METHODOLOGIE

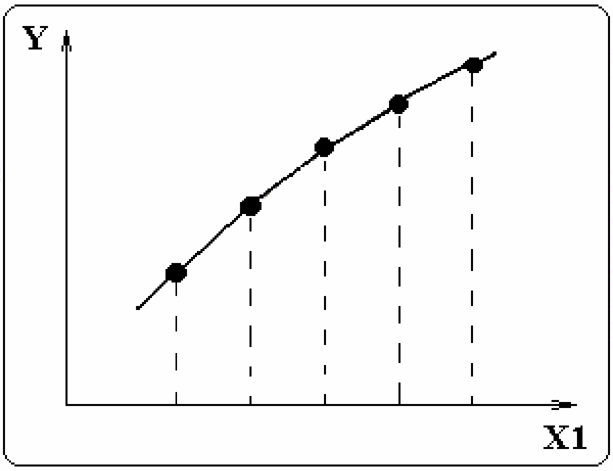
DES PLANS D'EXPERIENCES

PLANS FACTORIELS COMPLETS

Alain LAMURE

INTRODUCTION AUX PLANS D'EXPERIENCES
INTERET DES PEX : STRATEGIE D'EXPERIMENTATION CLASSIQUE

π **Stratégie classique**



Mesure = réponse y pour plusieurs valeurs d'1 variable x_1, **valeurs autres variables** fixes. Fin expérimentation, courbe $y = f(x_1)$.

Pour étude 7 facteurs avec 5 points expérimentaux par variable $\Rightarrow 5^7 = 78\ 125$ essais.

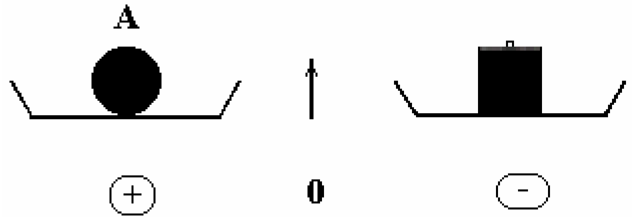
π **Pour réduire nombre d'essais, on peut :**

- soit diminuer nombre de points expérimentaux (3 points $\Rightarrow 3^7 = 2\ 187$ expériences et 2 points $\Rightarrow 2^7 = 128$ expériences),

- soit diminuer nombre de variables $\Rightarrow$ doute sur valeur des résultats.

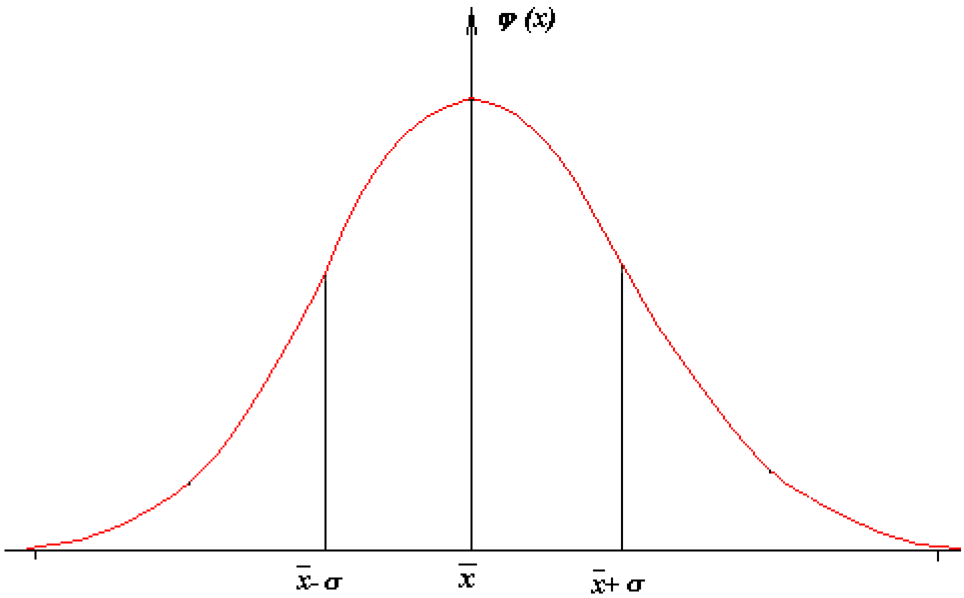
Exemple *:* **Pesée de 4 objets (A, B, C, D) avec balance à plateaux :**
pesée objet par objet : ex. A à gauche, masse m_A à droite puis B et m_B, puis C et m_C, et enfin D et m_D.

N° essai	*A*	*B*	*C*	*D*	*Réponse*
1	*+1*	*0*	*0*	*0*	m_A
2	*0*	*+1*	*0*	*0*	m_B
3	*0*	*0*	*+1*	*0*	m_C
4	*0*	*0*	*0*	*+1*	m_D



SI ERREUR DE MESURE SUR LES PESEES EST UNIFORME ET = σ, EXPERIMENTATEUR AURA FAIT 4 MESURES AVEC UNE ERREUR DE ± σ.

π **Distribution normale** : courbe représentative = courbe de Gauss variable aléatoire x distribuée normalement avec **moyenne =** $\bar{x}$**, écart type =** σ et **Variance** : $V = \sigma^2$



π **Théorème des variances** : variables aléatoires $x_1, x_2, \dots x_n$ indépendantes + relation $y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n$.

⇒ Variance de y~ $V(y\sim) = 0 + a_1^2V(x_1) + a_2^2V(x_2) + \dots + a_n^2V(x_n)$

Exemple : $\bar{x}$ = moyenne de n valeurs de x_i $\quad \bar{x} = 1/n\,[x_1 + x_2 + \dots + x_n]$

⇒ $V(\bar{x}) = 1/n^2\,[V(x_1) + V(x_2) + \dots + V(x_n)]$

Si variances égales entre elles : $V(x_1) = V(x_2) = \dots = V(x_n) = \sigma_x^2$

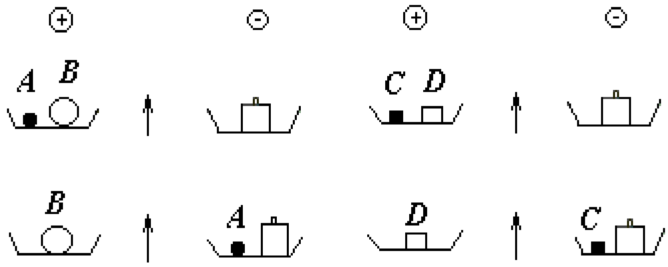
⇒ $V(\bar{x}) = 1/n\,\sigma_x^2$ d'où $\boxed{\sigma(\bar{x}) = \sigma_x/\sqrt{n}}$

π **ERREUR SUR LA MOYENNE = ERREUR SUR UNE MESURE DIVISEE PAR RACINE CARRREE DE** n**.**

INTRODUCTION AUX PLANS D'EXPERIENCES
INTERET DES PEX : STRATEGIES D'EXPERIMENTATION

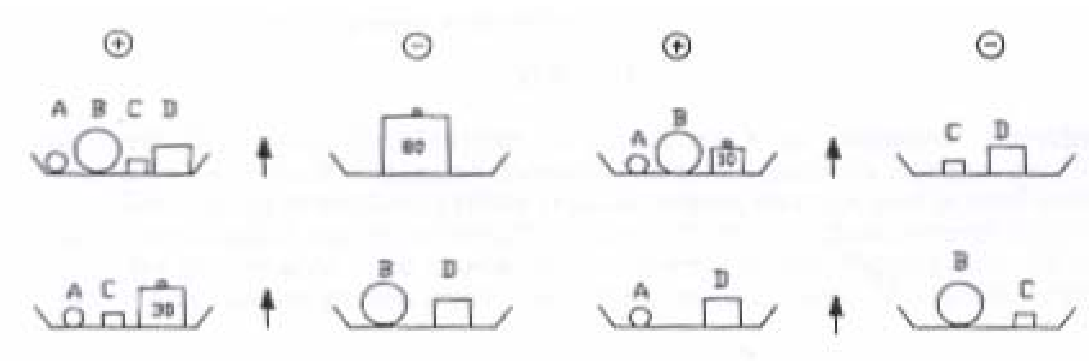
<u>Stratégie quelconque</u> : A et B à gauche pour 1ère pesée, puis A à droite et B à gauche, puis C et D à gauche et enfin C à droite et D à gauche. Si erreur de mesure sur pesées uniforme et = σ, expérimentateur aura fait 4 mesures avec erreur de $\pm \sigma/\sqrt{2}$.

N° essai	*A*	*B*	*C*	*D*	*Réponse*
5	*+1*	*+1*	*0*	*0*	$m_A + m_B$
6	*-1*	*+1*	*0*	*0*	$-m_A + m_B$
7	*0*	*0*	*+1*	*+1*	$m_C + m_D$
8	*0*	*0*	*-1*	*+1*	$-m_C + m_D$



<u>Stratégie PEX</u> : pesée simultanée de tous les objets.
Ex. 4 objets à gauche pour 1ère pesée, A et C à gauche et B et D à droite pour 2ème pesée, A et B à gauche et C et D à droite pour 3ème pesée et A et D à gauche et B et C à droite pour 4ème pesée. Si erreur de mesure sur pesées uniforme et = σ ⇒ 4 mesures avec erreur de ± σ/2 .

N° essai	*A*	*B*	*C*	*D*	*Réponse*
9	*+1*	*+1*	*+1*	*+1*	$m_A + m_B + m_C + m_D$
10	*+1*	*-1*	*+1*	*-1*	$m_A - m_B + m_C - m_D$
11	*+1*	*+1*	*-1*	*-1*	$m_A + m_B - m_C - m_D$
12	*+1*	*-1*	*-1*	*+1*	$m_A - m_B - m_C + m_D$



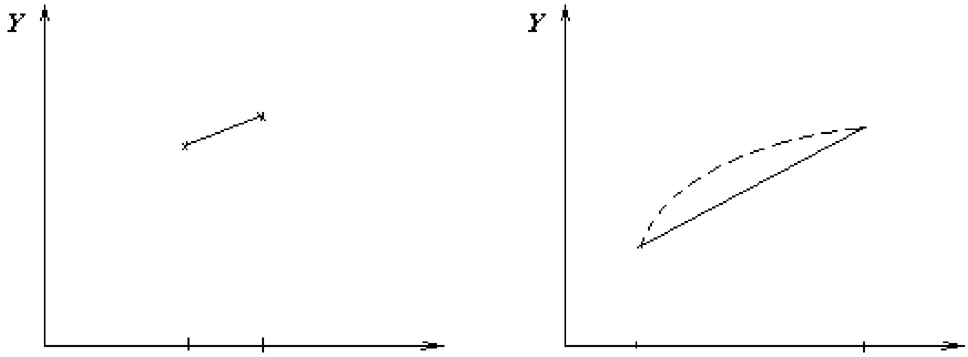
STRATEGIE DES PEX PERMET DE REDUIRE ERREUR A SA VALEUR LA PLUS FAIBLE POSSIBLE.

CONSTRUCTION DES PLANS D'EXPERIENCES
GENERALITES : CHOIX ET MODALITES DES FACTEURS

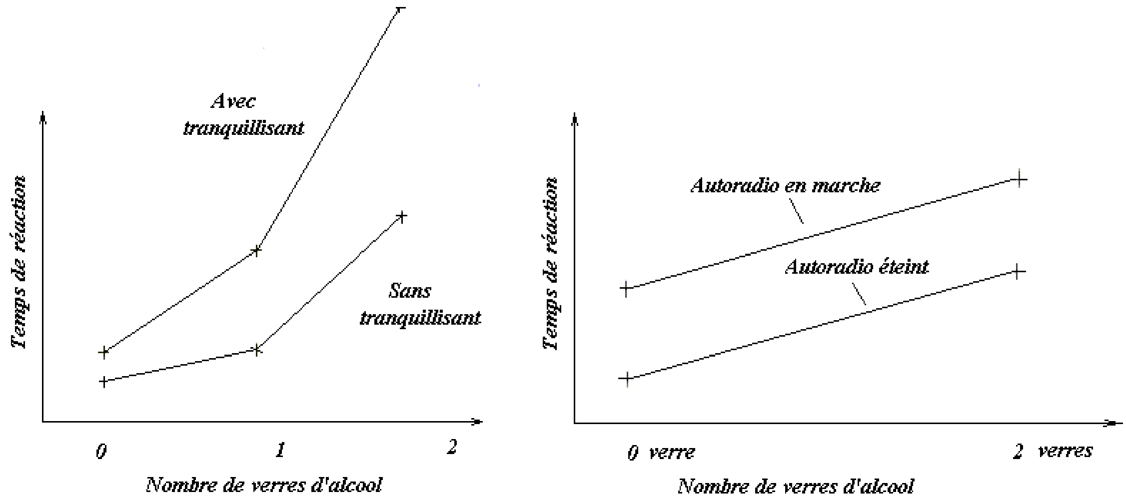
Choix des facteurs :

	en réalité	*au cours expérimentation*
Facteurs principaux	*Existent*	*Maîtrisés*
Facteurs bloc	*n'existent pas*	*Existent du fait conditions expérimentales*
Facteurs bruit	*subis*	

Modalités des facteurs : facteurs qualitatifs ou quantitatifs (nombre de niveaux = 2 pour raison économique, 3 si non linéarités supposées ou 5 au maximum). **NE PAS PRENDRE DES NIVEAUX TROP RAPPROCHES (PRECISION), NI TROP ELOIGNES (NON LINEARITE).**



Pressentir les interactions . 2 facteurs interagissent si effet de l'un dépend de la modalité prise par l'autre. *Exemple* **:** temps de réaction au freinage en fonction taux alcoolémie et absorption d'un tranquillisant.



CONSTRUCTION DES PLANS D'EXPERIENCES
GENERALITES : VARIABLES CODEES ET PLANS DE CRIBLAGE

Variables naturelles U_i évoluent sur échelles souvent différentes

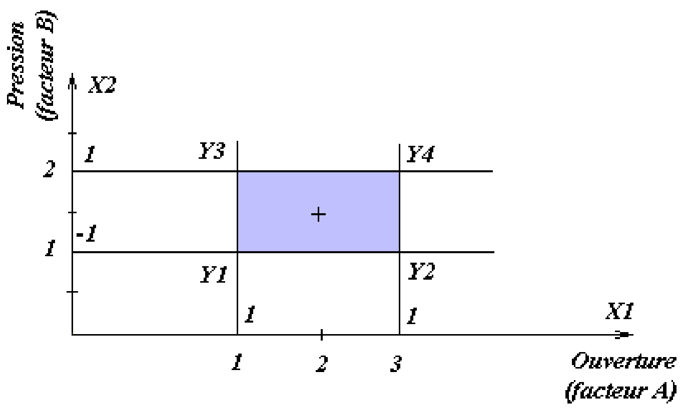
Centre d'intérêt U_i^0 = point particulier $\in$ intérieur domaine expérimental. **Variables codées** (ou centrées réduites) X_i se déduisent des variables naturelles, par "centrage" + "réduction"

$$U_i = U_i^0 + X_i \, \Delta U_i \Leftrightarrow X_i = \frac{U_i - U_i^0}{\Delta U_i} \text{ avec } \Delta U_i \text{ pas de variation.}$$

Exemple : Fonctionnement d'un pistolet à peinture. Réponse = couleur : échelle 0 (noir) $\rightarrow$ 60 (jaune or) qui dépend a priori de 2 facteurs : ouverture du pistolet (facteur 1) et P (facteur 2).

Domaine expérimental = limites de variation des facteurs.

Facteurs	*Ouverture U_1*	*Pression U_2*	*X_1*	*X_2*
minimum	*1 cran*	*1 bar*	*-1*	*-1*
maximum	*3 crans*	*2 bars*	*+1*	*+1*
centre	*2 crans*	*1,5 bar*	*0*	*0*



Classement des PEX en plans de criblage, de modélisation ou de mélange.

Plans de criblage : but = découvrir les facteurs les plus influents sur une réponse donnée en un minimum d'expériences.

Plans de modélisation : relation mathématique lie réponses mesurées aux variables associées aux facteurs.

Plans factoriels complets 2^k: 2 niveaux par facteur $\Rightarrow$ modèle du 1er degré exemple pour 2 facteurs avec interactions $\mathbf{y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2}$

Plans pour surfaces de réponse : au moins 3 niveaux par facteurs $\Rightarrow$ modèles du 2nd degré.

Plans de mélange : = plans adaptés aux facteurs avec contraintes

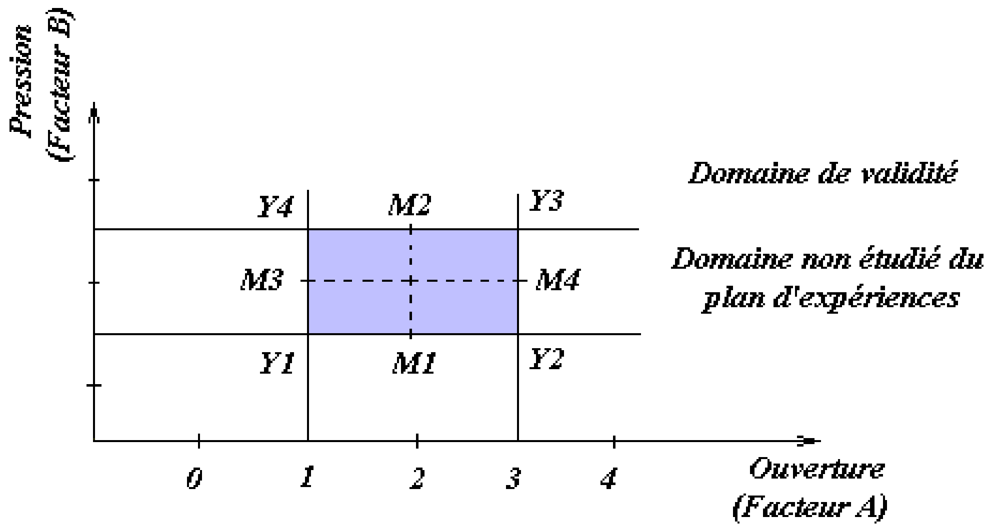
CONSTRUCTION DES PLANS D'EXPERIENCES
PLANS FACTORIELS COMPLETS : PLAN COMPLET A 2 FACTEURS 2^2

Exemple : Fonctionnement d'un pistolet à peinture.

Facteurs	*Mini*	*Maxi*
1 - Ouverture	*1 cran*	*3 crans*
2 - Pression	*1 bar*	*2 bars*

Choix des points expérimentaux : Méthode classique : M_1, M_2, M_3 et M_4, PEX : sommets du rectangle : Y_1, Y_2, Y_3, Y_4

2 points par variables ⇒ loi du 1^er degré $\mathbf{y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2}$



Notation de Yates (niveau bas = – 1 et niveau haut = + 1)

n° essai	*point*	*Facteur 1 (ouverture)*	*Facteur 2 (pression)*	*Réponse (couleur)*
1	Y_1	*-1*	*-1*	*15*
2	Y_2	*+1*	*-1*	*20*
3	Y_3	*-1*	*+1*	*25*
4	Y_4	*+1*	*+1*	*30*

Méthode analytique : système 4 équations à 4 inconnues :

$y_{1\sim} = a_0 - a_1 - a_2 + a_{12}$ ⇒ $a_0 = \frac{1}{4}(y_{1\sim} + y_{2\sim} + y_{3\sim} + y_{4\sim}) = 22{,}5$

$y_{2\sim} = a_0 + a_1 - a_2 - a_{12}$ ⇒ $a_1 = \frac{1}{4}(-y_{1\sim} + y_{2\sim} - y_{3\sim} + y_{4\sim}) = 2{,}5$

$y_{3\sim} = a_0 - a_1 + a_2 - a_{12}$ ⇒ $a_2 = \frac{1}{4}(-y_{1\sim} - y_{2\sim} + y_{3\sim} + y_{4\sim}) = 5$

$y_{4\sim} = a_0 + a_1 + a_2 + a_{12}$ ⇒ $a_{12} = \frac{1}{4}(y_{1\sim} - y_{2\sim} - y_{3\sim} + y_{4\sim}) = 0$

⇒ Modèle **y~ =** $22{,}5 + 2{,}5x_1 + 5x_2 + 0\,x_1x_2$

$\mathbf{a_0}$ = valeur réponse au centre du domaine = moyenne des réponses.

$\mathbf{a_1}$ = **effet du facteur 1,** $\mathbf{a_2}$ = **effet du facteur 2**.

$\mathbf{a_{12}}$ **= mesure interaction entre les 2 facteurs**

Exemple : Rendement d'une réaction catalysée

Facteurs influents = T du bain et P. Domaine d'étude : T(°C) ε[60, 80] et P(bar) ε [1, 2]. Points expérimentaux : A (60, 1), B (80, 1), C (60, 2) et D (80, 2). Réponse = masse produit synthétisé au cours réaction chimique.

n°essai	*Moyenne*	*Facteur 1*	*Facteur 2*	*Interaction 12*		*Réponse (g)*
1	*+1*	*-1*	*-1*	*+1*		$y_1 = 60$
2	*+1*	*+1*	*-1*	*-1*		$y_2 = 70$
3	*+1*	*-1*	*+1*	*-1*		$y_3 = 80$
4	*+1*	*+1*	*+1*	*+1*		$y_4 = 95$

Méthode analytique : $a_i = ¼\,(\pm y_1\sim \pm y_2\sim \pm y_3\sim \pm y_4\sim)$.

En A (-1, -1) : $y_1 = a_0 - a_1 - a_2 + a_{12}$, en B (+1,-1) : $y_2 = a_0 + a_1 - a_2 - a_{12}$
en C (-1,+1) : $y_3 = a_0 - a_1 + a_2 - a_{12}$ et D (+1,+1) : $y_4 = a_0 + a_1 + a_2 + a_{12}$
Si modèle valide, réponse dans tout le domaine expérimental s'écrit :

$$\mathbf{y\sim = 76{,}25 + 6{,}25\, x_1 + 11{,}25\, x_2 + 1{,}25\, x_1x_2.}$$

Méthode matricielle : soient y = vecteur-réponse, a = vecteur-effet et y = Xa (X = matrice de calcul des effets**).**

$$y = \begin{vmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{vmatrix} \qquad a = \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{vmatrix} \qquad \begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} \mathbf{I} & \mathbf{x_1} & \mathbf{x_2} & \mathbf{x_1x_2} \end{array} \\ X = & \begin{vmatrix} +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 \end{vmatrix} \end{array}$$

- Colonne 1 associée au modèle, colonnes 2 et 3 aux coordonnées points expérimentaux (en v.c.r.) et 4 au produit x_1 par x_2 (**ne résulte pas de a_{12}**).
- Somme termes colonne 4 = 0 ⇒ colonnes 2 et 3 orthogonales. Si tous les facteurs pris 2 à 2 sont orthogonaux, **plan** est **orthogonal** (situation "toutes choses variant également par ailleurs").
- Matrices orthogonales = matrices telles que $A^t = A^{-1}$. Pour PEX, matrices carrées = **matrices d'Hadamard** (éléments ± 1 et $A^tA = nI$ qui n'existent que pour n = 2 ou multiple de 4).
- Relation $\mathbf{A^t = nA^{-1} \Rightarrow A^{-1} = 1/n\, A^t}$ d'où $\mathbf{y = X\,a \Rightarrow a = X^{-1}\,y = 1/n\, X^t\,y}$. **Par méthode matricielle, toutes inconnues** (a_0, a_1, a_2 et a_{12}) **obtenues d'un seul coup.**

CONSTRUCTION DES PLANS D'EXPERIENCES
PLANS FACTORIELS COMPLETS: *IMPOSSIBILITES EXPERIMENTALES*

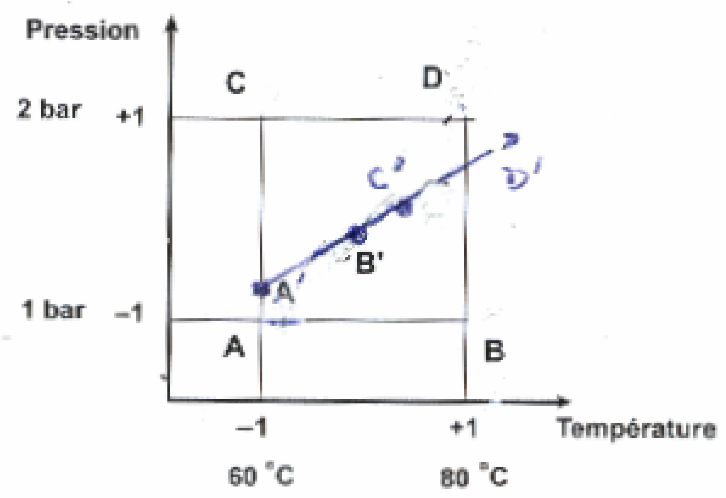
<u>Exemple réaction avec points expérimentaux "très mal placés"</u>

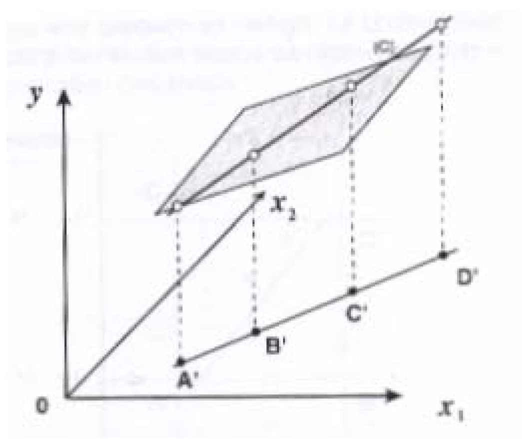
A'(60°C, 1,1 bar), B'(67,5°C, 1,4 bar), C'(76°C, 1,74 bar), D'(82°C, 1,98 bar)

N° essai	Moyenne	T	P	Interaction 12
1	+1	-1	-0,8	+0,8
2	+1	-0,25	-0,2	+0,05
3	+1	+0,6	+0,48	+0,288
4	+1	+1,2	+0,96	+1,152

Masse
$y_1 = 62$
$y_2 = 72,5$
$y_3 = 85,76$
$y_4 = 95,99$

colonne $X_2 = 0,8.X_1 \Rightarrow \det \mathbf{X} = 0 \Rightarrow y\sim = a_0 + (a_1 + 0,8a_2)x_1 + 0,8a_{12}\, x_1^2$





$$\begin{vmatrix} 62,00 \\ 72,50 \\ 85,76 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & -0,25 & +0,0625 \\ +1 & +0,6 & +0,36 \end{vmatrix} x \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 + 0,8a_2 \\ 0,8a_{12} \end{vmatrix} \Rightarrow \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 + 0,8a_2 \\ 0,8a_{12} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -0,125 & +0,9412 & +0,1838 \\ -0,2917 & -06275 & +0,9191 \\ +0,8333 & -1,5686 & +0,7353 \end{vmatrix} x \begin{vmatrix} 62,00 \\ 72,50 \\ 85,76 \end{vmatrix}$$

D'où $y\sim = 76,25 + 15,25\ x_1 + x_1^2$ **Au lieu d'avoir des courbes de surfaces d'isoréponses dans tout le domaine d'étude, on n'a plus qu'une droite**.

<u>Exemple réaction chimique avec technique "un facteur à la fois"</u>

A''(60°C, 1,5 bar), B''(80°C, 1,5 bar), C''(75°C, 1 bar) et D''(75°C, 2 bars).

N° essai	Moyenne	T	P	Interaction 12
5	+1	-1	0	0
6	+1	+1	0	0
7	+1	0	-1	0
8	+1	0	+1	0

Masse
$y_1 = 70$
$y_2 = 82,5$
$y_3 = 65$
$y_4 = 87,5$

Matrice **X** possède une colonne de 0 $\Rightarrow$ **calcul des 4 inconnues impossible. Technique à n'utiliser que** pour débroussailler un problème contenant beaucoup de facteurs et **si l'on suppose a priori qu'il n'y a pas d'interactions.**

<u>Exemple Etude d'une émulsion de bitume</u> : détermination de l'influence acide gras et acide chlorhydrique sur stabilité émulsion

3 Facteurs : 1/ acide gras (faible ou forte concentration), 2/ HCl (très ou peu dilué) et 3/ Nature du bitume (A ou B)⇒ **Plan 2^3**
Réponse = Indice stabilité émulsion (**erreur expérimentale sur mesure ± 2**)
Niveau chaque facteur = ±1 (en v. c. r.) ⇒ domaine expérimental = cube et points expérimentaux aux sommets du cube.

N°essai	Moyenne	F_1	F_2	F_3	I_{12}	I_{13}	I_{23}	I_{123}	Réponse y
1	+	-	-	-	+	+	+	-	38
2	+	+	-	-	-	-	+	+	37
3	+	-	+	-	-	+	-	+	26
4	+	+	+	-	+	-	-	-	24
5	+	-	-	+	+	-	-	+	30
6	+	+	-	+	-	+	-	-	28
7	+	-	+	+	-	-	+	-	19
8	+	+	+	+	+	+	+	+	16

Effets (interactions) obtenus par calcul matriciel **a** = 1/8 $\mathbf{X^t.y}$

$$\begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_{12} \\ a_{13} \\ a_{23} \\ a_{123} \end{vmatrix} = \frac{1}{8} \begin{vmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & -1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 & +1 & -1 & -1 & +1 \end{vmatrix} x \begin{vmatrix} 38 \\ 37 \\ 26 \\ 24 \\ 30 \\ 28 \\ 19 \\ 16 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 27{,}25 \\ -1 \\ -6 \\ -4 \\ -0{,}25 \\ -0{,}25 \\ -0{,}25 \\ 0 \end{vmatrix}$$

a_0	a_1	a_2	a_3	a_{12}	a_{13}	a_{23}	a_{123}
27,25	- 1	- 6	- 4	- 0,25	-0,25	-0,25	0

Modèle : $y\sim = 27{,}25 - x_1 - 6\,x_2 - 4\,x_3 - 0{,}25\,x_1x_2 - 0{,}25\,x_1x_3 - 0{,}25\,x_2x_3$

Analyse du plan : Facteurs importants = facteur 2 : dilution de HCl (à effet négatif) et facteur 3 : nature du bitume (meilleur = B).
Aucune interaction significative ($\Delta E = \pm\, 2/\sqrt{8} = \pm\, 0{,}7$) et effet concentration en acide gras ?

CONSTRUCTION DES PLANS D'EXPERIENCES
PLANS FACTORIELS COMPLETS: *ERREUR EXPERIMENTALE*

Lorsque points expérimentaux situés aux extrémités du domaine, calcul de effet E par $a_i = 1/n\ (\pm\ y_1 \pm y_2 \pm \ldots \pm y_n)$. **Variance naturelle = indice dispersion des mesures autour moyenne** (≠ **erreur systématique** = décalage constant des mesures). Si **erreur expérimentale** ΔE (erreur aléatoire σ(E) + systématique) ≈ erreur aléatoire :

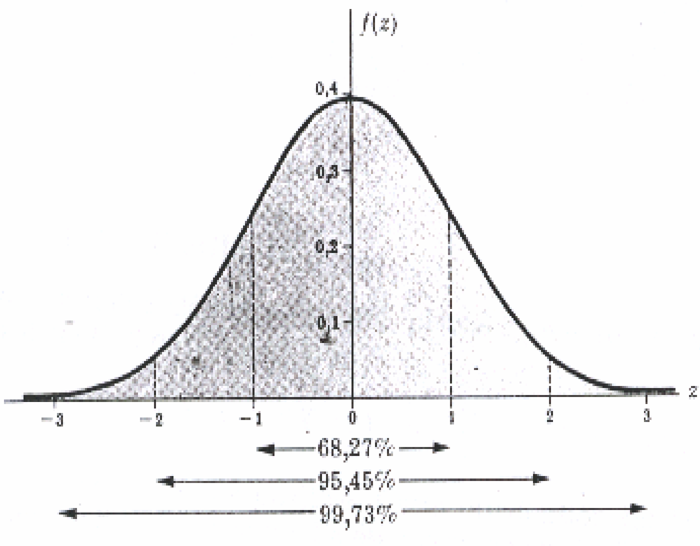
$V(E) = 1/n^2\ [V(y_1) + V(y_2) + \ldots + V(y_n)] = 1/n\ V(y) \Rightarrow \Delta E \approx \sigma(E) = \frac{1}{\sqrt{n}}\sigma(y)$.

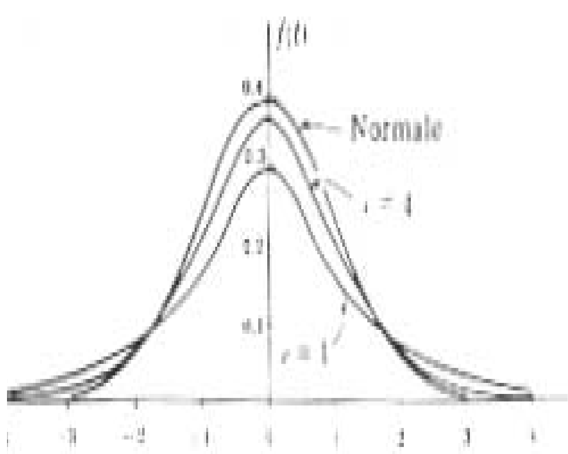
Si **E >> ΔE ⇒ effet influent**, si **E << ΔE ⇒ effet sans influence** et si E ≈ ΔE ⇒ effet sans influence ou légèrement influent. Pour estimer **erreur expérimentale, effectuer plusieurs mesures en un même point** (meilleure solution = point central) **en contrôlant facteurs du plan.**

Remarque : distribution normale (Gauss) donne intervalles de confiance à ±σ, ±2σ, ±3σ. Expérimentalement répartition = **courbe t de Student** à N degrés de liberté (courbe voisine courbe normale réduite pour N > 30 et d'autant plus aplatie que nombre de mesures faible) : estimation s de l'écart-type donnée par $s = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{1}^{N}\left(y_i - \bar{y}\right)^2}$.

		Nbre		**mesure**		**calcul**		
		1	**2**	**3**	**4**	**10**	**20**	∞
%	**70%**	1,96	1,39	1,25	1,19	1,09	1,06	1,03
cas	**90%**	6,31	2,92	2,35	2,13	1,81	1,73	1,64
hypothèse	**95%**	12,71	4,30	3,18	**2,78**	2,23	2,09	**1,96**
correcte	**99%**	63,66	9,93	5,84	4,60	3,17	2,85	2,58

Ex. intervalle de confiance à 95% pour N élevé (LOI NORMALE) = ± 1,96 σ et pour 4 mesures = ± 2,78 s (2,78 = LOI.STUDENT.INVERSE (0,05 ;4)



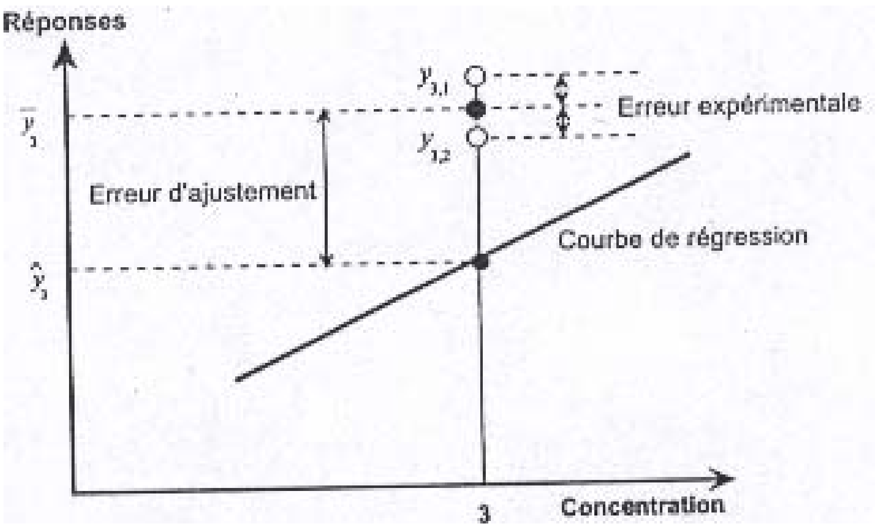


PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
PLANS FACTORIELS COMPLETS : *REGRESSION MULTILINEAIRE*

● **Mathématiquement :** réponse **y~** fonction des niveaux des facteurs (x_i) et coefficients a_i constants. Choix expérimentateur a priori entre ≠ modèles **:** constant ($y\sim = a_0$) ; 1er degré avec interaction ($y\sim = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_{12} x_1 x_2$) 2nd degré avec interaction ($y\sim = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_{12} x_1 x_2 + a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2$). Démarche PEX = **vérification expérimentale du modèle mathématique**

● **Expérimentalement :** $\hat{y}$ **=** y~ + e où e = **résidu**

$\hat{y} = f(x_1, x_2,\ldots, x_k) + \Delta(x_1, x_2,\ldots, x_n) + \sigma(x_1, x_2,\ldots, x_n)$ avec $\Delta(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ **erreur systématique** (**écart d'ajustement** "lack of fit") et $\sigma(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ **erreur expérimentale** (**fonction position du point expérimental**).



Objectif expérimentateur = réduire erreur ajustement ($\Delta \rightarrow \sigma$)**.** Pour que **réponse aussi peu dispersée que possible, recommencer plusieurs fois même expérience au voisinage du centre d'intérêt** (PEX ≡ d.l. en série de Taylor, au voisinage de U_i^0). Système :

$$\hat{y}_1 = a_0 + a_1 x_{11} + a_2 x_{21} + a_{12} x_{11} x_{21} + a_{11} x_{11}^2 + a_{22} x_{21}^2 + e_1$$
$$\hat{y}_2 = a_0 + a_1 x_{12} + a_2 x_{22} + a_{12} x_{12} x_{22} + a_{11} x_{12}^2 + a_{22} x_{22}^2 + e_2$$
.
$$\hat{y}_n = a_0 + a_1 x_{1n} + a_2 x_{2n} + a_{12} x_{1n} x_{2n} + a_{11} x_{1n}^2 + a_{22} x_{2n}^2 + e_n$$

$\hat{y}$ **= X.â + e** avec $\hat{y}$: matrice-réponse (n,1), **â** : matrice-coefficient (p,1), **X** : matrice PEX (n,p) et **e** : matrice-écart (n,1).

Déterminer ensemble des coefficients par régression multilinéaire pour minimiser somme des carrés des écarts $\mathbf{e^t e}$ (**méthode des moindres carrés**). Somme minimale par rapport aux coefficients si $\partial e^t e / \partial a = 0 \Rightarrow$ $\mathbf{\hat{a} = (X^t X)^{-1}.X^t.}\hat{y}$

Exemple étalonnage d'une solution

Expérience = 5 dilutions de concentrations C ≠ (5 niveaux) répétée 2 fois afin de différencier erreur expérimentale et manque d'ajustement. Un seul facteur = concentration du produit dans la solution.

C	Réponse 1	Réponse 2
0	0	-
1	128	121
2	225	235
3	315	308
4	370	358
5	395	402

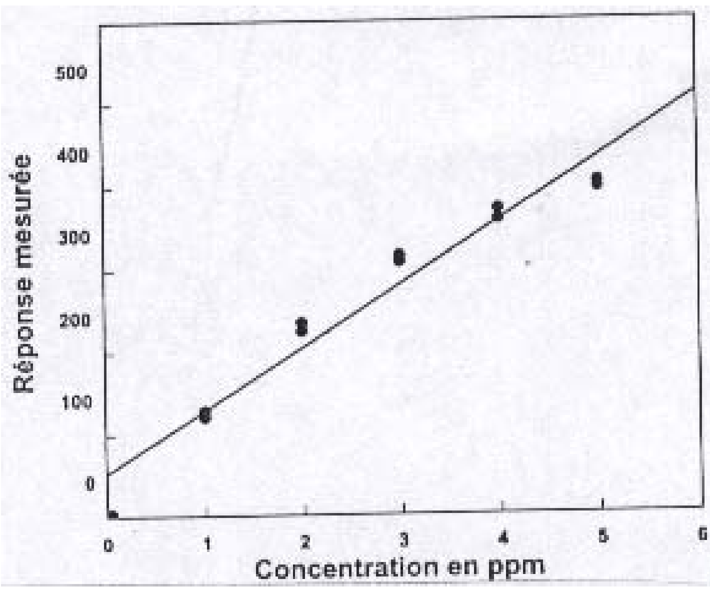
●Si choix a priori **modèle expérimental du 1^er^ degré** : $\hat{y} = a_0 + a_1x_1 + e$

Calcul coefficients de la droite basé sur formule : $\mathbf{\hat{a} = (X^tX)^{-1}.X^t.}\hat{y}$

$$X^t = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 3 & 4 & 4 & 5 & 5 \end{vmatrix} \Rightarrow X^tX = \begin{vmatrix} 11 & 30 \\ 30 & 110 \end{vmatrix} \quad X^tX^{-1} = \begin{vmatrix} 0{,}3548 & -0{,}0968 \\ -0{,}0968 & 0{,}0355 \end{vmatrix}$$

où $\mathbf{X^tX}$ **= Matrice d'information** et $\mathbf{X^tX^{-1}}$ **= Matrice de dispersion** ⇒ coefficients déterminés par régression multilinéaire ⇒ modèle expérimental $\hat{y} = 52{,}32 + 76{,}05\ x + e$.

Tracé réponse = f(C) et droite de régression calculée avec modèle :



Conclusion : **résidus distribués sur un arc** : allure de la courbe ⇒ **inadéquation du modèle du 1^er^ degré** (fonction du second degré)

● Choix d'un modèle du 2nd degré sans interaction **:** $\hat{y}$ **=** $\mathbf{a_0 + a_1\, x_1 + a_2\, x_1^2 + e}$**.**

Calcul des coefficients toujours basé sur formule : $\mathbf{\hat{a} = (X^tX)^{-1}.X^t.}\,\hat{y}$

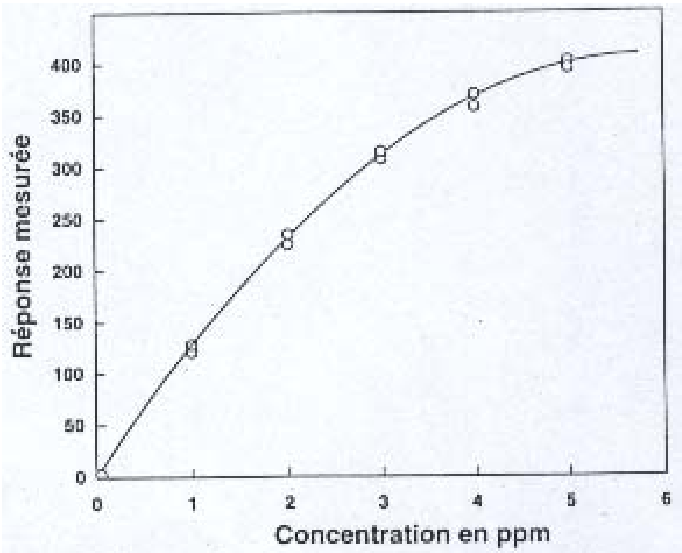
Transposée matrice **X** $\quad X^t = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 3 & 4 & 4 & 5 & 5 \\ 0 & 1 & 1 & 4 & 4 & 9 & 9 & 16 & 16 & 25 & 25 \end{vmatrix}$

Matrices d'information et de dispersion :

$$X^tX = \begin{vmatrix} 11 & 30 & 110 \\ 30 & 110 & 450 \\ 110 & 450 & 1958 \end{vmatrix} \quad \text{et} \quad X^tX^{-1} = \begin{vmatrix} +0{,}6969 & -0{,}500 & +0{,}0757 \\ -0{,}500 & +0{,}5107 & -0{,}0893 \\ +0{,}0757 & -0{,}0893 & +0{,}0168 \end{vmatrix}$$

D'où coefficients du modèle et relation mathématique :

y~ = -1,33 + 139,28 x – 11,88x^2



Conclusion : courbe de régression passe au plus prés points expérimentaux ⇒ **modèle du second degré sans interaction valide**.

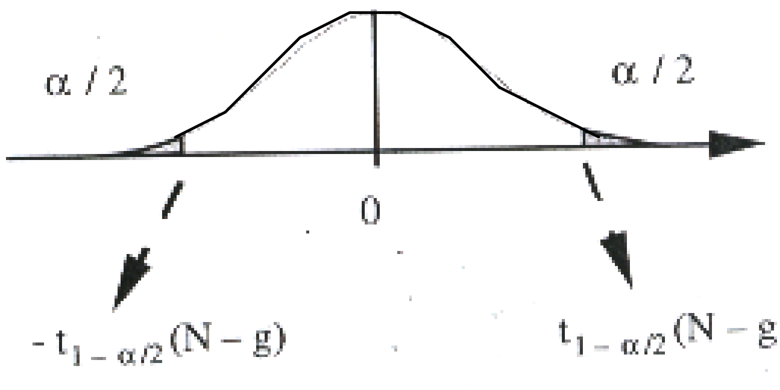
Variance de répétabilité = base des tests statistiques. Détermination si variation induite par un facteur significative en mesurant dispersion expérimentale réponse. Pour plan avec r répétitions, $\Sigma^2 R$ = total somme carrés calculée pour chacune des i expériences du plan

Expérience	Réponses	Moyenne	Σ carrés
1	$Y_{11}, Y_{12},\ldots, Y_{1r}$	$\bar{y}_1$	$\Sigma(Y_{1k}-\bar{y}_1)^2$
2	$Y_{21}, Y_{22},\ldots, Y_{2r}$	$\bar{y}_2$	$\Sigma(Y_{2k}-\bar{y}_2)^2$
g	$Y_{g1}, Y_{g2},\ldots, Y_{gr}$	$\bar{y}_i$	$\Sigma(Y_{gk}-\bar{y}g)^2$
			Total **: Σ^2R**

Comme nombre de termes dans $\Sigma^2 R$ estimé à partir de N résultats**,** nombre **degrés de liberté ddl_R = N – g** (nombre réponses - nombre moyennes estimées) **et variance de répétabilité** $V_{rep} = \mathbf{\Sigma^2 R}/ddl_R$

Exemple : significativité des effets

Effet d'un facteur A au niveau i : $e_{Ai} = \bar{y}_{Ai} - \bar{y}$ où $\bar{y}_{Ai}$ = moyenne résultats d'essais. En tenant compte égalité des variances de chacune des moyennes, $s^2_{e_{Ai}} = \frac{m_A - 1}{N} s^2_{rep}$ où N = nombre total d'essais et m_A = nombre de niveaux du facteur A. Si effet observé correspond à fluctuations aléatoires réponse, **loi statistique = loi de Student** à N-g degrés de libertés et **comparaison de t = e_{Ai}/s_{eAi} (effet divisé par son écart-type) avec fractile** $t_{1-\alpha/2(N-g)}$ **donné par tables**. Si $|t| < t_{1-\alpha/2(N-g)}$ effet déclaré non significatif (et significatif autrement) ⇒ pour que **effet soit significatif, il faut que t soit grand**.



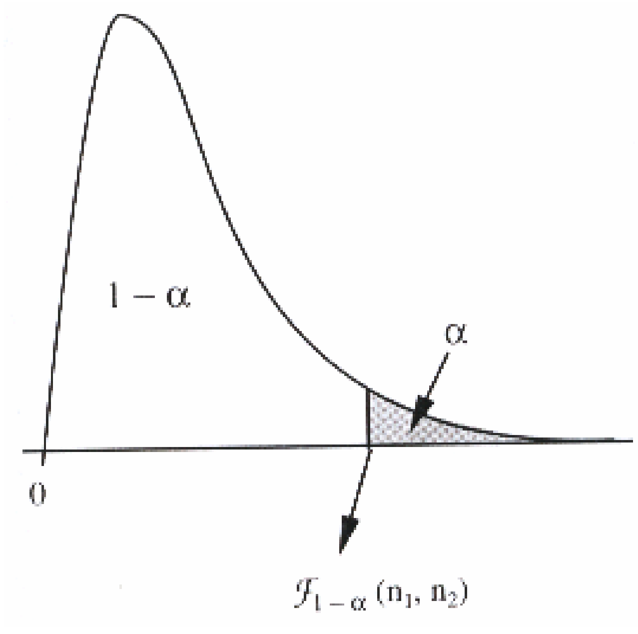
PLANS D’EXPERIENCES DE MODELISATION
VALIDATION DES MODELES : *ANALYSE STATISTIQUE GLOBALE*

Alors que test de **Student** permet de tester **individuellement** effet de chacune des modalités de chacun des facteurs, **analyse variance** permet de tester **globalement** effet de chacun des facteurs.

Test classique pour savoir si facteur Q a ou non une influence significative sur réponse = test de **Fisher-Snédécor**.
Somme des carrés résidus $\Sigma^2\mathbf{R} = \Sigma^2\mathbf{A} + \Sigma^2\mathbf{E}$ (effet ajustement du facteur Q + dispersion expérimentale réponse). Test consiste à comparer ces 2 termes $\Rightarrow$ rapport $\mathbf{F = V_A/V_E}$ où $\mathbf{V_A = \Sigma^2 A/ddl_A}$ et $\mathbf{V_E = \Sigma^2 E/ddl_E}$.
V_A = estimation variance de répétabilité et rapport F suit loi de Fisher-Snédécor $\mathsf{F}(n_1,n_2)$ où $n_1 = ddl_A$ et $n_2 = ddl_E$. Rapport F a forte probabilité ($1-\alpha$) d’être < $\mathsf{F}_{1-\alpha}(n_1,n_2)$ et faible probabilité (α) d’être > $\mathsf{F}_{1-\alpha}(n_1,n_2)$.
$\Rightarrow$ **F** doit être **< valeur critique $\mathsf{F}_{1-\alpha}(n_1, n_2)$ pour considérer influence du facteur Q non significative** et **modèle validé si rapport des carrés moyens $F = V_A/V_E$ faible.**

Remarque : valeur critique à 95% obtenue pour $\alpha = 0,05$ calculée sous Excel par INVERSE.LOI (α ; n_1 ; n_2)

Exemple étalonnage d’une solution : avec modèle du 1er degré F = 53,93 et probabilité pour que rapport nul p < 0,0003 $\Rightarrow$ **modèle choisi a priori non valable.** Avec modèle du 2nd degré F = 0,1738 et p = 0,9097.



PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
VALIDATION DES MODELES : *ANALYSE STATISTIQUE DU R^2*

Pour évaluer degré d'ajustement du modèle par rapport aux réponses mesurées, calcul du coefficient $\mathbf{R^2} = \dfrac{\hat{y}^t \hat{y} - \bar{y}^t \bar{y}}{y^t y - \bar{y}^t \bar{y}}$ rapport entre parties expliquée par modèle (**carré réponses prédites corrigé de la moyenne**) et à expliquer (**carré réponses mesurées corrigé de la moyenne**). Sous Excel, R^2 = SOMME.CARRES.ECART S($\mathbf{y_{cal}}$)/SOMME.CARRES.ECART S($\mathbf{y}$) où $\mathbf{y_{cal}}$ et $\mathbf{y}$ = matrices colonnes des réponses calculées et expérimentales corrigées de la moyenne. On a $0 \le R^2 \le 1$ avec R= 0 : modèle n'explique rien et R =1 : toutes les réponses mesurées expliquées. **R^2 élevé ne signifie pas bonne qualité du modèle** (R^2 = 1 avec 2 réponses et modèle 1^er^ degré ou 3 réponses et modèle 2^nd^ degré). **Qualité du modèle fonction du nombre de résultats <u>et</u> du modèle choisi**.

<u>Exemple étalonnage d'une solution</u>

C (p.p.m.)	Mesure	Moyenne	Réponse modèle 1^er^ degré	ΣE^2 Ecarts Expériment.	ΣR^2 Résidus	ΣA^2 Ecarts Ajustement
0	0	0	52,32	0	2737,65	2737,65
1	128	124,5	128,37	12,25	0,14	14,98
1	121	124,5	128,37	12,25	54,33	14,98
2	225	230	204,42	25	423,56	654,37
2	235	230	204,42	25	935,18	654,37
3	315	311,5	280,47	12,25	1192,48	963,00
3	308	311,5	280,47	12,25	758,025	963,00
4	370	364	356,52	36	181,81	56,01
4	358	364	356,52	36	2,20	56,01
5	395	398,5	432,56	12,25	1411,09	1160,39
5	402	398,5	432,56	12,25	934,19	1160,39
			Somme	**195,5**	**8630,66**	**8435,16**

● **N = 11 réponses prédites et n = 2 coefficients calculés avec les réponses mesurées ⇒ $\mathbf{d.d.l._R}$ = N – n = 9 et** variance des résidus $\mathbf{V_R = \Sigma R^2/d.d.l._R}$.

● **p = 6 moyennes indépendantes et n = 2 coefficients calculés avec les réponses mesurées ⇒ $\mathbf{d.d.l._A}$ = 4** et variance d'ajustement $\mathbf{V_A}$ = = $\mathbf{\Sigma A^2/d.d.l._A}$

● **2 mesures par essai et 5 concentrations ≠ 0 ⇒ $\mathbf{d.d.l._E}$ = N – p = 5 et** variance expérimentale $\mathbf{V_E = \Sigma E^2/d.d.l._E}$

⇒ $R^2 = 0,9497$ pour modèle 1^er^ degré et $R^2 = 0,9987$ pour modèle 2^nd^ degré.

METHODOLOGIE
DES PLANS D'EXPERIENCES

SURFACES DE REPONSE

Alain LAMURE

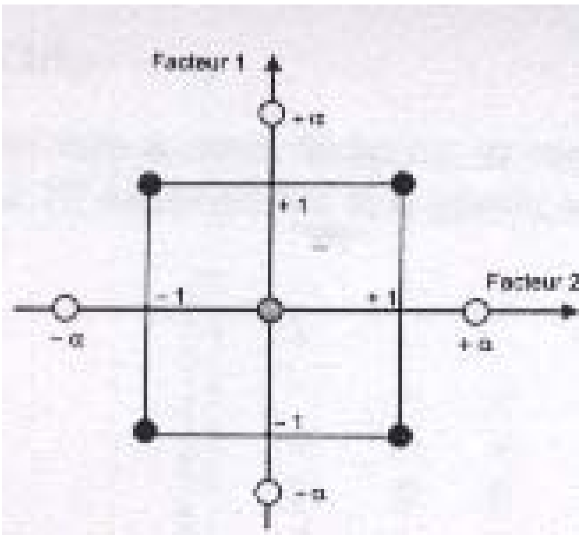
PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION SURFACES DE REPONSE*: PLANS COMPOSITES*

Plans composites se prêtent au ***déroulement séquentiel d'une étude*** :
1ère partie = **plan factoriel complété par points au centre** pour vérifier validité du modèle du 1er degré. Lorsque tests de validation négatifs (réponse mesurée statistiquement différente de celle calculée au même point) ⇒ essais supplémentaires pour établir modèle du 2nd degré. **Nouveaux essais représentés par points d'expériences sur axes des coordonnées (points en étoile) et par de nouveaux points centraux.**

Si points en étoile sur les faces du cube (ou hypercube, $\alpha = \pm 1$) on a un **Plan Composite à faces centrées**. Plan central composite peut être extérieur (CCE) si points en étoile extérieurs au domaine cubique ($\alpha > 1$) ou intérieur (CCI) s'ils appartiennent au domaine cubique ($\alpha < 1$).

Nombre total d'essais $\mathbf{n} = \mathbf{n_f}$ (somme essais du plan factoriel) + $\mathbf{n_e}$ (somme essais plan en étoile) + $\mathbf{n_o}$ (essais au centre). Choix emplacement des points en étoile lié à des considérations expérimentales (facilité ou impossibilité d'atteindre certaines zones du domaine d'étude) et théoriques (critères d'optimalité). Par exemple, pour plan composite à 2 facteurs n = 12 essais (4 pour plan 2^2, 4 pour la partie en étoile et 4 pour essais au centre : 2 après le plan factoriel et 2 autres à la fin).

Représentation des points expérimentaux pour un plan composite CCE pour 2 facteurs avec en noir : points du plan factoriel 2^2, en gris clair : points en étoile et en gris foncé : points centraux



PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
SURFACES DE REPONSE*: PLANS COMPOSITES*

Modèle mathématique = modèle du 2nd degré avec interactions. Pour 2 facteurs : $y\sim = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_{12} x_1x_2 + a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2$ et pour 3 facteurs : $y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2$

Pour plan composite à 2 facteurs, matrice de calcul **X** = matrice (12,6)
12 expériences, 6 coefficients) et matrice d'information $\mathbf{X^tX}$ **=** matrice (6,6).

$$X = \begin{vmatrix} +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & -\alpha & 0 & 0 & +\alpha^2 & 0 \\ +1 & +\alpha & 0 & 0 & +\alpha^2 & 0 \\ +1 & 0 & -\alpha & 0 & 0 & +\alpha^2 \\ +1 & 0 & +\alpha & 0 & 0 & +\alpha^2 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad X^tX = \begin{vmatrix} 12 & 0 & 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 4+2\alpha^2 \\ 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 4+2\alpha^4 & 4 \\ 4+2\alpha^2 & 0 & 0 & 0 & 4 & 4+2\alpha^4 \end{vmatrix}$$

où α représente la distance des points en étoile au centre du domaine

Suivant la valeur de α, possibilité d'obtenir les critères d'optimalité suivants :

♦ **Isovariance par rotation** : éléments de la matrice d'information satisfont à la relation : $n_f + 2\alpha^4 = 3n_f \Leftrightarrow \alpha = \sqrt[4]{n_f}$

Par exemple, pour plan 2^3, points en étoile situés à α = 1,414 (en v.c.r.).

♦ **Presque orthogonalité** : sous matrice diagonale si $\alpha = \sqrt[4]{\dfrac{n_f\left(\sqrt{n}-\sqrt{n_f}\right)^2}{4}}$.

Valeurs de α pour obtenir la presque orthogonalité :

Nombre	**2**	**3**	**4**	**5**	**5**	**6**	**6**
plan	$\mathbf{2^2}$	$\mathbf{2^3}$	$\mathbf{2^4}$	$\mathbf{2^{5-1}}$	$\mathbf{2^6}$	$\mathbf{2^{6-1}}$	$\mathbf{2^6}$
$\mathbf{n_f}$	4	8	16	16	32	32	64
$\mathbf{n_\alpha}$	4	6	8	10	10	12	12
$\mathbf{n_o = 1}$	1	1,215	1,414	1,547	1,596	1,724	1,761
$\mathbf{n_o = 2}$	1,078	1,287	1,483	1,607	1,662	1,784	1,824
$\mathbf{n_o = 3}$	1,147	1,353	1,547	1,664	1,724	1,841	1,885
$\mathbf{n_o = 4}$	1,210	1,414	1,607	1,719	1,784	1,896	1,943

Suivant le critère d'optimalité choisi par l'expérimentateur, la variance des coefficients Diag V(â) = σ_r^2 Diag $(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}$, sera de :

	σ(â$_0$)	**σ(â$_1$)**	**σ(â$_2$)**	**σ(â$_{12}$)**	**σ(â$_{11}$)**	**σ(â$_{22}$)**
Isovariance par rotation	0,500 σ_r	0,353 σ_r	0,353 σ_r	0,500 σ_r	0,395 σ_r	0,395 σ_r
presque orthogonalité	0,489 σ_r	0,380 σ_r	0,380 σ_r	0,500 σ_r	0,483 σ_r	0,483 σ_r

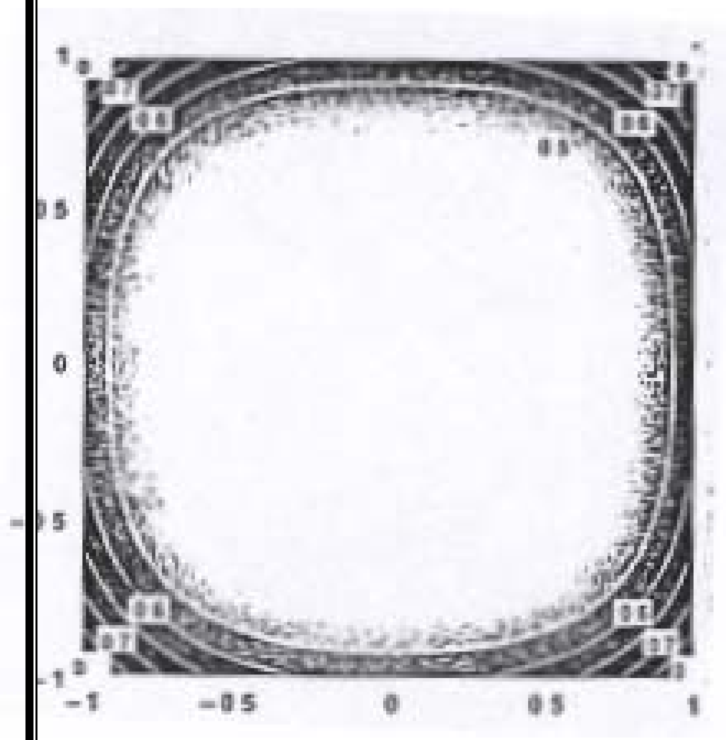
Fonction de variance de prédiction : $d^2(\hat{y}_p) = x^t_p(X^tX)^{-1}x_p$ vaudra :

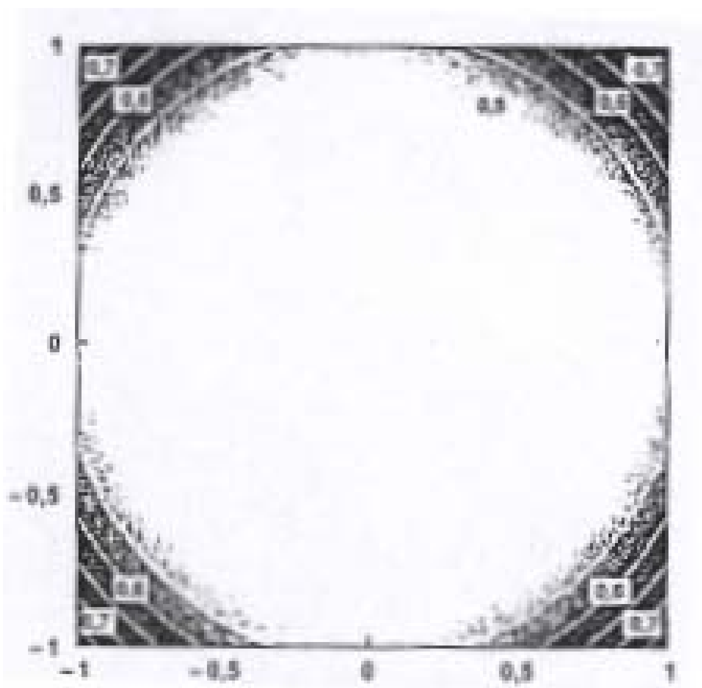
♦ avec critère d'isovariance par rotation :

d $(\hat{y}_p) = \sqrt{0{,}25 - 0{,}125(x_1^2 + x_2^2) + 0{,}156(x_1^2 + x_2^2)^2}$

♦ avec critère de presque orthogonalité :

d $(\hat{y}_p) = \sqrt{0{,}238 - 0{,}125(x_1^2 + x_2^2) + 0{,}25x_1^2x_2^2 + 0{,}233\left(x_1^4 + x_2^4\right)}$ $\Rightarrow$ **seules les courbes d'égale erreur de prédiction pour critère d'isovariance par rotation sont des cercles** (pour plans CCE à 2 facteurs et 4 points centraux).



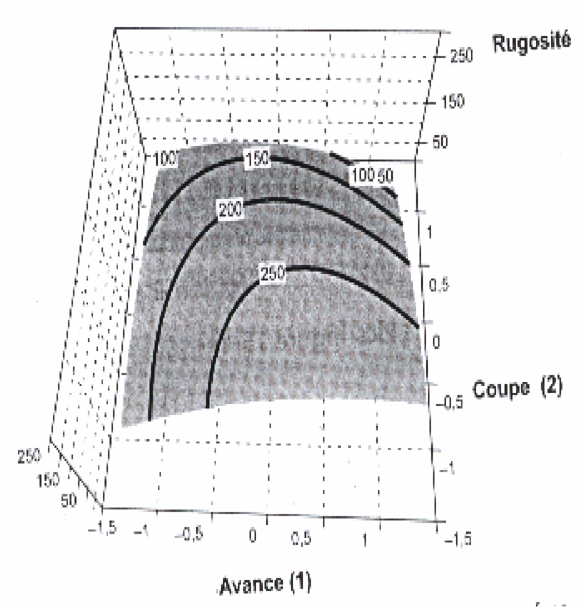


PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
SURFACES DE REPONSE: *APPLICATION DES PLANS COMPOSITES*

Exemple : Etat de surface de pièces métalliques
Epaisseur de métal arraché à chaque passage par un disque abrasif réglable.
Facteurs déterminants pour état de surface : 1/ V_a vitesse d'avancement outil et 2/ V_t vitesse tangentielle de coupe (liée à V_a et au diamètre outil).
Réponse choisie = rugosité R_a (valeur la + faible possible et < 150 si possible).

Vitesse	**-1,21**	**-1**	**0**	**1**	**1,21**
1 avance	0,73	0,9	1,65	2,4	2,57
2 coupe	13,95	15	20	25	26,05

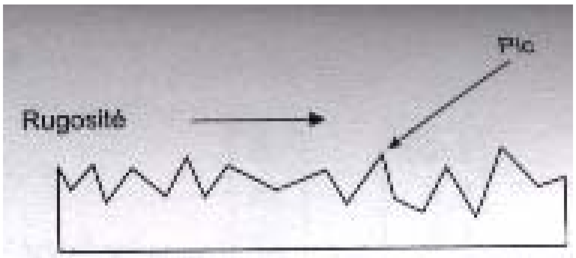
Essai	**avance**	**coupe**	Rugosité x1000
1	-1	-1	194
2	+1	-1	282
3	-1	+1	120
4	+1	+1	91
5	0	0	233
6	0	0	235
7	-1,21	0	154
8	+1,21	0	195
9	0	-1,21	278
10	0	+1,21	122
11	0	0	232
12	0	0	230



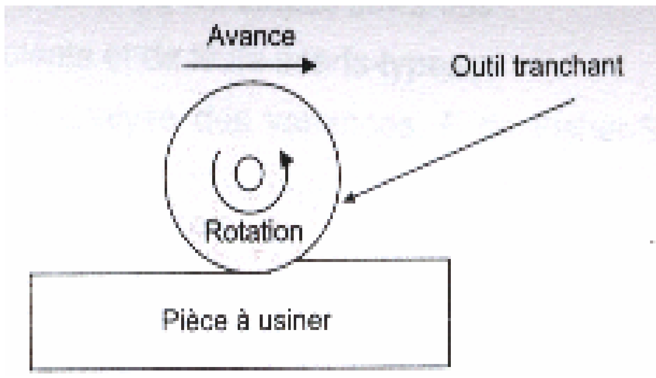
Modèle de la rugosité donné par relation

$$\hat{y} = 232{,}4 + 15{,}7\, x_1 - 65{,}5\, x_2 - 29{,}2\, x_1 x_2 - 39{,}2\, x_1^2 - 21{,}8\, x_2^2$$

(±1,05) (±0,82) (±0,82) (±1,08) (±1,00) (±1,04)

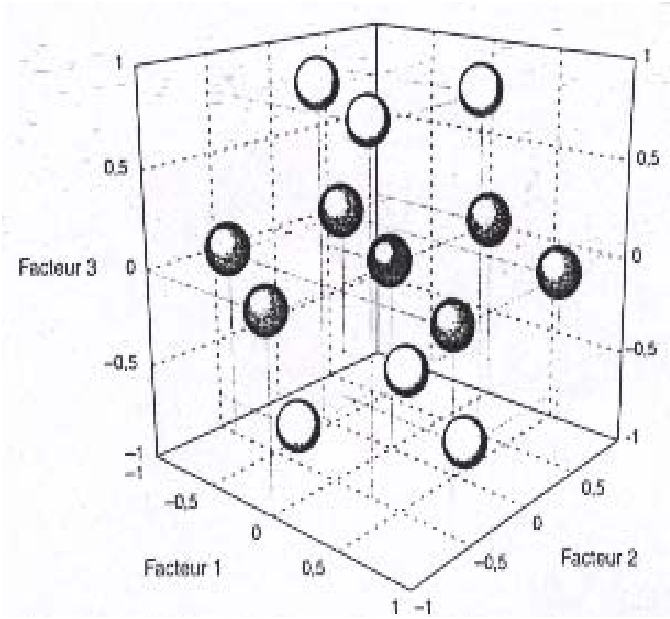


Objectif rugosité < 0,15 atteint en choisissant vitesses d'avance et de coupe qui ensemble donnent réponse se situant sous ligne de niveau 150



PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION SURFACES DE REPONSE: *PLANS DE BOX-BEHNKEN*

Plans possédant également propriété de **séquentialité** : étude des k premiers facteurs en se réservant possibilité d'en ajouter de nouveaux. Premier plan de Box-Behnken, pour 3 facteurs construit sur un cube (milieu des 12 arêtes du cube + 3 points au centre du domaine d'étude) : coordonnées points au centre d'une arête (0, ± 1, ± 1) ⇒ points expérimentaux tous à égale distance centre du domaine d'étude : 2 facteurs décrivent un carré (4 essais d'un plan 2^2) tandis que coordonnées du 3ème facteur = 0.



Lorsque nombre de facteurs > 3 ⇒ **n-cube** : points expérimentaux au centre des faces (24 pour 4-cube) ou des cubes (40 pour 5-cube). ⇒ Plans de Box-Behnken comportent 24 + 3 essais pour 4 facteurs (0, 0, ±1, ±1) et 40 + 6 essais pour 5 facteurs (0, 0, 0, ±1, ±1). Pour construire ces plans, 2 facteurs décrivent un carré (4 essais plan 2^2) tandis que 3ème, 4ème (pour 4 facteurs) et 5ème facteurs (pour 5 facteurs) = 0. Pour 4 ou 5 facteurs, possibilité de commencer par plan de 3 facteurs à condition que facteurs 4 et 5 = 0 pendant ces essais : 12 essais supplémentaires seront nécessaires pour étudier le 4ème facteur et 16 essais plus 3 essais au centre pour étudier le 5ème.

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Facteur 4	Facteur 5
1 à 4	±1	±1	0	0	0
5 à 8	0	±1	±1	0	0
9 à 12	±1	0	±1	0	0
13 à 16	±1	0	0	±1	0
17 à 20	0	±1	0	±1	0
21 à 24	0	0	±1	±1	0
25 à 28	±1	0	0	0	±1
29 à 32	0	±1	0	0	±1
33 à 36	0	0	±1	0	±1
37 à 40	0	0	0	±1	±1
41 à 46	0	0	0	0	0

Exemple : Douceur des yoghourts.

Acidité produite par ferments s qui transforment lactose en acide lactique. Objectif étude = diminuer goût acide. 3 facteurs retenus :
1/ taux de dilution (rapport volumique eau ajoutée/lait brut) 0,5 < U_1 < à 2), 2/ pH (suivant quantité de stabilisant injecté) 6 < U_2 < 5 et 3/ taux de concentration du lait (rapport volumique lait brut/stabilisé) 1,5 < U_3 < 2,5. Réponse = "appauvrissement acide" (meilleur si valeur plus élevée).

Modèle mathématique = modèle du 2nd degré avec interactions d'ordre 2 :
$y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2$

Plan classique comporte 15 points expérimentaux $\Rightarrow$ **X** = matrice (15,10) et $\mathbf{X^tX}$ ou $\mathbf{(X^tX)^{-1}}$ = matrices (10,10).

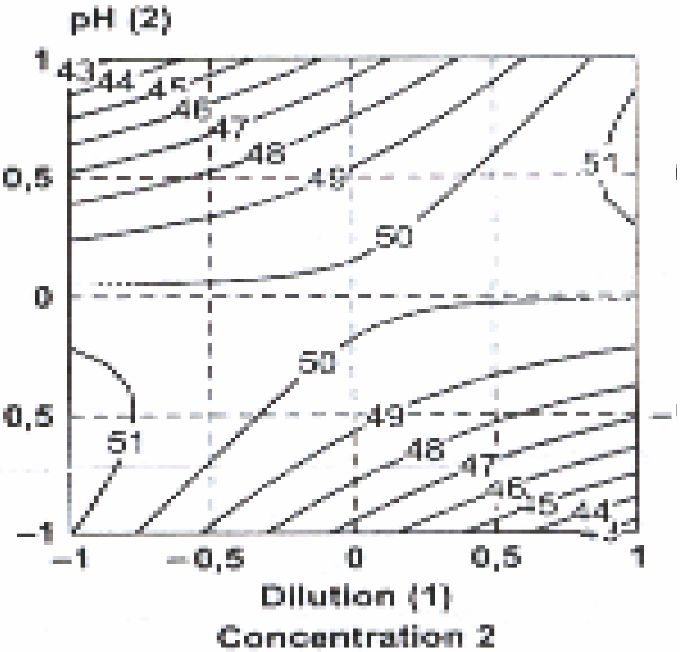
$$X = \begin{vmatrix} +1 & -1 & -1 & 0 & +1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & +1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & -1 & +1 & 0 & -1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & +1 & +1 & 0 & +1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ +1 & -1 & 0 & -1 & 0 & +1 & 0 & +1 & 0 & +1 \\ +1 & -1 & 0 & +1 & 0 & -1 & 0 & +1 & 0 & +1 \\ +1 & +1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & +1 & 0 & +1 \\ +1 & +1 & 0 & +1 & 0 & +1 & 0 & +1 & 0 & +1 \\ +1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & +1 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & -1 & +1 & 0 & 0 & -1 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & +1 & +1 & 0 & 0 & +1 & 0 & +1 & +1 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \Rightarrow X^tX = \begin{vmatrix} 15 & & & & & & & 8 & 8 & 8 \\ & 8 & & & & & & & & \\ & & 8 & & & & & & & \\ & & & 8 & & & & & & \\ & & & & 4 & & & & & \\ & & & & & 4 & & & & \\ & & & & & & 4 & & & \\ 8 & & & & & & & 8 & 4 & 4 \\ 8 & & & & & & & 4 & 8 & 4 \\ 8 & & & & & & & 4 & 4 & 8 \end{vmatrix}, y = \begin{vmatrix} 51,3 \\ 42,6 \\ 42,2 \\ 50,4 \\ 40,7 \\ 41,5 \\ 41,3 \\ 40,8 \\ 35,2 \\ 35,3 \\ 39,5 \\ 39,8 \\ 50,8 \\ 50,1 \\ 49,4 \end{vmatrix}$$

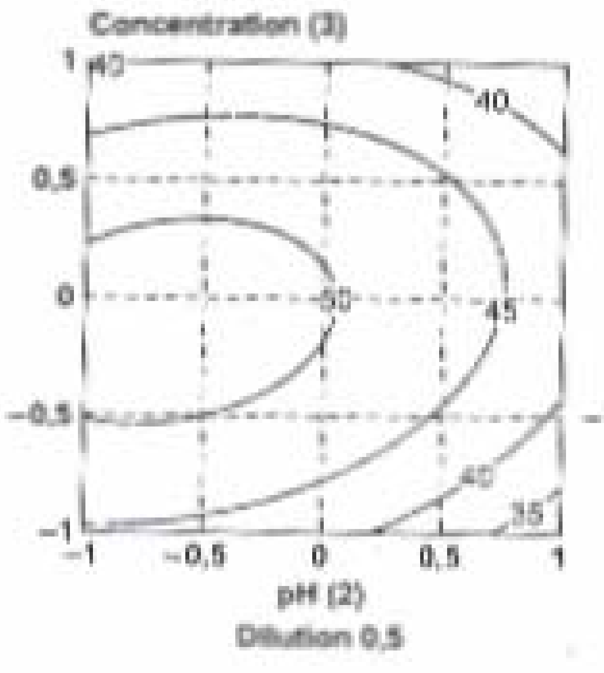
Plan de Box-Behnken pour 3 facteurs ne respecte pas le critère d'isovariance par rotation ($8 \neq 3 \times 4$) tandis que celui pour 4 facteurs le respecte.

Plan classique de Box-Behnken pour 3 facteurs ne respecte pas non plus critère de presque orthogonalité mais, si on rajoute au centre 4 points au lieu de 3 $\Rightarrow$ plan qui respecte ce critère.

Coefficients du modèle calculés par régression multilinéaire :
$\hat{y} = 50{,}1 - 0{,}07x_1 - 0{,}11x_2 + 0{,}06x_3 + 4{,}22x_1x_2 - 0{,}32x_1x_3 + 2{,}2x_2x_3 + 0{,}07x_1^2 - 3{,}6x_2^2 - 9{,}1x_3^2$
Variance de chacun des coefficients donnée par : Diag V(â) = σ_r^2 Diag $(X^tX)^{-1}$.
$\sigma(\hat{a}_0) = 0{,}58\sigma_r$, $\sigma(\hat{a}_1) = \sigma(\hat{a}_2) = \sigma(\hat{a}_3) = 0{,}35\sigma_r$, $\sigma(\hat{a}_{12}) = \sigma(\hat{a}_{13}) = \sigma(\hat{a}_{23}) = 0{,}50\sigma_r$, $\sigma(\hat{a}_{11}) = \sigma(\hat{a}_{22}) = 0{,}52\sigma_r$ et $\sigma(\hat{a}_{33}) = 0{,}52\sigma_r$ où **σ_r = écart type des résidus** (**expérimental + ajustement) estimée** souvent **par écart type expérimental au centre du domaine** (0,7 dans exemple des yoghourts) car si **modélisation valide $\sigma_r \sim \sigma_e$**. Pour tous coefficients, **écarts-types < 1 $\Rightarrow$ bonne précision des réponses calculées**.

Comme domaine d'étude à 3 dimensions, $\Rightarrow$ coupes ⫽ plans $x_i = c^{te}$ pour voir détails des surfaces d'isoréponses (plans centraux et faces du cube).
Coupes $\perp$ axe concentration montrent qu'on peut obtenir appauvrissement acide = 51 si dilution vaut ± 1 (choix $x_1 = -1 \Leftrightarrow$ dilution = 0,5 car moins d'eau à extraire).
Courbes d'isoréponses dans plans (pH x concentration) indiquent qu'il existe une réponse maximale. Dans plan x_1 = -1, le modèle s'écrit :
$\hat{y} = 50{,}24 - 4{,}33\, x_2 + 0{,}38\, x_3 + 2{,}2\, x_2x_3 + 0{,}07\, x_1^2 - 3{,}55\, x_2^2 - 9{,}1\, x_3^2$.
Maximum obtenu par relations : $\partial\hat{y}/\partial x_2 = 0$ et $\partial\hat{y}/\partial x_3 = 0 \Leftrightarrow x_2 = -0{,}63$ (pH = 5,8) et $x_3 = -0{,}06$ (concentration ~ 2)

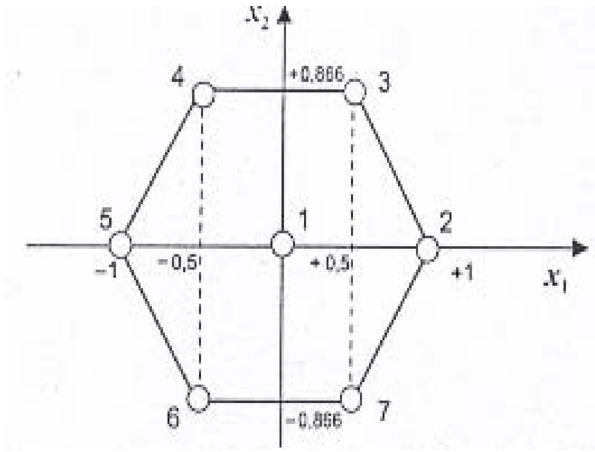




PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
SURFACES DE REPONSE: *PLANS DE DOEHLERT POUR 2 FACTEURS*

Dans plans de Doehlert, **points répartis de manière régulière dans l'espace expérimental.** Pour 2 facteurs, points expérimentaux forment un hexagone régulier : 1 point au centre et 6 aux sommets. La matrice d'expériences pour 2 facteurs : (5 niveaux pour facteur 1 et 3 pour facteur 2) est la suivante.

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



Avec 7 points expérimentaux, ce plan permet de calculer 7 inconnues et il est possible d'utiliser un modèle du 2nd degré avec interactions : $y\sim = a_0 + a_1\,x_1 + a_2\,x_2 + a_{12}\,x_1x_2 + a_{11}\,x_1^2 + a_{22}\,x_2^2$

Matrice **X** = matrice (7,6) (7 expériences, 6 coefficients) et matrices d'information X^tX et de dissipation $(X^tX)^{-1}$ = matrices (6,6).

$$X = \begin{vmatrix} +1 & +1 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +1 & +0{,}5 & 0{,}866 & 0{,}433 & 0{,}25 & 0{,}75 \\ +1 & -0{,}5 & 0{,}86 & -0{,}433 & 0{,}25 & 0{,}75 \\ +1 & -1 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ +1 & -0{,}5 & -0{,}866 & 0{,}433 & 0{,}25 & 0{,}75 \\ +1 & +0{,}5 & -0{,}866 & -0{,}433 & 0{,}25 & 0{,}75 \\ +1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \Rightarrow X^tX = \begin{vmatrix} 7 & & & & 3 & 3 \\ & 3 & & & & \\ & & 3 & & & \\ & & & 0{,}75 & & \\ 3 & & & & 2{,}25 & 0{,}75 \\ 3 & & & & 0{,}75 & 2{,}25 \end{vmatrix}$$

Plan pour 2 facteurs respecte le **critère d'isovariance** (2,25 = 3 x 0,75) mais pas de presque orthogonalité.

Variance coefficients du modèle : Diag $V(\hat{a}) = \sigma_r^2$ Diag $(X^tX)^{-1} \Rightarrow$ $\sigma(\hat{a}_0) = \sigma(\hat{a}_1) = \sigma(\hat{a}_2) = 0{,}58\sigma_r$, $\sigma(\hat{a}_{12}) = 1{,}16\,\sigma_r$ et $\sigma(\hat{a}_{11}) = \sigma(\hat{a}_{22}) = 1{,}23\,\sigma_r$.

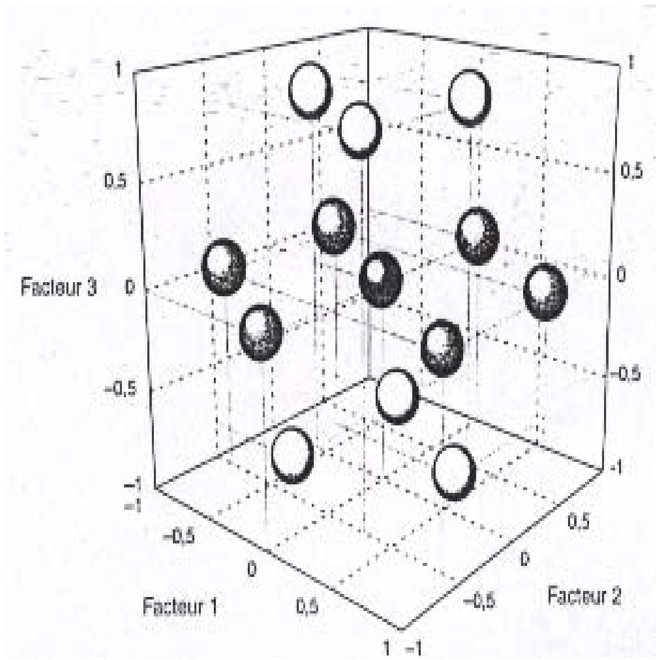
Fonction variance de prédiction : **erreur de prédiction identique pour tous points situés à égale distance du centre du domaine d'étude**

$d^2(\hat{y}_p) = x_p^t(X^tX)^{-1}x_p$ $\quad d(\hat{y}_p) = \sqrt{1 - 1{,}667(x_1^2 + x_2^2) + 1{,}5(x_1^2 + x_2^2)^2}$

PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
SURFACES DE REPONSE: *PLANS DE DOEHLERT POUR 3 FACTEURS*

Comme points régulièrement répartis dans espace expérimental, **possibilité d'étendre le plan vers n'importe quelle direction de l'espace en ajoutant des points régulièrement répartis.** Pour 3 facteurs, points régulièrement disposées dans espace expérimental : 7 points forment hexagone (centres de sphères jointives) + 6 points (3 en dessous et 3 au dessus). Points d'expériences forment un réseau uniforme dans espace hexagonal.

Essai N°	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3
1	0	0	0
2	+1	0	0
3	+0,5	+0,866	0
4	-0,5	+0,866	0
5	-1	0	0
6	-0,5	-0,866	0
7	+0,5	-0,866	0
8	**0**	**0**	**0**
9	-0,5	+0,289	+0,816
10	0	-0,577	+0,816
11	+0,5	+0,289	+0,816
12	-0,5	-0,289	-0,816
13	0	+0,577	-0,816
14	+0,5	-0,289	-0,816
15	**0**	**0**	**0**



($0{,}866 \approx \sqrt{3}/2$, $0{,}289 \approx 1/2\sqrt{3}$, $0{,}577 \approx 1/\sqrt{3}$ et $0{,}816 \approx \sqrt{2/3}$)

Dans ce plan de Doehlert, 3ème facteur = 0 pendant les 8 premières expériences : on peut donc traiter d'abord 2 facteurs puis si cela est nécessaire, effectuer les essais 8 à 13 pour étudier 3ème facteur (conduite séquentielle). Sans compter points au centre, **nombre n d'expériences n = k(k+1)** (6 pour 2 facteurs, 12 pour 3 facteurs). Pour 3 facteurs, matrice de calcul **X** = matrice (13,10) ou (15,10) suivant que l'on ait 1 ou 3 points centraux (10 coefficients pour le modèle).

Exemple : Rendement d'une réaction d'hydrolyse du nitrile ester

Facteurs influents : 1/ concentration en acide sulfurique ($1,5 < U_1 < 3\%$), 2/ quantité eau ($3 < U_2 < 6\%$) et 3/ température réaction ($87,5 < U_3 < 112,5°C$)

Réponse = rendement de réaction d'hydrolyse (en %).

Matrices information et dispersion = (10,10) ($\forall$**nombre de points centraux**):

$$\hat{y} = 81,5 + 1,55x_1 + 0,52x_2 .-0,18x_3 + 9,35x_1x_2 - 5,88x_1x_3 + 6,37x_2x_3 - 12,5x_1^2 - 2,7x_2^2 - 0,08x_3^2$$

±1,6 ±1,4 ±1,4 ±1,4 ±3,2 ±3,6 ±3,2 ±2,5 ±2,5 ±2,4

$$\left(X^tX\right)^{-1} = \begin{vmatrix} 0,33 & & & & & & & -0,33 & -0,33 & -0,33 \\ & 0,25 & & & & & & & & \\ & & 0,25 & & & & & & & \\ & & & 0,25 & & & & & & \\ & & & & 1,33 & -0,47 & & & & \\ & & & & -0,47 & 1,67 & & & & \\ & & & & & & 1,67 & -0,23 & 0,23 & \\ -0,33 & & & & & & -0,23 & 0,83 & 0,16 & 0,25 \\ -0,33 & & & & & & 0,23 & 0,16 & 0,83 & 0,25 \\ -0,33 & & & & & & & 0,25 & 0,25 & 0,75 \end{vmatrix} \text{ et } y = \begin{vmatrix} 81,8 \\ 72,5 \\ 81,4 \\ 71 \\ 65,5 \\ 79,4 \\ 73,6 \\ 80,3 \\ 82,8 \\ 75,9 \\ 77,6 \\ 79,5 \\ 79,2 \\ 78,5 \\ 82,6 \end{vmatrix}$$

Pour optimiser la réponse, utilisation de l'analyse canonique, basée sur la simplification de la relation générale $\mathbf{y = y_0 +} x_k^t\mathbf{.a_k +} x_k^t\mathbf{.A.x_k}$ où $\mathbf{x_k}$ = vecteur des coordonnées d'un point, $\mathbf{a_k}$ = vecteur des coefficients des termes du 1er degré, **A** = matrice centrale des termes rectangulaires et des termes carrés et y_0 = valeur réponse à l'origine.

$$\mathbf{y} = 81,5 + \begin{bmatrix} 1,55 & 0,52 & -0,18 \end{bmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} -12,5 & 4,675 & -2,94 \\ 4,675 & -2,7 & 3,185 \\ -2,94 & 3,185 & -0,08 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{vmatrix}$$

Coordonnées du point stationnaire se déduisent de $\mathbf{x_s = -0,5.A^{-1}.a_k}$

Exemple x_s **=** (+0,173 +0,185 -0,179).

Comme la distance du point stationnaire au centre du domaine $D_s^2 = x_S^t\mathbf{x_s} \Rightarrow$ $D_s = 0,3 < 1$ **point stationnaire S є domaine d'étude.**

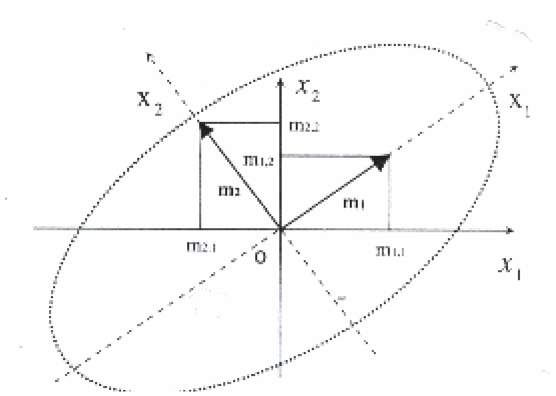
Réponse au point stationnaire S : rendement y = 81,7%.
Faire tourner axes du repère (coïncidence entre axes origine et de la conique ⇒ diagonalisation matrice centrale puis translation du centre du repère au point stationnaire S.

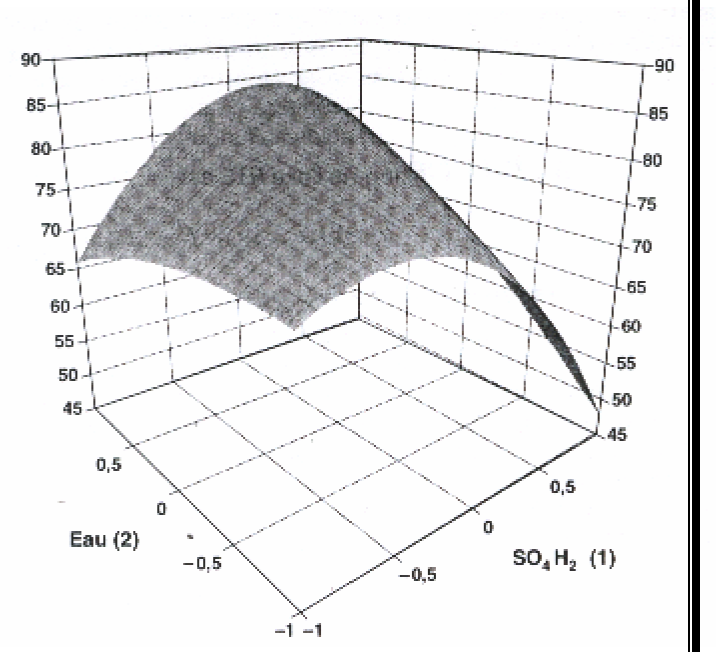
Relation s'écrit alors : **y** = 81,7 + $\begin{vmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 2{,}06 & & \\ & -1{,}94 & \\ & & -15{,}39 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{vmatrix}$

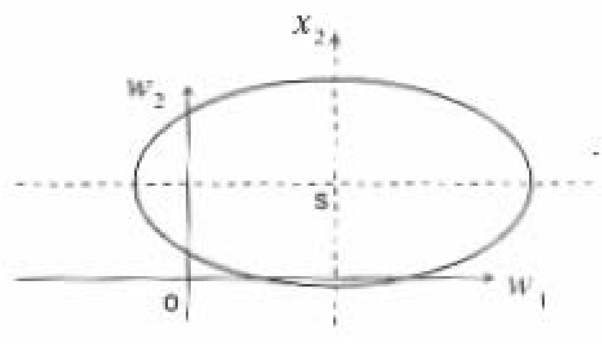
Valeurs propres $\lambda_1 = 2{,}06$ (> 0 ⇒ minimum) et $\lambda_2 = -1{,}94$ (< 0 ⇒ maximum) faibles ⇒ réponse variera peu le long axes RT_1 et RT_2. Par contre comme valeur propre $\lambda_3 = -15{,}39$ (< 0 ⇒ maximum) élevée ⇒ réponse variera rapidement selon axe RT3. La matrice des **vecteurs propres** s'écrivant :

$$\begin{array}{cccc} & m_1 & m_2 & m_3 \\ M = & \multicolumn{3}{c}{\begin{vmatrix} 0{,}015 & 0{,}463 & 0{,}886 \\ 0{,}567 & 0{,}726 & -0{,}390 \\ 0{,}824 & -0{,}508 & 0{,}251 \end{vmatrix}} \end{array}$$

D'après composantes des vecteurs propres m_1 et m_3, axes RT_1 et RT_3 presque orientés comme respectivement axes 3 (température) et 1 (% acide). Par conséquent, pour obtenir rendement le plus élevé il faudra rester prés du point stationnaire pour w_2 et w_3 et s'en éloigner pour w_1
Etant donné que rendement meilleur lorsque T au niveau haut, se placer à 110°C et réponse $\hat{y}$ =81,35 - 3,25 x_1 + 5,72 x_2 + 9,35 x_1x_2 - 12,5 x_{12} - 2,7 x_2^2).







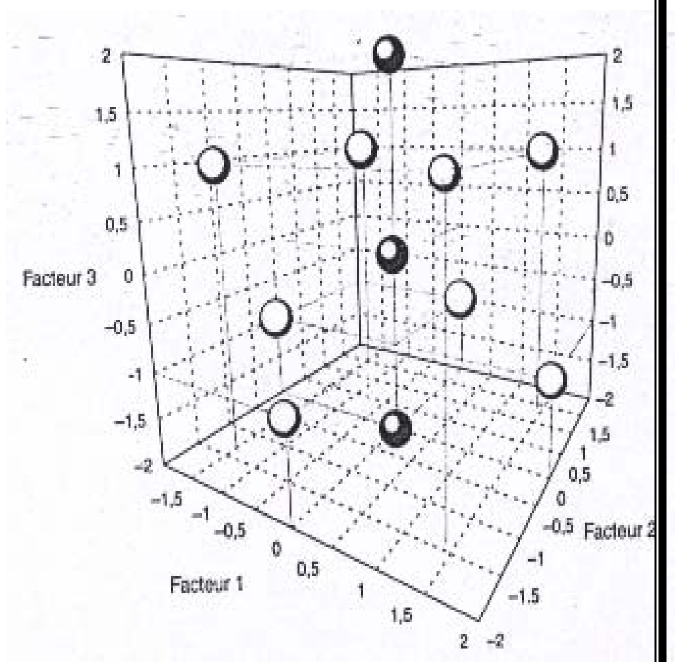
PLANS D'EXPERIENCES DE MODELISATION
SURFACES DE REPONSE*: PLANS DE ROQUEMORE*

Objectif des plans hybrides = **approcher les deux critères d'optimalité** (presque orthogonalité et isovariance par rotation) sans en atteindre aucun. **Orthogonalité garantit meilleure précision possible sur les coefficients du modèle et isovariance par rotation conduit à des erreurs de prévision identiques à une même distance du centre du domaine**. Le respect des deux critères simultanément est impossible.

Plans de Roquemore existent seulement pour 3, 4 et 6 facteurs. Notation du plan donne 3 indications : nombre de facteurs (3, 4 ou 6), nombre d'expériences (11, 16 ou 28) et lettre (A, B ou C) pour différencier 2 plans ayant le même nombre d'expériences et de facteurs (plans 311A et 311B pour 3 facteurs, 416A, 416B et 416C pour 4 facteurs et 628A pour 6 facteurs).

Dans plan 311A de Roquemore, points expérimentaux situés aux sommets d'1 carré (plan de base 2^2 : essais 3, 4, 5 et 6, niveau +1 facteur 3), aux sommets d'un carré décalé de 45° par rapport au carré précédent (points 7, 8, 9 et 10, niveau –1 facteur 3) et sur axe passant par centres des deux carrés (essais 2, 11 et 1, niveaux –2, 0 et +2 du facteur 3).

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



Plan de Roquemore 311A

Plan de Roquemore 311A **presque saturé** (10 coefficients dans le modèle). Matrice de calcul **X** = matrice (11,10) et matrices d'information et de dissipation = (10,10). Termes de la diagonale principale de la matrice d'information correspondant à Σx_1^4 et à $\Sigma x_2^4 = 3.\Sigma x_1^2 x_2^2$ termes rectangles (48 = 3x16) ⇒ **isovariance par rotation respectée** pour **facteurs 1 et 2 mais pas pour le facteur 3.** De même, plan de Roquemore 311A respecte presque critère de presque orthogonalité (éléments hors diagonale principale de $(\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}$ faibles).

$$X^tX = \begin{vmatrix} 11 & & & & & & & 16 & 16 & 16 \\ & 16 & & & & & & & & \\ & & 16 & & & & & & & \\ & & & 16 & & & & & & \\ & & & & 16 & & & & & \\ & & & & & 16 & & & & \\ & & & & & & 16 & & & \\ 16 & & & & & & & 48 & 16 & 16 \\ 16 & & & & & & & 16 & 48 & 16 \\ 16 & & & & & & & 16 & 16 & 40 \end{vmatrix}$$

$$\left(X^tX\right)^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & & & & & & & -0{,}188 & -0{,}188 & -0{,}25 \\ & 0{,}063 & & & & & & & & \\ & & 0{,}063 & & & & & & & \\ & & & 0{,}063 & & & & & & \\ & & & & 0{,}063 & & & & & \\ & & & & & 0{,}063 & & & & \\ & & & & & & 0{,}063 & & & \\ -0.188 & & & & & & & 0{,}061 & 0{,}029 & 0{,}039 \\ -0{,}188 & & & & & & & 0{,}029 & 0{,}060 & 0{,}039 \\ -0{,}25 & & & & & & & 0{,}039 & 0{,}039 & 0{,}094 \end{vmatrix}$$

Ecarts-types des coefficients : $\sigma(\hat{a}_0) = \sigma_r$, $\sigma(\hat{a}_{33}) = 0{,}31\ \sigma_r$ et $\sigma(\hat{a}_1) = \sigma(\hat{a}_2) = \sigma(\hat{a}_3) = \sigma(\hat{a}_{12}) = \sigma(\hat{a}_{13}) = \sigma(\hat{a}_{23}) = \sigma(\hat{a}_{11}) = \sigma(\hat{a}_{22}) = 0{,}25\ \sigma_r$.

Fonction variance de prédiction $d^2(\hat{y}_p) = x^t_p(X^tX)^{-1}x_p$
$\Rightarrow d(\hat{y}_p) = \sqrt{1 - 0{,}31(x_1^2 + x_2^2) - 0{,}44x_3^2 + 0{,}14(x_1^2x_3^2 + x_2^2x_3^2) + 0{,}06(x_1^2 + x_2^2)^2 + 0{,}09x_3^4}$

Facteurs 1 et 2 jouent un rôle symétrique dans cette formule et pour une valeur de x_3, fonction ne dépend que de $\rho^2 = x_1^2 + x_2^2$: critère d'isovariance respecté pour les facteurs 1 et 2.

METHODOLOGIE
DES PLANS D'EXPERIENCES

PLANS DE CRIBLAGE

Alain LAMURE

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : DDL ET PPCM

Pour modèle donné, nombre minimal d'expériences **n_{min}= ddl degrés de liberté du modèle utilisé** = nombre coefficients indépendants.

EXEMPLE 1 : minimum d'expériences pour déterminer coefficients du modèle suivant : $\mathbf{y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 + a_{12}x_1x_2 + a_{23}x_2x_3 + a_{24}x_2x_4}$

ddl 1 1 1 1 1 1 1 1

1 degré de liberté nécessaire pour calcul de moyenne, m-1 pour facteurs à m niveaux et (m_A -1)(m_B -1) pour interactions entre facteurs. **Orthogonalité des facteurs** ⇒ nombre d'expériences **n** du plan = **multiple de tous les produits 2 à 2 des niveaux** : **cas le plus favorable**, n = **PPCM de tous ces produits.**

EXEMPLE 2 Modèle $\mathbf{y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4}$.

Facteurs A B C D

Niveaux 2 3 5 7

ddl = $1_M + 1_A + 2_B + 4_C + 6_D = 14$

Condition d'orthogonalité

A	**2**	*			
B	**3**	2x3	*		
C	**5**	2x5	3x5	*	
D	**7**	2x7	3x7	5x7	*
		2	**3**	**5**	**7**
		A	**B**	**C**	**D**

PPCM = 2 x 3 x 5 x 7 = 210

Plan minimal = plan complet.

Facteurs A B C D

Niveaux 2 4 4 8

ddl = $1_M + 1_A + 3_B + 3_C + 7_D = 15$

Condition d'orthogonalité

A	**2**	*			
B	**2^2**	2x2^2	*		
C	**2^2**	2x2^2	2^2x2^2	*	
D	**2^3**	2x2^3	2^2x2^3	2^2x2^3	*
		2	**2^2**	**2^2**	**2^3**
		A	**B**	**C**	**D**

PPCM = 2^5 = 32

Plan minimal = 32 essais.

Choix judicieux nombre de niveaux permet parfois de diminuer nombre d'expériences.

Lorsque nombre d'expériences n = ddl**,** plan et modèle **saturés ⇒ aucun degré de liberté pour tester adéquation du modèle.**

Plan sursaturé = plan qui comporte moins d'essais que de coefficients inconnus **:** plans utilisés lorsqu'il y a beaucoup de facteurs à examiner et que l'on est sûr que peu d'entre eux sont influents sur la réponse**.**

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : FRACTIONNEMENT

Pour plan complet 2^4 : 16 expériences pour déterminer 16 inconnus (constante, effets principaux et interactions d'ordre 2, d'ordre 3 et d'ordre 4)

$\mathbf{y\sim = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_2 + a_{14}x_1x_4 + a_{23}x_2x_3 + a_{24}x_2x_4 + a_{34}x_3x_4} + a_{123}x_1x_2x_3 + a_{124}x_1x_2x_4 + a_{134}x_1x_3x_4 + a_{234}x_2x_3x_4 + a_{1234}x_1x_2x_3x_4$

Reconstitution fidèle pas forcément utile car interactions ≥ 3 souvent négligeables $\Rightarrow$ 11 expériences nécessaires.

FRACTIONNEMENT DU PLAN COMPLET en ne retenant que expériences pour lesquelles $X_1.X_2.X_3.X_4 = +1$. Dans fraction (a), **1.2.3.4** = **I** (E1)

N° essai	1	2	3	4	1.2.3.4	
1	- 1	- 1	- 1	- 1	+ 1	**a**
2	+ 1	- 1	- 1	- 1	- 1	
3	- 1	+ 1	- 1	- 1	- 1	
4	+ 1	+ 1	- 1	- 1	+ 1	**a**
5	- 1	- 1	+ 1	- 1	- 1	
6	+ 1	- 1	+ 1	- 1	+ 1	**a**
7	- 1	+ 1	+ 1	- 1	+ 1	**a**
8	+ 1	+ 1	+ 1	- 1	- 1	
9	- 1	- 1	- 1	+ 1	- 1	
10	+ 1	- 1	- 1	+ 1	+ 1	**a**
11	- 1	+ 1	- 1	+ 1	+ 1	**a**
12	+ 1	+ 1	- 1	+ 1	- 1	
13	- 1	- 1	+ 1	+ 1	+ 1	**a**
14	+ 1	- 1	+ 1	+ 1	- 1	
15	- 1	+ 1	+ 1	+ 1	- 1	
16	+ 1	+ 1	+ 1	+ 1	+ 1	**a**

Plan fractionnaire orthogonal 2^{4-1} construit comporte 8 expériences et permet de déterminer 8 coefficients donnés par recherche des **CONFUSIONS** :

I x **1 = 1 = 2.3.4** (E2) **I** x **2 = 2 = 1.3.4** (E3)

I x **3 = 3 = 1.2.4** (E4) **I** x **4 = 4 = 1.2.3** (E5)

Chaque effet d'ordre 1 confondu avec une interaction d'ordre 3.

(**2** x E2) **1.2 = 3.4** (E6) (**3** x E2) **1.3** = **2.4** (E7)

(**4** x E2) **1.4 = 2.3** (E8)

Chaque interaction d'ordre 2 confondue avec autre interaction d'ordre 2.

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : GENERATEUR D'ALIAS

Plan 2^{4-1} permet d'estimer les 8 coefficients = **CONTRASTES**:

1/ $\mathbf{a_0 + a_{1234}}$, 2/ $\mathbf{a_1 + a_{234}}$, 3/ $\mathbf{a_2 + a_{134}}$, 4/ $\mathbf{a_3 + a_{124}}$,
5/ $\mathbf{a_4 + a_{123}}$, 6/ $\mathbf{a_{12} + a_{34}}$, 7/ $\mathbf{a_{13} + a_{24}}$ 8/ $\mathbf{a_{14} + a_{23}}$.

En divisant plan 2^3 en deux demi-plans.

N° essai	I	1	2	3	12	13	23	123	
5	+	-	-	+	+	-	-	+	1er demi plan
2	+	+	-	-	-	-	+	+	
3	+	-	+	-	-	+	-	+	
8	+	+	+	+	+	+	+	+	
1	+	-	-	-	+	+	+	-	2ème demi plan
6	+	+	-	+	-	+	-	-	
7	+	-	+	+	-	-	+	-	
4	+	+	+	-	+	-	-	-	

Pour demi-plan supérieur, les 8 colonnes du 1er demi-plan ⇒ **I = 1.2.3**
1 = 2.3, **2 = 1.3** et **3 = 1.2.**

GENERATEUR D'ALIAS = relation **I = 1.2.3.** Avec demi-plan inférieur,
I = -1.2.3, **1 = - 2.3,** **2 = - 1.3** et **3 = - 1.2.**

EQUIVALENCE entre **GENERATEURS D'ALIAS** et **VALEUR DES CONTRASTES**

I = 1.2.3 ⇔ $a'_0 = a_0 + a_{123}$ **1 = 2.3** ⇔ $a'_1 = a_1 + a_{23}$
2 = 1.3 ⇔ $a'_2 = a_2 + a_{13}$ **3 = 1.2** ⇔ $a'_3 = a_3 + a_{12}$
I = - 1.2.3 ⇔ $a''_0 = a_0 - a_{123}$ **1 = - 2.3** ⇔ $a''_1 = a_1 - a_{23}$
2 = - 1.3 ⇔ $a''_2 = a_2 - a_{13}$ **3 = - 1.2** ⇔ $a''_3 = a_3 - a_{12}$

PASSAGE DU GROUPE DE GENERATEUR D'ALIAS (GGA) aux **CONTRASTES**

Ecrire GGA avec signes : exemple **+ I = - 1.2.4 = + 2.3.5 = + 1.3.4.5**
Le multiplier par vecteur correspondant : exemple **1** pour contraste a'_1 ⇒
+1.I = -1.1.2.4 = +1.2.3.5 = +1.1.3.4.5 ⇔ +1 = -2.4 = +1.2.3.5 = +3.4.5
Contraste obtenu en supprimant signes d'égalité
1 - 2.4 + 1.2.3.5 + 3.4.5 ⇒ $a'_1 = a_1 - a_{24} + a_{345} + a_{1235}$

PASSAGE DES CONTRASTES au **GROUPE DE GENERATEUR D'ALIAS (GGA)**

Ecrire le contraste : exemple $a'_1 = a_1 - a_{35} + a_{234} - a_{1245}$
Ne conserver que termes du 2nd membre : **1 - 3.5 + 2.3.4 - 1.2.4.5**.
Séparer termes par des signes d'égalité **1 = -3.5 = +2.3.4 = -1.2.4.5**
Les multiplier par vecteur correspondant (exemple **1** pour a'_1) pour avoir GGA
1.1 = I = - 1.3.5 = + 1.2.3.4 = - 2.4.5

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : GENERATEURS DE BOX-HUNTER

Plan	N. essais	Générateurs	Résolution
2^{3-1}	4	**3 = ± 1.2**	III
2^{4-1}	8	**4 = ± 1.2.3**	IV
2^{5-2}	8	**4= ± 1.2** et **5 = ± 1.3**	III
2^{5-1}	16	**5 = ± 1.2.3.4**	V
2^{6-3}	8	**4 = ± 1.2, 5 = ± 1. 3** et **6 = ± 2.3**	III
2^{6-2}	16	**5 = ± 1.2.3** et **6 = ± 2.3.4**	IV
2^{6-1}	32	**6 = ± 1.2.3.4.5**	VI
2^{7-4}	8	**4 = ± 1.2, 5 = ± 1.3,** **6 = ± 2.3 et 7 = ± 1.2.3**	III
2^{7-3}	16	**5 = ± 1.2.3, 6 = ± 2.3.4** et **7 = ± 1.3.4**	IV
2^{7-2}	32	**6 = ± 1.2.3.4** et **7 = ± 1.2.3.4.5**	IV
2^{7-1}	64	**7 = ± 1.2.3.4.5.6**	VII
2^{8-4}	16	**5 = ± 2.3.4, 6 = ± 1.3.4** **7 = ± 1.2.3** et **8 = ± 1.2.4**	IV
2^{8-3}	32	**6 = ± 1.2.3, 7 = ± 1.2.4** et **8 = ± 2.3.4.5**	IV
2^{8-2}	64	**7 = ± 1.2.3.4** et **8 = ± 1.2.5.6**	V
2^{9-5}	16	**5 = ± 1.2.3, 6 = ± 2.3.4,** **7 = ±1.3.4, 8 = ± 1.2.4** et **9 = ± 1.2.3.4**	III
2^{9-4}	32	**6 = ± 2.3.4.5, 7 = ± 1.3.4.5** **8 = ±1.2.4.5,** et **9 = ± 1.2.3.5**	IV
2^{9-3}	64	**7 = ± 1.2.3.4, 8 = ± 1.3.5.6** et **9 = ± 3.4.5.6**	IV
2^{10-6}	16	**5 = ±1.2.3, 8 = ± 1.2.4,** **6 = ± 2.3.4, 9 = ± 1.2.3.4** **7 = ± 1.3.4,** et **10 = ± 1.2**	III
2^{10-5}	32	**6 = ± 1.2.3.4, 7 = ± 1.2.3.5,** **8 = ± 1.2.4.5, 9 = ± 1.3.4.5** et **10 = ± 2.3.4.5**	IV
2^{10-4}	64	**7 = ± 2.3.4.6, 8 = ± 1.3.4.6,** **9 = ± 1.2.4.5,** et **10 = ± 1.2.3.5**	IV

PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : INTERET DES GENERATEURS BOX-HUNTER

Pour nombre donné de facteurs, tableau de Box-Hunter fournit catalogue des possibilités offertes : choix table comportant peu (nombre important de confusions) ou beaucoup d'expériences. Pour caractériser ampleur des confusions dans table, utilisation notion de **résolution**. Plan de **résolution :**

♦ **III** si effets principaux confondus avec interactions d'ordre II,

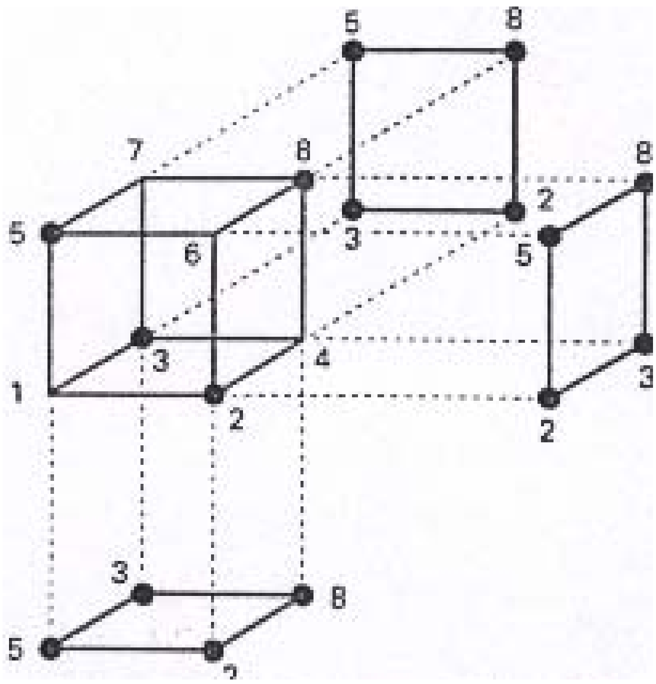
♦ **IV** si effets principaux confondus avec interactions d'ordre III ou plus et interactions d'ordre II confondues avec interactions d'ordre II ou plus,

♦ **V** si effets principaux confondus avec interactions d'ordre IV ou plus et interactions d'ordre II confondues avec interactions d'ordre III ou plus.

RESOLUTION d'un plan d'autant plus élevée que confusions seront peu gênantes.
Avantage démarche de Box-Hunter = mettre en évidence prix à payer pour réduire nombre d'expériences. Choisir plan de résolution au moins égale à IV pour calculer effet de chacun des facteurs et des interactions d'ordre II, plan de résolution IV pour calculer effets des facteurs principaux par interactions d'ordre II.

Intérêt principal des plans fractionnaires = diminution considérable nombre des essais mais connaissance théorie des "alias" indispensable pour interpréter de tels plans.

Soient points situés aux 4 sommets de chaque cube définissant domaine expérimental. Projection points d'expériences sur faces d'un cube définit plan fractionnaire 2^{3-1}



PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : THEORIE DES CONTRASTES

EXEMPLE D'UN PLAN 2^{3-1}: STABILITE DE L'EMULSION DE BITUME.

Essais numérotés 5, 2, 3 et 8 donnent matrice d'expériences plan 2^{3-1}. Pour calcul des effets du plan par méthode des moyennes : multiplication des réponses par signe correspondants aux colonnes, addition des produits et division par nombre d'essais.

N° essai	Facteur 1	Facteur 2	Facteur 3	Stabilité
1	-1	-1	-1	38
2	**+1**	**-1**	**-1**	**37**
3	**-1**	**+1**	**-1**	**26**
4	+1	+1	-1	24
5	**-1**	**-1**	**+1**	**30**
6	+1	-1	+1	28
7	-1	+1	+1	19
8	**+1**	**+1**	**+1**	**16**

	Moyenne	Effet 1	Effet 2	Effet 3
Plan 2^3	27,25	-1	-6	-6
Plan 2^{3-1}	27,25	- 075	- 6,25	- 4,25

Effets calculés dans plan fractionnaire = **contrastes** ou **alias** sont, dans exemple, **comparables à ceux du plan complet** en 2 fois moins d'expériences.

Contraste du facteur 1 $a'_1 = ¼(- y_5 + y_2 - y_3 + y_8)$.
Effet du plan 2^3 $a_1 = 1/8\ (- y_1 + y_2 - y_3 + y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8)$
Interaction entre 2 et 3 $a_{23} = 1/8\ (y_1 + y_2 - y_3 - y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_8)$
$\Rightarrow a'_1 = a_1 + a_{23}$: **contraste = effet principal augmenté de l'interaction** : a_1 et a_{23} sont **concomitants** (ou "**aliasés")**.

Dans plans fractionnaires, effets calculés (= contrastes) ne sont plus purs, ils sont mélangés ("aliasés") avec les interactions.

Possibilité d'obtenir des **résultats convenables à condition que interactions concomitantes ("aliasées") soient négligeables devant valeur des effets principaux.**

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : EXEMPLE D'UN PLAN 2^{5-2}

EXEMPLE : ETUDE DE LA COULEUR D'UN PRODUIT : Facteurs influents : 1/ température de la réaction (basse, élevée), 2/ origine des matières premières (fournisseurs A, B), 3/ vitesse d'agitation (faible, forte), 4/ durée de stockage (court, long) et 5/ nature de l'additif. (A,B).

PLANS DE BASE 2^3 ET FRACTIONNAIRE 2^{5-2} (5 facteurs, 8 essais). **Choisir 2 interactions du plan de base à mélanger avec facteurs principaux** comme **4 = 1.2.3** et **5 = 1.3** $\Rightarrow$ **I = 1.2.3.4** et **I = 1.3.5** $\Rightarrow$ **I = 1.2.3.4.1.3.5** = **2.4.5** et contrastes :

$a'_1 = a_1 + a_{35} + a_{234} + a_{1245}$ $\quad$ $a'_2 = a_2 + a_{45} + a_{134} + a_{1235}$

$a'_3 = a_3 + a_{15} + a_{124} + a_{2345}$ $\quad$ $a'_4 = a_4 + a_{25} + a_{123} + a_{1345}$

$a'_5 = a_5 + a_{13} + a_{24} + a_{12345}$ $\quad$ $a'_{12} = a_{12} + a_{34} + a_{235} + a_{14}$

$a'_{23} = a_{23} + a_{14} + a_{345} + a_{125}$ $\quad$ $a'_0 = a_0 + a_{135} + a_{25} + a_{1234}$

N°	1	2	3	4 =1.2.3	5 =1.3	1.2	2.3	I	Couleur
1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	+1	27,4
2	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	31,1
3	-1	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	26,6
4	+1	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1	32,4
5	-1	-1	+1	+1	+1	+1	-1	+1	31,4
6	+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	16,5
7	-1	+1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	27,5
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	15,5

Calcul des contrastes : $a'_1 = -2,18$; $a'_2 = -0,55$; $a'_3 = -3,33$; $a'_4 = 0,1$; $a'_5 = -4,55$; $a'_{12} = 0,63$; $a'_{23} = -0,68$ et $a'_0 = 26,05$.
Erreur calculée $\Delta E = \pm 1 \Rightarrow$ semblent significatifs $a'_1 = a_1 + a_{35}$, $a'_3 = a_3 + a_{15}$ et $a'_5 = a_5 + a_{13} + a_{24}$ et non significatifs a'_2 ($a_2 + a_{45}$), a'_4 ($a_4 + a_{25}$), a'_{12} ($a_{12} + a_{34}$) et a'_{23} ($a_{23} + a_{14}$).
$\Rightarrow$ Facteurs 2 et 4 sont non influents (leurs interactions aussi) et 1, 3 et 5 semblent influents : 2^{nde} **série d'essais nécessaire pour lever les ambiguïtés.**

Calcul effets 1, 3 et 5 purs (sans influence interactions a_{15}, a_{13} et a_{35}) $\Rightarrow$ choix des contrastes $a''_1 = a_1 - a_{35}$, $a''_3 = a_3 - a_{15}$ et $a''_5 = a_5 - a_{13}$.
Somme puis différence des contrastes permet de séparer les effets des interactions ($a'_1 + a''_1 = 2\,a_1$, $a'_1 - a''_1 = 2\,a_{35}$).

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FACTORIELS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : ANALYSE D'UN PLAN 2^{5-2}

PLAN COMPLEMENTAIRE : contraste $a''_1 = a_1 - a_{35}$ d'où le GGA : **I = -1.3.5**. Plan coupé en 4 donne 2 générateurs indépendants **I = 1.2.3.4** (cf plan de base) $\Rightarrow$ **I = 1.2.3.4** x **(- 1.3.5)** = **- 2.4.5**. $\Rightarrow$ **4 = 1.2.3** et **5 = - 1.3**.

essai	1	2	3	4 = 123	5 = -1.3	1.2	2.3	I
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

Couleur
27,0
17,0
23,6
19,1
24,8
34,6
26,0
26,7

CALCUL DES CONTRASTES : $a''_1 = -0{,}5$; $a''_2 = -1{,}0$; $a''_3 = -3{,}18$; $a''_4 = 1{,}84$; $a''_5 = -3{,}13$; $a''_{12} = -0{,}45$; $a''_{13} = -0{,}68$ et $a_0 = 24{,}85$

Comme **I = 1.2.3.4 = - 1.3.5 = - 2.4.5**.$\Rightarrow$ Contrastes

$a''_1 = a_1 - a_{35} + \cancel{a_{234}} - \cancel{a_{1245}}$,

$a''_2 = a_2 - a_{45} + \cancel{a_{134}} - \cancel{a_{1235}}$

$a''_3 = a_3 - a_{15} + \cancel{a_{124}} - \cancel{a_{2345}}$

$a''_4 = a_4 - a_{25} + \cancel{a_{123}} - \cancel{a_{1345}}$

$a'' = a_5 - a_{13} - a_{24} + \cancel{a_{12345}}$

$a''_{12} = a_{12} + a_{34} - \cancel{a_{235}} - \cancel{a_{145}}$

$a''_{23} = a_{23} + a_{14} - \cancel{a_{125}} - \cancel{a_{345}}$

$a''_0 = a_0 - \cancel{a_{135}} - \cancel{a_{245}} + \cancel{a_{1234}}$

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_{15}	a_{25}	a_{35}	a_{45}	$a_{12} + a_{34}$	$a_{13} + a_{24}$	$a_{14} + a_{23}$	$a_0 + a_{1234}$
-1,34	-0,78	-0,07	-0,87	-3,84	-3,26	0,97	-0,84	0,22	0,09	- 0,71	- 0,68	25,45

CONCLUSION : seuls 2 effets sont influents : T de réaction et nature additif. Interaction entre ces 2 facteurs est forte ($\forall$T mauvaise couleur avec A, bonne couleur avec B si T élevée) d'où choix additif B et T élevée.

Autres facteurs sans influence $\Rightarrow$ prendre vitesse d'agitation la plus faible (économie d'énergie) et fournisseur le moins cher.

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : METHODE DE TAGUCHI

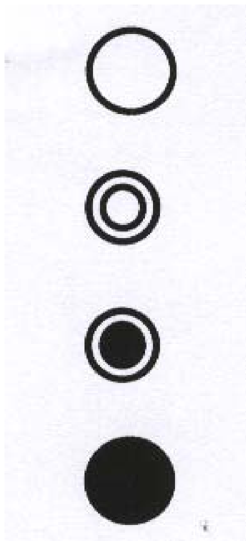
Mise au point de plans fractionnaires adaptés à un modèle = procédure assez fastidieuse et complexe. Existence de **tables standard** dans lesquelles **interactions d'ordre 2 (sauf quelques-unes parfaitement identifiées) et interactions d'ordre > 2 sont négligées.** Méthode de Taguchi fondée sur une représentation graphique du modèle que l'on souhaite identifier : **facteurs représentés par** des **ronds** et classés entre 4 groupes :

GROUPE 1 = ROND VIDE : facteurs très difficiles à modifier ⇒ changement de modalité doit être rare

GROUPE 2 = 2 CERCLES CONCENTRIQUES : facteurs moyennement difficiles à modifier ⇒ changement de modalité doit être peu fréquent,

GROUPE 3 = CERCLE ENTOURANT UN ROND Plein : facteurs assez faciles à modifier ⇒ changement de modalité peut être assez fréquent,

GROUPE 4 = ROND PLEIN : facteurs très faciles à modifier ⇒ changements de modalité peuvent être très fréquents.



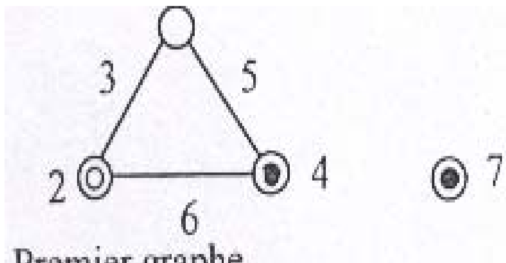
TABLES DE TAGUCHI = tables orthogonales correspondant au PEX. Dans notation de Taguchi, 1 ≡ niveau bas et 2 ≡ niveau haut. Par exemple table $L_8(2^7)$ comportant 8 lignes (⇒ possibilité d'étudier 7 facteurs sans interactions en 8 expériences) extraite plan complet 2^7. Quand il existe des interactions entre facteurs, table suivie de graphes linéaires et de triangles des interactions. : **interactions entre facteurs représentées par un trait entre les facteurs**

MODELES ASSOCIES A LA TABLE $L_8(2^7)$:

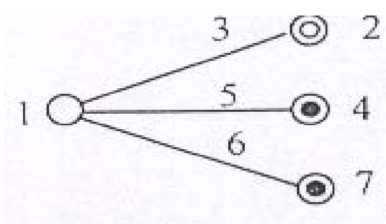
y~ = M + A + B + C + D + AB + BC + AC

y~ = M + A + B + C + D + AB +AC + AD

avec facteur A en colonne 1, facteur B en colonne 2, facteur C en colonne 4, et facteur D en colonne 7



Premier graphe



Deuxième graphe

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : TABLEAUX D'INTERACTIONS

Pour les 2 modèles : **3= 1.2**, **5 = 1.4** et **6 = 2.4**

De manière générale, colonnes qui sont couplées ("aliasées") indiquées par le **TRIANGLE DES INTERACTIONS** qui accompagne la table

Exemple 1er modèle : facteur A en C1, B en C2, C en C4 et D en C7. Interactions AB = L(l) ∩ C(2) en **3**, BC = L(2) ∩ C(4) en **6** et AC = L(1) ∩ C(4) en **5**.

A partir du triangle des alias on en déduit tableau des interactions (exemple pour facteur A, 1 = (6) ∩ C(7) = BC ∩ D = BCD).

colonnes

	2	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**
(1)	3	2	5	4	7	6
(2)		1	6	7	4	5
(3)			7	6	5	4
(4)				1	2	3
(5)					3	2
(6)						1

Facteurs	Colonne	Alias
A	1	BCD
B	2	ACD
C	4	ABD
D	7	ABC
AB	3	CD
AC	5	BD
BC	6	AD

D'où matrice d'expériences

N°	1	2	3 =1.2	4	5 =1.4	6 =2.4	7=1.2.4
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	2	2	2	2
3	1	2	2	1	1	2	2
4	1	2	2	2	2	1	1
5	2	1	2	1	2	1	2
6	2	1	2	2	1	2	1
7	2	2	1	1	2	2	1
8	2	2	1	2	1	1	2

3= 1.2, **5 = 1.4**, **6 = 2.4** et **7 = 1.2.4** ⇒ **I = 1.2.3 = 1.4.5 = 2.4.6** mais aussi **I = 3.4.7 = 2.5.7 = 1.6.7 = 3.5.6**

REMARQUE : **méthode générale** pour plans factoriels de résolution IV avec matrices orthogonales de Taguchi consiste à **attribuer de façon systématique les facteurs aux colonnes impaires.**

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES $2^{k\text{-}p}$: TABLES DE TAGUCHI

Dans table $L_8(2^7)$, facteurs principaux couplés avec interactions ordre III et interactions ordre II concomitantes avec celles ordre II ⇒ résolution plan = IV (interactions ordre III négligeables ⇒ facteurs déterminés sans ambiguïté).
Existence de 18 tables orthogonales que l'on peut classer en 3 groupes :

♦ **INTERACTIONS IMPOSSIBLES** $L_{12}(2^{11})$ et $L_{36}(2^{11} \times 3^{12})$: tables adaptées pour rechercher un extrémum (sens de l'effet des facteurs) ; interactions "diluées" sur ensemble de colonnes,

♦ **INTERACTIONS LIMITEES** $L_{18}(2^1 \times 3^7)$, $L_{32}(2^1 \times 4^9)$, L_{50} $(2^1 \times 5^{11})$: une seule interaction peut être estimée

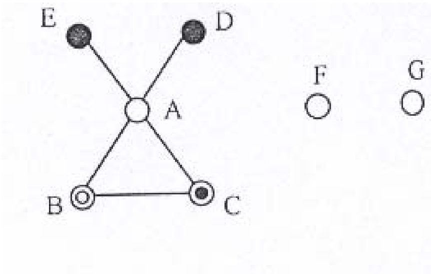
♦ **INTERACTIONS POSSIBLES** $L_4(2^3)$, $L_8(2^7)$, $L_{16}(2^{15})$, $L_{32}(2^{31})$, $L_{64}(2^{63})$, $L_9(3^4)$, $L_{27}(3^{13})$, $L_{81}(3^{40})$, $L_{36}(2^3 \times 3^{13})$, $L_{54}(2^1 \times 3^{25})$, $L_{16}(4^5)$, $L_{64}(4^{21})$ et $L_{25}(5^6)$: tables suivies de graphes linéaires et d'un triangle des interactions.

EXEMPLE : Etude de 7 facteurs à 2 niveaux et 5 interactions
Modèle : y~ = M + A + B + C + D + E + F + G + AB + AC + BC + AD + AE.
Conditions d'orthogonalité (PPCM = 16) et ddl =13 ⇒ table L_{16}.

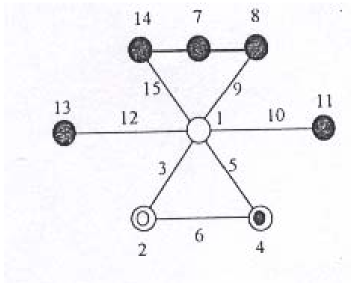
N° essai	**01 A**	**02 B**	03	**04 C**	05	06	07	**08 D**	09	10	**11 F**	12	**13 G**	**14 E**	15	y
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	35,6
2	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	30,4
3	1	1	1	2	2	2	2	1	1	1	1	2	2	2	2	33,5
4	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	39,5
5	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	12,6
6	1	2	2	1	1	2	2	2	2	1	1	2	2	1	1	34,5
7	1	2	2	2	2	1	1	1	1	2	2	2	2	1	1	26,5
8	1	2	2	2	2	1	1	2	2	1	1	1	1	2	2	36,4
9	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	33,5
10	2	1	2	1	2	1	2	2	1	2	1	2	1	2	1	23,4
11	2	1	2	2	1	2	1	1	2	1	2	2	1	2	1	35,6
12	2	1	2	2	1	2	1	2	1	2	1	1	2	1	2	21,5
13	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1	26,6
14	2	2	1	1	2	2	1	2	1	1	2	2	1	1	2	20,4
15	2	2	1	2	1	1	2	1	2	2	1	2	1	1	2	28,4
16	2	2	1	2	1	1	2	2	1	1	2	1	2	2	1	34,5

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
PLANS FRACTIONNAIRES 2^{k-p} : ANALYSE D'UN PLAN DE TAGUCHI

Graphe du problème



Graphe de Taguchi



Moyenne réponses : $a_0 = 29,56$

Effet moyen au niveau i : E_{Ai}= moyenne réponses (A niveau i) – a_0

	A	**B**	**C**	**D**	**E**	**F**	**G**
1	31,13	31,625	27,125	29,037	32,025	33	30,025
2	27,99	27,487	31,987	30,075	27,087	26,112	29,087

Tableau des moyennes

	A	**B**	**C**	**D**	**E**	**F**	**G**
E_1	1,57	2,07	-2,43	- 0,52	2,47	3,44	0,47
E_2	-1,57	-2,07	2,43	0,52	-2,47	-3,44	-0,47

Tableau des effets moyens.

AB	B = 1	B = 2
A = 1	34,75	27,5
A = 2	28,5	27,5

AC	C = 1	C = 2
A = 1	28,3	34,0
A = 2	26,0	30,0

BC	C = 1	C = 2
B = 1	30,7	32,5
B = 2	23,5	31,45

AE	E = 1	E = 2
A = 1	34,0	28,20
A = 2	30,0	25,95

AD	D = 1	D = 2
A = 1	27,05	35,2
A = 2	31,0	24,95

Tableau des moyennes pour interactions retenues.

Interactions I_{AiBj} = moyenne réponse (A niveau i et B niveau j) – E_{Ai} – a_0.

$I_{A1B1} = + 1,55$ $\quad I_{A1C1} = - 0,42$ $\quad I_{B1C1} = + 1,53$ $\quad I_{A1D1} = - 3,56$ $\quad I_{A1E1} = + 0,43$

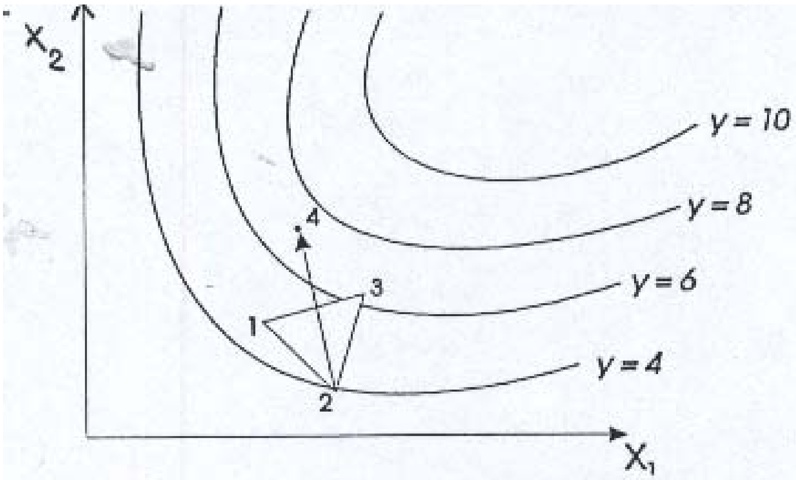
Modèle Y~ = 29,56 + [1,57 -1,57] A + [2,77 -2,07] B + [-2,43 2,43] C + [-0,52 0,52] D + [2,47 -2,47] E + [3,44 -3,44] F + [0,47 -0,47] G +

$$ {}^tA\begin{bmatrix} 1,55 & -1,55 \\ -1,55 & 1,55 \end{bmatrix}B + {}^tA\begin{bmatrix} -0,42 & 0,42 \\ 0,42 & -0,42 \end{bmatrix}C + {}^tA\begin{bmatrix} -3,56 & 3,56 \\ 3,56 & -3,56 \end{bmatrix}D + {}^tB\begin{bmatrix} 1,53 & -1,53 \\ -1,53 & 1,53 \end{bmatrix}C $$

$$ + {}^tA\begin{bmatrix} 0,43 & -0,43 \\ -0,43 & 0,43 \end{bmatrix}E $$

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
CONSTRUCTION PROGRESSIVE : METHODE SIMPLEX®

PRINCIPE : structure initiale à k+1 expériences plans puis développement de manière itérative en fonction des résultats accumulés. Si points équidistants, simplexe **régulier** (triangle équilatéral pour espace à 2 dimensions). Démarche consiste à effectuer expériences initiales dans conditions expérimentales correspondant aux coordonnées des sommets du simplexe puis à ***faire évoluer simplexe dans espace des variables explicatives en supprimant, à chaque étape, le point pour lequel la réponse est la plus mauvaise pour le remplacer par un autre point situé à l'opposé de celui-ci sur l'axe passant par le centre de gravité des autres sommets***.



METHODE DU SIMPLEX® ne postule aucune forme de modèle mathématique**. C'est une méthode d'optimisation rapide ponctuelle** (conduit à un point = optimum d'une réponse quantitative) **séquentielle** (expériences analysées au fur et à mesure après une phase initiale), **monotone** (expérience abandonnée que si expérience plus favorable trouvée). **utilisée quand on n'a qu'une seule variable expliquée.**

Soit une réponse y, fonction de 2 variables x_1 et x_2.
Longueur arête du simplexe régulier (triangle équilatéral) = a dans espace à k dimensions et p et q = coordonnées d'un sommet.

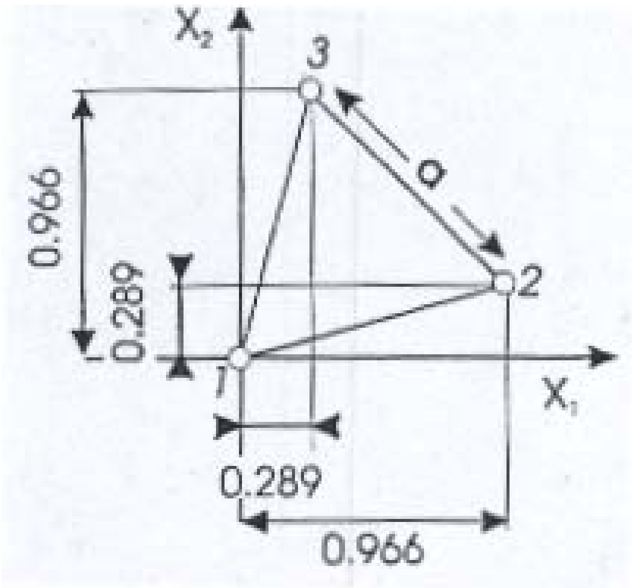
Existence de plusieurs simplexes de départ

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
CONSTRUCTION PROGRESSIVE : SIMPLEXE DE DEPART N°1

♦ Un sommet à l'origine des axes et axe passant par ce sommet et par centre de gravité du triangle confondu avec la première bissectrice.

Matrice d'expériences générale des (k+1) points de ce simplexe de départ :

N° point	x_1	x_2	x_3	…	x_{k-1}	x_k
1	**0**	**0**	**0**	…	**0**	**0**
2	**p**	q	q	…	q	q
3	q	**p**	q	…	q	q
…	…	…	…	…	…	…
k	q	q	q	…	**p**	q
k+1	q	q	q	…	q	**p**



Matrice formée d'une ligne de zéro, puis tableau symétrique ne contenant que p sur diagonale principale et q en dehors diagonale. Calcul valeurs de p et q simple : carré de la distance entre 2 points quelconques constant et égal à a^2. Valeur de a arbitraire et en prenant a = 1 $\Rightarrow$ $p = \frac{1}{k\sqrt{2}}\left(\sqrt{k+1}-1+k\right)$ et $q = \frac{1}{k\sqrt{2}}\left(\sqrt{k+1}-1\right)$. D'où valeurs de p et q calculées pour différentes valeurs de k

k	2	3	4	5	6	7	8
p	0,966	0,943	0,926	0,912	0,901	0,892	0,884
q	0,259	0,236	0,219	0,205	0,194	0,185	0,177

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
CONSTRUCTION PROGRESSIVE : AUTRES SIMPLEXES DE DEPART

♦ **CENTRE DU PLAN SITUE AU CENTRE DU SIMPLEXE.**

Matrice d'expérience générale de ce 2nd simplexe de départ est :

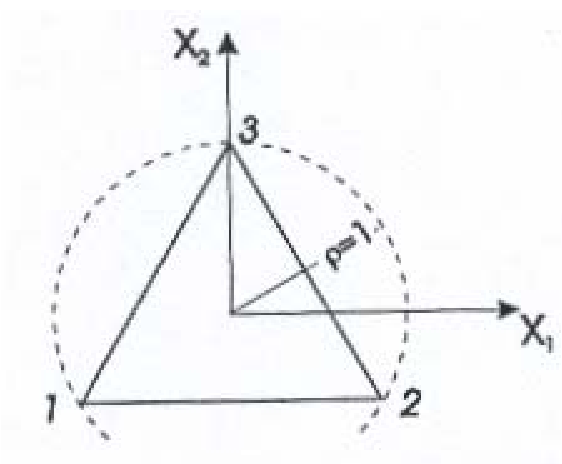
N° point	x_1	x_2	x_3	x_4	…	x_k
1	-1/2	$-1/2\sqrt{3}$	$-1/2\sqrt{6}$	$-1/2\sqrt{10}$	…	$-1/\sqrt{2k(2k+1)}$
2	½	$-1/2\sqrt{3}$	$-1/2\sqrt{6}$	$-1/2\sqrt{10}$	…	$-1/\sqrt{2k(2k+1)}$
3	0	$2/2\sqrt{3}$	$-1/2\sqrt{6}$	$-1/2\sqrt{10}$	…	$-1/\sqrt{2k(2k+1)}$
4	0	0	$3/2\sqrt{6}$	$-1/2\sqrt{10}$	…	$-1/\sqrt{2k(2k+1)}$
5	0	0	0	$4/2\sqrt{10}$	…	$-1/\sqrt{2k(2k+1)}$
…	…	…	…	…	…	…
k+1	0	0	0	0	…	$k/\sqrt{2k(2k+1)}$

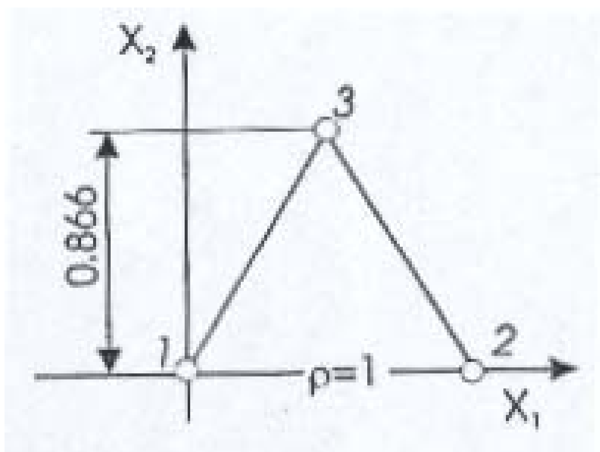
♦ **SIMPLEXE DE DEPART ORIENTE DE TELLE FAÇON QU'UN COTES PARALLELE A L'AXE DU FACTEUR QUI SEMBLE LE PLUS IMPORTANT.**

Matrice d'expérience de ce 3ème simplexe de départ est pour 6 facteurs.

N° point	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1	0	0	0	0	0	0
2	1	0	0	0	0	0
3	0,5	0,866	0	0	0	0
4	0,5	0,259	0,816	0	0	0
5	0,5	0,259	0,204	0,791	0	0
6	0,5	0,259	0,204	0,158	0,775	0
7	0,5	0,259	0,204	0,158	0,129	0,764

Pour nombre de facteurs > 7, calcul des éléments diagonaux p_n (k = n) et non diagonaux q_n (pour k = n) par récurrence : $p_n^{\,2} = 1 - \sum_{i=1}^{n-1} q_i^{\,2}$ et $q_n = p_n - 1/2p_n$



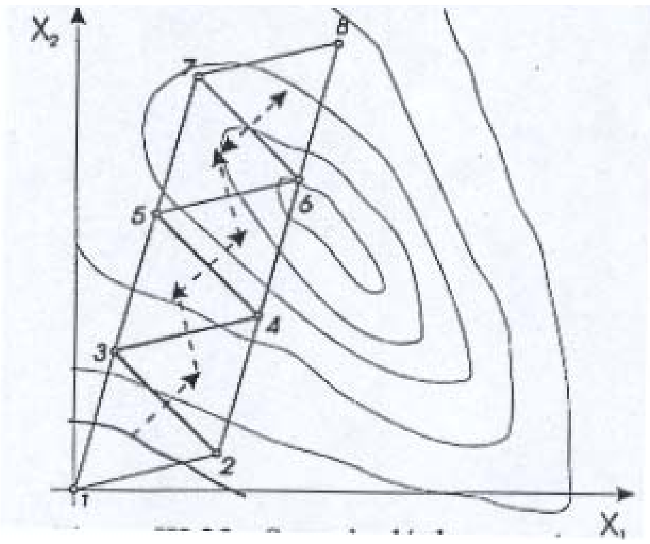


Suivi de l'évolution du simplexe avec **COURBES DE NIVEAux**. Méthode d'optimisation consiste à se déplacer dans le plan pour s'éloigner du plus mauvais point, dans espoir de trouver de meilleures réponses. A partir du simplexe de départ, ***progression*** assurée en appliquant **REGLE 1** ***: A partir du simplexe de départ le point auquel la réponse est la moins bonne est remplacé par son symétrique par rapport au centre de gravité des k points restants, ce qui conserve la régularité du nouveau simplexe. Nous dirons que la transformation est une réflexion.***

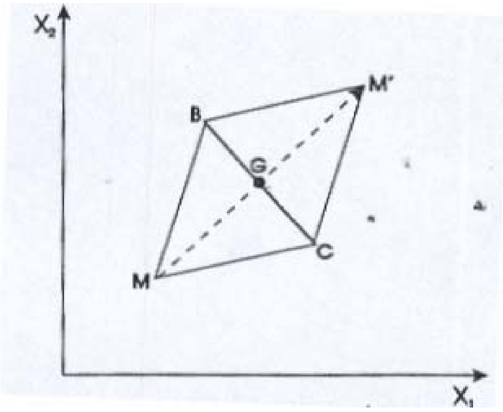
EXEMPLE : point le plus mauvais = point 1 puisque $y_1 < y_2 < y_3$. Réflexion 1 $\rightarrow$ 4 (réponse y_4). Points (2), (3) et (4) forment nouveau triangle équilatéral (simplexe) auquel nous pouvons appliquer même transformation par réflexion.

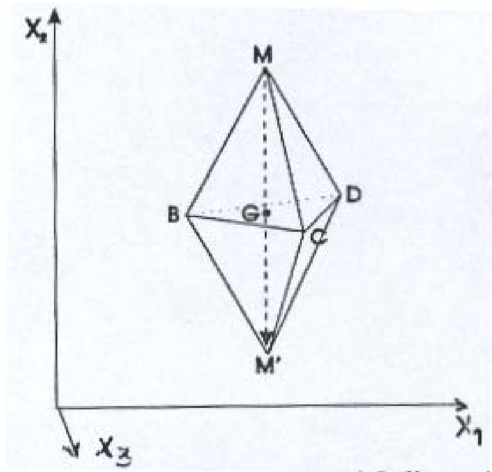
♦ Règle de **déplacement du simplexe** appliquée successivement et direction du mouvement du simplexe toujours **à l'opposé point le plus mauvais**. Déplacement conduit à région dans laquelle valeurs de y meilleure aussi longtemps que, dans le domaine limité par le triangle, surface de réponse a une pente suffisante.

♦ Raisonnement suppose implicitement que **surface de réponse = plan** de la forme $\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_k x_k$ contenant (k+1) coefficients déterminés de façon unique par les (k+1) réponses aux (k+1) sommets du simplexe. **Déplacements en zigzag** dans direction grossièrement constante et **suivant** approximativement **ligne de la plus grande pente**.



DANS ESPACE A 2 DIMENSIONS. M' = symétrique de M par rapport à G, centre de gravité de B et C (G = milieu de MM' et de BC). Soit x_{iz} = i$^{\text{ème}}$ coordonnée de z. $x_{iG} = (x_{iM} + x_{iM'})/2 = (x_{iB} + x_{iC})/2 \Rightarrow$ $x_{iM'} = 2\lceil (x_{iB} + x_{iC})/2 \rceil - x_{iM}$





A 3 DIMENSIONS, M a pour symétrique M', par rapport à G, centre de gravité du plan BCD. : $x_{iG} = (x_{iB} + x_{iC} + x_{iD})/3$ donc $x_{iM'} = \lceil 2(x_{iB} + x_{iC} + x_{iD})/3 \rceil - x_{iM}$

Et de façon générale : $$x_{iM'} = 2/k \sum_{\substack{1 \le z \le k+1 \\ z \ne M}} x_{iZ} - x_{iM}$$

EXEMPLE : ETUDE DU RENDEMENT en fonction de X_1 = température, X_2 et X_3 = concentrations en NaOH et $CHCl_3 \Rightarrow$ 4 points pour le simplexe.

	Niveau 1	Niveau 2	Pas Δx_i
X_1 température (°C)	25	15	-10
X_2 concentration NaOH (mol.l^{-1})	5,6	6,6	1
X_3 concentration $CHCl_3$ (mol.l^{-1})	1,3	1,0	-0,3

Avec simplexe de départ N°1, **coordonnées x_i** des sommets du triangle équilatéral, **dans espace normé** (a =1) prennent valeurs p = 0,943 et q = 0,236.

Matrice d'expériences et rendements

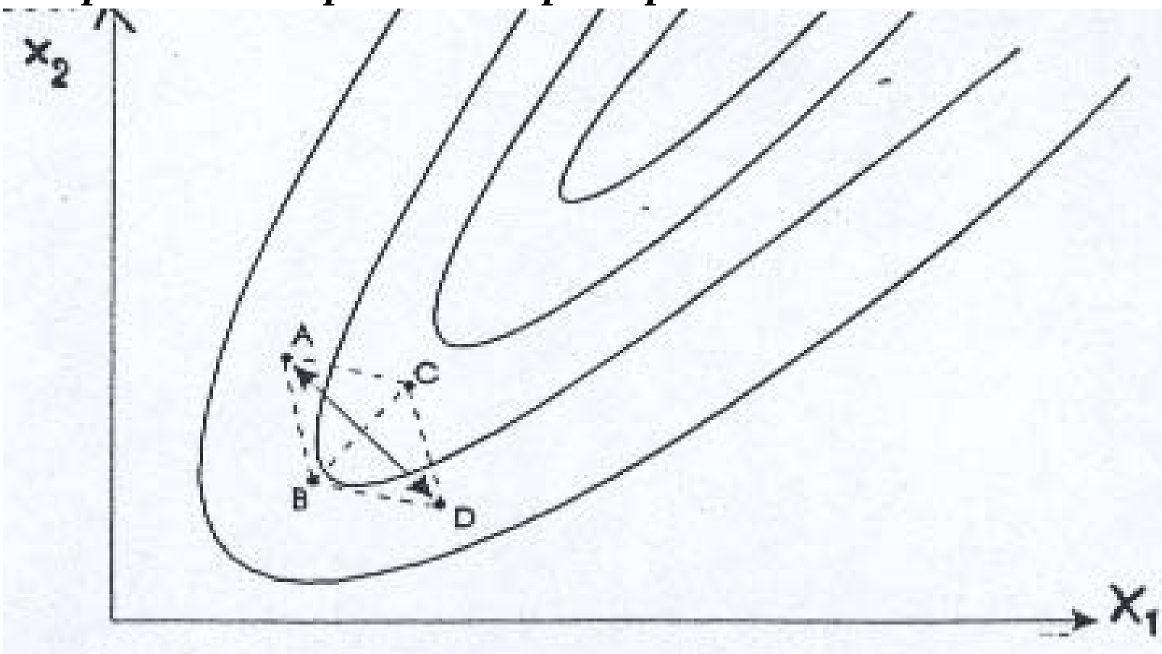
N°	x_1	x_2	x_3	U_1	U_2	U_3
1	0	0	0	25	5,6	1,3
2	0,943	0,236	0,236	16,0	5,84	1,22
3	0,236	0,943	0,236	22,6	6,54	1,22
4	0,236	0,236	0,943	22,6	5,84	1,02

y
52,3
73,8
83,1
63,5

Plus mauvais rendement avec point N°1 $\Rightarrow$ remplacement par son symétrique 5 de coordonnées : $x_{1,5}$ = 15,8, $x_{2,5}$ = 6,54 et $x_{3,5}$ = 1,00

Règle de déplacement appliquée jusqu'à obtention d'un optimum ou qu'apparaissent des ***impossibilités*** qui impliquent utilisation d'autres règles pour faire progresser le simplexe. En particulier, difficulté de progression si un des côtés situé sur une arête de la surface de réponse. Règle 1 $\Rightarrow$ remplacement point A $\rightarrow$ point D où la réponse reste la plus mauvaise. En appliquant de nouveau règle 1 point D $\rightarrow$ point A $\Rightarrow$ oscillation continuelle ou relaxation. Il faut utiliser alors **REGLE N° 2**

Si l'application deux fois consécutives de la règle 1 conduit à retrouver le point précédemment abandonné, cette même règle 1 doit être appliquée au deuxième plus mauvais point du simplexe précédent.

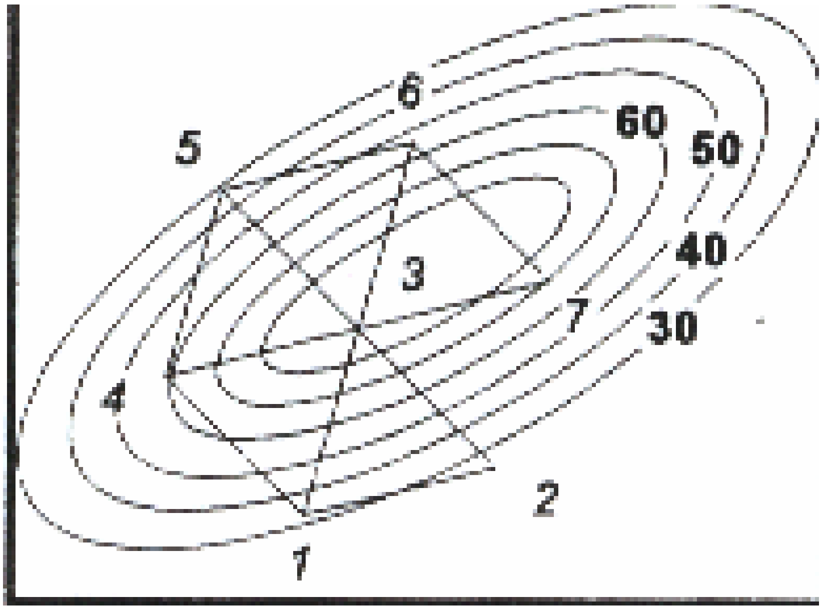


Dans exemple précédent, puisque image de A = A après 2 réflexions, il faut abandonner point B (pour le substituer par le point C') **dans triangle ABC** (simplexe) **de départ**.

Remarque : si $y_D < y_B < y_C$ et $y_D > y_A$, simplexe DBC peut aussi être utilisé pour supprimer point B.

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
CONSTRUCTION PROGRESSIVE : CONDITIONS D'ARRET

Il peut arriver également que réponse en un des points telle que ***simplexe tourne autour de ce sommet***. Ceci peut se produire pour deux raisons :
1/ pivot proche de l'optimum,
2/ réponse en ce point est entachée d'une erreur importante. ⇒
REGLE N°3 (**règle du vieillissement**) : ***Si après (k+1) réflexions, un même sommet est conservé dans les simplexes successifs, l'expérience en ce point doit être refaite.***



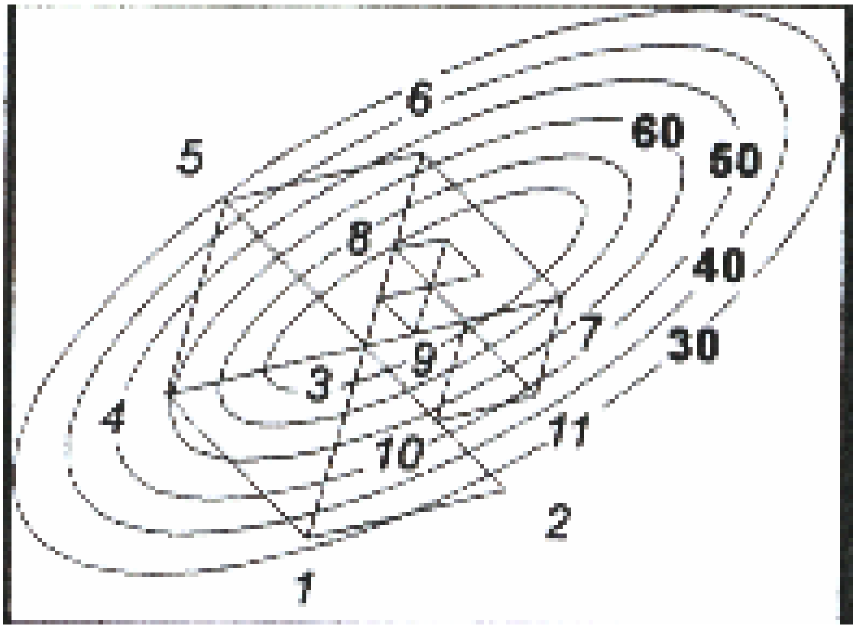
Cette règle permet d'**éviter** la trop grande importance que pourrait prendre une **réponse aberrante**. Si nouvelle expérience confirme résultat précédent, ***progression du simplexe*** doit être continuée en appliquant la **REGLE 4** ***: Un nouveau simplexe doit être envisagé lorsqu'un sommet du simplexe où la réponse est la meilleure est utilisé depuis M itérations avec M défini par la relation (k = nombre de facteurs) : M = 1,65 k + 0,05 k²*** $M = 1{,}65\,k + 0{,}05\,k^2$

k	2	3	4	5	6
M	3	5	7	9	11-12

On est proche de l'optimum : on peut alors soit considérer optimum satisfaisant et arrêter, soit améliorer l'optimum en construisant un plan d'expériences permettant étude du modèle au voisinage de l'optimum.

REGLE 5 *: Une recherche plus précise de l'optimum peut être conduite à partir du point stationnaire en diminuant la taille du simplexe* (de moitié ou du quart, par exemple).

Remarque : **méthode** simplex bien que ne prenant pas en compte **forme réelle surface de réponse** permet de trouver rapidement (en **peu d'expériences)**, zone d'intérêt dans laquelle recherche plus fine pourra être faite. Au cours de la progression du simplexe, sa taille pourra évoluer si l'on s'aperçoit du mauvais choix du pas d'une variable (pas trop petits ⇒ "piétinement" de la progression et des pas trop grands ne permettent pas de localiser un maximum aigu).

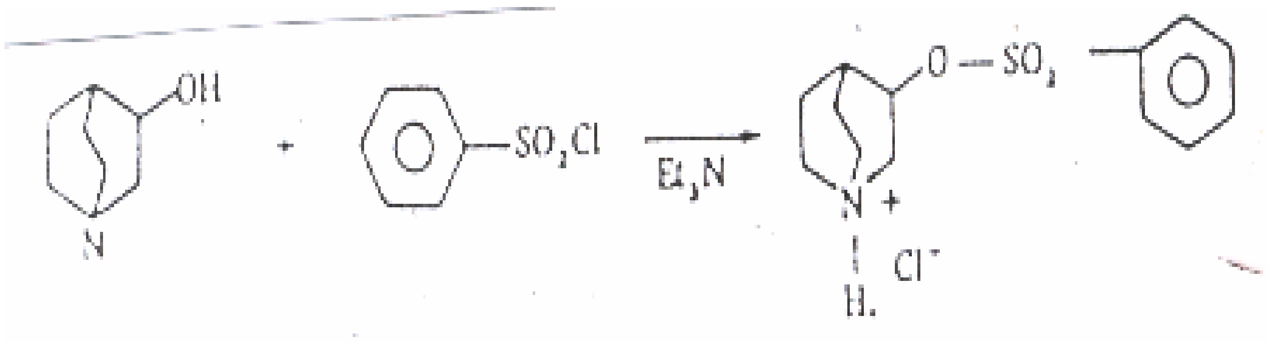


Deux autres règles peuvent être ajoutées. La première concerne les ***expériences où erreurs de mesure gênent progression du simplexe***.
REGLE 6 : *Si l'erreur expérimentale est trop grande par rapport à la variation supposée de la réponse, l'apparition d'une erreur de biais sera évitée en remplaçant toutes les anciennes observations du dernier simplexe par de nouvelles, chaque fois que 2(k + 1) expériences auront été faites.*

Dans le cas ou une ou plusieurs variables soumises à des **contraintes** (cf plans de mélange) et que application règle N°1 ⇒ dépassement des limites, appliquer règle N°2 successivement au 2ème plus mauvais point (ou au 3ème si 2ème lui aussi hors limites). **REGLE 7 *: Remplacer un nouveau sommet qui dépasse une contrainte par un autre sommet choisi par la règle 2***

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
CONSTRUCTION PROGRESSIVE : EXEMPLE D'APPLICATION DE SIMPLEX

EXEMPLE : phénylsulfonyl-3 quinuclidine = intermédiaire industriel
But : optimiser rendement en raison coût élevé du réactif principal : hydroxy-3 quinuclidine. Synthèse en une étape par action du chlorure de benzène sulfonyle sur hydroxy-3 quinuclidine, en présence de triéthylamine.



Variables influentes (cf niveau et pas de variations dans tableau)
x_1 : rapport molaire Benzène Sulfochlorure/Quinuclidinol,
x_2 : rapport molaire Triméthylamine/Quinuclidinol,
x_3 : température pendant l'introduction du quinuclidinol,
x_4 : durée de la réaction et x_5 : température de la réaction.
Réponse = rendement en phénylsulfonyloxyquinuclidine.

Variables	Niveau de base	Pas
x_1	1	0,2
x_2	1	0,2
x_3	15 °C	8 °C
x_4	1,5 h	0,5 h
x_5	20 °C	8 °C

Simplexe régulier de départ N°1 $p = \frac{1}{k\sqrt{2}}\left(\sqrt{k+1} + k - 1\right)$ et $q = \frac{1}{k\sqrt{2}}\left(\sqrt{k+1} - 1\right)$

N°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	x_1	x_2	x_3 (°C)	x_4 (h)	x_5 (°C)	Rdt
1	0	0	0	0	0	1	1	15,0	1,5	20,0	57,1
2	**0,912**	0,205	0,205	0,205	0,205	1,182	1,041	16,6	1,6	21,6	**56,8**
3	0,205	**0,912**	0,205	0,205	0,205	1,041	1,182	16,6	1,6	21,6	59,9
4	0,205	0,205	**0,912**	0,205	0,205	1,041	1,041	22,3	1,6	21,6	59,2
5	0,205	0,205	0,205	**0,912**	0,205	1,041	1,041	16,6	2,0	21,6	62,4
6	0,205	0,205	0,205	0,205	**0,912**	1,041	1,041	16,6	1,6	27,3	57,2

PLANS D'EXPERIENCES DE CRIBLAGE
CONSTRUCTION PROGRESSIVE : ANALYSE DU SIMPLEX

DEPLACEMENT DU SIMPLEXE REGULIER : remplacement point N°2 (rendement le moins bon) par son symétrique par rapport à l'hyperface opposée (règle N°1). Pour calculer coordonnées réduites de ce point N°7 utilisation formule : $X_{R,J} = 2X_{G,J} - X_{W,J}$ où W = N° du plus mauvais point et R = N° du nouveau point symétrique avec $X_{G,J} = \frac{1}{k}\sum_{l=1}^{k+1} X_{l,J}$ où k = 5 et l ≠ W.

N°	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	x_1	x_2	x_3 (°C)	x_4 (h)	x_5 (°C)	Rdt
7	-0,584	0,406	0,406	0,406	0,406	0,883	1,081	18,2	1,7	23,2	58,8
8	0,094	0,773	0,773	0,773	0,773	1,019	1,155	21,2	1,9	26,2	67,9
9	-0,155	0,795	0,795	0,795	-0,194	0,969	1,159	21,4	1,9	18,4	64,2
10	0,805	0,750	0,750	0,750	0,072	1,161	1,15	21,0	1,9	20,6	68,0
11	0,256	1,169	1,179	1,169	0,219	1,051	1,234	16,4	2,1	21,7	73,4
12	0,277	0,565	0,876	1,555	0,225	1,055	1,113	22,0	2,3	21,8	71,5
13	0,306	1,416	1,144	1,105	0,233	1,061	1,283	24,2	2,1	21,9	**74,3**
14	0,851	1,074	0,694	1,346	0,803	1,170	1,215	20,6	2,2	26,4	66,8

Simplexe	N° expériences						Rendements					
1	1	~~2~~	3	4	5	6	57,1	**56,8**	59,9	59,2	62,4	57,2
2	~~1~~	**7**	3	4	5	6	**57,1**	58,8	59,9	59,2	62,4	57,2
3	**8**	7	3	4	5	~~6~~	67,9	58,8	59,9	59,2	62,4	**57,2**
4	8	~~7~~	3	4	5	**9**	67,9	**58,8**	59,9	59,2	62,4	64,2
5	8	**10**	3	~~4~~	5	9	67,9	68,0	59,9	**59,2**	62,4	64,2
6	8	10	~~3~~	**11**	5	9	67,9	68,0	**59,9**	73,4	62,4	64,2
7	8	10	**12**	11	~~5~~	9	67,9	68,0	71,5	73,4	**62,4**	64,2
8	8	10	12	11	**13**	~~9~~	67,9	68,0	71,5	73,4	74,3	**64,2**
9	8	10	12	11	13	**14**	67,9	68,0	71,5	73,4	74,3	**66,8**