4 dans lequel chaque case (une parcelle ou "plot") est découpée en 4 sous-parcelles (subplots) correspondant aux 4 modalités d'un quatrième facteur. Dans chaque sous-parcelle on enregistre un résultat d'une réponse donnée.

Construisons-le pas-à-pas. Considérons d'abord le carré latin du tableau 8.27 où les modalités du facteur traitement sont représentées par les chiffres 1 à 4, et les 4 modalités du facteur bloc prennent les lettres A, \dots, D . Celles-ci ne définissent pas un traitement de carré latin puisque une même lettre est présente dans toute une colonne.

$C1$	$D3$	$A2$	$B4$
$C4$	$D2$	$A1$	$B3$
$C3$	$D1$	$A3$	$B1$
$C2$	$D4$	$A4$	$B2$

Tableau 8.27. Le premier carré latin 4×4 du dispositif split-plot.

Si on examine au tableau 8.28 le deuxième carré latin du split-plot on observe que lettres ne sont pas affectées aux mêmes colonnes.

$A3$	$B2$	$C3$	$D4$
$A1$	$B4$	$C2$	$D2$
$A2$	$B1$	$C4$	$D1$
$A4$	$B3$	$C1$	$D3$

Tableau 8.28. Le deuxième carré latin 4×4 du dispositif split-plot.

Les chiffres sont placés à des endroits différents de celui du tableau 8.27, mais forment encore un carré latin (différent du premier).

Et ainsi de suite si on examine les deux derniers carrés latins du dispositif aux tableaux 8.29 et 8.30.

$B2$	$C1$	$D4$	$A3$
$B4$	$C3$	$D1$	$A2$
$B1$	$C2$	$D3$	$A1$
$B3$	$C4$	$D2$	$A4$

Tableau 8.29. Le troisième carré latin 4×4 du dispositif split-plot.

$D4$	$A3$	$B1$	$C1$
$D2$	$A4$	$B3$	$C2$
$D3$	$A1$	$B2$	$C4$
$D1$	$A2$	$B4$	$C3$

Tableau 8.30. Le quatrième carré latin 4×4 du dispositif split-plot.

Ainsi sur ces 4 carrés latins le facteur bloc forme un carré latin 4×4 donné au tableau 8.31.

<i>C</i>	<i>D</i>	<i>A</i>	<i>B</i>
<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>
<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>A</i>
<i>D</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>

Tableau 8.31. Le carré latin 4×4 du facteur bloc dans le dispositif split-plot.

On présente le split-plot complet au tableau 8.32 avec les résultats.

<i>C1</i> : 35	<i>D3</i> : 27	<i>A2</i> : 33	<i>B4</i> : 34
<i>C4</i> : 34	<i>D2</i> : 34	<i>A1</i> : 33	<i>B3</i> : 31
<i>C3</i> : 30	<i>D1</i> : 32	<i>A3</i> : 30	<i>B1</i> : 37
<i>C2</i> : 41	<i>D4</i> : 27	<i>A4</i> : 28	<i>B2</i> : 37
<i>A3</i> : 25	<i>B2</i> : 36	<i>C3</i> : 24	<i>D4</i> : 25
<i>A1</i> : 29	<i>B4</i> : 30	<i>C2</i> : 41	<i>D2</i> : 26
<i>A2</i> : 32	<i>B1</i> : 29	<i>C4</i> : 31	<i>D1</i> : 24
<i>A4</i> : 28	<i>B3</i> : 24	<i>C1</i> : 31	<i>D3</i> : 18
<i>B2</i> : 34	<i>C1</i> : 28	<i>D4</i> : 21	<i>A3</i> : 23
<i>B4</i> : 27	<i>C3</i> : 26	<i>D1</i> : 23	<i>A2</i> : 26
<i>B1</i> : 28	<i>C2</i> : 37	<i>D3</i> : 20	<i>A1</i> : 24
<i>B3</i> : 22	<i>C4</i> : 28	<i>D2</i> : 26	<i>A4</i> : 26
<i>D4</i> : 31	<i>A3</i> : 25	<i>B1</i> : 34	<i>C1</i> : 33
<i>D2</i> : 30	<i>A4</i> : 33	<i>B3</i> : 26	<i>C2</i> : 37
<i>D3</i> : 25	<i>A1</i> : 30	<i>B2</i> : 35	<i>C4</i> : 35
<i>D1</i> : 29	<i>A2</i> : 32	<i>B4</i> : 35	<i>C3</i> : 26

Tableau 8.32. Split-plot en carré latin à 3 facteurs +1, avec les résultats.

8.4.5 Le plan en "cross-over"

Description

Ce plan dit à permutation d'objets, plus connu sous ses appellations anglaises de "cross-over design", "change-over design" ou "switch-over design", est souvent utilisé en biostatistique pour étudier simultanément un facteur traitement (ou un facteur exposition) et le facteur temps sur un nombre de sujets disponibles qui dépasse en général largement le nombre de traitements. Plus précisément, un facteur traitement comportant n traitements est à tester en n périodes de temps, en r répétitions (chaque répétition correspond à un sujet), ce qui conduit à r unités expérimentales fournissant chacune n résultats, soit à $n \times r$ résultats au total. En pratique $n \leq 4$, et souvent $n = 2$. La particularité principale de ce dispositif est que chaque sujet est son propre contrôle (témoin), c'est-à-dire que chaque sujet reçoit tous les traitements séquentiellement : c'est

un dispositif dit à mesures répétées. Pour être clair soulignons que le terme "répétées" s'applique ici au nombre de résultats obtenus sur chaque sujet, soit ici n , et donc est différent du nombre total de répétitions du dispositif, ici r , soit le nombre total de sujets.

Les plans en cross-over sont généralement équilibrés c'est-à-dire que tous les sujets participent au même nombre de périodes, mais ils arrivent parfois que des résultats manquent car certains sujets sont "perdus de vue", ce qui déséquilibre alors le plan et nécessite alors des méthodes sophistiquées pour l'analyse des résultats.

Construction

Sa construction se fait par **juxtaposition de k carrés latins quelconques** (non orthogonaux), avec $r = k \times n$. Par exemple, pour 4 traitements A, B, C, D, à étudier sur 4 périodes de temps, avec 8 sujets, 2 carrés latins d'ordre 4 seront utilisés selon le schéma du tableau 8.33.

carrés latins	→	I				II			
sujets	→	s1	s2	s3	s4	s5	s6	s7	s8
période 1	→	A	B	C	D	D	A	B	C
période 2	→	D	C	B	A	C	B	A	D
période 3	→	C	A	D	B	B	C	D	A
période 4	→	B	D	A	C	A	D	C	B

Tableau 8.33. Schéma d'un plan en cross-over ($n = 4$, $r = 8$, $k = 2$).

On observe au tableau 8.33 que les carrés latins ne sont pas orthogonaux. Toutes les colonnes sont des permutations différentes des 4 lettres, et chaque colonne représentant un sujet recevant aléatoirement et séquentiellement les 4 traitements sur les 4 périodes de temps. Chaque traitement apparaît k ($=2$) fois par ligne.

Un autre exemple, couramment utilisé, est celui de l'étude de deux traitements A et B (ou l'évaluation d'un traitement par rapport à un placebo) comme illustré au tableau 8.34 avec 10 sujets, pour lesquels les traitements sont inversés d'une période à l'autre. Les 5 carrés latins utilisés sont des carrés latins d'ordre 2.

carrés latins	→	I		II		III		IV		V	
sujets	→	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
période 1	→	A	B	A	B	B	A	A	B	A	B
période 2	→	B	A	B	A	A	B	B	A	B	A

Tableau 8.34. Schéma d'un plan en cross-over ($n = 2$, $r = 10$, $k = 5$).

Avantages

Par rapport à une étude longitudinale (dans le temps) classique, non "cross-over" le plan en cross-over présente deux avantages majeurs à savoir :

- l'influence d'une éventuelle confusion avec des covariables est réduite car chaque sujet est son propre contrôle (témoin),
- il est statistiquement plus efficace au sens de l'efficacité relative rencontrée au §6.3.1, ce qui conduit à utiliser moins de sujets que dans un plan non "cross-over",
- il est aussi plus précis que les dispositifs correspondants en blocs aléatoires complets.

Inconvénients

Il faut être conscient de ces inconvénients avant de mettre en oeuvre ce type de plan :

- Il ne permet pas l'étude des éventuelles interactions entre le facteur traitement et le facteur temps.
- Il peut se produire un effet d'ordre ("order effect") : l'ordre dans lequel les traitements sont administrés peut influencer sur la réponse (effets secondaires dus à un des traitements qui va perturber l'effet du traitement suivant.
- Il peut se produire un effet "résiduel" ("carry-over effect") : l'action d'un traitement perdure dans le temps, et va donc se continuer sur la période suivante où le traitement suivant doit intervenir, d'où la création d'une confusion entre les estimations des effets des différents traitements à évaluer. Pour cette raison, en pratique, on respecte une période de temps "mort" ("wash out") entre chaque période d'administration. Cependant, comme par définition on ne connaît pas encore très bien la pharmacodynamie des nouveaux traitements étudiés, il est difficile parfois d'ajuster correctement le temps de ce wash-out. S'il est certain qu'un tel effet carry-over puisse se produire les spécialistes utilisent des plans en cross-over adaptés (voir par exemple Cochran & Cox, 1957).
- Dans certains cas, il existe aussi un effet d'apprentissage ("learning effect") qui va permettre au sujet de mieux recevoir un deuxième traitement grâce à l'apprentissage dû au traitement précédent.

Malgré ces inconvénients le plan en cross-over, utilisé avec précaution, reste un dispositif très souvent utilisé en recherche biomédicale, et pourrait être utilisé plus souvent en recherche industrielle.

Degrés de liberté associés aux 3 sources de variation

L'analyse des résultats se fait en deux temps : d'abord par une analyse de variance globale adaptée au caractère de mesures répétées, puis par une analyse plus fine des effets des traitements. Les degrés de liberté associés aux 3 sources de variation sont donnés au tableau 8.35.

Source de variation	Degrés de liberté
Colonnes (répétitions)	$n - 1$
Lignes (période)	$n - 1$
Traitements	$n - 1$
Variation résiduelle	$(n - 1)(r - 2)$
Total	$nr - 1$

Tableau 8.35. Degrés de liberté dans un plan en cross-over.

Modèle associé

Aujourd'hui, de façon générale, on analyse le plan en cross-over avec un modèle mixte

$$Y_{ijkl} = \mu + \alpha_j + \beta_k + \gamma_l + S_{i(l)} + \varepsilon_{ijkl} \quad (8.17)$$

où :

- α_j est l'effet (fixe) du traitement j , $j = 1, \dots, n$,
- β_k est l'effet (fixe) de la période k , $k = 1, \dots, n$,
- γ_l est l'effet (fixe) de la séquence l des traitements (une répétition) l , $l = 1, \dots, r$,
- $S_{i(l)}$ est l'effet (aléatoire) du sujet i dans la séquence l , $i = 1, \dots, n$, de loi de probabilité supposée $\mathcal{N}(0, \sigma_S^2)$, σ_S^2 étant une variance inter-sujets,
- ε_{ijkl} est un terme d'erreur de loi de probabilité supposée $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, σ^2 étant une variance intra-sujets.

La procédure MIXED du logiciel SAS permet d'estimer correctement tous ces effets.

Un exemple standard de cross-over

Illustrons l'analyse d'un plan en cross-over simple (c'est-à-dire $n = 2$ seulement) en partant des données de Cochran & Cox (1957, page 130). On dispose des résultats d'une réponse biologique donnée, et qui figurent au tableau 8.36, avec les totaux de lignes et colonnes.

carrés latins	→	I		II		III		IV		V		
sujets	→	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	totaux
période 1	→	30	21	22	13	13	29	7	12	23	24	194
période 2	→	14	21	5	22	18	17	16	14	8	23	158
totaux	→	44	42	27	35	31	46	23	26	31	47	352

Tableau 8.36. Plan en cross-over avec les résultats, et les totaux lignes et colonnes.

Pour le traitement A le total est de 216, et pour le traitement B le total est de 136. Le total de toutes les lignes est naturellement égal au total de toutes les colonnes, soit 352. A partir de ces totaux on calcule les différentes sommes de carrés définies dans (8.5). On obtient :

- Terme correctif = $(352)^2 / 20 = 6195.20$
- $SCT = (30)^2 + (14)^2 + (21)^2 + \dots + (23)^2 - 6195.20 = 910.8$
- $SC(\text{colonnes}) = \frac{1}{2} \left[(44)^2 + (42)^2 + \dots + (47)^2 - 6195.20 \right] = 357.8$
- $SC(\text{lignes}) = (194 - 158)^2 / 20 = 64.8$
- $SC(\text{traitements}) = (216 - 136)^2 / 20 = 320$
- $SCR = SCT - SC(\text{colonnes}) - SC(\text{lignes}) - SC(\text{traitements}) = 168.2$

ce qui conduit à la table d'analyse de variance du tableau 8.37.

Source de variation	Degrés de liberté	SC	CM
Colonnes (répétitions)	9	357.8	39.8
Lignes (période)	1	64.8	64.8
Traitements	1	320.0	320.0
Variation résiduelle	8	168.2	21.0
Total	19	910.8	

Tableau 8.37. Table d'analyse de variance correspondant au tableau 8.36.

Le F_{obs} vaut $320/21 = 15.24$ valeur supérieure au $\mathcal{F}(1, 8; 1\%) = 11.26$ de la table de Fisher-Snedecor. On peut donc conclure que le traitement A donne une réponse biologique significativement supérieure (au risque de 1% seulement de se tromper) à celle obtenue avec le traitement B.

Ici, comme il n'y a que 2 traitements, l'analyse fine est réduite à calculer une estimation de l'écart-type de la différence des moyennes des deux traitements. On utilise la formule usuelle :

$$\hat{\sigma}_{t_1-t_2} = \sqrt{\frac{2CMR}{r}} \quad (8.18)$$

qui donne ici $\hat{\sigma}_{t_1-t_2} = \sqrt{(2 \times 21) / 10} = 2.049$. Comme la différence des moyennes vaut 8, on peut obtenir ainsi, comme usuellement, un intervalle de confiance de la différence au risque α :

$$[8 - 2.049 \times \mathcal{T}(r - 2; \alpha) ; 8 + 2.049 \times \mathcal{T}(r - 2; \alpha)]$$

où $\mathcal{T}(r - 2; \alpha)$ est le fractile de la loi de Student. Pour un risque de 5% ($\alpha = 0.05$) on a $\mathcal{T}(8; 0.05) = 2.306$, soit l'intervalle [3.3 ; 12.7].

En cas d'une donnée manquante on estimera celle-ci par :

$$\check{y}_{ijk} = \frac{ry'_{i..} + ny'_{.j.} + ny'_{..k} - 2y'_{...}}{(n - 1)(r - 2)} \quad (8.19)$$

et en conséquence l'écart-type de la différence de la moyenne du traitement sans donnée manquante et celui avec une donnée manquante pour y_u devient :

$$\hat{\sigma}_{t_1-t_2}^{(-u)} = \sqrt{CMR \left[\frac{2}{r} + \frac{n}{r(n - 1)(r - 2)} \right]} \quad (8.20)$$

Remarques :

1. Quand $n=2$, comme ci-dessus, on peut être tenté de considérer les deux périodes comme deux échantillons de r données appariées, puisque les 2 traitements A et B sont réalisés sur le même sujet à chaque fois. Et dans ce cas on a l'habitude de construire un intervalle de confiance plutôt sur la moyenne des différences (appariées) des deux traitements : cet intervalle sera plus petit que celui attaché à la différence des moyennes (la variabilité du sujet étant exclue du procédé par définition). Cette pratique est déconseillée dans le contexte des plans en cross-over car on est jamais sûr que l'effet d'un traitement n'influence pas l'autre traitement (phénomène de carry-over ou de learning toujours possible).

2. Si on soupçonne des risques d'effet de carry-over des cross-over adaptés existent, voir par exemple Cochran & Cox (1957, page 133).

Chapitre 9

Plans en dispositifs incomplets

9.1 Introduction

Ce chapitre est basé sur le chapitre 9 de Dagnelie (1981). Quand le nombre de combinaisons de niveaux (ou modalités) des facteurs mis en jeu dans un plan d'expériences est trop grand parce que le nombre de facteurs est trop grand et/ou le nombre de niveaux par facteur est trop grand, alors les plans en blocs complets, les dispositifs en carrés latins (même les carrés latins généralisés), les plans factoriels complets usuels, ne conviennent pas pour trois raisons essentielles. La première, évidente, est que le nombre d'expériences à réaliser devient trop grand pour des raisons de budget ou de temps. La deuxième est qu'il n'existe pas le dispositif adapté pour le problème en question (par exemple les carrés latins généralisés se font rares en grande dimension). La troisième est que parfois la nature même de l'expérience interdit de réaliser de façon homogène (dans le temps) toutes les expériences d'un bloc ; par exemple quand le bloc correspond à une journée de travail, journée dans laquelle il est matériellement impossible de "caser" les expériences exigées par la structuration en blocs du dispositif choisi. Cette troisième situation est aussi fréquente en analyse sensorielle où un juge ne peut évaluer dans une séance donnée qu'un nombre réduit de produits parmi l'ensemble des produits à évaluer.

A l'instar du plan fractionnaire asymétrique on ne sait pas résoudre le problème de la partition en blocs incomplets d'un plan complet ou fractionnaire de façon générale. Toutefois, il existe des dispositifs incomplets, équilibrés ou partiellement équilibrés, qui peuvent être utiles dans un certain nombre de situations. C'est l'objet de ce chapitre très succinct de montrer un aperçu des 4 types de blocs incomplets suivants : les blocs incomplets équilibrés, les réseaux équilibrés, les carrés latins incomplets, et les blocs incomplets non équilibrés (ou partiellement équilibrés).

9.2 Les blocs incomplets équilibrés

Les plans en blocs incomplets équilibrés (BIE) se nomment en anglais "Balanced Incomplete Block Designs", soit BIBD. Abordons leur présentation par deux exemples introductifs.

9.2.1 Deux exemples introductifs

On trouve aux tableaux 9.1 et 9.2 deux exemples de dispositifs en blocs incomplets équilibrés, chaque ligne constituant, dans un cas comme dans l'autre, un bloc de 4 unités expérimentales.

Le premier est relatif à 8 niveaux : il comporte 14 blocs de 4 unités expérimentales, chacun des niveaux étant répété 7 fois, et se trouvant associé 3 fois à chacun des autres niveaux dans un même bloc.

Répétition 1	Bloc1	8	6	3	1
	Bloc2	7	4	5	2
Répétition 2	Bloc3	7	3	5	1
	Bloc4	6	4	2	8
Répétition 3	Bloc5	5	4	6	3
	Bloc6	7	2	8	1
Répétition 4	Bloc7	7	6	1	4
	Bloc8	2	5	8	3
Répétition 5	Bloc9	5	4	1	8
	Bloc10	6	3	2	7
Répétition 6	Bloc11	6	5	7	8
	Bloc12	3	4	2	1
Répétition 7	Bloc13	3	7	4	8
	Bloc14	2	5	6	1

Tableau 9.1. Exemple de bloc incomplet équilibré.

On remarque dans le tableau 9.1 qu'effectivement les 8 niveaux du facteur – mais ce pourrait être aussi 8 traitements correspondant à plusieurs facteurs – n'apparaissent pas tous en même temps dans un seul bloc (incomplet donc). Il faut 2 blocs (incomplets) pour voir apparaître les 8 niveaux, et du coup chaque répétition comporte 2 blocs.

Le second dispositif du tableau 9.2 comporte 10 niveaux, 15 blocs de 4 unités expérimentales et 6 répétitions, le nombre de présences simultanées des mêmes niveaux dans un même bloc étant égal ici à 2, pour tous les couples de niveaux.

Répétition 1	Bloc1	1	10	6	8
	Bloc2	7	3	8	1
Répétition 2	Bloc3	9	1	4	10
	Bloc4	2	7	10	4
Répétition 3	Bloc5	5	4	8	3
	Bloc6	7	5	6	4
Répétition 4	Bloc7	7	2	8	9
	Bloc8	4	2	1	3
Répétition 5	Bloc9	8	6	4	9
	Bloc10	7	9	5	1
Répétition 6	Bloc11	3	10	9	5
	Bloc12	6	5	2	1
Répétition 7	Bloc13	10	3	6	7
	Bloc14	2	6	3	9
	Bloc15	10	8	5	2

Tableau 9.2. Un autre exemple de bloc incomplet équilibré.

On remarque que dans le second exemple on ne peut pas faire le même regroupement que dans le premier car le nombre de blocs n'est plus un multiple du nombre de répétitions.

Une situation intermédiaire qui peut également se présenter est l'existence de groupes de répétitions complètes.

9.2.2 Condition nécessaire d'existence

D'une façon générale, en désignant par N le nombre de niveaux (ou traitements), par k le nombre d'unités expérimentales par blocs, par b le nombre de blocs, et par r le nombre de répétitions, on peut facilement démontrer que les conditions suivantes sont nécessaires pour assurer l'existence de blocs incomplets équilibrés :

$$\begin{aligned} Nr &= bk \\ \frac{r(k-1)}{N-1} &= \lambda \end{aligned}$$

λ étant un nombre entier, égal au nombre de présences simultanées des différents couples de traitements dans les différents blocs.

En particulier pour l'exemple du tableau 9.1 on a :

$$N = 8 ; k = 4 ; b = 14 ; r = 7 ; \lambda = 3$$

ainsi le couple des traitements 6 et 8 apparaît $\lambda = 3$ fois, dans les blocs 1, 4 et 11. Il en est de même pour tous les autres couples.

En particulier pour l'exemple du tableau 9.2 on a :

$$N = 10 ; k = 4 ; b = 15 ; r = 6 ; \lambda = 2$$

ainsi le pattern 1 n'apparaît que $\lambda = 2$ fois avec le pattern 10 sur l'ensemble des blocs (une fois dans le bloc 1 et une fois dans le bloc 3).

En général ces conditions d'existence ne sont pas suffisantes. Des listes de blocs incomplets équilibrés existent dans les ouvrages spécialisés, voir par exemple Cochran & Cox (1975).

On procédera toujours à la répartition aléatoire des traitements, celle-ci se faisant en général en attribuant au hasard des numéros d'ordre aux différents traitements, en permutant de façon aléatoire les blocs au sein de l'ensemble du dispositif ou, éventuellement, au sein de chacune des répétitions complètes et en permutant également de façon aléatoire les traitements à l'intérieur de chacun des blocs.

9.2.3 Analyse de la variance des blocs incomplets

L'interprétation des résultats des dispositifs incomplets, et notamment ceux des dispositifs en blocs incomplets, se fait par analyse de la variance, mais cette analyse doit être adaptée selon l'un des 4 types de dispositifs exposés dans ce chapitre.

D'une manière générale, il s'agit d'une analyse de la variance non orthogonale, dans laquelle les facteurs et les blocs ne sont pas indépendants les uns des autres. Il en résulte que différents ajustements doivent être réalisés, non seulement dans le calcul des sommes des carrés des écarts, mais aussi dans l'estimation des moyennes.

On donne au tableau 9.3 les ddl associés aux différentes sources de variation dans le cas d'un plan en blocs incomplets équilibrés avec répétitions complètes, et au tableau 9.4 sans répétitions complètes.

Source de variation	ddl : cas général	ddl : un cas particulier
Traitements	$N - 1$	7
Répétitions	$r - 1$	6
Blocs (dans répétitions)	$b - r$	7
Variation résiduelle	$Nr - N - b + 1$	35
Totaux	$Nr - 1$	55

Tableau 9.3. Les ddl d'un plan en blocs incomplets équilibrés avec répétitions complètes.

Source de variation	ddl : cas général	ddl : un cas particulier
Traitements	$N - 1$	9
Blocs	$b - 1$	14
Variation résiduelle	$Nr - N - b + 1$	36
Totaux	$Nr - 1$	59

Tableau 9.4. Les ddl d'un plan en blocs incomplets équilibrés sans répétitions complètes.

9.2.4 Discussion

Une importance très variable est donnée, selon les auteurs, aux dispositifs expérimentaux en blocs incomplets. Dagnelie conseille de n'avoir recours à ces dispositifs qu'en cas de nécessité, par exemple si le nombre d'unités expérimentales par bloc est très petit,

ou si le nombre de traitements est grand, en privilégiant ceux dont les blocs peuvent se réunir en répétitions complètes. En effet, en cas de données manquantes, ceux-ci peuvent alors se traiter comme des blocs complets, de façon approximative mais avec une perte raisonnable de précision.

9.2.5 Génération avec SAS

Exemple 1

On trouve dans le code GLM09 suivant un exemple très simple d'un problème à 6 blocs, où 2 traitements sont appliqués par bloc, parmi 4 traitements possibles.

```
/****** GLM09.SAS *****/;
data d1;
input bloc trt y;
cards;
1 1 1.2
1 2 2.7
2 3 7.1
2 4 8.6
3 1 7.1
3 3 9.7
4 2 8.8
4 4 15.1
5 1 9.7
5 4 17.4
6 2 13.0
6 3 16.6

;
proc print;
run;

proc glm data=d1;
class bloc trt;
model y=trt bloc/ e1 ss3 ;

means trt bloc;
lsmeans trt / stderr;

run;
/****** */;
```

qui conduit à la sortie suivante :

```
*****  
OBS      BLOC      TRT      Y  
  
  1        1        1      1.2  
  2        1        2      2.7  
  3        2        3      7.1  
  4        2        4      8.6  
  5        3        1      7.1  
  6        3        3      9.7  
  7        4        2      8.8  
  8        4        4     15.1  
  9        5        1      9.7  
 10        5        4     17.4  
 11        6        2     13.0  
 12        6        3     16.6
```

General Linear Models Procedure
Class Level Information

```
Class      Levels      Values  
  
BLOC              6      1 2 3 4 5 6  
  
TRT              4      1 2 3 4
```

Number of observations in data set = 12

General Linear Models Procedure
Type I Estimable Functions for: TRT

```
Effect          Coefficients  
  
INTERCEPT      0  
  
TRT              1  L2  
                2  L3
```


	3	L4
	4	-L2-L3-L4
BLOC	1	0.3333*L2+0.3333*L3
	2	-0.3333*L2-0.3333*L3
	3	0.3333*L2+0.3333*L4
	4	-0.3333*L2-0.3333*L4
	5	-0.3333*L3-0.3333*L4
	6	0.3333*L3+0.3333*L4

General Linear Models Procedure
Type I Estimable Functions for: BLOC

Effect	Coefficients	
INTERCEPT	0	
TRT	1	0
	2	0
	3	0
	4	0
BLOC	1	L6
	2	L7
	3	L8
	4	L9
	5	L10
	6	-L6-L7-L8-L9-L10

General Linear Models Procedure

Dependent Variable: Y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	8	281.127500	35.140938	40.82	0.0056
Error	3	2.582500	0.860833		

Corrected Total 11 283.710000

 R-Square C.V. Root MSE Y Mean
 0.990897 9.516011 0.92781 9.75000

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
TRT	3	102.256667	34.085556	39.60	0.0065
BLOC	5	178.870833	35.774167	41.56	0.0057

Source	DF	Type III SS	Mean Square	F Value	Pr > F
TRT	3	59.017500	19.672500	22.85	0.0144
BLOC	5	178.870833	35.774167	41.56	0.0057

General Linear Models Procedure

Level of	-----Y-----		
TRT	N	Mean	SD
1	3	6.0000000	4.35545635
2	3	8.1666667	5.17912477
3	3	11.1333333	4.90951457
4	3	13.7000000	4.56398948

Level of	-----Y-----		
BLOC	N	Mean	SD
1	2	1.9500000	1.06066017
2	2	7.8500000	1.06066017
3	2	8.4000000	1.83847763
4	2	11.9500000	4.45477272
5	2	13.5500000	5.44472222
6	2	14.8000000	2.54558441

General Linear Models Procedure

Least Squares Means

TRT	Y LSMEAN	Std Err LSMEAN	Pr > T HO:LSMEAN=0
1	6.8000000	0.6281310	0.0017
2	7.6500000	0.6281310	0.0012
3	10.9250000	0.6281310	0.0004
4	13.6250000	0.6281310	0.0002

Exemple 2

Avec la procédure PLAN on peut générer quelques blocs incomplets, en voici un exemple, tiré de Jarrett & Hall (1978), traité avec le code PLAN04 suivant :

```
/****** PLAN04 *****/
proc plan seed=33373;
  treatments trt=8
    of 52 cyclic (1 2 3 4 32 43 46 49) 4;
  factors blocks=13 plots=8;
  output out=BIE
quit;

proc tabulate;
  class blocks plots;
  var trt;
  table blocks, plots*(trt*f=8.)/rts=8;
run; quit; run;

/******/;
```

qui conduit à :

```
*****
The PLAN Procedure
```

```
Plot Factors

Factor    Select    Levels    Order
```

```

blocks      13      13  Random
plots       8       8  Random

```

Treatment Factors

```

Factor      Select    Levels    Order    Initial Block / Increment
trt         8         52     Cyclic   (1 2 3 4 32 43 46 49) / 4

```

```

blocks      -----plots-----      trt      -----
10          7 4 8 1 2 3 5 6          1 2 3 4 32 43 46 49
8           1 2 4 3 8 6 5 7          5 6 7 8 36 47 50 1
9           2 5 4 7 3 1 8 6          9 10 11 12 40 51 2 5
6           4 2 6 8 3 7 1 5          13 14 15 16 44 3 6 9
7           4 7 6 3 1 2 8 5          17 18 19 20 48 7 10 13
4           4 8 1 5 3 6 7 2          21 22 23 24 52 11 14 17
2           6 2 3 8 7 5 1 4          25 26 27 28 4 15 18 21
3           6 2 3 1 7 4 5 8          29 30 31 32 8 19 22 25
1           1 2 7 8 5 6 3 4          33 34 35 36 12 23 26 29
5           5 7 6 8 4 3 1 2          37 38 39 40 16 27 30 33
12          5 8 1 4 7 3 6 2          41 42 43 44 20 31 34 37
13          3 5 1 8 4 2 6 7          45 46 47 48 24 35 38 41
11          4 1 5 2 3 8 6 7          49 50 51 52 28 39 42 45

```

```

*****
*          *                               plots                               *
*          *****
*          * 1 * 2 * 3 * 4 * 5 * 6 * 7 * 8 *
*          *****
*          * trt * trt * trt * trt * trt * trt * trt * trt *
*          *****
*          * Sum * Sum * Sum * Sum * Sum * Sum * Sum * Sum *
*****
*blocks*   *   *   *   *   *   *   *   *
*****
*1         * 33* 34* 26* 29* 12* 23* 35* 36*
*2         * 18* 26* 27* 21* 15* 25* 4* 28*
*3         * 32* 30* 31* 19* 22* 29* 8* 25*

```

*4	*	23*	17*	52*	21*	24*	11*	14*	22*
*5	*	30*	33*	27*	16*	37*	39*	38*	40*
*6	*	6*	14*	44*	13*	9*	15*	3*	16*
*7	*	48*	7*	20*	17*	13*	19*	18*	10*
*8	*	5*	6*	8*	7*	50*	47*	1*	36*
*9	*	51*	9*	40*	11*	10*	5*	12*	2*
*10	*	4*	32*	43*	2*	46*	49*	1*	3*
*11	*	50*	52*	28*	49*	51*	42*	45*	39*
*12	*	43*	37*	31*	44*	41*	34*	20*	42*
*13	*	47*	35*	45*	24*	46*	38*	41*	48*

9.3 Les réseaux carrés équilibrés

Les réseaux carrés équilibrés, aussi appelés treillis carrés équilibrés (en anglais "balanced lattice squares") sont des dispositifs constitués à la fois de répétitions complètes et d'un double réseau de blocs incomplets croisés, correspondants aux lignes et aux colonnes des répétitions complètes. On en trouve un exemple au tableau 9.5 pour 16 traitements, 5 répétitions, 20 lignes et 20 colonnes de 4 unités expérimentales (4 lignes et 4 colonnes de 4 unités expérimentales dans chacune des 5 répétitions).

9	1	13	5	7	16	9	2	10	16	5	3	8	9	3	14	2	1	4	3
16	8	12	4	1	10	15	8	7	1	12	14	5	12	2	15	10	9	12	11
2	10	6	14	14	5	4	11	4	6	15	9	6	11	1	16	14	13	16	15
7	15	3	11	12	3	6	13	13	11	2	8	7	10	4	13	6	5	8	7

Tableau 9.5. Exemple de réseau carré équilibré.

On remarque qu'à l'intérieur des 5 répétitions, tous les couples de traitements sont présents une et une seule fois dans une même ligne, et une et une seule fois dans une même colonne.

De tels dispositifs n'existent évidemment que quand le nombre d'objets est un carré ($N = 9, 16, 25, \dots$), le nombre d'unités expérimentales k (par bloc) et le nombre de répétitions r étant tels que :

$$k = \sqrt{N} \quad \text{et} \quad r = k + 1$$

Toutefois de tels dispositifs n'existent pas pour tout nombre de traitements égal à un carré : le cas $N = 36$, par exemple, est manquant.

D'autre part, lorsque k est un nombre impair ($N = 9, 25, 49, \text{etc.}$), il est possible de diminuer de moitié le nombre de répétitions, en considérant que tous les couples de

traitements doivent être présents une fois et une seule fois dans une même ligne ou dans une même colonne. Les caractéristiques du dispositif sont alors telles que :

$$k = \sqrt{N} \quad \text{et} \quad r = (k + 1)/2$$

Des tables de ces dispositifs existent, voir par exemple Cochran & Cox (1957). Dans tous les cas, on attribuera au hasard des numéros d'ordre aux différents traitements et on procédera à une permutation aléatoire des répétitions et à une permutation des lignes, d'une part, et des colonnes, d'autre part, au sein de chacune des répétitions.

On donne au tableau 9.6 les ddl associés aux différentes sources de variation dans le cas d'un plan en réseaux carrés équilibrés. On note que, pour les réseaux carrés équilibrés, les nombres de ddl peuvent également être exprimés, respectivement, comme suit en fonction du seul paramètre k :

$$k^2 - 1, \quad k, \quad k^2 - 1, \quad k^2 - 1, \quad (k^2 - 1)(k - 2), \quad k^3 + k^2 - 1$$

Source de variation	ddl : cas général	ddl : un cas particulier
Traitements	$N - 1$	15
Répétitions	$r - 1$	4
Lignes (dans répétitions)	$r(k - 1)$	15
Colonnes (dans répétitions)	$r(k - 1)$	15
Variation résiduelle	$Nr - N - 2rk + r + 1$	30
Totaux	$Nr - 1$	79

Tableau 9.6. Les ddl d'un plan en réseaux carrés équilibrés.

Les réseaux simples équilibrés ou treillis simples équilibrés ("balanced lattices") sont des dispositifs analogues aux réseaux carrés équilibrés, qui ne font intervenir, à l'intérieur des répétitions, qu'un seul système de blocs (lignes ou colonnes). Ils existent dans les mêmes conditions que les réseaux carrés équilibrés.

9.4 Les carrés latins incomplets

Appelés aussi carrés de Youden, ce sont des dispositifs équilibrés qui peuvent être obtenus en éliminant, dans certaines conditions, une ou plusieurs lignes, ou une ou plusieurs colonnes des carrés latins normaux. On en trouve un exemple au tableau 9.7 pour 13 traitements et 4 répétitions, le nombre de lignes étant égal au nombre de traitements et le nombre de colonnes étant égal au nombre de répétitions.

12	4	3	6
2	7	6	9
10	2	1	4
5	10	9	12
4	9	8	11
9	1	13	3
7	12	11	1
1	6	5	8
3	8	7	10
13	5	4	7
11	3	2	5
6	11	10	13
8	13	12	2

Tableau 9.7. Exemple de carré latin incomplet.

Comme les carrés latins classiques et les dispositifs avec permutation de traitements, et comme les réseaux carrés équilibrés, les carrés latins incomplets assurent un double contrôle de la variabilité du matériel expérimental. Ils superposent en effet un ensemble de blocs complets (colonnes du tableau 9.7) et un ensemble de blocs incomplets équilibrés (lignes du tableau 9.7).

Certains des dispositifs en blocs incomplets équilibrés peuvent d'ailleurs être construits à partir de carrés latins incomplets du genre de celui du tableau 9.7 par une permutation aléatoire des traitements à l'intérieur des lignes.

Les conditions d'existence des carrés latins incomplets sont les mêmes que celles des blocs équilibrés, avec en outre les restrictions suivantes :

$$N = b \quad \text{et} \quad k = p$$

En particulier, dans l'exemple du tableau 9.7, le paramètre λ (nombre de présences simultanées des différents couples de traitements dans une même ligne) est égal à 1. On notera aussi le fait que, dans certains cas, il peut être utile d'associer l'un à l'autre deux carrés latins incomplets, voire même un carré latin complet et un carré latin incomplet, ce qui peut conduire notamment à des situations intermédiaires entre le carré latin classique et le dispositif avec permutation des traitements .

Des tables existent pour ces dispositifs (Cochran & Cox, 1957). La répartition aléatoire des traitements se fait en attribuant au hasard des numéros d'ordre aux différents traitements et en permutant de façon aléatoire, d'une part, les lignes et, d'autre part, les colonnes.

On donne au tableau 9.8 les ddl associés aux différentes sources de variation dans le cas d'un plan en carrés latins incomplets.

Source de variation	ddl : cas général	ddl : un cas particulier
Traitements	$N - 1$	12
Lignes	$N - 1$	12
Colonnes	$r - 1$	3
Variation résiduelle	$(N - 1)(r - 2)$	24
Totaux	$Nr - 1$	51

Tableau 9.8. Les ddl d'un plan en carrés latins incomplets.

9.5 Les blocs incomplets et les réseaux non équilibrés

Parallèlement aux dispositifs expérimentaux en blocs incomplets équilibrés, existent des plans en blocs incomplets non équilibrés, aussi appelés blocs incomplets partiellement équilibrés, en anglais "partially balanced incomplete blocks". Ceux-ci n'assurent pas, pour tous les couples de traitements, un nombre égal de présences simultanées dans les différents blocs. Il en résulte que toutes les comparaisons entre traitements ne sont pas également précises ou également puissantes.

De même, parallèlement aux dispositifs en réseaux équilibrés, existent des dispositifs non équilibrés tels que les réseaux rectangulaires (en anglais "rectangular lattice"). Pour ceux-ci, le nombre de traitements N est lié à la dimension des blocs k par la relation :

$$N = k(k + 1)$$

de tels dispositifs existant donc pour 12, 20, 30, ... traitements .

D'autres généralisations des réseaux équilibrés ont également été présentées par Patterson & Williams, voir notamment les références Patterson & Williams (1976, [28]), Patterson et al. (1978, [29]), Williams (1977, [36]).

9.6 Traitement d'un exemple en agronomie

C'est une application réelle dirigée et analysée par Dagnelie (1977) dont nous retraçons ici les éléments essentiels pour illustrer et comparer quelques uns des dispositifs exposés dans ce chapitre.

9.6.1 Le dispositif expérimental

L'étude est relative à la comparaison de variétés de betterave sucrière. Il y a 13 variétés à étudier dont une variété témoin. Les parcelles ont une surface utile de 6.75 m² et comportent normalement 50 à 60 betteraves. Ici on ne s'intéressera qu'aux observations concernant la richesse en sucre des betteraves caractérisée par échantillonnage.

Pour augmenter au maximum la précision des comparaisons entre les variétés nouvelles et la variété témoin, le nombre de répétitions a été multiplié par 3 ou 4. Afin d'assurer le meilleur contrôle possible de l'hétérogénéité du champ, un dispositif en réseau carré équilibré a été adopté. Avec 16 patterns (12 pour les variétés et 4 pour le témoin), ce dispositif permet d'avoir à la fois 5 répétitions de chacune des 12 variétés

nouvelles et 20 répétitions de la variété témoin, qui occupe alors la place de 4 patterns. Le tableau 9.9 schématise le dispositif utilisé. Les numéros d'ordre des patterns ayant été tirés au hasard, la variété témoin a reçu les numéros 3, 5, 9 et 16, les autres numéros étant affectés, toujours au hasard, aux 12 variétés nouvelles.

9.6.2 Analyse des résultats

Analyse de variance

Le tableau 9.9 donne les résultats qui sont ensuite analysés par analyse de la variance selon trois hypothèses pour permettre la comparaison des dispositifs en réseau carré équilibré et réseau simple équilibré, à un dispositif en blocs complets randomisés.

Variétés	Rép 1	Rép 2	Rép 3	Rép 4	Rép 5	Totaux	Moy	Moy ajustées
1	17.4	16.4	16.4	17.0	16.4	83.6	16.72	16.78
2	16.7	16.4	17.4	16.8	16.4	83.7	16.74	16.73
3	17.1	16.8	15.9	17.0	16.5	83.3	16.66	16.69
4	16.7	16.7	16.6	16.9	17.1	84.0	16.80	16.77
5	16.5	16.9	15.4	16.4	16.8	82.0	16.40	16.57
6	16.6	16.6	16.3	16.3	16.4	82.0	16.44	16.27
7	17.2	16.7	16.3	16.6	16.2	83.0	16.60	16.60
8	17.1	17.2	17.5	17.4	17.3	86.5	17.30	17.26
9	16.7	16.7	16.4	16.6	16.8	83.2	16.64	16.64
10	17.3	16.4	15.7	16.9	17.0	83.3	16.66	16.75
11	16.2	16.8	15.9	17.0	16.8	82.7	16.54	16.34
12	16.4	17.7	16.2	16.6	16.4	83.3	16.66	16.64
13	16.1	17.4	17.5	17.1	16.9	85.0	17.00	16.92
14	17.3	16.9	16.4	16.7	16.4	83.7	16.74	16.74
15	18.0	17.3	17.4	16.4	16.6	85.7	17.14	17.19
16	17.2	16.0	15.1	16.9	16.2	81.4	16.28	16.44
Totaux	270.5	268.9	262.4	268.6	266.2	1336.6	16.71	16.71

Tableau 9.9. Les résultats (richesse en sucre).

Hypothèse 1

Supposons que l'on néglige les contraintes propres au réseau carré équilibré (répartition en lignes et en colonnes), comme s'il s'agissait d'un plan en blocs randomisés classique. On obtient alors l'analyse de variance donnée au tableau 9.10.

Sources de variation	ddl	SC	CM
Variétés	15	5.17	0.345
Répétitions	4	2.48	0.620
Variation résiduelle	60	12.53	0.209
Totaux	79	20.18	

Tableau 9.10. Table d'analyse de la variance avec un dispositif en blocs complets randomisés.

Cette analyse est d'une certaine façon impropre puisque l'on ignore les contraintes, mais elle permet de quantifier l'efficacité du découpage en 5 blocs complets, par rapport à une répartition tout à fait aléatoire. Cette efficacité peut être calculée comme suit :

$$\frac{[SC(\text{répétitions}) + SC(\text{variation résiduelle})] / (ddl_{rep} + ddl_{vres})}{CMR} = \frac{0.235}{0.209} = 1.12 \text{ ou } 112\%$$

Hypothèse 2

Ne négligeons plus maintenant les contraintes propres au réseau carré équilibré, l'analyse du tableau 9.11 est alors conforme.

Sources de variation	ddl	SC	CM
Variétés (ajust. lignes et colonnes)	15	5.37	0.358
Répétitions	4	2.48	0.620
Lignes (ajust. variétés et colonnes)	15	5.99	0.399
Colonnes (ajust. variétés et lignes)	15	1.91	0.127
Variation résiduelle	30	4.23	0.141
Totaux	79	19.98	

Tableau 9.11. Table d'analyse de la variance avec un dispositif en réseau carré équilibré.

C'est une analyse de variance non orthogonale, les sommes des carrés des 3 "facteurs" variétés, lignes et colonnes ont été ajustées pour tenir compte de la non-indépendance de ces 3 facteurs. C'est ainsi que $SC(\text{variétés})$ est ajustée pour éliminer entièrement les différences qui peuvent exister entre les lignes et entre les colonnes. De même, les facteurs lignes et colonnes sont ajustés respectivement en fonction des facteurs variétés et colonnes d'une part, variétés et lignes d'autre part. Il résulte de ces ajustements que le total des différentes sommes de carrés (19.98) n'est pas strictement égal à la SCT initiale (20.18).

Dans un cours plus avancé sur ce sujet on peut montrer comment réaliser cette analyse avec une approche spécialement adaptée aux analyses de variances sur dispositifs incomplets et/ou non équilibrés. C'est l'approche des μ -modèles proposée par Searle (1987).

Cette analyse sous l'hypothèse 2 montre que l'introduction du facteur lignes provoque une réduction substantielle de SCR et CMR tandis que l'introduction du facteur colonnes ne présente aucun intérêt car $CM(\text{colonnes}) < CMR$ ($0.127 < 0.141$). Cette constatation nous conduit à l'hypothèse 3.

Hypothèse 3

Suite à cette constatation on regroupe la source de variation "colonne" et la source de variation résiduelle, de manière, notamment, à augmenter le nombre de ddl du CMR .

Ce regroupement revient en fait à considérer le dispositif expérimental comme un réseau simple équilibré, faisant intervenir uniquement, à l'intérieur des répétitions, un système de lignes. On obtient alors la table d'analyse de variance du tableau 9.12.

Sources de variation	ddl	SC	CM
Variétés (ajust. lignes)	15	5.16	0.344
Répétitions	4	2.48	0.620
Lignes (ajust. variétés)	15	6.38	0.425
Variation résiduelle	45	6.14	0.136
Totaux	79	20.16	

Tableau 9.12. Table d'analyse de la variance avec un dispositif en réseau simple équilibré.

On remarque au tableau 9.12 que $SC(\text{variétés})$ et $SC(\text{lignes})$ sont légèrement modifiées en raison du fait qu'elles ne doivent plus être ajustées alors en fonction du facteur colonnes.

Enfin, une dernière correction doit être apportée au CMR afin de tenir compte de l'imprécision supplémentaire due au caractère partiellement aléatoire des ajustements qui sont effectués, on obtient ainsi un CMR de 1.59 au lieu de 0.136.

Efficacité

L'efficacité relative du dispositif en réseau par rapport aux répétitions complètes est :

$$0.209/0.159 = 1.31 \rightarrow 131\%$$

et l'efficacité du réseau par rapport à une répartition complètement aléatoire serait :

$$0.235/0.159 = 1.48 \rightarrow 148\%$$

Cette dernière valeur montre que le dispositif en réseau carré équilibré donne, avec 5 répétitions, une précision supérieure à celle qui aurait été obtenue à partir de 7 répétitions complètement aléatoires.

Différences significatives

Sur la base d'un réseau simple équilibré un test F approché permet de mettre en évidence l'existence de différences significatives entre les variétés. En effet :

$$F_{obs} = 0.344/0.159 = 2.16 > \mathcal{F}(15, 45; 0.95) = 1.89$$

On peut compléter par un test de Dunnett (Dagnelie, 1977) destiné à comparer les 12 variétés nouvelles à la variété témoin. Pour ce faire il est nécessaire de calculer les moyennes ajustées des différents patterns et la moyenne générale ajustée des 4 témoins :

$$(16.69 + 16.57 + 16.64 + 16.44)/4 = 16.58$$

Il faut également calculer la plus petite différence significative au sens de Dunnett en tenant compte des nombres de répétitions différents affectés aux variétés nouvelles et à la variété témoin :

$$2,89\sqrt{0.159\left(\frac{1}{5} + \frac{1}{20}\right)} = 0.58$$

Il apparaît ainsi que seules les variétés portant les numéros 8 et 15 diffèrent significativement de la variété témoin, en lui étant supérieures. On notera aussi que, si la variété témoin avait été répétée de la même manière que chacune des 12 autres variétés, il aurait été possible, dans les mêmes conditions, de mettre en expérience 15 variétés nouvelles, mais avec une valeur sensiblement plus élevée de la plus petite différence significative :

$$2.89\sqrt{0.159\frac{2}{5}} = 0.75$$

9.7 Conclusion

Les tableaux 9.13 et 9.14 permettent d'orienter le choix d'un dispositif incomplet. Il donne une liste des dispositifs en blocs incomplets équilibrés, au sens large, en faisant la distinction entre blocs incomplets équilibrés proprement dits, avec répétitions complètes (B1) et sans répétitions complètes (B2), carrés latins incomplets ou groupes de carrés latins incomplets (C) et réseaux équilibrés (R). On notera à ce propos, d'une part, que tous les carrés latins incomplets et les groupes de carrés latins incomplets (C) peuvent donner naissance à des blocs incomplets équilibrés sans répétitions complètes (B2) et, d'autre part, que tous les dispositifs affectés d'une des mentions B1, C ou R comprennent, sous une forme ou sous une autre, des répétitions complètes.

N	k	r	Type
3	2	4, 6, 8, 10	C
4	2	3, 6, 9	R
	3	3, 6, 9	C
5	2	4, 8	C
	3	6	C
	4	4, 8	C
6	2	5, 10	B1
	3	5, 10	B2(pour $r = 5$); B1(pour $r = 10$)
	4	10	B2
	5	5, 10	C
7	2	6	C
	3	3, 6, 9	C
	4	4, 8	C
	6	6	C
8	2	7	B1
	4	7	B1
	7	7	C
9	2	8	C
	3	4, 6, 8, 10	R
	4	8	C
	5	10	C
	6	8	B2
	8	8	C
10	2	9	B1
	3	9	C
	4	6	B2
	5	9	B2
	6	9	B2
	9	9	C
11	2	10	C
	5	5, 10	C
	6	6	C
	10	10	C

Tableau 9.13. Dispositifs en blocs incomplets équilibrés, en carrés latins incomplets et en réseaux équilibrés : nombres de patterns N (< 11), nombres d'unités expérimentales par bloc k , nombres de répétitions r (≤ 10) et types de dispositifs : B1= blocs incomplets équilibrés avec répétitions complètes; B2=blocs incomplets équilibrés sans répétitions complètes; C=carrés latins incomplets ou blocs incomplets équilibrés sans répétitions complètes; R=réseaux équilibrés.

N	k	r	Type
13	3	6	C
	4	4, 8	C
	9	9	C
15	3	7	B1
	7	7	C
	8	8	C
16	4	5, 10	R
	6	6	C
	6	9	B2
	10	10	C
19	3	9	C
	9	9	C
	10	10	C
21	3	10	B1
	5	5, 10	C
	7	10	B2
25	4	8	C
	5	3, 6, 9	R
	9	9	C
28	4	9	B1
	7	9	B2
31	6	6	C
	10	10	C
37	9	9	C
41	5	10	C
49	7	4, 8	R
57	8	8	C
64	8	9	R
73	9	9	C
81	9	5, 10	R
91	10	10	C

Tableau 9.14. Suite du tableau 8.9 pour $11 < N < 100$.

Dans le choix de l'un ou l'autre dispositif, il faudra que le nombre de ddl du carré moyen résiduel ne soit pas trop faible (pas moins de 6 à 10 ddl, par exemple), le risque d'aboutir à de faibles nombres de ddl étant important surtout pour de petits nombres de traitements et de répétitions.

On remarque aussi que l'existence de dispositifs équilibrés pour certains nombres de traitements seulement n'est pas un inconvénient aussi important qu'on pourrait le croire à première vue, dans la mesure où il est souvent possible, et même parfois souhaitable, de

répéter un plus grand nombre de fois certains traitements de référence. Le dispositif en réseau carré équilibré 5×5 ($N = 25$ et $k = 5$) avec 3, 6, ou 9 répétitions complètes, peut ainsi être utilisé par exemple dans des plans d'expériences destinés à comparer 20, 21 ou 22 variétés nouvelles avec une variété témoin, pour autant que le nombre de répétitions de celle-ci soit quintuplé, quadruplé ou triplé.

Terminons ce chapitre en soulignant que les plans de ce chapitre peuvent s'appliquer à des domaines autres que l'agronomie, par exemple en analyse sensorielle pour évaluer N produits à partir de k échantillons, avec b juges (tous les juges ne pouvant pas tester tous les produits en une séance), sur r séances de dégustation. Un autre exemple pourrait être le test de matériaux techniques en milieu industriel avec des contraintes similaires.

Chapitre 10

Plans de surface de réponse

10.1 Introduction

Les facteurs considérés dans ce chapitre sont continus et le modèle linéaire (en les paramètres) postulé sera toujours un polynôme en les variables construites à partir des facteurs. En théorie, le degré de ce polynôme pour chaque facteur peut être quelconque, mais d'un point de vue pratique un degré 2 ou 3 suffit en général pour construire une approximation de qualité raisonnable du modèle (inconnu) qui relie la réponse aux facteurs, pour peu que le domaine expérimental défini au départ par l'expérimentateur ne soit pas trop grand.

En outre, le nombre de termes dans le polynôme, et donc de paramètres à estimer, devient vite prohibitif quand à la fois le nombre de facteurs p augmente et le degré d . Par exemple on trouve au tableau 10.1 le nombre de termes en fonction du nombre de facteurs, jusqu'au degré 4 pour chaque facteur.

$p \setminus$ degré d	1	2	3	4
2	3	6	10	15
3	4	10	20	35
4	5	15	35	70
5	6	21	56	126
p	$p + 1$	$(p + 2)!/2p!$	$(p + 3)!/6p!$	$(p + 4)!/24p!$

Tableau 10.1. Nombre P de termes (y compris le terme constant) dans un polynôme en fonction du nombre p de facteurs et du degré d .

Comme le degré minimum du polynôme sera 2, les facteurs présenteront au moins 3 niveaux. Le modèle (complet) de degré 2 à p facteurs s'écrit donc :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{k>j}^p \beta_{jk} x_j x_k + \sum_{j=1}^p \beta_{jj} x_j^2 + \varepsilon \quad (10.1)$$

et le nombre de termes du modèle sera

$$P = 1 + p + \frac{p(p-1)}{2} + p = \frac{(p+1)(p+2)}{2} = (p+2)!/2p! \quad (10.2)$$

Concernant le terme d'erreur ε , on posera les hypothèses usuelles :

$$E(\varepsilon) = 0 \quad , \quad V(\varepsilon) = \sigma^2 I \quad , \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2) \quad (10.3)$$

Le cas où $V(\varepsilon) = \Sigma_{diag} = diag \left\{ \sigma_1^2, \dots, \sigma_{N_S}^2 \right\}$ est envisageable, mais est plus facilement traitable par les méthodes du chapitre 11.

Les plans d'expériences étudiés dans ce chapitre sont appelés plans de surface de réponse, ils particulièrement adaptés à la nature continue des facteurs. Leur nombre total d'expériences est N répartis sur N_S points de support – ceux-ci, nous le rappelons, étant comme pour tout type de plan les coordonnées dans le domaine expérimental compact et convexe défini par les bornes des facteurs codés – en lesquels r répétitions d'expériences sont réalisées, selon un schéma de répartition des répétitions noté $\{r\} = \{r_1, \dots, r_{N_S}\}$. On a donc $N \geq N_S \geq P$.

L'objectif de ces plans est ambitieux puisque pour les plus optimaux d'entre eux ils permettent simultanément :

- de détecter les **facteurs significatifs**,
- de permettre des **prédictions de bonne qualité**, par exemple de variance faible, en moyenne, sur le domaine expérimental, ou faible sur une zone particulière, ou de maximum minimisé,
- de détecter les **optimum** de la réponse ou bien des zones optimales,
- de détecter avec une bonne sensibilité le **manque d'ajustement** de modèle,
- de rendre possible une **partition en blocs**,
- de rendre possible la **séquentialité** de la réalisation des expériences.

Cependant, on demandera aux plans de réponse les plus usuels de satisfaire au moins aux trois premiers objectifs ci-dessus.

Le plan de surface de réponse le plus simple, et le plus naturel à imaginer, est le plan factoriel 3^p , déjà vu au chapitre 4 dans le cadre des facteurs discrets, qui peut être utilisé pour p facteurs continus à condition de coder les niveaux des facteurs d'une façon particulière. Toutefois, nous verrons que certaines de ses propriétés ne sont pas satisfaisantes, et c'est ce qui milite pour des meilleurs plans de surface de réponse à savoir notamment le plan composite centré étudié en section 10.4. En section 10.5 on examinera un plan particulier, mais très efficace, le plan cuboctaèdre factoriel pour trois facteurs. De nombreux autres plans de surface de réponse existent (les plans équiradiaux, les réseaux de Doehlert, les réseaux simplexe-somme, les plans hybrides, ...). On peut remonter à 1930 avec Wishart, Winsor, Yates, ... pour voir les premiers plans de surface de réponse, et surtout 1951 avec Box & Wilson (1951, [10]) qui proposent le plan composite centré (voir section 10.4). Ce chapitre n'est qu'une introduction sur les plans de surface de réponse, nous renvoyons le lecteur aux ouvrages de Box & Draper (1987), Khuri (1987), et Phan-tan-luu & Mathieu (1997) pour des études très complètes des plans de surface de réponse.

10.2 Etude générale

On postulera dans tout le reste de ce chapitre un modèle complet du second degré au maximum.

10.2.1 Trois propriétés recherchées

Compte tenu des objectifs fixés, trois propriétés sont particulièrement recherchées pour les plans de surface de réponse. Au sens strict on peut démontrer qu'elles sont toutes les trois simultanément incompatibles, mais pas deux à deux.

Orthogonalité et C -orthogonalité

Un plan est dit orthogonal – on devrait dire de façon plus rigoureuse un plan dont la matrice de modèle est dite orthogonale – s'il conduit à des estimateurs $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_j, \hat{\beta}_{jj}, \hat{\beta}_{jk}$ indépendants, et alors la variance de \hat{y} en tout point $x^i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})$ du domaine expérimental Ω s'exprime comme une somme pondérée des variances du vecteur $\hat{\beta}$:

$$\text{var}(\hat{y}_{x^i}) = \text{var}\left(f^T(x^i)\hat{\beta}\right) = f^T(x^i)\text{var}\left(\hat{\beta}\right)f(x^i) \quad (10.4)$$

$$= \sigma^2 f^T(x^i)(X^T X)^{-1}f(x^i) \quad (10.5)$$

où X est la matrice de modèle de dimension $N \times P$, et la matrice des moments $N^{-1}X^T X$ correspondante est **diagonale**.

Un plan est dit C -orthogonal s'il conduit à des estimateurs $\hat{\beta}_j, \hat{\beta}_{jj}, \hat{\beta}_{jk}$ indépendants, mais les $\hat{\beta}_{jj}$ ne sont pas indépendants de $\hat{\beta}_0$. En d'autres termes, cela se traduit par une matrice de moments non diagonale, mais qui présente une sous-matrice C , obtenue en supprimant la première ligne et la première colonne, qui, elle, est diagonale :

$$N^{-1}X^T X = \begin{pmatrix} 1 & \cdots \\ \vdots & C \end{pmatrix} \quad (10.6)$$

Isovariance par rotation

Elle a été proposée par Box & Hunter (1957, [6]), sous le nom anglais de "rotatability". Dans un plan isovariant par rotation $\text{var}(\hat{y}_{x^i})$ ne dépend que de la distance ρ du point x^i au centre du domaine expérimental :

$$\text{var}(\hat{y}_{x^i}) = h(\rho_{x^i}) \quad (10.7)$$

$$\rho_{x^i}^2 = \sum_{j=1}^p x_{ij}^2$$

où les variables x_j sont les facteurs X_j codés (voir plus loin). Ainsi les surfaces à variance de prédiction constante sont des p -sphères concentriques dans l'espace des p variables. Intuitivement, ce critère coïncide avec l'idée d'isotropie que l'on a du monde physique qui nous entoure.

Précision uniforme

La précision de \hat{y} est uniforme si $\text{var}(\hat{y})$ est constante à l'intérieur d'une p -sphère de rayon ρ^* :

$$\text{var}(\hat{y})_{\rho=0} = \text{var}(\hat{y})_{\rho=\rho^*} \quad (10.8)$$

avec :

$$\rho^* = \sqrt{\sum_{j=1}^p \rho_j^{*2}} \quad (10.9)$$

$$\rho_j^* = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ij}^2} \quad , \quad j = 1, \dots, p \quad (10.10)$$

On se contentera parfois d'une précision presque uniforme.

10.2.2 Codage des facteurs expérimentaux

Les p variables x_j , $j = 1, \dots, p$ sont codées à partir des facteurs X_j comme :

$$x_{ij} = \frac{X_{ij} - \bar{X}_j}{s_{X_j}} \quad (10.11)$$

avec :

$$\bar{X}_j = \frac{\sum_{i=1}^N X_{ij}}{N} \quad (10.12)$$

et :

$$s_{X_j} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_{ij} - \bar{X}_j)^2}{N}} \quad (10.13)$$

où s_{X_j} est une mesure de la dispersion des points expérimentaux dans la direction de l'axe X_j . Les variables x_j sont donc centrées-réduites.

10.2.3 Matrice des moments

Soit le modèle polynomial de degré d sous forme matricielle :

$$Y_{N \times 1} = X_{N \times P} \beta_{P \times 1} + \varepsilon_{N \times 1} \quad (10.14)$$

à P variables explicatives x_j centrées-réduites (correspondant à p facteurs expérimentaux étudiés).

Un moment m_δ d'ordre total δ sera défini par :

$$m_\delta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i1}^{\delta_1} x_{i2}^{\delta_2} \dots x_{ip}^{\delta_p} = \left[1^{\delta_1} 2^{\delta_2} \dots p^{\delta_p} \right] \quad (10.15)$$

avec les δ_j ordres partiels tels que :

$$\delta_j \geq 0, \quad \in \mathbb{N}, \quad \sum_{j=1}^p \delta_j = \delta \quad (10.16)$$

L'ordre total δ prend donc les valeurs $0, 1, \dots, pd$. Ces moments sont les éléments de la matrice des moments :

$$N^{-1} (X^T X) \quad (10.17)$$

Application au modèle de degré 1

Avec ces notations la matrice des moments pour le modèle de degré 1 à p effets principaux seulement dans (10.14), c-a-d $P = p + 1$, s'écrit :

$$N^{-1} (X^T X) = \begin{bmatrix} 1 & [1] & [2] & \dots & [p] \\ & [11] & [12] & \dots & [1p] \\ & & [22] & \dots & [2p] \\ & & & \ddots & \vdots \\ & SYM & & & [pp] \end{bmatrix} \quad (10.18)$$

avec, pour $j, k = 1, \dots, p$:

$$[j] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{ij} \quad (10.19)$$

$$[jj] = [j^2] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{ij}^2$$

$$[jk] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{ij} x_{ik}$$

et comme les x_j sont centrées-réduites on a $[j] = 0$ et $[jj] = 1$. Donc, $[j]$ est un moment du premier ordre, $[j^2]$ est un moment pur d'ordre 2, et $[jk]$ est un moment mixte d'ordre 2, et donc (10.18) se simplifie en :

$$N^{-1} (X^T X) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ & 1 & \dots & \dots & \dots & [1p] \\ & & \ddots & \dots & \dots & \vdots \\ & & & \ddots & [jk] & \vdots \\ & SYM & & & & \vdots \\ & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (10.20)$$

Application au modèle de degré 2

Pour le modèle du deuxième degré ($d = 2$) avec $p = 2$ on a :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon \quad (10.21)$$

et sous les mêmes conditions la matrice des moments s'écrit :

$$N^{-1} (X^T X) = \begin{array}{cccccc} \left[\begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & [12] \\ & 1 & [12] & [111] & [122] & [112] \\ & & 1 & [112] & [222] & [122] \\ & & & [1111] & [1122] & [1112] \\ & & & & [2222] & [1222] \\ & & & & & [1122] \end{array} \right] & \begin{array}{l} (x_0) \\ (x_1) \\ (x_2) \\ (x_1^2) \\ (x_2^2) \\ (x_1 x_2) \end{array} \\ \begin{array}{cccccc} (x_0) & (x_1) & (x_2) & (x_1^2) & (x_2^2) & (x_1 x_2) \end{array} & \end{array} \quad (10.22)$$

avec :

$$\begin{aligned} [111] &= [1^3] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{ij}^3 \\ [122] &= [12^2] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{i1} x_{i2}^2 \\ [1111] &= [1^4] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{i1}^4 \\ [1122] &= [1^2 2^2] = N^{-1} \sum_{i=1}^N x_{i1}^2 x_{i2}^2 \end{aligned} \quad (10.23)$$

10.2.4 Condition nécessaire et suffisante d'isovariance par rotation

Une CNS (Myers, 1976) pour qu'un plan soit isovariant par rotation est que le moment m_δ , d'ordre δ , soit de la forme :

$$\begin{aligned} m_\delta &= 0 \quad \text{si un } \delta_j \text{ est impair} \Rightarrow m_\delta \text{ sera dit impair} \\ m_\delta &= \frac{\lambda_\delta \times \prod_{j=1}^p \delta_j!}{2^{\delta/2} \times \prod_{j=1}^p \left(\frac{\delta_j}{2}\right)!} \quad \text{si tous les } \delta_j \text{ sont pairs} \Rightarrow m_\delta \text{ sera dit pair} \end{aligned}$$

avec $\lambda_\delta \neq 0$ un scalaire lié à δ (voir plus loin).

Application au modèle du premier degré

Les variables étant CR et si le plan est orthogonal, on vérifie que la CNS est vraie car :

$$\begin{aligned} [j] &= [j^1] = 0 \\ [jk] &= [j^1 k^1] = 0 \\ [jj] &= [j^2] = \frac{\lambda_2 \times 2!}{2^{2/2} \times 1} = \lambda_2 = 1 \end{aligned} \quad (10.24)$$

et donc la matrice des moments de taille $(p+1) \times (p+1)$ s'écrit :

$$N^{-1} (X^T X) = \begin{bmatrix} 1 & 0_{(1 \times p)}^T \\ 0_{(p \times 1)} & \lambda_2 I_{(p \times p)} \end{bmatrix} \quad (10.25)$$

Au vu de cette matrice, on constate en conséquence que, pour **un modèle polynomial du premier degré, un plan orthogonal est aussi un plan isovariant par rotation.**

Application au modèle du deuxième degré

La matrice des moments de taille $\left(1 + 2p + \frac{p(p-1)}{2}\right) \times \left(1 + 2p + \frac{p(p-1)}{2}\right)$ s'écrit sous forme de matrice-blocs :

$$N^{-1} (X^T X) = \begin{bmatrix} M_j & M_{jj} & M_{01} \\ M_{jj}^T & M_{jjjj} & M_0 \\ M_{01}^T & M_0^T & M_{jkjk} \end{bmatrix} \quad (10.26)$$

avec :

$$M_j = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \lambda_2 I_p & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \begin{matrix} (x_0) \\ (x_1) \\ \vdots \\ (x_p) \end{matrix} \quad (10.27)$$

$(x_0)(x_1) \dots (x_p)$

$$M_{jj} = \begin{bmatrix} \lambda_2 & \dots & \dots & \lambda_2 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} (x_1^2) \\ (x_2^2) \\ \vdots \\ (x_p^2) \end{matrix} \quad (10.28)$$

$(x_1^2) (x_2^2) \dots (x_p^2)$

$$M_{jjjj}^{p \times p} = \begin{bmatrix} \lambda_4 (2I_p + J_p) \\ \\ \\ \end{bmatrix} \begin{pmatrix} (x_1^2) \\ (x_2^2) \\ \vdots \\ (x_p^2) \end{pmatrix} \quad (10.29)$$

où J_p est une matrice $(p \times p)$ de uns. En fait cette matrice M_{jjjj} renferme les moments $[j^4]$ et certains $[j^2 k^2]$.

Ensuite on a :

$$M_{jkjk}^{p' \times p'} = \begin{bmatrix} \\ \\ \lambda_4 I_{p'} \\ \\ \end{bmatrix} \begin{pmatrix} (x_1 x_2) \\ (x_1 x_3) \\ \vdots \\ (x_{p-1} x_p) \end{pmatrix} \quad (10.30)$$

$(x_1 x_2) \dots (x_{p-1} x_p)$

où $p' = \frac{p(p-1)}{2}$. Cette matrice M_{jkjk} renferme les autres moments $[j^2 k^2]$.

Enfin on a M_0 matrice de zéros, de dimensions $p \times p'$, et M_{01} matrice de zéros, de dimensions $(p+1) \times p'$.

On vérifie que la CNS est vraie pour les moments $[j^2]$, $[j^4]$, $[j^2 k^2]$, $j = 1, \dots, p$, $j, k = 1, \dots, p$ avec $j < k$, car :

$$[j^2] = \frac{\lambda_2 \times 2!}{2^{2/2} \times 1} = \lambda_2 = 1 \neq 0 \quad (10.31)$$

$$[j^4] = 3\lambda_4, \quad \lambda_4 \neq 0 \quad (\text{voir plus loin}) \quad (10.32)$$

$$[j^2 k^2] = \lambda_4 \quad (10.33)$$

Donc pour un modèle du deuxième degré, pour qu'un plan soit isovariant par rotation (ivr), il faut que :

$$[j^4] = 3 [j^2 k^2] \quad (10.34)$$

c-a-d le moment pur d'ordre 4 doit être 3 fois plus grand que le moment mixte d'ordre 4.

En outre, la matrice des moments n'étant pas diagonale, le plan ivr n'implique pas un plan orthogonal. On pourra toutefois obtenir un plan ivr qui soit C -orthogonal (voir plus loin).

Fonction de variance et valeur de λ_δ

On étudiera le cas $\delta = 4$, valeur cruciale associée aux modèles du deuxième degré. Pour faire apparaître le lien entre λ_4 et l'isovariance par rotation développons l'équation

de la variance de la prédiction donnée en (10.5) en utilisant l'inverse analytique de la matrice des moments donnée en (10.26). On a, tous calculs faits, pour tout point $x^i \in \Omega$ (domaine expérimental) :

$$\text{var}(\hat{y}_{x^i}) = A \{2(p+2)\lambda_4^2 + 2\lambda_4(\lambda_4 - 1)(p+2)\rho^2 + [(p+1)\lambda_4 - (p-1)]\rho^4\} \quad (10.35)$$

avec :

$$\begin{aligned} A &= \frac{\sigma^2}{2N\lambda_4[(p+2)\lambda_4 - p]} \\ \rho^2 &= x^{iT}x^i \end{aligned} \quad (10.36)$$

et donc cette variance de la prédiction est une fonction de N , p , ρ et λ_4 (fonction décroissante de λ_4) :

$$\text{var}(\hat{y}_{x^i}) = f(N, p, \rho, \lambda_4) \quad (10.37)$$

Au centre du domaine expérimental, c-a-d pour $\rho = 0$, on a :

$$\text{var}(\hat{y}_0) = \lambda_4 \frac{\sigma^2}{N} \left(\lambda_4 - \frac{p}{p+2} \right)^{-1} \quad (10.38)$$

et pour $\lambda_4 = 1$ l'équation (10.35) se simplifie en :

$$\text{var}(\hat{y}_{x^i}) = \frac{\sigma^2}{N} (p+2 + \rho^4) \quad (10.39)$$

et au centre du domaine :

$$\text{var}(\hat{y}_0) = \frac{\sigma^2}{N} (p+2) \quad (10.40)$$

Valeur singulière de λ_4

Pour que l'équation (10.38) ait un sens, c-a-d que la variance de la prédiction ne soit pas infinie, il faut que :

$$\lambda_4 > \frac{p}{p+2} \quad (10.41)$$

$p/(p+2)$ étant appelée la valeur singulière de λ_4 . Il est instructif d'examiner le comportement du plan quand λ_4 tend vers sa valeur singulière, avec le théorème suivant :

Théorème :

Soit un plan ivr. Quand λ_4 tend vers sa valeur singulière, tous les points du plan tendent à se positionner à la même distance $\rho = \text{cste} \neq 0$ du centre (plan dégénéré).

Démonstration :

D'une part on a, si tous les points sont à égale distance (sur une sphère de rayon $\rho \neq 0$) :

$$\rho^2 = \frac{1}{N} N \rho^2 = \frac{1}{N} N \rho_{x^i}^2, \forall x^i$$

et donc :

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_{x^i}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{j=1}^p x_{ij}^2 \right] \\ &= \sum_{j=1}^p \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N x_{ij}^2 \right] = \sum_{j=1}^p [j^2] \\ &= p\end{aligned}$$

D'autre part on a :

$$\rho^4 = \frac{1}{N} N \rho^4 = \frac{1}{N} N \rho_{x^i}^4, \forall x^i$$

et donc :

$$\begin{aligned}\rho^4 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{j=1}^p x_{ij}^2 \right]^2 \\ &= \sum_{j=1}^p [j^4] + \sum_{j=1}^p \sum_{k \neq j}^p [j^2 k^2]\end{aligned}$$

et comme le plan est ivr on a :

$$\rho^4 = \sum_{j=1}^p 3\lambda_4 + \sum_{j=1}^p \sum_{k \neq j}^p \lambda_4$$

Des deux résultats on tire :

$$p^2 = 3p\lambda_4 + p(p-1)\lambda_4$$

d'où :

$$\lambda_4 = \frac{p}{p+2}$$

CQFD.

Donc il suffit d'avoir au moins un point au centre en plus d'autres points à distance $\rho \neq 0$ pour que le plan ne soit pas dégénéré.

Fonction de précision

Considérons maintenant la fonction de précision relative $W(\rho)$ définie par l'inverse de la variance normalisée :

$$W(\rho) = \left[\frac{\text{var}(\hat{y}_{x^i})}{\sigma^2/N} \right]^{-1} \quad (10.42)$$

Pour

$$\frac{p}{p+2} < \lambda_4 \leq 1.$$

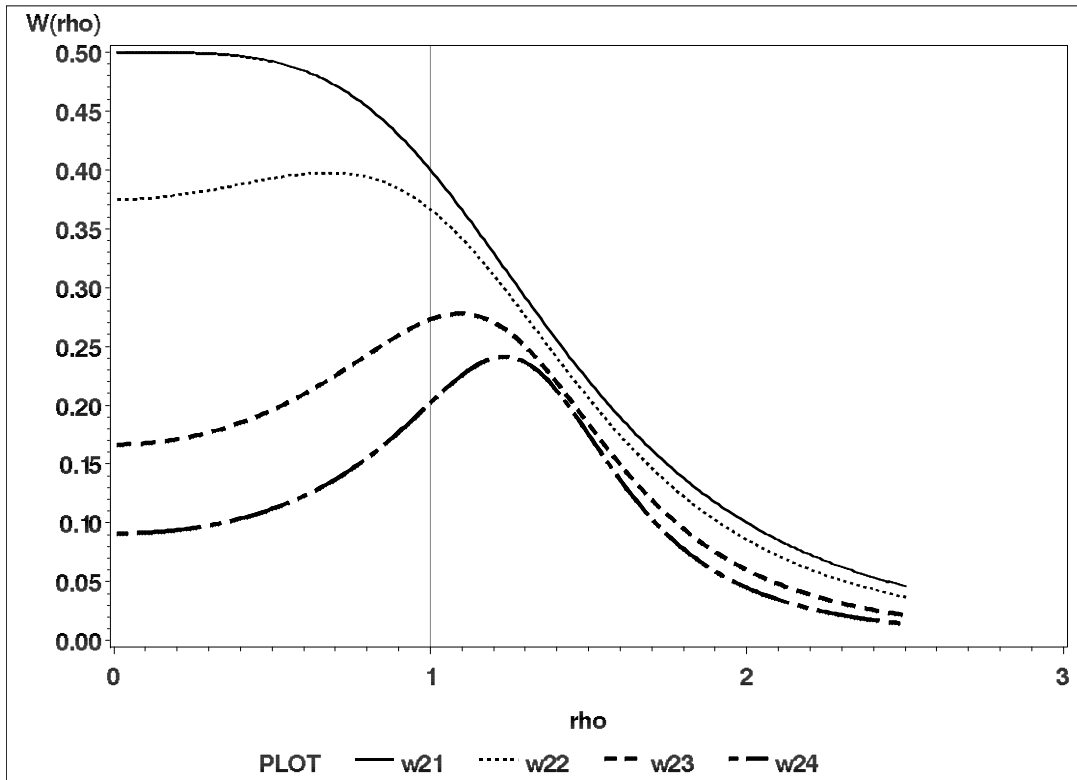


FIG. 10.1 – Graphe de la fonction de précision $W(\rho)$ en fonction de ρ , pour $p = 2$, et les valeurs de λ_4 suivantes : la courbe w21 correspond à $\lambda_4 = 1$; la courbe w22 correspond à $\lambda_4 = 0.8$; la courbe w23 correspond à $\lambda_4 = 0.6$; la courbe w24 correspond à $\lambda_4 = 0.55$.

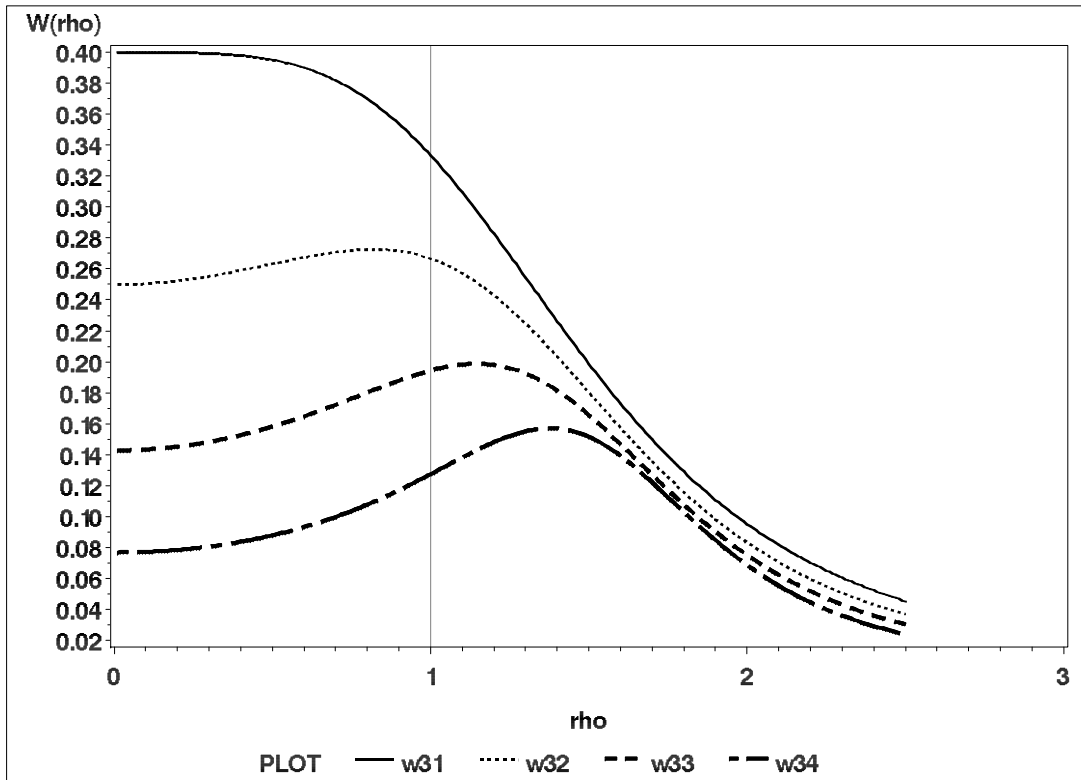


FIG. 10.2 – Graphe de la fonction de précision $W(\rho)$ en fonction de ρ , pour $p = 3$, et les valeurs de λ_4 suivantes : la courbe w31 correspond à $\lambda_4 = 1$; la courbe w32 correspond à $\lambda_4 = 0.8$; la courbe w33 correspond à $\lambda_4 = 0.7$; la courbe w34 correspond à $\lambda_4 = 0.65$.

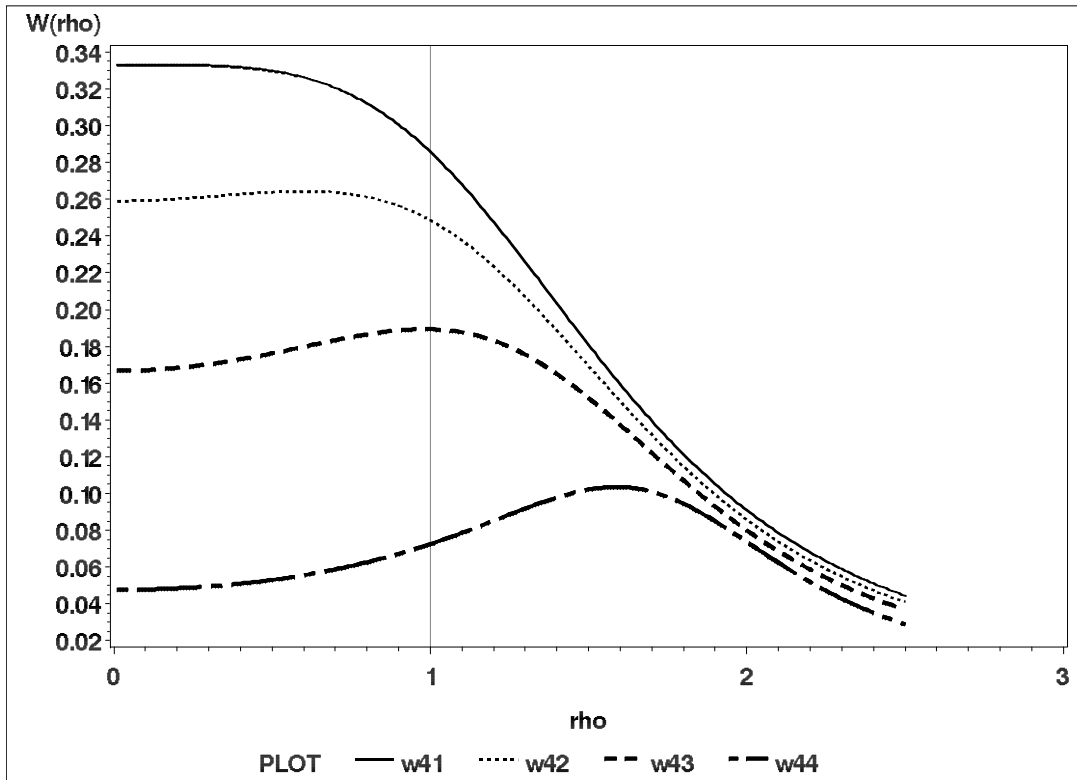


FIG. 10.3 – Graphe de la fonction de précision $W(\rho)$ en fonction de ρ , pour $p = 4$, et les valeurs de λ_4 suivantes : la courbe w41 correspond à $\lambda_4 = 1$; la courbe w42 correspond à $\lambda_4 = 0.9$; la courbe w43 correspond à $\lambda_4 = 0.8$; la courbe w44 correspond à $\lambda_4 = 0.7$.

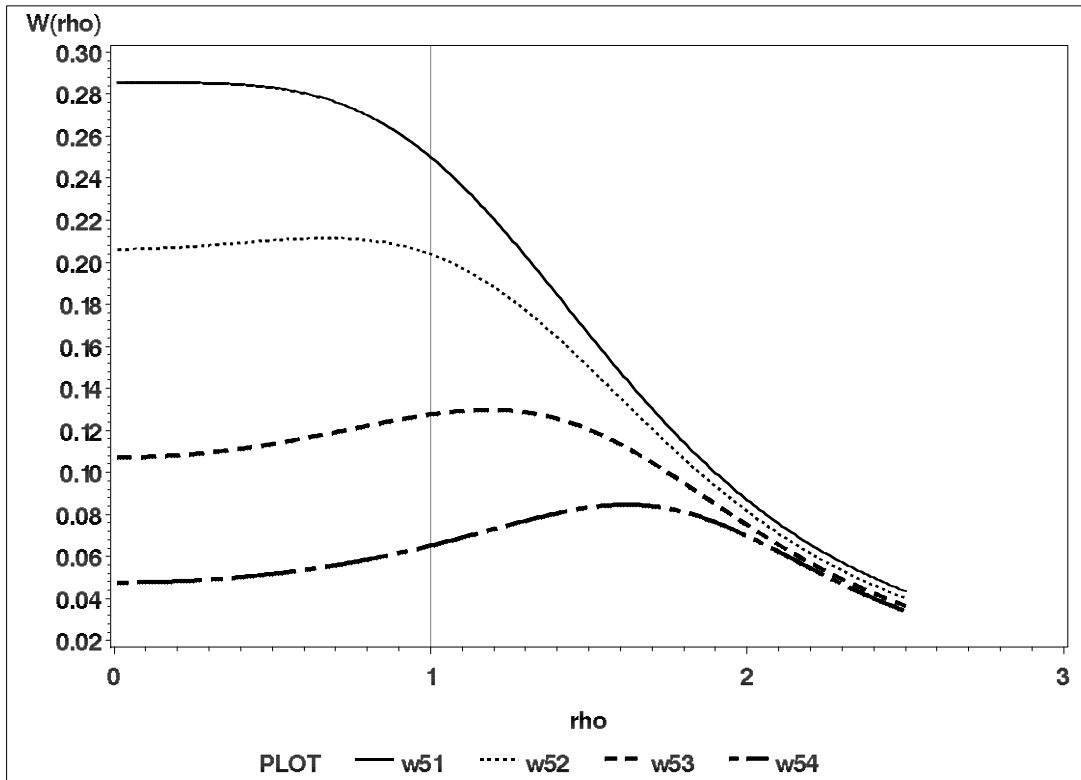


FIG. 10.4 – Graphe de la fonction de précision $W(\rho)$ en fonction de ρ , pour $p = 5$, et les valeurs de λ_4 suivantes : la courbe w51 correspond à $\lambda_4 = 1$; la courbe w52 correspond à $\lambda_4 = 0.9$; la courbe w53 correspond à $\lambda_4 = 0.8$; la courbe w54 correspond à $\lambda_4 = 0.75$.

traçons son graphe en fonction de ρ , pour 4 valeurs de p , sur les figures 10.1 à 10.4. Le choix de la borne supérieure de 1 pour λ_4 est expliqué ci-dessous.

Ces figures illustrent clairement comment la précision est très influencée par le choix de λ_4 . Ainsi pour p égal à 2 et 3, la variation est très importante $\forall \lambda_4$. Pour $p = 4$ et 5, on observe que pour $\lambda_4 = 0.9$ la variation de la précision est presque uniforme à l'intérieur d'une sphère de rayon $\rho = 1$, c-a-d égal à un écart-type.

Donc pour N fixé et $\rho \neq 0$ la qualité de la prédiction, mesurée par $W(\rho)$, dépend du plan ivr utilisé au travers du choix de λ_4 . On remarque que quand $\lambda_4 \rightarrow 1$ la précision augmente, et donc, compte tenu de la compétition biais-variance, les biais paramétriques des estimateurs $\hat{\beta}$ augmenteront si le vrai modèle comporte par exemple des termes cubiques en plus des termes quadratiques.

Khuri (1988, [23]) propose une mesure de l'isovariance par rotation sous la forme d'une fonction des moments du design, qui s'exprime entre 0 et 100, cette dernière valeur correspondant à un design exactement ivr. Cette mesure permet de comparer des designs différents sur ce critère, et aussi d'envisager dans certains cas une réparation du design (pour le rendre ivr).

10.2.5 Précision uniforme et isovariance par rotation

Après l'examen des figures 10.1 à 10.4 on peut chercher à avoir un plan ivr permettant une précision presque uniforme à l'intérieur d'une sphère de rayon 1 (un écart-type) en choisissant des valeurs adéquates pour λ_4 . Après calculs, on obtient les valeurs du tableau 10.2 pour λ_4 .

p	2	3	4	5	6	7	8
λ_4	0.78	0.84	0.87	0.89	0.91	0.92	0.93

Tableau 10.2. Valeurs (arrondies) de λ_4 en fonction de p pour qu'un plan conduise à une variance de prédiction de la réponse à la fois faible et presque uniforme dans la sphère d'intérêt centrée sur le centre de Ω et de rayon d'un écart-type.

Rappel :

La précision uniforme (ou même presque uniforme) n'existe pas pour un modèle du premier degré (se rappeler les hyperboles de confiance pour décrire la précision des prédictions d'une droite de régression).

10.2.6 C -orthogonalité et isovariance par rotation

Pour les modèles du deuxième degré, on a vu que la matrice des moments n'est pas diagonale car les moments $[j^2]$ et $[j^2k^2]$ sont positifs. Pour que cette matrice soit diagonale il faut exprimer les variables du modèle en termes de polynômes orthogonaux (voir section suivante).

Une fois ces variables codées, le modèle $Y = X\beta + \varepsilon$ devient alors

$$Y = XPP^{-1}\beta + \varepsilon = \dot{X}\dot{\beta} + \varepsilon \quad (10.43)$$

où P est la matrice (non singulière) transformant les termes x_{ij}^d en $P_d(x_{ij})$.

Par exemple pour $p = 2$ et un degré $d = 2$, et des niveaux symétriquement répartis autour de zéro (x_j centrées) on a, pour $j = 1, 2$:

$$\begin{aligned} P_0(x_j) &= 1 \\ P_1(x_j) &= x_j \\ P_2(x_j) &= x_j^2 - [jj] \end{aligned}$$

La matrice X se transforme en :

$$\dot{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 - [1^2] & x_{22}^2 - [2^2] & x_{11}x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N1} & x_{N2} & x_{N1}^2 - [1^2] & x_{N2}^2 - [2^2] & x_{N1}x_{N2} \end{bmatrix} \quad (10.44)$$

$(x_0) \quad (x_1) \quad (x_2) \quad (x_1^2) \quad (x_2^2) \quad (x_1x_2)$

et la nouvelle matrice des moments s'écrit :

$$N^{-1}(\dot{X}^T \dot{X}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \\ & [1^2] & a & 0 & b & c \\ & & [2^2] & d & 0 & e \\ & SYM & & f & g & h \\ & & & & i & j \\ & & & & & k \end{bmatrix} \begin{matrix} (x_0) \\ (x_1) \\ (x_2) \\ (x_1^2) \\ (x_2^2) \\ (x_1x_2) \end{matrix} \quad (10.45)$$

$(x_0) \quad (x_1) \quad (x_2) \quad (x_1^2) \quad (x_2^2) \quad (x_1x_2)$

avec :

- $a = [12]$,
- $b = [122]$,
- $c = [112]$,
- $d = [112]$,
- $e = [122]$,
- $f = [1^4] - [1^2]^2$,
- $g = [1^22^2] - [1^2][2^2]$,
- $h = [1^32] - [1^2][12]$,
- $i = [2^4] - [2^2]^2$,
- $j = [12^3] - [2^2][12]$,
- $k = [1^22^2]$.

Pour que (10.45) soit diagonale il faut donc que les deux conditions suivantes soient satisfaites :

- condition 1 : $[12] = [122] = [112] = [1^3 2] = [12^3] = 0$,
- condition 2 : $g = 0 \implies [1^2 2^2] = [1^2] [2^2]$.

Toute cette approche se généralise à p facteurs, et pour $d = 2$; on a donc :

$$[j^2 l^2] = [j^2] [l^2] \quad (10.46)$$

Finalement, la première condition est obtenue si le plan est ivr ($\exists \delta_j$ impair) et, par ailleurs (10.46) est vraie si $[j^2] = [l^2] = 1$. Cette dernière égalité implique $\lambda_4 = 1$ (voir équation (10.33)) et que les termes $[j^2]$ de la première ligne de la matrice (10.26) ne peuvent pas être nuls : orthogonalité stricte et isovariance par rotation sont incompatibles

Donc un plan ivr peut être rendu C -orthogonal si $\lambda_4 = 1$. On observe aussi la stricte incompatibilité des deux propriétés de C -orthogonalité-ivr avec la précision uniforme puisque pour avoir à peu près celle-ci il faut jouer sur des $\lambda_4 \neq 1$ (voir tableau 10.2).

10.2.7 Codage par polynômes orthogonaux

Ce codage nous permet de rendre orthogonaux les termes quadratiques dans le cas d'un plan à au moins 3 niveaux. Explicitons le principe des polynômes orthogonaux.

Principe

Soit un facteur X_j prenant au moins 3 niveaux, régulièrement espacés ou non, représenté par la variable x_j dans un modèle polynomial de degré quelconque. Les différents termes dans ce polynôme, de degré $\leq d$, construits à partir de x_j , conduisent à des vecteurs *a priori* non orthogonaux dans la matrice de modèle. L'objectif du codage par polynômes orthogonaux permet de rendre orthogonaux entre eux tous les termes du modèle.

Soit $P_d(x_j)$ le polynôme orthogonal de degré d (≥ 0) à déterminer, pour la variable x_j , $j = 1, \dots, p$. Il s'écrit :

$$P_d(x_j) = x_j^d + \alpha_{d-1,d} x_j^{d-1} + \dots + \alpha_{1,d} x_j + \alpha_{0,d} \quad (10.47)$$

où les coefficients α sont tels que :

$$\sum_{i=1}^N P_d(x_{ij}) P_{d-h}(x_{ij}) = 0, \quad h = 1, \dots, d \quad (10.48)$$

$$P_0(x_j) = 1 \quad (10.49)$$

La procédure de Gram-Schmidt (voir cours de régression) permet de construire une base orthogonale formée des polynômes $P_d(\cdot)$ à partir de la base $(1, x_j, x_j^2, \dots, x_j^d)$. Finalement, si besoin est, on normera ensuite les termes de la base pour disposer d'une base orthonormée.

La procédure de G-S conduit à :

$$P_0(x_j) = 1$$

$$P_k(x_j) = x_j^k - \sum_{u=1}^{k-1} P_u(x_j) \frac{\langle x_j^k, P_u(x_j) \rangle}{\langle P_u(x_j), P_u(x_j) \rangle}, \quad k = 1, \dots, d \quad (10.50)$$

puis pour la normalisation on effectue la transformation :

$$R_k(x_j) = \frac{P_k(x_j)}{\sqrt{\langle P_k(x_j), P_k(x_j) \rangle}} \quad (10.51)$$

Par exemple, pour $d = 2$, et n_j niveaux symétriquement répartis autour de zéro (x_j centrée) on a :

$$P_0(x_j) = 1 \quad (10.52)$$

$$P_1(x_j) = x_j \quad (10.53)$$

$$P_2(x_j) = x_j^2 - \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} x_{ij}^2 \quad (10.54)$$

Avec 3 niveaux $-g, 0, +g$ pour x_j on obtient $P_2(x_j) = x_j^2 - 2/3g^2$, et les codages correspondants sont donnés au tableau 10.3.

n°	x_0	x	x^2
1	1	$-g$	$g^2 - \frac{2}{3}g^2 = \frac{1}{3}g^2$
2	1	0	$0 - \frac{2}{3}g^2 = -\frac{2}{3}g^2$
3	1	$+g$	$g^2 - \frac{2}{3}g^2 = \frac{1}{3}g^2$

Tableau 10.3. Codage des termes x_0, x, x^2 d'un facteur X à 3 niveaux.

Dans un plan 3^p on prend $g = 1$, soit un codage des éléments du terme carré représenté par les valeurs respectives $1/3, -2/3, 1/3$. Remarquons qu'on peut prendre la transformation équivalente $x^2 \rightarrow 3x^2 - 2$.

Finalement le modèle (10.1) se réécrit comme :

$$y = \gamma_0 + \sum_{j=1}^p \gamma_j P_1(x_j) + \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{k>j}^p \gamma_{jk} P_1(x_j) P_1(x_k) + \sum_{j=1}^p \gamma_{jj} P_2(x_j^2) + \varepsilon \quad (10.55)$$

Les tables de codage

On trouve dans des tables les codages pour les nombres de niveaux **équidistants** les plus usuels en planification expérimentale. On donne au tableau 10.4 un extrait utile de ces tables où les codages sont donnés sous la forme

$$P_k(x) = \lambda_k f(x^*, n) \quad (10.56)$$

où λ_k est un coefficient, x^* est la variable x centrée et divisée par l'écart entre 2 niveaux, n le nombre de niveaux, et $f(\cdot)$ la fonction déduite de l'orthogonalisation de G-S. Pour les polynômes orthonormés correspondants il suffit de diviser chaque élément d'un vecteur par l'écart-type de celui-ci, donnée en bas du tableau.

	$n = 3$		$n = 4$			$n = 5$			
x	P_1	P_2	P_1	P_2	P_3	P_1	P_2	P_3	P_4
1	-1	+1	-3	+1	-1	-2	+2	-1	+1
2	0	-2	-1	-1	+3	-1	-1	+2	-4
3	+1	+1	+1	-1	-3	0	-2	0	+6
4			+3	+1	+1	+1	-1	-2	-4
5						+2	+2	+1	+1
λ_k	1	3	2	1	10/3	1	1	5/6	35/12
σ	$\sqrt{2/3}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{5}$	1	$\sqrt{5}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{14/5}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{11}$

Tableau 10.4. Codages par polynômes orthogonaux pour les nombres de niveaux 3, 4 et 5, correspondant aux degrés respectifs 2, 3 et 4.

Génération avec SAS

On peut générer facilement les polynômes orthonormés avec le logiciel SAS. La commande ORPOL de la procédure IML utilisée comme suit permet de le vérifier et de comparer avec le tableau 10.4, pour 5 niveaux et jusqu'au degré 4 :

```

/***** ORPOL01 *****/
proc iml;

X1 = T(1:5);
d=4;
P1 = orpol(X1,d);
print P1;
norme=j(1,5,0);
do j=1 to d+1;
  norme[j]=sqrt(ssq(P1[,j]));
end;

print norme;

P2=
{
-2 2 -1 1,
-1 -1 2-4,

```

```

0 -2 0 6,
1 -1 -2 -4,
2 2 1 1
};
print P2;

norme=j(1,4,0);
do j=1 to 4;
  norme[j]=sqrt(ssq(P2[,j]));
end;

print norme;

do j=1 to 4;
  do i=1 to 5;
    P2[i,j]=P2[i,j]/norme[j];
  end;
end;

print P2;

norme=j(1,4,0);
do j=1 to 4;
  norme[j]=sqrt(ssq(P2[,j]));
end;

quit;run; quit;
/*****/

```

qui conduit à la sortie suivante :

```

/*****/

P1

0.4472136 -0.632456 0.5345225 -0.316228 0.1195229
0.4472136 -0.316228 -0.267261 0.6324555 -0.478091
0.4472136 8.571E-21 -0.534522 -1E-20 0.7171372
0.4472136 0.3162278 -0.267261 -0.632456 -0.478091
0.4472136 0.6324555 0.5345225 0.3162278 0.1195229

```

```

norme
1      1      1      1      1
P2
-2      2      -1      1
-1      -1      2      -4
0      -2      0      6
1      -1      -2      -4
2      2      1      1

```

```

norme
3.1622777 3.7416574 3.1622777 8.3666003

```

```

P2
-0.632456 0.5345225 -0.316228 0.1195229
-0.316228 -0.267261 0.6324555 -0.478091
0 -0.534522 0 0.7171372
0.3162278 -0.267261 -0.632456 -0.478091
0.6324555 0.5345225 0.3162278 0.1195229
/*****/

```

Commentaire :

- Dans la sortie ci-dessus on reprend avec P2 le tableau 10.4 pour $n=5$ (degré 4), et on vérifie après normalisation que l'on retrouve bien la solution proposée par SAS (matrice P1).

10.3 Le plan 3^p

10.3.1 Modèle et matrice de modèle

On choisira $p = 2$, sans perte de généralité, pour pouvoir facilement détailler tous les calculs. C'est donc un plan factoriel complet à deux facteurs continus X_1 et X_2 . Comme il y a 3 niveaux par facteur on peut postuler un modèle avec des effets quadratiques des facteurs. Il s'écrit :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \varepsilon \quad (10.57)$$

Si on attribue les 3 niveaux (codés) -1, 0, +1 à chacun des deux facteurs la matrice de modèle pour une seule répétition par expérience, s'écrit comme au tableau 10.5.

n°	x_0	x_1	x_2	x_1^2	x_2^2	x_1x_2
1	+1	-1	-1	+1	+1	+1
2	+1	-1	0	+1	0	0
3	+1	-1	+1	+1	+1	-1
4	+1	0	-1	0	+1	0
5	+1	0	0	0	0	0
6	+1	0	+1	0	+1	0
7	+1	+1	-1	+1	+1	-1
8	+1	+1	0	+1	0	0
9	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Tableau 10.5. Matrice de modèle pour le plan 3^2 à 2 facteurs continus.

Ce codage semble bien adapté. Mais si on calcule les produits scalaires des vecteurs de ce tableau on constate qu'ils sont tous orthogonaux entre eux, sauf les vecteurs des termes carrés, qui ne sont pas centrés et présentent un produit scalaire de +4 entre eux, ce qui est particulièrement fâcheux puisque ce type de plan est justement fait pour estimer en propre des effets quadratiques des facteurs. En outre, les vecteurs des termes carrés ne sont pas orthogonaux au vecteur x_0 .

La solution, au moyen du codage par les polynômes orthogonaux exposé au §10.2.7, consiste à effectuer la transformation $x_j^2 \rightarrow 3x_j^2 - 2$ (ou $x_j^2 \rightarrow x_j^2 - 2/3$) $j = 1, 2$ (voir tableau 10.4), ceux-ci devenant centrés, orthogonaux entre eux, et également orthogonal aux autres vecteurs, y compris le vecteur associé au terme $(3x_1^2 - 2) \times (3x_2^2 - 2)$.

Grâce à ce codage, il est également possible d'étudier de façon rigoureuse les effets de termes plus compliqués tels les termes $x_1(3x_2^2 - 2)$ et $x_2(3x_1^2 - 2)$, qui conduisent alors à saturer le modèle (10.57), qui devient donc (voir une application dans l'exemple suivant) :

$$y = \beta_0 + \beta_1x_1 + \beta_2x_2 + \beta_{12}x_1x_2 + \beta_{11}x_1^2 + \beta_{22}x_2^2 + \beta_{122}x_1x_2^2 + \beta_{112}x_1^2x_2 + \beta_{1122}x_1^2x_2^2 + \varepsilon \quad (10.58)$$

10.3.2 Un exemple de plan 3^2 pour deux facteurs continus

Enoncé du problème

Cet exemple, issu du milieu industriel, est tiré du livre de Montgomery (1991). La variation de durée de vie d'un outil de coupe installé dans une machine à commande numérique est supposée dépendre de deux facteurs continus : l'angle d'attaque de l'outil (X_1) et la vitesse de coupe (X_2). Trois niveaux de vitesse et d'angle sont choisis, et deux répétitions d'expériences sont réalisées pour chacune des 9 combinaisons du plan factoriel complet 3^2 qui conduit donc à 18 résultats de la réponse.

On trouve au tableau 10.6 les résultats des réponses pour chaque combinaison.

$X_1 = \text{Angle}$ (degrés)	$X_2 = \text{Vitesse (in/min)}$			$y_{i..}$
	125 (-1)	150 (0)	175 (+1)	
15 (-1)	-2; -1 → -3	-3; 0 → -3	2; 3 → 5	-1
20 (0)	0; 2 → +2	1; 3 → +4	4; 6 → 10	16
25 (+1)	-1; 0 → -1	5; 6 → +11	0; -1 → -1	9
$y_{.j.}$	-2	12	14	24 = $y_{...}$

Tableau 10.6. Résultats du plan (les totaux par case apparaissent à droite des flèches).

Matrice de modèle

Avec le code SAS suivant :

```

/***** FACTEX21.SAS *****/
proc factex;
  factors x1 x2/nlev=3;
  output out=plan pointrep=2
         x1 nvals=(15 20 25)
         x2 nvals=(125 150 175);

data mod; set plan;
x1=(x1-20)/5; x2=(x2-150)/25; x12=x1*x2;
q1=3*x1*x1-2;
q2=3*x2*x2-2;
x1q2=x1*q2; x2q1=x2*q1; q1q2=q1*q2;
proc print data=mod ;
proc corr data=mod noprob;
run;
/*****/

```

on génère la matrice de modèle codée suivante :

```

*****
Obs    x1    x2    x12    q1    q2    x1q2    x2q1    q1q2

1      -1    -1      1      1      1      -1      -1      1
2      -1    -1      1      1      1      -1      -1      1
3      -1     0      0      1     -2       2       0     -2
4      -1     0      0      1     -2       2       0     -2

```

```

5   -1   1   -1   1   1   -1   1   1
6   -1   1   -1   1   1   -1   1   1
7    0  -1   0   -2   1   0   2  -2
8    0  -1   0   -2   1   0   2  -2
9    0   0   0   -2  -2   0   0   4
10   0   0   0   -2  -2   0   0   4
11   0   1   0   -2   1   0  -2  -2
12   0   1   0   -2   1   0  -2  -2
13   1  -1  -1   1   1   1  -1   1
14   1  -1  -1   1   1   1  -1   1
15   1   0   0   1  -2  -2   0  -2
16   1   0   0   1  -2  -2   0  -2
17   1   1   1   1   1   1   1   1
18   1   1   1   1   1   1   1   1
*****

```

Avec la ligne de code suivant :

```

/*****/
proc corr data=mod noprob;
/*****/

```

on vérifie qu'elle est bien orthogonale :

```

*****
The CORR Procedure

```

Simple Statistics						
Variable	N	Mean	Std Dev	Sum	Minimum	Maximum
x1	18	0	0.84017	0	-1.00000	1.00000
x2	18	0	0.84017	0	-1.00000	1.00000
x12	18	0	0.68599	0	-1.00000	1.00000
q1	18	0	1.45521	0	-2.00000	1.00000
q2	18	0	1.45521	0	-2.00000	1.00000

x1q2	18	0	1.18818	0	-2.00000	2.00000
x2q1	18	0	1.18818	0	-2.00000	2.00000
q1q2	18	0	2.05798	0	-2.00000	4.00000

Pearson Correlation Coefficients, N = 18

	x1	x2	x12	q1
x1	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x2	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
x12	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
q1	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000
q2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x1q2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x2q1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
q1q2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Pearson Correlation Coefficients, N = 18

	q2	x1q2	x2q1	q1q2
x1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x12	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
q1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
q2	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
x1q2	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
x2q1	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
q1q2	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000

Commentaire :

- *On observe dans la sortie précédente que ni les écart-types, ni les plages de variation des termes de la matrice de modèle sont identiques, contrairement aux matrices de modèle des plans à deux niveaux. Comme on souhaite dans une première phase de l'analyse comparer les effets de tous les termes du modèle, on propose de réduire les termes de la matrice de modèle (déjà orthogonale) de telle façon que les estimateurs ultérieurs aient des écart-types tous égaux.*

Ceci est obtenu avec le code suivant :

```
*****
proc standard data=mod out=cenred mean=0 std=1;
run;
*****
```

Analyse de variance et estimation des coefficients

Après avoir saisi les données, la procédure GLM, au moyen du code suivant :

```
***** GLM04 *****
data rep; input y @@; datalines;
-2 -1 -3 0 2 3 0 2 1 3 4 6 -1 0 5 6 0 -1
;
data total ; merge cenred rep;

proc glm data=total;

model y= x1 x2 x12 q1 q2 x1q2 x2q1 q1q2 / ss1;
run;quit; run;
*****
```

nous fournit l'analyse de variance et les estimations des coefficients :

```
*****
The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Source                DF      Squares      Sum of
                    Mean Square  F Value    Pr > F
Model                  8      111.0000000    13.8750000     9.61    0.0013
Error                  9       13.0000000     1.4444444
Corrected Total       17      124.0000000
```

R-Square	Coeff Var	Root MSE	y Mean
0.895161	90.13878	1.201850	1.333333

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
x1	1	8.33333333	8.33333333	5.77	0.0398
x2	1	21.33333333	21.33333333	14.77	0.0039
x12	1	8.00000000	8.00000000	5.54	0.0431
q1	1	16.00000000	16.00000000	11.08	0.0088
q2	1	4.00000000	4.00000000	2.77	0.1305
x1q2	1	42.66666667	42.66666667	29.54	0.0004
x2q1	1	2.66666667	2.66666667	1.85	0.2073
q1q2	1	8.00000000	8.00000000	5.54	0.0431

Parameter	Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1.333333333	0.28327886	4.71	0.0011
x1	0.700140042	0.29149154	2.40	0.0398
x2	1.120224067	0.29149154	3.84	0.0039
x12	-0.685994341	0.29149154	-2.35	0.0431
q1	-0.970142500	0.29149154	-3.33	0.0088
q2	-0.485071250	0.29149154	-1.66	0.1305
x1q2	-1.584236069	0.29149154	-5.43	0.0004
x2q1	-0.396059017	0.29149154	-1.36	0.2073
q1q2	-0.685994341	0.29149154	-2.35	0.0431

On constate que deux effets ne sont pas significatifs au risque de 5%, ce sont l'effet du terme quadratique de x_2 et l'effet du terme $x_2x_1^2$. Après avoir supprimé ces deux termes on refait une régression sur les termes restants et on obtient un modèle final interprétable avec des effets significatifs (la résiduelle changeant, les p-values ne sont plus exactement inférieures à 0.05) :

The GLM Procedure

Dependent Variable: y

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	6	104.3333333	17.3888889	9.73	0.0007
Error	11	19.6666667	1.7878788		
Corrected Total	17	124.0000000			

R-Square	Coeff Var	Root MSE	y Mean
0.841398	100.2837	1.337116	1.333333

Source	DF	Type I SS	Mean Square	F Value	Pr > F
x1	1	8.33333333	8.33333333	4.66	0.0538
x2	1	21.33333333	21.33333333	11.93	0.0054
x12	1	8.00000000	8.00000000	4.47	0.0580
q1	1	16.00000000	16.00000000	8.95	0.0123
x1q2	1	42.66666667	42.66666667	23.86	0.0005
q1q2	1	8.00000000	8.00000000	4.47	0.0580

Parameter	Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1.333333333	0.31516123	4.23	0.0014
x1	0.700140042	0.32429823	2.16	0.0538
x2	1.120224067	0.32429823	3.45	0.0054
x12	-0.685994341	0.32429823	-2.12	0.0580
q1	-0.970142500	0.32429823	-2.99	0.0123
x1q2	-1.584236069	0.32429823	-4.89	0.0005
q1q2	-0.685994341	0.32429823	-2.12	0.0580

Enfin, on fait une régression directement sur les termes restants mais contruits sur les échelles naturelles des deux facteurs pour disposer à la fois d'une équation permettant de faire des prédictions de la réponse dans le domaine d'étude (interpolation seulement), et aussi des graphiques très utiles. En revanche les nouveaux coefficients ne seront plus

utilisables pour faire de l'interprétation et de la comparaison des effets. Pour ce faire on se reportera au listing immédiatement précédent.

On obtient donc :

The REG Procedure

Model: MODEL1

Dependent Variable: y

Number of Observations Read 18

Number of Observations Used 18

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	6	76.42186	12.73698	2.94	0.0576
Error	11	47.57814	4.32529		
Corrected Total	17	124.00000			

Root MSE	2.07973	R-Square	0.6163
Dependent Mean	1.33333	Adj R-Sq	0.4070
Coeff Var	155.97990		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	122.07406	114.28866	1.07	0.3083
x1	1	-12.58220	8.95517	-1.41	0.1876
x2	1	-1.03160	0.75430	-1.37	0.1987
x12	1	0.09016	0.04371	2.06	0.0636
q1	1	0.16809	0.15412	1.09	0.2987
x1q2	1	0.00010583	0.00016189	0.65	0.5267
q1q2	1	-0.00001083	0.00000648	-1.67	0.1227

Avec l'équation de cette sortie on peut, à l'aide des codes SAS suivants obtenir les graphiques des figures 10.5 et 10.6.

```

/*****/;
data d0;
  do x1=15 to 25 by 1;
    do x2=125 to 175 by 1;

      y= 122.07406-12.58220*x1-1.03160*x2
        +0.09016*x1*x2 +0.16809*x1*x1
        +0.00010583*x1*x2*x2-0.00001083*x1*x1*x2*x2;

      output;
    end;
  end;

goptions device=win reset=global gunit=pct border
  reset=axis ftext=swissb htitle=4 htext=3;
  symbol1 width=5 height=3;
run;

proc g3d data=d0 ;
  plot x1*x2=y/ctop=black rotate=30;

proc gcontour data=d0 ;
  plot x1*x2=y /autolabel=(check=none)
      levels=-1.8 -0.6 0.5 1.7 2.3 4.0 5.1;

run;quit;run;
/*****/;

```

Le graphique des isocontours (Figure 10.6) permet de détecter de façon simple les zones d'intérêt de la réponse, notamment l'optimum. Il faut ajouter qu'en cas de plus de 2 facteurs ce type de graphique perd vite de son intérêt. Il faut alors faire appel à l'analyse canonique de recherche d'optimum ("ridge analysis" en anglais).

10.3.3 Propriétés du 3^p

On a vu que, via le codage par polynômes orthonormés, on pouvait étudier correctement les effets quadratiques des facteurs continus. Examinons maintenant le 3^p sous l'angle de l'isovariance par rotation.

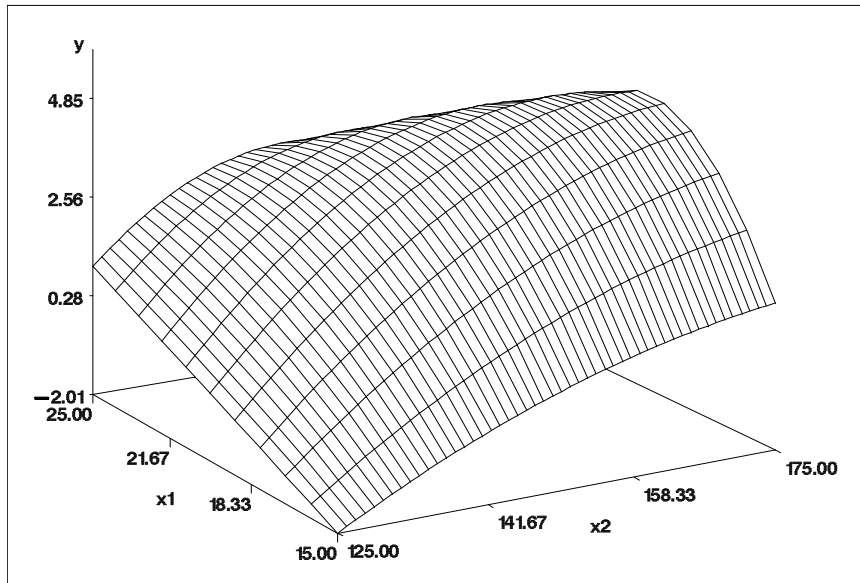


FIG. 10.5 – Surface de réponse pour l'exemple du 3^2 .

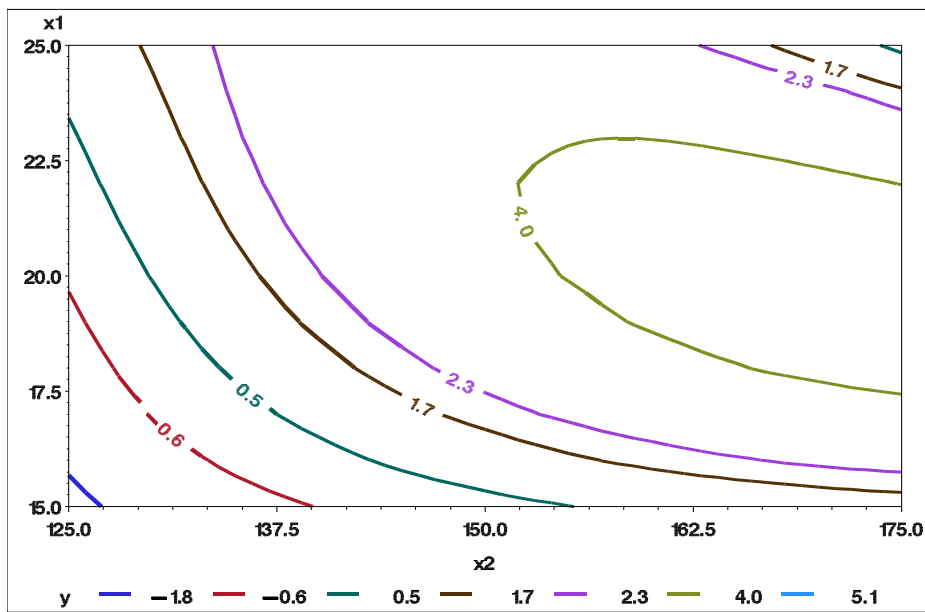


FIG. 10.6 – Isocontours pour l'exemple du plan 3^2 .

Construisons d'abord la matrice des moments à partir de la matrice de modèle (non codée par les polynomes orthogonaux) :

$$N^{-1}(X^T X) = \begin{array}{cccccc} \left[\begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 0 & 2/3 & 2/3 & 0 \\ & 2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 2/3 & 0 & 0 & 0 \\ SYM & & & 2/3 & 4/9 & 0 \\ & & & & 2/3 & 0 \\ & & & & & 4/9 \end{array} \right] & \begin{array}{l} (x_0) \\ (x_1) \\ (x_2) \\ (x_1^2) \\ (x_2^2) \\ (x_1 x_2) \end{array} \end{array} \quad (10.59)$$

On vérifie bien qu'elle n'est pas diagonale, et qu'en outre le plan n'est pas ivr puisque ayant :

$$\begin{aligned} [1^4] &= [2^4] = 2/3 \\ [1^2 2^2] &= 4/9 \end{aligned}$$

la condition (10.34) n'est pas respectée : $[j^4] \neq 3 [j^2 k^2]$ car $2/3 \neq 3 \times 4/9 = 4/3$.

Codons (par polynomes orthogonaux) la matrice de modèle X comme au tableau 10.7.

n°	x_0	x_1	x_2	$x_1^2 - 2/3$	$x_2^2 - 2/3$	$x_1 x_2$
1	+1	-1	-1	+1/3	+1/3	+1
2	+1	-1	0	+1/3	-2/3	0
3	+1	-1	+1	+1/3	+1/3	-1
4	+1	0	-1	-2/3	+1/3	0
5	+1	0	0	-2/3	-2/3	0
6	+1	0	+1	-2/3	+1/3	0
7	+1	+1	-1	+1/3	+1/3	-1
8	+1	+1	0	+1/3	-2/3	0
9	+1	+1	+1	+1/3	+1/3	+1

Tableau 10.7. Matrice de modèle codée \dot{X} pour le plan 3^2 .

Les deux colonnes x_1 et x_2 nous conduisent à $[j^2] = 1/9 \times 6 = 2/3$. La matrice des moments s'écrit maintenant :

$$N^{-1}(\dot{X}^T \dot{X}) = \begin{array}{cccccc} \left[\begin{array}{cccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & 2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & 2/3 & 0 & 0 & 0 \\ SYM & & & 2/9 & 0 & 0 \\ & & & & 2/9 & 0 \\ & & & & & 2/3 \end{array} \right] & \begin{array}{l} (x_0) \\ (x_1) \\ (x_2) \\ \leftarrow (x_1^2) \\ (x_2^2) \\ \leftarrow (x_1 x_2) \end{array} \end{array} \quad (10.60)$$

$(x_0) \quad (x_1) \quad (x_2) \quad (x_1^2) \quad \begin{matrix} \uparrow \\ (x_2^2) \end{matrix} \quad \begin{matrix} \uparrow \\ (x_1 x_2) \end{matrix}$

On vérifie, comme attendu, qu'elle est diagonale mais que le plan correspondant n'est toujours pas ivr, car $[1^2 2^2]$ prend deux valeurs : 0 et $2/3$.

Remarque :

Si on prenait un codage $-g, 0, +g$, avec $g \neq 1$ on rendrait aussi le plan orthogonal, mais toujours pas ivr.

En conclusion, pour un modèle du deuxième degré, le plan 3^p avec des niveaux équidistants peut être complètement orthogonalisable, mais ne sera jamais ivr car on peut montrer que : $[j^4] = 3/2$ et $[j^2 k^2] = 1$ ce qui implique $[j^4] \neq 3 [j^2 k^2]$.

10.4 Le plan composite centré

En 1951 Box et Wilson proposent le plan composite centré comme plan performant de surface de réponse pour un modèle du deuxième degré du type (10.1).

10.4.1 Définition

Ce plan est constitué de 3 parties :

- un plan factoriel complet 2^p ou fractionnaire 2^{p-k} , à 2 niveaux codés $-g, +g$ ou $-1, +1$, soit $N_F = 2^p$ ou 2^{p-k} expériences pour cette partie,
- $2p$ points situés sur les axes des variables à une distance $\pm\alpha$ du centre du domaine expérimental, formant un polytope axial, soit $N_\alpha = 2p$ expériences pour cette partie,
- un nombre $N_0 (> 1)$ d'expériences au centre.

Le nombre total d'expériences est donc $N = N_F + N_\alpha + N_0$, et les valeurs de α et N_0 sont liées (voir plus loin).

Exemple : pour $p = 2$ et $g = 1$ on peut avoir $|\alpha| = \sqrt{2}$ avec $N_0 = 1$, soit $N = 2^2 + 2 \times 2 + 1 = 9$. La matrice d'expériences est donnée au tableau 10.8. Les points de support des 8 premières expériences se placent sur un cercle de rayon $\sqrt{2}$.

n°	x_0	x_1
1	-1	-1
2	+1	-1
3	-1	+1
4	+1	+1
5	$-\sqrt{2}$	0
6	$+\sqrt{2}$	0
7	0	$-\sqrt{2}$
8	0	$+\sqrt{2}$
9	0	0

Tableau 10.8. Matrice d'expériences pour un plan composite centré pour $p = 2$, avec $N_0 = 1$.

10.4.2 Condition sur N_0

Pour le modèle (10.57) et p facteurs, la matrice du modèle s'écrit :

$$X = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 & \pm 1_{N_F \times p} & & \pm 1_{N_F \times p} & & \pm 1_{N_F \times p(p-1)/2} \\ 1 \\ 1 \\ 1 & -\alpha & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & +\alpha & 0 & 0 & 0 & \alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -\alpha & 0 & \vdots & 0 & \alpha^2 & 0 & \vdots \\ 1 & 0 & +\alpha & 0 & \vdots & 0 & \alpha^2 & 0 & \vdots & 0_{2p \times p(p-1)/2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & & & 0 & -\alpha & & 0 & \alpha^2 \\ 1 & & & 0 & +\alpha & & 0 & \alpha^2 \\ 1 \\ 1 & & 0_{N_0 \times p} & & & 0_{N_0 \times p} & & & 0_{N_0 \times p(p-1)/2} \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$(x_0) \quad (x_1) \dots (x_p) \quad (x_1^2) \dots (x_p^2) \quad (x_1 x_2) \quad (x_1 x_3) \quad \dots \quad (x_{p-1} x_p)$$

Tableau 10.8. Matrice de modèle pour un plan composite centré pour p facteurs.

Théorème

Il faut $N_0 > 0$ pour que les termes quadratiques β_{jj} soient estimables.

Démonstration

La sous-matrice concernée à N' lignes, avec $N' = N_\alpha + N_0$, s'écrit :

$$X_{\alpha^2} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha^2 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \alpha^2 & 0 & \dots & \vdots \\ 1 & 0 & \alpha^2 & \dots & \vdots \\ 1 & \vdots & \alpha^2 & \dots & \vdots \\ 1 & \vdots & 0 & \dots & \vdots \\ 1 & \vdots & \vdots & \dots & 0 \\ 1 & \vdots & \vdots & \dots & \alpha^2 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & \alpha^2 \\ 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (10.61)$$

et la matrice $X_{\alpha^2}^T X_{\alpha^2}$ correspondante est :

$$X_{\alpha^2}^T X_{\alpha^2} = \begin{pmatrix} N' & 2\alpha^2 & 2\alpha^2 & \cdots & 2\alpha^2 \\ & 2\alpha^4 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & 0 \\ & & & & 2\alpha^4 \end{pmatrix} \quad (10.62)$$

Le déterminant de (10.62) s'exprime comme :

$$|X_{\alpha^2}^T X_{\alpha^2}| = (2\alpha^4)^p (N' - 2p) \quad (10.63)$$

Il faut qu'il soit positif pour que (10.62) soit inversible, c-a-d il qu'il faut $N' > 2p$, c-a-d $N_\alpha + N_0 > 2p$ ou encore $2p + N_0 > 2p$, soit $N_0 > 0$.

CQFD

10.4.3 Conditions pour l'isovariance par rotation

Ecrivons les conditions sur les moments de la matrice des moments du plan composite centré pour que celui-ci soit ivr :

- $[j] = 0$, $j = 1, \dots, p$ (les x_j sont centrées),
- $[j^3] = 0$, $j = 1, \dots, p$,
- $[jk] = 0$, $j, k = 1, \dots, p$, $j \neq k$,
- $[j^2k] = 0$, $j, k = 1, \dots, p$, $j \neq k$,
- $[jlk] = 0$, $j \neq l \neq k$,
- $[j^3k] = 0$, $j, k = 1, \dots, p$, $j \neq k$,
- $[j^2lk] = 0$, $j \neq l \neq k$,
- $[j^2]$, $[j^4]$, $[j^2k^2] \neq 0$
 - Choix du facteur d'échelle g pour les niveaux de la partie factorielle tel que $[jj] = 1$ (voir exercice à la fin du chapitre),
 - $[j^4]$ et $[j^2k^2]$ dépendent de α et N_0 (voir § suivant).

10.4.4 Relation entre N_F et α

Déterminons la relation qui lie N_F et α pour qu'un plan composite centré soit ivr. Soit $-g$, $+g$ le codage de la partie factorielle, tel que $[j^2] = 1$. Par exemple pour une x_j les valeurs prises sur les N expériences seront :

$$-g, +g, -g, +g, -\alpha g, +\alpha g, 0, \dots, 0$$

On trouve g en écrivant :

$$[j^2] N = N = 2^p g^2 + 2\alpha^2 g^2$$

d'où :

$$g = \sqrt{\frac{N}{N_F + 2\alpha^2}}$$

Par ailleurs, il faut $[j^4] = 3 [j^2 k^2]$.

Or :

$$\begin{aligned} [j^4] &= \frac{g^4 N_F + 2\alpha^4 g^4}{N} \\ [j^2 k^2] &= \frac{N_F g^4}{N} \end{aligned}$$

ce qui implique :

$$\alpha = N_F^{1/4} \quad (10.64)$$

On observe que (10.64) ne dépend pas du facteur d'échelle g .

10.4.5 Détermination de α et C -orthogonalité

Déterminons la relation de α pour qu'un plan composite centré soit C -orthogonalisable (mais pas forcément ivr). Il faut au départ :

$$[j^2 k^2] = \lambda_4 = 1$$

Or :

$$[j^2 k^2] = \frac{N_F g^4}{N} = \frac{N_F}{N} \left[\sqrt{\frac{N}{N_F + 2\alpha^2}} \right]^4$$

ce qui implique :

$$NN_F = (N_F + 2\alpha^2)^2 \quad (10.65)$$

soit :

$$\alpha = \left(\frac{\sqrt{NN_F} - N_F}{2} \right)^{1/2} \quad (10.66)$$

10.4.6 Relation de N_0

Déterminons la relation de N_0 pour qu'un plan composite centré soit à la fois ivr et C -orthogonal. Il suffit d'injecter (10.64) dans (10.65), et comme $N_0 = N - N_F - N_\alpha$ on en tire :

$$N_0 = \text{entier le plus proche de } 4\sqrt{N_F} + 4 - 2p$$

Par exemple si $p = 2$ on a : $N_F = 4$, $N_0 = 8$, $\alpha = \sqrt{2}$.

10.4.7 Isovariance par rotation et précision presque uniforme

Déterminons la valeur de N_0 pour qu'un plan composite centré soit ivr et de précision presque uniforme. Pour p donné, λ_4 est donné dans le tableau 10.2 pour que le plan soit de précision presque uniforme. Or :

$$\lambda_4 = [j^2 k^2] = \frac{NN_F}{(N + 2\alpha^2)^2} \quad (10.67)$$

et comme on souhaite un plan ivr on remplace dans (10.67) α^2 par $\sqrt{N_F}$, d'où :

$$N_0 = \text{entier le plus proche de } \lambda_4(\sqrt{N_F} + 2)^2 - N_F - 2p \quad (10.68)$$

Par exemple pour $p = 3$ on a $N_F = 2^3 = 8$, $\lambda_4 = 0.8385$, soit $N_0 = 6$.

10.4.8 Tableaux résumés

Dans les tableaux 10.9 à 10.11 on résume les valeurs des différents paramètres pour choisir un plan adéquat. Dans le tableau 10.9, les valeurs de N_0 sont obtenues avec la formule (10.66).

p	2	3	4	5	5	6	6
Partie Factorielle	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}	2^5	2^{6-1}	2^6
N_F	4	8	16	16	32	32	64
N_α	4	6	8	10	10	12	12
$N_0=1$	1.000	1.215	1.414	1.547	1.596	1.724	1.761
$N_0=2$	1.078	1.287	1.483	1.607	1.662	1.784	1.824
$N_0=3$	1.147	1.353	1.547	1.664	1.724	1.841	1.885
$N_0=4$	1.210	1.414	1.607	1.719	1.784	1.896	1.943

Tableau 10.9. Valeurs de α (données par la formule (10.66)) en fonction de N_0 pour rendre C -orthogonal un plan composite centré (qui ne sera pas forcément ivr).

p	2	3	4	5	5	6	6
Partie Factorielle	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}	2^5	2^{6-1}	2^6
α	$\sqrt{2}$	1.682	2	2	2.378	2.378	2.823
N_F	4	8	16	16	32	32	64
N_α	4	6	8	10	10	12	12
N_0	8	9	12	10	17	15	24
N	16	23	36	36	59	59	100
Efficacité= $P/N \times 100$	37.4	43.5	41.7	58.5	35.6	47.4	28.0

Tableau 10.10. Valeurs de α (données par la formule (10.64)), N_F , N_α , N_0 et N pour rendre C -orthogonal un plan composite centré qui est déjà ivr.

p	2	3	4	5	5	6	6
Partie Factorielle	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}	2^5	2^{6-1}	2^6
α	$\sqrt{2}$	1.682	2	2	2.378	2.378	2.823
N_F	4	8	16	16	32	32	64
N_α	4	6	8	10	10	12	12
N_0	5	6	7	6	10	9	15
N	13	20	31	32	52	53	91
Efficacité= $P/N \times 100$	46.1	50.0	48.3	65.8	40.3	52.9	30.8

Tableau 10.11. Valeurs de α (données par la formule (10.64)), N_F , N_α , N_0 et N pour rendre de précision uniforme un plan composite centré qui est déjà ivr.

10.4.9 Un exemple d'application réelle du plan composite centré

Enoncé du problème

Dans les années 1980 on cherchait à fabriquer une matière plastique PVC de qualité alimentaire pour la fabrication de bouteilles d'eau minérale. Une des difficultés majeures était d'empêcher le jaunissement du PVC par exemple lors de l'exposition au soleil, c-a-d de lui procurer une bonne stabilité thermique.

Une étude en laboratoire de R&D est lancée pour étudier l'influence de plusieurs additifs stabilisants thermiques à incorporer dans le PVC lors de sa fabrication.

Une formulation de base du PVC (obtenue dans un mélangeur adapté aux produits à très haute viscosité) est formée de deux parties :

- une partie fixe, très majoritaire pondéralement et inerte vis-à-vis de la stabilité thermique, dont on se préoccupera pas ici,
- une partie de quantité variable, constituée de 5 ingrédients chimiques très spécifiques : HSE, stéarate de Ca, octoate de Zn, Rhodiastab 50, Sorbitol, tous plus ou moins favorables à la stabilité thermique.

L'objectif de recherche est donc de jouer sur les quantités de ces 5 ingrédients pour trouver un dosage permettant l'amélioration de la stabilité thermique.

Le test de stabilité thermique consiste à faire avancer à vitesse constante une bande de PVC dans un four infra-rouge spécial, puis à mesurer l'éventuel jaunissement (la réponse étudiée) de la bande PVC à la sortie du four. Ce jaunissement est mesuré avec précision avec un appareil colorimétrique : l'échelle continue du jaunissement va de 0 (absolument aucun jaunissement détectable) à 10, à ± 0.05 (incertitude de ± 5 centièmes d'échelle). D'autres réponses sont mesurées mais qu'on n'étudiera pas ici.

La matrice d'expériences

Une démarche par plan d'expériences est décidée, avec une contrainte imposée (raisons de coût, de délai de réponse à la demande du client, ...) de 33 expériences réalisables au maximum (4 expériences sont réalisables en une journée). Comme on cherche à quantifier assez finement les effets des 5 ingrédients, qu'on dénommera maintenant simplement par X_1, \dots, X_5 , un modèle avec effets linéaires, interactions doubles et effets quadratiques est postulé, soit :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^5 \beta_j x_j + \sum_{j=1}^4 \sum_{k>j}^5 \beta_{jk} x_j x_k + \sum_{j=1}^5 \beta_{jj} x_j^2 + \varepsilon \quad (10.69)$$

Compte tenu des éléments précédents un plan composite centré est choisi caractérisé par :

- une partie factorielle 2^{5-1} de 16 expériences,
- un polytope axial de $2 \times 5 = 10$ expériences, avec $\alpha = 2$, le plan est donc ivr car (10.64) est satisfaite,
- $N_0 = 6$ pour que le plan ivr soit de précision (presque) uniforme (voir tableau 10.11).

Sa matrice d'expériences D est donnée ci-dessous :

$$D = \begin{pmatrix} n^{\circ} \text{ exp} & X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 \\ 2 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 3 & -1 & +1 & -1 & -1 & -1 \\ 4 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ 5 & -1 & -1 & +1 & -1 & -1 \\ 6 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ 7 & -1 & +1 & +1 & -1 & +1 \\ 8 & +1 & +1 & +1 & -1 & -1 \\ 9 & -1 & -1 & -1 & +1 & -1 \\ 10 & +1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ 11 & -1 & +1 & -1 & +1 & +1 \\ 12 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 \\ 13 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 \\ 14 & +1 & -1 & +1 & +1 & -1 \\ 15 & -1 & +1 & +1 & +1 & -1 \\ 16 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ 17 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 18 & +2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 19 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 20 & 0 & +2 & 0 & 0 & 0 \\ 21 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 22 & 0 & 0 & +2 & 0 & 0 \\ 23 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 24 & 0 & 0 & 0 & +2 & 0 \\ 25 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 26 & 0 & 0 & 0 & 0 & +2 \\ 27 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 28 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 29 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 30 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 31 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 32 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Si on examine la structure de corrélation de la matrice du modèle correspondant à cette matrice d'expériences D , on observe que toutes les variables sont parfaitement orthogonales entre elles **sauf les termes quadratiques qui sont tous corrélés entre eux** :

	q1	q2	q3	q4	q5
q1	1.00000	-0.06667	-0.06667	-0.06667	-0.06667
q2	-0.06667	1.00000	-0.06667	-0.06667	-0.06667

q3	-0.06667	-0.06667	1.00000	-0.06667	-0.06667
q4	-0.06667	-0.06667	-0.06667	1.00000	-0.06667
q5	-0.06667	-0.06667	-0.06667	-0.06667	1.00000

Cependant, ils présentent un coefficient de corrélation suffisamment faible pour considérer que le plan ivr et de précision (presque) uniforme est également presque C -orthogonal.

Remarque :

On peut vérifier qu'avec 4 points au centre de plus, pour avoir $N_0 = 10$ (voir tableau 10.10), la (sous)-matrice de modèle devient, comme attendu à la suite de la lecture du tableau 10.10, parfaitement orthogonale :

	q1	q2	q3	q4	q5
q1	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
q2	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000
q3	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
q4	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000
q5	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000

Le plan ivr est alors C -orthogonal, il ne reste que les produits scalaires non nuls des termes quadratiques avec le vecteur x_0 . On ne peut pas annuler ceux-ci sous peine de perdre l'ivr. Un codage par polynômes orthogonaux orthogonalisera complètement le plan mais rendra le plan non ivr.

En résumé, le plan avec $N_0 = 6$ est un plan de bonne qualité, satisfaisant à la contrainte de 33 expériences au maximum, c'est celui qui a été réalisé au travers d'un plan d'expérimentation où les niveaux réels (grammes pour 100 grammes de partie fixe) suivants ont été affectés aux 5 facteurs :

- X_1 : -2 \rightarrow 0.20 ; -1 \rightarrow 0.35 ; 0 \rightarrow 0.50 ; +1 \rightarrow 0.65 ; +2 \rightarrow 0.80,
- X_2 : -2 \rightarrow 0.04 ; -1 \rightarrow 0.28 ; 0 \rightarrow 0.52 ; +1 \rightarrow 0.76 ; +2 \rightarrow 1.00,
- X_3 : -2 \rightarrow 1.50 ; -1 \rightarrow 2.62 ; 0 \rightarrow 3.75 ; +1 \rightarrow 4.87 ; +2 \rightarrow 6.00,
- X_4 : -2 \rightarrow 1.00 ; -1 \rightarrow 1.75 ; 0 \rightarrow 2.50 ; +1 \rightarrow 3.25 ; +2 \rightarrow 4.00,
- X_5 : -2 \rightarrow 0.20 ; -1 \rightarrow 0.35 ; 0 \rightarrow 0.50 ; +1 \rightarrow 0.65 ; +2 \rightarrow 0.80.

Bien entendu les 32 expériences ont été réalisées au laboratoire dans un ordre aléatoire, pour des raisons déjà données au chapitre 1.

Analyse des résultats

Les résultats de la réponse Y sont donnés au tableau 10.12.

n° exp	Y
1	2.20
2	2.00
3	2.60
4	2.50
5	2.47
6	2.67
7	0.33
8	0.87
9	2.80
10	2.67
11	3.13
12	1.37
13	2.50
14	0.80
15	1.53
16	0.83
17	2.73
18	2.43
19	2.40
20	1.00
21	2.97
22	2.43
23	2.93
24	1.20
25	1.43
26	3.17
27	2.80
28	2.73
29	2.80
30	2.77
31	2.80
32	2.80

Tableau 10.12. Résultats de la réponse Y.

Avec la proc reg de SAS on obtient la sortie suivante pour la réponse Y :

```
*****
The REG Procedure
Model: MODEL1
Dependent Variable: y
```

Number of Observations Read	32
Number of Observations Used	32

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	20	17.64596	0.88230	4.25	0.0087
Error	11	2.28413	0.20765		
Corrected Total	31	19.93009			

Root MSE	0.45568	R-Square	0.8854
Dependent Mean	2.20813	Adj R-Sq	0.6770
Coeff Var	20.63669		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	2.81716	0.18175	15.50	<.0001
x1	1	-0.18542	0.09302	-1.99	0.0716
x2	1	-0.32292	0.09302	-3.47	0.0052
x3	1	-0.34792	0.09302	-3.74	0.0033
x4	1	-0.14458	0.09302	-1.55	0.1484
x5	1	0.24458	0.09302	2.63	0.0234
x12	1	-0.01187	0.11392	-0.10	0.9189
x13	1	0.03312	0.11392	0.29	0.7766
x14	1	-0.29563	0.11392	-2.60	0.0249
x15	1	0.30438	0.11392	2.67	0.0217
x23	1	-0.30063	0.11392	-2.64	0.0230
x24	1	0.07063	0.11392	0.62	0.5479
x25	1	-0.09688	0.11392	-0.85	0.4132
x34	1	-0.08437	0.11392	-0.74	0.4744
x35	1	-0.06688	0.11392	-0.59	0.5690
x45	1	0.17938	0.11392	1.57	0.1437
q1	1	-0.08466	0.08414	-1.01	0.3359
q2	1	-0.30466	0.08414	-3.62	0.0040

q3	1	-0.05466	0.08414	-0.65	0.5293
q4	1	-0.21341	0.08414	-2.54	0.0277
q5	1	-0.15466	0.08414	-1.84	0.0932

Commentaire :

– Comme de nombreux termes ne sont pas significatifs on les supprime, et obtient finalement le modèle final suivant (en variables codées) :

The REG Procedure

Model: MODEL1

Dependent Variable: y

Number of Observations Read 32

Number of Observations Used 32

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	8	14.47627	1.80953	7.63	<.0001
Error	23	5.45382	0.23712		
Corrected Total	31	19.93009			

Root MSE	0.48695	R-Square	0.7264
Dependent Mean	2.20813	Adj R-Sq	0.6312
Coeff Var	22.05274		

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	2.56518	0.13014	19.71	<.0001
x2	1	-0.32292	0.09940	-3.25	0.0035
x3	1	-0.34792	0.09940	-3.50	0.0019
x5	1	0.24458	0.09940	2.46	0.0218

x14	1	-0.29563	0.12174	-2.43	0.0234
x15	1	0.30438	0.12174	2.50	0.0200
x23	1	-0.30063	0.12174	-2.47	0.0214
q2	1	-0.28366	0.08910	-3.18	0.0041
q4	1	-0.19241	0.08910	-2.16	0.0415

Commentaires :

- Le modèle est globalement très significatif car le F_{obs} vaut 7.63 associé à une p -value < 0.0001 .
- Le taux d'explication, qui présente une pertinence compte tenu de la p -value précédente, est de 73%.
- Tous les effets de ce modèle sont significatifs au risque 5%.

C'est ce modèle qui permet de faire de l'interprétation des effets des facteurs et de leurs interactions car les écart-types de leurs estimateurs sont très proches (variant de 0.089 à 0.122) , et les variables elles-mêmes dans le modèle, on l'a vu, sont presque orthogonales impliquant *in fine* des estimateurs quasiment indépendants.

En revanche, pour contruire un **modèle utilisable en pratique pour faire de la prédiction ou de l'optimisation**, il faut recalculer le modèle avec les variables exprimées sur les **échelles naturelles** en prenant soin de conserver les termes constitutifs des interactions. Par exemple, ici on ré-introduira x_1 et x_4 car les interactions x_1x_4 et x_1x_5 sont présentes. En effet, physiquement, il faut bien que les facteurs soient présents pour qu'ils puissent manifester une interaction ! On obtient ainsi le modèle suivant :

The REG Procedure

Model: MODEL1

Dependent Variable: y

Number of Observations Read 32
Number of Observations Used 32

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	10	17.00180	1.70018	12.19	<.0001
Error	21	2.92828	0.13944		

Corrected Total 31 19.93009

Root MSE 0.37342 R-Square 0.8531
 Dependent Mean 2.20813 Adj R-Sq 0.7831
 Coeff Var 16.91116

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	-3.53605	2.01643	-1.75	0.0941
x1	1	-1.43056	2.97754	-0.48	0.6359
x2	1	7.60303	1.81931	4.18	0.0004
x3	1	0.26996	0.19214	1.41	0.1746
x4	1	4.89289	0.95360	5.13	<.0001
x5	1	-5.13333	2.13588	-2.40	0.0256
x14	1	-2.62778	0.82982	-3.17	0.0046
x15	1	13.52778	4.14911	3.26	0.0037
x23	1	-1.11364	0.34576	-3.22	0.0041
q2	1	-4.59238	1.18970	-3.86	0.0009
q4	1	-0.70436	0.16197	-4.35	0.0003

Commentaire :

- Comme les variables sont exprimées en échelles naturelles, elles sont donc corrélées (voir plus haut), et il est alors normal de trouver certains tests de significativité incohérents avec les précédents. Par exemple x_3 n'apparaît plus significatif maintenant avec une p -value de 0.1746 contre 0.0019 quand les variables étaient codées.
- En revanche on va pouvoir utiliser ce modèle pour calculer des prédictions en tout endroit du domaine expérimental étudié, puisque l'on a supposé vrai le modèle postulé au départ dans tout ce domaine.

Finalement, le modèle en échelles naturelles s'écrit (en arrondissant les valeurs du listing précédent) pour la réponse Y , en fonction des facteurs X_j :

$$\hat{Y} = -3.54 - 1.43X_1 + 7.60X_2 + 0.27X_3 + 4.89X_4 - 5.13X_5 - 2.63X_1X_4 + 13.53X_1X_5 - 1.11X_2X_3 - 4.59X_2^2 - 0.71X_4^2$$

Pour répondre à l'objectif de recherche initial on peut maintenant, en se fixant une valeur cible pour \hat{Y} , déterminer les valeurs correspondantes pour les 5 facteurs : c'est un

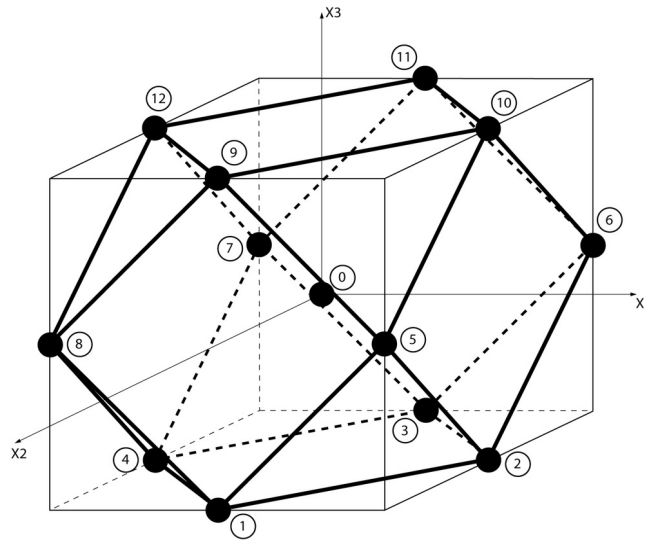


FIG. 10.7 – Cuboctaèdre centré sur le point $(0, 0, 0)$.

problème d'optimisation classique qu'il faut résoudre. On renvoie le lecteur à un cours d'optimisation. De façon plus prosaïque on peut aussi faire des graphiques d'isocontours par couple de facteurs (voir plus haut les isocontours pour le 3^2) mais il faut au préalable être en mesure de fixer les 3 autres facteurs à des valeurs pertinentes.

10.5 Le plan cuboctaèdre factoriel

10.5.1 Construction

Ce plan n'existe que pour 3 facteurs. Nous le décrivons ici car il est à la fois économique par rapport au plan 3^3 et d'une efficacité très grande par rapport au modèle suivant (où 10 paramètres sont à estimer) :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^3 \beta_j x_j + \sum_{j=1}^3 \beta_{jj} x_j^2 + \sum_{j=1}^2 \sum_{k=2}^3 \beta_{jk} x_j x_k + \varepsilon \quad (10.70)$$

Il est obtenu par l'intersection d'un cube d'arête a et d'un octaèdre d'arête $a\sqrt{2}$, tous les deux centrés sur le même point. On peut le décrire par le solide convexe en trois dimensions dont les 12 sommets sont définis par les coordonnées des milieux d'arête d'un cube (voir figure 10.7).

On donne au tableau 10.13 les coordonnées de ses 12 sommets.

n°	x_1	x_2	x_3
1	0	+1	-1
2	+1	0	-1
3	0	-1	-1
4	-1	0	-1
5	+1	+1	0
6	+1	-1	0
7	-1	-1	0
8	-1	+1	0
9	0	+1	+1
10	+1	0	+1
11	0	-1	+1
12	-1	0	+1

Tableau 10.13. Coordonnées du cuboctaèdre.

10.5.2 Propriétés

Pour utiliser le cuboctaèdre comme matrice d'expériences pour le modèle (10.70), conduisant à une matrice de modèle de bonne qualité, par exemple C -orthogonale, il faut réaliser $n_0 = 4$ expériences au centre $(0, 0, 0)$ du domaine expérimental. On donne en effet au tableau 10.14 l'évolution du coefficient de corrélation ρ entre les termes quadratiques en fonction du nombre d'expériences au centre, tableau qui montre la valeur optimale pour n_0 .

n_0	ρ
0	-0.50
1	-0.30
2	-0.17
3	-0.07
4	0.00
5	0.055
6	0.10
7	0.14
8	0.17
9	0.19
10	0.21

Tableau 10.14. Evolution du coefficient de corrélation entre les termes quadratiques en fonction du nombre d'expériences au centre.

Donc avec $12 + 4 = 16$ expériences seulement ce plan est particulièrement efficace, directement C -orthogonal sans codage particulier. Bien entendu, il n'est ni ivr, ni de précision uniforme.

10.5.3 Un exemple d'application réelle du cuboctaèdre factoriel

Énoncé du problème

On s'inspire ici d'un exemple industriel réel. Le contexte est l'optimisation d'un réacteur chimique pilote de synthèse d'acide cyanhydrique, et l'objectif est de déterminer le coût économique d'une augmentation du nombre de toiles de platine en relation avec le débit d'air et la température des gaz. La réponse est le taux de conversion de la réaction chimique et les trois facteurs contrôlables sont : X_1 , le nombre de toiles de platine (les 3 niveaux sont 20, 50 et 80), X_2 , la température des gaz (les 3 niveaux sont $100^\circ C$, $230^\circ C$ et $360^\circ C$), et X_3 , le débit d'air ($226 \text{ m}^3/h$, $310 \text{ m}^3/h$ et $400 \text{ m}^3/h$).

Le plan d'expérimentation

Le coût d'une seule expérience étant très élevé, et par ailleurs comme le chimiste soupçonne des effets quadratiques des facteurs, le choix d'un plan cuboctaèdre factoriel est fait. Un autre avantage pratique de ce plan est que seulement 3 niveaux différents sont à régler, sachant que changer de réglage est une opération délicate sur cet appareillage.

Les niveaux théoriques étant difficiles à maintenir, des petites variations sont apparues. On donne au tableau 10.15 les niveaux réels fixés et les résultats de la réponse (dans un ordre différent du tableau 10.13), et au tableau 10.16 les niveaux équivalents sur les échelles $-1,+1$.

n° exp	X_1	X_2	X_3	Y
1	50	228	313	64.5
2	50	226	317	64.7
3	50	101	228	62.0
4	50	100	398	60.0
5	50	231	315	64.5
6	50	360	399	67.5
7	50	355	229	67.5
8	50	230	316	63.5
9	20	230	400	58.3
10	20	230	228	62.0
11	20	100	315	56.5
12	20	360	314	64.3
13	80	100	311	62.0
14	80	230	396	63.0
15	80	230	226	62.5
16	80	360	311	67.0

Tableau 10.15. Niveaux réels (plan d'expérimentation) et résultats de la réponse.

num	x1	x2	x3
1	0	-0.01538	0.00000
2	0	-0.03077	0.04598
3	0	-0.99231	-0.97701
4	0	-1.00000	0.97701
5	0	0.00769	0.02299
6	0	1.00000	0.98851
7	0	0.96154	-0.96552
8	0	0.00000	0.03448
9	-1	0.00000	1.00000
10	-1	0.00000	-0.97701
11	-1	-1.00000	0.02299
12	-1	1.00000	0.01149
13	1	-1.00000	-0.02299
14	1	0.00000	0.95402
15	1	0.00000	-1.00000
16	1	1.00000	-0.02299

Tableau 10.16. Niveaux perturbés dans l'échelle -1,+1.

Cet exemple est très intéressant car il montre comment un plan d'expériences construit sur des bons critères, tel ici le cuboctaèdre C-orthogonal, est robuste vis-à-vis des variations (involontaires bien sûr) sur les valeurs des niveaux imposées par le plan en question. En effet, les corrélations entre les colonnes de la matrice de modèle, basée sur la matrice d'expériences du tableau 10.16, ne sont certes plus nulles mais restent très faibles, comme on peut le voir ci-après :

Pearson Correlation Coefficients, N = 16

	x1	x2	x3	x12	x13
x1	1.00000	0.00000	-0.01905	0.00000	-0.00620
x2	0.00000	1.00000	0.00516	0.00000	0.00196
x3	-0.01905	0.00516	1.00000	0.00207	-0.00791
x12	0.00000	0.00000	0.00207	1.00000	-0.00292
x13	-0.00620	0.00196	-0.00791	-0.00292	1.00000
x23	0.00210	0.01831	-0.00540	-0.02082	0.00020
q1	0.00000	0.00615	-0.01451	0.00000	-0.01900
q2	0.00000	-0.00969	0.00983	0.00000	-0.00169

q3	-0.00810	0.00084	-0.00798	0.00010	-0.03371
----	----------	---------	----------	---------	----------

Pearson Correlation Coefficients, N = 16

	x23	q1	q2	q3
x1	0.00210	0.00000	0.00000	-0.00810
x2	0.01831	0.00615	-0.00969	0.00084
x3	-0.00540	-0.01451	0.00983	-0.00798
x12	-0.02082	0.00000	0.00000	0.00010
x13	0.00020	-0.01900	-0.00169	-0.03371
x23	1.00000	-0.00813	0.02003	0.01996
q1	-0.00813	1.00000	0.01131	0.00574
q2	0.02003	0.01131	1.00000	-0.01740
q3	0.01996	0.00574	-0.01740	1.00000

On rappelle que sur les variables dans les échelles naturelles, à partir desquelles on construirait les interactions et les effets quadratiques, on obtient, pour des raisons purement numériques, des corrélations totalement rédhitoires comme le montre la sortie ci-après :

Pearson Correlation Coefficients, N = 16

	x1	x2	x3	x12	x13
x1	1.00000	0.00000	-0.01905	0.70062	0.89553
x2	0.00000	1.00000	0.00516	0.65629	0.00246
x3	-0.01905	0.00516	1.00000	-0.00938	0.39213
x12	0.70062	0.65629	-0.00938	1.00000	0.62914
x13	0.89553	0.00246	0.39213	0.62914	1.00000
x23	-0.00780	0.88831	0.43175	0.57679	0.17000
q1	0.97823	0.00128	-0.02165	0.68621	0.87411
q2	0.00000	0.98074	0.00699	0.64365	0.00315
q3	-0.01976	0.00523	0.99539	-0.00983	0.38904

Pearson Correlation Coefficients, N = 16

	x23	q1	q2	q3
x1	-0.00780	0.97823	0.00000	-0.01976

x2	0.88831	0.00128	0.98074	0.00523
x3	0.43175	-0.02165	0.00699	0.99539
x12	0.57679	0.68621	0.64365	-0.00983
x13	0.17000	0.87411	0.00315	0.38904
x23	1.00000	-0.00808	0.87269	0.43016
q1	-0.00808	1.00000	0.00171	-0.02221
q2	0.87269	0.00171	1.00000	0.00672
q3	0.43016	-0.02221	0.00672	1.00000

Analyse des résultats

A partir de la matrice d'expériences du type "presque" cuboactèdre factoriel du tableau 10.16, et après avoir construit les colonnes de la matrice de modèle comme usuellement, on obtient par régression la modélisation de la réponse dans la sortie ci-dessous (après sélection des effets significatifs) :

The REG Procedure

Model: MODEL1

Dependent Variable: y

Number of Observations Read 16

Number of Observations Used 16

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	5	135.15620	27.03124	38.28	<.0001
Error	10	7.06130	0.70613		
Corrected Total	15	142.21750			

Root MSE 0.84032 R-Square 0.9503

Dependent Mean 63.11250 Adj R-Sq 0.9255

Coeff Var 1.33146

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	64.31372	0.29715	216.44	<.0001
x1	1	1.66701	0.29716	5.61	0.0002
x2	1	3.24392	0.29879	10.86	<.0001
x3	1	-0.67400	0.30316	-2.22	0.0504
x13	1	1.06680	0.42753	2.50	0.0317
q1	1	-2.34670	0.42029	-5.58	0.0002

Enfin, en recalculant un modèle sur les échelles naturelles du tableau 10.15 on obtient un modèle qui permettra de faire facilement de la prédiction et de l'optimisation. Il est fourni dans la sortie suivante :

The REG Procedure

Model: MODEL1

Dependent Variable: y

Number of Observations Read 16
 Number of Observations Used 16

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Pr > F
Model	5	135.15620	27.03124	38.28	<.0001
Error	10	7.06130	0.70613		
Corrected Total	15	142.21750			

Root MSE 0.84032 R-Square 0.9503
 Dependent Mean 63.11250 Adj R-Sq 0.9255
 Coeff Var 1.33146

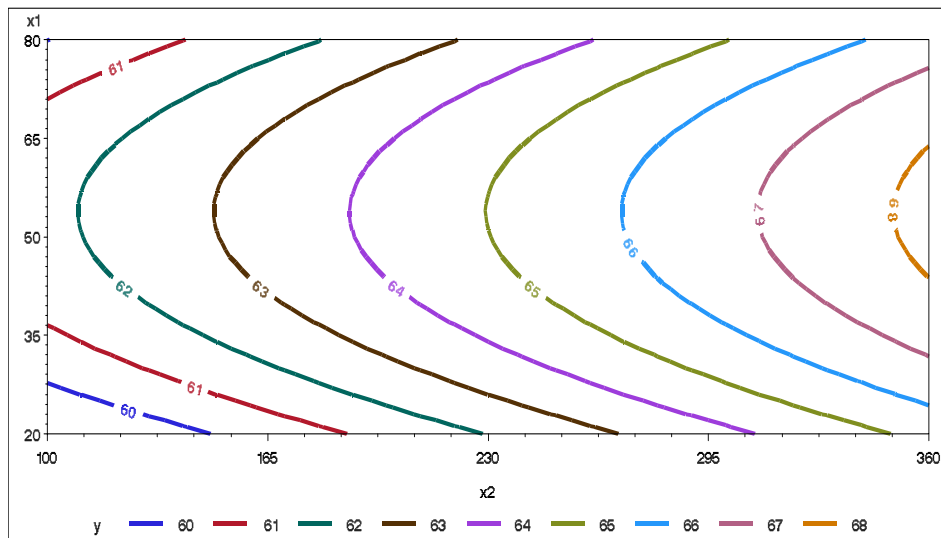


FIG. 10.8 – Isocontours pour $X_3 = 226$.

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	t Value	Pr > t
Intercept	1	58.09904	3.04899	19.06	<.0001
x1	1	0.18838	0.07066	2.67	0.0237
x2	1	0.02495	0.00230	10.86	<.0001
x3	1	-0.02818	0.00887	-3.18	0.0099
x13	1	0.00040873	0.00016381	2.50	0.0317
q1	1	-0.00261	0.00046699	-5.58	0.0002

Au vu de ce modèle estimé et comme on cherche à augmenter le taux de conversion les conclusions sont : on peut augmenter le nombre de toiles, l'influence du débit d'air est faible, et il y a avantage à travailler à haute température. Pour trouver des valeurs approximativement optimales pour ces 3 facteurs on peut s'aider des 3 graphiques d'isocontours des figures 10.8 à 10.10.

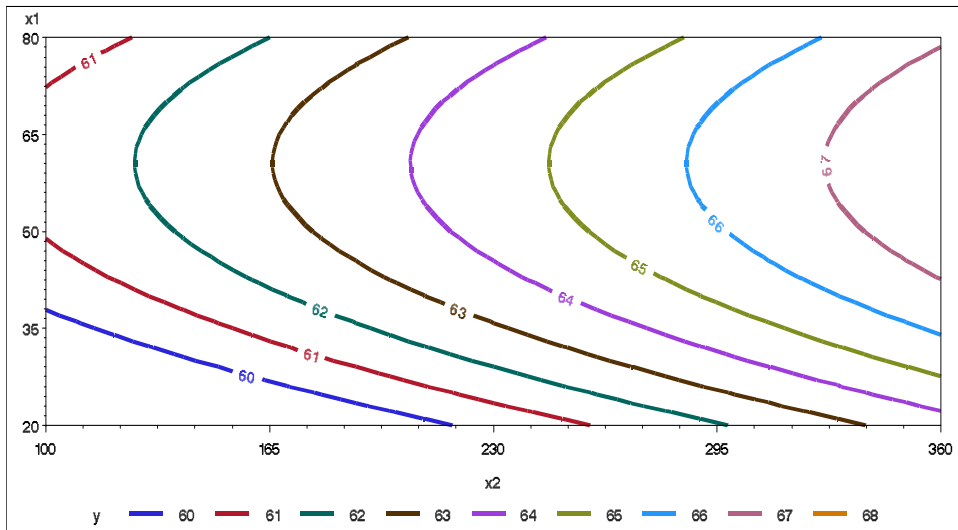


FIG. 10.9 – Isocontours pour $X_3 = 313$.

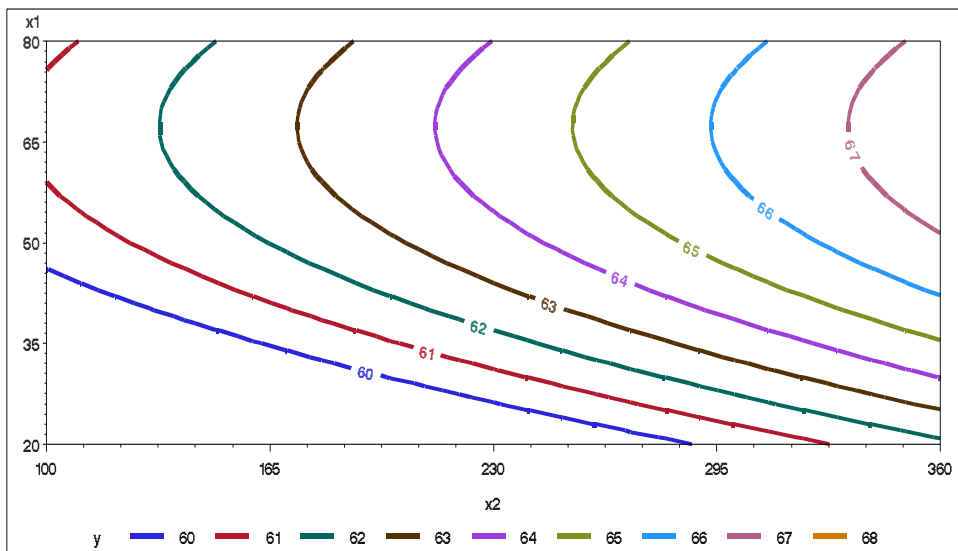


FIG. 10.10 – Isocontours pour $X_3 = 400$.

A l'examen de ces 3 figures on peut décider, en tenant compte du coût très élevé des toiles de platine, qu'on peut utiliser un nombre raisonnable de celles-ci (environ 50) si on se fixe une température élevée (vers 400 °C), mais plutôt avec un débit d'air faible inférieur à 300 m³/h. Dans ces conditions on peut s'attendre à un bon taux de conversion d'environ 67%.

10.6 Utilisation de la matrice d'alias

Cette matrice exposée à la fin du chapitre 3 peut aussi être utilisée avec profit dans le contexte des plans de surface de réponse. Examinons les deux exemples suivants.

10.6.1 Exemple 1

On fait des observations y_i pour les niveaux suivants du facteur explicatif x : -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, et on postule le modèle :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$$

Mais le vrai modèle est :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_{11} x^2 + \beta_{111} x^3 + \varepsilon$$

Exprimons les biais occasionnés. On a :

$$X_1 = \begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad X_2 = \begin{pmatrix} 9 & -27 \\ 4 & -8 \\ 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ 4 & 8 \\ 9 & 27 \end{pmatrix}$$

ce qui conduit à :

$$(X_1^T X_1)^{-1} = \begin{pmatrix} 1/7 & 0 \\ 0 & 1/28 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad X_1^T X_2 = \begin{pmatrix} 28 & 0 \\ 0 & 196 \end{pmatrix}$$

et ainsi :

$$A = \begin{pmatrix} 1/7 & 0 \\ 0 & 1/28 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 28 & 0 \\ 0 & 196 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 7 \end{pmatrix}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}_0) &= \beta_0 + 4\beta_{11} \\ E(\hat{\beta}_1) &= \beta_1 + 7\beta_{111} \end{aligned}$$

Si les valeurs de β_{11} et β_{111} ne sont pas négligeables par rapport à β_0 et β_1 alors les biais $4\beta_{11}$ et $7\beta_{111}$ peuvent être très importants.

10.6.2 Exemple 2

Examinons les biais quand le plan d'expériences est un carré gréco-latin 3×3 . Soit Le carré gréco-latin :

$$D = \begin{array}{|c|c|c|} \hline A\alpha & B\beta & C\gamma \\ \hline B\gamma & C\alpha & A\beta \\ \hline C\beta & A\gamma & B\alpha \\ \hline \end{array}$$

Une fois codé et développé il s'écrit :

$$D = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & -1 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & -1 \\ 0 & +1 & -1 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Soit le modèle postulé :

$$E(Y) = \beta_0 + \sum_{j=1}^4 \beta_j x_j + \sum_{i=1}^4 \beta_{jj} x_j^2$$

Soit le vrai modèle :

$$E(Y) = \beta_0 + \sum_{j=1}^4 \beta_j x_j + \sum_{i=1}^4 \beta_{jj} x_j^2 + \sum_{i \neq j}^6 \beta_{jk} x_j x_k$$

A partir de D et du modèle postulé on construit X_1 :

$$X_1 = \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 & x_4^2 \\ +1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & 0 & 0 & 0 & +1 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & -1 & 0 & +1 & 0 & +1 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & 0 & +1 & -1 & 0 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 & -1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & +1 & -1 & +1 & 0 & +1 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & +1 & 0 & -1 & +1 & +1 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & 0 & -1 & +1 & +1 & 0 & +1 \end{pmatrix}$$

A partir des termes complémentaires dans le vrai modèle on construit X_2 :

$$X_2 = \begin{pmatrix} x_{12} & x_{13} & x_{14} & x_{23} & x_{24} & x_{34} \\ +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & +1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & +1 & 0 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

ce qui conduit à la matrice d'alias A :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 & -1/2 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & -1/2 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & 0 & 0 & +1 \\ -1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 0 & +1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et aux espérances suivantes :

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}_0) &= \beta_0 - \beta_{23} - \beta_{24} - \beta_{34} \\ E(\hat{\beta}_1) &= \beta_1 - (\beta_{23} + \beta_{24} + \beta_{34}) / 2 \\ E(\hat{\beta}_2) &= \beta_2 - (\beta_{13} + \beta_{14}) / 2 \\ E(\hat{\beta}_3) &= \beta_3 - (\beta_{12} + \beta_{14}) / 2 \\ E(\hat{\beta}_4) &= \beta_4 - (\beta_{12} + \beta_{13}) / 2 \\ E(\hat{\beta}_{11}) &= \beta_{11} + (\beta_{23} + \beta_{24} + \beta_{34}) / 2 \\ E(\hat{\beta}_{22}) &= \beta_{22} + (\beta_{13} - \beta_{14}) / 2 + \beta_{34} \\ E(\hat{\beta}_{33}) &= \beta_{33} + (\beta_{14} - \beta_{12}) / 2 + \beta_{24} \\ E(\hat{\beta}_{44}) &= \beta_{44} + (\beta_{12} - \beta_{13}) / 2 + \beta_{23} \end{aligned}$$

On conviendra que, si les interactions doubles ne sont pas négligeables, les biais paramétriques sur les effets principaux estimés peuvent être très importants.

Chapitre 11

Introduction aux plans optimaux pour modèles linéaires

11.1 Introduction

Cette théorie de l'optimalité a été initialement proposée par **Jack Kiefer** à partir de la **fin des années 50**, puis augmentée ensuite par de nombreux autres chercheurs : Silvey, Fedorov, Atkinson, Wynn,... Les modèles postulables pour la réponse sont dans le **cadre du modèle linéaire général** : modèles de régression linéaire et modèles d'analyse de la variance. Historiquement les erreurs sont considérées comme **gaussiennes et indépendantes**, mais on peut étendre aujourd'hui la théorie à d'autres lois d'erreur.

La notion générale de **critères d'optimalité** apparaît, et les méthodes de construction des plans optimaux sont en général basées sur des **algorithmes itératifs** (pionniers : Wynn et Fedorov au début des années 70).

11.2 Quelques exemples de situations où les plans d'expériences usuels ne sont pas adaptés

11.2.1 Contraintes géométriques

Un modèle **polynomial** du deuxième degré usuel, à deux facteurs continus, est postulé :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \varepsilon \quad (11.1)$$

mais avec présence de contraintes sur le domaine expérimental comme le montre la figure 11.1.

Bien sûr, on peut retrouver des domaines expérimentaux usuels (cuboïdaux) sous les contraintes comme le montre la figure 11.2.

Cependant, la portion **non explorée** est grande et peut devenir gigantesque quand le domaine expérimental est de dimension élevée par exemple pour 6 ou 7 facteurs, nombres de facteurs rencontrés fréquemment dans la pratique.

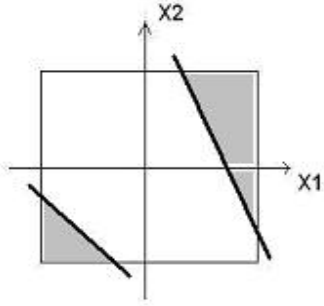


FIG. 11.1 – Exemple de deux contraintes géométriques sur un domaine expérimental de plan 2^2 .

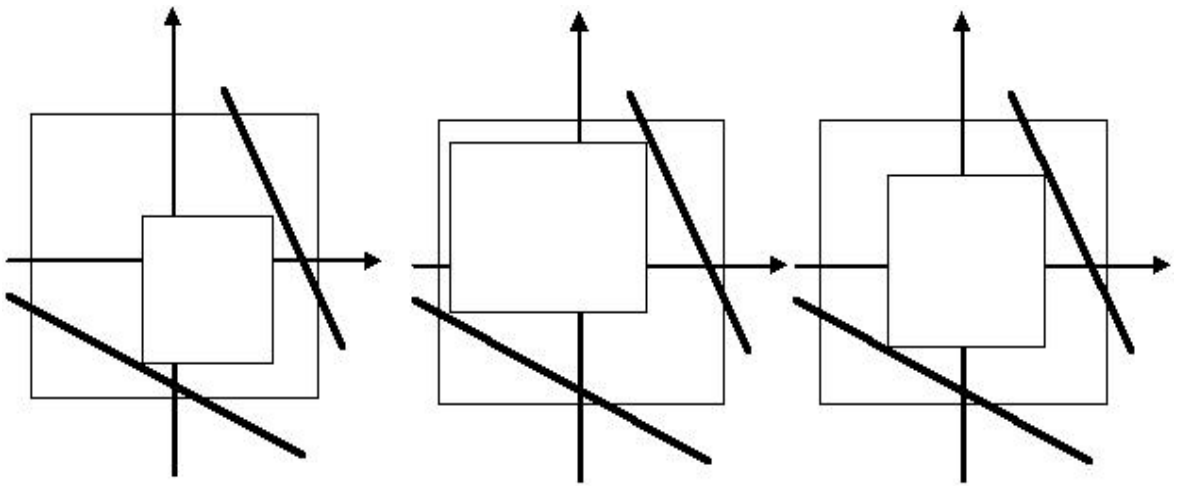


FIG. 11.2 – Exemples de redéfinition de sous-domaines expérimentaux possibles sous deux contraintes géométriques.

11.2.2 Autres contraintes

De façon non exhaustive, d'autres types de contraintes sont possibles :

- On peut postuler un modèle polynomial **particulier** :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^4 \beta_j x_j + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{14} x_1 x_4 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{33} x_3^2 + \varepsilon \quad (11.2)$$

- On souhaite construire un plan d'expériences pour **discriminer** "au mieux" deux ou plusieurs modèles polynomiaux en concurrence.
- Le domaine expérimental **n'est pas connexe**.
- Absence d'une fraction orthogonale (de plan factoriel) de **taille raisonnable** pour un problème donné.
- etc, ...

11.3 Définitions et notations

Rappelons quelques définitions et notations.

Le modèle

Reprenons des notations déjà vues. Soit le modèle :

$$Y = X_N \beta + \varepsilon \quad (11.3)$$

avec :

- Y : vecteur $N \times 1$ des N observations y_i .
- \mathbf{X}_N : matrice de modèle de dimensions $N \times P$, P étant le nombre de termes du modèle construits à partir des p facteurs étudiés ($P \geq p+1$); une ligne i de cette matrice est le vecteur $1 \times P$ vecteur fonction de régression $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T$ ($\in \mathcal{A} \subset \mathbb{R}^P$) au point de support \mathbf{x}_i ($\in \Omega \subset \mathbb{R}^p$), \mathcal{A} étant le domaine d'action et Ω étant le domaine expérimental.
- β : vecteur $P \times 1$ des P paramètres inconnus (à estimer).
- ε : vecteur $N \times 1$ des N erreurs ε_i (supposées indépendantes et gaussiennes), d'espérance $E(\varepsilon) = \mathbf{0}$ et de matrice de variance diagonale (inconnue)

$$\mathbf{V}(\varepsilon) = \text{diag} \{ \sigma_1^2, \dots, \sigma_i^2, \dots, \sigma_N^2 \} \quad (11.4)$$

les σ_i^2 étant égaux à σ^2 en cas de variance homoscédastique.

Les estimateurs :

- Moindres carrés ordinaires ($\sigma_i^2 = \sigma^2, \forall i$) :

$$\hat{\beta}_{MCO} = (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)^{-1} \mathbf{X}_N^T \mathbf{y} \quad (11.5)$$

$$\text{Var}(\hat{\beta}_{MCO}) = \sigma^2 (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)^{-1} \quad (11.6)$$

- Moindres carrés pondérés :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{MCP} = (\mathbf{X}_N^T \mathbf{W} \mathbf{X}_N)^{-1} \mathbf{X}_N^T \mathbf{W} \mathbf{y} \quad \text{avec } \mathbf{W} = \mathbf{V}^{-1} \quad (11.7)$$

$$\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{MCP}) = (\mathbf{X}_N^T \mathbf{W} \mathbf{X}_N)^{-1} \quad (11.8)$$

Matrices d'information :

- Matrice d'information de Fisher :

$$\mathbf{M}_F(\beta) = E_{y|\beta} \left\{ \frac{\partial \text{Log}(L(\mathbf{y}|\beta))}{\partial \beta} \frac{\partial \text{Log}(L(\mathbf{y}|\beta))}{\partial \beta^T} \right\} \quad (11.9)$$

- Si le modèle est linéaire en les paramètres, et si $\boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{V})$, alors $\mathbf{M}_F(\beta)$ devient la matrice d'information (pondérée) ne dépendant pas du paramètre β :

$$\mathbf{M}^W = \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X} = \mathbf{M}_F(\beta) = \mathbf{M}_F \quad (11.10)$$

- Matrice d'information moyenne par échantillon (ou normalisée), appelée aussi matrice (pondérée) des moments :

$$\mathbf{M}_N^W = N^{-1} \mathbf{X}_N^T \mathbf{W} \mathbf{X}_N$$

Normalisation

La normalisation est essentielle car elle permet la comparaison de matrices d'information de plans à nombres d'expériences différents. En effet, l'ajout d'une expérience à un plan de matrice de modèle \mathbf{X}_N ne peut qu'augmenter l'information :

$$\mathbf{X}_{N+1}^T \mathbf{X}_{N+1} = \mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N + \mathbf{f}(\mathbf{x}_{N+1}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_{N+1})^T > \mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N \quad (11.11)$$

11.4 Idées fondatrices de J. Kiefer

On peut résumer une partie du travail de recherche de J. Kiefer dans le domaine des plans d'expériences optimaux par les idées majeures suivantes :

- Le plan doit conduire à un modèle dont les estimateurs des paramètres ont une **variance minimale** et une structure de matrice de covariance **la plus diagonale possible**. Or l'inverse de la matrice d'information de Fisher forme pour un estimateur non biaisé une **borne inférieure** de sa matrice de variance (borne FDCR).
- Un critère d'optimalité est une fonction **scalaire, convexe**, de la matrice de variance des estimateurs, ou d'une de ses fonctions, ou plus généralement de l'inverse de la matrice d'information de Fisher : **c'est une fonction de perte à minimiser**
- Le critère d'optimalité le plus connu est le **critère de D-optimalité** qui correspond à la **minimisation du déterminant de la matrice de variance** (outils théoriques pour la minimisation : analyse convexe et calcul différentiel) ou la maximisation de la matrice d'information.

- Un théorème majeur : le **théorème d'équivalence** (Kiefer & Wolfowitz, 1960) entre la D -optimalité et la G -optimalité.
- Un point de support expérimental \mathbf{x}_i pour une expérience est un point dans $\Omega \subset$ dans un espace de Hilbert et à ce point est attachée une **mesure de probabilité** $\pi(\mathbf{x}_i)$. Le plan d'expériences devient une structure formelle mathématique constitué d'un **support continu** χ associé à une **densité de probabilité** π définie sur ce support, on parle de **plan à mesure continue** π (design measure) : ce n'est pas un plan physiquement réalisable.

Convexité

Soit \mathcal{D} l'ensemble de toutes les mesures π possibles sur χ . Cet ensemble est **convexe** :

$$\pi_1, \pi_2 \in \mathcal{D} \implies \pi = (1 - \alpha)\pi_1 + \alpha\pi_2 \in \mathcal{D} \quad , \quad \forall 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (11.12)$$

La matrice d'information de Fisher de la mesure π , normalisée par construction, s'écrit :

$$\mathbf{M}_F(\pi) = \int_{\chi} \lambda(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})^T \pi(d\mathbf{x}) \quad (11.13)$$

L'ensemble des matrices d'information présente aussi la **propriété de convexité** :

$$(1 - \alpha)\mathbf{M}_F(\pi_1) + \alpha\mathbf{M}_F(\pi_2) = \mathbf{M}_F[(1 - \alpha)\pi_1 + \alpha\pi_2] \quad (11.14)$$

Exemple :

Soit la régression simple $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$, avec variance d'erreur constante :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})^T = \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & x^2 \end{pmatrix}$$

On alors :

$$\mathbf{M}_F(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & \int x\pi(d\mathbf{x}) \\ \int x\pi(d\mathbf{x}) & \int x^2\pi(d\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \pi_1 \\ \pi_1 & \pi_2 \end{pmatrix}$$

où π_1 et π_2 sont les moments d'ordre 1 et 2 de la mesure π .

11.5 Types de plans

11.5.1 Plan approximatif

Le plan dit approximatif est une **approximation** du plan continu obtenu par **discrétisation** de la mesure π .

On le note :

$$\xi_{N_S}^\pi = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1 & , \dots , & \mathbf{x}_i & , \dots , & \mathbf{x}_{N_S} \\ \lambda(\mathbf{x}_1) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_i) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_{N_S}) \\ \pi(\mathbf{x}_1) & , \dots , & \pi(\mathbf{x}_i) & , \dots , & \pi(\mathbf{x}_{N_S}) \end{array} \right\} \quad (11.15)$$

avec $\pi(\mathbf{x}_i)$ valeur de la mesure π au point \mathbf{x}_i .

En pratique, on choisit a priori N_s **très grand**, une densité **uniforme** ($1/N_s$ en chaque point de support), et $\lambda(\mathbf{x}_i) = 1/\sigma_i^2$.

La matrice d'information de Fisher associée à $\xi_{N_s}^\pi$ (normalisée par construction) s'écrit :

$$\mathbf{M}_F(\xi_{N_s}^\pi) = \sum_{i=1}^{N_s} \lambda(\mathbf{x}_i) \pi(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \quad (11.16)$$

Un résultat important est que pour toute mesure $\pi \in \mathcal{D}$ il existe un **support fini** tel que $\mathbf{M}_F(\pi)$ se décompose sous la forme suivante :

$$\mathbf{M}_F(\pi) = \sum_{i=1}^Q \lambda(\mathbf{x}_i) \pi(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \quad \text{avec } Q \leq (P(P+1)/2) + 1 \quad (11.17)$$

11.5.2 Le plan discret-exact (exact design)

Le plan discret-exact est un plan **physiquement réalisable**.

On le note :

$$\xi_{N, N_s, \{r\}} = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1 & , \dots , & \mathbf{x}_i & , \dots , & \mathbf{x}_{N_s} \\ \lambda(\mathbf{x}_1) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_i) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_{N_s}) \\ r_1 & , \dots , & r_i & , \dots , & r_{N_s} \end{array} \right\} \quad (11.18)$$

avec :

- N_s : nombre de points de support correspondant à N_s conditions expérimentales distinctes (ou traitements)
- N : nombre total d'expériences du plan,
- r_i : nombre de répétitions de l'expérience i au point-support \mathbf{x}_i , $\sum_{i=1}^{N_s} r_i = N$, $r_i \neq 0, \forall i$,
- $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N_s})^T = \mathcal{S}_{N_s}$ support de taille N_s du plan,
- $\lambda(\mathbf{x}_i)$: valeur de la fonction de pondération en \mathbf{x}_i .

Les observations étant supposées indépendantes, la matrice d'information de Fisher d'un plan discret-exact $\xi_{N, N_s, \{r\}}$ s'écrit comme une **somme pondérée** de N_s matrices $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T$ de rang 1 avec $\lambda(\mathbf{x}_i)$ égal ou proportionnel à $1/\sigma_i^2$:

$$\mathbf{M}_F(\xi_{N, N_s, \{r\}}) = \sum_{i=1}^{N_s} \lambda(\mathbf{x}_i) \frac{r_i}{N} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \quad (11.19)$$

Si $r_i = 1, \forall i$, alors la matrice d'information de Fisher correspondante est :

$$\mathbf{M}_F(\xi_{N, N, \{1, \dots, 1\}}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \quad (11.20)$$

11.6 Plans D-optimaux

11.6.1 Définitions

Dans le cas continu une mesure π qui est D -optimale est notée π_D , et est définie comme :

$$\pi_D = Arg \left\{ \max_{\pi \in \mathcal{D}} \left[\det \left(\int_{\mathcal{X}} \lambda(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \pi(d\mathbf{x}) \right) \right] \right\} \quad (11.21)$$

Dans le cas discret-exact un plan D -optimal est défini comme :

$$\xi_{N, N_S, \{r\}}^D = Arg \left\{ \max_{\xi_{N, N_S, \{r\}} \in \mathcal{X}} \left[\det (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N) \right] \right\} \quad (11.22)$$

ou de façon équivalente :

$$\xi_{N, N_S, \{r\}}^D = Arg \left\{ \min_{\xi_{N, N_S, \{r\}} \in \mathcal{X}} \left[\det (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)^{-1} \right] \right\} \quad (11.23)$$

D -efficacité d'un plan discret-exact

$$D - \text{efficacité} = 100 \times \left[\frac{\det (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N) / N^P}{\det (\mathbf{M}_F (\pi_D))} \right]^{1/P} \quad (11.24)$$

Exemple

Soit le modèle $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$ et les 2 plans possibles (avec $\lambda(\cdot) \equiv 1$) :

$$\xi_{3,3,\{r\}}^1 = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & 0 & +1 \\ 1 & 1 & 1 \end{array} \right\} \quad \xi_{3,2,\{r\}}^2 = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & -1 & +1 \\ 1 & 1 & 1 \end{array} \right\}$$

On trouve :

$$\det (\mathbf{X}_3^T \mathbf{X}_3) = 6 \text{ pour } \xi_{3,3,\{r\}}^1 \text{ et } \det (\mathbf{X}_3^T \mathbf{X}_3) = 8 \text{ pour } \xi_{3,2,\{r\}}^2$$

$$\Rightarrow \text{DONC} : \xi_{3,2,\{r\}}^2 \text{ est D-meilleur.}$$

11.7 Autres critères d'optimalité

11.7.1 Critère de D_A -optimalité

On s'intéresse à des **combinaisons linéaires particulières** des paramètres du modèle. Si \mathbf{A} est la matrice ($s \times P$), de rang $s < P$, des coefficients de ces combinaisons la mesure D_A -optimale est définie par :

$$\pi_{D_A} = Arg \left\{ \min_{\pi \in \mathcal{D}} \det [\mathbf{A} \mathbf{M}_F^{-1}(\pi) \mathbf{A}^T] \right\} \quad (11.25)$$

Exemple : tester in fine $\beta_1 - 2\beta_2 = 0$: l'effet du médicament 1 est-il équivalent au double de l'effet du médicament 2 ?

$$\implies A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \end{pmatrix}$$

11.7.2 Critère de D_S -optimalité

Soit s paramètres d'intérêt majeur parmi les P , les $r = P - s$ sont par exemple des paramètres de nuisance. Un critère d'optimalité peut se construire par restriction au sous-ensemble des s paramètres.

Posons β_s le vecteur $(s \times 1)$ des s premiers paramètres et β_r le vecteur $(r \times 1)$ des r paramètres suivants. Le vecteur β est donc composé des deux vecteurs juxtaposés β_s et β_r :

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_s \\ \beta_r \end{pmatrix} \quad (11.26)$$

En conséquence, la matrice d'information de Fisher se **partitionne** en 4 blocs :

$$\mathbf{M}_F(\pi) = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_F^{[1,1]}(\pi)_{(s \times s)} & \mathbf{M}_F^{[1,2]}(\pi)_{(s \times r)} \\ \mathbf{M}_F^{[2,1]}(\pi)_{(r \times s)} & \mathbf{M}_F^{[2,2]}(\pi)_{(r \times r)} \end{bmatrix} \quad (11.27)$$

Un lemme matriciel bien connu sur l'inverse d'une matrice partitionnée nous conduit à :

$$\mathbf{M}_F^{-1}(\pi) = \begin{bmatrix} [\mathbf{M}_F^{[1,1]}(\pi)]_{(s \times s)}^{(-1)} & [\mathbf{M}_F^{[1,2]}(\pi)]_{(s \times r)}^{(-1)} \\ [\mathbf{M}_F^{[2,1]}(\pi)]_{(r \times s)}^{(-1)} & [\mathbf{M}_F^{[2,2]}(\pi)]_{(r \times r)}^{(-1)} \end{bmatrix} \quad (11.28)$$

avec :

$$[\mathbf{M}_F^{[1,1]}(\pi)]^{(-1)} = \left[\mathbf{M}_F^{[1,1]}(\pi) - \mathbf{M}_F^{[1,2]}(\pi) (\mathbf{M}_F^{[2,2]}(\pi))^{-1} (\mathbf{M}_F^{[1,2]}(\pi))^T \right]^{-1} \quad (11.29)$$

Une mesure est D_s -optimale si elle minimise $\det \left\{ [\mathbf{M}_F^{[1,1]}(\pi)]^{(-1)} \right\}$:

$$\pi_{D_s} = \text{Arg} \left\{ \min_{\pi \in \mathcal{D}} \left\{ \det \left\{ [\mathbf{M}_F^{[1,1]}(\pi)]^{(-1)} \right\} \right\} \right\} \quad (11.30)$$

11.7.3 Critère de A -optimalité

$$\pi_A = \text{Arg} \left\{ \min_{\pi \in \mathcal{D}} \text{Trace} \left[\mathbf{M}_F(\pi)^{-1} \right] \right\} \quad (11.31)$$

11.7.4 Critère de E -optimalité

$$\pi_E = \text{Arg} \left\{ \min_{\pi \in \mathcal{D}} \tau_{\max} \left[\mathbf{M}_F(\pi)^{-1} \right] \right\} \quad (11.32)$$

avec $\tau_{\max}(\mathbf{M}_F^{-1}(\pi))$ valeur propre maximale de $\mathbf{M}_F^{-1}(\pi)$ parmi ses P valeurs propres.

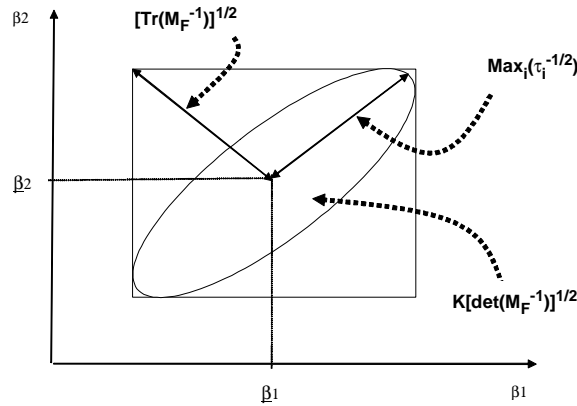


FIG. 11.3 – Ellipse de confiance avec mise en évidence de la pertinence des trois critères de D-, A- et E-optimalités.

11.8 Lien avec l'ellipsoïde de confiance

La formule de l'ellipsoïde de confiance, pour un modèle de régression linéaire et un plan discret-exact $\xi_{N,N_S,\{r\}}$, est :

$$(\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{M}_F(\xi_{N,N_S,\{r\}}) (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq \rho^2 \quad (11.33)$$

avec :

- $\rho^2 = P \hat{\sigma}_\nu^2 \mathcal{F}(P, \nu; \alpha)$ si la vraie variance σ^2 est inconnue, et $\hat{\sigma}_\nu^2$ en est une estimation indépendante à ν ddl (souvent $\nu = N - P$ parce que l'on prend pour $\hat{\sigma}_\nu^2$ la variance **résiduelle** de la régression obtenue avec les N résultats du plan d'expériences),
- $\rho^2 = \sigma^2 \chi^2(P; \alpha)$ sinon.

La figure 11.3 est très illustrative : on observe en effet que les critères D, A et E sont liés respectivement au **volume** de cet ellipsoïde, à sa **forme** (aplatissement) et à son **orientation**.

11.9 Critère de G-optimalité

Plutôt que s'intéresser directement à la précision des P estimateurs $\hat{\beta}_j$, on peut souhaiter un modèle avec lequel les **prédictions elles-mêmes seront les plus précises possible**. Le critère de G -optimalité (G comme "general variance") vise à **minimiser le maximum de la variance de la réponse prédite**.

Si on appelle $d(\mathbf{x}, \pi) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \mathbf{M}_F^{-1}(\pi) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ la **fonction de variance**, une mesure π est G -optimale si :

$$\pi_G = \text{Arg} \left\{ \min_{\pi \in \mathcal{D}} \left\{ \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \pi) \right\} \right\} = \pi_D \text{ (par le GET, 1960)} \quad (11.34)$$

Pour un plan discret-exact à N expériences sur N_S (N et N_S fixés a priori), à variance des erreurs constante et $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$:

$$\text{var}(\hat{y}_{\mathbf{x}}) = \sigma^2 \mathbf{f}(\mathbf{x})^T (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sigma^2 d(\mathbf{x}) \quad (11.35)$$

$$\xi_{N, N_S, \{r^*\}}^G = \text{Arg} \left\{ \min_{\{r\}} \left\{ \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}) \right\} \right\} \neq \xi_{N, N_S, \{r^*\}}^D \text{ (en général)} \quad (11.36)$$

Exemple :

Pour $\xi_{3,3,\{r\}}^1$ (à σ^2 près) on a :

$$\text{var}(\hat{y}_{\mathbf{x}}) = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}x^2$$

et pour $\xi_{3,2,\{r\}}^2$ on a :

$$\text{var}(\hat{y}_{\mathbf{x}}) = \frac{1}{8}(3 + 2x + 3x^2)$$

Aucun de ces deux plans n'est G -meilleur que l'autre pour **toutes** les valeurs de $x \in [-1, +1]$. Mais, pour $\xi_{3,3,\{r\}}^1$ on a :

$$\sup\{\text{var}(\hat{y}_{\mathbf{x}})\} = \frac{1}{3} + \frac{1}{2} = \frac{5}{6}$$

et pour $\xi_{3,2,\{r\}}^2$ on a :

$$\sup\{\text{var}(\hat{y}_{\mathbf{x}})\} = \frac{1}{8}(3 + 2 + 3) = 1$$

Donc le plan $\xi_{3,3,\{1,1,1\}}^1$ est G -meilleur que le plan $\xi_{3,2,\{2,1\}}^2$.

Un plan discret-exact D -optimal n'est pas forcément G -optimal sur le même domaine, alors qu'il y a **équivalence** dans le cas continu.

11.10 Equivalence entre G - et D -optimalités continues

Cette équivalence, dans le **cas continu uniquement**, s'appuie sur un théorème fondamental (le GET de Kiefer et Wolfowitz, 1960), énoncé pour un modèle linéaire, étendu par Whittle (1973, [35]) à tout critère différentiable et convexe.

Théorème d'équivalence générale (TEG, GET en anglais) de Kiefer et Wolfowitz (1960) :

- Les trois propositions suivantes sont **équivalentes**, $\forall \lambda(\cdot) > 0$:
 - (a) la mesure π_D maximise (globalement) $\det \mathbf{M}_F(\pi)$, π_D est alors D -optimale,
 - (b) la mesure π_D minimise (globalement) $\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \pi)]$, π_D est alors G -optimale,
 - (c) $\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} [\lambda(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}, \pi_D)] = P$.
- Les matrices d'information de tous les plans continus satisfaisant à ces trois propositions **coïncident**. Toute combinaison linéaire de mesures continues satisfaisant aux trois propositions satisfait aussi à ces 3 propositions.

11.10.1 Exemple : Plan G-optimal pour la régression simple

Soit le modèle :

$$E(y_x) = \beta_0 + \beta_1 x \quad , \quad x \in [-1, +1] \quad , \quad \lambda(x) \equiv 1$$

On souhaite réaliser N (N pair) expériences (c'est-à-dire recueillir N observations). Dans ce but on propose le plan discret-exact $\xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}$ constitué de $N/2$ expériences au point-support -1 (r répétitions) et $N/2$ expériences au point-support $+1$ (r répétitions). Ce plan $\xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}$ est D - et G -optimal, notons-le : $\xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}^{D,G}$.

En effet, à partir de

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_F &= \sum_{i=1}^2 \frac{r}{N} \mathbf{f}(x_i) \mathbf{f}(x_i)^T \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & +1 \\ +1 & +1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & +1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

On obtient la fonction de variance au point-support -1 :

$$d(-1, \xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}^{D,G}) = \begin{pmatrix} +1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \end{pmatrix} = 2$$

et au point-support $+1$:

$$d(+1, \xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}^{D,G}) = \begin{pmatrix} +1 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \end{pmatrix} = 2$$

Donc :

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} \left\{ d(x, \xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}^{D,G}) \right\} = \max_{-1 \leq x \leq 1} (1 + x^2) = 2 = P$$

En chaque point-support du plan $\xi_{N,2,\{N/2,N/2\}}^{D,G}$ la fonction de variance vaut P .

11.10.2 Exemple : Plan G -optimal pour la régression quadratique

Soit le modèle :

$$E(y_x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_{11} x^2 \quad , \quad x \in [-1, +1] \quad , \quad \lambda(x) \equiv 1$$

Soit le plan discret (les r_i sont remplacés par r_i/N) :

$$\boldsymbol{\xi}_{N,3} = \left\{ \begin{array}{ccc} -1 & 0 & +1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{array} \right\}$$

Il est D - et G -optimal car à partir de :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_F &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \end{pmatrix} + \frac{1}{3} \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &+ \frac{1}{3} \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

On obtient :

$$\mathbf{M}_F^{-1} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} +4 & 0 & -4 \\ 0 & +2 & 0 \\ -4 & 0 & +6 \end{pmatrix}$$

d'où :

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} \left\{ d(x, \boldsymbol{\xi}_{N,3}^{D,G}) \right\} = \max_{-1 \leq x \leq 1} \left\{ \frac{3}{4} (4 - 6x^2 + 6x^4) \right\} = 3 = P$$

Le graphe de la fonction de variance est donné en figure 11.4 :

En -1, 0, 1 la fonction vaut 3 (= P).

Conséquences importantes

- Les mesures continues D - et G -optimales sont **équivalentes**.
- Lors de la construction de plans optimaux **discrets-exacts** on peut utiliser de manière interchangeable les propriétés des mesures ce qui permet, parfois, de trouver des plans par des méthodes plus simples.
- On peut vérifier facilement la D -optimalité éventuelle d'un plan quelconque discret-exact en calculant la fonction de variance d_i en chaque point du support : si la fonction $\lambda(\mathbf{x})d(\mathbf{x}, \pi)$ vaut P en chacun de ces points, alors le plan est D -optimal,

Corollaire du TEG : Aux points de support d'un plan D -optimal de mesure π_D , la fonction de variance atteint sa valeur maximale P .

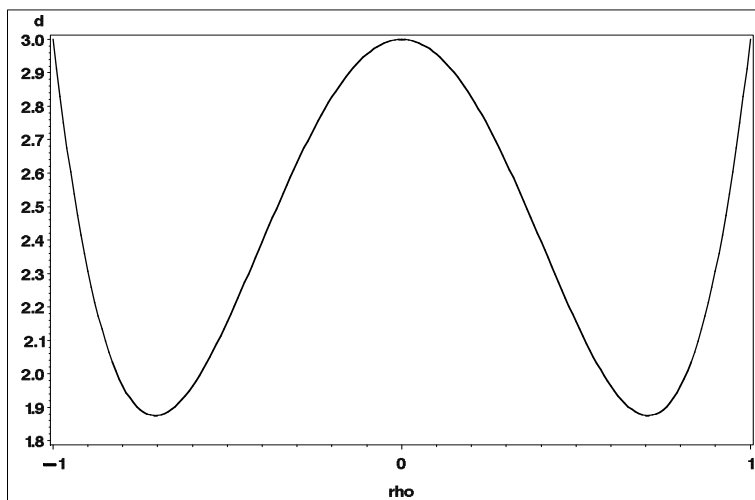


FIG. 11.4 – Graphe de fonction de variance pour l'exemple de la régression quadratique.

11.11 Méthodes de construction des plans approximatifs D-optimaux

11.11.1 Généralités

Une méthode simple serait la **recherche directe** du maximum de la fonction $\det[\mathbf{M}_F(\pi)]$ (ou de son log) sous la contrainte que les masses $m_i = \pi(\mathbf{x}^i)$ en chacun des points du support soient positives et que leur somme soit égale à 1. **Comme l'ensemble des matrices d'information est convexe et que la fonction $\log[\det(M_F(\pi))]$, définie sur cet ensemble, est concave, alors son maximum est unique (global).**

Mais le nombre de points de support à mesure non nulle correspondant à ce maximum, N_s^* , est **inconnu**, et par conséquent les méthodes numériques classiques ne sont pas adaptées : des algorithmes spécifiques (Fedorov, 1972, [18] ou Wynn, 1970, [37]) ont été proposés.

L'idée de base de ces algorithmes est d'améliorer un plan approximatif donné, approximant une mesure continue, **en chargeant les points de support où la fonction de variance est la plus grande** dans le but de faire tendre le plan approximatif de départ vers un plan approximatif D -optimal (et G -optimal).

Pour définir un plan approximatif quelconque il faut donc d'abord décrire finement le domaine expérimental Ω par un **grand ensemble discret** (de cardinal N_s) de points de support \mathbf{x}_i , telle une grille. Puis, on attribue une mesure (masse) à chacun de ces points de support \mathbf{x}_i , généralement égale à $1/N_s$. Eventuellement, une pondération $\lambda(\mathbf{x}_i)$ leur est également associée. Le support approximatif D -optimal final est obtenu quand la fonction $\log[\det(M_F(\pi))]$ a atteint son **maximum sous la contrainte** que les masses de probabilité somment à 1 sur le support.

L'intérêt majeur de la connaissance de ce maximum est de permettre de construire une D -**efficacité** de tout plan discret physiquement réalisable.

11.11.2 Algorithmes de Wynn (1970) et Fedorov (1972)

On améliore un support approximatif (grille très fine de N_S noeuds attachés à des masses $1/N_S$), approximant le support continu d'une mesure uniforme, en chargeant les points de support où la **fonction de variance est la plus grande**.

Détaillons le principe commun à ces deux algorithmes qui ne diffèrent que par le **choix de la suite** $\{\alpha_t\}$.

A l'itération 1, soit une mesure $\pi^{[1]}$ supportée par N_S points.

→ La masse en chacun des points est donc $\pi^{[1]}(\mathbf{x}_i) = m_i = \frac{1}{N_S}, \forall i \in [1, \dots, N_S]$.

→ Le plan d'expériences approximatif se note :

$$\xi_{N_S}^{[1]} = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1 & , \dots , & \mathbf{x}_i & , \dots , & \mathbf{x}_{N_S} \\ \lambda(\mathbf{x}_1) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_i) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_{N_S}) \\ \frac{1}{N_S} & , \dots , & \frac{1}{N_S} & , \dots , & \frac{1}{N_S} \end{array} \right\} \quad (11.37)$$

A l'itération $t + 1$, le plan s'exprime comme :

$$\xi_{N_S}^{[t+1]} = (1 - \alpha_t)\xi_{N_S}^{[t]} + \alpha_t\xi_i^{[t]} \quad (11.38)$$

avec :

$$\xi_i^{[t]} = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1 & , \dots , & \mathbf{x}_i & , \dots , & \mathbf{x}_{N_S} \\ 0 & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_i) & , \dots , & 0 \\ 0 & , \dots , & 1 & , \dots , & 0 \end{array} \right\} \quad (11.39)$$

et donc $\xi_{N_S}^{[t+1]}$ s'écrit :

$$\xi_{N_S}^{[t+1]} = \left\{ \begin{array}{cccc} \mathbf{x}_1 & , \dots , & \mathbf{x}_i & , \dots , & \mathbf{x}_{N_S} \\ \lambda(\mathbf{x}_1) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_i) & , \dots , & \lambda(\mathbf{x}_{N_S}) \\ \frac{1-\alpha_t}{N_S} & , \dots , & \frac{1-\alpha_t}{N_S} + \alpha_t & , \dots , & \frac{1-\alpha_t}{N_S} \end{array} \right\} \quad (11.40)$$

et $0 < \alpha_t < 1$

En termes de mesure on peut écrire :

$$\pi^{[t+1]} = (1 - \alpha_t)\pi^{[t]} + \alpha_t\pi_{1,i}^{[t]} \quad (11.41)$$

où $\pi_{1,i}^{[t]}$ est la mesure qui place la masse 1 au point-support x_i et la masse 0 aux autres points, c'est-à-dire une information α_t est ajoutée au point-support x_i tandis que, mécaniquement, une information $\frac{\alpha_t}{N_S}$ est ôtée à chacun des N_S point-supports : il y a bien **conservation de la masse totale** puisque :

$$1 = \alpha_t + \left(\frac{1 - \alpha_t}{N_S}\right)N_S$$

En termes de matrices d'information on peut écrire :

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_F(\pi^{[t+1]}) &= (1 - \alpha_t)\mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) + \alpha_t\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \\ &= (1 - \alpha_t)\left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T\right]\end{aligned}\quad (11.42)$$

Il nous faut maintenant passer à une expression du déterminant de $\mathbf{M}_F(\pi^{[t+1]})$ puisque c'est celui-ci que l'on cherche à **maximiser** (ou son log).

Pour ce faire rappelons le lemme matriciel suivant.

Lemme :

Soit la matrice carrée \mathbf{B} par blocs \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{R} et \mathbf{S} où \mathbf{P} et \mathbf{S} sont des matrices carrées **régulières** :

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{Q} \\ \mathbf{R} & \mathbf{S} \end{pmatrix}$$

Alors :

$$\det \mathbf{B} = \det \mathbf{P} \times \det(\mathbf{S} - \mathbf{R}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Q}) = \det \mathbf{S} \times \det(\mathbf{P} - \mathbf{Q}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{R}).$$

Appliquons ce lemme en posant :

$$\mathbf{P} = \mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) \quad , \quad \mathbf{Q} = \left[\frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\right]^{\frac{1}{2}}\mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \quad , \quad \mathbf{R} = \mathbf{Q}^T \quad , \quad \mathbf{S} = -1$$

on a :

$$\begin{aligned}& \det \begin{pmatrix} \mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) & \left[\frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\right]^{\frac{1}{2}}\mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \\ \left[\frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\right]^{\frac{1}{2}}\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T & -1 \end{pmatrix} \\ &= \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]})\right] \times \left[-1 - \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{M}_F^{-1}(\pi^{[t]})\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\right] \\ &= -\det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]})\right] \times \left[1 + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{M}_F^{-1}(\pi^{[t]})\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\right]\end{aligned}$$

Mais par le même lemme on a aussi :

$$\begin{aligned}& \det \begin{pmatrix} \mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) & \left[\frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\right]^{\frac{1}{2}}\mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \\ \left[\frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\right]^{\frac{1}{2}}\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T & -1 \end{pmatrix} \\ &= -1 \times \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T\right]\end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned}& \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T\right] \\ &= \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]})\right] \times \left[1 + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)}\lambda(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{M}_F^{-1}(\pi^{[t]})\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\right]\end{aligned}$$

Ainsi le déterminant cherché s'écrit :

$$\begin{aligned} \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t+1]}) \right] &= \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) \right] \times (1 - \alpha_t)^P \\ &\quad \times \left[1 + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{M}_F^{-1}(\pi^{[t]}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \right] \\ &= \det \left[\mathbf{M}_F(\pi^{[t]}) \right] \times \delta^{(t)} \end{aligned}$$

avec $\delta^{(t)}$ fonction croissante de $d(\mathbf{x}_i, \pi^{[t]})$ pour $0 < \alpha_t < 1$:

$$\begin{aligned} \delta^{(t)} &= (1 - \alpha_t)^P \times \left[1 + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)} \lambda(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{M}_F^{-1}(\pi^{[t]}) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \right] \\ &= (1 - \alpha_t)^P \times \left[1 + \frac{\alpha_t}{(1 - \alpha_t)} d(\mathbf{x}_i, \pi^{[t]}) \right] \end{aligned}$$

11.11.3 Algorithmes de Fedorov (1972)

Les algorithmes de Fedorov et Wynn ne se distinguent que par le choix de la suite $\{\alpha_t\}$. Pour alléger l'écriture et sans perte de généralité on posera $\lambda(\mathbf{x}) \equiv 1$.

L'algorithme de Fedorov est similaire à un **algorithme de gradient** avec, de surcroît, une **optimisation de la longueur du pas à chaque itération** : on cherche l'augmentation la plus grande du déterminant de la matrice d'information à chaque itération.

Il faut donc maximiser $\delta^{[t]}$, qui dépend à la fois de α_t et du point \mathbf{x}_i .

Tout d'abord on choisit le point \mathbf{x}^* qui maximise $d(\mathbf{x}_i, \pi^{[t]})$, sans se préoccuper de α_t , après avoir calculé $d(\mathbf{x}_i, \pi^{[t]})$ en chacun des N_s points du support :

$$d_*^{[t]} = d(\mathbf{x}^*, \pi^{[t]}) = \sup_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}} \left\{ d(\mathbf{x}_i, \pi^{[t]}) \right\} \quad (11.43)$$

Ensuite on cherche α_t qui maximise la fonction $\delta^{[t]}(d_*^{[t]})$. En dérivant la fonction par rapport à α_t puis en annulant la dérivée on trouve la valeur optimale α_t^* :

$$\alpha_t^* = \frac{d_*^{[t]} - P}{P(d_*^{[t]} - 1)} \quad (11.44)$$

Il faut s'assurer que α_t^* est vraiment toujours positif. En effet, comme $\pi^{[t]}$ n'est pas encore D -optimale on a :

$$d_*^{[t]} - P = \max_{\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}} \left[d(\mathbf{x}_i, \pi^{[t]}) - P \right] > 0 \quad (11.45)$$

et donc α_t^* est toujours positif tant que la mesure $\pi^{[t]}$ n'est pas D -optimale.

En vérifiant que la dérivée seconde est négative on s'assure que $\delta_*^{[t]}$ est bien un maximum pour α_t^* .

On a :

$$\delta_*^{[t]} = \frac{[d(\mathbf{x}^*, \pi^{[t]})/P]^P}{[(d(\mathbf{x}^*, \pi^{[t]}) - 1)/(P - 1)]^{P-1}} \quad (11.46)$$

Finalement, le déterminant de la matrice d'information correspondant au meilleur plan à l'itération $t + 1$ s'écrira :

$$\det [\mathbf{M}_F(\pi^{[t+1]})] = \left[\frac{d_*^{[t]}}{P} \right]^P \times \left[\frac{P - 1}{d_*^{[t]} - 1} \right]^{P-1} \times \det [\mathbf{M}_F(\pi^{[t]})] \quad (11.47)$$

La convergence est démontrée par Fedorov (1972, [18]) :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \det [\mathbf{M}_F(\pi^{[t]})] \right\} = \det [\mathbf{M}_F(\pi_D)] \quad (11.48)$$

où π_D est une mesure D -optimale (pas forcément unique, même si $\mathbf{M}_F(\pi_D)$ est unique) sur \mathcal{X} .

Le meilleur critère d'arrêt de cet algorithme est basé sur l'assertion c/ du TEG, les itérations s'arrêtent quand :

$$d(\mathbf{x}^*, \pi^{[t]}) - P \leq \varepsilon \quad (11.49)$$

ε étant un petit nombre réel positif choisi pour satisfaire une précision donnée.

Un exemple de graphique d'évolution du déterminant est donné en figure 11.5, un exemple de répartition des masses est donné en figure 11.6, et un exemple de graphe de la fonction de variance est donné en figure 11.7. On y observe bien $P = 2$ (en fin d'itérations).

11.11.4 Algorithme de Wynn (1970)

Ici on ne cherche plus un α_t qui garantisse l'augmentation maximale du critère à chaque itération mais on choisit une suite $\{\alpha_t\}$ a priori.

Cette suite est telle que :

$$\alpha_t \rightarrow 0 \quad \text{quand } t \rightarrow \infty \quad \text{et} \quad \sum \alpha_t = \infty \quad (11.50)$$

Wynn propose ainsi $\alpha_t = \frac{1}{N_s + t}$.

L'accroissement du critère n'est pas monotone mais la convergence vers une mesure optimale est également démontrée, même si la vitesse de convergence de cet algorithme est très lente.

11.11.5 Algorithme de Torsney (1988)

Principe

C'est un algorithme bien adapté à la D -optimalité quand N_s est grand. On le décrit avec les 4 étapes suivantes :

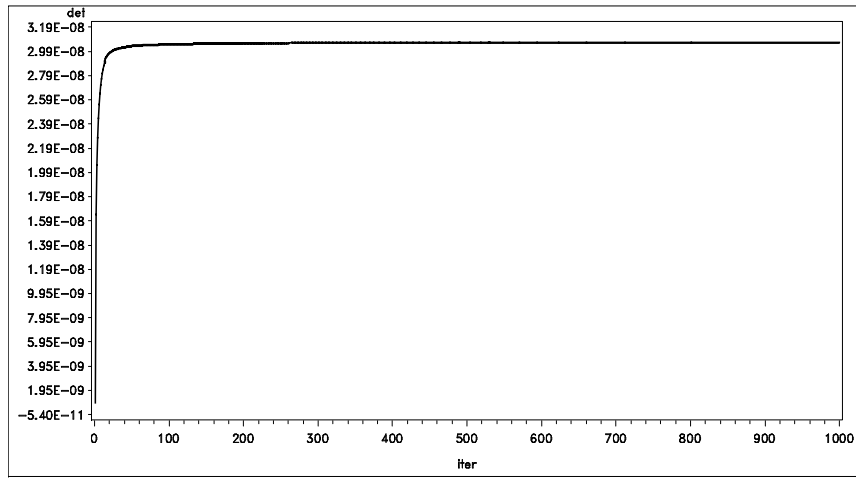


FIG. 11.5 – Evolution du déterminant de la matrice d’information de Fisher, dans le cas d’un plan continu.

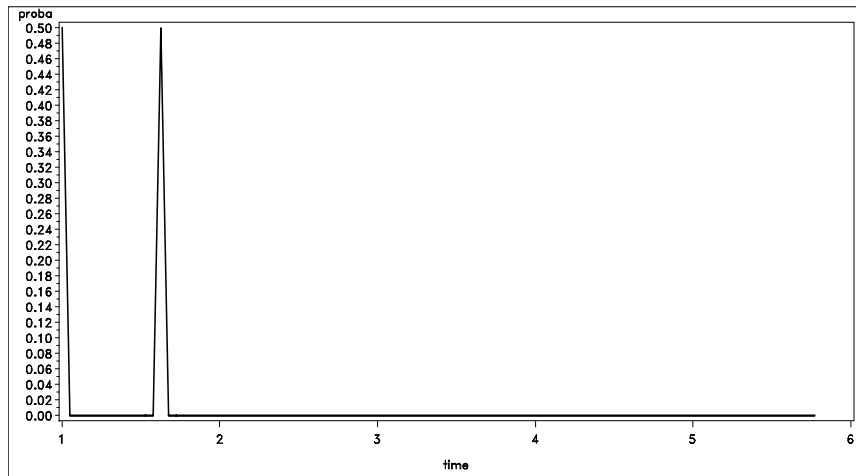


FIG. 11.6 – Répartition des masses pour une mesure D-optimale.

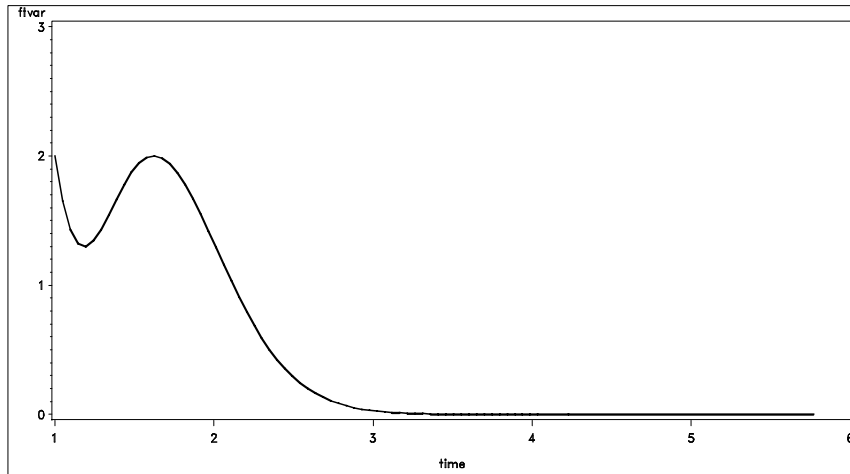


FIG. 11.7 – Graphe de fonction de variance pour un plan D-optimal à 2 points de support.

- **Etape 1** : On choisit des mesures strictement positives pour chacun des N_s points du support (sinon les mesures nulles restent négligeables quel que soit le nombre d'itérations).
- **Etape 2** : On calcule $d(\mathbf{x}_i, \pi_i^{[t]})$ pour chaque \mathbf{x}_i .
- **Etape 3** : On attribue la nouvelle mesure par :

$$\pi_i^{[t+1]} = \pi_i^{[t]} \frac{d(\mathbf{x}_i, \pi_i^{[t]})}{P}, \quad i = 1, \dots, N_s \quad (11.51)$$

Si une mesure devient négligeable en un point \mathbf{x}^k à l'itération $t = \tau$ alors on pose $\pi_k^{[t]} = 0, \forall t > \tau$.

Rq : On voit ainsi que certains points du support ne vont plus participer à la suite des calculs à partir d'un certain nombre d'itérations : c'est la raison majeure de la grande vitesse de cet algorithme.

- **Etape 4** : Si pour tout point restant $d(\mathbf{x}^u, \pi_u^{[t]}) - P < \varepsilon, \forall u$ et pour ε petit nombre réel positif satisfaisant à la précision souhaitée, alors on stoppe l'algorithme. La convergence (monotone) vers une mesure D -optimale est démontrée.

Exemple de mise en oeuvre de l'algorithme de Torsney (1988, [34])

Illustrons la mise en oeuvre de cet algorithme avec le code SAS/IML TORSNEY01 (fourni en Annexe B), à partir d'un exemple simple. On cherche à modéliser le **rendement** (la réponse) d'une réaction chimique en fonction de la **température** du milieu réactionnel (facteur X_1) et de la **pression** dans le réacteur (X_2). Comme on ne dispose pas de modèle théorique qui relie cette réponse à ces deux facteurs, on se contente donc, en première approximation, de postuler un modèle empirique du type **polynomial** et de **degré 2** :

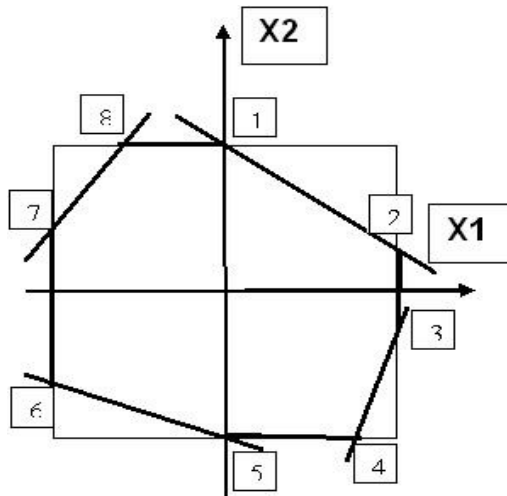


FIG. 11.8 – Domaine sous contraintes.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \varepsilon \quad (11.52)$$

Les niveaux mini et maxi de chacun des deux facteurs continus conduiraient à définir un **domaine expérimental compact** Ω de forme carrée s'il n'y avait pas de contraintes. En réalité il y a des **contraintes** : il est interdit de réaliser des expériences dans les coins du carré, car, par exemple, il y a un coin où la température et la pression sont simultanément élevées, ce qui induit des risques d'explosion. Le domaine expérimental **autorisé** est donc un sous-domaine de Ω . Un sous-domaine possible pour les variables codées est un **polygone convexe** défini par des contraintes inspirées de la connaissance antérieure du sujet de recherche, à partir d'un carré $[-1, +1]^2$. On obtient ainsi le polygone convexe à 8 sommets de la figure 11.8. Les coordonnées des 8 sommets sont donnés dans le tableau 11.1.

sommet	x_1	x_2
1	0	1
2	1	0.2
3	1	-0.2
4	0.8	-1
5	0	-1
6	-1	-0.8
7	-1	0.4
8	-0.6	1

Tableau 11.1. Coordonnées des 8 sommets du polygone de l'exemple.

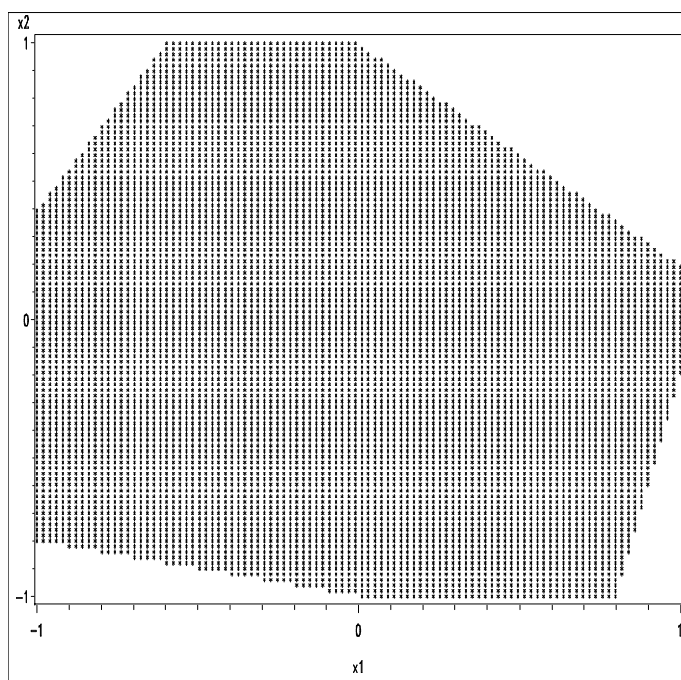


FIG. 11.9 – Maillage fin du réseau candidat polygonal de l'exemple (8155 points), superposé au domaine expérimental sous contraintes de la figure 11.8.

Le réseau candidat, qui devrait être continu d'un point de vue théorique, est approximé au mieux en maillant finement le polygone précédent comme sur la figure 11.9 où $N_S = 8155$. Remarquons que N_S peut être beaucoup plus petit si on se contente de points maillant l'enveloppe convexe de l'espace du modèle.

A la figure 11.10 on montre l'évolution du déterminant de la matrice d'information de Fisher.

On obtient ainsi :

$$\det [M_F (\pi_D)] = 1.644 \times 10^{-3}$$

Les points de support de la mesure D -optimale, en conservant uniquement les points de probabilité $\geq 4 \times 10^{-5}$, sont les 16 points dont les coordonnées sont données au tableau 11.2. Ils apparaissent sur la figure 11.11.

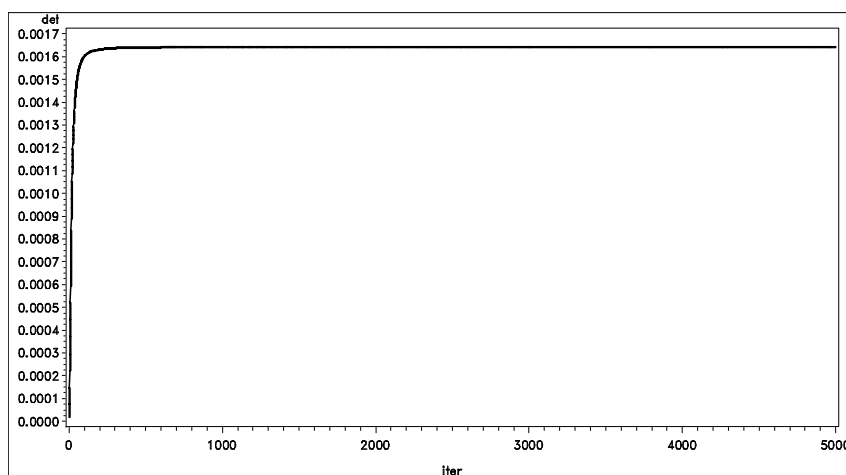


FIG. 11.10 – Evolution du déterminant de la matrice d’information de Fisher, pour l’exemple.

num/num_reseau/ft de var/proba/[X1; X2]	num/num_reseau/ft de var/proba/[X1; X2]
1/1/6/0.15990 [-1.000; -0.798]	9/4151/5.9989/0.0199 [-0.051; -0.131]
2/8155/6/0.15930 [+1.000; +0.192]	10/4249/5.9986/0.0156 [-0.030; -0.152]
3/7674/6/ 0.15500 [+0.798; -1.000]	11/4149/5.9976/0.0066 [-0.051; -0.172]
4/60/6/0.14213 [-1.000; +0.394]	12/4051/5.9968/0.0036 [-0.071; -0.152]
5/4405/6/0.13172 [-0.010; +1.000]	13/4250/5.9966/0.0027 [-0.030; -0.131]
6/4150/6/0.10330 [-0.051; -0.152]	14/4248/5.9954/0.0011 [-0.030; -0.172]
7/1604/6/0.05948 [-0.596; +1.000]	15/4052/5.9950/0.0008 [-0.071; -0.131]
8/4406/6/0.03861 [+0.010; -1.000]	16/4050/5.9934/0.0002 [-0.071; -0.172]

Tableau 11.2. Coordonnées des points de support de la mesure D -optimale.

On verra à la section suivante le traitement de ce même exemple dans le cas discret.

11.12 Méthodes de construction des plans D -optimaux discrets

11.12.1 Algorithmes d’échange : principe

Les pionniers sont Fedorov (1972, [18]) et Mitchell (1974, [27]). On présuppose l’existence d’un ensemble de N_c expériences **candidates** (N_c points de support) positionnées dans Ω . On construit itérativement un plan D -optimal à N expériences (la valeur de N est choisie *a priori*) sélectionnées parmi les N_c , en échangeant les expériences du plan (au départ aléatoire) avec les expériences de l’ensemble candidat, en optimisant à chaque fois un **critère de fonction de variance**. On espère (il n’y a pas de preuve de convergence) que le N -plan final aura une D -efficacité proche de 100%, c’est-à-dire

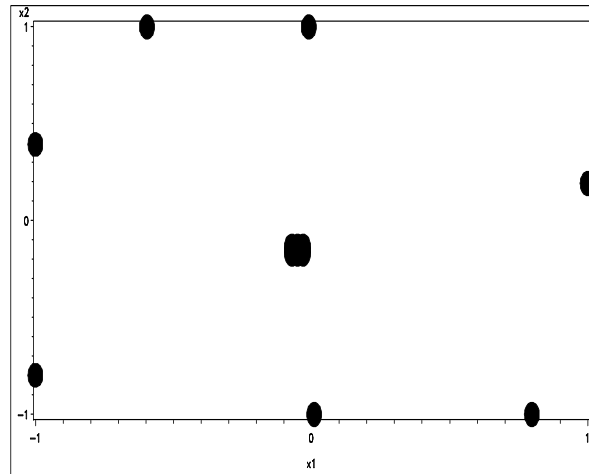


FIG. 11.11 – Points de support de mesure non négligeable.

que le **déterminant normé de sa matrice d'information sera proche du maximum théorique** (calculé par les algorithmes de la section 11.11). Ces deux algorithmes diffèrent par le **type d'échange** entre les expériences du plan et celles de l'ensemble candidat.

11.12.2 Algorithme d'échange double de Fedorov (1972)

- On choisit **aléatoirement** (ou selon un choix circonstancié) $N (\geq P)$ expériences parmi les N_c pour constituer un N -plan d'expériences initial non dégénéré.
- On échange une expérience du plan initial par une expérience de l'ensemble candidat dans le but d'une augmentation maximale du déterminant Δ de la matrice d'information du plan : l'échange se fait **en un seul coup** : si on désigne par i un point du support du plan initial et j un point du support de l'ensemble candidat on détermine le couple (i, j) le plus performant dans cette augmentation en calculant Δ pour les $N \times (N_c - 1)$ couples possibles ; soit (i_{\max}, j_{\max}) le meilleur couple.
- On **réalise** effectivement dans le plan l'échange de i_{\max} par j_{\max} correspondant à Δ_{\max} et on retourne à l'étape 2 si le critère d'arrêt n'est pas satisfait.

Un théorème :

Après l'échange de l'exp i par l'exp j à l'itération $t + 1$ on a :

$$(\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t+1]} = (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t]} - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T + \mathbf{f}(\mathbf{x}_j)\mathbf{f}(\mathbf{x}_j)^T \quad (11.53)$$

$$\det(\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t+1]} = \det(\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t]} \times [1 + \Delta(i, j)] \quad (11.54)$$

avec :

$$\Delta(i, j) = d(\mathbf{x}_j) - [d(\mathbf{x}_i)d(\mathbf{x}_j) - d^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)] - d(\mathbf{x}_i) \quad (11.55)$$

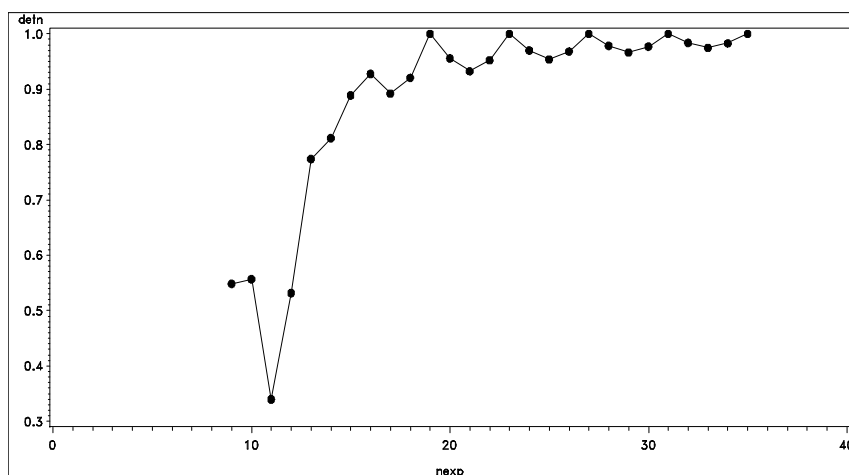


FIG. 11.12 – Evolution du déterminant normé lors de la recherche de plans D-optimaux discrets.

où :

$$\begin{aligned}
 d(\mathbf{x}_i) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t]}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \\
 d(\mathbf{x}_j) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}_j)^T (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t]}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \\
 d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)^T (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t]}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \quad \text{fonction de covariance} \\
 &= \mathbf{f}(\mathbf{x}_j)^T (\mathbf{X}_N^T \mathbf{X}_N)_{[t]}^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \quad \text{fonction de covariance}
 \end{aligned}
 \tag{11.56}$$

Plusieurs tests d'arrêt sont possibles, par exemple on peut stopper quand $\Delta(i, j) < \varepsilon$, valeur faible choisie a priori.

11.12.3 Inconvénients

On retrouve d'abord l'inconvénient commun aux algorithmes discrets de ce type, à savoir l'**absence de preuve de convergence**, l'optimum atteint ne pouvant être que local. On peut atténuer cet inconvénient en relançant k fois l'algorithme (typiquement $k = 5$ à 10) en partant de k solutions **aléatoires initiales différentes** : on choisit alors comme plan D -optimal le meilleur plan obtenu parmi les k . Le fait de remplacer un seul point à la fois risque de conduire à un "**blocage**" : une expérience peut être remplacée par elle-même ou par une expérience équivalente, l'accroissement du déterminant est nul et pourtant le plan risque de ne pas être D -optimal. Mitchell a proposé la mise en oeuvre de techniques d'**excursions** pour remédier à ce risque de blocage.

Remarque :

Entre l'itération $t + 1$ et l'itération t l'algorithme peut aussi modifier la répartition $\{r\}$.

On montre en figure 11.12 un graphe typique d'évolution du déterminant normé.

11.12.4 Construction des plans D-optimaux discrets avec la procédure OPTEX de SAS

La procédure OPTEX, interactive si besoin est, permet de construire par algorithme itératif des plans optimaux discrets basés notamment sur les critères de D-, A-, G-optimalité. Cette construction se fait en deux étapes :

- On fournit à la procédure un réseau d'expériences candidates et on postule un modèle linéaire dans les paramètres,
- La procédure extrait un sous-ensemble d'expériences satisfaisant au critère d'optimalité choisi.

La procédure autorise plusieurs choix d'algorithmes, notamment les algorithmes d'échange de Fedorov (1972). La structure générale d'invocation de la procédure est la suivante :

```
PROC OPTEX data= coding= epsilon= nocode noprint seed=;
- CLASS names;
- MODEL noint prior=;
- BLOCKS
  - covar= var=; ou : design=; ou : structure=(b)k;
  - init=random chain;
  - iter= n;
  - keep= m;
  - noexchange;
- EXAMINE
  - design;
  - information;
  - number=;
  - variance;
- GENERATE
  - augment=;
  - criterion= D A U S;
  - initdesign= sequential random partial(m);
  - iter= n;
  - keep = m;
  - method = detmax exchange fedorov m_fedorov sequential;
  - n = n saturated;
- ID names;
- OUTPUT
  - out = name blockname = number= best abest gbest vbest;
```

On examine ci-après quelques exemples d'utilisation de cette procédure.

Construction d'un plan de taille fixée a priori pour un modèle du deuxième degré

Soit le modèle, incomplet car les interactions doubles sont absentes, du deuxième degré :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^4 \beta_j x_j + \sum_{j=1}^4 \beta_{jj} x_j^2 + \varepsilon \quad (11.57)$$

Ce modèle comprend 9 paramètres (effets) à estimer. On cherche alors à construire un plan D-optimal de taille 9 tiré dans un plan complet 3^4 de 81 expériences.

Le premier code OPTTEX01 permet la construction du plan complet 3^4 et l'examen du réseau candidat constitué par ce plan complet :

```
***** OPTTEX01 *****
proc factex;
  factors x1-x4/nlev=3;
  output out=candi;
run;

proc optex coding=orthcan data=candi;
  model x1 x2 x3 x4 x1*x1 x2*x2 x3*x3 x4*x4;
  examine;
  generate initdesign=candi method=sequential;
  output out=reseau;

proc print data=reseau;
run;

*****
```

Commentaires :

- La commande `coding=orthcan` permet d'orthogonaliser le réseau candidat et conduit ensuite à fournir une valeur correcte de la $D - eff$.

Ce code conduit à la sortie :

```
*****
The OPTTEX Procedure
```

Factor Ranges

Factor	Low Value	High Value
x1	-1.000000	1.000000
x2	-1.000000	1.000000
x3	-1.000000	1.000000
x4	-1.000000	1.000000

Design Number	D-Efficiency	A-Efficiency	G-Efficiency	Average Prediction Standard Error
1	100.0000	100.0000	100.0000	0.3333

Examining Design Number 1

Log determinant of the information matrix	3.9550E+01
Maximum prediction variance over candidates	0.1111
Average prediction variance over candidates	0.1111
Average variance of coefficients	0.0123
D-Efficiency	100.0
A-Efficiency	100.0

Obs	x1	x2	x3	x4
1	-1	-1	-1	-1
2	-1	-1	-1	0
3	-1	-1	-1	1
.....				
.....				
79	1	1	1	-1
80	1	1	1	0
81	1	1	1	1

Commentaires :

– On observe que le réseau candidat présente une *D – eff* de 100%.

Ensuite le code OPTTEX02 :

```

***** OPTEX02 *****
proc optex coding=orthcan data=candi seed=117;
  model x1 x2 x3 x4 x1*x1 x2*x2 x3*x3 x4*x4;
  examine;
  generate n=9 initdesign=random method=fedorov;
  output out=plan;
;
proc print data=plan;
run;
*****

```

conduit à la sortie :

```

*****
The OPTEX Procedure

```

Design Number	D-Efficiency	A-Efficiency	G-Efficiency	Average Prediction Standard Error
1	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
2	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
3	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
4	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
5	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
6	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
7	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
8	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
9	100.0000	100.0000	100.0000	1.0000
10	87.7552	73.7705	65.4654	1.1643

Examining Design Number 1

```

Log determinant of the information matrix      1.9775E+01
Maximum prediction variance over candidates      1.0000
Average prediction variance over candidates      1.0000
Average variance of coefficients                 0.1111

```

D-Efficiency	100.0
A-Efficiency	100.0

Obs	x1	x2	x3	x4
1	-1	-1	0	1
2	-1	0	1	-1
3	-1	1	-1	0
4	0	-1	-1	-1
5	0	0	0	0
6	0	1	1	1
7	1	-1	1	0
8	1	0	-1	1
9	1	1	0	-1

Commentaires :

- *Le plan trouvé est de D – eff égale à 100%, c’est une fraction 3⁴⁻².*
- *Si on change la valeur du seed on aura un autre plan de D – eff égale à 100% (car on sait qu’avec le plan 3⁴ plusieurs fractions équivalentes de taille 9 existent, voir section 4.8 du chapitre 4).*
- *Dix tentatives (par défaut) ont été lancées pour trouver le plan D-optimal de la meilleure efficacité possible c-a-d ici 100% ; on observe qu’à la dixième tentative le plan trouvé est moins bon puisqu’il présente une D-efficacité de 88% seulement.*

Construction d’un plan à partir d’un réseau non orthogonal

Soit les 5 facteurs rtemp (X_1), press (X_2), time (X_3), solv (X_4), source (X_5), (X_5 étant un facteur discret) à étudier au moyen du modèle suivant (pour X_5 les calculs se feront sur ses 5-1 indicatrices) :

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^5 \beta_j x_j + \sum_{j=1}^3 \sum_{k=2}^4 \beta_{jk} x_j x_k + \sum_{j=1}^3 \beta_j x_j^2 + \varepsilon$$

Les nombres de niveaux respectifs sont : 3, 3, 3, 2, 5. Le plan factoriel complet est constitué de

$$N = 3 \times 3 \times 3 \times 2 \times 5 = 270 \text{ expériences (points de support).}$$

Mais pour des raisons d’impossibilité physique certaines expériences ne sont pas réalisables, ce sont celles pour lesquelles, simultanément : rtemp=150, press=10, time=3 d’une part, et rtemp=350, press=30, time=5 d’autre part.

Le premier code, PLAN04, prépare le réseau candidat :

```

***** PLAN04 *****
proc plan ordered;
factors rtemp=3 press=3 time=3 solv=2 source=5/noprint;
output out=can
  rtemp  nvals=(150 to 350 by 100)
  press  nvals=(10 to 30 by 10)
  time   nvals=(3 to 5)
  solv   nvals=(20 to 25 by 5)
  source nvals=(1 to 5);
data candi ; set can;
  if (^((rtemp=150)&(press=10)&(time=3)));
  if (^((rtemp=350)&(press=30)&(time=5)));
proc print data=candi;
*****

```

qui conduit à :

```

*****
Obs    rtemp    press    time    solv    source
  1     150      10      4      20      1
  2     150      10      4      20      2
  3     150      10      4      20      3
  4     150      10      4      20      4
  .....
  .....
246    350      30      4      25      1
247    350      30      4      25      2
248    350      30      4      25      3
249    350      30      4      25      4
250    350      30      4      25      5
*****

```

Commentaire :

– 250 expériences seulement constituent le réseau et non pas 270 : il n'est donc pas orthogonal.

Le deuxième code, OPTEX03, permet de choisir un plan D-optimal à 30 expériences :


```

***** OPTEX03 *****
proc optex coding=orthcan data=candi;
  class source;
  model source solv|rtemp|press|time@2
         rtemp*rtemp press*press time*time;
  generate n=30;
  output out=reactor;
;
proc print data=reactor;
run;
*****

```

On obtient la sortie suivante :

```

*****
The OPTEX Procedure

```

Class Level Information

```

Class  Levels  -Values--
source      5    1 2 3 4 5

```

Factor Ranges

Factor	Low Value	High Value
solv	20.000000	25.000000
rtemp	150.000000	350.000000
press	10.000000	30.000000
time	3.000000	5.000000

Design Number	D-Efficiency	A-Efficiency	G-Efficiency	Average Prediction Standard Error
1	102.1697	91.9695	77.5466	0.8077
2	101.9212	91.1632	80.4966	0.8113
3	101.8692	90.2773	80.3656	0.8152

4	101.7654	90.8651	78.8135	0.8126
5	101.3628	89.1880	79.2854	0.8202
6	101.3109	91.3990	77.3318	0.8102
7	101.1927	90.2634	76.5042	0.8153
8	101.1450	89.4394	76.6330	0.8191
9	101.0601	90.2345	78.1083	0.8154
10	100.0355	89.7423	77.4892	0.8177

Obs	solv	rtemp	press	time	source
1	20	150	10	4	5
2	20	350	10	3	5
3	20	350	30	3	5
4	25	150	30	3	5
5	25	250	20	4	5
6	25	350	10	5	5
7	20	150	20	3	4
8	20	250	10	5	4
9	20	350	30	3	4
10	25	150	30	5	4
11	25	250	10	3	4
12	25	350	30	4	4
13	20	150	10	5	3
14	20	150	30	4	3
15	20	250	10	3	3
16	20	350	20	5	3
17	25	150	20	5	3
18	25	350	30	3	3
19	20	150	30	3	2
20	20	150	30	5	2
21	20	350	10	4	2
22	25	150	10	4	2
23	25	250	30	5	2
24	25	350	20	3	2
25	20	250	20	4	1
26	20	250	30	5	1
27	25	150	10	5	1
28	25	150	30	3	1
29	25	350	10	3	1
30	25	350	20	5	1

Commentaire :

- La valeur donnée ici par SAS pour la $D - eff$ est fausse, on verra plus loin comment atteindre la valeur exacte au moyen du programme *MOPTEX*..

Construction d'un plan à partir d'un plan de base

On peut imaginer un plan existant à compléter, ou réparer. On peut réaliser cette tâche à l'aide du code *OPTEX04* suivant :

```
***** OPTEX04 *****
data preset;
  input solv rtemp press time source;
  datalines;
  20 350 10 5 4
  20 150 10 4 3
  25 150 30 3 3
  25 250 10 5 3
  ;
proc optex data=candi coding=orthcan;
  class source;
  model source solv|rtemp|press|time@2
         rtemp*rtemp press*press time*time;
  generate n=25 augment=preset;
  output out=reactor2;
  ;
proc print data=reactor2;
run;
*****
```

Commentaire :

- Le plan de base se trouve dans le fichier "preset".
- La commande "augment=preset" permet d'indiquer le nom du plan de base.

On obtient la sortie suivante :

```
*****
```

The OPTEX Procedure

Design Number	D-Efficiency	A-Efficiency	G-Efficiency	Average Prediction Standard Error
1	98.6258	83.8650	70.3647	0.9266
2	97.9838	83.6843	68.7985	0.9276
3	97.9500	82.0953	70.7052	0.9365
4	97.9030	84.9593	71.2269	0.9206
5	97.8641	81.5328	68.7821	0.9397
6	97.7150	81.8024	71.3177	0.9382
7	97.4794	87.1723	77.1124	0.9088
8	97.3164	83.9096	72.8128	0.9263
9	97.2354	85.3828	68.7558	0.9183
10	93.7153	76.6734	65.3534	0.9690

Obs	solv	rtemp	press	time	source
1	20	150	20	3	5
2	20	250	10	5	5
3	20	350	30	4	5
4	25	150	20	5	5
5	25	350	10	4	5
6	20	150	30	5	4
7	20	250	20	4	4
8	20	350	10	5	4
9	25	150	10	5	4
10	25	250	30	5	4
11	25	350	30	3	4
12	20	150	10	4	3
13	20	350	20	5	3
14	25	150	30	3	3
15	25	250	10	5	3
16	20	150	30	3	2
17	20	250	30	5	2
18	20	350	10	3	2
19	25	150	10	4	2
20	25	350	20	3	2
21	20	150	10	5	1
22	20	350	30	3	1
23	25	150	30	5	1

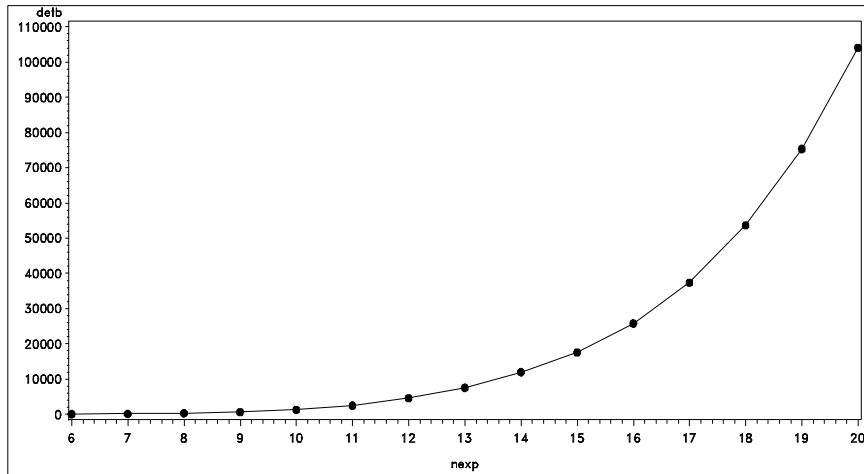


FIG. 11.13 – Evolution du déterminant brut.

24	25	250	10	3	1
25	25	350	20	5	1

Construction d'une suite de plans D-optimaux

Il est plus rigoureux de calculer le déterminant normé ou la $D - eff$ en fonction de la taille du plan. On obtient ainsi un graphe dont les abscisses des pics de $D - eff$ sont les tailles des meilleurs plans D-optimaux.

Construisons cette suite avec le programme MOPTX (en annexe B) qui comporte une boucle en macrolangage, à partir de l'exemple traité dans le cadre continu au §11.11.6.

On montre l'évolution du déterminant brut en figure 11.13, l'évolution du déterminant normé à la figure 11.14, l'évolution de la D-efficacité de 6 à 20 à expériences en figure 11.15, l'évolution de l'accroissement du déterminant brut à la figure 11.16, et l'évolution de la D-efficacité de 6 à 100 expériences en figure 11.17.

Enfin on donne les coordonnées du plan discret-exact sélectionné, de D -efficacité = 99.57%, au tableau 11.3; les points apparaissent en figure 11.18.

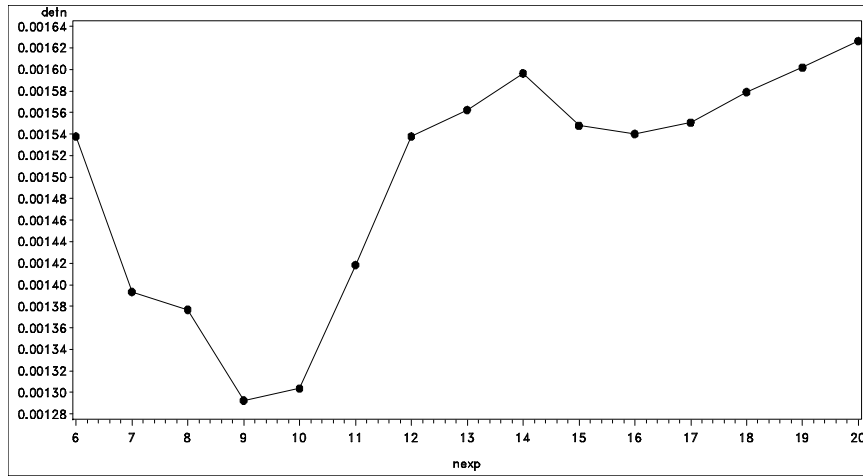


FIG. 11.14 – Evolution du déterminant normé.

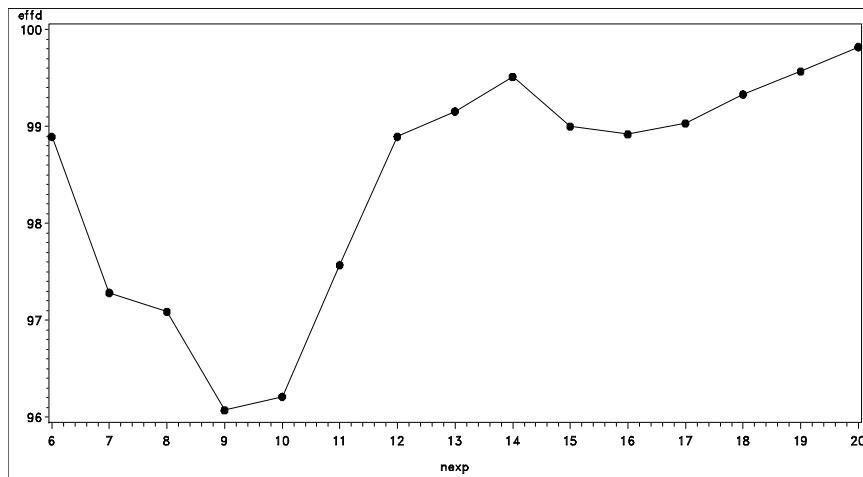


FIG. 11.15 – Evolution de la D -efficacité sur 6 à 20 expériences.

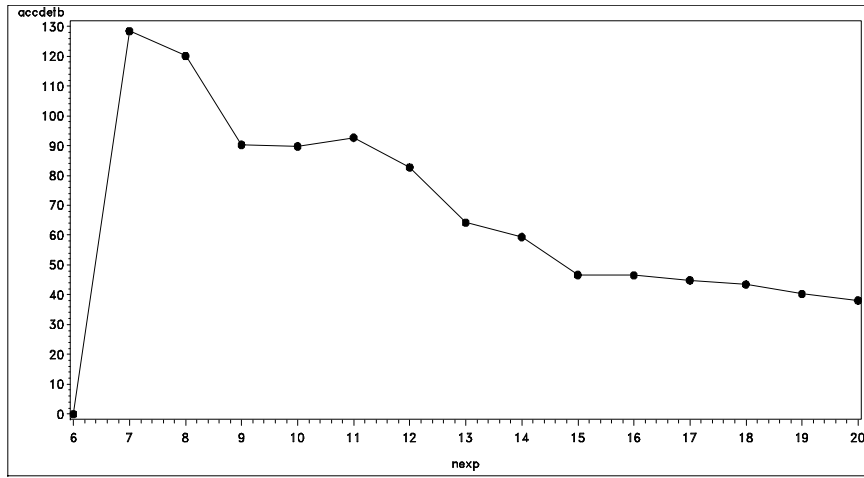


FIG. 11.16 – Evolution de l'accroissement du déterminant brut.

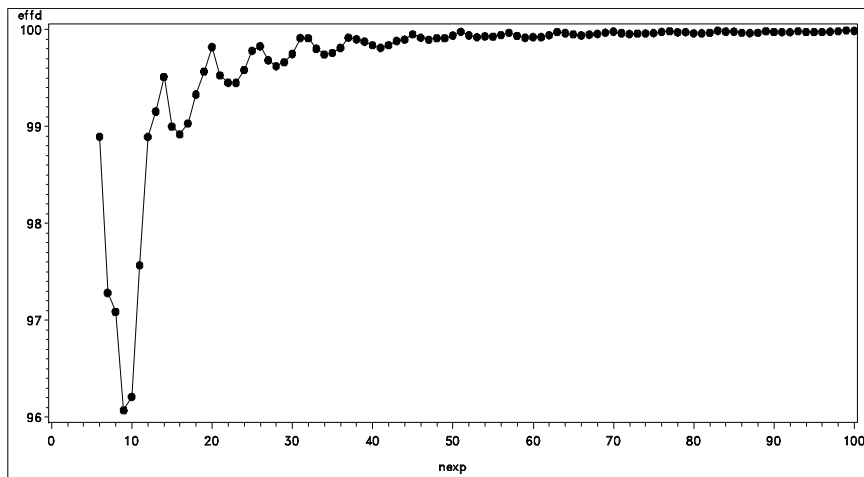


FIG. 11.17 – Evolution de la D-efficacité de 0 à 100 expériences.

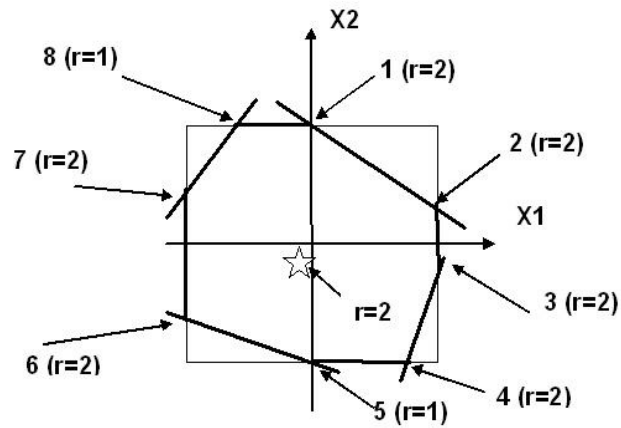


FIG. 11.18 – Domaine expérimental sous contraintes avec les coordonnées des points de support du plan D -optimal discret.

num	réseau	coordonnées	répétition
1	1	$[-1.000; -0.798]$	2
2	8155	$[+1.000; +0.192]$	2
3	7674	$[+0.798; -1.000]$	2
4	60	$[-1.000; +0.394]$	2
5	4405	$[-0.010; +1.000]$	2
6	4150	$[-0.051; -0.111]$	2
7	1604	$[-0.596; +1.000]$	1
8	4406	$[+0.010; -1.000]$	1

Tableau 11.3. Coordonnées du plan D -optimal discret.

On observe que l'étoile correspond au centre de gravité du polygone, et ne coïncide pas avec le centre du carré.

Chapitre 12

Conclusion générale

Ce polycopié n'est qu'une introduction à la méthode des plans d'expériences. Les types de plans suivants méritent chacun au moins un chapitre complet pour être explicité, et n'ont pas leur place dans un tel polycopié. Bien entendu, il existe de bons ouvrages dont la liste est donnée en Annexe A pour le lecteur intéressé. Nous donnons toutefois maintenant quelques éléments et quelques exemples pour décrire la spécificité propre des types de plans non abordés dans ce polycopié.

12.1 Plans pour problèmes de mélange et formulation (chimique, galénique, cosmétique, alimentaire, ...)

Ces plans peuvent se définir très facilement par une contrainte fonctionnelle irréductible : les facteurs étant des proportions (ou des pourcentages) d'ingrédients du mélange (ou de la formulation) étudié(e), la somme de ces proportions vaut 1 (ou 100). Cette contrainte fonctionnelle interdit l'utilisation des plans vus jusqu'au chapitre 9. Des plans particuliers, notamment les réseaux simplexes de Scheffé (Cornell, 1990), ont été proposés.

Si en outre, comme c'est très souvent le cas, il existe en outre des contraintes de bornes (inférieure et/ou supérieure) sur les proportions, on fait alors appel à d'autres techniques, d'abord pour définir le domaine expérimental – un polyèdre convexe, en général irrégulier – puis pour construire des plans optimaux par rapport au modèle postulé et au domaine expérimental sous contraintes. Ces plans pourront être construits avec les éléments du chapitre 10.

12.2 Plans pour problèmes de mélange avec facteurs externes

C'est un problème encore plus compliqué que le précédent car en plus des proportions du mélange on s'intéresse en même temps à des facteurs dits externes, qui ne sont pas des proportions, mais des facteurs, discrets ou continus, eux-mêmes soumis à des contraintes

particulières (par exemple certaines combinaisons de leurs niveaux sont physiquement impossibles ou interdites). Ces plans pourront être construits avec les éléments du chapitre 10.

12.3 Plans d'expériences numériques

C'est un nouveau domaine en pleine expansion où les expériences sont virtuelles, réalisées sur ordinateur uniquement, avec simulation d'une variance naturelle ou non. Un des objectifs majeurs du plan d'expériences à construire est le maillage optimal de l'espace des facteurs (souvent en grand nombre) sachant qu'il existe un modèle postulé en général non linéaire en les paramètres, ou pas de modèle du tout dans une première phase exploratoire de l'étude.

12.4 Plans pour modèles non linéaires (régression non linéaire, réseaux de neurones)

Domaine encore en recherche, qui fait appel aux mathématiques déjà vues dans ce polycopié, mais aussi à des méthodes mathématiques très différentes, notamment la géométrie différentielle et l'optimisation stochastique.

12.5 Et d'autres, ...

- Plans pour systèmes d'équations différentielles.
- Plans optimaux pour modèles linéaires mixtes (présence simultanée d'effets fixes et d'effets aléatoires)
- Plans optimaux pour modèles non linéaires mixtes.
- Plans optimaux pour modèles linéaires généralisés (mixtes ou non)
- Plans d'échantillonnage séquentiels ou non.

Bibliographie

- [1] ABRAMOWITZ, M.A., STEGUN, A. et al., 1970. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, New York.
- [2] ATKINSON, A.C., DONEV, A.N., 1992. *Optimum Experimental Designs*. Clarendon Press, Oxford, UK.
- [3] BARANYI, J., ROBERTS, T.A., 1994. *A dynamic approach to predicting bacterial growth in food*. International Journal of Food Microbiology 23, 277-294.
- [4] BARANYI, J., ROBERTS, T.A., 1995. *Mathematics of predictive food microbiology*. International Journal of Food Microbiology 26, 199-218.
- [5] BOX, G.E.P, HUNTER, W.G., HUNTER, J.S., 1978. *Statistics for experimenters*. John Wiley & Sons, New York.
- [6] BOX, G.E.P, HUNTER, J.S., 1957. *Multi-Factor Experimental Designs for Exploring Response Surfaces*. Annals of Mathematical Statistics, 28, 195-241.
- [7] BOX, G.E.P., LUCAS, H.L., 1959. *Design of experiments in nonlinear situations*. Biometrika, 46, 77-90.
- [8] BOX, G.E.P, MEYER, R.D, 1986. *An analysis for unreplicated fractional factorials*. Technometrics, 28, 1, 11-18.
- [9] BOX, G.E.P, MEYER, R.D, 1993. *Finding the active factors in fractionated screening experiments*. Journal of Quality Technology, 25, 2, 94-105.
- [10] BOX, G.E.P, WILSON, K.B., 1951. *On the experimental attainment of optimum conditions*, JRSS B, 13, 1-45.
- [11] BRUNER, 1979. *Les acides perfluorosulfoniques. Activation du n-pentane par les superacides du type $R_FSO_3H-SbF_5$ ($R_F=C_nF_{2n+1}$)*.
- [12] DANIEL, C, 1959. *Use of half-normal plots in interpreting factorial two-level experiments*. Technometrics, 1, 311-341.
- [13] DAVID, H.A., 1981. *Order Statistics 2nd Edition*. Wiley, New-York.
- [14] DEY, 1985. *Orthogonal fractional factorial designs*. New Delhi, Wiley Eastern.
- [15] DRAPER, N.R., SMITH, H., 1981. *Applied Regression Analysis, Second Edition*, 1981. John Wiley & Sons, New York.
- [16] ELGUERO, J., ESPADA, M., MATHIEU, D., PHAN-TAN-LUU, R., 1979. *Anales de Quimica*, 75, 729-732.

- [17] Fang KT, Li R, Sudjianto A. Design and modelling for computer experiments. London : Chapman and Hall / CRC ; 2006.
- [18] FEDOROV, 1972. *Theory of optimal experiments*. Academic Press, New-York.
- [19] HAALAND, P.D., . Experimental Designs in Biotechnology.
- [20] HEDAYAT, WALLIS, 1978. *Hadamard matrices and their applications*. The Annals of Statistics, 6, 6, 1184-1238.
- [21] ISSANCHOU, S., GAUCHI, J.-P., 2008. *Computer-aided Optimal Designs for Improving Neural Network Generalization*. Neural Networks, 21, 945-950.
- [22] KIEFER, J., WOLFOWITZ, J., 1960. *The equivalence of two extremum problems*. Canad. J. Math. 12, 363-366.
- [23] KHURI, A.I., 1988. *A measure of rotatability for response-surface designs*. Technometrics, 30, 95-104.
- [24] KOBILINSKI, A., 1997. *Plans d'expériences. Applications à l'entreprise*, page 87-97. Editeurs scientifiques : J.-J. Dreesbeke, J. Fine, G. Saporta. Technip, Paris.
- [25] LEHNINGER, A.E., 1979. *Biochimie*. Flammarion, Paris.
- [26] LENTH, R.V., 1989. *Quick and easy analysis of unreplicated factorials*. Technometrics, 31, 469-473.
- [27] MITCHELL, T., 1974. *An algorithm for the construction of D-optimal experimental designs*, Technometrics, (1974), 16, 203-210
- [28] PATTERSON, H.D., WILLIAMS, E.R., 1976. *A new class of resolvable incomplete block designs*. Biometrika, 63, 83-92.
- [29] PATTERSON, H.D., WILLIAMS, E.R., HUNTER, E.A., 1978. *Blocks designs for variety trials*. J. Agric. Sci., 90, 395-400.
- [30] PLACKETT, R.L, BURMAN, J.P., 1943. *The design of optimum multifactorial experiments I*. Biometrika, 33, 305-325.
- [31] PLACKETT, R.L, BURMAN, J.P., 1946. *The design of optimum multifactorial experiments II*. Biometrika, 33, 328-332.
- [32] RATKOVSKY, D.A., 1983. *Nonlinear regression modelling*, Dekker.
- [33] TENENHAUS, M., 2007. *Statistique : méthodes pour décrire, expliquer et prévoir*. Dunod, Paris.
- [34] TORSNEY, B., 1988. *Computing optimizing distributions with applications in design, estimation and image processing*, in Y. Dodge, V.V. Fedorov & H.P. Wynn (Eds), Optimal Design and Analysis of Experiments. Amsterdam, North-Holland, pp. 361-370.
- [35] WHITTLE, P., 1973. *Some general points in the theory of optimum experimental design*. J. Roy. Statist. Soc, B, 35, 123-130.
- [36] WILLIAMS, E.R., 1977. *Iterative analysis of generalized lattice designs*. Aus. J. Stat., 19, 39-42.
- [37] WYNN, H.P., 1970. *The sequential generation of D-optimum experimental designs*. The Annals of mathematical Statistics, 1970, 41, 1655-1664.

Annexe A

Ouvrages sur les plans d'expériences

On trouvera ci-dessous une liste, non exhaustive sur les plans d'expériences proprement dits, ainsi que sur les méthodes d'analyse des plans.

Niveaux : débutant (*); confirmé (**); expert (***); spécialisé (S).

ANDERSON, V.L., MCLEAN, R.A. Design of Experiments – A realistic Approach. Marcel Dekker Inc., New York, 1974.(*)

ARMITAGE, P., BERRY, G. Statistical Methods in medical research. 2nd Ed., Oxford, Blackwell, 1987.(S)

ASSMUS Jr, E.F., KEY, J.D. Designs and their codes. Cambridge University Press, 1992.(S)

ATKINSON, A.C., DONEV, A.N. Optimum experimental designs. Oxford : Clarendon Press, 1992.(**)

BANERJEE, K.. Weighing designs. Marcel Dekker, New York, 1975.(S)

BENOIST, D. Notions sur les plans d'expériences. Editions Technip - Paris, 1974.(**)

BENOIST, D, TOURBIER, Y., GERMAIN-TOURBIER, S. Plans d'expériences : construction et analyse. Lavoisier Tec & Doc, Paris, 1994.(**)

BOX G.E.P., HUNTER, W.G., HUNTER, J. S. Statistics for experimenters. John Wiley & Sons, New York, 1980.(*)

BOX, G.E.P., DRAPER, N. R. Empirical Model-Building and Response Surfaces. John Wiley & Sons, New York, 1987.(**)

CLARKE, G.M. Statistics & Experimental Design. An introduction for Biologists & Biochemists. Edward Arnold, London-Melbourne-Auckland, 1994.(S)

CLARKE, G.M., KEMPSON, R.E. Introduction to the Design and Analysis of Experiments. Edward Arnold, London, 1994.(*)

CLATWORTHY, W. H. Tables of Two-Associate-Class Partially Balanced Designs. NBS Appl. Math. Ser., New York, 63, 1973.(**)

- COCHRAN, W.G. and COX, G.M. Experimental Designs. John Wiley & Sons, New York, 1957, Spanish Ed., 1965.(*)
- CONNOR, W. G., YOUNG, S. Fractional Factorial Designs for experiments with Factors at Two or Three Levels. NBS Appl. Math. Ser., New York, 58, 1961.(**)
- CORNELL, J. A. Experiments with Mixtures. 2nd Ed. John Wiley & Sons, New York, 1990.(S)
- COURSOL, J. Techniques Statistiques des Modèles Linéaires. Cours du CIMPA, Nice, 1980.(**)
- COX, D. R. Planning of Experiments. John Wiley & Sons, New York, 1958.(*)
- DAGNELIE, P. Analyse statistique à plusieurs variables. Gembloux. Les Presses Agronomiques de Gembloux, 1977.(**)
- DAGNELIE, P. Principes d'expérimentation. Gembloux. Les Presses Agronomiques de Gembloux, 1981.(*)
- DAGNELIE, P., KOBILINSKY, A., PHAN-TAN-LUU, R., MATHIEU, D., GAUCHI, J.-P., SAPORTA, G. (Editeurs Scientifiques : Droesbeke, J.-J., Fine, J., Saporta, G.). Plans d'expériences - Applications à l'entreprise. TECHNIP, 1997(**)
- DODGE Y., FEDOROV V.V., WYNN H.P. (Editors). Optimal design and analysis of experiments. North-Holland, Amsterdam, 1988.(***)
- DYKE, G.V. Comparative Experiments with Field Crops, Second edition. Charles Griffin & Comp. London, Oxford University Press, 1988.(S)
- FANG, KT, LI, R, SUDJIANTO, A. Design and modelling for computer experiments. London : Chapman and Hall / CRC ; 2006. (S)
- FEDOROV, V. V. Theory of optimal Experiments. Academic Press, New-York, 1972.(***)
- FISHER, R.A. The design of experiments 8-th.ed. Oliver and Boyd, Edinburgh 1966 (first ed. 1935).(*)
- FLEISS, J.L. The Design and Analysis of Clinical Experiments. J. Wiley & Sons, New-York, 1986.(S)
- GACULA, M.C., SINGH J. Statistical methods in food and consumer research. Academic Press, Inc. 1984.(S)
- GAUCHI, J.-P. Plans d'expériences - Applications à l'entreprise. Chapitres 7, 8 et 9.1. Editeur TECHNIP, Paris 1997 (éditeurs scientifiques : Droesbeke, J.-J., Fine, J., Saporta, G.) (**)
- GHOSH, S. Statistical design and analysis of industrial experiments. Marcel Dekker Inc.,1990.(*)
- GOMEZ, K.A., GOMEZ, A.A. Statistical Procedures for Agricultural Research, second edition. John Wiley & Son, New-York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 1984.(S)
- HAALAND P.D. Experimental design in biotechnology. Marcel Dekker, New York, 1989.(S)
- HINKELMANN, K. (ed.). Experimental Design, Statistical Models and Genetic Statistics
M. Dekker, New York, 1984.(S)

- HINKELMANN, K., KEMPTHORNE, O. Design and Analysis of Experiments, Vol. I Introduction to Experimental Design, John Wiley & Sons, New-York, 1994.(*)
- JOHN, L.G. Design and analysis of experiments Vol. 1, 2, 3. The Iowa State University Press, 1978.(*)
- JOHN P.W.M. Statistical design and analysis of experiments. Macmillan, New-York, 1971.(*)
- JOHN P.W.M. Incomplete block Designs vol. 1. Marcel Dekker, New-York, 1980.(**)
- JOHN, J.A. Cyclic Design. Chapman and Hall, London, New-York, 1987.(***)
- JOHN, J.A., WILLIAMS, E.R. Cyclic and Computer Generated Designs. Chapman & Hall, 2nd edition. London, 1995.(***)
- JONES, B., KENWARD, R. Design and analysis of cross-over trials. Chapman and Hall, 1989.(**)
- KEMPTHORNE, O. The Design Design and Analysis of Experiments. J. Wiley & Sons, New York 1952 (New ed. see Hinkelmann and Kempthorne).(*)
- KHURI, A.I., CORNELL, J.A. Response surfaces : Designs and analyses. Marcel Dekker, 1987.(**)
- KIEFER, J.C. Design of experiments (Collected papers, vol. 3). Springer-Verlag, 1985.(***)
- LEWIS G., MATHIEU, D., Phan-Tan-Luu, R. Pharmaceutical Experimental Design. Marcel Dekker Inc., N-Y, 1999.(**)
- LITTLE, T.M., HILLS, F.J. Agricultural Experimentation Design and Analysis. John Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 1978.(S)
- LOGOTHETIS N., WYNN H.P. Quality through design experimental design off-line quality control. Clarendon Press, 1989.(**)
- LORENZEN, T.J., ANDERSON, V.L. Design of Experiments.A No-Name Approach. Marcel Dekker Inc., New York, 1993.(*)
- MASON R.L., GUNST R.F., HESS J.L. Statistical design and analysis of experiments. John Wiley & Sons, New York, 1989.(*)
- McLEAN, R. A., ANDERSON, V.L. Applied Factorial and Fractional Designs. Marcel Dekker, INC., New York and Basel, 1984.(*)
- MEAD, R. The design of experiments - Statistical principles for practical application Cambridge University Press, Cambridge, 1988.(**)
- MEAD, R.M., CURNOW, R.N., HASTED, A.M. Statistical Methods in Agriculture and Experimental Biolo, 2nd edition. Chapman and Hall, New York 1993.(S)
- MONTGOMERY, D.C. Design and Analysis of Experiments. John Wiley & Sons, New York, 1984.(*)
- MYERS, J. L. Fundamentals of Experimental Design. Allyn and Bacon, Boston, 1966.(*)
- MYERS, R. H. Response Surface Methodology. Edwards Brother (distributors), Ann Arbor,Michigan, 1976.(**)
- NIGAM, A. K., PURI, P.D., GUPTA, V.K. Characterizations and analysis of block designs. Wiley Eastern Ltd, 1988.(**)

- OGAWA J. Statistical theory of the analysis of experimental designs. Dekker, New York 1974.(**)
- PAZMAN, A. Foundations of optimum Experimental Design. Reidel, Dordrecht, 1986.(***)
- PEARCE, S. C. The Agricultural field Experiment : A Statistical Examination of Theory and Practice. John Wiley & Sons, New York, 1983.(S)
- PEARCE, S.C., CLARKE, G.M., DYKF, G.V., KEMPSON, R.E. Manual of Crop Experimentation. Charles Griffin & Company, London, Oxford University Press, New York, 1988.(S)
- POCOCK, S.J. Clinical Trials. A practical approach. Chichester Wiley, 1983.(S)
- PUKELSHEIM, F. Optimal Experimental Design. Wiley, New York, 1993.(***)
- RAKTOE, B.L., HEDAYAT, A., FEDERER, W.T. Factorial Designs. J. Wiley & Sons, New York, 1981.(**)
- RASCH, D., HERRENDORFER, G. Experimental Design - Sample Size Determination and Block Designs. Reidel Publ. Co. Dordrecht, Boston, Lancaster, Tokyo, 1986.(**)
- RATKOWSKY David A., EVANS Marc A., ALLDREDGE J. Richard. Cross-over experiments design, analysis, and application, Volume 135. Marcel Dekker, Inc. 1993.(S)
- RAY-CHAUDHURI D. Coding theory and design theory part 1, Vol. 20. Springer-Verlag, Berlin,1990.(***)
- RAY-CHAUDHURI D. Edit. Coding theory and design theory part 2, Vol. 21 Springer-Verlag, Berlin, 1990.(***)
- ROY, R. K. A Primer on the Taguchi Method. Van Norstrand, Reinhold, New York, 1990.(*)
- SANTNER T.J., TAMHANE A.C. Design of experiments. Marcel Dekker, New York ,1984(*)
- SEARLE, S. R. Linear Models. Wiley, New York, 1971.(**)
- SEARLE, S. R. Linear Models for Unbalanced Data. Wiley, New York, 1987.(***)
- SENN S. Cross-over in Clinical research. Wiley, New York, 1993.(S)
- SHAH, K. R., SINHA, B. K. Theory of Optimal Designs. Springer-Verlag (Lecture Notes in Statistics 54), Berlin, 1989.(***)
- SILVEY, S. D. Optimal Design, Chapman and Hall, Londres, 1980.(***)
- SRIVASTAVA J. N (Edit.). Combinatorial mathematics optimal designs and their applications. North-Holland, Amsterdam, 1980.(***)
- STREET,A.P and STREET,D. J. Combinatorics of Experimental Design. Clarendon Press, Oxford, 1987(***)
- TAGUCHI, G. System of Experimental Design, Vol. 1 & 2. Unipub, New York, 1987.(*)
- WALD, A. Sequential Analysis. John Wiley & Sons, New York, 1947.
- WALLIS W.D. Combinatorial designs. Marcel Dekker, New York 1988.(***)
- WHITEHEAD, J. The desin and analysis of .sequential clinical trials. Ellis Harwood, Chichester, 1982.(S)
- WINER, B. J. Statistical Principles in Experimental Design. Mc Graw Hill Book Co., New York, 1962.(**)

YATES, F. Experimental Desin. Selected Papers., Hafner Publishing Co., Darien Connecticut, 1970(**).

Annexe B

Sous-programme Torsney (plan continu) et programme Moptex (suite de plans D -optimaux discrets)

```

/*****/;
/*****/;
/*****/;
/* */;
/*          TORSNEY.SAS          */;
/*          */;
/*          SOUS-PROGRAMME SAS/IML          */;
/*          */;
/*****/;
/*****/;
/*****/;
/*          */;
/*          OBJECTIFS DU SOUS-PROGRAMME :          */;
/*          -----          */;
/* Calcul de plans d'expériences D-optimaux continus pour modèles */;
/* linéaires ou non linéaires par l'algorithme de Torsney          */;
/*          */;
/*****/;
/* Auteur : Jean-Pierre Gauchi / INRA / MIA Jouy          */;
/* Date de création : septembre 1995          */;
/* Date de la dernière modification : juin 2009          */;
/*****/;

```

```

start torsney
(termc,X,nbf,reseau,epscaff,maxiter,imprim,stock,
evoldet,detmax,design);

```

```

/*----- */;
/* entrées:          */;
/* -----          */;
/* termc: variable flag          */;
/*   = 0 ---> pas de terme constant dans le modèle          */;
/*   = 1 ---> terme constant dans le modèle          */;
/*          */;
/* X : ---> dans le cas linéaire X est la matrice du          */;
/*          modèle, où ses valeurs sont des niveaux          */;
/*          des variables explicatives du modèle          */;
/*          ---> dans le cas non linéaire X est la matrice          */;
/*          jacobienne du modèle          */;
/*          */;
/* nbf : ---> nombre de facteurs dans la matrice de modèle          */;
/*          (cas linéaire)          */;
/*          */;
/* reseau : ---> dans le cas linéaire reseau=X          */;
/*          ---> dans le cas non linéaire reseau= la matrice          */;
/*          des variables explicatives du modèle          */;
/*          */;
/* epscaff : écart minimal entre la ft de variance et p pour          */;
/*          stopper les itérations          */;
/*          CONSEIL:          */;
/*          Choisir dans le MAIN une valeur sur la plage          */;
/*          10^-5 à 10^-12          */;
/*          */;
/* epscaff : seuil sur les masses pour l'affichage final          */;
/*          CONSEIL:          */;
/*          Choisir dans le MAIN une valeur sur la plage          */;
/*          10^-3 à 10^-8          */;
/*          */;
/* maxiter : nombre maximum d'itérations autorisé          */;
/*          CONSEIL: tester d'abord peu d'itérations 100 par          */;
/*          exemple, puis augmenter dans un deuxième temps          */;

```

```

/*                                                    */;
/* imprim : variable flag                               */;
/*      = 0 ---> pas d'impression écran de résultats  */;
/*      dans ce sous-programme                         */;
/*      = 1 ---> impression écran de résultats dans ce */;
/*      sous-programme                                 */;
/*                                                    */;
/* stock : variable flag                               */;
/*      = 0 ---> pas de stockage de résultats dans ce  */;
/*      sous-programme                                 */;
/*      = 1 ---> stockage de résultats dans ce sous-programme */;
/*----- */;

/*----- */;
/* sorties:                                           */;
/* -----                                           */;
/* evoldet : matrice dont le nombre de lignes est égal au */;
/*      nombre d'itérations, et à deux colonnes      */;
/*      en colonne 1 on trouve le numéro de l'itération */;
/*      en colonne 2 on trouve la valeur du déterminant */;
/*                                                    */;
/* detmax : valeur maximum du déterminant             */;
/*                                                    */;
/* design : matrice des mesures de proba, des valeurs de la */;
/*      fonction de variance et des variables explicati- */;
/*      ves en chacun des points du reseau            */;
/*----- */;

/*----- */;
/* aff  : pourcentage d'itérations finales à afficher  */;
/*      aff=10;                                         */;
/*----- */;

/*----- INITIALISATIONS ----- */;
nx=nrow(X); px=ncol(X);

pi=j(nx,1,1/nx); dx=j(nx,1,0); evoldet=j(maxiter,3,0);
num=j(nx,1,0); jconst=j(nx,1,1);

if termc=1 then do; X=jconst||X; px=px+1; end;

i=1;
do while (i<=nx); num[i]=i; i=i+1; end;

arret=0 ; iter=1;

dummy=1/(nx+(0.05*nx));
if epscal > dummy then epscal=dummy;

/*----- */;

/*----- */;
/* début de la boucle des itérations                */;

do while (iter <= maxiter & arret=0);

arret=1;
evoldet[iter,1]=iter;

```

```

    Minf=j(px,px,0);

    i=1;
    do while (i<=nx);
    if pi[i]>0 then
    do;
        Minf=Minf+t(X[i,])*X[i,]*pi[i];
    end;
        i=i+1;
    end;

    deter=det(Minf);
    evoldet[iter,2]=deter;
    if deter > 0 then evoldet[iter,3]=log(deter);
    else evoldet[iter,3]=0;

    if deter < 10.e-70 then invm=ginv(Minf);
    else invm=inv(Minf);

    i=1;
    do while (i<=nx);
    if pi[i]>0 then
    do;
        dx[i]=X[i,]*invm*t(X[i,]);
        pi[i]=pi[i]*dx[i]/px;
    end;
        if pi[i] < epscal then pi[i]=0;
        if pi[i] > 0 & abs(dx[i]-px)> epscal then arret=0;
        i=i+1;
    end;

        iter=iter+1;

    end;

/* fin de la boucle des itérations */;
/*----- */;

    iter=iter-1;
    detmax=det(Minf);
    evoldet=evoldet[1:iter,];
    if termc=0 then resfac=reseau[,1:nbf];
    if termc=1 then resfac=reseau[,2:nbf+1];

    design=num||dx||pi||resfac;

/*----- */;
    if imprim=1 then
    do;
        print iter; print epscal; print nx;

        print "-----";
        print "Nombre d'itérations / Déterminant / Logdet : ";

    if iter > 10 then
    do;
        dummy=iter-int((aff/100)*iter);
        dummy=dummy+1;
    end;
    else dummy=1;

```

```

    evol=evoldet[dumy:iter,];
        print evol;
    print "-----";

ll=0;
nz=ncol(design);
impdes=j(1,nz,0);

do i=1 to nx;
    if design[i,3] > epsaff then impdes=impdes//design[i,];
    end;

nl=nrow(impdes);
if nl >1 then impdes=impdes[2:nl,];
print impdes;
if nl > 1 then nl=nl-1;
print nl;
print epsaff;

    dumy=impdes[,3];
    somp=sum(dumy);
    print somp;
    print "-----";

        end;
/*-----*/;

/*-----*/;
if stock=1 then
do;
    create sdet from evoldet ; append from evoldet ;close sdet;
    if imprim=0 then
    do;
        create sdesign from design;append from design;close sdesign;
    end;
    if imprim=1 then
    do;
        create sdesign from impdes; append from impdes;close sdesign;
    end;

    end;
/*-----*/;

    finish torsney;
/*****/;

/***** PROGRAMME MOPTEX2.SAS *****/;
/*
*/;
/* Auteur : JP Gauchi
*/;
/* Date de création : Avril 1991
*/;

```

```

/* Modification : Mars 2006
*/;
/*-----*/;
/* Objectif :
*/;
/* Programme de recherche de plans d'experiences D-optimaux discrets
*/;
/* basé sur la procédure OPTEX du logiciel SAS/QC avec l'algorithme de
*/;
/* Fedorov (echange double).
*/;
/* Le programme ci-dessous est présenté avec exemples.
*/;
/* Les options possibles sont :
*/;
/*          - analyse du réseau candidat et de l'ensemble protégé,
*/;
/*          - étude avec et sans points protégés,
*/;
/*          - graphiques superposés.
*/;
/*
*/;
/*-----*/;
;
options linesize=80 pagesize=80;
;
/*****/;
/* exemple 1 : recherche de plans D-optimaux dans un plan factoriel 2^5
*/;
data init1;input nc p;
datalines;
32 5
;
proc print data=init1;
;
/* Construction d'un réseau candidat ncxp avec PROC FACTEX
*/;
proc factex;
    factors x1-x5 / nlev=2;
    output out=cand1;
;
/*****/;
;
proc print data=cand1;
data resu1; input detb detn effd;datalines;
0 0 0
;
;
/*----- */;
/* PARTIE I : ETUDE SANS POINTS PROTEGES */;
/*----- */;

/* I.1. Analyse du réseau candidat */ ;

proc iml;
nlin=0;
use cand1; read all into mat1;
use init1; read all into init2;
nc=init2[1];p=init2[2];
;

/* ici construction éventuelle de termes supplément. dans le modèle */;

```



```

mcor=corr(mat1);
mvif=inv(mcor); fvif=j(p,1,0);
do i=1 to p;fvif[i]=mvif[i,i];end;
moy=fvif[+,]/p;
print mcor;print fvif; print moy;
;

/*concaténation d'un vecteur de uns si terme constant dans le modèle*/;

x0=j(nc,1,1);mat2=x0||mat1;p=p+1;
inf=t(mat2)*mat2;detb=det(inf);

detmax=1; /* donné par la procédure TORSNEY */;
detn=detb/(nc**p);effd=((detn/detmax)**(1/p))*100;

total=detb||detn||effd;
create candid1 from total;append from total;close candid1;

/* création d'un vecteur de numérotation des expériences candidates */;
/* puis concaténation. */;

num=j(nc,1,0); do i=1 to nc; num[i]=i ;end;
fich=num||mat1;
create candi2 from fich;append from fich;close candi2;
create init3 from p;append from p;close init3;
create deter1 from detmax;append from detmax;close deter1;

quit;run;quit;
;
data candi3;set candi2(rename=(col1=num col2=x1 col3=x2 col4=x3 col5=x4
col6=x5));

/* I.2. Recherche des plans D-optimaux de taille n0=p jusqu'à nc. */;

;
%macro opti(first=1,last=1);
%local i;
%do i=&first %to &last;
proc optex nocode data=candi3 seed=%eval(17+&i);
examine;
generate n=&i method=federov;
model x1-x5;
id num;
output out=plan&i;
proc print data=plan&i;var num x1-x5;
proc corr data=plan&i noprob nosimple;
;
proc iml;
use init3; read all into init4; p=init4;
use plan&i;
read all into mat1&i;
mat1&i=mat1&i[,1:p-1];
x0&i=j(&i,1,1);mat2&i=x0&i||mat1&i;
inf&i=(t(mat2&i))*mat2&i;
detb&i=det(inf&i);detn&i=detb&i/(&i**p);
use deter1; read all into deter2; detmax=deter2;
effd&i=((detn&i/detmax)**(1/p))*100;
print detb&i;
create mat3&i from detb&i;append from detb&i;close mat3&i;

```

```

        create mat4&i from detn&i;append from detn&i;close mat4&i;
        create mat5&i from effd&i ;append from effd&i ;close mat5&i;
quit;
;
data fin1&i;set mat3&i;rename coll=detb ;
data fin2&i;set mat4&i;rename coll=detn ;
data fin3&i;set mat5&i;rename coll=effd ;
data fint&i;merge fin1&i fin2&i fin3&i;
;
proc print data=fint&i;
proc append base=resul1 data=fint&i;
%end;
run;
%mend opti;
%opti(first=6,last=32);
run;
;
data candid2 ; set candid1(rename=(coll=detbrut col2=detnorm col3=effd));
proc print data=candid2;

run;

proc iml;
use resul1; read all into resul2;
nl=nrow(resul2); nc=ncol(resul2);
resul2=resul2[2:nl,];
use init1; read all into init2;p=init2[2];
nl=nrow(resul2);
num=j(nl,1,0); do i=1 to nl; num[i]=i+p; end;
dbnp=resul2[,1];dnp=resul2[,2];enp=resul2[,3];

acrb=j(nl,1,0);ll=0;
do i=1 to nl-1;ll=ll+1 ;
    acrb[ll+1]=((resul2[i+1,1]-resul2[i,1])/resul2[i,1])*100;
end;
dessin1=num||dbnp||dnp||enp||acrb;
create dessin2 from dessin1;append from dessin1;close dessin2;

quit;run;quit;

data dessin3;set dessin2(rename=(coll=nexp col2=detb col3=detn
col4=effd col5=accdetb));
proc print data=dessin3;
run;

;
/*-----*/ ;
/* PARTIE II : ETUDE AVEC POINTS PROTEGES */ ;
/*-----*/ ;

/* II.1. Construction de l'ensemble des expériences protégées */ ;

/** exemple 1 ***/;
data prot1;
input x1 x2 x3 x4 x5; datalines;
-1 1 -1 1 -1
1 -1 1 -1 1
1 1 -1 1 1
-1 1 1 -1 -1

```

```

-1 -1 -1 -1 1
 1  1  1 -1 -1
-1 -1  1  1  1
-1  1  1 -1  1
;
data init5;input npp p;datalines;
8 5
;
/*****/;
data resul3; input detb detn effd;datalines;
0 0 0
;
proc print data=init5;
proc print data=prot1;
run;

/* II.2. Analyse de l'ensemble protégé */ ;

proc iml;
use prot1; read all into mat1;
use init5; read all into init6;
npp=init6[1];p=init6[2];
;

/* ici construction éventuelle de termes supplément. dans le modèle */;

mcor=corr(mat1);
mvif=inv(mcor); fvif=j(p,1,0);
do i=1 to p;fvif[i]=mvif[i,i];end;
moy=fvif[+,]/p;
print mcor;print fvif; print moy;
;
/* concaténation d'un vecteur de uns si terme constant */;
/* dans le modèle */;
;
x0=j(npp,1,1);mat2=x0||mat1;p=p+1;
inf=t(mat2)*mat2;detb=det(inf);
detmax=1; /* donné par la procédure TORSNEY */;
detn=detb/(npp**p);effd=((detn/detmax)**(1/p))*100;
total=detb||detn||effd;
create candid3 from total;append from total;close candid3;
;

/*création d'un vecteur de numérotation des exp. candidates */;
/* puis concaténation. */;
;
num=j(npp,1,0); do i=1 to npp; num[i]=i ;end;
fich=num||mat1;
create prot2 from fich;append from fich;close prot2;
create init7 from p;append from p;close init7;
create deter3 from detmax;append from detmax;close deter3;

quit;run;quit;
;
data prot3;set prot2(rename=(col1=num col2=x1 col3=x2 col4=x3 col5=x4
col6=x5));

/* II.3. Recherche des plans D-optimaux de taille npp+1 à nc-1.*/ ;

%macro opti(first=1,last=1);
%local i;
%do i=%first %to %last;
proc optex nocode data=candi3;

```

```

        examine;
        generate augment=prot3 n=&i method=federov;
model x1-x5;
id num;
    output out=plan&i;
    proc print data=plan&i;var num x1-x5;
    proc corr data=plan&i noprob nosimple;
;
proc iml;
    use init7; read all into init8; p=init8;
    use plan&i;
    read all into mat1&i;mat1&i=mat1&i[,1:p-1];
    x0&i=j(&i,1,1);mat2&i=x0&i||mat1&i;
    inf&i=(t(mat2&i))*mat2&i;
    detb&i=det(inf&i);detn&i=detb&i/(&i**p);
    use deter3; read all into deter4; detmax=deter4;
    effd&i=((detn&i/detmax)**(1/p))*100;
    print detb&i;
    create mat3&i from detb&i;append from detb&i;close mat3&i;
    create mat4&i from detn&i;append from detn&i;close mat4&i;
    create mat5&i from effd&i ;append from effd&i ;close mat5&i;
quit;
;
    data fin1&i;set mat3&i;rename coll=detb ;
    data fin2&i;set mat4&i;rename coll=detn ;
    data fin3&i;set mat5&i;rename coll=effd ;
    data fint&i;merge fin1&i fin2&i fin3&i;
;
    proc print data=fint&i;
    proc append base=resul3 data=fint&i;
%end;
run;
%mend opti;
%opti(first=9,last=32);
run;
;
data candid4 ; set candid3(rename=(coll=detbrut col2=detnorm col3=effd));
proc print data=candid4;

run;

proc iml;
use resul3; read all into resul4;
nl=nrow(resul4); nc=ncol(resul4);
resul4=resul4[2:nl,];
use init5; read all into init6;npp=init6[1];p=init6[2];
nl=nrow(resul4);
num=j(nl,1,0); do i=1 to nl; num[i]=i+npp; end;
dbnp=resul4[,1];dnp=resul4[,2];enp=resul4[,3];

acrb=j(nl,1,0);ll=0;
do i=1 to nl-1;ll=ll+1 ;
    acrb[ll+1]=((resul4[i+1,1]-resul4[i,1])/resul4[i,1])*100;
end;
dessin1=num||dbnp||dnp||enp||acrb;
create dessin4 from dessin1;append from dessin1;close dessin4;

quit;run;quit;

data dessin5;set dessin4(rename=(coll=nexp col2=detb col3=detn
col4=effd col5=accdetb));
proc print data=dessin5;

```

```

run;

;
/*-----*/;
/*
*/;
/* GRAPHIQUES D'EVOLUTION
*/;
/*
*/;
/*-----*/;
;
goptions nodisplay device=win reset=global gunit=pct border reset=axis
        ftext=duplex htitle=4 htext=3;
;
symbol1 c=black interpol=join v=dot height=3;
axis1 label=('Nombre experiences du plan');
;
proc gplot data=dessin3 gout=work.g ;
plot detb*nexp/ name='graph1';
plot detn*nexp/ name='graph2';
plot effd*nexp/ name='graph3';
plot accdetb*nexp/ name='graph4';
run;
quit;

goptions display;
proc greplay nofs gout=work.g;
igout=work.g;
tc sasuser.templ;
template g4;
tplay 1:graph1 2:graph2 3:graph3 4:graph4;
run;
quit;run;

proc gplot data=dessin5 gout=work.g ;
plot detb*nexp/ name='graph5';
plot detn*nexp/ name='graph6';
plot effd*nexp/ name='graph7';
plot accdetb*nexp/ name='graph8';
run;
quit;run;
proc greplay nofs gout=work.g;
igout=work.g;
tc sasuser.templ;
template g4;
tplay 1:graph5 2:graph6 3:graph7 4:graph8;
run;
quit;run;

/***** code de la template g4 *****/;
/*
options linesize=85 pagesize=1000;
proc greplay nofs ;
tc sasuser.templ;
tdef g4 des='4 boxes with space'
1/ llx=10 lly=53
   ulx=10 uly=96
   urx=50 ury=96
   lrx=50 lry=53
   color=black
2/ llx=50 lly=53
   ulx=50 uly=96

```

```
        urx=90  ury=96
        lrx=90  lry=53
        color=black
3/  llx=10  lly=10
    ulx=10  uly=53
    urx=50  ury=53
    lrx=50  lry=10
    color=black
4/  llx=50  lly=10
    ulx=50  uly=53
    urx=90  ury=53
    lrx=90  lry=10
    color=black ;
end;
run;quit;run;
/*****/;
```