

## Concevoir une stratégie expérimentale

Plans d'expériences — Séance 1 — « Pourquoi toutes les expériences ne se valent-elles pas ? »

### Choisir ses essais : facteurs, interactions, identifiabilité et précision

#### Comment utiliser ce fascicule

Ce fascicule rassemble les connaissances de la séance 1. Il suit l'ordre des missions vécues en séance et peut être lu seul, par exemple si vous avez été absent.

Chaque section part d'une situation d'expérimentation, puis explique ce qu'il faut en retenir. Les calculs s'appuient sur le fascicule F0, auquel renvoient les mentions du type « F0, section 5 ». Les encadrés « Vérifiez votre compréhension » sont suivis de leurs réponses. Les démonstrations sont regroupées à la fin des sections, dans les parties « Pour aller plus loin ».

À la fin de la séance, vous devez savoir :

- décrire un problème expérimental par sa réponse, ses facteurs et son domaine, et coder les facteurs ;
- dire ce que mesure réellement une stratégie qui fait varier un facteur à la fois, et dans quels cas elle est raisonnable ;
- calculer et interpréter une interaction entre deux facteurs ;
- reconnaître des effets confondus et vérifier, à l'aide du rang, qu'un modèle est identifiable ;
- écrire un modèle sous forme matricielle et comparer la précision de deux plans avant de les réaliser ;
- dire ce qu'un plan ne permettra pas de conclure.

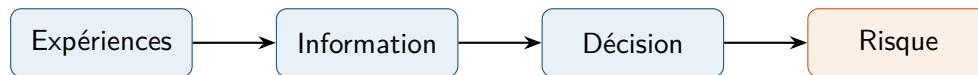
## Table des matières

|          |                                                                     |           |
|----------|---------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Pourquoi planifier ses expériences</b>                           | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Réponse, facteurs et domaine expérimental</b>                    | <b>4</b>  |
| 2.1      | Le cas étudié pendant la séance . . . . .                           | 4         |
| 2.2      | Le vocabulaire . . . . .                                            | 4         |
| 2.3      | Les variables codées . . . . .                                      | 4         |
| <b>3</b> | <b>Faire varier un facteur à la fois</b>                            | <b>6</b>  |
| 3.1      | Deux stratégies pour quatre essais . . . . .                        | 6         |
| 3.2      | Les résultats des deux laboratoires . . . . .                       | 6         |
| 3.3      | Quand l'ordre des essais change la conclusion . . . . .             | 6         |
| 3.4      | Ce que mesure réellement cette stratégie . . . . .                  | 7         |
| 3.5      | Quand cette stratégie est-elle raisonnable? . . . . .               | 7         |
| <b>4</b> | <b>Les interactions</b>                                             | <b>9</b>  |
| 4.1      | Mesurer l'effet d'un facteur à chaque niveau de l'autre . . . . .   | 9         |
| 4.2      | Le diagramme d'interaction . . . . .                                | 9         |
| 4.3      | Ce que l'interaction change dans l'interprétation . . . . .         | 10        |
| 4.4      | Coefficient et effet total : deux conventions . . . . .             | 11        |
| <b>5</b> | <b>Faire varier les facteurs ensemble : la confusion des effets</b> | <b>12</b> |
| 5.1      | Le journal de production . . . . .                                  | 12        |
| 5.2      | Plusieurs modèles également bons . . . . .                          | 12        |
| 5.3      | Le diagnostic par le rang . . . . .                                 | 12        |
| 5.4      | Quand faire varier les facteurs ensemble est-il légitime? . . . . . | 13        |
| 5.5      | Lever la confusion . . . . .                                        | 13        |
| <b>6</b> | <b>Le modèle linéaire et sa matrice</b>                             | <b>14</b> |
| 6.1      | Pourquoi écrire un modèle . . . . .                                 | 14        |
| 6.2      | Écriture du modèle . . . . .                                        | 14        |
| 6.3      | Les hypothèses . . . . .                                            | 14        |
| 6.4      | Estimer les coefficients . . . . .                                  | 15        |
| <b>7</b> | <b>Plus d'essais, plus d'information ?</b>                          | <b>16</b> |
| 7.1      | La question posée . . . . .                                         | 16        |
| 7.2      | Le calcul de $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ . . . . .                 | 16        |
| 7.3      | Comparaison de cinq plans . . . . .                                 | 16        |
| 7.4      | Ce qu'apportent vraiment les répétitions . . . . .                  | 17        |

|           |                                                           |           |
|-----------|-----------------------------------------------------------|-----------|
| <b>8</b>  | <b>Deux plans identifiables sont-ils équivalents ?</b>    | <b>18</b> |
| 8.1       | La précision se calcule avant l'expérience . . . . .      | 18        |
| 8.2       | Mission D : deux plans de quatre essais . . . . .         | 18        |
| 8.3       | Le rôle de l'orthogonalité . . . . .                      | 18        |
| 8.4       | Le rôle de la position des essais . . . . .               | 19        |
| 8.5       | Quand une partie du domaine est interdite . . . . .       | 19        |
| 8.6       | Cinq notions à ne pas confondre . . . . .                 | 19        |
| <b>9</b>  | <b>Ce qu'un plan ne permet pas de conclure</b>            | <b>21</b> |
| 9.1       | Quand le modèle oublie un terme . . . . .                 | 21        |
| 9.2       | Les limites à énoncer systématiquement . . . . .          | 21        |
| <b>10</b> | <b>Vers la séance 2 : trois facteurs en quatre essais</b> | <b>22</b> |
| <b>11</b> | <b>Exercices corrigés et références</b>                   | <b>23</b> |

# 1 Pourquoi planifier ses expériences

Au laboratoire comme dans l'industrie, on réalise rarement une expérience « pour voir ». On la réalise parce qu'une décision doit être prise : choisir des conditions opératoires, valider une méthode d'analyse, abandonner une piste, acheter un équipement. Cette décision comporte un risque, celui de se tromper, et ce risque dépend de la qualité de l'information apportée par les expériences. On peut résumer cette chaîne ainsi :



On entend souvent dire que la qualité de l'information dépend de la position des points expérimentaux, et non des résultats obtenus ni du nombre d'expériences. La séance permet d'examiner cette affirmation. Elle est juste sur le premier point : deux plans de même taille peuvent donner des précisions très différentes, selon la façon dont les essais sont disposés. Elle est juste aussi sur le deuxième : on peut calculer la précision d'un plan avant d'avoir le moindre résultat. Elle doit en revanche être nuancée sur le troisième, car, à disposition des essais comparable, la précision s'améliore quand le nombre d'essais augmente. Il reste vrai qu'ajouter des essais mal placés peut n'apporter aucune information sur la question posée.

Le choix d'une stratégie dépend d'abord de cette question. On distingue habituellement quatre objectifs. L'**exploration** cherche à savoir ce qui se passe dans un domaine encore mal connu. Le **criblage** cherche, parmi de nombreux facteurs, ceux qui ont réellement une influence ; il fera l'objet de la séance 2. L'**étude quantitative** cherche à mesurer l'effet de chaque facteur et à savoir si les facteurs agissent indépendamment les uns des autres ; elle est au cœur des séances 1 et 3. L'**optimisation**, enfin, recherche les meilleures conditions, souvent en conciliant plusieurs réponses ; elle sera traitée en séance 4.

Un **plan d'expériences** est une stratégie qui organise les essais pour obtenir l'information recherchée aussi efficacement et aussi précisément que possible, compte tenu des contraintes de coût, de durée, de faisabilité et de sécurité. Un plan ne se juge donc jamais seul : il se juge par rapport à une question, à un modèle que l'on accepte de supposer, et à des contraintes. Toute la séance consiste à expliciter ces trois éléments.

## 2 Réponse, facteurs et domaine expérimental

### Dans cette section

Décrire un problème expérimental avec le vocabulaire des plans d'expériences ; passer des valeurs réelles aux variables codées, et inversement.

### 2.1 Le cas étudié pendant la séance

Un laboratoire d'analyse doit améliorer le rendement d'extraction d'un pesticide contenu dans des échantillons solides, avant de le doser par chromatographie. Deux réglages paraissent déterminants : la température d'extraction, que l'on peut faire varier entre 40 °C et 60 °C, et la durée d'extraction, entre 1 h et 2 h. Chaque essai occupe l'extracteur pendant une demi-journée, ce qui limite le nombre d'essais possibles. Deux laboratoires traitent des échantillons différents : un sédiment sableux pour le laboratoire A, une boue de station d'épuration pour le laboratoire B.

### 2.2 Le vocabulaire

La grandeur que l'on mesure et que l'on cherche à améliorer s'appelle la **réponse** ; ici, c'est le rendement d'extraction, exprimé en pourcentage. On n'agit jamais directement sur la réponse, mais sur des grandeurs que l'on peut régler, appelées **facteurs** : ici, la température  $T$  et la durée  $t$ . Les valeurs choisies pour un facteur sont ses **niveaux**.

D'autres grandeurs peuvent agir sur la réponse sans être contrôlées : l'humidité des échantillons, le lot de solvant, l'opérateur, la dérive de l'appareil de mesure. On les appelle des facteurs parasites. Leur existence est l'une des raisons pour lesquelles on réalise les essais dans un ordre tiré au hasard, précaution qui sera discutée en séance 3.

L'ensemble des conditions que l'on accepte d'explorer s'appelle le **domaine expérimental**. Ici, c'est le rectangle formé par les températures de 40 à 60 °C et les durées de 1 à 2 h. Les conclusions d'une étude ne valent que dans ce domaine. Le domaine doit être réaliste, techniquement et économiquement. Il doit aussi être assez large pour que les variations de la réponse dépassent nettement l'erreur de mesure, et assez restreint pour que le modèle choisi reste valable. Il arrive qu'une partie du domaine soit interdite, pour des raisons de sécurité ou de qualité : ce sera le cas dans la mission D.

### 2.3 Les variables codées

Pour comparer des facteurs exprimés dans des unités différentes, on les **code**. On choisit le centre du domaine,  $U^0$ , et le pas de variation,  $\Delta U$ , égal à la moitié de l'étendue. La variable codée vaut alors

$$x = \frac{U - U^0}{\Delta U} \quad \text{et, inversement,} \quad U = U^0 + x \Delta U.$$

| Facteur                       | Niveau bas | Niveau haut | Centre $U^0$ | Pas $\Delta U$ |
|-------------------------------|------------|-------------|--------------|----------------|
| Température $T$ , codée $x_1$ | 40 °C      | 60 °C       | 50 °C        | 10 °C          |
| Durée $t$ , codée $x_2$       | 1 h        | 2 h         | 1,5 h        | 0,5 h          |

Le niveau bas d'un facteur correspond toujours à  $x = -1$ , le niveau haut à  $x = +1$ , et le centre à  $x = 0$ . Le domaine rectangulaire devient ainsi un carré de côté 2, centré sur l'origine, sur lequel il est commode de raisonner.

Le codage a un autre avantage. Les coefficients d'un modèle écrit en variables codées s'expriment tous en points de rendement par unité codée, ce qui permet de les comparer directement d'un facteur à l'autre. Il faut cependant savoir revenir aux unités réelles. Si le coefficient de la température vaut 8 points par unité codée, et qu'une unité codée correspond à  $10^\circ\text{C}$ , la température fait gagner  $8/10 = 0,8$  point de rendement par degré.

**Vérifiez votre compréhension**

1. À quelle valeur codée correspond une température de  $55^\circ\text{C}$ ? une durée de 1,25 h?
2. Quelle durée réelle correspond à  $x_2 = 0,5$ ?

Réponses. 1.  $x_1 = (55 - 50)/10 = 0,5$  et  $x_2 = (1,25 - 1,5)/0,5 = -0,5$ . 2.  $t = 1,5 + 0,5 \times 0,5 = 1,75$  h.

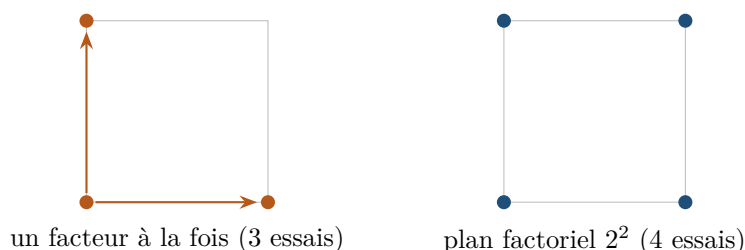
### 3 Faire varier un facteur à la fois

#### Dans cette section

Comprendre ce que mesure une stratégie qui fait varier un facteur à la fois ; savoir dans quels cas elle donne de bons résultats et dans quels cas elle peut tromper.

#### 3.1 Deux stratégies pour quatre essais

Avec un budget de quatre essais au plus, deux façons de procéder viennent naturellement à l'esprit. La première, que l'on appelle stratégie « un facteur à la fois » (en anglais, *one factor at a time*), part des conditions actuelles, 40 °C pendant 1 h. On modifie d'abord la température seule, puis la durée seule. Il suffit de trois essais, et chaque comparaison est facile à interpréter, puisqu'un seul réglage change à la fois. La seconde réalise les quatre combinaisons des deux températures et des deux durées. Elle demande un essai de plus, mais couvre tout le domaine. On l'appelle **plan factoriel complet** à deux facteurs, noté  $2^2$ .



#### 3.2 Les résultats des deux laboratoires

Les deux laboratoires ont obtenu les rendements suivants, en pourcentage.

|                                  | 40 °C, 1 h | 60 °C, 1 h | 40 °C, 2 h | 60 °C, 2 h |
|----------------------------------|------------|------------|------------|------------|
| Laboratoire A (sédiment sableux) | 23         | 37         | 41         | 59         |
| Laboratoire B (boue de station)  | 17         | 43         | 65         | 35         |

Supposons que chaque laboratoire ait suivi la stratégie « un facteur à la fois », et n'ait donc pas mesuré le rendement à 60 °C pendant 2 h. Pour le prévoir, il additionne le gain dû à la température et le gain dû à la durée.

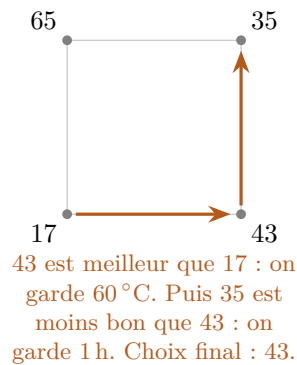
Dans le laboratoire A, passer à 60 °C fait gagner  $37 - 23 = 14$  points, et passer à 2 h en fait gagner  $41 - 23 = 18$ . La prévision est donc  $23 + 14 + 18 = 55$ . La mesure donne 59 : l'écart de 4 points est modéré, et la recommandation de travailler à 60 °C pendant 2 h est correcte.

Dans le laboratoire B, la température fait gagner  $43 - 17 = 26$  points et la durée  $65 - 17 = 48$  points. La prévision est  $17 + 26 + 48 = 91$ , mais la mesure ne donne que 35. Un laboratoire qui aurait suivi cette prévision aurait choisi des conditions donnant un rendement presque deux fois plus faible que celui obtenu à 40 °C pendant 2 h, qui atteint 65.

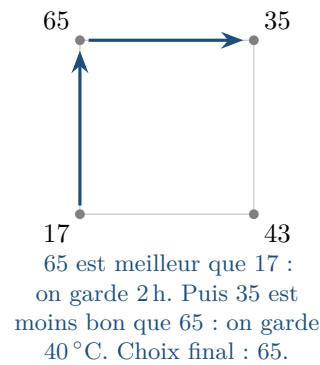
#### 3.3 Quand l'ordre des essais change la conclusion

En pratique, la stratégie « un facteur à la fois » est souvent adaptative : on conserve le meilleur niveau du premier facteur avant de faire varier le second. Avec les résultats du laboratoire B, deux équipes qui choisiraient un ordre différent aboutiraient à deux conclusions différentes.

## la température d'abord



## la durée d'abord



Les deux équipes ont appliqué la même méthode, au même système, avec le même nombre d'essais, et elles recommandent des conditions différentes. Dans le laboratoire A, au contraire, les deux ordres conduisent au même choix.

### 3.4 Ce que mesure réellement cette stratégie

Pourquoi la méthode fonctionne-t-elle dans un laboratoire et pas dans l'autre ? Parce qu'elle mesure l'effet de la température à *la durée de départ*, c'est-à-dire 1 h, et l'effet de la durée à *la température de départ*, 40 °C. On parle d'**effets locaux**. La prévision du coin non testé repose sur une hypothèse implicite : l'effet de la température serait le même à 2 h qu'à 1 h. Dans le laboratoire A, c'est presque vrai. Dans le laboratoire B, c'est faux : à 2 h, chauffer fait *perdre* 30 points au lieu d'en faire gagner. La section suivante donne un nom à ce phénomène, l'interaction, et montre comment le mesurer.

Il faut surtout retenir que la stratégie « un facteur à la fois » ne permet pas de vérifier cette hypothèse. Avec trois essais et trois inconnues (le rendement de départ et les deux effets), il ne reste aucune mesure pour la contrôler.

### 3.5 Quand cette stratégie est-elle raisonnable ?

Il serait faux de conclure que la stratégie « un facteur à la fois » est toujours mauvaise. Elle donne de bons résultats lorsque les facteurs agissent indépendamment l'un de l'autre, et que l'on a de bonnes raisons physiques de le penser. Elle est aussi bien adaptée lorsque l'erreur de mesure est faible devant les effets, que les essais sont réalisés l'un après l'autre et que leurs résultats sont rapidement connus, et que l'objectif est une amélioration rapide plutôt qu'une compréhension du système. Dans ces conditions, une stratégie adaptative peut obtenir une grande partie de l'amélioration possible avec peu d'essais (Frey et Wang, 2006).

Elle devient risquée lorsque les facteurs peuvent interagir, lorsqu'on veut prévoir la réponse dans tout le domaine, ou lorsque l'erreur de mesure n'est pas négligeable. Dans ce dernier cas, chaque effet n'est estimé qu'à partir de deux mesures, ce qui le rend moins précis, comme on le verra à la section 8. Czitrom (1999) compare les deux approches sur plusieurs cas industriels.

#### Vérifiez votre compréhension

1. Dans le laboratoire A, quelle conclusion tirerait une équipe qui ferait d'abord varier la durée ?
2. Pourquoi la stratégie « un facteur à la fois » ne peut-elle pas vérifier sa propre hypothèse ?

*Réponses.* 1. 41 est meilleur que 23, on garde 2 h ; puis 59 est meilleur que 41, on garde 60 °C. Le choix final est (60 °C ; 2 h), comme avec l'autre ordre. 2. Parce qu'elle ne mesure jamais l'effet d'un facteur à deux niveaux différents de l'autre facteur : le coin (+, +) n'est pas testé.

**Pour aller plus loin : les démonstrations**

On montre à la section 4 (partie « Pour aller plus loin ») que les quatre rendements moyens d'un plan à deux facteurs s'écrivent toujours  $\mu = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2$ . Avec la stratégie « un facteur à la fois », l'effet mesuré de la température vaut

$$\frac{\mu(+, -) - \mu(-, -)}{2} = \frac{(b_0 + b_1 - b_2 - b_{12}) - (b_0 - b_1 - b_2 + b_{12})}{2} = b_1 - b_{12}.$$

On mesure donc l'effet moyen  $b_1$  diminué de l'interaction  $b_{12}$ . De même pour la durée. La prévision du coin  $(+, +)$  vaut  $\mu(+, -) + \mu(-, +) - \mu(-, -) = b_0 + b_1 + b_2 - 3b_{12}$ , alors que la vraie valeur est  $b_0 + b_1 + b_2 + b_{12}$  : l'erreur de prévision vaut exactement  $4b_{12}$ . Dans le laboratoire A,  $b_{12} = 1$  et l'erreur vaut 4 ; dans le laboratoire B,  $b_{12} = -14$  et l'erreur vaut  $-56$ .

## 4 Les interactions

### Dans cette section

Définir et calculer l'interaction entre deux facteurs ; lire un diagramme d'interaction ; distinguer le coefficient d'un facteur de son effet total.

### 4.1 Mesurer l'effet d'un facteur à chaque niveau de l'autre

Deux facteurs **interagissent** lorsque l'effet de l'un dépend du niveau de l'autre. Pour le vérifier, il faut mesurer l'effet de la température séparément à chaque durée, ce que permet le plan factoriel à quatre essais.

À la durée basse ( $x_2 = -1$ ), l'effet de la température, rapporté à un pas codé, vaut

$$b_1^- = \frac{y(+, -) - y(-, -)}{2}.$$

À la durée haute ( $x_2 = +1$ ), il vaut

$$b_1^+ = \frac{y(+, +) - y(-, +)}{2}.$$

Si les deux facteurs n'interagissent pas, ces deux valeurs sont égales. Leur demi-différence mesure donc l'interaction ; on l'appelle **coefficient d'interaction** et on la note  $b_{12}$  :

$$b_{12} = \frac{b_1^+ - b_1^-}{2} = \frac{y(-, -) - y(+, -) - y(-, +) + y(+, +)}{4}.$$

Les signes qui apparaissent devant les quatre rendements, +, -, -, +, sont ceux du produit  $x_1 x_2$  pour chaque essai. Le calcul est symétrique : on obtient le même nombre en mesurant l'effet de la durée à chaque température. L'interaction est donc une propriété du couple de facteurs, et non de l'un d'eux.

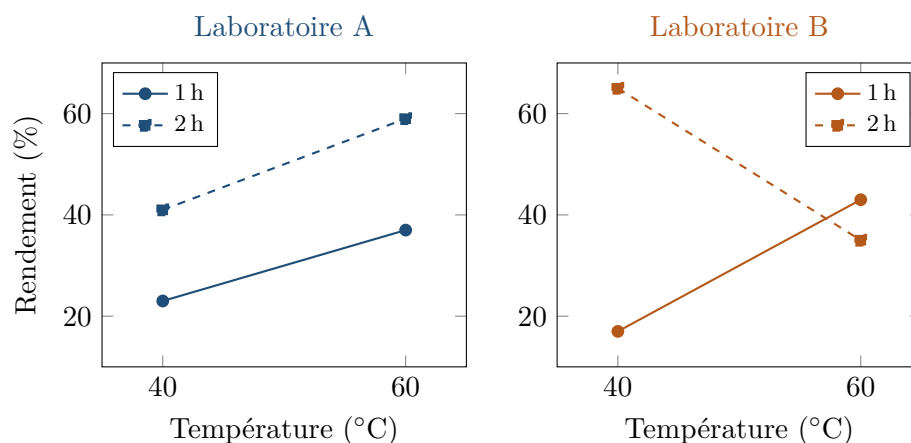
### Exemple résolu 4.1 : Les deux laboratoires

Dans le laboratoire A,  $b_1^- = (37 - 23)/2 = 7$  et  $b_1^+ = (59 - 41)/2 = 9$ , donc  $b_{12} = (9 - 7)/2 = 1$ . L'effet de la température change peu avec la durée.

Dans le laboratoire B,  $b_1^- = (43 - 17)/2 = 13$  et  $b_1^+ = (35 - 65)/2 = -15$ , donc  $b_{12} = (-15 - 13)/2 = -14$ . À 1 h, chauffer augmente le rendement ; à 2 h, chauffer le diminue fortement. C'est ce que l'on observerait si le pesticide se dégradait lorsqu'il reste longtemps à haute température dans cette matrice.

### 4.2 Le diagramme d'interaction

On représente la réponse en fonction d'un facteur, en traçant une ligne pour chaque niveau de l'autre facteur. Des lignes parallèles traduisent l'absence d'interaction. Des lignes qui s'écartent, se rapprochent ou se croisent traduisent une interaction.



L'interaction n'est pas une curiosité d'école. Le diagramme suivant provient d'une étude industrielle sur un sécheur sous vide de gazole, dont la réponse est la quantité d'eau qui reste dans le produit. À 70 °C, augmenter la pression fait passer l'eau résiduelle de 23,4 à 51,7 ; à 100 °C, la pression n'a presque plus d'effet, puisqu'on passe de 11,7 à 12,4.

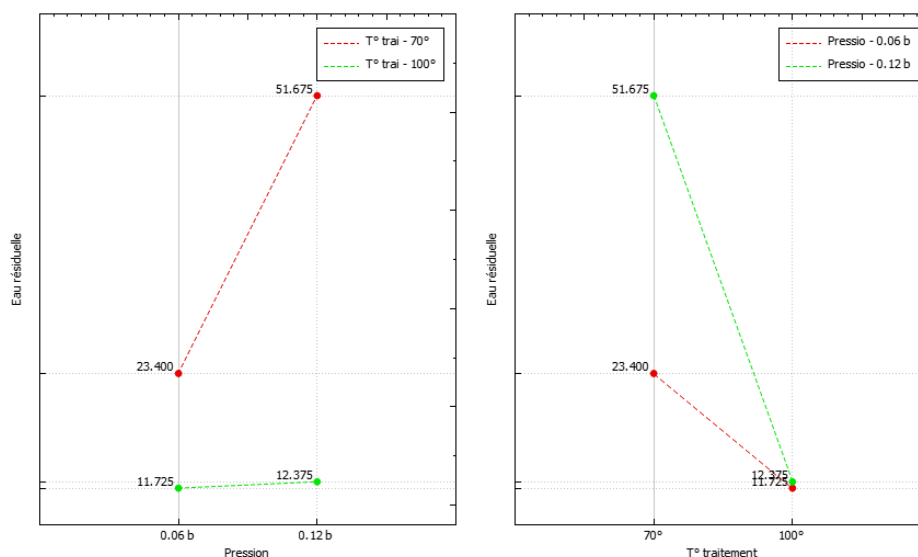


Figure : M. Sergent (AMU). Moyennes de deux répétitions ; la réponse est la quantité d'eau résiduelle dans le produit.

### 4.3 Ce que l'interaction change dans l'interprétation

Dans le laboratoire B, le coefficient de la température calculé sur l'ensemble des quatre essais vaut  $b_1 = (-17 + 43 - 65 + 35)/4 = -1$ . Pris isolément, ce nombre laisse penser que la température n'a pratiquement aucune influence. C'est faux : elle fait varier le rendement de 26 points à 1 h et de 30 points en sens inverse à 2 h. Le coefficient  $b_1$  est une moyenne de ces deux effets opposés. En présence d'une interaction, un coefficient ne s'interprète donc qu'en le lisant avec le coefficient d'interaction correspondant.

Cet exemple montre aussi qu'une stratégie qui ne fait jamais varier deux facteurs en même temps ne peut pas voir leur interaction. Le coin (60 °C ; 2 h) porte précisément cette information.

#### 4.4 Coefficient et effet total : deux conventions

Le mot « effet » n'a pas le même sens chez tous les auteurs, et il faut toujours préciser ce que l'on calcule. Dans ce cours, on appelle **coefficient** du facteur  $j$ , noté  $b_j$ , la variation de la réponse pour un pas d'une unité codée, c'est-à-dire du centre du domaine au niveau haut. Dans un plan équilibré, il vaut

$$b_j = \frac{\bar{y}_+ - \bar{y}_-}{2},$$

où  $\bar{y}_+$  et  $\bar{y}_-$  sont les moyennes des essais réalisés au niveau haut et au niveau bas. On appelle **effet total** la variation complète du niveau bas au niveau haut,  $\Delta_j = \bar{y}_+ - \bar{y}_- = 2b_j$ . Une partie de la tradition française des plans d'expériences appelle « effet » le coefficient  $b_j$ , tandis que la littérature anglo-saxonne (Box, Hunter et Hunter, 2005 ; Montgomery, 2019) appelle *effect* la quantité  $\Delta_j$ .

Dans le laboratoire A, le coefficient de la température vaut 8 points par unité codée. L'effet total vaut donc 16 points entre 40 et 60 °C, soit 0,8 point par degré. Comme  $\Delta_j = 2b_j$ , la variance de l'effet total est quatre fois celle du coefficient (F0, section 7) ; il faut en tenir compte lorsqu'on compare des précisions.

##### Vérifiez votre compréhension

1. Dans le laboratoire A, calculez l'effet de la durée à 40 °C puis à 60 °C, rapporté à un pas codé, et vérifiez que leur demi-différence vaut  $b_{12}$ .
2. Dans le laboratoire B, que vaut l'effet total de la durée ?

Réponses. 1.  $(41 - 23)/2 = 9$  et  $(59 - 37)/2 = 11$  ;  $(11 - 9)/2 = 1 = b_{12}$ . 2.  $b_2 = (-17 - 43 + 65 + 35)/4 = 10$ , donc l'effet total vaut 20 points.

##### Pour aller plus loin : les démonstrations

**Quatre valeurs, quatre coefficients.** Avec deux facteurs à deux niveaux, quatre valeurs quelconques  $y(-, -)$ ,  $y(+, -)$ ,  $y(-, +)$  et  $y(+, +)$  peuvent toujours s'écrire sous la forme  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{12}x_1x_2$ . Il suffit de prendre

$$b_0 = \frac{1}{4}(y_{--} + y_{+-} + y_{-+} + y_{++}), \quad b_1 = \frac{1}{4}(-y_{--} + y_{+-} - y_{-+} + y_{++}),$$

$$b_2 = \frac{1}{4}(-y_{--} - y_{+-} + y_{-+} + y_{++}), \quad b_{12} = \frac{1}{4}(y_{--} - y_{+-} - y_{-+} + y_{++}),$$

comme on le vérifie en remplaçant  $x_1$  et  $x_2$  par  $\pm 1$ . Pour le laboratoire A, on trouve (40 ; 8 ; 10 ; 1) et pour le laboratoire B, (40 ; -1 ; 10 ; -14). Ce résultat, utilisé à la fin de la section 3, découle aussi du fait que la matrice  $4 \times 4$  de ce modèle a des colonnes orthogonales et est donc inversible (F0, sections 4 et 6).

## 5 Faire varier les facteurs ensemble : la confusion des effets

### Dans cette section

Reconnaître des effets confondus ; savoir ce que des données confondues permettent et ne permettent pas de conclure ; lever une confusion par un essai bien choisi.

### 5.1 Le journal de production

Le laboratoire A dispose d'un journal de six extractions réalisées les mois précédents. Les opérateurs avaient l'habitude d'allonger la durée chaque fois qu'ils augmentaient la température, si bien que les deux réglages ont toujours varié ensemble.

| Lot                        | 1    | 2    | 3    | 4    | 5    | 6    |
|----------------------------|------|------|------|------|------|------|
| Température (°C)           | 40   | 45   | 50   | 50   | 55   | 60   |
| Durée (h)                  | 1    | 1,25 | 1,5  | 1,5  | 1,75 | 2    |
| Valeurs codées $x_1 = x_2$ | -1   | -0,5 | 0    | 0    | 0,5  | 1    |
| Rendement (%)              | 22,8 | 30,3 | 39,5 | 38,7 | 48,4 | 57,5 |

La direction voudrait libérer l'extracteur plus tôt en travaillant à 60 °C pendant 1 h seulement. Le journal permet-il de prévoir le rendement dans ces conditions ? Le rendement augmente nettement et régulièrement d'un lot à l'autre, et l'on dispose de six lots pour un modèle à trois coefficients. Il semble donc qu'il y ait assez de données.

### 5.2 Plusieurs modèles également bons

Puisque  $x_1 = x_2$  pour chaque lot, le modèle  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$  se réduit, sur ces données, à  $b_0 + (b_1 + b_2)x_1$ . Seule la somme  $b_1 + b_2$  intervient dans les prévisions. L'ajustement de cette droite par les moindres carrés donne une constante de 39,53 et une pente  $b_1 + b_2 = 17,5$ . Tous les couples de coefficients dont la somme vaut 17,5 décrivent donc les six lots exactement aussi bien. Ils prévoient pourtant des rendements très différents à 60 °C pendant 1 h, c'est-à-dire au point  $x_1 = 1, x_2 = -1$  :

| Interprétation du journal    | $b_1$ | $b_2$ | Prévision à 60 °C, 1 h |
|------------------------------|-------|-------|------------------------|
| Tout vient de la température | 17,5  | 0     | 57,0                   |
| Tout vient de la durée       | 0     | 17,5  | 22,0                   |
| Les deux comptent autant     | 8,75  | 8,75  | 39,5                   |

Un essai réalisé ensuite à 60 °C pendant 1 h a donné 37 %. Avant cet essai, rien dans le journal ne permettait de choisir entre les trois interprétations, et ce quel que soit le nombre de lots qu'il aurait contenus. On dit que les effets de la température et de la durée sont **confondus** dans ces données.

### 5.3 Le diagnostic par le rang

La matrice du modèle construite à partir du journal a deux colonnes identiques, celle de  $x_1$  et celle de  $x_2$ . Son rang vaut donc 2, alors que le modèle compte trois coefficients (F0, section 5). Le modèle n'est pas identifiable : c'est la traduction mathématique de la situation précédente. Retenons le critère général : les coefficients d'un modèle à  $p$  termes sont identifiables si et seulement si le rang de  $\mathbf{X}$  vaut  $p$ . Avoir au moins  $p$  essais est nécessaire, mais ne suffit pas.

## 5.4 Quand faire varier les facteurs ensemble est-il légitime ?

Faire varier les deux facteurs ensemble n'est pas une erreur en soi. C'est même la bonne démarche lorsque la décision ne porte que sur un changement combiné, par exemple : « faut-il passer du protocole 40 °C–1 h au protocole 60 °C–2 h ? » Le journal répond alors très bien, puisque la somme  $b_1 + b_2$  est précisément ce qu'il faut connaître : le changement de protocole fait gagner environ  $2 \times 17,5 = 35$  points. C'est aussi une démarche acceptable lorsque deux réglages sont liés par une contrainte physique qui empêche de les modifier séparément, ou lorsque l'on veut seulement savoir si un changement global a un effet. Elle devient insuffisante dès que l'on veut attribuer l'effet à l'un des facteurs, prévoir une combinaison qui n'a pas été testée, ou comprendre l'origine d'un problème.

Les données de production sont souvent dans cette situation. Les opérateurs modifient plusieurs réglages à la fois, et certains réglages varient avec des facteurs qui ne sont pas enregistrés, comme la saison ou le lot de matière première. Un logiciel de régression fournira toujours des coefficients, mais ces coefficients n'auront pas nécessairement de sens.

## 5.5 Lever la confusion

Un seul essai bien placé suffit à rendre le modèle identifiable. En ajoutant au journal l'essai réalisé à 60 °C pendant 1 h, le rang passe à 3, et l'ajustement donne  $b_1 = 7,48$  et  $b_2 = 10,02$ , des valeurs proches de celles que fournira le plan factoriel (8 et 10). La précision reste cependant médiocre : la variance de chaque coefficient vaut environ  $0,39 \sigma^2$  avec sept essais, contre  $0,25 \sigma^2$  pour le plan factoriel à quatre essais. De plus, cet essai unique détermine à lui seul la différence  $b_1 - b_2$ , sans aucun contrôle. Un second essai, à 40 °C pendant 2 h, améliorerait nettement la situation. L'identifiabilité est une condition nécessaire ; elle ne garantit pas une bonne précision.

### Vérifiez votre compréhension

1. Un collègue propose quatre essais aux points codés  $(-1, -1)$ ,  $(-1, -1)$ ,  $(1, 1)$  et  $(1, 1)$  « pour avoir des répétitions ». Les coefficients  $b_1$  et  $b_2$  sont-ils identifiables ?
2. Quelle question ce plan permet-il quand même de traiter ?

*Réponses.* 1. Non : les colonnes  $x_1$  et  $x_2$  sont identiques, le rang vaut 2. 2. Il permet d'estimer l'effet du changement combiné, c'est-à-dire  $b_1 + b_2$ , et, grâce aux répétitions, l'erreur de mesure.

## 6 Le modèle linéaire et sa matrice

### Dans cette section

Écrire un modèle linéaire et sa matrice  $\mathbf{X}$ ; connaître les hypothèses sur lesquelles reposent les calculs; estimer les coefficients d'un plan factoriel.

### 6.1 Pourquoi écrire un modèle

Les sections précédentes ont utilisé un modèle sans le dire. Prévoir le rendement du coin non testé en additionnant deux gains, c'était supposer que la réponse s'écrit  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ . Écrire le modèle de façon explicite a plusieurs avantages. On résume ainsi un ensemble de mesures par quelques coefficients que l'on sait interpréter. On peut prévoir la réponse dans tout le domaine. On rend visibles les hypothèses que l'on fait, au lieu de les subir. Enfin, on peut calculer la précision des coefficients et comparer des plans avant de les réaliser.

### 6.2 Écriture du modèle

Un **modèle linéaire** décrit la mesure de l'essai  $i$  comme la somme de termes connus, multipliés par des coefficients inconnus, et d'une erreur aléatoire :

$$Y_i = b_0 + b_1x_{i1} + b_2x_{i2} + b_{12}x_{i1}x_{i2} + \varepsilon_i.$$

Le mot « linéaire » signifie que la réponse dépend linéairement des *coefficients*; les termes eux-mêmes peuvent être des produits de facteurs, comme  $x_1x_2$ , ou des carrés, comme  $x_1^2$ .

On range les mesures dans un vecteur  $\mathbf{Y}$ , les coefficients dans un vecteur  $\boldsymbol{\beta}$  et les erreurs dans un vecteur  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . La matrice du modèle  $\mathbf{X}$  a une ligne par essai et une colonne par coefficient (F0, section 3). Le modèle s'écrit alors en une seule ligne :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}.$$

#### Exemple résolu 6.1 : Les matrices de trois plans

Pour le modèle  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ , dont les colonnes sont 1,  $x_1$  et  $x_2$ , on obtient :

$$\mathbf{X}_{\text{un à la fois}} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_{2^2} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_{\text{journal}} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 1 & -0,5 & -0,5 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0,5 & 0,5 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Pour le modèle qui comprend l'interaction, on ajoute la colonne  $x_1x_2$ , obtenue en multipliant terme à terme les colonnes de  $x_1$  et de  $x_2$ . Pour le plan  $2^2$ , elle vaut  $(1, -1, -1, 1)^\top$ .

### 6.3 Les hypothèses

Les calculs des sections suivantes reposent sur quatre hypothèses, qu'il faut savoir traduire en termes de laboratoire.

1. *Le modèle est juste dans le domaine* : il ne néglige aucun terme important, qu'il s'agisse d'une interaction ou d'une courbure. Si cette hypothèse est fausse, certains coefficients peuvent être biaisés (section 9).

2. *L'erreur de mesure a la même variance  $\sigma^2$  en tout point du domaine, et les erreurs de deux essais différents ne sont pas liées.* Une dérive de l'appareil au cours de la campagne, ou un lot de réactif utilisé pour certains essais seulement, peuvent contredire cette hypothèse.
3. *Les niveaux des facteurs sont réglés exactement,* ou du moins avec une erreur négligeable devant le pas de variation.
4. *Le modèle est identifiable :* le rang de  $\mathbf{X}$  est égal au nombre de coefficients.

## 6.4 Estimer les coefficients

Les coefficients sont estimés par la méthode des moindres carrés (F0, section 8) :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

### Exemple résolu 6.2 : Le plan factoriel du laboratoire B

Pour le modèle avec interaction, les quatre colonnes de  $\mathbf{X}$  sont orthogonales et  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = 4\mathbf{I}$ . Chaque coefficient est donc le produit scalaire de sa colonne avec le vecteur des rendements, divisé par 4 :

$$\begin{aligned} \hat{b}_0 &= \frac{17+43+65+35}{4} = 40, & \hat{b}_1 &= \frac{-17+43-65+35}{4} = -1, \\ \hat{b}_2 &= \frac{-17-43+65+35}{4} = 10, & \hat{b}_{12} &= \frac{17-43-65+35}{4} = -14. \end{aligned}$$

Dans cet exemple, on dispose de quatre essais pour quatre coefficients. Le modèle passe exactement par les quatre points et il ne reste aucun résidu. Un tel plan est dit **saturé**. Il ne permet ni d'estimer l'erreur de mesure, ni de vérifier que le modèle convient : un ajustement parfait n'apporte ici aucune garantie sur la validité du modèle.

### Vérifiez votre compréhension

1. Écrivez la matrice  $\mathbf{X}$  du plan  $2^2$  pour le modèle avec interaction.
2. Pour le laboratoire A, calculez  $\hat{b}_{12}$ .

*Réponses.* 1. Les lignes sont  $(1, -1, -1, 1)$ ,  $(1, 1, -1, -1)$ ,  $(1, -1, 1, -1)$  et  $(1, 1, 1, 1)$ . 2.  $(23 - 37 - 41 + 59)/4 = 1$ .

## 7 Plus d'essais, plus d'information ?

### Dans cette section

Distinguer le nombre d'essais, le rang de la matrice, les répétitions et la précision ; comparer plusieurs plans sur ces quatre points.

### 7.1 La question posée

Lors de la mission C, deux propositions s'opposent. La première consiste à réaliser deux fois chacun des trois essais « un facteur à la fois », soit six essais : on dispose ainsi de répétitions, et les moyennes sont plus fiables. La seconde consiste à réaliser les quatre essais du plan factoriel, sans répétition. Pour trancher, il faut séparer quatre notions que le langage courant confond souvent :

- le *nombre d'essais*  $N$ , qui mesure le coût ;
- le *rang* de la matrice  $\mathbf{X}$ , qui indique combien d'effets le plan permet de séparer ;
- les *répétitions*, c'est-à-dire les essais refaits dans des conditions identiques, qui permettent d'estimer l'erreur de mesure sans faire confiance au modèle ;
- la *précision* des coefficients, que l'on calculera à la section suivante.

### 7.2 Le calcul de $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$

#### Exemple résolu 7.1 : Le plan « un facteur à la fois » répété deux fois

La matrice  $\mathbf{X}$  compte six lignes. Ses colonnes sont  $\mathbf{1} = (1, 1, 1, 1, 1, 1)^\top$ ,  $\mathbf{x}_1 = (-1, 1, -1, -1, 1, -1)^\top$  et  $\mathbf{x}_2 = (-1, -1, 1, -1, -1, 1)^\top$ . Chaque case de  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  est le produit scalaire de deux colonnes (F0, section 4). Sur la diagonale, on trouve trois fois le nombre 6. Hors de la diagonale,  $\mathbf{1} \cdot \mathbf{x}_1 = -2$ ,  $\mathbf{1} \cdot \mathbf{x}_2 = -2$  et  $\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2 = 1 - 1 - 1 + 1 - 1 - 1 = -2$ . Donc

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 6 & -2 & -2 \\ -2 & 6 & -2 \\ -2 & -2 & 6 \end{pmatrix}.$$

C'est exactement le double de la matrice obtenue avec trois essais : répéter un plan double chaque produit scalaire. Les cases non nulles hors de la diagonale indiquent que les colonnes ne sont pas orthogonales. Pour le plan factoriel à quatre essais, on a vu que  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = 4\mathbf{I}$ .

### 7.3 Comparaison de cinq plans

Le tableau suivant compare cinq plans pour le modèle  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$  et pour le modèle qui ajoute l'interaction. La dernière colonne donne la variance de  $\hat{b}_1$  en unités de  $\sigma^2$  ; elle est calculée à la section suivante.

| Plan                              | Essais | Points<br>distincts | Rang<br>(sur 3) | Rang avec<br>interaction (sur 4) | $\text{Var}(\hat{b}_1)/\sigma^2$ |
|-----------------------------------|--------|---------------------|-----------------|----------------------------------|----------------------------------|
| Journal de production             | 6      | 5                   | 2               | 3                                | —                                |
| Un facteur à la fois              | 3      | 3                   | 3               | 3                                | 1/2                              |
| Un facteur à la fois, répété      | 6      | 3                   | 3               | 3                                | 1/4                              |
| Factoriel 2 <sup>2</sup>          | 4      | 4                   | 3               | 4                                | 1/4                              |
| Factoriel 2 <sup>2</sup> , répété | 8      | 4                   | 3               | 4                                | 1/8                              |

Plusieurs enseignements se dégagent. Le journal, avec six essais, a le rang le plus faible : le nombre d'essais ne dit rien de leur capacité à séparer les effets. Répéter le plan « un facteur à la fois »

ne change pas son rang ; avec trois conditions distinctes, on ne pourra jamais estimer les quatre coefficients du modèle avec interaction. La répétition divise en revanche la variance par deux. Avec six essais, ce plan atteint la précision du plan factoriel à quatre essais, qui permet en plus d'estimer l'interaction.

## 7.4 Ce qu'apportent vraiment les répétitions

Les répétitions ont pourtant un avantage réel. Elles permettent d'estimer l'erreur de mesure sans rien supposer du modèle, à partir des écarts entre essais identiques (F0, section 7). Le nombre de degrés de liberté de cette estimation est égal au nombre d'essais moins le nombre de points distincts : trois pour le plan « un facteur à la fois » répété, aucun pour le plan factoriel non répété. Ce dernier, avec le modèle à interaction, est saturé : il n'offre aucun moyen d'estimer l'erreur ni de contrôler le modèle. Le plan factoriel répété cumule les avantages, mais il coûte huit essais. Un compromis fréquent consiste à ajouter quelques répétitions au centre du domaine, comme on le verra en séance 3.

### Vérifiez votre compréhension

1. Combien de degrés de liberté d'erreur de mesure le journal de production fournit-il ?
2. Peut-on estimer l'interaction en répétant trois fois le plan « un facteur à la fois » ?

*Réponses.* 1. Un seul : six lots pour cinq points distincts, puisque le point central a été réalisé deux fois. 2. Non : le rang reste égal à 3, quel que soit le nombre de répétitions.

## 8 Deux plans identifiables sont-ils équivalents ?

### Dans cette section

Calculer la précision d'un plan avant de le réaliser ; comprendre le rôle de l'orthogonalité et de la position des essais ; choisir un plan lorsqu'une partie du domaine est interdite.

### 8.1 La précision se calcule avant l'expérience

La précision des coefficients estimés est donnée par la formule

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}.$$

La variance du coefficient  $b_j$  se lit sur la diagonale de  $(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}$ , multipliée par la variance  $\sigma^2$  de l'erreur de mesure. Les autres cases donnent les covariances entre coefficients. Cette formule, démontrée dans F0 (section 9), repose sur les hypothèses 2 à 4 de la section 6. Elle ne contient pas les résultats des essais : on peut donc comparer la précision de plusieurs plans sur le papier, avant toute expérience.

Pour le plan « un facteur à la fois » à trois essais, on obtient  $\text{Var}(\hat{b}_1) = \sigma^2/2$ . Pour le plan factoriel à quatre essais,  $\text{Var}(\hat{b}_1) = \sigma^2/4$ . La différence ne vient pas d'un défaut particulier de la première stratégie : chaque coefficient  $y$  est calculé à partir de deux mesures seulement, alors que dans le plan factoriel chaque mesure intervient dans le calcul de chaque coefficient (F0, section 7).

### 8.2 Mission D : deux plans de quatre essais

Comparons deux plans de quatre essais qui permettent tous deux d'estimer le modèle  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ . Le premier est le plan factoriel. Le second fait varier un facteur à la fois, mais répète le point de départ : ses essais sont  $(-1, -1)$ ,  $(-1, +1)$ ,  $(+1, -1)$  et  $(+1, +1)$ . Ce second plan rassure souvent les expérimentateurs, parce qu'il fournit une première estimation de l'erreur de mesure.

Pour ce second plan, le calcul donne

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & -2 \\ -2 & 4 & 0 \\ -2 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

On lit  $\text{Var}(\hat{b}_1) = \frac{3}{8}\sigma^2$ , soit 50 % de plus qu'avec le plan factoriel, et une corrélation de  $\frac{1}{3}$  entre  $\hat{b}_1$  et  $\hat{b}_2$ . Les deux plans ont le même nombre d'essais et sont tous deux identifiables ; ils ne sont pourtant pas équivalents.

### 8.3 Le rôle de l'orthogonalité

Lorsque les colonnes de  $\mathbf{X}$  sont orthogonales,  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  est diagonale, et le calcul est particulièrement simple : chaque coefficient est le produit scalaire de sa colonne avec les mesures, divisé par le nombre d'essais, et sa variance vaut  $\sigma^2/N$  pour des colonnes de  $\pm 1$ . Sous des erreurs non corrélées de même variance, les estimateurs ont alors des covariances nulles. Une observation contribue pourtant à plusieurs coefficients ; covariance nulle ne signifie pas indépendance en général. Des erreurs conjointement gaussiennes assurent ici cette indépendance.

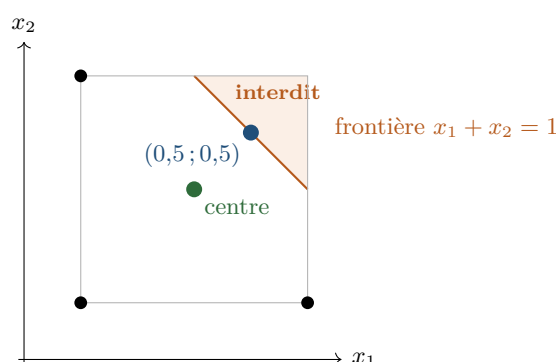
On démontre de plus (F0, section 9) que, si les niveaux codés restent entre  $-1$  et  $+1$ , aucun plan de  $N$  essais ne permet d'estimer un coefficient avec une variance inférieure à  $\sigma^2/N$ . Cette valeur n'est atteinte que par une colonne de  $\pm 1$  orthogonale à toutes les autres. C'est ce qui fait l'intérêt des plans orthogonaux, qui seront au cœur de la séance 2.

## 8.4 Le rôle de la position des essais

L'orthogonalité ne suffit pas. Considérons le plan factoriel resserré, dont les essais sont placés aux niveaux  $\pm 0,5$ , c'est-à-dire à 45 et 55 °C et à 1,25 et 1,75 h. Ses colonnes restent orthogonales, mais la variance de  $\hat{b}_1$  vaut maintenant  $\sigma^2$ , quatre fois plus que pour le plan placé aux bords du domaine. Le nombre d'essais et l'orthogonalité n'ont pas changé, seule la position des points a changé. Pour mesurer une pente malgré l'erreur de mesure, il vaut mieux placer les essais loin les uns des autres, dans la limite d'un domaine réaliste où le modèle reste valable.

## 8.5 Quand une partie du domaine est interdite

Supposons maintenant que le responsable qualité interdise les conditions trop « chaudes et longues », parce que le pesticide s'y dégrade et que l'extracteur approche de sa limite de sécurité. Le domaine autorisé est réduit par la condition  $x_1 + x_2 \leq 1$ , qui exclut le coin (60 °C ; 2 h). Le plan factoriel n'est plus réalisable, et il faut choisir un autre plan de quatre essais.



Quatre plans réalisables sont envisagés. Tous contiennent les trois essais noirs, sauf le plan resserré. Le tableau donne leurs propriétés, calculées avec la formule précédente ; les variances sont exprimées en unités de  $\sigma^2$ .

| Plan                     | $\text{Var}(\hat{b}_1)$ | Corrélation<br>de $\hat{b}_1$ et $\hat{b}_2$ | Interaction<br>estimable ? | Point fort           |
|--------------------------|-------------------------|----------------------------------------------|----------------------------|----------------------|
| Départ répété            | 0,375                   | 0,33                                         | non                        | estime l'erreur      |
| Centre ajouté            | 0,458                   | 0,45                                         | oui (Var = 1,5)            | contrôle l'intérieur |
| Point (0,5 ; 0,5) ajouté | 0,336                   | 0,25                                         | oui (Var = 0,47)           | le plus précis       |
| Resserré $\pm 0,5$       | 1                       | 0                                            | oui (Var = 4)              | orthogonal           |

Aucun de ces plans n'est meilleur que les autres sur tous les points. Le plan qui ajoute le point (0,5 ; 0,5) est le plus précis et permet d'estimer l'interaction, mais il place un essai exactement sur la frontière ; si celle-ci est mal connue, cet essai peut être faussé par la dégradation du pesticide. Le plan avec point central est moins précis, mais il reste loin de la zone interdite et renseigne sur l'intérieur du domaine. Le plan qui répète le point de départ estime l'erreur de mesure, mais ne permet pas d'étudier l'interaction, alors que c'est précisément elle que l'on soupçonne. Le plan resserré, enfin, est orthogonal mais quatre fois moins précis. Le choix dépend donc de l'objectif et du risque que l'on accepte, et c'est ce choix qu'il faut savoir justifier.

## 8.6 Cinq notions à ne pas confondre

Un plan est *identifiable* pour un modèle lorsque le rang de  $\mathbf{X}$  est égal au nombre de coefficients. Il est *orthogonal* lorsque  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  est diagonale. Il est *précis* lorsque les variances des coefficients, lues

dans  $\sigma^2(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1}$ , sont petites. Ces trois propriétés dépendent du plan et du modèle. Les deux suivantes dépendent du phénomène étudié : le modèle est *valide* lorsqu'il ne néglige aucun terme important, et deux facteurs sont *sans interaction* lorsque l'effet de l'un ne dépend pas du niveau de l'autre. Aucune de ces propriétés n'entraîne les autres : le plan qui répète le point de départ est identifiable sans être orthogonal, le plan resserré est orthogonal sans être précis, et un plan orthogonal peut donner des coefficients faux si le modèle est incomplet.

#### Vérifiez votre compréhension

1. Pour le plan factoriel répété (huit essais), que vaut  $\text{Var}(\hat{b}_1)$  ?
2. Un plan est orthogonal et identifiable. Est-il nécessairement précis ? Donnez un exemple.

*Réponses.* 1.  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = 8\mathbf{I}$ , donc  $\text{Var}(\hat{b}_1) = \sigma^2/8$ . 2. Non : le plan factoriel resserré aux niveaux  $\pm 0,5$  est orthogonal et identifiable, mais  $\text{Var}(\hat{b}_1) = \sigma^2$ .

## 9 Ce qu'un plan ne permet pas de conclure

### Dans cette section

Savoir qu'un modèle incomplet donne des coefficients biaisés, même avec un plan orthogonal ; énoncer les limites d'une étude.

### 9.1 Quand le modèle oublie un terme

Les résultats de précision supposent que le modèle ajusté contient tous les termes utiles. Si l'un d'eux est oublié, les coefficients sont **biaisés** : en moyenne, ils ne sont plus égaux aux vraies valeurs. Deux exemples permettent de comprendre ce qui se passe.

Le premier a déjà été rencontré. Avec la stratégie « un facteur à la fois », oublier l'interaction conduit à mesurer, au lieu de l'effet moyen  $b_1$  de la température, la quantité  $b_1 - b_{12}$  (section 3). Dans le laboratoire B, on obtient 13 alors que l'effet moyen vaut  $-1$ .

Le second concerne le plan factoriel, pourtant orthogonal. Supposons que le rendement passe par un maximum vers  $50^\circ\text{C}$ , ce qui se traduit par un terme de courbure  $b_{11}x_1^2$ , avec par exemple  $b_{11} = -6$ . Aux quatre essais du plan factoriel,  $x_1$  vaut  $-1$  ou  $+1$ , donc  $x_1^2 = 1$  : le terme oublié prend la même valeur pour tous les essais, et il se confond avec la constante. Le modèle ajusté donne  $\hat{b}_0 = b_0 + b_{11} = 34$ . Il prévoit donc 34 au centre du domaine, alors que la vraie réponse  $y$  vaut 40, et aucun résidu ne signale l'erreur.

Ces exemples montrent que l'orthogonalité ne garantit pas l'absence de biais. Elle garantit des coefficients non corrélés et une variance minimale pour le modèle ajusté. Contre les termes oubliés, la seule protection consiste à prévoir des essais capables de les révéler, comme un point au centre du domaine ou des essais de contrôle, ou à disposer d'une connaissance physique qui justifie de les négliger.

### 9.2 Les limites à énoncer systématiquement

Toute conclusion d'une étude expérimentale doit être accompagnée de ses limites. Elle ne vaut qu'à l'intérieur du domaine étudié ; extrapoler suppose que le modèle reste valable au-delà, ce que les données ne peuvent pas confirmer. Un plan saturé ne permet ni d'estimer l'erreur de mesure, ni de tester le modèle. Si la variance de l'erreur n'est pas la même partout, ou si les erreurs de plusieurs essais sont liées, par exemple par une dérive de l'appareil, la formule de précision ne décrit plus la précision réelle ; réaliser les essais dans un ordre aléatoire limite ce risque. Enfin, un facteur non contrôlé qui varie en même temps qu'un facteur étudié lui est confondu, et aucun calcul sur la matrice  $\mathbf{X}$  ne permet de le détecter.

### Ce que notre plan ne permet pas de conclure

Pour toute proposition de plan, il est utile de rédiger un court paragraphe qui précise : les coefficients qui ne sont pas identifiables, ou les effets qui sont confondus ; les termes que l'on suppose nuls, et ce qui se passerait s'ils ne l'étaient pas ; la précision attendue des coefficients, exprimée en fonction de  $\sigma$  ; la possibilité, ou non, d'estimer l'erreur de mesure et de vérifier le modèle ; le domaine en dehors duquel on ne conclut pas.

## 10 Vers la séance 2 : trois facteurs en quatre essais

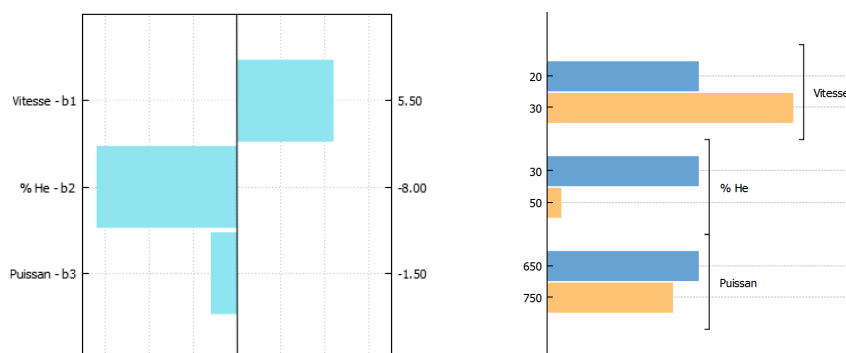
Considérons un procédé de soudure laser, dont la réponse est le nombre de soufflures, c'est-à-dire de défauts, dans la soudure. Trois facteurs sont étudiés à deux niveaux : la vitesse de déplacement (20 ou 30 cm/min), la proportion d'hélium dans le gaz de protection (30 ou 50 %) et la puissance du laser (650 ou 750 W).

Avec la stratégie « un facteur à la fois », chaque facteur est testé à ses deux niveaux, ce qui demande six essais lorsque les trois comparaisons sont faites indépendamment. On obtient 18 et 29 soufflures pour la vitesse, 31 et 15 pour l'hélium, 25 et 22 pour la puissance. Les coefficients valent donc 5,5,  $-8$  et  $-1,5$ , chacun avec une variance  $\sigma^2/2$ .

On peut aussi utiliser le plan suivant, qui ne compte que quatre essais.

| Essai | $x_1$ (vitesse) | $x_2$ (hélium) | $x_3$ (puissance) | Soufflures |
|-------|-----------------|----------------|-------------------|------------|
| 1     | +               | +              | −                 | 22         |
| 2     | −               | +              | +                 | 8          |
| 3     | +               | −              | +                 | 35         |
| 4     | −               | −              | −                 | 27         |

Pour le modèle  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$ , on vérifie que  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = 4\mathbf{I}$  : les colonnes sont orthogonales. Les coefficients valent 23, 5,5,  $-8$  et  $-1,5$ , et chacun a une variance  $\sigma^2/4$ . Le plan demande donc deux essais de moins et divise la variance par deux.



Figures : M. Sergent (AMU). À gauche, les coefficients ; à droite, les réponses moyennes aux deux niveaux de chaque facteur. Dans ce jeu de données, les deux stratégies donnent exactement les mêmes coefficients.

### Question pour réfléchir

Calculez, pour chacun des quatre essais, le produit de  $x_1$  par  $x_2$ , et comparez le résultat à la colonne  $x_3$ . Vous devez constater que  $x_3 = -x_1x_2$ . Que mesure alors réellement le coefficient  $b_3$  si la vitesse et la proportion d'hélium interagissent ? Le plan reste-t-il orthogonal pour un modèle qui contiendrait l'interaction  $x_1x_2$  ? Quel est le prix à payer pour étudier trois facteurs en quatre essais ? Ces questions ouvriront la séance 2, consacrée au criblage et aux matrices d'Hadamard.

## 11 Exercices corrigés et références

**Exercice 11.1** (effets locaux) Pour le laboratoire B, calculer l'effet de la durée à 40 °C puis à 60 °C, rapporté à un pas codé. Retrouver le coefficient d'interaction.

**Exercice 11.2** (confusion) Un ancien plan comporte les essais codés  $(-1, -1)$ ,  $(0, 0)$  et  $(1, 1)$ , chacun réalisé deux fois. Le modèle  $b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$  est-il identifiable ? Quelle question ce plan permet-il de traiter ?

**Exercice 11.3** (précision) Pour le plan factoriel répété deux fois et le modèle avec interaction, calculer  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ , puis  $\text{Var}(\hat{b}_{12})$ . Combien de degrés de liberté ce plan fournit-il pour estimer l'erreur de mesure ?

**Exercice 11.4** (contrainte) Avec la contrainte  $x_1 + x_2 \leq 1$ , proposer un plan de quatre essais différent de ceux de la section 8, puis calculer  $\text{Var}(\hat{b}_1)$  à l'aide du laboratoire interactif. Peut-on obtenir  $\text{Var}(\hat{b}_1) = \text{Var}(\hat{b}_2) = \sigma^2/4$  ?

### Solutions

**Solution de l'exercice 11.1.** À 40 °C,  $(65 - 17)/2 = 24$  ; à 60 °C,  $(35 - 43)/2 = -4$ . La demi-différence vaut  $(-4 - 24)/2 = -14$ , ce qui est bien  $b_{12}$ .

**Solution de l'exercice 11.2.** Non : les colonnes  $x_1$  et  $x_2$  sont identiques, le rang vaut 2. Le plan permet d'estimer l'effet d'un changement combiné des deux facteurs,  $b_1 + b_2$ , ainsi que l'erreur de mesure, grâce aux trois paires de répétitions.

**Solution de l'exercice 11.3.** Les quatre colonnes de  $\pm 1$  restent orthogonales et chacune a une norme au carré égale à 8, donc  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = 8\mathbf{I}$  et  $\text{Var}(\hat{b}_{12}) = \sigma^2/8$ . Huit essais pour quatre points distincts fournissent quatre degrés de liberté.

**Solution de l'exercice 11.4.** On peut par exemple ajouter aux trois essais  $(-1, -1)$ ,  $(1, -1)$  et  $(-1, 1)$  un quatrième essai en  $(1, 0)$ , qui respecte la contrainte. Le laboratoire donne alors les variances. Il est impossible d'obtenir  $\sigma^2/4$  pour les deux coefficients : il faudrait deux colonnes de  $\pm 1$  orthogonales entre elles et à la colonne constante, ce qui, avec quatre essais, impose les quatre coins du carré, dont le coin interdit.

### Références

- Box, G. E. P., Hunter, J. S., et Hunter, W. G. (2005). *Statistics for Experimenters : Design, Innovation, and Discovery* (2<sup>e</sup> éd.). Wiley.
- Czitrom, V. (1999). One-factor-at-a-time versus designed experiments. *The American Statistician*, 53(2), 126–131.
- Daniel, C. (1973). One-at-a-time plans. *Journal of the American Statistical Association*, 68(342), 353–360.
- Frey, D. D., et Wang, H. (2006). Adaptive one-factor-at-a-time experimentation and expected value of improvement. *Technometrics*, 48(3), 418–431.
- Goupy, J., et Creighton, L. (2006). *Introduction aux plans d'expériences* (3<sup>e</sup> éd.). Dunod.
- Montgomery, D. C. (2019). *Design and Analysis of Experiments* (10<sup>e</sup> éd.). Wiley.