Chapitre II – Notion de plan d'expériences

1. Introduction

A l'origine, les P.E. s'appliquent à l'expérimentation (non numérique) et concernent la stratégie de recherche à suivre pour répondre à un certain nombre de questions ; l'expérimentateur cherche comment sélectionner les expériences à faire, quelle est la meilleure stratégie pour :

- Conduire le plus rapidement possible aux résultats espérés,
- Eviter des expériences inutiles,
- Apporter une bonne précision,
- Conduire à la modélisation et à l'optimisation des phénomènes étudiés

Une littérature abondante existe sur les P.E., mais dans le cas d' "expérimentation" numérique, tous les aspects liés aux erreurs de mesure sont sans objet (répétitions de la même expérience par exemple)

Un plan d'expériences peut être utilisé comme une méthode d'optimisation, pour trouver une ou des solutions au problème posé, mais aussi comme une étape préliminaire à l'optimisation et a alors pour objectif le choix des variables à optimiser et des fonctions à prendre en compte dans une formulation mathématique classique pour résoudre le problème par une méthode de gradient par exemple.

Terminologie :

Réponse : grandeur à laquelle on s'intéresse (y) ; son choix est un autre problème.
Facteurs : variables qui peuvent être continues ou discrètes (x_1, x_2 , … x_n), qualitatives (pas de logique de classement) ou quantitatives.
Niveaux : valeurs prises par un facteur dans les expériences

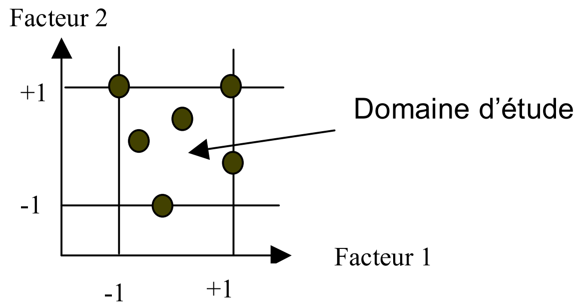
Méthode classique (cf relaxation, ou directions alternées) : fixer les niveaux de toutes les variables sauf une (ex : x_1) à laquelle on donne plusieurs valeurs successivement ; la mesure de la réponse donne une courbe $y=f(x_1)$. Recommencer pour chaque facteur …Mais :

➡ 7 facteurs, 5 niveaux donne 5^7 = 78125 expériences
7 facteurs, 3 niveaux donne 3^7 = 2187 expériences

Pour diminuer le nombre d'expériences, il faut faire varier les niveaux de tous les facteurs à la fois à chaque expérience. Ceci permettra d'étudier un grand nombre de facteurs, de détecter les interactions entre facteurs, et de trouver les facteurs influents. Pour cela, au départ, le nombre de niveaux sera généralement fixé à 2 seulement par facteur:

Niveau bas d'un facteur: borne inférieure, notée par –1
Niveau haut : borne supérieure, notée par +1

Représentation graphique (géométrique): domaine de variation d'un facteur, espace expérimental, domaine d'étude, 1 expérience=1 point



Plan d'expériences : liste des combinaisons de niveaux de facteurs pour lesquels la réponse du modèle doit être observée. (cf. liste des points du domaine de conception à partir desquels une approximation est construite)

Surface de réponse : ensemble des réponses correspondant à <u>tous les points</u> du domaine, associée à un modèle mathématique f (modèle postulé, approximation) de la réponse :

$$y = f(x_1, x_2, \ldots x_n)$$

(avec 2 variables, la représentation géométrique du P.E. et de la surface de réponse associée est possible dans un espace de dimension 2 ou 3, sous forme de lignes ou de surface d' isovaleurs)

Les plans d'expériences ne font pas tous appel à des surfaces de réponse : les plus simples utilisent seulement 2 niveaux (réponse linéaire), et la notion de surface de réponse n'apparaît pas explicitement. Les approximations les plus utilisées sont des polynômes de degré 1 ou 2. Si un modèle est insuffisant (pas assez précis), il sera possible d'ajouter des termes au polynôme et des points au P.E. pour obtenir une meilleure approximation.

Différents types de plans :

Plans de <u>criblage</u> : pour trouver les facteurs les plus influents sur une réponse.

Plans de <u>modélisation</u> = plans pour surfaces de réponse: modèles du 1er ou 2ème degré

Plans de <u>mélanges</u> : adaptés aux facteurs dépendants

Plans <u>complets/fractionnaires</u> :

plans factoriels <u>complets</u> : toutes les combinaisons des niveaux de facteurs sont présentes

plans factoriels <u>fractionnaires</u> : tous les niveaux de chaque facteur sont présents , mais pas toutes les combinaisons possibles de facteurs

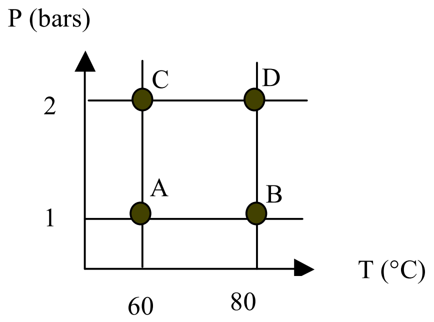
Historique : travaux de Fisher (1925) pour des essais combinant plusieurs facteurs, applications en agronomie (très grand nombre de paramètres), puis aspects théoriques étudiés par les statisticiens (Plackett et Burman, 1946), ensuite applications par les industriels et universitaires (Box, Behnken, Taguchi, …).

2. Plans factoriels complets à deux niveaux : 2^k

Ce sont les plus simples, mais ils ont de nombreuses applications (complets ou fractionnaires)

2.1 Plan complet à 2 facteurs : 2^2

Exemple : étude du rendement d'une réaction chimique
2 facteurs : température et pression



Variables centrées réduites : changement d'unité de mesure et d'origine pour avoir niveau bas= -1 et niveau haut = +1 pour tous les facteurs :

T	60°C	70°C	80°C
P	1 bar	1.5 bar	2 bars
Var.c..réd.	-1	0	1

La variable centrée réduite prend la valeur 0 au milieu du domaine.
Pas : valeur en unités d'origine correspondant à 1 en unités réduites. (pour T, pas = 10°C)

Matrice d'expérience (ou matrice des essais) :

N°	Température Facteur 1	Pression Facteur2	Rendement (réponse)
1	-1	-1	60
2	+1	-1	70
3	-1	+1	80
4	+1	+1	95

Effet global et effet moyen d'un facteur :

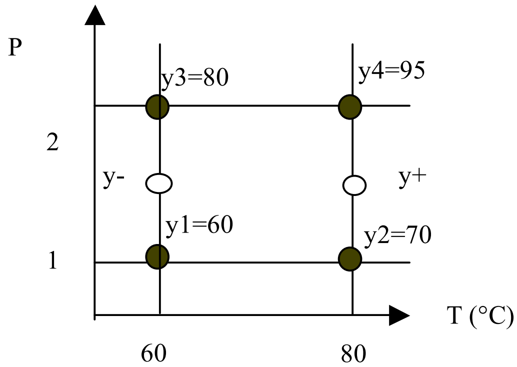
Moyenne des réponses au niveau +1 de T:

$$y_+ = \frac{1}{2}(y2 + y4) = 82.5$$

Moyenne des réponses au niveau -1 de T:

$$y_- = \frac{1}{2}(y1 + y3) = 70$$

Effet global de la température :



$E_{Tg} = (y_+ - y_-) = 12.5$

Effet moyen de la température :

$E_T = ½\ E_{Tg} = ½\ (y_+ - y_-) = 6.25$

soit :

$E_T = ½\ (- y_1 + y_2 - y_3 + y_4)$

Et de même pour l'effet moyen de la pression :

$E_P = ½\ (- y_1 - y_2 + y_3 + y_4)$

Remarque : les réponses sont numérotées dans l'ordre des essais (cf. matrice d'expériences) ; les signes dans E_T et E_P sont ceux qui apparaissent dans la colonne du facteur étudié. Cette règle se généralise à tous les plans factoriels à 2 niveaux quel que soit le nombre de facteurs.

Moyenne de toutes les réponses :

$I = ¼\ (y_1 + y_2 + y_3 + y_4) = ¼\ (60 +70 +80 +95) = 305/4 = 76.25$

(valeur de la réponse au centre du domaine expérimental)

<u>**Interaction entre les facteurs**</u> : lorsque l'effet d'un facteur dépend du niveau des autres facteurs :

Au niveau bas de T, l'effet de la pression est : $E_p^- = ½\ (y_3 - y_1) = ½\ (80 – 60) = 10$

Au niveau haut de T : $E_p^+ = ½\ (y_4 - y_2) = ½\ (95 – 70) = 12.5$

L'interaction de la température sur la pression est la moitié de la différence entre E_p^+ et E_p^-

$E_{tp} = ½ \{ ½ (y_4 - y_2) - ½ (y_3 - y_1) \} = ¼ (y_1 - y_2 - y_3 + y_4)$

$E_{tp} = ½\ (12.5 – 10) = 1.25$

Interaction de la pression sur la température :

$½\ (½\ (95 – 80) – ½\ (70 – 60)) = ½\ (7.5 – 5) = 1.25$

On a: interaction T sur p = interaction p sur T (résultat général)

$E_{Tp} = E_{pT} = ¼\ (y_1 - y_2 - y_3 + y_4)$

Remarque:
Interaction: couplage des effets des facteurs sur la réponse

Indépendance: les niveaux d'un facteur ne sont pas liés aux niveaux des autres (toutes les combinaisons sont réalisables)

Pour retrouver ces formules dans un cas général , on construit la <u>**matrice des effets**</u> :

Matrice des effets

N°	Moyenne	Température Facteur 1	Pression Facteur2	Interaction 12		Rendement (réponse)
1	+1	-1	-1	+1		60
2	+1	+1	-1	-1		70
3	+1	-1	+1	-1		80
4	+1	+1	+1	+1		95

Div.	4	4	4	4
Effet	76.25	6.25	11.25	1.25

Signe d'une réponse dans la formule d' interaction = (signe facteur1) * (signe facteur 2)

> Pour les plans factoriels à 2 niveaux, les effets et les interactions se calculent de cette manière quel que soit le nombre de facteurs.

conclusion de l'exemple : le meilleur rendement est obtenu en augmentant à la fois la pression et la température.

2.2 Plan complet à 3 facteurs : 2^3

Exemple : étude d'une émulsion de bitume .
Problème : recherche de l'influence d'un acide gras et de l'acide chlorhydrique sur la stabilité de l'émulsion, pour 2 bitumes A et B.

Facteur 1 : acide gras : faible (-) et forte (+) concentration
Facteur 2 : acide chlorhydrique : très dilué (-) et peu dilué (+)
Facteur 3 : nature du bitume : A (-) et B (+) (c'est une variable discrète)

Réponse : indice de stabilité de l'émulsion (en points)

Objectif : émulsion stable (indice faible)

Domaine expérimental : cube

Matrice des effets :

Essai	Moy.	Fac.1 (ac.gr)	Fac.2 (HCl)	Fac.3 (bitume)	Int. 12	Int. 13	Int. 23	In. 123		Réponses
1	+	-	-	-	+	+	+	-		38
2	+	+	-	-	-	-	+	+		37
3	+	-	+	-	-	+	-	+		26
4	+	+	+	-	+	-	-	-		24
5	+	-	-	+	+	-	-	+		30
6	+	+	-	+	-	+	-	-		28
7	+	-	+	+	-	-	+	-		19
8	+	+	+	+	+	+	+	+		16

Div.	8	8	8	8	8	8	8	8
Effets	27.25	-1	-6	-4	-0.25	-0.25	0.25	0

Interprétation :

- L'effet du facteur 2 (E2) est le plus important ; il est < 0 : la valeur de la réponse diminue quand le facteur passe du niveau –1 à +1.
- E1 est faible (la concentration d'acide gras est sans importance)
- La nature du bitume est également importante (meilleur résultat avec B)
- Pas d'interactions significatives

Notation de Box : E1 → **1**, E123 → **123**

<u>2.3 Construction des plans factoriels complets à k facteurs : 2^k</u>

Construction de la matrice d'expérience et numérotation
Numérotation dite « classique » : les essais sont numérotés de 1 à n. Dans les colonnes, les valeurs sont les suivantes :
Suite des signes du facteur 1 : - + - + - + …
Suite des signes du facteur 2 : - - + + - - …
Suite des signes du facteur 3 : - - - - + + + + …
Et ainsi de suite (8-, 8+ ; 16-, 16 + ; …)

2^k essais à faire, k effets principaux, 2^k -k- 1 interactions

Représentation matricielle : soit X la matrice formée des lignes et colonnes des moyennes, facteurs, interactions :

X =

Moy.	Fac1	Fac2	In12
+1	-1	-1	+1
+1	+1	-1	-1
+1	-1	+1	-1
+1	+1	+1	+1

Vecteur des réponses : $Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix}$

Vecteur des effets : $E = \begin{bmatrix} I \\ E_1 \\ E_2 \\ E_{12} \end{bmatrix}$

On a alors : $E = \frac{1}{4} X^t Y$

Et pour tout plan factoriel complet à 2 niveaux :

$$E = \frac{1}{n} X^t Y \qquad \text{avec n = nombre des essais} = 2^k$$

- On peut considérer la transformation du vecteur des réponses Y par la matrice X^t comme le moyen de faire apparaître l'effet de chaque facteur séparément, alors que les influences ne sont pas visibles directement dans Y
- X^t caractérise l'emplacement des points expérimentaux, d'où l'importance de bien placer ces points.
- Les matrices X^t sont des matrices d'Hadamard, qui ont des propriétés mathématiques particulières :

Et on a :

$$X^{-1} = \frac{1}{n} X^t$$

$$Y = X E \qquad \text{(calcul des réponses à partir des effets)}$$

$$X^t X = n I \qquad \text{(I = matrice identité)}$$

- On peut démontrer que cette valeur de $X^t X$ est celle qui donne la meilleure précision possible

- Unités : la moyenne, les effets et les interactions sont exprimés dans les mêmes unités que celles utilisées pour mesurer les réponses.

3. **Notion de plan optimal**

Soit X la matrice d'expériences.
$X^t X$ = matrice d'information
$(X^t X)^{-1}$ = matrice de dispersion

Critères d'optimalité d'un plan d'expériences :

a) critère de la matrice unité : $X^t X = n I$ où n = nombre d'expériences est le meilleur critère, mais ne peut être satisfait que pour n = 4 p

b) déterminant maximal : dét ($X^t X$) le plus grand possible

c) Trace minimale : $tr(X^t X)^{-1}$ la plus faible possible (trace = somme des éléments de la diagonale principale)

d) L'élément maximal de la diagonale principale doit être le plus faible possible.

Remarques : ces critères ne sont pas incompatibles ; a) implique b), c) et d).
Si $(X^t X)^{-1}$ est diagonale, la matrice d'expériences est dite orthogonale

Il existe un très grand nombre de matrices d'expériences, pour des domaines cubiques ou sphériques, des modèles du 1^er^ ou 2^ème^ degré (Box-Behnken, Doehlert, …); pour choisir un P.E., on dispose de tables donnant les matrices d'expériences possibles en fonction du nombre d'expériences envisagé, de niveaux des variables, …

Références :

Introduction aux plans d'expériences, Jacques Goupy, Dunod, Paris, 2001,
Plans d'expériences pour surfaces de réponse, Jacques Goupy, Dunod, 1999,
Plans d'expériences, applications à l'entreprise, Jean-Jacques Droesbeke, Jeanne Fine, Gilbert Saporta Editeurs, Technip
Pratique des plans d'expériences, Paul Schimmerling, Jean-Claude Sisson, Ai Zaïdi, Tec&Doc