

Thèse

Présentée pour obtenir le grade de DOCTEUR
de l'Université Louis Pasteur (Strasbourg I)

Spécialité **Mathématiques Appliquées**

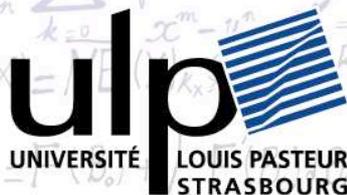
Par Frédéric BERTRAND

Plans sphériques de force t et applications en statistique

Soutenue le 7 décembre 2007 devant la Commission d'Examen :

Jean-Marc AZAIS
Dominique COLLOMBIER
Jean-Pierre GAUCHI
Giovanni PISTONE
Jean-Pierre WINTENBERGER

Rapporteur externe
Directeur de thèse
Examinateur
Rapporteur externe
Rapporteur interne



INSTITUT DE RECHERCHE MATHÉMATIQUE AVANCÉE
UMR 7501

Université Louis Pasteur et CNRS
<http://www-irma.u-strasbg.fr>



INSTITUT DE RECHERCHE MATHÉMATIQUE AVANCÉE

Université Louis Pasteur et C.N.R.S. (UMR 7501)

7, rue René Descartes

67084 STRASBOURG Cedex

Plans sphériques de force t et applications en statistique

par

Frédéric BERTRAND

Mots-clés : Statistique mathématique – Statistique algébrique – Planification expérimentale – Invariance faible – Surface de réponse – Surface de variance – Caractérisations polynomiales – Bases de Gröbner – Programmation semi-définie positive

Classification mathématique : 62K20, 62K05, 62K99, 05B30, 13P10, 20F55, 51M20.

Avant-propos

Questions de traduction

Nous avons indiqué la traduction anglaise des notions algébriques apparaissant dans le chapitre 8.

Notations

- $A \times B$ désigne le produit cartésien de deux ensembles A et B .
- Pour C une matrice réelle à p lignes et q colonnes, C' désigne la transposée de la matrice C .
- $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ est le produit scalaire canonique de deux vecteurs.
- $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_E$ est le produit scalaire de deux vecteurs pour le produit scalaire défini par la matrice symétrique réelle définie positive E .
- V^\perp est l'orthogonal de la partie V pour le produit scalaire canonique.
- C^- est un pseudo inverse de la matrice réelle à p lignes et q colonnes C .
- C^+ est le pseudo inverse de Moore-Penrose de la matrice réelle à p lignes et q colonnes C .
- C^{-1} est l'inverse de la matrice carrée C lorsque celle-ci est inversible.
- $C^{1/2}$ désigne une racine carrée de la matrice C . Si C est symétrique réelle semi-définie positive alors $C^{1/2}$ est l'unique matrice symétrique réelle semi-définie positive dont le carré est égal à C .
- $C^{1/s}$, où s est un nombre réel positif, désigne une racine s -ème de la matrice C . Si C est symétrique réelle semi-définie positive alors $C^{1/s}$ est l'unique matrice symétrique réelle semi-définie positive dont la puissance s -ème est égal à C .
- $C \otimes D$ est le produit tensoriel des deux matrices C et D .
- Si C et D sont deux matrices symétriques réelles alors $C \leq D$ si et seulement si $D - C \in \mathcal{S}_k^+$. Il s'agit de l'ordre de Loewner.
- \sqrt{I} désigne le radical de l'idéal I .
- \bar{f}^F est le reste de la division euclidienne de f par le s -uplet (f_1, \dots, f_s) .
- \bar{f}^G est le reste de la division euclidienne de f par la base de Gröbner G .
- $\hat{\kappa}$ est un estimateur de la fonction κ des paramètres du modèle.
- $|A|$ désigne le cardinal de l'ensemble fini A .
- $n!$ désigne la factorielle de l'entier n .
- $\binom{n}{p}$ est le nombre de parties à p éléments d'un ensemble à n éléments.
- $\langle f_1, \dots, f_k \rangle$ désigne l'idéal engendré par les polynômes f_1, \dots, f_k .

- $\mathbb{E}[X]$ désigne l'espérance de la variable aléatoire X .
- $\text{Var}[X]$ désigne la variance de la variable aléatoire X .
- $\text{Cov}[X_1, X_2]$ désigne la covariance des variables aléatoires X_1 et X_2 .
- $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_v)$ où les $\alpha_1, \dots, \alpha_v$ sont v entiers positifs.
- $\gamma_{\boldsymbol{\xi}}$ est le cardinal effectif de $R(\boldsymbol{\xi})$, où $\boldsymbol{\xi}$ est un plan isovariant sur la boule \mathcal{B}_r , qui est égal à :

$$\gamma_{\boldsymbol{\xi}} = \sum_{\rho \in R(\boldsymbol{\xi})} m_{\boldsymbol{\xi}}(\rho).$$

- χ est un domaine expérimental, c'est-à-dire une partie d'un espace vectoriel réel de dimension v euclidien.
- $\boldsymbol{\eta}$ est une surface de réponse d'ordre d .
- $\boldsymbol{\lambda}(A)$ est le vecteur $(\lambda_1(A), \dots, \lambda_k(A))'$ des valeurs propres de la matrice A symétrique réelle rangées dans l'ordre croissant : $\lambda_1(A) \leq \lambda_j(A) \leq \lambda_k(A)$.
- $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ est un critère d'optimalité.
- $\Phi_p(A) = \left(\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \lambda_j(A)^p \right)^{\frac{-1}{p}}$ si $p \notin \{-\infty, 0\}$ est le critère d'optimalité Φ_p de Kiefer.
- $\Phi_0(A) = \left(\prod_{j=1}^k \lambda_j(A) \right)^{\frac{-1}{k}} = (\det(A))^{\frac{-1}{k}}$ est le critère de D -optimalité.
- $\Phi_{-1}(A) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \lambda_j(A)^{-1}$ est le critère de A -optimalité.
- $\Phi_{-\infty}(A) = (\min_{j=1, \dots, k} \lambda_j(A))^{-1}$ est le critère de E -optimalité.
- $\Phi_I(A) = \frac{1}{\text{vol}(\chi)} \int_{\chi} \mathbf{f}(\mathbf{x})' A^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ est le critère de I -optimalité.
- $\mu_{\gamma}(\boldsymbol{\xi})$ désigne le moment d'ordre γ du modèle polynomial pour le plan $\boldsymbol{\xi}$.
- $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_k)$ est le vecteur des paramètres.
- σ^2 variance commune des variables aléatoires Y_1, \dots, Y_n représentant les valeurs de la réponse y aux points x_1, \dots, x_n du plan expérimental.
- τ désigne un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$.
- $\boldsymbol{\xi}$ est un plan expérimental exact ou approché c'est-à-dire un couple (\mathbf{X}, \mathbf{w}) où \mathbf{X} est un sous-ensemble fini du domaine expérimental χ et \mathbf{w} est un r -uplet réel.
- $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i)$ le poids du point support \mathbf{x}_i du plan $\boldsymbol{\xi}$.
- $\boldsymbol{\xi}^g$ est l'image du plan $\boldsymbol{\xi}$ par g une transformation bijective de χ sur χ .
- $\boldsymbol{\xi}_n$ est un plan expérimental exact de cardinal pour un nombre total d'essais égal à n .
- $\boldsymbol{\xi}(\mathcal{S}_{\rho})$ est le poids total de tous les points du plan appartenant à la sphère de rayon ρ centrée en l'origine du domaine.
- $]a, b[$ désigne l'intervalle réel ouvert d'extrémités a et b .
- \mathcal{A} est un cône convexe inclus dans \mathcal{S}_k tel que $\mathcal{S}_k^{++} \subset \mathcal{A} \subset \mathcal{S}_k^+$.
- A désigne une matrice symétrique réelle définie positive telle que le groupe de matrices compact \mathcal{G} soit conjugué au sous-groupe \mathcal{K} du groupe orthogonal $\mathcal{O}_v(\mathbb{R})$: $\mathcal{G} = A\mathcal{K}A^{-1}$.
- A est un sous-ensemble fini de \mathbb{N}^v l'ensemble des degrés du modèle polynomial A .
- A_d est un sous-ensemble fini de \mathbb{N}^v appelé modèle polynomial complet de degré d .
- $\text{Aut}(H)$ désigne l'ensemble des automorphismes du groupe H .
- \mathcal{B}_r est la boule de rayon r centrée en $\mathbf{0}$.
- \mathbb{C} désigne le corps des nombres complexes.
- $\mathbb{C}\mathbf{P}^v$ désigne un espace projectif sur le corps des nombres complexes.
- $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_v]$ désigne l'algèbre des polynômes à v indéterminées à coefficients complexes.

- \mathcal{C}_b est un domaine expérimental de forme v -hypercube symétrique centré en $\mathbf{0}$:

$$\mathcal{C}_b = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, |x_i| \leq b_i, 1 \leq i \leq v \right\}$$

où $b_i \in]0, +\infty[$, $1 \leq i \leq v$.

- $C_K(\boldsymbol{\xi})$ est la matrice d'information réduite du plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$.
- $\text{Conv}\{D\}$ est l'enveloppe convexe de D une partie d'un \mathbb{R} -espace vectoriel.
- $\det C$ désigne le déterminant de C une matrice carrée.
- $\text{Diag}(a_1, \dots, a_v)$ est égal à D une matrice diagonale d'ordre v dont le terme général D_{ij} est égal à 0 si $i \neq j$ et à a_i si $i = j$.
- E désigne une matrice symétrique réelle définie positive telle que le groupe de matrices compact \mathcal{G} soit un sous-groupe du groupe $\mathcal{O}_v(E)$.
- \mathcal{E}_H est un domaine expérimental de forme v -ellipsoïde centré en $\mathbf{0}$:

$$\mathcal{E}_H = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, \mathbf{x}' H \mathbf{x} \leq 1 \right\}$$

où $H \in \mathcal{S}_k^{++}$.

- $\partial \mathcal{E}_H$ est la frontière de \mathcal{E}_H :

$$\partial \mathcal{E}_H = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, \mathbf{x}' H \mathbf{x} = 1 \right\}.$$

- $\text{eff}(\boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\xi}^*) = \frac{\Phi(M(\boldsymbol{\xi}^*))}{\Phi(M(\boldsymbol{\xi}))}$ est l'efficacité relative d'un plan $\boldsymbol{\xi}$ par rapport à un plan $\boldsymbol{\xi}^*$.
- $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ est l'ensemble des représentants de degré minimal des fonctions polynomiales estimables pour le plan $\boldsymbol{\xi}$ et l'ordre τ .
- $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_k)'$ est une fonction connue définie sur $\boldsymbol{\chi}$ et à valeurs dans \mathbb{R}^k . Il s'agit de la part déterministe d'un modèle statistique.
- $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ est la part déterministe du modèle évaluée en le point support \mathbf{x}_i du plan $\boldsymbol{\xi}$.
- \mathbf{f}_d est la part déterministe d'un modèle polynomial complet de degré d .
- G désigne une base de Gröbner.
- \mathcal{G} est un groupe de transformations bijectives de $\boldsymbol{\chi}$ sur $\boldsymbol{\chi}$.
- \mathcal{G}_{orth} est le groupe des endomorphismes orthogonaux de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique.
- $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ est le groupe des matrices réelles inversibles d'ordre v . Il s'agit d'un groupe topologique pour la topologie héritée de la topologie usuelle sur $\mathcal{M}_v(\mathbb{R})$.
- \mathbb{H} désigne le corps des quaternions.
- $\mathbb{H}\mathbf{P}^v$ désigne un espace projectif sur le corps des quaternions.
- I désigne un idéal de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.
- $\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ désigne l'ensemble des idéaux de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.
- $\mathbf{I}(V)$ désigne l'idéal annulateur d'une partie de \mathbb{k}^v .
- $\mathbf{I}(\boldsymbol{\xi})$ ou $\mathbf{I}(\mathbf{X})$ désignent l'idéal du plan $\boldsymbol{\xi}$.
- I_v est la matrice carrée identité d'ordre v .
- $i_M(\boldsymbol{\xi})$ est la surface d'information généralisée de l'estimateur de la réponse moyenne $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})$.
- Pour \mathbf{C} une matrice réelle à p lignes et q colonnes, $\text{Im}(\mathbf{C})$ désigne l'image de la matrice \mathbf{C} dans \mathbb{R}^q .
- \mathbb{K} ou \mathbb{k} désignent un corps de caractéristique nulle.

- $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_v]$ désigne l'algèbre des polynômes à v indéterminées à coefficients dans le corps \mathbb{K} .
- $\mathbb{K}[V]$ désigne l'ensemble des fonctions polynomiales $\phi : V \rightarrow \mathbb{K}$.
- \mathcal{K} désigne un sous-groupe compact du groupe orthogonal $\mathcal{O}_v(\mathbb{R})$.
- Pour \mathbf{C} une matrice réelle à p lignes et q colonnes, $\text{Ker}(\mathbf{C})$ désigne le noyau de la matrice \mathbf{C} dans \mathbb{R}^p .
- $\text{LC}(f)$ désigne le coefficient du terme dominant du polynôme f .
- $\text{LM}(f)$ désigne le monôme dominant du polynôme f .
- $\text{LT}(f)$ désigne le terme dominant du polynôme f .
- $\mathcal{M} = \text{Conv}\{\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})', \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ est une partie convexe de \mathcal{S}_k .
- $\mathcal{M}_v(\mathbb{R})$ est le \mathbb{R} -espace vectoriel des matrices carrées réelles d'ordre v .
- $\mathcal{M}_{p,q}(\mathbb{R})$ ou $\mathcal{M}_{p,q}$ est le \mathbb{R} -espace vectoriel des matrices réelles à p lignes et q colonnes.
- $M(\boldsymbol{\xi})$ matrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$.
- $\overline{M}_{d,\rho}$ est la matrice des moments d'un plan isovariant dont le support est inclus dans la sphère \mathcal{S}_ρ .
- $m_{\boldsymbol{\xi}}(\rho)$ est la multiplicité d'un rayon $\rho \in R(\boldsymbol{\xi})$ qui est égale à :

$$m_{\boldsymbol{\xi}}(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{si } \rho = r \\ 1, & \text{si } 0 < \rho < r \\ \frac{1}{2}, & \text{si } \rho = 0 \end{cases} .$$

- M_0 est la matrice des moments de la distribution uniforme sur le domaine compact d'intérieur non vide d'intérieur vide $\mathcal{X} : M_0 = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})' \frac{d\mathbf{x}}{\text{vol}(\mathcal{X})}$.
- $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ désigne la fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour un modèle polynomial complet A_d de degré d .
- $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$ désigne la fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour un modèle polynomial A de degré d .
- $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ désigne la fonction E -génératrice des moments du modèle polynomial complet A_d de degré d .
- $\min_{x \in \Gamma} f(x)$ désigne le minimum de f pour x appartenant à Γ .
- $\text{multideg}(f)$ le degré multivarié du polynôme f .
- \mathbb{N} désigne les entiers naturels.
- $n(\boldsymbol{\xi})$ est la taille du plan exact $\boldsymbol{\xi}$.
- \mathbb{O} désigne les octaves de Cayley.
- $\mathbb{O}P^1$ désigne la droite projective sur les octaves de Cayley.
- $\mathbb{O}P^2$ désigne le plan projectif sur les octaves de Cayley.
- $\mathcal{O}_v(\mathbb{R})$, \mathcal{O}_v est le groupe orthogonal de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique.
- $\mathcal{O}_v(E)$ est le groupe orthogonal de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire induit par la matrice symétrique réelle définie positive E .
- \mathbb{Q} désigne les nombres rationels.
- \mathcal{Q} est un groupe de matrices carrées d'ordre k .
- \mathcal{Q}_{orth} est le groupe de matrices carrées d'ordre k induit par le groupe \mathcal{G}_{orth} .
- \mathbb{R} désigne le corps des nombres réels.
- $\mathbb{R}P^v$ désigne un espace projectif sur le corps des nombres réels.
- $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ désigne l'algèbre des polynômes à v indéterminées à coefficients réels.
- $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$ désigne le quotient de l'algèbre des polynômes à v indéterminées à coefficients réels par l'idéal I .

- $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ désigne la \mathbb{R} –sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ des polynômes invariants pour l’action induite par le groupe de matrices \mathcal{G} .
- $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ désigne la \mathbb{R} –sous-algèbre des polynômes en les polynômes à coefficients réels f_1, \dots, f_k .
- r désigne généralement le cardinal de \mathbf{X} l’ensemble des points support du plan expérimental ξ .
- $R(\xi)$ est l’ensemble, fini, des rayons $\rho \in [0, r]$ tels que $\xi(\mathcal{S}_\rho) > 0$.
- $R^{\mathcal{G}}$ désigne l’opérateur de Reynolds associé au groupe de matrices compact \mathcal{G} .
- $\text{ri}(\mathcal{S})$ est l’intérieur relatif du segment \mathcal{S} .
- \mathcal{S}_k ou $\text{Sym}_k(\mathbb{R})$ désignent le \mathbb{R} –espace vectoriel des matrices symétriques réelles.
- \mathcal{S}_k^+ ou $\mathcal{S}_k^+(\mathbb{R})$ désignent le cône convexe des matrices symétriques réelles positives.
- \mathcal{S}_k^{++} ou $\mathcal{S}_k^{++}(\mathbb{R})$ désignent le cône convexe étoilé en $\mathbf{0}$ des matrices symétriques réelles positives.
- \mathcal{S}_r est la sphère de rayon r centrée en $\mathbf{0}$.
- \mathcal{S}^v est la sphère unité centrée en $\mathbf{0}$ de l’espace vectoriel \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique.
- $\text{supp}(\xi)$ est le support du plan ξ .
- t est généralement un entier qui désigne la force d’un plan sphérique.
- \mathbf{t} désigne un élément de \mathbb{R}^v .
- $\text{tr}(M)$ est la trace de la matrice M .
- U_g est la matrice de g la transformation bijective de χ sur χ lorsque le groupe \mathcal{G} agit linéairement sur χ .
- $\mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ désigne l’ensemble des variétés affines de \mathbb{K}^n .
- $\mathbf{V}(I)$ désigne la variété algébrique associée à l’idéal I .
- $V(\xi_n, \mathbf{c})$ est la fonction de variance normalisée.
- \mathcal{V}_b est l’ensemble des sommets de \mathcal{C}_b :

$$\mathcal{V}_b = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, |x_i| = \pm b_i, 1 \leq i \leq v \right\}.$$

- $v_{M(\xi)} : \chi \rightarrow \mathbb{R}$ est la surface de variance extrapolée à χ de l’estimateur de la réponse moyenne $\widehat{\eta(\mathbf{x})}$. Si la matrice des moments $M(\xi)$ du plan expérimental ξ n’est pas singulière il s’agit de la surface de variance de l’estimateur de la réponse moyenne $\widehat{\eta(\mathbf{x})}$.
- $\mathfrak{v}_{M(\xi)} : \chi \rightarrow \mathbb{R}$ est la surface de variance généralisée de l’estimateur de la réponse moyenne $\widehat{\eta(\mathbf{x})}$.
- $\text{Vect}(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_l)$ est le sous-espace vectoriel engendré par les vecteurs $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_l$.
- \mathbf{w} est un r –uplet réel (w_1, \dots, w_r) , les poids des points support du plan ξ .
- \mathbf{X} est un ensemble fini de r points $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r$, les points support du plan ξ .
- y est une réponse univariée réelle c’est-à-dire une fonction définie sur χ et à valeurs réelles.
- $\widehat{\eta(\mathbf{x})}$ est l’estimateur de la réponse moyenne de η , une surface de réponse d’ordre d .
- \mathbb{Z} désigne les entiers relatifs.

Table des matières

I	Construction de plans expérimentaux : aspects théoriques	1
1	Introduction	7
1.1	Domaines d'application	8
1.1.1	Étude des propriétés de certains tenseurs physiques	8
1.1.2	Régression sphérique	8
1.1.3	Données directionnelles	8
1.1.4	Reconnaissance de formes	9
1.1.5	Surfaces de réponse	10
1.2	Contexte et motivations statistiques	10
1.2.1	Cadre du travail	10
1.3	Motivations	10
1.3.1	Isovariance	11
1.3.2	Admissibilité	11
1.3.3	Confusions d'effets	11
1.4	Approche combinatoire	12
1.4.1	Questions de construction	12
1.4.2	Plans sphériques combinatoires et isovariance statistique	12
1.5	Outils algébriques	13
1.5.1	Groupes de Coxeter	13
1.5.2	Bases de Gröbner	13
1.5.3	Utilisation des notions d'invariance en planification expérimentale	14
1.5.4	Extension aux autres formes de domaines expérimentaux	14
1.6	Synthèse des idées originales	14
2	Problématique statistique	17
2.1	Modèles statistiques	17
2.2	Optimalité	21
2.3	Équivariance, invariance et invariance faible	25
2.4	Invariance et optimalité	30
2.5	Admissibilité	32
2.6	Admissibilité, invariance et modèles polynomiaux	34
2.7	Éléments de résolution d'un problème d'optimalité	39
2.7.1	Reformulation et réduction du problème	39
2.7.2	Cas d'un plan isovariant pour un modèle d'ordre d , $d \geq 1$	40
2.8	Fonction génératrice des moments et invariance faible	43
2.8.1	Invariance par un sous-groupe du groupe orthogonal	44
2.8.2	Invariance par un groupe de matrices compact	46

2.9	Conclusion	54
3	Surfaces de réponse	57
3.1	Un cas particulier : matrice des moments inversible	59
3.1.1	Définition	59
3.1.2	Isovariance et invariance de la surface de réponse	59
3.1.3	Plans faiblement-invariants et invariance de la surface de réponse	62
3.2	Cas général : matrice des moments quelconque, première approche	63
3.2.1	Définitions et propriétés des pseudo-inverses	63
3.2.2	Inverse de Moore-Penrose et invariance	67
3.2.3	Surface de variance extrapolée	69
3.2.4	Surface de variance extrapolée et plans faiblement invariants	72
3.3	Cas général : matrice des moments quelconque, deuxième approche	81
3.3.1	Surface de variance généralisée	81
3.3.2	Invariances	82
3.4	Modèles polynomiaux pour surfaces de réponse	86
3.5	Conclusion	90
4	Plans sphériques de force t	93
4.1	Force et isovariance	93
4.1.1	Définition des plans sphériques	93
4.1.2	Premières propriétés des plans sphériques	94
4.1.3	Plans isovariants et plans sphériques	95
4.2	Existence de plans sphériques	96
4.3	Extension de la notion de plan sphérique	97
4.4	Résultats de non existence	99
4.5	Caractérisations des t -plans sphériques	100
4.5.1	Polynômes harmoniques	101
4.5.2	Formules de cubature	102
4.5.3	Représentation des groupes finis	102
4.6	Résultats d'existence constructifs	102
4.6.1	Cas particulier de la dimension 2	103
4.6.2	Cas général	104
4.7	4-plans sphériques, modèles A_2 , D -efficacité et I -efficacité	108
4.8	$2d$ -plans sphériques, modèles A_d et D -efficacité	111
4.9	Conclusion	111
5	Construction polynomiale de plans faiblement invariants	113
5.1	Invariance faible et invariants polynomiaux	114
5.1.1	Polynômes invariants pour l'action d'un groupe de matrices	114
5.1.2	Utilisation de l'invariance des surfaces de réponses	118
5.1.3	Utilisation de la fonction génératrice des moments	121
5.2	Construction ou augmentation de plans expérimentaux	125
5.2.1	Problème de construction de type polynomial	125
5.2.2	Invariance faible d'un plan expérimental	127
5.2.3	Recherche d'optimalité d'un plan expérimental	128
5.2.4	Plans partiellement faiblement-invariants et optimalité	129

TABLE DES MATIÈRES GÉNÉRALE

5.2.5	Plans bloqués orthogonalement	129
5.3	Éléments de résolution du problème de construction polynomiale	130
5.3.1	Construction « à vue »	130
5.3.2	Réduction du nombre d'inconnues	130
5.3.3	Utilisation des bases de Gröbner	131
5.4	Programmation semi-définie positive	131
5.4.1	Introduction	131
5.4.2	Théorème des zéros : cas réel	132
5.4.3	Calcul algorithmique des réfutations	133
5.4.4	Décomposition en sommes de carrés	134
5.4.5	Optimisation sur une variété réelle	134
5.4.6	Variétés réelles de dimension 0	135
5.4.7	Minimisation de polynômes sur une variété de dimension 0	136
5.5	Calculs relatifs aux sous-groupes finis du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v	137
5.5.1	Quelques groupes dérivés des groupes de permutations	138
5.5.2	Quelques groupes finis de réflexions	140
5.5.3	Calcul du degrés des invariants polynomiaux	143
5.6	Conclusion	146
6	Analyse des confusions d'effets	149
6.1	Bases de Gröbner en planification expérimentale	149
6.1.1	Modèles algébriques	149
6.1.2	Idéal d'un plan expérimental et estimabilité	151
6.1.3	Le <i>span</i> d'un plan expérimental	153
6.1.4	Modèles et identifiabilité	156
6.2	Algorithmes	158
6.3	Modèles saturés, sous-modèles et analyse de régression	159
6.3.1	Sous-modèles et calcul des représentants des fonctions estimables	159
6.3.2	Critère de discrimination entre modèles saturés	161
6.3.3	Applications à l'analyse de régression	162
6.4	Conclusion	166
7	Résultats de l'étude de cas	167
7.1	Cas de la dimension 3	167
7.1.1	Les résultats de Hardin et Sloane	167
7.1.2	Utilisation des informations de Hardin et Sloane	171
7.1.3	Résultats	171
7.2	Cas de la dimension 4	175
7.2.1	Les résultats de Hardin et Sloane	175
7.2.2	Utilisation des informations de Hardin et Sloane	178
7.3	Conclusion	179
8	Notions algébriques	181
8.1	Un détour par l'algèbre moderne	183
8.1.1	Anneaux et modules	183
8.1.2	Idéaux d'une \mathbb{K} -algèbre de polynômes	187
8.1.3	Bases de Gröbner	190

8.1.4	Algorithmes	201
8.1.5	Le dictionnaire Algèbre-Géométrie	202
8.1.6	Invariants des groupes finis	212
8.2	Groupes de réflexions dans un espace réel euclidien	216
8.2.1	Groupes de réflexions	217
8.2.2	Groupes de Coxeter	225
8.3	Polytopes convexes	227
8.3.1	Polytopes réguliers	227
8.3.2	Conclusion	231
8.3.3	Polytopes déduits des polytopes réguliers	232
8.4	Relations et générateurs pour certains groupes de réflexions	233
8.4.1	Introduction	233
8.4.2	Groupes cycliques et diédraux	233
8.4.3	Groupes engendrés par des rotations de \mathbb{R}^3	233
8.4.4	Groupes engendrés par des réflexions de \mathbb{R}^3	234
8.4.5	Sous-groupes des groupes de réflexion	236
8.4.6	Tableaux récapitulatifs	237
8.5	Conclusion	237
9	Conclusion	241
9.1	Résumé	241
9.1.1	Chapitre 2	241
9.1.2	Chapitre 3	242
9.1.3	Chapitre 4	242
9.1.4	Chapitre 5	243
9.1.5	Chapitre 6	245
9.1.6	Chapitre 7	246
9.1.7	Chapitre 8	246
9.2	Synthèse des résultats originaux	246
9.2.1	Chapitre 2	246
9.2.2	Chapitre 3	247
9.2.3	Chapitre 4	247
9.2.4	Chapitre 5	247
9.2.5	Chapitre 7	248
9.3	Ouvertures et extensions envisagées	249
II	Construction de plans expérimentaux : pratique	1
10	Implémentation pratique	7
10.1	Description des programmes	7
10.2	Préambule	8
10.2.1	Gestion des répertoires	8
10.2.2	Chargement des boîtes à outils	8
10.2.3	Configuration	11
10.2.4	Conversion de types, tri	12
10.3	Matrices et idéaux	14

TABLE DES MATIÈRES GÉNÉRALE

10.3.1	Entrées sorties	14
10.3.2	Matrice du plan et matrice des moments	15
10.3.3	Variance de l'estimateur BLUE	21
10.3.4	Idéal du plan	31
10.4	Isovariance	34
10.4.1	Équations d'isovariance	34
10.4.2	Fonction génératrice des moments	37
10.4.3	Défaut d'isovariance	39
10.5	Estimabilité	41
10.5.1	Algorithme de Möller, Marinari et Mora	41
10.6	Manipulation des objets algébriques	43
10.6.1	Utilitaires	43
10.6.2	Représentation algébrique des modèles possibles	46
10.6.3	Décomposition dans une sous-algèbre de polynômes	47
10.6.4	Solutions d'un système d'équations polynomiales	54
10.6.5	Idéal annulateur d'une variété de dimension 0	57
10.7	Groupes	73
10.7.1	Outils	73
10.7.2	Matrices remarquables d'ordre fini	74
10.7.3	Ensembles de générateurs de certains groupes de matrices	77
10.7.4	Des générateurs aux groupes	81
10.7.5	Groupes finis de matrices	83
10.7.6	Orbite d'un point par un groupe de matrices	92
10.8	Représentations à l'aide du théorème de l'élément primitif	94
10.8.1	Polynômes minimaux	94
10.8.2	Générateurs	95
10.8.3	Outils	102
10.8.4	Groupes	107
10.9	Compléments	108
11	Une étude de cas	115
11.1	Cas de la dimension 3	115
11.1.1	Les résultats de Hardin et Sloane	115
11.1.2	Utilisation des informations de Hardin et Sloane	119
11.2	Présentation des résultats	119
11.3	N1	120
11.3.1	$tdeg(x,y,z)$	121
11.3.2	$plex(x,y,z)$	121
11.3.3	Variance	122
11.4	N2	123
11.4.1	$tdeg(x,y,z)$	124
11.4.2	$plex(x,y,z)$	125
11.4.3	Variance	125
11.5	N3	126
11.5.1	$tdeg(x,y,z)$	128
11.5.2	$plex(x,y,z)$	128
11.5.3	Variance	129

TABLE DES MATIÈRES GÉNÉRALE

11.6	N4	130
11.6.1	tdeg(x,y,z)	134
11.6.2	plex(x,y,z)	134
11.6.3	Variance	135
11.7	N5	136
11.7.1	tdeg(x,y,z)	138
11.7.2	plex(x,y,z)	138
11.7.3	Variance	139
11.8	N6	140
11.8.1	tdeg(x,y,z)	142
11.8.2	plex(x,y,z)	142
11.8.3	Variance	143
11.9	N7	144
11.9.1	tdeg(x,y,z)	155
11.9.2	plex(x,y,z)	159
11.9.3	Variance	162
11.10	N8	163
11.10.1	tdeg(x,y,z)	165
11.10.2	plex(x,y,z)	166
11.10.3	Variance	167
11.11	N9	168
11.11.1	tdeg(x,y,z)	176
11.11.2	plex(x,y,z)	177
11.11.3	Variance	178
11.12	N10	180
11.12.1	tdeg(x,y,z)	184
11.12.2	plex(x,y,z)	185
11.12.3	Variance	186
11.13	N10twisted	187
11.13.1	tdeg(x,y,z)	190
11.13.2	plex(x,y,z)	190
11.13.3	Variance	191
11.14	N11	192
11.14.1	tdeg(x,y,z)	195
11.14.2	plex(x,y,z)	198
11.14.3	Variance	199
11.15	N11+1	201
11.15.1	tdeg(x,y,z)	205
11.15.2	plex(x,y,z)	207
11.15.3	Variance	208
11.15.4	Etude de la variance pour N11 et N11bis et un modèle de degré 2	209
11.15.5	Variance pour le modèle tdeg saturé.	212
11.15.6	Optimalité pour le modèle plex saturé.	220
11.16	N12	228
11.16.1	tdeg(x,y,z)	234
11.16.2	plex(x,y,z)	238
11.16.3	Variance	242

TABLE DES MATIÈRES GÉNÉRALE

11.17N12+1 point au centre	243
11.17.1 tdeg(x,y,z)	247
11.17.2 plex(x,y,z)	257
11.17.3 Variance	261
11.18N13	263
11.18.1 tdeg(x,y,z)	267
11.18.2 plex(x,y,z)	269
11.18.3 Variance	271
11.19N14	273
11.19.1 1er essai	273
11.19.2 2ème essai	274
11.20N15	280
11.20.1 tdeg(x,y,z)	287
11.20.2 plex(x,y,z)	287
11.20.3 Variance	287
11.21N16	289
11.21.1 Variance	293
11.22N17	295
11.23N18	301
11.23.1 Variance	306
11.24N19	308
11.25N20	332
11.25.1 tdeg(x,y,z)	343
11.25.2 Variance	343
11.26N21	345
11.26.1 Variance	351
11.27N22	352
11.27.1 Variance	362
11.28N24 5-plan	364
11.28.1 tdeg(x,y,z)	368
11.28.2 Variance	369
11.29N24bis 7-plan	370
11.29.1 tdeg(x,y,z)	373
11.29.2 plex(x,y,z)	374
11.29.3 Variance	375
11.29.4 tdeg(x,y,z)	377
11.29.5 plex(x,y,z)	377
11.29.6 Variance	378
11.30N25	379
11.30.1 Variance	410
11.30.2 Variance	414
11.30.3 Variance	418
11.30.4 Variance	422
11.31 Conclusion	424
11.32 Cas de la dimension 4	427
11.32.1 Les résultats de Hardin et Sloane	427
11.32.2 Utilisation des informations de Hardin et Sloane	431

TABLE DES MATIÈRES GÉNÉRALE

11.33 Conclusion	431
Remerciements	433

Première partie

Aspects théoriques de la construction de plans expérimentaux

Table des Matières

1	Introduction	7
1.1	Domaines d'application	8
1.1.1	Étude des propriétés de certains tenseurs physiques	8
1.1.2	Régression sphérique	8
1.1.3	Données directionnelles	8
1.1.4	Reconnaissance de formes	9
1.1.5	Surfaces de réponse	10
1.2	Contexte et motivations statistiques	10
1.2.1	Cadre du travail	10
1.3	Motivations	10
1.3.1	Isovariance	11
1.3.2	Admissibilité	11
1.3.3	Confusions d'effets	11
1.4	Approche combinatoire	12
1.4.1	Questions de construction	12
1.4.2	Plans sphériques combinatoires et isovariance statistique	12
1.5	Outils algébriques	13
1.5.1	Groupes de Coxeter	13
1.5.2	Bases de Gröbner	13
1.5.3	Utilisation des notions d'invariance en planification expérimentale	14
1.5.4	Extension aux autres formes de domaines expérimentaux	14
1.6	Synthèse des idées originales	14
2	Problématique statistique	17
2.1	Modèles statistiques	17
2.2	Optimalité	21
2.3	Équivariance, invariance et invariance faible	25
2.4	Invariance et optimalité	30
2.5	Admissibilité	32
2.6	Admissibilité, invariance et modèles polynomiaux	34
2.7	Éléments de résolution d'un problème d'optimalité	39
2.7.1	Reformulation et réduction du problème	39
2.7.2	Cas d'un plan isovariant pour un modèle d'ordre d , $d \geq 1$	40
2.8	Fonction génératrice des moments et invariance faible	43
2.8.1	Invariance par un sous-groupe du groupe orthogonal	44
2.8.2	Invariance par un groupe de matrices compact	46
2.9	Conclusion	54

3	Surfaces de réponse	57
3.1	Un cas particulier : matrice des moments inversible	59
3.1.1	Définition	59
3.1.2	Isovariance et invariance de la surface de réponse	59
3.1.3	Plans faiblement-invariants et invariance de la surface de réponse	62
3.2	Cas général : matrice des moments quelconque, première approche	63
3.2.1	Définitions et propriétés des pseudo-inverses	63
3.2.2	Inverse de Moore-Penrose et invariance	67
3.2.3	Surface de variance extrapolée	69
3.2.4	Surface de variance extrapolée et plans faiblement invariants	72
3.3	Cas général : matrice des moments quelconque, deuxième approche	81
3.3.1	Surface de variance généralisée	81
3.3.2	Invariances	82
3.4	Modèles polynomiaux pour surfaces de réponse	86
3.5	Conclusion	90
 4	 Plans sphériques de force t	 93
4.1	Force et isovariance	93
4.1.1	Définition des plans sphériques	93
4.1.2	Premières propriétés des plans sphériques	94
4.1.3	Plans isovariants et plans sphériques	95
4.2	Existence de plans sphériques	96
4.3	Extension de la notion de plan sphérique	97
4.4	Résultats de non existence	99
4.5	Caractérisations des t -plans sphériques	100
4.5.1	Polynômes harmoniques	101
4.5.2	Formules de cubature	102
4.5.3	Représentation des groupes finis	102
4.6	Résultats d'existence constructifs	102
4.6.1	Cas particulier de la dimension 2	103
4.6.2	Cas général	104
4.7	4-plans sphériques, modèles A_2 , D -efficacité et I -efficacité	108
4.8	$2d$ -plans sphériques, modèles A_d et D -efficacité	111
4.9	Conclusion	111
 5	 Construction polynomiale de plans faiblement invariants	 113
5.1	Invariance faible et invariants polynomiaux	114
5.1.1	Polynômes invariants pour l'action d'un groupe de matrices	114
5.1.2	Utilisation de l'invariance des surfaces de réponses	118
5.1.3	Utilisation de la fonction génératrice des moments	121
5.2	Construction ou augmentation de plans expérimentaux	125
5.2.1	Problème de construction de type polynomial	125

TABLE DES MATIÈRES

5.2.2	Invariance faible d'un plan expérimental	127
5.2.3	Recherche d'optimalité d'un plan expérimental	128
5.2.4	Plans partiellement faiblement-invariants et optimalité	129
5.2.5	Plans bloqués orthogonalement	129
5.3	Éléments de résolution du problème de construction polynomiale	130
5.3.1	Construction « à vue »	130
5.3.2	Réduction du nombre d'inconnues	130
5.3.3	Utilisation des bases de Gröbner	131
5.4	Programmation semi-définie positive	131
5.4.1	Introduction	131
5.4.2	Théorème des zéros : cas réel	132
5.4.3	Calcul algorithmique des réfutations	133
5.4.4	Décomposition en sommes de carrés	134
5.4.5	Optimisation sur une variété réelle	134
5.4.6	Variétés réelles de dimension 0	135
5.4.7	Minimisation de polynômes sur une variété de dimension 0	136
5.5	Calculs relatifs aux sous-groupes finis du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v	137
5.5.1	Quelques groupes dérivés des groupes de permutations	138
5.5.2	Quelques groupes finis de réflexions	140
5.5.3	Calcul du degré des invariants polynomiaux	143
5.6	Conclusion	146
6	Analyse des confusions d'effets	149
6.1	Bases de Gröbner en planification expérimentale	149
6.1.1	Modèles algébriques	149
6.1.2	Idéal d'un plan expérimental et estimabilité	151
6.1.3	Le <i>span</i> d'un plan expérimental	153
6.1.4	Modèles et identifiabilité	156
6.2	Algorithmes	158
6.3	Modèles saturés, sous-modèles et analyse de régression	159
6.3.1	Sous-modèles et calcul des représentants des fonctions estimables	159
6.3.2	Critère de discrimination entre modèles saturés	161
6.3.3	Applications à l'analyse de régression	162
6.4	Conclusion	166
7	Résultats de l'étude de cas	167
7.1	Cas de la dimension 3	167
7.1.1	Les résultats de Hardin et Sloane	167
7.1.2	Utilisation des informations de Hardin et Sloane	171
7.1.3	Résultats	171
7.2	Cas de la dimension 4	175
7.2.1	Les résultats de Hardin et Sloane	175
7.2.2	Utilisation des informations de Hardin et Sloane	178
7.3	Conclusion	179

8	Notions algébriques	181
8.1	Un détour par l'algèbre moderne	183
8.1.1	Anneaux et modules	183
8.1.2	Idéaux d'une \mathbb{K} -algèbre de polynômes	187
8.1.3	Bases de Gröbner	190
8.1.4	Algorithmes	201
8.1.5	Le dictionnaire Algèbre-Géométrie	202
8.1.6	Invariants des groupes finis	212
8.2	Groupes de réflexions dans un espace réel euclidien	216
8.2.1	Groupes de réflexions	217
8.2.2	Groupes de Coxeter	225
8.3	Polytopes convexes	227
8.3.1	Polytopes réguliers	227
8.3.2	Conclusion	231
8.3.3	Polytopes déduits des polytopes réguliers	232
8.4	Relations et générateurs pour certains groupes de réflexions	233
8.4.1	Introduction	233
8.4.2	Groupes cycliques et diédraux	233
8.4.3	Groupes engendrés par des rotations de \mathbb{R}^3	233
8.4.4	Groupes engendrés par des réflexions de \mathbb{R}^3	234
8.4.5	Sous-groupes des groupes de réflexion	236
8.4.6	Tableaux récapitulatifs	237
8.5	Conclusion	237
9	Conclusion	241
9.1	Résumé	241
9.1.1	Chapitre 2	241
9.1.2	Chapitre 3	242
9.1.3	Chapitre 4	242
9.1.4	Chapitre 5	243
9.1.5	Chapitre 6	245
9.1.6	Chapitre 7	246
9.1.7	Chapitre 8	246
9.2	Synthèse des résultats originaux	246
9.2.1	Chapitre 2	246
9.2.2	Chapitre 3	247
9.2.3	Chapitre 4	247
9.2.4	Chapitre 5	247
9.2.5	Chapitre 7	248
9.3	Ouvertures et extensions envisagées	249

Chapitre 1

Introduction

Ce manuscrit comporte deux parties. La première, intitulée « Aspects théoriques de la construction de plans expérimentaux », développe les aspects théoriques sur lesquels repose le travail qui a été mené. La seconde partie, intitulée « Implémentation pratique et applications à la construction de plans expérimentaux », contient le code des programmes qui ont été utilisés afin d'appliquer la méthodologie qui est exposée dans la première partie ainsi que les résultats détaillés auxquels l'application de ces idées ont mené. Cette séparation naturelle était nécessaire compte tenu de la taille imposante des résultats découlant de cette implémentation pratique de la méthodologie proposée. La seconde partie a été principalement réalisée pour montrer qu'il était possible d'obtenir des constructions de dispositifs expérimentaux dans un temps suffisamment court pour que la méthodologie proposée soit applicable par les expérimentateurs. La complexité des problèmes qu'il est possible de résoudre dépend naturellement de la puissance de calcul mise à la disposition des utilisateurs et s'accroîtra ainsi naturellement avec le temps et les innovations technologiques fréquentes qui marquent régulièrement le domaine de l'informatique. Nous avons utilisé un ordinateur personnel disposant d'un processeur cadencé à 1 *GHz* et disposant de 1 *Go* de mémoire vive pour obtenir les résultats de l'étude de cas proposée aux chapitres 11 et 7.

Chacun des chapitres qui composent ce manuscrit comporte une introduction détaillée ainsi qu'un résumé des résultats auquel nous avons abouti. Nous y renvoyons le lecteur qui souhaiterait approfondir l'introduction que nous proposons ci-dessous.

Dans ce travail, nous nous intéressons au problème de construction de plans expérimentaux euclidiens. Nous utilisons et développons des outils mathématiques permettant d'aborder des problèmes classiques sous un angle algébrique. En particulier nous cherchons des caractérisations polynomiales des diverses propriétés souhaitables d'un plan expérimental : l'équivariance, l'invariance faible, l'isovariance, *cf.* [GH96], le blocage orthogonal, *cf.* [BD88], et certains critères d'optimalité alphabétique comme les critères de Kiefer, *cf.* [Kie74], ou la I -optimalité, *cf.* [GH96]. Bien qu'a priori il soit possible d'appliquer les résultats dont nous allons faire l'exposé dans la suite à tout domaine expérimental et tout modèle polynomial vérifiant la propriété d'équivariance, nous mettons en avant le cas des domaines expérimentaux égaux à une boule centrée en l'origine d'un espace vectoriel réel de dimension $v \geq 1$ ou à la frontière. Nous avons opéré ce choix principalement pour deux raisons. Premièrement, lors de notre recherche d'une caractérisation polynomiale

de l'isovariance nous montrerons comment il est possible de se ramener à cette situation lorsque nous cherchons à construire des dispositifs faiblement invariants pour l'action linéaire d'un groupe de matrices compact. Deuxièmement, il existe de nombreux exemples d'utilisation naturelle de plans expérimentaux dont le support est inclus dans une boule ou dans une sphère centrée à l'origine d'un espace euclidien de dimension finie v .

1.1. Domaines d'application

Nous commençons par développer des exemples associés à des contextes d'utilisation naturels de plans expérimentaux ξ dont le support est inclus dans une sphère d'un espace euclidien de dimension finie v .

1.1.1. Étude des propriétés de certains tenseurs physiques

L'article de G. R. Hext, [Hex63], indique comment utiliser des plans expérimentaux dont le support est inclus dans une sphère pour estimer les composantes d'un tenseur du deuxième ordre. L'auteur souligne en particulier l'intérêt d'utiliser un dispositif isovariant et illustre cette idée avec l'analyse du magnétisme d'une roche.

1.1.2. Régression sphérique

L. L. Kupper, [Kup72], souligne qu'il existe de nombreux problèmes de modélisation dans les sciences de la vie et de la terre et la physique pour lesquels le domaine expérimental est de forme sphérique. Ainsi par exemple si nous nous intéressons à la distribution d'une charge électrique sur la surface d'un conducteur circulaire ou sphérique ou à la prévision de la valeur moyenne d'un flux de chaleur ou à la concentration d'un gaz en un point quelconque de la surface d'une étoile, de la terre, d'une autre planète ou de l'un de ses satellites. L. L. Kupper a également montré par ailleurs, [Kup70], que dans ce contexte, où nous utilisons une régression de Fourier ou une régression basée sur un modèle dont les termes forment une base des polynômes harmoniques sphériques de degré 1 ou 2, les meilleurs plans, dans le sens où ils possèdent alors de nombreuses propriétés d'optimalité, sont des plans isovariants pour des modèles de degré d en dimension 2 et 3. Ainsi, comme L. L. Kupper l'a montré dans [Kup73], il s'agit en particulier de plans exacts minimax pour la régression de Fourier et la régression basée sur un modèle dont les termes forment une base des polynômes harmoniques sphériques de degré au plus 2. Remarquons que L. L. Kupper indique qu'il n'existe pas de plans minimax exacts pour un modèle dont les termes forment une base des polynômes harmoniques sphériques de degré supérieur ou égal à 3. Tous les plans dont nous donnons les constructions aux chapitres 7 et 11 peuvent donc être utilisés dans ce contexte. Ils ont également l'avantage d'être des plans orthogonaux pour un modèle de régression constitué de polynômes harmoniques sphériques dont le degré est inférieur ou égal à partie entière de la force du plan divisée par 2.

1.1.3. Données directionnelles

Nous renvoyons à l'ouvrage de K.V. Mardia, [Mar75], ainsi qu'à l'ouvrage de K.V. Mardia et P.E. Jupp, [MJ00], pour un exposé détaillé du traitement des données directionnelles

1.1 Domaines d'application

en statistique. Il s'agit d'un vaste domaine qui comprend des applications aussi bien en géostatistique que dans le domaine des reconnaissances de formes, voir [MP05]. Dans ce dernier cas, il est naturel d'introduire des domaines expérimentaux qui sont inclus dans des espaces projectifs réels.

M.J. Prentice, *cf.* [Pre86], s'intéresse plus particulièrement au cas de l'inférence dans l'ensemble des rotations de \mathbb{R}^3 . Il explicite le lien entre ce cas d'importance pratique fondamentale et l'échantillonnage dans le corps des quaternions \mathbb{H} ou dans l'espace projectif $\mathbb{R}P^4$. Un exemple d'application aux données vectorielles d'un cardiogramme y est également détaillé. M.J. Prentice développe cette approche dans [Pre89] pour l'analyse d'échantillons appariés en utilisant un modèle paramétrique de régression sphérique sur $\mathbb{R}P^4$.

Nous montrons, au chapitre 4, comment construire dans des espaces projectifs des plans expérimentaux qui possèdent des propriétés qui sont similaires à celles de l'isovariance pour un domaine expérimental de forme sphérique. D'autre part tout dispositif expérimental dont le support est inclus dans une sphère de \mathbb{R}^v et antipodal est canoniquement associé à un dispositif expérimental dans $\mathbb{R}P^v$. Par conséquent la méthodologie, que nous proposons au chapitre 5, pour construire des dispositifs isovariants dont le support est inclus dans une sphère s'applique à ce contexte.

1.1.4. Reconnaissance de formes

H. Dette, V. B. Melas et A. Pepelyshev, *cf.* [DMP05], font l'étude des plans optimaux pour l'analyse de formes tri-dimensionnelles à l'aide d'harmoniques sphériques. Les domaines d'application de l'acquisition et de l'analyse de formes tri-dimensionnelles sont nombreux et variés : la médecine, la chimie, l'architecture, l'agriculture et la biologie. Il s'agit de parvenir à décrire la valeur de la distance entre l'origine du repère et celle l'extrémité de l'objet dans une direction donnée. Les modèles de régression basés sur des harmoniques sphériques permettent généralement de décrire de manière satisfaisante les formes de ces objets à l'aide d'un nombre relativement réduit de termes. Nous nous plaçons dans le cas où l'expérimentateur est à même de fixer les directions pour lesquelles il effectue un relevé de la distance entre l'origine du repère et celle l'extrémité de l'objet. Il est alors d'un intérêt primordial de déterminer de bons plans expérimentaux dont le support est inclus dans la sphère unité de \mathbb{R}^3 . Les auteurs montrent que la distribution uniforme sur la sphère est optimale pour tous les critères d'optimalité Φ_p proposés par Kiefer en 1974, *cf.* [Kie74]. Cette distribution n'étant pas un plan expérimental, les auteurs proposent des plans exacts dont le support est inclus dans la sphère unité de \mathbb{R}^3 . Ces plans expérimentaux sont construits à l'aide de formules de quadrature basées sur les polynômes de Legendre de telle sorte que leur matrice des moments, pour un modèle de régression dont les termes sont des harmoniques sphériques de degré inférieur ou égal à d , soit égale à celle de la distribution uniforme, c'est-à-dire $I_{(2d+1)^2}$. La méthodologie de construction que nous proposons au chapitre 5 permet d'obtenir des plans qui vérifient cette propriété puisqu'un dispositif isovariant pour un modèle polynomial complet de degré d est orthogonal lorsqu'analysé à l'aide d'un modèle de régression dont les termes sont des harmoniques sphériques de degré inférieur ou égal à d . Par conséquent les plans expérimentaux que nous construisons au chapitre 7 peuvent tous être utilisés pour faire de la reconnaissance de formes tridimensionnelles puisqu'ils sont optimaux pour tous les critères Φ_p introduits par Kiefer en 1974.

1.1.5. Surfaces de réponse

La notion d'invariance est centrale dans la méthodologie des surfaces de réponse. En 1957, Box et Hunter, *cf.* [BH57], ont souligné l'intérêt de l'utilisation de dispositifs expérimentaux isovariants pour analyser des surfaces de réponse. L'utilisation pratique de tels dispositifs depuis lors a montré que cette recommandation était judicieuse. Nous développons ce point au chapitre 3 et indiquons comment utiliser l'invariance de la variance de l'estimateur de la réponse moyenne par toute transformation du groupe orthogonal pour obtenir une caractérisation polynomiale de l'isovariance. Nous proposons également une méthodologie de construction de dispositifs isovariants au chapitre 5 dont l'application, réalisée aux chapitres 7 et 11, aboutit à la construction de dispositifs isovariants dont les coordonnées sont connues de manière exactes.

1.2. Contexte et motivations statistiques

1.2.1. Cadre du travail

Nous considérons un espace vectoriel réel de dimension finie v muni du produit scalaire canonique, une partie de cet espace notée χ et appelée domaine expérimental. Un plan expérimental ξ est alors un ensemble fini de r couples $(\mathbf{x}_i, \xi(\mathbf{x}_i))$ où $\mathbf{x}_i \in \chi$ et $\sum_{i=1}^r \xi(\mathbf{x}_i) = 1$.

Nous proposons diverses méthodes combinant plusieurs outils combinatoires, comme les t -plans sphériques, et algébriques, comme les bases de Gröbner, les groupes de Coxeter, les invariants polynomiaux pour l'action induite par l'action linéaire d'un groupe de matrices compact \mathcal{G} et le théorème des zéros réels, pour établir les propriétés fondamentales puis indiquer comment construire des plans expérimentaux ξ pour lesquels la matrice des moments $M(\xi)$ est invariante pour l'action de \mathcal{G} sur le plan expérimental, c'est-à-dire des plans \mathcal{G} -faiblement invariants, où \mathcal{G} est un groupe de matrices compact. L'utilisation des propriétés d'invariance faible d'un plan s'avère être particulièrement efficace pour simplifier la résolution de problèmes courants en planification expérimentale comme la construction de plans expérimentaux alphabétiquement optimaux.

1.3. Motivations

Le travail réalisé porte sur l'utilisation combinée d'outils combinatoires et algébriques pour la construction et l'analyse de plans d'expérience. Les principaux avantages de cette approche sont sa grande généralité, son automatisation et l'obtention des coordonnées exactes des points du plan ainsi que la détermination complète des confusions d'effets. Toutefois, nous nous intéresserons ici également à la méthodologie des surfaces de réponse, à laquelle le lecteur trouvera une introduction dans le livre de Myers et Montgomery paru en 2002, [MM02], et à la propriété d'isovariance statistique, introduite par Box et Hunter en 1957, *cf.* [BH57], ce qui nous amènera à justifier l'étude particulière des plans dont le support est inclus dans une sphère, celle-ci étant la frontière du domaine expérimental lorsque celui-ci est une boule centrée à l'origine du repère.

Actuellement la construction de plans d'expérience euclidiens repose généralement sur la

1.3 Motivations

recherche numérique des coordonnées des points du plan.

Si cette résolution numérique peut, de prime abord, sembler satisfaisante pour l'expérimentateur, il s'avère qu'elle souffre de certains défauts. Elle rend à la fois impossible l'obtention d'une classification des plans à une isométrie orthogonale près et l'analyse exacte des confusions d'effets qui apparaissent nécessairement lorsque nous nous intéressons à des plans euclidiens de petite taille. Or une connaissance précise des confusions d'effets est importante pour le planificateur et rend possible l'utilisation de modèles polynomiaux qui ne seront plus limités au degré 2 comme c'est trop souvent le cas dans la théorie et dans la pratique.

1.3.1. Isovariance

L'analyse des résultats obtenus à l'aide de surfaces de réponse basées sur des modèles polynomiaux repose sur l'hypothèse d'une certaine régularité de la réponse moyenne et en particulier sur sa bonne approximation par son développement de Taylor.

La propriété d'isovariance pour un dispositif expérimental contraint la variance de l'estimateur de la réponse moyenne à être une fonction radiale. Ceci permet de rendre toutes comparables, en termes d'intervalles de confiance ou d'intervalles de prédiction, les erreurs commises à une distance fixée de l'origine du dispositif, donc sur tout le domaine expérimental dans le cas où ce domaine est une sphère. Il s'agit donc de trouver un plan d'expérience pour lequel la variance de l'estimateur de la réponse moyenne ne dépend que de la distance à l'origine ce qui est équivalent à l'invariance par toute transformation du groupe orthogonal de l'espace euclidien sous-jacent, noté \mathcal{O}_v , de la matrice des moments des points du plan.

1.3.2. Admissibilité

Gaffke et Heiligers, *cf.* [GH96], ont montré qu'une classe essentiellement complète pour un modèle de régression polynomiale complète de degré d et un domaine expérimental égal à une boule centrée en l'origine du repère de \mathbb{R}^v est la classe des plans admissibles et isovariants. Ils ont également montré qu'un plan de ce type est l'union de plans dont le support est inclus dans des sphères concentriques dont le centre est placé au centre du domaine expérimental. Ceci justifie le soin particulier qui a été accordé à l'étude de la construction de plans sphériques isovariants.

1.3.3. Confusions d'effets

La construction d'un dispositif isovariant n'a d'intérêt que s'il peut être utilisé efficacement. Pour cela il faut être à même de pouvoir déterminer quels sont les modèles, dont tous les coefficients sont estimables, qui peuvent être utilisés pour en faire l'analyse.

La structure particulière des dispositifs dont les points sont nécessairement situés sur la sphère complique singulièrement ce moment de l'étude dès que le modèle polynomial que nous utilisons est de degré supérieur ou égal à 3 puisque de nombreuses confusions d'effets apparaissent alors.

1.4. Approche combinatoire

1.4.1. Questions de construction

Dans un article dédié à la théorie des codes, Delsarte, Goethals et Seidel, *cf.* [DGS77], ont introduit en 1977 la notion de plans sphériques combinatoires de force t pour t un entier naturel. Il s'agit d'un ensemble fini, noté X , de points de la sphère unité S^{v-1} de l'espace euclidien \mathbb{R}^v tel que l'égalité

$$\int_{S^{v-1}} f(x) d\sigma(x) = \frac{1}{|X|} \sum_{x \in X} f(x)$$

soit vérifiée pour toute fonction polynomiale f à n variables de degré inférieur ou égal à t et où σ est la mesure uniforme sur la sphère unité S^{v-1} telle que $\sigma(S^{v-1}) = 1$.

En 1984, Seymour et Zaslavsky, *cf.* [SZ84], ont donné une preuve non constructive de l'existence de t -plans sphériques combinatoires X : il existe des t -plans sphériques combinatoires pour toute valeur de $|X|$ sauf un nombre fini.

Pour une force donnée t_0 , la recherche des plans de cardinalité minimale permet d'obtenir des dispositifs qui présentent un intérêt particulier pour le planificateur. Une recherche systématique des plans sphériques combinatoires de force t de cardinalité minimale a été réalisée en 1996 par Hardin et Sloane en dimension 3, *cf.* [HS96], et entreprise depuis lors en dimension 4, *cf.* [SHC03]. Leur démarche peut se résumer en deux étapes : l'utilisation de résultats d'existence algébrique puis rapidement d'un critère numérique, la discrédance, qui permet de conjecturer si un sous-ensemble de points de la sphère unité est un t -plan sphérique combinatoire ou non.

La démarche de Hardin et Sloane peut se résumer en deux parties. Tout d'abord les auteurs ont établi ou rappelé quelques résultats d'existence et ont obtenu les coordonnées exactes ou approchées des points de ces plans. Puis ils se sont rapidement tournés vers un calcul numérique de la discrédance du plan considéré, qui permet d'évaluer numériquement, et donc de conjecturer si l'on est en présence d'un t -plan plan euclidien ou non, ce qui a résulté en le calcul approché des coordonnées des points du plan.

Or le statisticien a besoin d'avoir la connaissance exacte de la configuration de points qu'il utilise, ce qui contraste avec la situation dans laquelle les plans sphériques combinatoires servent pour l'intégration numérique. Hardin et Sloane, *cf.* [HS96], n'ont communiqué que les coordonnées approchées des points des dispositifs qu'ils ont obtenus, l'approche algébrique proposée à la section 1.5 permet d'en obtenir les coordonnées exactes. Ces calculs ont été menés pour un grand nombre de ces dispositifs, reproduits dans le chapitre 11 et résumés dans le chapitre 7.

1.4.2. Plans sphériques combinatoires et isovariance statistique

Considérons un plan dont le support est inclus dans la sphère unité de \mathbb{R}^n et analysé à l'aide d'un modèle polynomial d'ordre q . En 1992, Neumaier et Seidel ont indiqué que si la matrice des moments des points du plan est invariante par toute transformation du groupe \mathcal{O}_n alors le support de ce plan est un plan sphérique combinatoire de force $2q$, *cf.* [NS92].

Lorsque nous analysons un plan sphérique à l'aide d'un modèle polynomial d'ordre supérieur ou égal à 2, apparaissent nécessairement des confusions d'effets. Si cette situation

peut être contournée lorsque le modèle utilisé est d'ordre 2 en rajoutant un essai au centre de la sphère, il n'en va pas de même lorsque le modèle utilisé est d'ordre supérieur ou égal à 3. L'approche algébrique basée sur les idées développées dans le livre de Pistone, Riccomagno et Wynn, *cf.* [PRW00a], et proposée à la section 1.5 permet aussi de traiter cette difficulté.

1.5. Outils algébriques

1.5.1. Groupes de Coxeter

L'utilisation de groupes est à la base de la construction de nombreux dispositifs expérimentaux : plans fractionnaires, plans composites centrés, etc. Cette pratique est non seulement due à la simplification des calculs qui en découle mais également au caractère des dispositifs cherchés. Ainsi, par exemple, l'isovariance impose certaines symétries aux plans de cardinal minimal comme le montrent les résultats de Hardin et Sloane en dimension 3, *cf.* [HS96] : leurs dispositifs sont en fait des unions d'orbites de points par des groupes de Coxeter. Nous renvoyons au livre de Coxeter et Moser, *cf.* [CM84], ou au chapitre 8 pour plus de détails sur les groupes de Coxeter.

Le problème de construction se ramène donc à la détermination du groupe et des orbites à utiliser ainsi qu'à celui du calcul des coordonnées d'un des points paramétrant chaque orbite. Nous obtenons alors un système d'équations polynomiales qui peut se résoudre à l'aide de bases de Gröbner.

1.5.2. Bases de Gröbner

Les livres de Cox, Little et O'Shea (1996), *cf.* [CLO96], et Kreuzer et Robbiano (2000 et 2005), *cf.* [KR00] et [KR05], soulignent que l'intérêt majeur des bases de Gröbner est de permettre une résolution algorithmique de nombreux problèmes de géométrie algébrique et d'algèbre commutative. Si l'utilisation des bases de Gröbner dans le domaine de la planification expérimentale a déjà été théorisée par Pistone, Riccomagno et Wynn (2000), *cf.* [PRW00a], ces méthodes n'ont pas encore été appliquées à la recherche de dispositifs isovariants. De plus le logiciel CoCoA développé par les auteurs précédents, ne concerne que des plans à coordonnées rationnelles. Il est de ce fait inopérant si nous étudions des plans dont les coordonnées appartiennent à des variétés algébriques comme, dans le cas d'étude qui nous intéresse ici, la sphère.

Il a donc fallu réaliser plusieurs programmes en Maple 10, [Map05]. La diversité des algorithmes utilisés provient du fait que les bases de Gröbner sont d'un intérêt multiple dans le problème qui nous intéresse. Notre préoccupation principale était d'évaluer leur temps d'exécution, celui-ci devant être suffisamment court pour présenter un intérêt pratique et majeur pour l'expérimentateur.

En premier lieu, les bases de Gröbner servent à déterminer la variété des plans admissibles sous certaines contraintes, en particulier la \mathcal{G} -invariance faible. Lorsque le plan est construit comme au paragraphe 1.5.1, nous calculons les coordonnées exactes des points paramétrant les orbites.

En second lieu, les bases de Gröbner permettent de résoudre non seulement le problème de l'analyse des confusions d'effets mais aussi de connaître les paramètres supplémentaires

que nous pourrions estimer en ajoutant un ou plusieurs points précis au dispositif. Ce dernier point repose sur l'utilisation de l'algorithme proposé par Marinari, Möller et Mora en 1993, [MMM93] et [MMM96], et particulièrement adapté à la recherche de bases de Gröbner pour des variétés algébriques de dimension 0. Le calcul d'une base de Gröbner pour un idéal associé à une variété algébrique de dimension 0 est toujours un problème de recherche actuel en géométrie algébrique, cf. [ABKR00] et [AKR01]. La méthodologie de construction exacte de dispositifs expérimentaux proposée dans ce travail pourra donc bénéficier de ces nouveaux développements et améliorations.

Nous bénéficions en outre d'une grande liberté dans le choix d'un modèle polynomial pour l'analyse du plan. En effet, nous pouvons intégrer à la recherche des paramètres estimables d'un modèle, même encore lors de l'analyse des résultats de l'expérimentation, des considérations sur l'importance des facteurs que nous souhaitons inclure dans le modèle au travers d'un ordre portant sur les termes du modèle.

1.5.3. Utilisation des notions d'invariance en planification expérimentale

Nous commençons par les propriétés d'invariance faible qui se ramènent à l'étude de l'isovariance statistique.

1.5.4. Extension aux autres formes de domaines expérimentaux

La propriété d'isovariance peut être utilisée pour obtenir des plans pour mélange pour lesquels la variance est constante sur un ensemble de triangles concentriques suivant l'approche proposée par Cornell et Khuri dans [CK79]. Le livre de Dunkl et Xu, [DX01], indique comment transformer la boule unité d'un espace euclidien de dimension v , $v \geq 2$, en le simplexe, le cube ou la sphère à l'aide de transformations non-linéaires. Il est alors possible d'adapter la méthode proposée par Cornell et Khuri à ces formes de domaines expérimentaux.

1.6. Synthèse des idées originales

Dans un premier point, nous démontrons que la construction de plans expérimentaux \mathcal{G} -faiblement invariants se réduit à celle de la construction de plans \mathcal{H} -faiblement invariants où \mathcal{H} est un sous-groupe du groupe \mathcal{O}_v , le groupe orthogonal de \mathbb{R}^v . Nous nous intéressons en particulier au problème de la construction de plans sphériques isovariants, c'est-à-dire de plans expérimentaux dont le support est inclus dans une sphère centrée en l'origine de \mathbb{R}^v et \mathcal{O}_v -faiblement invariants, puisque la connaissance de tels dispositifs permet de construire des plans \mathcal{G} -faiblement invariants pour \mathcal{G} un groupe de matrices compact quelconque.

Dans un deuxième point, notre objectif est d'obtenir une caractérisation polynomiale, en les coordonnées des points support du plan expérimental, de la propriété de \mathcal{G} -invariance faible. Nous étudions deux possibilités existantes, la surface de variance et la surface de variance généralisée, et introduisons un nouvel objet, la surface de variance extrapolée à

χ , pour remédier à certains défauts des deux autres types de surface de variance. Nous étudions en détail le lien entre la \mathcal{G} -invariance de la surface de variance extrapolée à χ et la \mathcal{G} -invariance faible du plan expérimental.

Dans un troisième point, nous définissons un problème de construction de type polynomial d'un plan expérimental : les coordonnées des points support du plan sont les solutions d'un système d'équations et d'inéquations polynomiales qui peut toujours se résoudre à l'aide de la programmation semi-définie positive. Nous utilisons les résultats précédents pour montrer que la recherche de dispositifs \mathcal{G} -faiblement invariants est un problème de construction de type polynomial. Nous montrons également que de nombreuses propriétés recherchées, par exemple l'optimalité alphabétique ou le blocage orthogonal, se formulent naturellement comme un problème de construction de type polynomial.

Dans un quatrième point, nous indiquons comment utiliser les groupes de réflexions finis pour réduire le nombre d'inconnues présentent dans un problème de construction de type polynomial. Nous donnons de nombreux exemples d'application de cette simplification et établissons des résultats d'existence exacts pour certains dispositifs expérimentaux dont les coordonnées n'étaient jusqu'alors connues que de manière approchée. Ces coordonnées sont des nombres algébriques exprimables à l'aide de radicaux ce qui nous permet, pour chacun de ces dispositifs sphériques, de déterminer alors, pour un ordre total sur les polynômes fixé, quels sont les modèles polynomiaux dont tous les paramètres sont estimables et l'ensemble des confusions d'effets associé au dispositif expérimental utilisé.

Lors de l'analyse des résultats expérimentaux, il est possible de considérer un autre ordre polynomial que celui utilisé lors de la phase de planification ce qui permet de faire jouer un rôle privilégié à certains des facteurs dont nous souhaitons, compte tenu des réalisations de la réponse qui ont été observées, étudier plus particulièrement l'influence. Si nous voulons ajouter un point au dispositif, par exemple si nous souhaitons réaliser un essai ou plusieurs essais supplémentaires, il est également possible de savoir quel sera l'ensemble des termes supplémentaires du modèle que nous pourrons alors estimer.

Dans un cinquième point, nous avons réalisé les calculs découlant des techniques exposées ci-dessus avec le logiciel Maple 10 ce qui a donné lieu à l'implémentation de nombreux algorithmes. En effet la nature sphérique des dispositifs considérés ne permettait pas de se servir des outils existants. L'utilisation de ces procédures a permis, entre autres, de mettre à la disposition de l'expérimentateur des plans, de cardinal r , isovariants et admissibles pour un modèle polynomial de degré 2 dont les coordonnées sont des nombres algébriques exprimables à l'aide de radicaux pour toutes les valeurs de r possibles, c'est-à-dire $r \geq 13$.

Le lecteur qui souhaiterait plus de détails pourra se référer au chapitre 9 où se trouve une liste par chapitre des résultats qui sont propres à l'approche que nous développerons ainsi qu'aux conclusions partielles figurant à la fin de chacun des chapitres.

Chapitre 2

Problématique statistique

Ce chapitre nous servira à introduire le contexte statistique qui sera le cadre de notre étude. Nous exposerons plusieurs notions, dont certaines, comme l'admissibilité et l'optimalité, sont couramment répandues dans la communauté statistique. Nous nous intéresserons également à diverses notions d'invariance associées à un plan comme l'équivariance, l'invariance faible et l'invariance.

Nous verrons, dans le cas où le domaine expérimental est une boule centrée en 0 et le modèle un modèle polynomial complet de degré d , que la recherche de plans admissibles et possédant un type d'invariance faible particulier, l'isovariance, permet non seulement d'obtenir une classe essentiellement complète pour la recherche de dispositifs présentant certains types d'optimalité, mais aussi de caractériser de manière précise le support de ces plans : ce sont des unions de plans sphériques, c'est-à-dire une union de plans dont le support est concentré sur une sphère.

Nous montrerons que la recherche algorithmique de plans optimaux isovariants nécessite la connaissance explicite de plans isovariants dont le support est sphérique. La détermination de ces plans passe par celle préalable de leurs matrices des moments. Nous obtenons celle-ci en introduisant la fonction génératrice des moments et tirant parti de son invariance qui découle de la faible invariance du plan.

Nous montrons alors que, pour tout groupe compact qui agit linéairement sur le domaine expérimental d'intérieur non vide, l'invariance faible et l'invariance d'une fonction génératrice des moments, adaptée à ce groupe, est équivalente. Nous utiliserons ce résultat original dans le chapitre 5 pour faire le lien entre l'invariance faible et la recherche algorithmique d'invariants polynomiaux.

2.1. Modèles statistiques

Nous nous intéressons à des modèles de régression linéaire soumis aux hypothèses statistiques usuelles décrites ci-dessous.

Nous considérons une variable indépendante \mathbf{x} , dont les différentes valeurs possibles appartiennent à un domaine expérimental \mathcal{X} , qui est une partie d'un espace vectoriel de dimension finie \mathbb{R}^v muni de sa structure euclidienne canonique, dont nous étudions l'influence sur une réponse y à valeurs réelles :

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^k \theta_j f_j(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}' \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (2.1.1)$$

où $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_k)' \in \mathbb{R}^k$ est un vecteur de paramètres inconnus et $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_k)'$ est une fonction connue définie sur \mathcal{X} et à valeurs dans \mathbb{R}^k . Il s'agit de la part déterministe d'un modèle statistique de régression linéaire. Cette modélisation n'est généralement pas satisfaisante lorsque nous cherchons à décrire un phénomène expérimental. Nous introduisons alors un modèle stochastique de la manière suivante : l'observation des valeurs de la réponse y aux points $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathcal{X}$ est représentée par des variables aléatoires à valeurs réelles Y_1, \dots, Y_n telles que

$$\mathbb{E}[Y_i] = y(\mathbf{x}_i), \quad \text{Var}[Y_i] = \sigma^2, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.1.2)$$

$$\text{Cov}[Y_i, Y_j] = 0, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad i \neq j. \quad (2.1.3)$$

La variance constante $\sigma^2 \in]0, +\infty[$ est inconnue et est de ce fait un paramètre additionnel du modèle.

Nous supposons que les valeurs pour lesquelles les observations sont effectuées sont non seulement connues exactement mais aussi contrôlées par l'expérimentateur : il s'agit du contexte usuel de la planification expérimentale.

Définition 2.1.1. *Un plan $\boldsymbol{\xi}$ approché pour le modèle 2.1.1 est un couple (\mathbf{X}, \mathbf{w}) où \mathbf{X} est un ensemble fini de points $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\} \in \mathcal{X}$, le support du plan, $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_r)$ sont les poids des points support du plan c'est-à-dire un ensemble de nombres réels strictement positifs de somme égale à 1, et $r \in \mathbb{N}$. Pour $i = 1, \dots, r$, nous notons également les points support du plan \mathbf{x}_i par $\boldsymbol{\xi}_i$ et les poids w_i par $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i)$. Un plan approché est donc une mesure de probabilité de support fini sur \mathcal{X} , que nous notons ainsi :*

$$\boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_r \\ \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_1) & \dots & \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_r) \end{pmatrix}. \quad (2.1.4)$$

Soit n le nombre total d'essais que nous souhaitons effectuer. Un plan approché $\boldsymbol{\xi}$, défini par l'équation 2.1.4, ne peut être réalisé dans la pratique que s'il existe r entiers strictements positifs n_1, \dots, n_r de somme n tels que :

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i) = \frac{n_i}{n}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (2.1.5)$$

Définition 2.1.2. *Un plan défini par 2.1.4 et vérifiant la condition 2.1.5 est un plan exact de taille n que nous notons alors $\boldsymbol{\xi}_n$.*

D'un point de vue statistique, la qualité d'un plan expérimental, utilisé avec un modèle vérifiant les équations 2.1.1 et 2.1.2, se traduit par sa matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$.

2.1 Modèles statistiques

Définition 2.1.3. La matrice des moments d'un plan est la matrice $M(\boldsymbol{\xi})$ définie ainsi :

$$M(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^r \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)'. \quad (2.1.6)$$

Proposition 2.1.1. $M(\boldsymbol{\xi})$ est une matrice carrée d'ordre k qui est la matrice polaire d'une forme quadratique positive. Pour un plan exact $\boldsymbol{\xi}_n$ et dès que $M(\boldsymbol{\xi}_n)$ est inversible, l'inverse de $M(\boldsymbol{\xi}_n)$ multipliée par $\frac{\sigma^2}{n}$ est la matrice de variance-covariance de l'estimateur des moindres carrés ordinaires de $\boldsymbol{\theta}$. En faisant l'hypothèse supplémentaire que le modèle linéaire est gaussien, alors $\frac{n}{\sigma^2} M(\boldsymbol{\xi}_n)$ est la matrice d'information de Fisher.

Démonstration 2.1.1. Voir [GH96].

Il existe un ordre partiel sur les formes quadratiques positives : l'ordre de Loewner.

Définition 2.1.4. L'ordre de Loewner est défini sur l'ensemble des matrices symétriques réelles d'ordre k , noté \mathcal{S}_k , de la manière suivante :

$$A \leq B \iff B - A \in \mathcal{S}_k^+ \quad ((A, B) \in \mathcal{S}_k) \quad (2.1.7)$$

où \mathcal{S}_k^+ est le cône convexe des matrices symétriques réelles positives.

Nous allons nous servir de cet ordre pour comparer les plans.

Définition 2.1.5. Soient $\boldsymbol{\xi}$ et $\boldsymbol{\eta}$ deux plans. Si $M(\boldsymbol{\eta}) \leq M(\boldsymbol{\xi})$ alors le plan $\boldsymbol{\xi}$ est au moins aussi bon que $\boldsymbol{\eta}$. Si de plus $M(\boldsymbol{\eta}) \neq M(\boldsymbol{\xi})$ alors le plan $\boldsymbol{\xi}$ est meilleur que le plan $\boldsymbol{\eta}$.

Dans le cadre de l'estimation des paramètres d'un modèle linéaire, gaussien ou non, par le théorème de Gauss-Markov, voir [Col95], la comparaison des plans à l'aide de l'ordre de Loewner est statistiquement pertinente que la matrice des moments du plan soit inversible ou non. En effet, considérons un plan exact de taille n , $\boldsymbol{\xi}_n$.

Définition 2.1.6. Pour un vecteur $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$, $\mathbf{c}'\boldsymbol{\theta}$ est linéairement estimable par $\boldsymbol{\xi}_n$ pour le modèle \mathbf{f} , si $\mathbf{c} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}_n))$.

Proposition 2.1.2. Interprétation en terme d'estimateur

La variance de l'estimateur BLUE, « Best Linear Unbiased Estimator », de $\mathbf{c}'\boldsymbol{\theta}$ est alors égale à $\frac{\sigma^2}{n} \mathbf{c}' M^-(\boldsymbol{\xi}_n) \mathbf{c}$, où $M^-(\boldsymbol{\xi}_n)$ est un pseudo inverse quelconque de $M(\boldsymbol{\xi}_n)$, voir la définition 3.2.1. Nous introduisons alors, pour un plan $\boldsymbol{\xi}_n$ la fonction de variance normalisée :

$$V(\boldsymbol{\xi}_n, \mathbf{c}) = \begin{cases} \mathbf{c}' M^-(\boldsymbol{\xi}_n) \mathbf{c}, & \text{si } \mathbf{c} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}_n)), \\ +\infty, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.1.8)$$

Démonstration 2.1.2. Voir [GH96].

Pour deux plans ξ et η nous avons dans $\overline{\mathbb{R}}$:

$$M(\xi) \leq M(\eta) \iff V(\xi, \mathbf{c}) \geq V(\eta, \mathbf{c}) \quad \forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^k. \quad (2.1.9)$$

Si les matrices des moments de ξ et η sont inversibles, alors l'équation 2.1.9 devient une conséquence directe de la décroissance de la fonction inverse d'une matrice symétrique définie positive pour l'ordre de Loewner :

$$M(\xi) \leq M(\eta) \iff M^{-1}(\eta) \leq M^{-1}(\xi). \quad (2.1.10)$$

Nous pouvons obtenir un résultat similaire à l'inégalité 2.1.9 en imposant une condition supplémentaire sur le vecteur \mathbf{c} , à savoir que \mathbf{c} appartienne à un sous-espace vectoriel donné de dimension $s \geq 1$. Ce sous-espace vectoriel peut être identifié à l'image de la matrice K' où K est une matrice de taille $s \times k$ de rang s .

Définition 2.1.7. *Étant donné un plan ξ , nous définissons alors la matrice semi-définie positive d'ordre s , notée $C_K(\xi)$ et également appelée matrice d'information réduite du plan, de la manière suivante :*

$$C_K(\xi) = \min_{L \in \mathcal{L}_g(K)} (LM(\xi)L'), \quad (2.1.11)$$

où le minimum est défini pour la relation d'ordre partiel de Loewner sur \mathcal{S}_s et est pris sur l'ensemble $\mathcal{L}_g(K)$ des inverses à gauche de K' . Rappelons que l'ensemble des inverses à gauche $\mathcal{L}_g(K)$ de K' est :

$$\mathcal{L}_g(K) = \left\{ L \in \mathcal{M}_{s,k} \mid LK' = I_s \right\}, \quad (2.1.12)$$

où I_s est la matrice identité d'ordre s et $\mathcal{M}_{s,k}$ est l'ensemble des matrices à s lignes et k colonnes à coefficients réels.

L'existence du minimum de l'équation 2.1.11 a été prouvée par Krafft dans [Kra83] et Pukelsheim a indiqué dans [Puk93] comment calculer un minimum L .

Proposition 2.1.3. *Si nous considérons la matrice K_s , définie par les deux blocs (I_s) et (0_{k-s}) arrangés de la manière suivante $K_s = (I_s | 0_{k-s})$, alors $C_{K_s}(\xi)$ est le complément de Schur du bloc $M_2(\xi)$ de la matrice $M(\xi)$ partitionnée de la manière suivante :*

$$M(\xi) = \begin{pmatrix} M_1(\xi) & M_{1,2}(\xi) \\ M'_{1,2}(\xi) & M_2(\xi) \end{pmatrix}, \quad (2.1.13)$$

où les matrices $M_1(\xi)$, $M_2(\xi)$, $M_{1,2}(\xi)$ sont respectivement de taille $s \times s$, $(k-s) \times (k-s)$ et $s \times (k-s)$. Le complément de Schur du bloc $M_2(\xi)$ de la matrice $M(\xi)$ vaut alors :

$$C_{K_s}(\xi) = M_1(\xi) - M_{1,2}(\xi)M_2^{-}(\xi)M'_{1,2}(\xi). \quad (2.1.14)$$

Plus généralement, pour une matrice K telle que $\mathbf{c}'\boldsymbol{\theta}$ est estimable linéairement à l'aide de ξ pour tout $\mathbf{c} \in \text{Im}(K')$, c'est-à-dire telle que $\text{Im}(K') \subset \text{Im}(M(\xi))$, nous avons la relation suivante :

$$C_K(\xi) = \left(KM^{-}(\xi)K' \right)^{-1} \quad (2.1.15)$$

et la matrice $C_K(\xi)$ est symétrique définie positive.

2.2 Optimalité

Démonstration 2.1.3. Voir [GH96].

L'analogie de la relation 2.1.9 est alors :

$$C_K(\boldsymbol{\xi}) \leq C_K(\boldsymbol{\eta}) \iff V(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{c}) \geq V(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{c}) \quad \forall \mathbf{c} \in \text{Im}(K'). \quad (2.1.16)$$

2.2. Optimalité

Nous renvoyons au chapitre de Gaffke et Heiligers, [GH96], et aux livres de Atkinson et Donev, [AD92], Pukelsheim, [Puk93], Schwabe, [Sch96], Cox et Reid, [CR00], et Liski, Mandal, Shah et Sinha [LMSS02] ainsi qu'à l'ouvrage collectif [DFS97] pour plus de détails sur les notions d'optimalité.

L'ordre partiel de Loewner présente le défaut majeur de ne pas permettre de sélectionner un optimum unique : si $k \neq 1$ et $s \neq 1$, il existe de nombreux dispositifs qui ne sont pas comparables. En effet chacune des matrices des moments qui ne sont pas comparables peuvent être elles-mêmes associées à plusieurs plans.

Pour remédier à ce problème il est d'usage de spécifier un critère d'optimalité réel c'est-à-dire une fonction de la matrice des moments à valeurs réelles.

Définition 2.2.1. *Critère d'optimalité*

Une fonction $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ est un critère d'optimalité si :

- i- \mathcal{A} est un cône convexe inclus dans \mathcal{S}_k tel que $\mathcal{S}_k^{++} \subset \mathcal{A} \subset \mathcal{S}_k^+$, où \mathcal{S}_k^{++} est le cône convexe étoilé en 0 des matrices réelles symétriques définies positives d'ordre k .
- ii- Φ est décroissante pour l'ordre partiel de Loewner :

$$A \leq B \iff \Phi(A) \geq \Phi(B), \quad \forall (A, B) \in \mathcal{A}^2. \quad (2.2.1)$$

- iii- Φ est convexe.

Si tous les paramètres du vecteur $\boldsymbol{\theta}$ sont des paramètres d'intérêt alors $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$. Si nous nous intéressons à un sous-système propre du vecteur des paramètres $\boldsymbol{\theta}$, représenté par $K\boldsymbol{\theta}$ où K est une matrice de taille $s \times k$ de rang s , alors :

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}(K) = \left\{ A \in \mathcal{S}_k^+ \mid \text{Im}(K') \subset \text{Im}(A) \right\}, \quad (2.2.2)$$

c'est-à-dire \mathcal{A} est l'ensemble des plans pour lesquels $K\boldsymbol{\theta}$ est estimable ou de manière équivalente pour lesquels $M(\boldsymbol{\xi}) \in \mathcal{A}(K)$.

Nous particularisons alors le critère d'optimalité Φ :

$$\Phi(A) = \phi(C_K(A)), \quad \forall A \in \mathcal{A}(K), \quad (2.2.3)$$

où $C_K(A)$ est défini de manière analogue à l'équation 2.1.11 :

$$C_K(A) = \min_{L \in \{L \in \mathcal{M}_{s,k} \mid LK' = I_s\}} (LAL'), \quad (A \in \mathcal{S}_k^+). \quad (2.2.4)$$

Une solution, semblable à celle de l'équation 2.1.15, à ce problème est donnée par :

$$C_K(A) = \left(KA^-K' \right)^{-1}, \quad (A \in \mathcal{A}_K). \quad (2.2.5)$$

La fonction ϕ , apparaissant à l'équation 2.2.3, doit vérifier les propriétés suivantes :

- i- $\phi : \mathcal{S}_s^{++} \rightarrow \mathbb{R}$,
- ii- ϕ est décroissante pour l'ordre partiel de Loewner :

$$A \leq B \iff \phi(A) \geq \phi(B), \quad \forall (A, B) \in \mathcal{S}_s^{++}. \quad (2.2.6)$$

- iii- ϕ est convexe.

Les conditions ci-dessus assurent qu'alors :

$$\Phi(A) = \max_{L \in \{L \in \mathcal{M}_{s,k} \mid LK' = I_s\}} \phi(LAL'), \quad (A \in \mathcal{S}_k^+). \quad (2.2.7)$$

Étant donné un critère d'optimalité Φ , la recherche d'un plan optimal ξ pour le modèle de régression défini en 2.1.1 revient à trouver une solution au problème de minimisation suivant :

$$\min_{\xi \mid M(\xi) \in \mathcal{A}} \Phi(M(\xi)). \quad (2.2.8)$$

Nous introduisons \mathcal{M} l'ensemble des matrices des moments $M(\xi)$ lorsque ξ parcourt l'ensemble de tous les plans. Le problème de minimisation donné par l'équation 2.2.8 devient alors :

$$\min_{M \in \mathcal{M} \cap \mathcal{A}} \Phi(M). \quad (2.2.9)$$

Nous cherchons donc à déterminer une matrice des moments optimale et non plus un plan optimal. Nous verrons dans la section 2.7, comment, dans certains cas, trouver un plan ξ associé à une matrice des moments optimale.

Proposition 2.2.1. *\mathcal{M} est une partie convexe de \mathcal{S}_k :*

$$\mathcal{M} = \text{Conv} \left\{ \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})', \mathbf{x} \in \mathcal{X} \right\}. \quad (2.2.10)$$

De plus, si $\mathbf{f}(\mathcal{X})$ est compacte alors \mathcal{M} est compacte.

Démonstration 2.2.1. Nous avons :

$$\mathcal{M} = \text{Conv} \left\{ \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})', \mathbf{x} \in \mathcal{X} \right\}, \quad (2.2.11)$$

où si S est une partie de \mathbb{R}^k , $\text{Conv}\{S\}$ est l'enveloppe convexe de S dans l'espace vectoriel \mathbb{R}^k .

Nous en déduisons alors que si $\mathbf{f}(\mathcal{X})$ est compacte alors \mathcal{M} est compacte comme enveloppe convexe d'un compact.

2.2 Optimalité

Le problème de minimisation 2.2.8 est ainsi un problème de minimisation convexe.

Une classe importante de critères d'optimalité sont les critères orthogonalement invariants sur \mathcal{S}_k^{++} .

Définition 2.2.2. *Un critère d'optimalité sur \mathcal{S}_k^{++} est orthogonalement invariant s'il est invariant pour l'action du groupe orthogonal de \mathbb{R}^k par congruence sur \mathcal{S}_k^{++} . Ces critères ne dépendent que des valeurs propres d'une matrice définie positive.*

Lemme 2.2.1. *Soit ψ une fonction à valeurs réelles et définie sur $(0, +\infty)^k$ convexe, symétrique, c'est-à-dire invariante par permutations des coordonnées d'un point de \mathbb{R}^k , et décroissante pour l'ordre partiel sur les coordonnées des vecteurs de $(0, +\infty)^k$ défini composante par composante par la relation d'ordre usuelle sur \mathbb{R} . Si nous définissons Φ de la manière suivante :*

$$\Phi(A) = \psi(\boldsymbol{\lambda}(A)), \quad \forall A \in \mathcal{S}_k^{++}, \quad (2.2.12)$$

où $\boldsymbol{\lambda}(A) = (\lambda_1(A), \dots, \lambda_k(A))'$ est le vecteur des valeurs propres de A rangées dans l'ordre croissant, $\lambda_1(A) \leq \dots \leq \lambda_k(A)$, alors Φ est un critère d'optimalité sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$.

Démonstration 2.2.2. Nous renvoyons à [GH96] pour une preuve de ce résultat qui ne présente pas de difficulté particulière.

Exemples 2.2.1. *Pour $-\infty \leq p \leq 1$, les fonctions Φ_p suivantes, définies \mathcal{S}_k^{++} , sont des critères d'optimalité orthogonalement invariants. Ce sont les critères d'optimalité Φ_p de Kiefer, [Kie74] :*

$$\begin{cases} \Phi_p(A) = \left(\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \lambda_j(A)^p \right)^{\frac{-1}{p}}, & \text{si } p \notin \{-\infty, 0\}, \\ \Phi_0(A) = \left(\prod_{j=1}^k \lambda_j(A) \right)^{\frac{-1}{k}} = (\det(A))^{\frac{-1}{k}}, \\ \Phi_{-\infty}(A) = \left(\min_{j=1, \dots, k} \lambda_j(A) \right)^{-1}. \end{cases} \quad (2.2.13)$$

Les critères obtenus pour $p = 0$, $p = -1$ et $p = -\infty$ sont appelés respectivement critères de D -optimalité, A -optimalité et E -optimalité.

Remarque 2.2.1. *Les cas $p = 0$ et $p = -\infty$ sont en fait des cas limites de la formule générale pour $p \notin \{-\infty, 0\}$.*

Définition 2.2.3. *Le critère de I -optimalité, qui n'est pas orthogonalement invariant, est défini pour tout domaine compact \mathcal{X} d'intérieur non vide par la formule :*

$$\Phi_I(A) = \frac{1}{\text{vol}(\mathcal{X})} \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})' A^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.2.14)$$

où $\text{vol}(\mathcal{X})$ désigne le volume du domaine expérimental compact \mathcal{X} .

Lemme 2.2.2. *Le critère de I -optimalité défini en 2.2.3 s'exprime également ainsi :*

$$\Phi_I(A) = \text{tr}(M_0 A^{-1}), \quad A \in \mathcal{S}_k^{++}, \quad (2.2.15)$$

où M_0 est la matrice des moments pour la distribution uniforme sur le domaine compact d'intérieur non vide \mathcal{X} . Nous avons ainsi :

$$M_0 = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})' \frac{d\mathbf{x}}{\text{vol}(\mathcal{X})}. \quad (2.2.16)$$

Démonstration 2.2.3. Voir [GH96].

Le lemme 2.2.2 permet de montrer que le critère de I -optimalité est un critère d'optimalité au sens de la définition 2.2.1.

Remarque 2.2.2. En utilisant la définition des critères d'optimalité pour un sous-système propre de paramètres d'intérêt défini par $K\boldsymbol{\theta}$, obtenue à l'équation 2.2.3, et où K est de rang s , les critères Φ_p et Φ_I se transforment en critères d'optimalité ϕ_p et ϕ_I sur \mathcal{S}_s^{++} .

Proposition 2.2.2. Les critères d'optimalité Φ_p , Φ_I , ϕ_p et ϕ_I sont à valeurs strictement positives et sont positivement homogènes de degré -1 , c'est-à-dire $\Phi(\alpha A) = \alpha^{-1}\Phi(A)$, $\forall \alpha \in (0, +\infty)$.

Démonstration 2.2.4. Évident.

L'inverse Ψ de tout critère Φ est donc une fonction d'information au sens de Pukelsheim, [GH96] : il s'agit d'une fonction strictement positive, positivement homogène de degré 1 et concave. La communauté statistique considère généralement que les critères Φ suffisent pour résumer tous les critères possibles d'optimalité, voir [GH96]. De plus les propriétés de stricte positivité et d'homogénéité permettent de définir la notion d'efficacité relative ci-dessous.

Définition 2.2.4. L'efficacité relative d'un plan $\boldsymbol{\xi}$ par rapport à un plan $\boldsymbol{\xi}^*$ est :

$$\text{eff}(\boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\xi}^*) = \frac{\Phi(M(\boldsymbol{\xi}^*))}{\Phi(M(\boldsymbol{\xi}))}, \quad (2.2.17)$$

où nous supposons que $M(\boldsymbol{\xi}^*)$ et $M(\boldsymbol{\xi})$ appartiennent au domaine de définition du critère d'optimalité Φ .

Remarque 2.2.3. Si $\boldsymbol{\xi}^*$ et $\boldsymbol{\xi}$ sont des plans exacts de taille $n(\boldsymbol{\xi}^*)$ et $n(\boldsymbol{\xi})$ alors le rapport 2.2.17 s'interprète comme le rapport des tailles des plans $n(\boldsymbol{\xi}^*)/n(\boldsymbol{\xi})$ telles que les matrices d'information de Fisher $n(\boldsymbol{\xi}^*)\sigma^{-2}M(\boldsymbol{\xi}^*)$ et $n(\boldsymbol{\xi})\sigma^{-2}M(\boldsymbol{\xi})$ fournissent la même qualité pour le critère Φ .

Définition 2.2.5. Si $\boldsymbol{\xi}^*$ est optimal, c'est-à-dire solution du problème de minimisation défini par l'équation 2.2.8, alors l'efficacité d'un plan $\boldsymbol{\xi}$ est définie par :

$$\text{eff}(\boldsymbol{\xi}) = \text{eff}(\boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\xi}^*). \quad (2.2.18)$$

L'efficacité d'un plan $\boldsymbol{\xi}$ est un réel de l'intervalle $]0, 1]$.

2.3. Équivariance, invariance et invariance faible

Un grand nombre de modèles de régression possèdent naturellement des propriétés de symétrie héritées d'une forme particulière du domaine expérimental et de propriétés de la fonction de réponse. Suivant [GH96], nous qualifions d'équivariants les modèles de type 2.1.1 présentant une propriété de symétrie.

Définition 2.3.1. *Considérons un modèle de régression linéaire défini par l'équation 2.1.1, $y(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}' \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^k$. Soit \mathcal{G} un groupe de transformations bijectives de \mathcal{X} sur \mathcal{X} et \mathcal{Q} un groupe de matrices réelles carrées d'ordre k pour la multiplication matricielle usuelle. Le modèle de régression est équivariant pour \mathcal{G} et \mathcal{Q} , ce que nous abrégeons également en $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant, s'il existe une application surjective de \mathcal{G} sur \mathcal{Q} qui à un élément g de \mathcal{G} associe un élément Q_g de \mathcal{Q} tel que :*

$$\mathbf{f}(g(\mathbf{x})) = Q_g \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \forall (x, g) \in \mathcal{X} \times \mathcal{G}. \quad (2.3.1)$$

Le lemme suivant permet de construire un groupe \mathcal{Q} à partir du moment où l'équation 2.3.1 est vérifiée.

Lemme 2.3.1. *Considérons un modèle de régression linéaire défini par l'équation 2.1.1. Soit \mathcal{G} un groupe de transformations bijectives de \mathcal{X} tel que :*

$$\forall g \in \mathcal{G}, \exists Q_g \in \mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R}) \mid \mathbf{f}(g(\mathbf{x})) = Q_g \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \forall x \in \mathcal{X}. \quad (2.3.2)$$

- i- Si $\mathbf{f}(\mathcal{X})$ engendre \mathbb{R}^k , alors $\mathcal{Q} = \{Q_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un groupe pour la multiplication usuelle des matrices et ainsi le modèle de régression est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant.
- ii- Sinon, soit P la matrice du projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X}))$ et $\bar{P} = I_k - P$. Alors $\mathcal{Q} = \{Q_g P + \bar{P}, g \in \mathcal{G}\}$ est un groupe pour la multiplication usuelle des matrices et ainsi le modèle de régression est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant.

Démonstration 2.3.1. Nous renvoyons à [GH96].

Remarque 2.3.1. Si nous considérons la matrice Π d'un projecteur d'image $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X}))$ quelconque à la place du projecteur orthogonal d'image $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X}))$ et de matrice P . Alors, en posant $\bar{\Pi} = I_k - \Pi$, $\mathcal{Q} = \{Q_g \Pi + \bar{\Pi}, g \in \mathcal{G}\}$ est un groupe pour la multiplication usuelle des matrices et ainsi le modèle de régression est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant. Ainsi, si le groupe \mathcal{G} est compact, nous pourrions choisir à la place du projecteur orthogonal P un projecteur Π tel que à la fois l'image de Π , $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X}))$, et le noyau de Π , un supplémentaire de $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X}))$, soient \mathcal{G} -stables. Nous pourrions alors tirer profit de la théorie de la représentation des groupes compacts pour déterminer quels sont les modèles équivariants irréductibles pour l'action d'un groupe \mathcal{G} compact sur \mathcal{X} . Il s'agit d'un approfondissement possible mais qui ne sera pas réalisé dans cette étude puisque nous souhaitons avant tout nous concentrer sur des modèles particuliers, les modèles polynomiaux, afin de pouvoir mettre directement à profit certains algorithmes d'algèbre computationnelle. D'autre part l'étude des propriétés d'équivariance pour des modèles polynomiaux ne nécessitent pas une approche aussi générale comme le montre le théorème 2.3.2. Nous renvoyons le lecteur à [Ser78], [Pic73] et [Far06] pour de plus amples détails sur la théorie des représentations linéaires et en particulier celle des groupes compacts. Remarquons néanmoins que cette approche a déjà fait ses preuves en statistique par exemple dans le cadre de l'étude des fractions de plans factoriels, cf. [Col95].

Lemme 2.3.2.

Si un modèle de régression est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{Q} compact, alors :

-i- le groupe \mathcal{Q} est unimodulaire, c'est-à-dire :

$$|\det Q_g| = 1, \quad \forall g \in \mathcal{G}, \quad (2.3.3)$$

-ii- il existe une matrice symétrique définie positive E telle que :

$$Q'EQ = E, \quad \forall Q \in \mathcal{Q}. \quad (2.3.4)$$

Autrement dit le groupe \mathcal{Q} est un sous-groupe orthogonal de \mathbb{R}^k muni du produit scalaire défini par E .

Démonstration 2.3.2. Nous renvoyons, par exemple, à [MT86].

Théorème 2.3.1. Soit \mathcal{Q} un groupe compact de matrices réelles carrées d'ordre k . Alors, pour toute $A \in \mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R})$ il existe une unique matrice $\bar{A} \in \text{Conv} \{QAQ', Q \in \mathcal{Q}\}$ telle que :

$$Q\bar{A}Q' = \bar{A}, \quad \forall Q \in \mathcal{Q}. \quad (2.3.5)$$

De plus l'application moyenne \mathcal{P} qui à A associe \bar{A} est un projecteur de $\mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R})$ sur $\{B \in \mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R}) \mid QBQ' = B \forall Q \in \mathcal{Q}\}$ le sous-espace vectoriel des matrices invariantes. Ce projecteur est un projecteur orthogonal dans l'espace euclidien $(\mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R}), \langle \cdot, \cdot \rangle_E)$ où $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$ est défini ainsi :

$$\langle B, C \rangle_E = \text{tr}(BEC'E), \quad (2.3.6)$$

où E est une des matrices symétriques réelles définies positives dont l'existence est assurée par la seconde partie du lemme 2.3.2.

Démonstration 2.3.3. Nous renvoyons à [GH96] pour la démonstration de ce théorème.

Définition 2.3.2. Une application g de \mathcal{X} dans \mathcal{X} induit une opération sur l'ensemble des plans dont le support est inclus dans \mathcal{X} de la manière suivante :

$$\xi^g = \begin{pmatrix} g(\mathbf{x}_1) & \dots & g(\mathbf{x}_r) \\ \xi(\mathbf{x}_1) & \dots & \xi(\mathbf{x}_r) \end{pmatrix}, \quad (2.3.7)$$

où ξ^g est l'image par g du plan

$$\xi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_r \\ \xi(\mathbf{x}_1) & \dots & \xi(\mathbf{x}_r) \end{pmatrix}. \quad (2.3.8)$$

Proposition 2.3.1. Si un modèle de régression est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant alors le groupe \mathcal{G} induit une opération sur l'ensemble des matrices des moments des plans dont le support est inclus dans \mathcal{X} de la manière suivante :

$$M(\xi^g) = Q_g M(\xi) Q_g', \quad \forall \xi \subset \mathcal{X}, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.3.9)$$

Il s'agit donc d'une action par congruence du groupe \mathcal{Q} .

Démonstration 2.3.4. Nous renvoyons à [GH96].

2.3 Équivariance, invariance et invariance faible

Définition 2.3.3. Soit un modèle de régression $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant. Un plan ξ est :

- i- \mathcal{G} -invariant si pour tout $g \in \mathcal{G}$, $\xi^g = \xi$,
- ii- \mathcal{G} -faiblement invariant si pour tout $g \in \mathcal{G}$, $M(\xi^g) = M(\xi)$.

Lemme 2.3.3. Soit un modèle de régression $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant avec \mathcal{Q} un groupe compact. Pour tout plan ξ il existe un plan faiblement invariant $\tilde{\xi}$ tel que

$$M(\tilde{\xi}) \in \text{Conv} \{M(\xi^g), g \in \mathcal{G}\}. \quad (2.3.10)$$

Si \mathcal{G} est fini alors, pour tout plan faiblement invariant $\tilde{\xi}$, il existe un plan invariant $\bar{\xi}$ dont le support, $\text{Supp} \bar{\xi}$, est inclus dans celui de $\tilde{\xi}$ et pour lequel $M(\bar{\xi}) = M(\tilde{\xi})$.

Démonstration 2.3.5. Nous renvoyons à [GH96].

Exemple 2.3.1. Tout modèle de régression est $(\{\text{id}_{\mathcal{X}}\}, \{I_k\})$ -équivariant. Certains des résultats exposés dans la suite s'appliquent donc également si le modèle ou le domaine expérimental ne présente pas de symétrie.

Définition 2.3.4. Soient d un entier naturel et A un sous-ensemble fini de \mathbb{N}^v . Les éléments de A sont notés $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_v)$. Les $\alpha_1, \dots, \alpha_v$ sont v entiers positifs et par conséquent ils peuvent s'interpréter comme le vecteur des degrés d'une fonction polynomiale à v variables. Nous supposons de surcroît que l'ensemble A vérifient les deux propriétés suivantes :

- i- $|\alpha| = \sum_{i=1}^v \alpha_i \leq d$ pour tout $\alpha \in A$
- ii- il existe $\alpha_0 \in A$ tel que $|\alpha_0| = d$.

Un modèle de régression multiple polynomiale A de degré d sur un domaine expérimental $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^v$ est alors défini par :

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha \in A} \theta_{\alpha} \mathbf{x}^{\alpha}, \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathcal{X}. \quad (2.3.11)$$

Le modèle de régression multiple polynomiale complet A_d de degré d sur un domaine expérimental $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^v$ est défini par :

$$A_d = \{\alpha \in \mathbb{N}_0^v, |\alpha| \leq d\}, \quad (2.3.12)$$

où \mathbb{N}_0^v désigne l'ensemble des vecteurs à v composantes dont les coordonnées sont supérieures ou égales à 0.

Lorsqu'aucune confusion n'est possible nous appelons indifféremment un modèle de régression multiple polynomiale A de degré d sur un domaine expérimental $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^v$ un modèle polynomiale A ou un modèle de régression polynomiale A . De même si aucune confusion n'est possible nous appelons indifféremment le modèle de régression multiple polynomiale complet A_d de degré d sur un domaine expérimental $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^v$ un modèle polynomiale complet de degré d , un modèle de régression polynomiale complet de degré d , un modèle polynomiale complet A_d ou un modèle de régression polynomiale complet A_d .

Nous montrons ici un lemme qui sera utilisé dans le chapitre 4 qui établit le lien entre les structures de groupe des deux groupes \mathcal{G} et \mathcal{Q} . La démonstration proposée évite le recours à l'argument constructif qui est généralement utilisé, voir [DGP93] par exemple.

Lemme 2.3.4. *Si le modèle de régression polynomiale A utilisé est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant et si la restriction à χ des fonctions polynomiales associées aux éléments de A forme une famille libre, alors l'application Ψ , qui à g de \mathcal{G} associe $Q_{g^{-1}}$ de \mathcal{Q} , est un morphisme de groupes et par conséquent $Q_{g^{-1}} = Q_g^{-1}$.*

Démonstration 2.3.6. Le modèle de régression utilisé est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant :

$$\mathbf{f}(g(\mathbf{x})) = Q_g \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \forall (\mathbf{x}, g) \in \chi \times \mathcal{Q}. \quad (2.3.13)$$

Ainsi :

$$Q_{g_2} Q_{g_1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(g_1(g_2(\mathbf{x}))), \quad \forall (\mathbf{x}, g_1, g_2) \in \chi \times \mathcal{Q}^2 \quad (2.3.14)$$

$$= \mathbf{f}((g_1 \cdot g_2)(\mathbf{x})), \quad \forall (\mathbf{x}, g_1, g_2) \in \chi \times \mathcal{Q}^2 \quad (2.3.15)$$

$$= Q_{(g_1 \cdot g_2)} \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \forall (\mathbf{x}, g_1, g_2) \in \chi \times \mathcal{Q}^2. \quad (2.3.16)$$

Nous obtenons ainsi $|\alpha|$ relations entre les composantes du vecteur $Q_{g_2} Q_{g_1} \mathbf{f}(\mathbf{x})$ et du vecteur $Q_{g_2} Q_{g_1} \mathbf{f}(\mathbf{x})$. La restriction à χ des fonction polynomiales associées aux éléments de A forme une famille libre : pour chacune des $|\alpha|$ relations nous procédons à l'identification des fonctions polynomiales avec les polynômes qui leur sont associées. Nous pouvons alors identifier les $|\alpha|$ coefficients des polynômes des membres de gauche et de droite de toutes les $|\alpha|$ relations que nous avons à notre disposition. Ainsi les $|\alpha|^2$ termes des matrices $Q_{g_2} Q_{g_1}$ et $Q_{(g_1 \cdot g_2)}$ sont identiques. Nous avons alors :

$$\Psi(g_1) \Psi(g_2) = Q_{g_1^{-1}} Q_{g_2^{-1}} \quad (2.3.17)$$

$$= Q_{g_2^{-1} \cdot g_1^{-1}} \quad (2.3.18)$$

$$= Q_{(g_1 \cdot g_2)^{-1}} \quad (2.3.19)$$

$$= \Psi(g_1 g_2) \quad (2.3.20)$$

, ce qui prouve la propriété de morphisme de l'application Ψ .

En particulier avec $g_2 = g^{-1}$:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = Q_{g^{-1}} Q_g \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \forall (\mathbf{x}, r) \in \chi \times \mathcal{Q}. \quad (2.3.21)$$

Corollaire 2.3.1. *Si le domaine expérimental χ est d'intérieur non vide et si le modèle de régression polynomiale A utilisé est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant, alors l'application Ψ qui à g de \mathcal{G} associe $Q_{g^{-1}}$ de \mathcal{Q} est un morphisme de groupes.*

Démonstration 2.3.7. Si le domaine expérimental est d'intérieur non vide, la restriction à χ des fonctions polynomiales associées aux éléments de A forme une famille libre.

Remarque 2.3.2. Dans les exemples suivants les groupes \mathcal{G} agissent linéairement sur χ , c'est-à-dire pour tout $g \in \mathcal{G}$, il existe une matrice U_g réelle carrée d'ordre v et inversible telle que :

$$g(\mathbf{x}) = U_g \mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \in \chi. \quad (2.3.22)$$

Définition 2.3.5. *Nous considérons un modèle polynomial A et un groupe \mathcal{G} qui induit une action linéaire définie par la condition 2.3.22. Pour tout $\alpha \in A$ et $\beta \in A_d$ tel que $|\alpha| = |\beta|$ nous posons $\Gamma(\alpha, \beta)$ l'ensemble des matrices γ carrées d'ordre k à coefficients dans \mathbb{N}_0 dont les sommes des lignes valent $\gamma_{i \bullet} = \alpha_i$ et les sommes des colonnes valent*

2.3 Équivariance, invariance et invariance faible

$\gamma_{\bullet j} = \beta_j$, pour tout $i, j = 1, \dots, v$. Pour $g \in \mathcal{G}$, les coefficients de U_g sont notés $u_{g,ij}$, pour $i, j = 1, \dots, v$. Enfin si $\alpha \in A$ et $\beta \in A_d$ nous définissons $q_{g,\alpha\beta}$ de la manière suivante :

$$q_{g,\alpha\beta} = \begin{cases} \left(\prod_{i=1}^v \alpha_i! \right) \sum_{\gamma \in \Gamma(\alpha,\beta)} \left(\frac{(u_{g,ij})^{\gamma_{i,j}}}{\gamma_{i,j}!} \right), & \text{si } |\alpha| = |\beta|, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.3.23)$$

Proposition 2.3.2. *En reprenant les notations de la définition 2.3.5, nous avons :*

$$(U_g \mathbf{x})^\alpha = \sum_{\substack{\beta \in A_d \\ |\beta| = |\alpha|}} q_{g,\alpha\beta} \mathbf{x}^\beta. \quad (2.3.24)$$

Démonstration 2.3.8. La preuve de cette proposition résulte d'un calcul direct.

Théorème 2.3.2. *Le modèle polynomial, défini par l'équation 2.3.11, est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant, où \mathcal{G} induit une action linéaire définie par la condition 2.3.22 et où $\mathcal{Q} = (q_{g,\alpha\beta})_{\alpha,\beta \in A}$ avec $q_{g,\alpha\beta}$ défini comme en 2.3.5, si et seulement la condition suivante est remplie :*

$$q_{g,\alpha\beta} = 0, \forall g \in \mathcal{G}, \forall \alpha \in A, \forall \beta \in A_d \setminus A \text{ tels que } |\beta| = |\alpha|. \quad (2.3.25)$$

Les coefficients des matrices du groupe \mathcal{Q} dépendent continuellement des coefficients des matrices U_g , ainsi le groupe \mathcal{Q} est compact si l'ensemble $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est compact.

Démonstration 2.3.9. Nous renvoyons à [GH96] pour la démonstration de ce théorème.

Exemple 2.3.2. Soit $\mathcal{G} = \mathcal{G}_s$ le groupe des changements de signe des coordonnées d'un vecteur à v composantes. Si le domaine expérimental χ est invariant pour l'action du groupe \mathcal{G}_s alors tout modèle de régression multiple polynomiale A , de la définition 2.3.4, est $(\mathcal{G}_s, \mathcal{Q}_s)$ -équivariant. En effet, soit $\epsilon = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_v)$ un élément du groupe \mathcal{G}_s , nous avons $U_\epsilon = \text{Diag}(\epsilon)$ et $q_{\epsilon,\alpha\beta} = 0$ dès que $\alpha \neq \beta$. Les matrices Q_ϵ sont diagonales d'ordre $\text{Card}(A)$ et leurs éléments diagonaux valent $\prod_{i=1}^v \epsilon_i^{\alpha_i}$, $\alpha \in A$.

Exemple 2.3.3. Soit $\mathcal{G} = \mathcal{G}_p$ le groupe des permutations des coordonnées d'un vecteur à v composantes. Si le domaine expérimental χ est invariant pour l'action du groupe \mathcal{G}_p et l'ensemble des degrés A est invariant par permutation alors le modèle de régression multiple polynomiale A , de la définition 2.3.4, est $(\mathcal{G}_p, \mathcal{Q}_p)$ -équivariant. En effet, soit π un élément du groupe symétrique d'ordre v , U_π est une matrice de permutation et $q_{\pi,\alpha\beta} = 0$ dès que $\beta \neq \alpha$. Les matrices Q_π sont les matrices de permutation d'ordre $\text{Card}(A)$ associées aux permutations $\alpha \longrightarrow \pi^{-1}\alpha$ de l'ensemble A des degrés des termes du modèle.

Exemple 2.3.4. Soit $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{sp}$ le groupe engendré par \mathcal{G}_s et \mathcal{G}_p , nous verrons par la suite, dans le chapitre 8, qu'il s'agit d'un groupe de Coxeter : le groupe hyperoctaédral. Un élément de \mathcal{G}_{sp} peut être identifié à un couple (ϵ, π) où ϵ est un vecteur de nombres réels de valeur absolue égale à 1 et π un élément du groupe symétrique d'ordre v . Si le domaine expérimental χ est invariant pour l'action du groupe \mathcal{G}_{sp} et l'ensemble des degrés A est invariant par permutation alors le modèle de régression multiple polynomiale A , de la définition 2.3.4, est $(\mathcal{G}_{sp}, \mathcal{Q}_{sp})$ -équivariant. Les matrices $Q_{\epsilon,\pi}$ sont données par la relation suivante $Q_{\epsilon,\pi} = Q_\epsilon Q_\pi$ où Q_ϵ et Q_π sont définies comme dans les exemples 2.3.2 et 2.3.3.

Exemple 2.3.5. Le domaine expérimental χ est pris égal à une boule de \mathbb{R}^v centrée en $\mathbf{0}$. Soit $\mathcal{G} = \mathcal{G}_{orth}$ le groupe des transformations orthogonales de \mathbb{R}^v . La condition d'équivariance 2.3.25 est alors équivalente à la condition suivante sur l'ensemble des degrés A :

$$\alpha \in A \implies \forall \beta \in A_d \mid |\beta| = |\alpha|, \beta \in A. \quad (2.3.26)$$

Définition 2.3.6. Lorsque le modèle polynomial complet de degré d sur le domaine expérimental χ égal à une boule de \mathbb{R}^v centrée en $\mathbf{0}$ est, pour \mathcal{Q}_{orth} donné par le théorème 2.3.2, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant il est appelé modèle polynomial de degré d isovariant.

Définition 2.3.7. Considérons un modèle polynomial de degré d isovariant. Un plan ξ est dit isovariant s'il est \mathcal{G}_{orth} -faiblement invariant.

Remarques 2.3.1.

- i- Les quatre groupes $\mathcal{Q}_s, \mathcal{Q}_p, \mathcal{Q}_{sp}$ et \mathcal{Q}_{orth} sont compacts. Dans chacun des cas le domaine expérimental est d'intérieur non vide et la propriété de morphisme 2.3.4 est donc bien vérifiée en vertu du corollaire 2.3.1.
- ii- Seuls les trois groupes $\mathcal{Q}_s, \mathcal{Q}_p$ et \mathcal{Q}_{sp} sont des sous-groupes du groupe orthogonal.
- iii- Les plans invariants pour l'action du groupe \mathcal{G}_{orth} sont réduits au plan formé par le point $\mathbf{0}$.
- iv- Nous verrons dans la suite que les plans faiblement invariants pour l'action du groupe \mathcal{G}_{orth} ne se réduisent pas à celui formé par le point $\mathbf{0}$.

2.4. Invariance et optimalité

Nous présentons quelques applications de la théorie de l'invariance aux problèmes d'optimalité. Pour plus de détails nous renvoyons à [GH96], [Sch96] et [LMSS02].

Définition 2.4.1. Soit \mathcal{Q} un groupe de matrices réelles carrées d'ordre k . Un critère d'optimalité Φ défini sur \mathcal{A} est \mathcal{Q} -invariant si :

$$QAQ' \in \mathcal{A} \text{ et } \Phi(QAQ') = \Phi(A), \quad \forall (A, Q) \in \mathcal{A} \times \mathcal{Q}. \quad (2.4.1)$$

Remarque 2.4.1. La définition 2.2.1 d'un critère d'optimalité Φ précise la nature de l'ensemble \mathcal{A} : \mathcal{A} est un cône convexe inclus dans \mathcal{S}_k tel que $\mathcal{S}_k^{++} \subset \mathcal{A} \subset \mathcal{S}_k^+$, où \mathcal{S}_k^{++} est le cône convexe étoilé en 0 des matrices réelles symétriques définies positives d'ordre k .

Proposition 2.4.1. Tout critère, défini sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$ et obtenu par le lemme 2.2.1, est \mathcal{O}_k -invariant. En particulier, les critères d'optimalité $\Phi_p, p \in [-\infty, 1]$, sont \mathcal{O}_k -invariants.

Démonstration 2.4.1. Les critères Φ_p sont définis sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$. L'action par similitude de \mathcal{O}_k sur \mathcal{S}_k^{++} coïncide avec l'action par congruence sur \mathcal{S}_k^{++} . Ainsi à la fois la signature d'une forme quadratique $A \in \mathcal{A}$ et ses valeurs propres sont conservées par cette action. Tout critère, défini sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$ et obtenu par le lemme 2.2.1, est donc \mathcal{O}_k -invariant.

Proposition 2.4.2. Si un modèle de régression multiple polynomiale A est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe $\mathcal{Q} \subset \mathcal{O}_k$, alors tout critère, défini sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$ et obtenu par le lemme 2.2.1, est \mathcal{Q} -invariant. En particulier, les critères d'optimalité $\Phi_p, p \in [-\infty, 1]$, sont \mathcal{Q} -invariants.

2.4 Invariance et optimalité

Démonstration 2.4.2. Nous renvoyons à [GH96].

Exemples 2.4.1. Pour les exemples 2.3.2, 2.3.3 et 2.3.4, les critères Φ_p , $p \in [-\infty, 1]$, sont respectivement \mathcal{Q}_s -invariant, \mathcal{Q}_p -invariant et \mathcal{Q}_{sp} -invariant.

Proposition 2.4.3. Si un modèle de régression multiple polynomiale A est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{Q} unimodulaire, alors le critère de D -optimalité, défini sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$ par Φ_0 , est \mathcal{Q} -invariant.

Démonstration 2.4.3. Le déterminant est invariant pour l'action par congruence d'un groupe unimodulaire.

Exemples 2.4.2. Pour l'exemple 2.3.5 le critère Φ_0 de D -optimalité est également \mathcal{Q}_{orth} -invariant.

Proposition 2.4.4. Si un modèle de régression multiple polynomiale A est un modèle polynomial de degré d isovariant, défini comme en 2.3.6, alors le critère de I -optimalité, défini sur $\mathcal{A} = \mathcal{S}_k^{++}$ par Φ_I , est \mathcal{Q}_{orth} -invariant.

Démonstration 2.4.4. La matrice des moments pour la distribution uniforme, M_0 définie par la relation 2.2.16, est invariante pour l'action du groupe \mathcal{G}_{orth} puisque la mesure de Lebesgue n'est pas modifiée par transformation orthogonale. Nous avons ainsi :

$$QM_0Q' = M_0, \quad \forall Q \in \mathcal{Q}_{orth}. \quad (2.4.2)$$

De ce fait :

$$\Phi_I = (QA'Q) = \text{tr} \left(M_0(QAQ')^{-1} \right) = \text{tr} \left(Q^{-1}M_0(Q^{-1})'A^{-1} \right) = \Phi_I(A). \quad (2.4.3)$$

Remarque 2.4.2. Les propriétés 2.4.3 et 2.4.4 sont particulièrement intéressantes dans le contexte de notre étude puisqu'elles permettent d'étudier la D -optimalité et la I -optimalité d'un plan ξ pour un modèle polynomial de degré d isovariant à une transformation orthogonale de ce plan près. Nous l'utiliserons constamment lors de l'étude de cas présentée dans le chapitre 7.

Lemme 2.4.1. Soit un modèle de régression multiple polynomiale A $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant, avec \mathcal{Q} est un groupe compact, et Φ un critère d'optimalité défini sur \mathcal{A} et \mathcal{Q} -invariant. Pour tout plan ξ tel que $M(\xi) \in \mathcal{A}$ et tout plan $\tilde{\xi}$ \mathcal{G} -faiblement invariant avec $M(\tilde{\xi}) \in \text{Conv} \{M(\xi^g), g \in \mathcal{G}\}$, dont l'existence est assurée par le lemme 2.3.3, nous avons :

$$M(\tilde{\xi}) \in \mathcal{A}, \quad \Phi \left(M(\tilde{\xi}) \right) \leq \Phi \left(M(\xi) \right). \quad (2.4.4)$$

Démonstration 2.4.5. Comme $M(\tilde{\xi}) \in \text{Conv} \{M(\xi^g), g \in \mathcal{G}\}$, il existe $r \in \mathbb{N}$, $g_1, \dots, g_r \in \mathcal{G}$ et $\alpha_1, \dots, \alpha_r > 0$ avec $\sum_{i=1}^r \alpha_i = 1$, tels que $M(\tilde{\xi}) = \sum_{i=1}^r \alpha_i M(\xi^{g_i})$. La partie \mathcal{A} est convexe et de ce fait $M(\tilde{\xi}) \in \mathcal{A}$. Or, la proposition 2.3.1 donne : $M(\xi^g) = Q_g M(\xi) Q_g'$ pour tout $g \in \mathcal{G}$. Puis la \mathcal{Q} -invariance de Φ assure que $\Phi(M(\xi^g)) = \Phi(M(\xi))$, pour tout $g \in \mathcal{G}$. Finalement la convexité de Φ donne :

$$\Phi \left(M(\tilde{\xi}) \right) \leq \sum_{i=1}^r \Phi \left(M(\xi^{g_i}) \right) = \Phi \left(M(\xi) \right). \quad (2.4.5)$$

Le corollaire 2.4.1 suivant est fondamental : il permet de souligner l'importance des plans isovariants parmi tous les plans dont le support est inclus dans une boule de \mathbb{R}^v centrée en $\mathbf{0}$ lorsque nous nous intéressons aux critères de D -optimalité et de I -optimalité.

Corollaire 2.4.1. *Considérons un domaine expérimental χ égal à une boule de \mathbb{R}^v centrée en $\mathbf{0}$. Pour un modèle polynomial de degré d isovariant et les deux critères d'optimalité Φ_0 et Φ_I , nous pouvons restreindre la recherche d'un plan optimal pour la classe des plans dont le support est dans χ à la sous-classe des plans isovariants.*

Démonstration 2.4.6. C'est une conséquence des propositions 2.4.3 et 2.4.4 sur la \mathcal{G}_{orth} -invariance des critères d'optimalité Φ_0 et Φ_I définis sur \mathcal{S}_k^{++} et du lemme 2.4.1.

2.5. Admissibilité

Nous commençons par indiquer l'intérêt des plans admissibles rappelant ainsi certains des commentaires de [GH96].

L'ordre partiel de Loewner, défini en 2.1.4, appliqué aux matrices des moments des plans, définition 2.1.5, induit un concept d'optimalité des plans. Ainsi, un plan ξ est admissible s'il n'existe pas de plan meilleur que ξ . En général, il n'existe pas un unique plan admissible. Toutefois, la notion d'admissibilité combinée à celle d'invariance permet de réduire considérablement, l'ensemble des plans dans lequel la recherche d'un plan optimum est à effectuer. Nous allons préciser ceci par les résultats suivants, en mettant en avant ceux qui concernent les domaines expérimentaux χ qui ont la forme d'une boule de \mathbb{R}^v centrée en $\mathbf{0}$.

Définition 2.5.1. *Un plan ξ_0 est dit admissible pour un modèle de régression linéaire défini par l'équation 2.1.1 s'il n'existe pas de plan ξ tel que :*

$$M(\xi_0) \leq M(\xi) \quad \text{et} \quad M(\xi_0) \neq M(\xi), \quad (2.5.1)$$

où $M(\xi_0)$ et $M(\xi)$ sont les matrices des moments respectivement du plan ξ_0 et du plan ξ .

Nous considérons désormais des modèles de régression $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariants, introduits dans la définition 2.3.1. Le cas où le modèle de régression linéaire ne présente pas de propriétés d'équivariance sera également traité puisqu'il s'agit de la situation où \mathcal{G} est le groupe dont le seul élément est l'identité de χ et \mathcal{Q} est le groupe dont le seul élément est l'identité de \mathbb{R}^k , comme nous l'avons indiqué à l'exemple 2.3.1.

Le théorème suivant, voir [KS66], montre que la propriété d'admissibilité d'un plan est uniquement associée à ses points support et ne dépend donc pas des poids du plan. Ceci justifie en partie le fait de ne considérer que des plans pour lesquels les poids sont uniformes et sont par conséquent des plans exacts. Nous procéderons ainsi, par exemple, aux chapitres 4, 5 et 7.

Théorème 2.5.1. *Soit un modèle de régression linéaire, $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant et défini par l'équation 2.1.1, tel que le groupe \mathcal{Q} et $\mathbf{f}(\chi)$ soient compacts. Pour $A \in \mathcal{S}_k^+$ nous posons :*

$$q_A(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})' A \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \chi. \quad (2.5.2)$$

2.5 Admissibilité

- i- Si ξ_0 est un plan faiblement invariant et admissible alors il existe une matrice $A \in \mathcal{S}_k^+$ non nulle et vérifiant, pour tout $Q \in \mathcal{Q}$, la condition $Q' A Q = A$ telle que chacun des points support de ξ_0 est un maximum global de q_A sur \mathcal{X} .
- ii- Si ξ_0 est un plan quelconque et s'il existe une matrice $A \in \mathcal{S}_k^{++}$ vérifiant, pour tout $Q \in \mathcal{Q}$, la condition $Q' A Q = A$ telle que chacun des points support de ξ_0 est un maximum global de q_A sur \mathcal{X} , alors ξ_0 est admissible.

Démonstration 2.5.1. Nous renvoyons à [GH96].

Remarque 2.5.1. La condition nécessaire d'admissibilité pour un plan découlant du premier point du théorème 2.5.1 est inutile dès qu'il existe une matrice A de \mathcal{S}_k^+ telle que :

$$q_A(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})' A \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad (2.5.3)$$

est constant sur ξ .

En particulier, si le modèle de régression 2.1.1 contient un terme constant non nul, par exemple $f_1 = 1$, alors le premier point du théorème 2.5.1 est vérifié pour la matrice $A = \text{Diag}(1, 0, \dots, 0)$.

Un théorème de Heiligers, [Hei91], permet de modifier le théorème 2.5.1 pour tenir compte de la remarque 2.5.1. Ce théorème a été repris et légèrement modifié dans [GH96] dont nous utilisons la formulation.

Théorème 2.5.2. Soit un modèle de régression linéaire, $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant et défini par l'équation 2.1.1, tel que le groupe \mathcal{Q} et $\mathbf{f}(\mathcal{X})$ soient compacts. Soient \mathcal{D} et \mathcal{K} définis ainsi :

$$\mathcal{D} = \{M_2 - M_1, M_1, M_2 \in \mathcal{M} \text{ et } M_1 \leq M_2\}, \quad (2.5.4)$$

$$\mathcal{K} = \text{Ker}(D^*) \subset \text{Ker}(D), \quad \forall D \in \mathcal{D}, \quad (2.5.5)$$

l'existence de la matrice D^* résultant de la convexité de \mathcal{D} .

Nous supposons que $\mathcal{K} \neq \mathbb{R}^k$, il existe donc \mathcal{L} un sous-espace non réduit à $\mathbf{0}$ supplémentaire de \mathcal{K} dans \mathbb{R}^k et tel que $Q' \mathcal{L} = \mathcal{L}$, pour tout $Q \in \mathcal{Q}$.

- i- Si ξ_0 est un plan faiblement invariant et admissible alors il existe des matrices $B \in \mathcal{S}_k^+$ et $C \in \mathcal{M}_{k,k}$ avec $\text{Im}(B) \subset \mathcal{L}$, $CP_{\mathcal{K}} = C$, $Q' B Q = B$ and $Q' C Q = C$ pour tout $Q \in \mathcal{Q}$ et telles que :

$$q_{B,C}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})' (B + C) \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \quad (2.5.6)$$

est non-constant et que chacun des points support de ξ_0 est un maximum global de $q_{B,C}$ sur \mathcal{X} .

- ii- Si ξ_0 est un plan tel qu'il existe des matrices $B \in \mathcal{S}_k^+$ et $C \in \mathcal{M}_{k,k}$ avec $\mathfrak{S}B \subset \mathcal{L}$, $CP_{\mathcal{K}} = C$, $Q' B Q = B$ and $Q' C Q = C$ pour tout $Q \in \mathcal{Q}$ et telles que :

$$q_{B,C}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})' (B + C) \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \quad (2.5.7)$$

est non-constant et que chacun des points support de ξ_0 est un maximum global de $q_{B,C}$ sur \mathcal{X} , alors ξ_0 est admissible.

Démonstration 2.5.2. Nous renvoyons à [GH96] pour la démonstration de ce théorème qui ne peut être reproduite ici compte tenu de sa longueur.

2.6. Admissibilité et invariance pour des plans utilisés avec des modèles de régression multiple polynomiale

Nous particularisons désormais les résultats précédents au cas d'un modèle de régression polynomiale A de degré d , comme défini en 2.3.4. Le domaine expérimental est désormais supposé compact.

Proposition 2.6.1. *La matrice des moments d'un plan ξ de points support $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r$ est :*

$$M(\xi) = (\mu_{\alpha+\beta}(\xi))_{\alpha, \beta \in A}, \quad (2.6.1)$$

où

$$\mu_{\alpha}(\xi) = \sum_{i=1}^r \mathbf{x}_i^{\alpha} \xi(\mathbf{x}_i), \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^v \text{ et } |\alpha| \leq 2d. \quad (2.6.2)$$

Démonstration 2.6.1. Évident.

Définition 2.6.1. *Si un plan ξ est admissible pour un modèle de régression polynomial A de degré d , comme défini en 2.3.4, il est dit A -admissible.*

Définition 2.6.2. *La matrice des moments d'un plan ξ pour un modèle de régression polynomial complet A_d de degré d est noté $M_d(\xi)$.*

Lemme 2.6.1. *Soit \mathcal{G} un groupe compact de transformations agissant linéairement sur \mathcal{X} . Supposons que le modèle de régression polynomial A de degré d est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant. Alors, pour tout plan faiblement invariant ξ il existe un plan faiblement invariant $\tilde{\xi}$ qui soit A -admissible et A_d -admissible et tel que :*

$$M(\tilde{\xi}) \geq M(\xi). \quad (2.6.3)$$

Démonstration 2.6.2. Nous renvoyons à [GH96].

Corollaire 2.6.1. *Lors de la recherche d'une solution optimale pour un critère d'optimalité \mathcal{Q} -invariant dans la classe des plans dont le support est dans \mathcal{X} , nous pouvons nous restreindre à chercher un plan optimal dans la sous-classe des plans faiblement invariants et A_d -admissibles.*

Démonstration 2.6.3. Évident.

Pour utiliser le théorème 2.5.2, il faut déterminer \mathcal{K} . Dans le cas du modèle A_d , polynomial complet de degré d , Heiligers, [Hei91], a montré le théorème suivant.

Théorème 2.6.1. *Dans le cas du modèle polynomial complet de degré d , nous avons :*

$$\mathcal{E} = \text{Vect} \{e_{\alpha}, \alpha \in \mathbb{N}_0^v, |\alpha| \leq d-1\} \subset \mathcal{K}, \quad (2.6.4)$$

où e_{α} , $\alpha \in A_d$ est le vecteur de \mathbb{R}^k dont les composantes, sauf celle associée à α qui vaut 1, sont nulles, avec $k = \binom{v+d}{d}$. Si les fonctions monomiales x^{α} , $|\alpha| \leq 2d$, sont linéairement indépendantes sur ξ , alors $\mathcal{E} = \mathcal{K}$.

2.6 Admissibilité, invariance et modèles polynomiaux

Nous pouvons désormais caractériser les plans A_d -admissibles pour un domaine χ compact. Le cas unidimensionnel a été traité en 1959 par Kiefer, voir [Kie56].

Théorème 2.6.2. *Soit $v = 1$, et $\chi = [a, b]$ avec $(a, b) \in \mathbb{R}^2$ tels que $a < b$. Un plan ξ est A_d -admissible si et seulement si :*

$$\text{Card}(\text{supp}(\xi) \cap]a, b]) \leq d - 1. \quad (2.6.5)$$

Démonstration 2.6.4. Nous renvoyons à [GH96].

Nous introduisons désormais la notion de segment et d'intérieur relatif d'un segment pour appliquer le théorème 2.6.2 au cas d'un modèle polynomial A_d avec $v \geq 2$.

Définition 2.6.3. *Un segment \mathcal{S} d'extrémités $\mathbf{x}^{(0)}$ et $\mathbf{x}^{(1)}$, deux points de \mathbb{R}^v , est l'enveloppe convexe de ces points :*

$$\mathcal{S} = \{\lambda \mathbf{x}^{(0)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(1)}, \lambda \in [0, 1]\}. \quad (2.6.6)$$

Le segment \mathcal{S} n'est pas dégénéré si ces extrémités, $\mathbf{x}^{(0)}$ et $\mathbf{x}^{(1)}$, ne sont pas égales.

Définition 2.6.4. *L'intérieur relatif d'un segment \mathcal{S} , noté $\text{ri}(\mathcal{S})$, d'extrémités $\mathbf{x}^{(0)}$ et $\mathbf{x}^{(1)}$, deux points de \mathbb{R}^v , est l'ensemble des barycentres à coefficients strictement positifs de ces points :*

$$\mathcal{S} = \{\lambda \mathbf{x}^{(0)} + (1 - \lambda) \mathbf{x}^{(1)}, \lambda \in]0, 1[\}. \quad (2.6.7)$$

Théorème 2.6.3. *Soit $v \geq 1$, et $\mathcal{S} \subset \chi$ un segment non dégénéré inclus dans le domaine expérimental. Si un plan ξ est A_d -admissible :*

$$\text{Card}(\text{supp}(\xi) \cap \text{ri}(\mathcal{S})) \leq d - 1. \quad (2.6.8)$$

Démonstration 2.6.5. Nous renvoyons à [GH96].

Définition 2.6.5. *Une face \mathcal{F} d'un ensemble χ est un sous-ensemble convexe de χ tel que :*

$$\mathcal{S} \subset \chi \text{ est un segment et } \mathcal{F} \cap \text{ri}(\mathcal{S}) \neq \emptyset, \implies \mathcal{S} \subset \mathcal{F}. \quad (2.6.9)$$

Remarque 2.6.1. L'ensemble χ est une face de χ et chaque point extrémal de χ est une face de χ .

Il existe plusieurs liens entre un compact convexe χ et ses faces. La proposition suivante explicite l'un d'entre eux.

Proposition 2.6.2. *Si χ est un compact convexe de \mathbb{R}^v , alors :*

$$\chi = \bigcup_{\mathcal{F} \text{ face de } \chi} \text{ri}(\mathcal{F}). \quad (2.6.10)$$

Démonstration 2.6.6. Nous renvoyons à [GH96].

Corollaire 2.6.2. *Nous reprenons le contexte du théorème 2.6.3 et nous supposons de surcroît que le domaine expérimental χ est compact et convexe.*

- i- Si $d = 1$, alors les points support d'un plan A_1 -admissible sont les points extrêmes de χ .
- ii- Si $d = 2$, alors pour toute face \mathcal{F} de χ un plan A_2 -admissible a au plus un point support dans $\text{ri}(\mathcal{F})$.

Démonstration 2.6.7. Nous renvoyons à [GH96].

Pour obtenir des résultats plus précis nous étudions des domaines expérimentaux particuliers.

Définition 2.6.6. Le domaine expérimental \mathcal{C}_b est un v -hypercube symétrique centré en $\mathbf{0}$:

$$\mathcal{C}_b = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, |x_i| \leq b_i, 1 \leq i \leq v \right\}, \quad (2.6.11)$$

où $b_i \in]0, +\infty[$, $1 \leq i \leq v$.

L'ensemble des sommets de \mathcal{C}_b est \mathcal{V}_b avec

$$\mathcal{V}_b = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, |x_i| = \pm b_i, 1 \leq i \leq v \right\}. \quad (2.6.12)$$

Définition 2.6.7. Le domaine expérimental \mathcal{E}_H est un v -ellipsoïde centré en $\mathbf{0}$:

$$\mathcal{E}_H = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, \mathbf{x}' H \mathbf{x} \leq 1 \right\}, \quad (2.6.13)$$

où $H \in \mathcal{S}_k^{++}$.

La frontière de \mathcal{E}_H est $\partial\mathcal{E}_H$:

$$\partial\mathcal{E}_H = \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)' \in \mathbb{R}^v, \mathbf{x}' H \mathbf{x} = 1 \right\}. \quad (2.6.14)$$

Corollaire 2.6.3. Soit un modèle de régression multiple polynomiale de degré $d = 1$ sur $\chi = \mathcal{C}_b$ ou $\chi = \mathcal{E}_H$. Un plan ξ est A_1 -admissible si et seulement si :

$$\text{supp}(\xi) \subset \begin{cases} \mathcal{V}_b, & \text{si } \chi = \mathcal{C}_b, \\ \partial\mathcal{E}_H, & \text{si } \chi = \mathcal{E}_H. \end{cases} \quad (2.6.15)$$

Démonstration 2.6.8. Nous renvoyons à [GH96].

Remarque 2.6.2. Dans le cas d'un domaine \mathcal{E}_H avec $H = (1/r^2)I_v$, c'est-à-dire si χ est la boule de rayon r centrée en $\mathbf{0}$, la matrice des moments d'un plan faiblement invariant pour \mathcal{G}_{sp} et A_1 -admissible est $M^* = \text{Diag}\left(1, \frac{r^2}{v}, \dots, \frac{r^2}{v}\right)$. Il s'agit de la même matrice des moments que celle d'un plan isovariant et A_1 -admissible.

Ainsi tout plan sphérique est un plan A_1 -admissible si le domaine expérimental est si le support du plan est inclus dans la frontière de cette boule.

Dans la suite nous nous concentrons sur les résultats d'admissibilité concernant les domaines de type \mathcal{E}_H .

Corollaire 2.6.4. Soit un modèle de régression multiple polynomiale de degré $d = 2$, un domaine expérimental χ égal à \mathcal{E}_H et le groupe de transformations constitué de deux éléments, l'identité et la symétrie centrale par rapport à l'origine du repère.

- i- Si un plan ξ est faiblement invariant et A_2 -admissible alors $\text{supp}(\xi) \subset \mathcal{E}_H \cup \{\mathbf{0}\}$.

2.6 Admissibilité, invariance et modèles polynomiaux

-ii- Réciproquement, si un plan, non nécessairement faiblement invariant, ξ est tel que $\text{supp}(\xi) \subset \mathcal{E}_H \cup \{0\}$ alors il est A_2 -admissible.

Démonstration 2.6.9. Nous renvoyons à [GH96].

Le corollaire 2.6.4 justifie pleinement l'utilisation de plans comportant des points répartis sur une même sphère, éventuellement complétés par des points au centre pour un modèle de régression polynomiale multiple de degré 2 et un domaine expérimental de type boule ; le support du plan étant inclus dans la frontière de cette boule.

Corollaire 2.6.5. *Tout plan dont le support est contenu dans la sphère unité de \mathbb{R}^v est A_2 -admissible pour un domaine χ égal à la boule unité de \mathbb{R}^v .*

Démonstration 2.6.10. Nous renvoyons à [GH96].

Dans le cas d'un domaine expérimental de type cube centré en $\mathbf{0}$ et symétrique ou de la boule de rayon r centrée en $\mathbf{0}$, quelques résultats généraux concernant les modèles de degré supérieurs ou égaux 3 existent, voir [GH96]. Toutefois si nous faisons l'hypothèse supplémentaire que le plan est isovariant il est possible de démontrer le résultat que nous allons exposer dans la suite de cette section.

Proposition 2.6.3. *Soit un modèle polynomial complet de degré $d \geq 1$ sur la boule \mathcal{B}_r de rayon r centrée en $\mathbf{0}$ et le groupe de transformations \mathcal{G}_{orth} . Pour tout $\rho \in [0, r]$, l'ensemble des plans isovariants dont le support est inclus dans la sphère \mathcal{S}_ρ est non-vide et tous ces plans ont la même matrice des moments, noté $\overline{M}_{d,\rho}$. Nous avons de plus, pour tout plan ξ isovariant sur la boule \mathcal{B}_r la décomposition suivante pour la matrice de ses moments :*

$$M_d(\xi) = \sum_{\rho \in R(\xi)} \xi(\mathcal{S}_\rho) \overline{M}_{d,\rho}, \quad (2.6.16)$$

où $\xi(\mathcal{S}_\rho)$ est le poids total de tous les points du plan ξ appartenant à la sphère \mathcal{S}_ρ et $R(\xi)$ l'ensemble, fini, des rayons $\rho \in [0, r]$ tels que $\xi(\mathcal{S}_\rho) > 0$.

Démonstration 2.6.11. Fixons un $\rho \in [0, r]$. Pour tout $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{S}_\rho$, la \mathcal{G}_{orth} -orbite de \mathbf{x}_0 est égale à \mathcal{S}_ρ . Par conséquent :

$$\left\{ \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})', \mathbf{x} \in \mathcal{S}_\rho \right\} = \left\{ Q_g^* \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)' Q_g^*, g \in \mathcal{G}_{orth} \right\}. \quad (2.6.17)$$

Le théorème 2.3.1, montre qu'il existe une unique matrice $\overline{M} = \overline{M}_{d,\rho}$ avec $\overline{M}_{d,\rho} \in \text{Conv} \left\{ \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})', \mathbf{x} \in \mathcal{S}_\rho \right\}$ telle que $Q_g^* \overline{M} Q_g^* = \overline{M}$, pour tout $g \in \mathcal{G}_{orth}$.

Remarquons que toute combinaison convexe finie de matrices $\mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}(\mathbf{x})'$ où $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_\rho$ de somme \overline{M} est associée à un plan isovariant dont le support est inclus dans \mathcal{S}_ρ .

Considérons maintenant un plan ξ isovariant et dont le support est inclus dans \mathcal{B}_r . Nous avons

$$\xi = \sum_{\rho \in R(\xi)} \xi(\mathcal{S}_\rho) \xi_\rho \quad (2.6.18)$$

pour des plans ξ_ρ dont le support est inclus dans \mathcal{S}_ρ avec $\rho \in R(\xi)$. Par conséquent :

$$M_d(\xi) = \sum_{\rho \in R(\xi)} \xi(\mathcal{S}_\rho) M_d(\xi_\rho). \quad (2.6.19)$$

Pour tout $g \in \mathcal{Q}_{orth}$, $Q_g^* M_d(\xi_\rho) Q_g^{*'} = M_d(\xi_\rho^g)$ est la matrice des moments du plan ξ^g dont le support est également inclus dans la sphère \mathcal{S}_ρ . Par conséquent, la moyenne $\overline{M_d}(\xi_\rho)$ de $Q_g^* M_d(\xi_\rho) Q_g^{*'}$ sur \mathcal{Q}_{orth} appartient à l'enveloppe convexe des matrices des moments des plans dont le support est inclus dans la sphère \mathcal{S}_ρ . Il s'agit donc de la matrice des moments d'un plan isovariant dont le support est inclus dans la sphère \mathcal{S}_ρ et par conséquent : $\overline{M_d}(\xi_\rho) = \overline{M}_{d,\rho}$.

Nous utilisons alors le projecteur orthogonal \mathcal{P} de $\mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R})$ sur le sous-espace vectoriel des matrices invariantes pour l'action par congruence de \mathcal{Q}_{orth} . Son existence a été montrée dans le théorème 2.3.1. Nous avons $\overline{M}_{d,\rho} = \mathcal{P}(M_d(\xi_\rho))$, pour tout $\rho \in R(\xi)$ et $\mathcal{P}(M_d(\xi_\rho)) = M_d(\xi_\rho)$ car ξ est isovariant. Par conséquent tous les plans isovariants dont le support est inclus dans la sphère \mathcal{S}_ρ ont la même matrice des moments $\overline{M}_{d,\rho}$.

Par linéarité du projecteur \mathcal{P} , nous obtenons bien la décomposition annoncée.

Définition 2.6.8. Soit ξ un plan isovariant sur la boule \mathcal{B}_r . La multiplicité $m_\xi(\rho)$ d'un rayon $\rho \in R(\xi)$ est égale à :

$$m_\xi(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{si } \rho = r \\ 1, & \text{si } 0 < \rho < r \\ \frac{1}{2}, & \text{si } \rho = 0 \end{cases} . \quad (2.6.20)$$

Définition 2.6.9. Soit ξ un plan isovariant sur la boule \mathcal{B}_r . Le cardinal effectif γ_ξ de $R(\xi)$ est égal à :

$$\gamma_\xi = \sum_{\rho \in R(\xi)} m_\xi(\rho). \quad (2.6.21)$$

Théorème 2.6.4. Soit un modèle polynomial complet d'ordre $d \geq 1$ sur la boule \mathcal{B}_r . Si le plan ξ est isovariant et A_d -admissible alors :

$$\gamma_\xi \leq \frac{d-1}{2}. \quad (2.6.22)$$

Réciproquement, si ξ est plan, non nécessairement isovariant, tel que :

$$\gamma_\xi \leq \frac{d-1}{2}, \quad (2.6.23)$$

alors il est A_d -admissible.

Démonstration 2.6.12. Nous renvoyons à [GH96].

Corollaire 2.6.6.

-i- Si $d = 1$, $\gamma_\xi = 0$. Ainsi le support d'un plan isovariant et A_1 -admissible plan est inclus dans la frontière de la boule \mathcal{B}_r .

Réciproquement tout plan dont le support est inclus dans la sphère de rayon r est A_1 -admissible.

-ii- Si $d = 2$, $\gamma_\xi \leq 1/2$. Ainsi le support d'un plan isovariant et A_2 -admissible plan est :

- soit inclus dans la frontière de la boule \mathcal{B}_r ,

- soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et de l'origine $\mathbf{0}$.

2.7 Éléments de résolution d'un problème d'optimalité

Réciproquement si un plan vérifie l'une des conditions ci-dessus, il est A_2 -admissible.

- iii- Si $d = 3$, $\gamma_\xi \leq 1$. Ainsi le support d'un plan isovariant et A_3 -admissible plan est :
- soit inclus dans la frontière de la boule \mathcal{B}_r ,
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et de l'origine $\mathbf{0}$,
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$.

Réciproquement si un plan vérifie l'une des conditions ci-dessus, il est A_3 -admissible.

- iv- Si $d = 4$, $\gamma_\xi \leq 3/2$. Ainsi le support d'un plan isovariant et A_4 -admissible plan est :
- soit inclus dans la frontière de la boule \mathcal{B}_r ,
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et de l'origine $\mathbf{0}$,
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$,
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière, d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$ et d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$.
- Réciproquement si un plan vérifie l'une des conditions ci-dessus, il est A_4 -admissible.

Démonstration 2.6.13. Évident.

2.7. Éléments de résolution d'un problème d'optimalité

2.7.1. Reformulation et réduction du problème

Le problème de minimisation 2.2.9 peut être considérablement simplifié si nous pouvons nous servir de la propriété d'équivariance et en particulier des lemmes 2.3.3 et 2.4.1. Suivant [GH96], nous introduisons désormais un cadre plus général permettant de mettre en oeuvre ces réductions.

Soit $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ un espace de Hilbert de dimension finie. Nous utiliserons soit $\mathcal{H} = \mathcal{S}_k$ muni du produit scalaire $\langle A, B \rangle = \text{tr}(AB)$, où A et B sont deux éléments de \mathcal{S}_k , soit $\mathcal{H} = \mathbb{R}^l$ muni du produit scalaire canonique. Soient \mathcal{M} et \mathcal{A} des sous-ensembles convexes de \mathcal{H} tels que \mathcal{M} est compact et $\mathcal{M} \cap \text{int}(\mathcal{A}) \neq \emptyset$, où $\text{int}(\mathcal{A})$ est l'intérieur de \mathcal{A} et Φ est une fonction convexe définie sur \mathcal{A} et à valeurs réelles. Le problème de minimisation 2.2.9 revient alors à :

$$\min_{m \in \mathcal{M} \cap \mathcal{A}} \Phi(m). \quad (2.7.1)$$

Or la proposition 2.2.1 permet de ne considérer que des sous-ensembles \mathcal{M} du type :

$$\mathcal{M} = \text{Conv} \left\{ \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})', \mathbf{x} \in \mathbf{X} \right\}, \quad (2.7.2)$$

où $\{m(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbf{X}\}$ est un ensemble donné de points $m(\mathbf{x})$ de \mathcal{H} .

Si nous souhaitons reconstruire un plan ξ à partir d'un $m \in \mathcal{M}$, il est primordial de

connaître, pour chaque des $m(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbf{X}$, un plan qui lui soit associé. Nous le notons $\overline{\xi_{\mathbf{x}}}$. En effet dans ce cas, pour déterminer ξ il suffit de trouver :

$$r \in \mathbb{N}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r \in \mathbf{X}, w_1, \dots, w_r > 0, \text{ avec } \sum_{i=1}^r w_i = 1, \quad (2.7.3)$$

tels que :

$$\sum_{i=1}^r w_i m(\mathbf{x}_i) = m. \quad (2.7.4)$$

Ainsi un plan ξ associé à un $m \in \mathcal{M}$ est le mélange de plans : $\sum_{i=1}^r w_i \overline{\xi_{\mathbf{x}_i}}$. Dans le cas où l'ensemble $\{m(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbf{X}\}$ a une structure simple, Gaffke et Heiligers, [GH96], ont proposé un algorithme permettant de résoudre le problème d'optimalité posé. Plus précisément, ils supposent que tout problème d'extremum linéaire,

$$\min_{\{\mathbf{x} \in \mathbf{X}\}} \langle a, m(\mathbf{x}) \rangle, \quad (2.7.5)$$

doit être facilement résoluble sur cet ensemble pour tout $a \in \mathcal{H}$ donné.

2.7.2. Cas d'un plan isovariant pour un modèle d'ordre $d, d \geq 1$

Gaffke et Heiligers s'intéressent au cas des plans \mathcal{G}_{sp} -invariants et des plans isovariants, cf. [GH96], où ils reprennent certains des résultats qu'ils ont obtenus dans [GH95b]. Nous ne considérons que ces derniers et montrons, que les plans isovariants sont caractérisés par un nombre réduit de paramètres. Cette réduction a déjà été utilisée, par exemple, par Galil et Kiefer, dans [GK79], dans le contexte des plans servant à faire de l'extrapolation et de des plans Φ_p -optimaux pour un modèle de régression cubique sur la boule v -dimensionnelle. Nous démontrerons également une caractérisation de l'isovariance à l'aide de la matrice génératrice des moments. Nous nous servirons de cette caractérisation dans le chapitre 5.

Soit \mathcal{X} un domaine expérimental égal à la boule centrée en $\mathbf{0}$ et de rayon $r > 0$ et un modèle de régression multiple isovariant de degré $d \geq 1$.

Nous supposons que, pour le problème d'optimalité considéré, la restriction à l'ensemble des plans isovariants est justifiée comme c'est le cas pour les critères de D -optimalité et de I -optimalité.

Le lemme 2.6.3 indique que la matrice des moments d'un plan isovariant se décompose de la manière suivante :

$$M_d(\xi) = \sum_{\rho \in R(\xi)} \xi(\mathcal{S}_\rho) \overline{M}_{d,\rho}, \quad (2.7.6)$$

Les matrices $\overline{M}_{d,\rho}$ vérifient la relation :

$$\overline{M}_{d,\rho} = D_\rho \overline{M}_{d,1} D_\rho \quad (2.7.7)$$

où D_ρ est la matrice diagonale d'ordre $\binom{v+d}{d}$ avec $D_{\rho_{\alpha,\alpha}} = \rho^{|\alpha|}, |\alpha| \leq d$.

Les matrices des moments des plans isovariants ξ sont donc paramétrées de manière

2.7 Éléments de résolution d'un problème d'optimalité

linéaire par le vecteur :

$$m(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\rho \in R(\boldsymbol{\xi})} \boldsymbol{\xi}(\mathcal{S}_\rho) m(\rho), \quad (2.7.8)$$

avec $m(\rho) = (\rho^2, \dots, \rho^{2d})'$, pour $0 \leq \rho \leq r$.

Lorsque $\boldsymbol{\xi}$ décrit l'ensemble des plans isovariants, $m(\boldsymbol{\xi})$ décrit \mathcal{M} où :

$$\mathcal{M} = \text{Conv} \{m(\rho), 0 \leq \rho \leq r\}. \quad (2.7.9)$$

Une résolution explicite d'un problème d'optimisation portant sur les plans isovariants nécessite donc le calcul du terme général de la matrice $\overline{M}_{d,\rho}$. Comme nous l'avons rappelé ci-dessus, il suffit de déterminer le terme général de la matrice $\overline{M}_{d,1}$.

Définition 2.7.1. *Nous définissons la notion de parité pour les moments d'un plan $\boldsymbol{\xi}$.*

- un moment d'ordre $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \dots, \gamma_v)$, $\mu_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi})$, est dit pair si tous les γ_i sont pairs,
- un moment d'ordre $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \dots, \gamma_v)$, $\mu_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi})$, est dit impair si un au moins des γ_i est impair.

Définition 2.7.2. *La fonction génératrice des moments d'un plan $\boldsymbol{\xi}$, pour un modèle polynomial complet A_d de degré d , notée $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est définie par :*

$$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' \mathbf{X}\right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.7.10)$$

Ainsi dans le cas où les poids sont tous égaux :

$$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \left(1 + \mathbf{t}' \mathbf{x}_i\right)^{2d}, \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.7.11)$$

Proposition 2.7.1. *Soit $\boldsymbol{\xi}$ un plan expérimental inclus dans le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$. Le coefficient d'un monôme $\mathbf{t}^{\boldsymbol{\gamma}} = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$ de $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, la fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour un modèle polynomial complet A_d de degré d , est égal à :*

$$\frac{(2d)!}{\prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\boldsymbol{\gamma}|)!} \mu_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi}), \quad (2.7.12)$$

où $|\boldsymbol{\gamma}| = \sum_{i=1}^v \gamma_i \leq 2d$.

Démonstration 2.7.1. C'est une application de la formule du multinôme.

Proposition 2.7.2. *Le terme général de la matrice $\overline{M}_{d,1}$ est égal aux moments $\mu_{\boldsymbol{\gamma}}^0$, avec $\boldsymbol{\gamma} \leq 2d$, de la distribution uniforme sur la sphère unité de \mathbb{R}^v . Plus précisément :*

- tous les moments $\mu_{\boldsymbol{\gamma}}^0$ impairs sont nuls,
- les moments $\mu_{\boldsymbol{\gamma}}^0 = [1^{\gamma_1}, 2^{\gamma_2}, \dots, v^{\gamma_v}]^0$ pairs respectent les relations :

$$\mu_{\boldsymbol{\gamma}}^0 = \frac{\lambda_{|\boldsymbol{\gamma}|} \prod_{i=1}^v (\gamma_i)!}{2^{|\boldsymbol{\gamma}|/2} \prod_{i=1}^v (\gamma_i/2)!}, \quad (2.7.13)$$

avec

$$\lambda_{|\gamma|} = \frac{a_{|\gamma|} 2^{|\gamma|/2} (|\gamma|/2)! (2d - |\gamma|)!}{(2d)!}, \quad (2.7.14)$$

où $|\gamma| = \sum_{i=1}^v \gamma_i$ et les $a_{|\gamma|}$, définis pour $0 \leq |\gamma| \leq 2d$ et $|\gamma|$ pair, sont des nombres réels. Nous avons alors l'identité :

$$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \sum_{j=1}^d a_{2j} \left(\sum_{i=1}^k t_i^2 \right)^j, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.7.15)$$

Démonstration 2.7.2. La matrice $\overline{M}_{d,1}$ est égale à la matrice des moments d'un plan isovariant dont le support est inclus dans la sphère unité de \mathbb{R}^v et dont les poids sont tous égaux. Considérons un tel plan $\boldsymbol{\xi}$.

$$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \left(1 + g(\mathbf{t})' \mathbf{x}_i \right)^{2d}, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}_{orth} \quad (2.7.16)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \left(1 + \mathbf{t}' g' \mathbf{x}_i \right)^{2d}, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}_{orth} \quad (2.7.17)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \left(1 + \mathbf{t}' g^{-1} \mathbf{x}_i \right)^{2d}, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}_{orth} \quad (2.7.18)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(g^{-1}(\boldsymbol{\xi}))(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}_{orth}. \quad (2.7.19)$$

Puisque ce plan est isovariant les moments sont invariants pour l'action du groupe orthogonal sur les points support du plan et de ce fait $\mu_{\gamma}(\boldsymbol{\xi}) = \mu_{\gamma}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})$ pour $|\gamma| = \sum_{i=1}^v \gamma_i \leq 2d$ et tout $g \in \mathcal{G}_{orth}$. La proposition 2.7.1 donne l'égalité des coefficients des monômes $\mathbf{t}^{\gamma} = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$, pour $|\gamma| = \sum_{i=1}^v \gamma_i \leq 2d$, implique celle des fonctions génératrices des moments $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ et $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})$ pour tout $g \in \mathcal{G}_{orth}$. D'où finalement nous avons :

$$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}_{orth}. \quad (2.7.20)$$

La fonction génératrice des moments est donc une fonction invariante par toute transformation du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v : c'est une fonction radiale et par conséquent il existe des nombres réels a_0, a_2, \dots, a_{2d} tels que :

$$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{j=1}^d a_{2j} \left(\sum_{i=1}^k t_i^2 \right)^j. \quad (2.7.21)$$

Si le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ est tel que les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à $2d$ forment une famille libre, par exemple si $\boldsymbol{\chi}$ est d'intérieur non vide ce qui est généralement le cas dans le contexte de l'isovariance, puisqu'alors $\boldsymbol{\chi}$ est une boule de \mathbb{R}^v de rayon non nul centrée en 0, nous pouvons identifier les coefficients des monômes des deux membres de l'équation 2.7.21. En particulier nous remarquons que si les moments sont impairs alors les coefficients associés du membre de droite de l'équation 2.7.21 sont nuls et si les moments sont pairs alors la formule du multinôme donne la valeur du coefficient de $\mathbf{t}^{\gamma} = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$ pour le membre de droite de l'équation 2.7.21 qui vaut :

$$\frac{a_{|\gamma|} (|\gamma|/2)!}{\prod_{i=1}^v (\gamma_i/2)!}. \quad (2.7.22)$$

2.8 Fonction génératrice des moments et invariance faible

La proposition 2.7.1 donne alors :

$$\frac{(2d)!}{v \prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) = \frac{a_{|\gamma|} (|\gamma|/2)!}{v \prod_{i=1}^v (\gamma_i/2)!}, \quad \text{si } \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) \text{ est un moment pair, (2.7.23)}$$

$$\frac{(2d)!}{v \prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) = 0, \quad \text{si } \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) \text{ est un moment impair, (2.7.24)}$$

ce qui est bien équivalent au résultat annoncé.

Remarque 2.7.1. Nous sommes ainsi ramenés au problème de trouver des plans isovariants dont le support est une sphère. Or la construction de dispositifs optimaux proposée par Gaffke et Heiligers, [GH96], nécessite un nombre de points pour le plan $\boldsymbol{\xi}$ proportionnel au nombre de poids non nuls. Il est donc particulièrement opportun de chercher à construire des plans isovariants de cardinaux variés. Plus le planificateur dispose de tels plans, plus il peut être à même de construire des plans optimaux ayant un nombre de points support en adéquation avec ses besoins, en particulier avec les contraintes auxquelles il est soumis et qui portent généralement sur le nombre maximal d'expériences qu'il peut réaliser.

Remarque 2.7.2. La première étape de la preuve de la proposition 2.7.2 est originale. Son principal avantage est de ne pas avoir à déterminer de manière explicite l'action induite sur la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ par celle du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v , \mathcal{G}_{orth} , sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$. Par conséquent il n'est pas nécessaire par exemple de recourir aux notations schläffliennes à la différence de la preuve proposée dans [MM02]. En effet, puisque le domaine expérimental que nous considérons est une boule centrée en l'origine de \mathbb{R}^v et de rayon non nul, la connaissance de la fonction génératrice des moments $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ pour un modèle polynomial complet A_d de degré d du plan $\boldsymbol{\xi}$ est équivalente à celle de la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ analysé à l'aide d'un modèle polynomial complet A_d de degré d . Nous montrons alors que l'invariance de la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour l'action par congruence du groupe \mathcal{Q}_{orth} induite par l'action linéaire du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v , \mathcal{G}_{orth} , sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\xi}$ est alors équivalente à l'invariance de la fonction génératrice des moments $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ par l'action linéaire du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v , \mathcal{G}_{orth} .

2.8. Fonction génératrice des moments et invariance faible

Il existe trois directions pour généraliser le résultat classique de la proposition 2.7.2 :

- i- Étudier le lien entre l'invariance de la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour l'action par congruence du groupe \mathcal{Q} induite par l'action linéaire d'un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v , \mathcal{G} , sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\xi}$ et celle de la fonction génératrice des moments $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ par l'action linéaire du sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v , \mathcal{G} .

- ii- S'intéresser au même problème que le précédent pour le cas d'un modèle polynomial A de degré d qui n'est pas nécessairement complet.
- iii- Étudier le lien entre l'invariance de la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour l'action par congruence du groupe \mathcal{Q} induite par l'action linéaire d'un sous-groupe compact des endomorphismes de \mathbb{R}^v , \mathcal{G} , sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\xi}$ et celle d'une fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ appropriée par l'action linéaire du sous-groupe compact des endomorphismes de \mathbb{R}^v , \mathcal{G} .

2.8.1. Invariance de la fonction génératrice des moments d'un modèle polynomial par un sous-groupe du groupe orthogonal

Nous souhaitons étendre le résultat de la proposition 2.7.2 au cas d'une action linéaire induite par un sous-groupe d'un groupe orthogonal. Pour cela commençons par définir la fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour un modèle polynomial A de degré d , introduit dans la définition 2.3.4, ainsi que la notion d'invariance de la fonction génératrice des moments.

Dans la fin de ce chapitre, tous les groupes \mathcal{G} considérés agissent linéairement sur $\boldsymbol{\chi}$. Nous confondrons ainsi le groupe \mathcal{G} et le groupe de matrices $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ décrivant l'action linéaire de \mathcal{G} sur $\boldsymbol{\chi}$.

Définition 2.8.1. *La fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ inclus dans le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ analysé à l'aide d'un modèle de régression polynomiale A de degré d , $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$, est définie par :*

$$\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma} \frac{(2d)!}{v \prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\boldsymbol{\gamma}|)!} \mu_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{t}^{\boldsymbol{\gamma}}, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \quad (2.8.1)$$

où l'ensemble $\Gamma = \{\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}, (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \in A^2\}$.

Remarque 2.8.1. Lorsque le modèle polynomial est complet de degré d , la proposition 2.7.1 nous assure que les définitions 2.7.2 et 2.8.1 sont bien confondues.

Lemme 2.8.1. *Soient un plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$ inclus dans le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ analysé à l'aide d'un modèle de régression polynomiale A de degré d et l'ensemble $\Gamma = \{\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}, (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \in A^2\}$. Soit ζ_{Γ} le projecteur de la \mathbb{R} -algèbre des fonctions polynomiales sur $\boldsymbol{\chi}$ dont une base du noyau est donnée par les fonctions polynomiales dont les degrés n'appartiennent pas à A et une base de l'image par les fonctions polynomiales dont les degrés appartiennent à A . La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$, est égale à :*

$$\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \zeta_{\Gamma} (\text{MGF}^{A^d}(\boldsymbol{\xi}))(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.8.2)$$

Démonstration 2.8.1.

$$\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \sum_{\gamma \in \Gamma} \frac{(2d)!}{v \prod_{i=1} (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{t}^\gamma, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.3)$$

$$= \sum_{\gamma \in \Gamma} \frac{(2d)!}{v \prod_{i=1} (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) \zeta_\Gamma(\mathbf{t} \rightarrow \mathbf{t}^\gamma)(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.4)$$

$$= \sum_{|\gamma| \leq 2d} \frac{(2d)!}{v \prod_{i=1} (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) \zeta_\Gamma(\mathbf{t} \rightarrow \mathbf{t}^\gamma)(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.5)$$

$$= \zeta_\Gamma(\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}))(\mathbf{t}). \quad (2.8.6)$$

Définition 2.8.2. Soient un groupe $\mathcal{G} = \{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ qui agit linéairement sur \mathcal{X} et un modèle polynomial A sur un domaine expérimental \mathcal{X} . La fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$, $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -invariante si :

$$\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.7)$$

Lemme 2.8.2. Si le groupe $\mathcal{G} = \{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v alors la transposition est une bijection de l'ensemble \mathcal{G} dans lui-même.

Démonstration 2.8.2. La démonstration est immédiate.

Lemme 2.8.3. Soient un sous-groupe $\mathcal{G} = \{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v qui agit linéairement sur \mathcal{X} et un modèle polynomial A sur un domaine expérimental \mathcal{X} . La fonction génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$, $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -invariante si et seulement si elle est \mathcal{G}' -invariante, avec $\mathcal{G}' = \{U_g, g \in \mathcal{G}\}$.

Démonstration 2.8.3. Il s'agit d'une application du lemme 2.8.2.

Théorème 2.8.1. Considérons un domaine expérimental \mathcal{X} inclus dans \mathbb{R}^v . Soit un modèle polynomial A de degré d (\mathcal{G}, \mathcal{Q})-équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur \mathcal{X} . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur \mathcal{X} , est un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v et que :

$$\zeta_\Gamma(\mathbf{t} \rightarrow g(\mathbf{t})^\gamma)(\mathbf{t}) = g(\mathbf{t})^\gamma, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall \gamma \in \Gamma \setminus A, \forall g \in \mathcal{G}, \quad (2.8.8)$$

$$\zeta_\Gamma(\mathbf{t} \rightarrow g(\mathbf{t})^\gamma)(\mathbf{t}) = 0, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall \gamma \in \Gamma, \forall g \in \mathcal{G}, \quad (2.8.9)$$

où l'ensemble $\Gamma = \{\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}, (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \in A^2\}$. L'invariance de la fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$, pour l'action du groupe \mathcal{G} est équivalente à celle de la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ pour l'action du groupe \mathcal{G} .

Démonstration 2.8.4. Supposons que le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant. Les moments sont invariants pour l'action du groupe \mathcal{G} sur les points support du plan et de ce fait $\mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}) = \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})$ pour tout $\gamma \in \Gamma = \{\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}, (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \in A^2\}$ et tout $g \in \mathcal{G}$. Nous avons alors par définition l'égalité entre les deux fonctions génératrices des moments :

$$\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi}) = \text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}}), \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.10)$$

Nous appliquons le lemme 2.8.1 :

$$\zeta_{\Gamma}(\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}))(\mathbf{t}) = \zeta_{\Gamma}(\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}}))(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.8.11)$$

En utilisant la démonstration du théorème 2.7.2 nous aboutissons à l'égalité suivante :

$$\zeta_{\Gamma}(\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}}))(\mathbf{t}) = \zeta_{\Gamma}(\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t} \rightarrow g(\mathbf{t}))) (\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.12)$$

Nous avons alors pour tout $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^v$ et tout $g \in \mathcal{G}$:

$$\zeta_{\Gamma}(\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t} \rightarrow g(\mathbf{t}))) (\mathbf{t}) = \sum_{|\boldsymbol{\gamma}| \leq 2d} \frac{(2d)!}{\prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\boldsymbol{\gamma}|)!} \mu_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\xi}) \zeta_{\Gamma}(\mathbf{t} \rightarrow g(\mathbf{t})^{\boldsymbol{\gamma}})(\mathbf{t}). \quad (2.8.13)$$

La propriété caractéristique de l'équivariance du modèle polynomial A , montrée dans le théorème 2.3.2, implique que pour tout $\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma$ l'égalité suivante est vraie :

$$\zeta_{\Gamma}(\mathbf{t} \rightarrow g(\mathbf{t})^{\boldsymbol{\gamma}})(\mathbf{t}) = g(\mathbf{t})^{\boldsymbol{\gamma}}, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.14)$$

En utilisant les hypothèses concernant ζ_{Γ} nous obtenons que :

$$\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.15)$$

Il suffit alors d'appliquer le lemme 2.8.3 pour prouver l'invariance de la fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^A(\boldsymbol{\xi})$, pour l'action du groupe \mathcal{G} . L'implication réciproque se montre de manière similaire.

Remarque 2.8.2. Si nous considérons un modèle polynomial complet A_d , alors l'application ζ_{Γ} est l'identité. Nous en déduisons le corollaire 2.8.1 suivant.

Corollaire 2.8.1. *Considérons un domaine expérimental \mathcal{X} inclus dans \mathbb{R}^v . Soit un modèle polynomial A_d complet de degré d (\mathcal{G}, \mathcal{Q})–équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur \mathcal{X} . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur \mathcal{X} , est un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v . L'invariance de la fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, pour l'action du groupe \mathcal{G} est équivalente à celle de la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ pour l'action du groupe \mathcal{G} .*

Démonstration 2.8.5. La remarque 2.8.2 permet d'appliquer le théorème 2.8.1.

Remarque 2.8.3. Nous utiliserons le corollaire 2.8.1 du chapitre 5 pour construire des plans \mathcal{G} –faiblement pour \mathcal{G} un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v .

2.8.2. Invariance de la fonction génératrice des moments d'un modèle polynomial complet par un sous-groupe compact

Nous nous intéresserons dans le paragraphe au lien entre l'invariance de la fonction génératrice des moments pour un modèle polynomial complet A_d de degré d pour l'action d'un groupe de matrices compact.

Remarque 2.8.4. Dans la démonstration du théorème 2.7.2, nous avons essentiellement tiré parti du fait que \mathcal{G}_{orth} est le groupe orthogonal de \mathbb{R}^v . Or, comme nous l'avons montré dans le lemme 2.3.2, pour tout modèle de régression $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour un groupe \mathcal{Q} compact il existe un produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$, défini par une matrice symétrique définie positive E , tel que \mathcal{Q} est un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^k muni du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$. Cette propriété est uniquement liée au fait que le groupe \mathcal{Q} est un groupe compact d'endomorphismes d'un espace vectoriel de dimension finie, voir par exemple [MT86] et [Ale99] puisque dans ce cas tout groupe de matrices d'ordre v compact est conjugué à un sous-groupe compact du groupe orthogonal \mathcal{O}_v .

Si l'action du groupe compact, \mathcal{G} , se traduit par une action linéaire qui n'est pas associée à un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v , l'invariance faible du plan se traduit par l'invariance d'une fonction génératrice des moments particulière que nous allons introduire à la définition 2.8.3.

Définition 2.8.3. Soient un modèle polynomial complet de degré d et E une matrice symétrique réelle d'ordre k définie positive. La fonction E –génératrice des moments du modèle polynomial complet A_d de degré d , $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est définie par la relation suivante :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[(1 + \langle \mathbf{t}, \mathbf{X} \rangle_E)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \quad (2.8.16)$$

où $\langle \mathbf{t}, \mathbf{x} \rangle_E = \mathbf{t}' E \mathbf{x}$ pour tout (\mathbf{t}, \mathbf{x}) de $\mathbb{R}^v \times \mathbb{R}^v$.

Remarque 2.8.5. La fonction I_v –génératrice des moments est égale à la fonction génératrice des moments du modèle polynomial complet de degré d telle qu'elle a été introduite dans la définition 2.7.2. Elle est adaptée à l'étude des invariances par un sous-groupe du groupe orthogonal puisque dans ce cas nous pouvons prendre pour matrice E la matrice identité d'ordre v .

Lemme 2.8.4. Soient un modèle polynomial complet de degré d et E une matrice symétrique réelle d'ordre k définie positive. La fonction E –génératrice des moments du plan $\boldsymbol{\xi}$ vérifie les propriétés suivantes :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(E\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.17)$$

$$= \text{MGF}_E^{A_d}(E^{1/2}\boldsymbol{\xi})(E^{1/2}\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.18)$$

$$= \text{MGF}_E^{A_d}(E\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.8.19)$$

Démonstration 2.8.6. Puisque E est une matrice symétrique réelle d'ordre k définie positive, il existe une unique matrice réelle d'ordre k définie positive F telle que $E = F^2$.

Nous la notons $E^{1/2}$. Les relations suivantes découlent directement de la définition 2.8.3 :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \quad (2.8.20)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (E\mathbf{t})' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.21)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(E\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.8.22)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (E\mathbf{t})' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.23)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (E^{1/2}\mathbf{t})' E^{1/2} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.24)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(E^{1/2}\boldsymbol{\xi})(E^{1/2}\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.25)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (E^{1/2}\mathbf{t})' E^{1/2} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.26)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' (E\mathbf{X}) \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.27)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(E\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.8.28)$$

Proposition 2.8.1. *Soit un modèle polynomial complet A_d de degré d (\mathcal{G}, \mathcal{Q})–équivalent pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur $\boldsymbol{\chi}$. Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur $\boldsymbol{\chi}$, est compact. Soit E l'une des matrices symétriques réelles définies positives telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(E)$, pour l'existence de E voir la remarque 2.8.4. Nous avons la relation suivante :*

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.29)$$

Démonstration 2.8.7.

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(U_g \mathbf{t}) \quad (2.8.30)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (EU_g \mathbf{t})' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.31)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' U_g' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.32)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E U_g^{-1} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.33)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E U_{g^{-1}} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.34)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}}} \left[\left(1 + (E\mathbf{t})' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.35)$$

$$= \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.36)$$

Remarque 2.8.6. Lorsque le groupe \mathcal{G} est un sous-groupe du groupe orthogonal nous pouvons prendre $E = I_v$. Nous retrouvons le résultat d'invariance que nous avons établi précédemment dans le corollaire 2.8.1.

2.8 Fonction génératrice des moments et invariance faible

Définition 2.8.4. Soient un groupe $\mathcal{G} = \{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ qui agit linéairement sur χ et un modèle polynomial complet A_d sur un domaine expérimental χ . La fonction E –génératrice des moments du plan ξ , $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, est \mathcal{G} –invariante si :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E^{A_d}(\xi)(\mathbf{t}), \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.37)$$

Nous nous intéressons maintenant au lien entre l’invariance faible du plan et celle de la fonction E –génératrice des moments. Nous souhaitons établir un résultat analogue au corollaire 2.8.1. Nous commençons par le lemme 2.8.7.

Remarque 2.8.7. Soit χ un domaine expérimental inclus dans \mathbb{R}^v . Le plan expérimental ξ^A , image d’un plan expérimental ξ inclus dans le domaine expérimental χ par une matrice A inversible n’est pas nécessairement associée à un plan expérimental appartenant au domaine expérimental χ . En effet l’image du support du plan expérimental ξ par l’application A n’est pas nécessairement incluse dans χ . Par contre la bijectivité de A nous assure que les poids du plan ξ seront identiques à ceux de ξ^A . Toutefois comme nous considérons des modèles polynomiaux, ceux-ci sont définis sur \mathbb{R}^v et de ce fait il est encore possible de définir la matrice des moments du plan ξ^A . Si le domaine expérimental χ est compact, nous pouvons toujours trouver $\lambda > 0$ tel que $\xi^A \subset \lambda\chi$ ou sinon prendre $\chi = \mathbb{R}^v$. Appelons χ^A ce second domaine expérimental que nous ne précisons dans la suite. En effet nous ne considérons que des domaines expérimentaux d’intérieur non vide et un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Il est alors possible de montrer que, si un modèle polynomial est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour un domaine expérimental χ , ce modèle polynomial est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour le domaine expérimental χ^A . Ceci nous permet alors de chercher une relation entre l’invariance faible du plan ξ et celle du plan ξ^A . Il s’agit de l’objet du lemme suivant 2.8.5.

Lemme 2.8.5. Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d’intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l’action linéaire de \mathcal{G} sur χ , est compact. Soit E l’une des matrices symétriques réelles définies positives telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(E)$, pour l’existence de E voir la remarque 2.8.4. Le plan ξ^E , image du plan ξ par la matrice E , est \mathcal{G} –faiblement invariant si et seulement si le plan ξ est \mathcal{G}' –faiblement invariant, avec $\mathcal{G}' = \{U'_g, g \in \mathcal{G}\}$.

Démonstration 2.8.8. L’action linéaire d’une matrice A sur \mathbb{R}^v induit l’action linéaire de l’opérateur Q_A sur la \mathbb{R} –algèbre des polynômes à v indéterminées, $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, suivante :

$$Q_A(P) = P(A\mathbf{X}), \quad \forall P \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]. \quad (2.8.38)$$

L’application qui à la matrice A du groupe linéaire de \mathbb{R}^v associe l’opérateur $Q_{A^{-1}}$ est un morphisme de groupes. Par conséquent, si la matrice A est inversible alors il en va de même de l’opérateur Q_A .

L’opérateur Q_A conserve le degré total d’un polynôme. Par conséquent sa restriction à l’espace vectoriel $\mathbb{R}_d[x_1, \dots, x_v]$ des polynômes en v indéterminées de degré au plus d est un isomorphisme. Nous notons cet isomorphisme Q_A^d .

Comme le domaine expérimental χ est d’intérieur non vide, l’action de l’opérateur Q_A sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ s’identifie avec l’action linéaire induite par la matrice A sur les fonctions polynomiales définies sur ξ suivante :

$$Q_A(P)(\mathbf{x}) = P(E\mathbf{x}), \quad \forall (P, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] \times \chi. \quad (2.8.39)$$

Nous avons en particulier pour le modèle polynomial complet de degré d et la matrice E symétrique définie positive de l'énoncé la relation suivante :

$$Q_E(\mathbf{f}(\mathbf{x})) = \mathbf{f}(E\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}. \quad (2.8.40)$$

Nous en déduisons que :

$$M(\boldsymbol{\xi}^E) = \sum_{i=1}^r \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(E\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(E\mathbf{x}_i)' \quad (2.8.41)$$

$$= \sum_{i=1}^r \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i) Q_E^d \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)' Q_E^{d'} \quad (2.8.42)$$

$$= Q_E^d \left(\sum_{i=1}^r \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)' \right) Q_E^{d'} \quad (2.8.43)$$

$$= Q_E^d M(\boldsymbol{\xi}) Q_E^{d'}. \quad (2.8.44)$$

D'autre part nous avons les égalités suivantes :

$$M((\boldsymbol{\xi}^E)^g) = M(U_g \boldsymbol{\xi}^E) \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.45)$$

$$= M(U_g E \boldsymbol{\xi}) \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.46)$$

$$= M(E U_{g^{-1}}' \boldsymbol{\xi}) \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.47)$$

$$= Q_E^d M(U_{g^{-1}}' \boldsymbol{\xi}) Q_E^{d'} \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.48)$$

Comme la matrice E et donc la matrice Q_E^d est inversible, nous avons les équivalences suivantes :

$$M((\boldsymbol{\xi}^E)^g) = M(\boldsymbol{\xi}^E) \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.49)$$

$$\Updownarrow$$

$$Q_E^d M(U_{g^{-1}}' \boldsymbol{\xi}) Q_E^{d'} = Q_E^d M(\boldsymbol{\xi}) Q_E^{d'} \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.50)$$

$$\Updownarrow$$

$$M(U_{g^{-1}}' \boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.51)$$

$$\Updownarrow$$

$$M(\boldsymbol{\xi}^g) = M(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall g \in \mathcal{G}'. \quad (2.8.52)$$

Proposition 2.8.2. *Considérons un domaine expérimental \mathcal{X} inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur \mathcal{X} . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur \mathcal{X} , est compact. Soit E l'une des matrices symétriques réelles définies positives telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(E)$, pour l'existence de E voir la remarque 2.8.4. Le plan $\boldsymbol{\xi}^E$ est \mathcal{G}' -faiblement invariant, avec $\mathcal{G}' = \{U_g', g \in \mathcal{G}\}$, si et seulement si la fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -invariante.*

Démonstration 2.8.9. Une application de la proposition 2.8.1 indique :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.53)$$

2.8 Fonction génératrice des moments et invariance faible

Nous considérons l'image du plan $\boldsymbol{\xi}$ par l'application linéaire de matrice E , que nous notons $\boldsymbol{\xi}^E$.

$$\text{MGF}^{A_d}(E\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.54)$$

$$= \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.55)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(E\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.56)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(EU_{g^{-1}}\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.57)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(U'_g E\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.58)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(U'_g \boldsymbol{\xi}^E)(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.59)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}((\boldsymbol{\xi}^E)^{g'})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.60)$$

Nous pouvons alors appliquer la proposition 2.7.1 et en déduire que, pour $|\gamma| = \sum_{i=1}^v \gamma_i \leq 2d$, le coefficient d'un monôme $\mathbf{t}^\gamma = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$ de $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t}))$ est égal à :

$$\frac{(2d)!}{\prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma((\boldsymbol{\xi}^E)^{g'}). \quad (2.8.61)$$

Nous avons également :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}) = \text{MGF}(E\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v \quad (2.8.62)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^E)(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v. \quad (2.8.63)$$

Nous pouvons alors appliquer la proposition 2.7.1 et en déduire que, pour $|\gamma| = \sum_{i=1}^v \gamma_i \leq 2d$, le coefficient d'un monôme $\mathbf{t}^\gamma = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$ de $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t})$ est égal à :

$$\frac{(2d)!}{\prod_{i=1}^v (\gamma_i)! (2d - |\gamma|)!} \mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}^E). \quad (2.8.64)$$

Supposons que la fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -invariante. Ceci se traduit par l'égalité suivante :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.65)$$

L'égalité 2.8.65 implique alors que les deux expressions 2.8.64 et 2.8.61 sont égales.

$$\mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}^E) = \mu_\gamma((\boldsymbol{\xi}^E)^{g'}), \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.66)$$

Par conséquent le plan $\boldsymbol{\xi}^E$ est \mathcal{G}' -faiblement invariant, avec $\mathcal{G}' = \{U'_g, g \in \mathcal{G}\}$.

Réciproquement supposons que, pour $\mathcal{G}' = \{U'_g, g \in \mathcal{G}\}$, le plan $\boldsymbol{\xi}^E$ est \mathcal{G}' -faiblement invariant.

$$\mu_\gamma(\boldsymbol{\xi}^E) = \mu_\gamma((\boldsymbol{\xi}^E)^{g'}), \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (2.8.67)$$

Nous en déduisons que, pour $|\gamma| = \sum_{i=1}^v \gamma_i \leq 2d$, le coefficient d'un monôme $\mathbf{t}^\gamma = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$ de $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^E)(\mathbf{t})$ est égal au coefficient d'un monôme $\mathbf{t}^\gamma = t_1^{\gamma_1} \times \dots \times t_v^{\gamma_v}$ de $\text{MGF}_E^{A_d}((\boldsymbol{\xi}^E)^{g'})(\mathbf{t})$. Par conséquent les deux fonctions génératrices des moments

$\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^E)$ et $\text{MGF}^{A_d}((\boldsymbol{\xi}^E)^{g'})$ sont égales. Ainsi les deux fonctions génératrices des moments $\text{MGF}^{A_d}(E\boldsymbol{\xi})$ et $\text{MGF}^{A_d}(EU_{g^{-1}}(\boldsymbol{\xi}))$ sont égales. Une application du lemme 2.8.4 implique l'égalité des fonctions E -génératrices des moments $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ et $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})$. Puis une application de la proposition 2.8.1 nous permet d'aboutir aux égalités suivantes :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(g(\mathbf{t})) = \text{MGF}_E(\boldsymbol{\xi}^{g^{-1}})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.68)$$

$$= \text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{t}), \quad \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G}, \quad (2.8.69)$$

qui prouvent la \mathcal{G} -invariance de la fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$.

Théorème 2.8.2. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur χ , est compact. Soit E l'une des matrices symétriques réelles définies positives telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(E)$, pour l'existence de E voir la remarque 2.8.4. La fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -invariante si et seulement si le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.*

Démonstration 2.8.10. Appliquons la proposition 2.8.2 : le plan $\boldsymbol{\xi}^E$ est \mathcal{G}' -invariant, avec $\mathcal{G}' = \{U'_g, g \in \mathcal{G}\}$, si et seulement si la fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -faiblement invariante. Rappelons le résultat du lemme 2.8.5 dont les hypothèses sont vérifiées : le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant si et seulement si le plan $\boldsymbol{\xi}^E$, image du plan $\boldsymbol{\xi}$ par la matrice E , est \mathcal{G}' -faiblement invariant, avec $\mathcal{G}' = \{U'_g, g \in \mathcal{G}\}$. Nous en déduisons l'équivalence qu'il fallait démontrer.

Remarque 2.8.8. Le lien que le théorème 2.8.2 établit entre l'entre l'invariance faible et l'invariance de la fonction génératrice des moments est remarquable : nous transformons le problème initial en un problème d'invariance polynomiale qu'il est possible de traiter algorithmiquement, comme nous le précisons au chapitre 5, à l'aide de l'algèbre commutative computationnelle.

Remarque 2.8.9. Si le groupe $\mathcal{G} = \{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v nous pouvons prendre $E = I_v$. Ce groupe est relativement compact. Soit $\overline{\mathcal{G}}$ son adhérence, pour lequel les propriétés d'invariance seront également vérifiées par passage à la limite des égalités les définissant puisque l'action de \mathcal{G} sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à $2d$ est continue pour la topologie usuelle. Ainsi les notions d'invariance associée à l'action du groupe \mathcal{G} coïncident avec celles associées au groupe $\overline{\mathcal{G}}$. Par conséquent nous pouvons appliquer le théorème 2.8.2 pour le groupe $\overline{\mathcal{G}}$, qui est alors compact, et $E = I_v$. Nous retrouvons ainsi les résultats d'invariance du corollaire 2.8.1.

Nous montrons maintenant, et nous reviendrons sur l'intérêt majeur de ce résultat en termes d'application à la construction explicite de dispositifs \mathcal{G} -invariants au théorème 5.1.7 et au corollaire 5.1.5 dans le chapitre 5, qu'il est possible de caractériser la \mathcal{G} -invariance faible d'un plan $\boldsymbol{\xi}$, analysé à l'aide d'un modèle polynomial complet, pour \mathcal{G} un groupe compact, par l'invariance pour l'action d'un sous-groupe du groupe orthogonal de \mathcal{O}_v d'une fonction déduite de la fonction génératrice des moments $\boldsymbol{\xi}$.

Nous commençons par un lemme pour préciser la nature d'un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$.

Lemme 2.8.6. *Soit \mathcal{G} un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. Le sous-groupe \mathcal{G} est conjugué à un sous-groupe \mathcal{K} du groupe orthogonal \mathcal{O}_v , c'est-à-dire il existe $A \in \mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ tel que $\mathcal{G} = A\mathcal{K}A^{-1}$.*

Démonstration 2.8.11. Nous renvoyons par exemple à [MT86].

Remarque 2.8.10. Soit \mathcal{G} un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. Nous avons vu à la remarque 2.8.4 qu'il existe alors une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v E$ le groupe orthogonal de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire associé à E . Un calcul direct montre que nous pouvons prendre $E = (AA')^{-1}$.

Théorème 2.8.3. *Soit un modèle polynomial complet de degré d (\mathcal{G}, \mathcal{Q})—équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur \mathcal{X} . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur \mathcal{X} , est compact. Soit A l'une des matrices inversibles telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est conjugué à \mathcal{K} un sous-groupe de \mathcal{O}_v , pour l'existence de A voir le lemme 5.1.1. La matrice $E = (AA')^{-1}$ est une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v E$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *La fonction E —génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} —invariante.*
- ii- *La fonction génératrice des moments de $\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}}$, $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}})$, est \mathcal{K} —invariante.*

Démonstration 2.8.12. Nous avons l'équivalence suivante :

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right] = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (U_g \mathbf{t})' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.70)$$

\Updownarrow

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right] = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (A k A^{-1} \mathbf{t})' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}. \quad (2.8.71)$$

Puis nous avons les égalités suivantes :

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right] = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' A'^{-1} A^{-1} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K} \quad (2.8.72)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (A^{-1} \mathbf{t})' A^{-1} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K} \quad (2.8.73)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}}} \left[\left(1 + (A^{-1} \mathbf{t})' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K} \quad (2.8.74)$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}})(A^{-1} \mathbf{t}), \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}. \quad (2.8.75)$$

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + (A k A^{-1} \mathbf{t})' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right] = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' (A k A^{-1})' A'^{-1} A^{-1} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' A'^{-1} k' A^{-1} \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K} \quad (2.8.76)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}}} \left[\left(1 + \mathbf{t}' A'^{-1} k' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K} \quad (2.8.77)$$

$$= \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}}} \left[\left(1 + (k(A^{-1} \mathbf{t}))' \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}$$

$$= \text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}})(k(A^{-1} \mathbf{t})), \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}. \quad (2.8.78)$$

Nous avons donc obtenu l'équivalence suivante :

$$\mathbb{E}_{\xi} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right] = \mathbb{E}_{\xi} \left[\left(1 + (U_g \mathbf{t})' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.79)$$

$$\begin{aligned} & \Downarrow \\ \text{MGF}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})(A^{-1}\mathbf{t}) &= \text{MGF}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})(k(A^{-1}\mathbf{t})), \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}. \end{aligned} \quad (2.8.80)$$

En effectuant le changement de variable bijectif $\mathbf{u} = A^{-1}\mathbf{t}$ nous aboutissons à l'équivalence recherchée :

$$\mathbb{E}_{\xi} \left[\left(1 + \mathbf{t}' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right] = \mathbb{E}_{\xi} \left[\left(1 + (U_g \mathbf{t})' E \mathbf{X} \right)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \forall g \in \mathcal{G} \quad (2.8.81)$$

$$\begin{aligned} & \Downarrow \\ \text{MGF}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})(\mathbf{u}) &= \text{MGF}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})(k\mathbf{u}), \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^v, \forall k \in \mathcal{K}. \end{aligned} \quad (2.8.82)$$

Remarque 2.8.11. Soient χ un domaine expérimental de \mathbb{R}^v d'intérieur non vide, un plan ξ analysé à l'aide d'un modèle de régression polynomiale complet de degré d (\mathcal{G}, \mathcal{Q})—équivariant pour l'action linéaire d'un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. Pour construire un plan expérimental \mathcal{G} -faiblement invariant, nous proposons la méthode suivante.

- i- Déterminer $A \in \mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ et \mathcal{K} un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(\mathbb{R})$ tels que $\mathcal{G} = A\mathcal{K}A^{-1}$.
- ii- Choisir un plan η , tel que le support de η^A est inclus dans χ , parmi la liste des plans à la disposition de l'expérimentateur pour lesquels la fonction génératrice des moments du plan expérimental η , $\text{MGF}^{A_d}(\eta)$, est \mathcal{K} -invariante.
- iii- Le plan expérimental $\xi = \eta^A$ est alors un plan \mathcal{G} -faiblement invariant.

Remarque 2.8.12. La connaissance de dispositifs isovariants pour des cardinaux variés de l'ensemble des points support du plan permet d'être assuré de disposer de plans qui seront de surcroît \mathcal{K} -faiblement invariant pour \mathcal{K} tout sous-groupe compact du groupe orthogonal. Nous mettons ainsi à nouveau en avant l'intérêt de mettre à la disposition des expérimentateurs des dispositifs isovariants. Nous verrons au chapitre 6 pourquoi il est également souhaitable de construire des plans pour lesquels nous connaissons les coordonnées exactes des points support du plan.

2.9. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons considéré en particulier des modèles de régression multiple polynomiale ($\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth}$)—équivariants et établi que les plans isovariants et admissibles forment une classe essentiellement complète. Nous avons également montré que la recherche de dispositifs D -optimaux et I -optimaux pour un modèle de régression polynomiale complet de degré d peut se restreindre à la recherche des plans qui sont de plus isovariants. Enfin nous avons souligné que la construction explicite d'un plan isovariant solution au problème de D -optimalité ou de I -optimalité nécessite la connaissance de dispositifs qui sont isovariants. La notion d'isovariance semble également avoir un intérêt dans d'autres domaines de la statistique ; nous renvoyons par exemple à [Her88] pour un exemple qui met en avant la notion d'isovariance pour la comparaison estimateurs par moindres carrés ordinaires et des estimateurs par moindres carrés généralisés.

2.9 Conclusion

Lors de la détermination de la matrice des moments d'un plan isovariant nous avons introduit la fonction génératrice des moments du plan. Il s'agissait avant tout d'une manière simple pour déterminer la valeur des moments d'un plan isovariant en utilisant le fait que la fonction génératrice des moments était radiale puisque qu'invariante par toute transformation du groupe orthogonal. La démonstration proposée a été simplifiée par rapport à celle de [MM02]. Nous avons montré qu'il est possible d'étendre ce résultat dans plusieurs directions. La première, le cas des sous-groupes du groupe orthogonal et d'un modèle polynomial complet, est déjà connue, *cf.* [Col02]. La seconde permet de s'intéresser au sous-groupes du groupe orthogonal et aux modèle polynomiaux qui ne sont pas nécessairement complets. Il s'agit d'un résultat nouveau puisque la fonction génératrice des moments n'est employée qu'avec des modèles polynomiaux complets. Enfin dans le troisième point nous démontrons que l'invariance faible pour un groupe compact et un modèle polynomial est équivalente à l'invariance de la fonction E -génératrice des moments. L'introduction de cette fonction ainsi que le théorème de caractérisation font partie des nouveautés apportées par ce travail. Elles permettent l'utilisation de techniques d'algèbre commutative computationnelle qui, comme nous le verrons au chapitre 5, nous permettent une approche algorithmique de la construction de plans faiblement invariants pour l'action non seulement du groupe orthogonal mais aussi d'un groupe compact qui agit linéairement sur le domaine expérimental. Nous avons enfin montré comment il est possible, en utilisant les propriétés de la fonction génératrice des moments que nous avons montrées, de ramener le problème de la construction de plans \mathcal{G} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact à celui de la construction de plans \mathcal{K} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe de matrices \mathcal{K} qui est un sous-groupe compact du groupe orthogonal. Ainsi si nous sommes à même de construire des dispositifs isovariants nous pouvons construire des plans qui sont \mathcal{G} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact quelque soit le groupe \mathcal{G} de matrices compact considéré.

Nous allons maintenant nous intéresser, dans le chapitre 3 suivant, au lien qui existe entre la notion d'isovariance, ou plus généralement d'invariance faible, et certaines propriétés de symétrie de la surface de variance d'une surface de réponse.

Chapitre 3

Surfaces de réponse

Nous nous préoccupons dans ce chapitre de surfaces de réponse et nous allons montrer que les plans isovariants y jouent, là encore, un rôle privilégié. Pour une introduction plus détaillée à ce domaine central de la planification expérimentale, nous renvoyons aux livres de Box et Draper [BD88] et [BD07], Khuri et Cornell [KC96] et Myers et Montgomery [MM02] ainsi qu'à l'ouvrage édité par Khuri [Khu06].

Nous allons faire le lien entre la notion de \mathcal{G} -invariance faible d'un plan analysé à l'aide d'un modèle A et l'invariance de la surface de réponse associée à A pour l'action du groupe \mathcal{G} en un sens que nous préciserons.

En premier lieu nous exposons le résultat fondamental de Box et Hunter, présenté en 1957 dans [BH57], qui établit le lien entre l'isovariance d'un plan et le fait que la surface de réponse d'un modèle polynomial complet d'ordre d est une fonction radiale. Nous reprenons la démonstration donnée dans [DGP93] qui s'étend naturellement au cas de tout dispositif faiblement invariant pour lequel la matrice des moments du plan est inversible.

L'expérimentateur ne peut se contenter de ce résultat qui ne concerne que des matrices des moments non singulières. En effet il existe plusieurs raisons pour lesquelles il peut être amené de manière naturelle à utiliser des matrices des moments singulières. Nous en rencontrerons trois dans ce travail.

La première est liée à la nature du domaine expérimental qui peut induire lui-même la singularité : modèles polynomiaux complets de degré supérieur ou égal à 2 dans un domaine expérimental égal à la sphère unité de l'espace vectoriel, modèles polynomiaux complets pour des plans pour mélange et plus généralement dès que les fonctions qui interviennent dans la définition du modèle ne forment pas une famille libre sur le domaine expérimental. Bien entendu l'expérimentateur pourrait lever cette difficulté en considérant un modèle dont les fonctions forment une famille libre sur le domaine expérimental. Ainsi par exemple dans le cas d'un domaine expérimental égal à la sphère unité, il est possible d'utiliser un modèle polynomial qui ne comporte que des polynômes harmoniques distincts. Dans tous les cas il est alors possible de trouver un plan expérimental tel que la matrice des moments de ce modèle est non singulière. Toutefois la difficulté d'interprétation des effets associés à chacun de ces polynômes harmoniques dissuade généralement les expérimentateurs de leur utilisation. Pour un exposé de situations pratiques où apparaît cette difficulté nous renvoyons le lecteur au chapitre 1.

La seconde est liée à une volonté de l'expérimentateur de surparamétrer le modèle afin

d'en tirer un avantage technique. Par exemple dans la section 3.4 de ce chapitre nous introduirons, suivant Draper et Pukelsheim [DP98], des modèles polynomiaux complets de degré d , qui sont surparamétrés dès que d est supérieur ou égal à 2. Nous pourrions alors tirer parti de l'algèbre tensorielle pour étudier l'action induite sur le modèle par une action linéaire sur le domaine expérimental. Sans cette surparamétrisation cette étude est à la fois moins naturelle et plus complexe à réaliser.

La troisième peut être une conséquence de la nécessité de raffiner le modèle utilisé pour analyser le plan expérimental si celui-ci n'a pas permis de fournir un ajustement dont la qualité a été jugée suffisante. Ce raffinement passe par l'ajout de fonctions au modèle avec lequel le plan expérimental a été analysé à l'origine, ce qui peut introduire des confusions d'effets puisque le plan expérimental n'était a priori adapté qu'au plan initial. Nous verrons au chapitre 6 quelles stratégies une approche algébrique permet de mettre en place pour la résolution de ces difficultés dans le cas d'un modèle polynomial.

En second lieu, nous étudions le lien entre \mathcal{G} -invariance faible et \mathcal{G} -invariance de la surface de réponse dans le cas où la matrice des moments n'est pas inversible. Pour cela nous commençons par rappeler certaines propriétés des pseudo-inverses d'une matrice et justifions par des considérations statistiques l'introduction de la notion de *surface de variance extrapolée* associée à une matrice des moments non inversible. Celle-ci coïncide avec la notion de surface de variance au sens habituel du terme lorsque la matrice des moments du plan est inversible. Nous prouvons alors que si un plan est \mathcal{G} -faiblement invariant, sa surface de réponse extrapolée est alors \mathcal{G} -invariante et que, réciproquement, si la surface de variance d'un plan est \mathcal{G} -invariante et sous une condition supplémentaire naturelle, le plan est \mathcal{G} -faiblement invariant.

Nous montrons alors, en troisième lieu, qu'il est plus naturel d'introduire la notion de *surface de variance généralisée*, comme par exemple dans [Puk93], et nous montrons le lien entre invariance de cette surface de variance et la faible invariance du plan. En effet les surfaces de variance extrapolées ne conservent pas une partie fondamentale de l'information statistique de la matrice des moments à laquelle elles sont associées : l'image de la matrice des moments. Ceci a pour conséquence de définir une variance en un point du domaine expérimental pour lequel il n'est peut être même pas possible d'estimer la réponse moyenne. Les *surfaces de variance généralisée* permettent de remédier à ce défaut.

En quatrième lieu nous revenons sur une nouvelle manière d'écrire un modèle polynomial en méthodologie des surfaces de réponse, suivant ainsi l'approche de Draper et Pukelsheim [DP98]. Le groupe de matrices \mathcal{Q} , associé à l'action du groupe orthogonal \mathcal{G}_{orth} , est alors un sous-groupe d'un groupe orthogonal ce qui est avantageux lorsque nous considérons des critères d'optimalité orthogonalement invariants.

3.1. Un cas particulier : matrice des moments inversible

3.1.1. Définition

Considérons un modèle A_d , polynomial complet de degré d , défini comme en 2.3.12, et un plan ξ dont le support est inclus dans le domaine $\chi = \mathcal{B}_r$ avec $r > 0$.

Remarque 3.1.1. A_d est un modèle polynomial de degré d isovariant et de ce fait le modèle de régression utilisé est $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant et le domaine χ est d'intérieur non vide. Nous sommes donc dans les conditions d'application du corollaire 2.3.1 : l'application Ψ qui à g de \mathcal{G}_{orth} associe Q_g de \mathcal{Q}_{orth} est donc un morphisme de groupes.

Définition 3.1.1. Une surface de réponse d'ordre d , notée η , est un modèle de régression polynomial multiple associée au modèle A_d :

$$\eta(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}_d' \mathbf{f}_d(\mathbf{x}), \quad (3.1.1)$$

où $\boldsymbol{\theta}_d = (\boldsymbol{\theta}^\alpha, \alpha \in A_d)'$ et $\mathbf{f}_d(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}^\alpha, \alpha \in A_d)'$.

Dans toute la suite, nous nous intéressons à des estimateurs des surfaces de réponse $\eta(\mathbf{x})$ obtenus par le théorème de Gauss-Markov et que nous notons $\widehat{\eta}(\mathbf{x})$:

$$\widehat{\eta}(\mathbf{x}) = \widehat{\boldsymbol{\theta}}_d' \mathbf{f}_d(\mathbf{x}). \quad (3.1.2)$$

Définition 3.1.2. Supposons que la matrice des moments du plan ξ soit définie positive. La surface de variance de l'estimateur de la réponse moyenne, $\widehat{\eta}(\mathbf{x})$ est égale à :

$$v_{M(\xi)}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_d(\mathbf{x})' M(\xi)^{-1} \mathbf{f}_d(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \chi. \quad (3.1.3)$$

3.1.2. Isovariance et invariance de la surface de réponse

En 1957, Box et Hunter, voir [BH57], stipulent qu'une propriété recherchée des surfaces de réponse est que la surface de variance ne dépende que de la norme euclidienne de \mathbf{x} , c'est-à-dire que la surface de variance soit invariante par toute transformation du groupe orthogonal \mathcal{O}_p . Draper, Gaffke et Pukelsheim, [DGP93], indiquent que, l'expérience accumulée par l'utilisation fructueuse des surfaces de réponse pendant 30 ans, a démontré que la propriété d'isovariance de la surface de variance était de première importance.

Nous commençons par un petit historique de la notion d'isovariance en méthodologie des surfaces de réponse qui témoigne de la position centrale de cette notion. Ainsi nous renvoyons le lecteur vers les articles de Box et Behnken [BB60], Bose et Carter [BC59], Bose et Draper [BD59], Gardiner, Grandage et Hader [GGH59], Draper [Dra60b], [Dra60a] et [Dra61], Das [Das61], Das et Narasimham [DN62], Herzberg [Her64], Hill et Hunter [HH66], Draper et Herzberg [DH68], Mehta et Das [MD68], Gupta et Dey [GD75], Mead et Pike [MP75], Huda [Hud82], Draper et Pukelsheim [DP90], Draper, Gaffke et Pukelsheim [DGP91] et [DGP93], Draper et Pukelsheim [DP94], Draper et Heiligers et Pukelsheim [DHP96] ainsi que le livre de Raghavarao [Rag71] et les rapports techniques de Box

et Behnken [BB58], Draper et Mc Gregor [DMG67], Mee [Mee00] et Block et Mee [BM01].

Définition 3.1.3. *Une surface de variance est dite isovariante si :*

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})}(r(\mathbf{x})) = v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}), \quad \forall r \in \mathcal{O}_v, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^v. \quad (3.1.4)$$

Remarque 3.1.2. *La propriété d'isovariance de la surface de réponse signifie qu'à une distance donnée de l'origine, la qualité de l'estimation de la surface de réponse est identique.*

Une surface de variance, 3.1.2, est caractérisée par la donnée d'une matrice des moments d'un plan. Aussi Box et Hunter (1957), [BH57], ont cherché une condition nécessaire et suffisante portant sur la matrice des moments d'un plan $M(\boldsymbol{\xi})$, supposée inversible, pour que la surface de variance associée soit isovariante. Leur résultat a été repris et redémontré dans [DGP93] où les auteurs montrent que ce résultat n'est plus valable si $d \geq 2$ et que nous supposons seulement que la $M(\boldsymbol{\xi})$ est une forme quadratique définie positive. Cette difficulté, que nous précisons au cours de la démonstration du théorème 3.1.1, n'est pas envisagée par tous les auteurs, comme par exemple Myers et Montgomery, dans [MM02]. Nous proposons ici une démonstration dont une partie repose sur les notions introduites au chapitre 2.

Théorème 3.1.1. *Pour toute matrice des moments d'un plan $M(\boldsymbol{\xi})$ définie positive, la surface de variance $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est isovariante si et seulement si le plan $\boldsymbol{\xi}$ est isovariant au sens de la définition 2.3.7, c'est-à-dire s'il est $\mathcal{G}_{orth} = \mathcal{O}_v$ -faiblement invariant ou encore si, pour tout $r \in \mathcal{O}_v$, la matrice $M(\boldsymbol{\xi}^r) = M(\boldsymbol{\xi})$.*

Démonstration 3.1.1. Puisque Ψ est un morphisme de groupes nous avons :

$$Q_{r'} = Q_{r^{-1}} = Q_r^{-1}, \quad \forall r \in \mathcal{O}_r. \quad (3.1.5)$$

Commençons par montrer que si le plan $\boldsymbol{\xi}$ est isovariant alors la surface de variance $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est isovariante.

Soit $\boldsymbol{\xi}$ un plan isovariant.

L'isovariance de la matrice des moments et la relation 3.1.5 impliquent :

$$M^{-1} = (Q_r M Q_r')^{-1} = Q_r' M^{-1} Q_r, \quad \forall r \in \mathcal{O}_r. \quad (3.1.6)$$

Considérons la surface de variance $v_{M(\boldsymbol{\xi})}^r$ déduite de $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ par l'action d'un élément $r \in \mathcal{O}_v$:

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})}(r(\mathbf{x})) = \mathbf{f}_d(r(\mathbf{x}))' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{f}_d(r(\mathbf{x})), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} \quad (3.1.7)$$

$$= \mathbf{f}_d(\mathbf{x})' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \mathbf{f}_d(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} \quad (3.1.8)$$

$$= \mathbf{f}_d(\mathbf{x})' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{f}_d(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X} \quad (3.1.9)$$

$$= v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}. \quad (3.1.10)$$

Montrons maintenant que si la surface de variance $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est isovariante alors le plan $\boldsymbol{\xi}$ est isovariant.

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})}(r(\mathbf{x})) = v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \forall r \in \mathcal{O}_r \quad (3.1.11)$$

$$\begin{aligned} & \Updownarrow \\ \mathbf{f}_d(r(\mathbf{x}))' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{f}_d(r(\mathbf{x})) &= \mathbf{f}_d(\mathbf{x})' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{f}_d(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \forall r \in \mathcal{O}_r. \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

3.1 Un cas particulier : matrice des moments inversible

Nous devons donc montrer que

$$\mathbf{f}_d(\mathbf{x})' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \mathbf{f}_d(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_d(\mathbf{x})' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{f}_d(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \forall r \in \mathcal{O}_r \quad (3.1.13)$$

$$\begin{aligned} & \Downarrow \\ M(\boldsymbol{\xi})^{-1} &= Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r, \quad \forall r \in \mathcal{O}_r. \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

La difficulté réside dans le fait que l'application \mathbf{f}_d de \mathcal{X} dans \mathbb{R}^k n'est pas nécessairement surjective. Puisque le domaine expérimental \mathcal{X} est une boule de \mathbb{R}^v , nous pouvons toujours extraire de \mathcal{X} $k = \binom{v}{v+d}$ vecteurs dont les images par \mathbf{f}_d forment une base pour \mathbb{R}^k . Cependant $\text{Im}(\mathbf{f}_d) \subsetneq \mathbb{R}^k$ dès lors que $d > 1$, c'est-à-dire que $\text{Im}(\mathbf{f}_d)$ n'est pas un espace vectoriel. Ainsi l'égalité 3.1.13 n'implique pas nécessairement :

$$\mathbf{u}' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \mathbf{u} = \mathbf{u}' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{u}, \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^k, \forall r \in \mathcal{O}_r. \quad (3.1.15)$$

Puisque $M(\boldsymbol{\xi})$ est une matrice des moments d'un plan nous avons :

$$\text{tr} \left(M(\boldsymbol{\xi}) Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \right) = \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i) \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i)' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \right) \quad (3.1.16)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i) \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i)' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \right) \quad (3.1.17)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(r(\boldsymbol{\xi}_i)) \quad (3.1.18)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad (3.1.19)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i)' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.1.20)$$

$$= \text{tr} \left(M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \right) \quad (3.1.21)$$

$$= k. \quad (3.1.22)$$

Prouvons la même propriété pour $(M(\boldsymbol{\xi}) Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r)^{-1}$:

$$\text{tr} \left((M(\boldsymbol{\xi}) Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r)^{-1} \right) = \text{tr} \left(Q_r' M(\boldsymbol{\xi}) Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \right) \quad (3.1.23)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i) \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i)' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \right) \quad (3.1.24)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i)' Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r \mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.1.25)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(r'(\boldsymbol{\xi}_i)) \quad (3.1.26)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(r^{-1}(\boldsymbol{\xi}_i)) \quad (3.1.27)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad (3.1.28)$$

$$= \text{tr} \left(M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^{-1} \right) \quad (3.1.29)$$

$$= k. \quad (3.1.30)$$

Enfin, en posant $A = M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} Q_r' M(\boldsymbol{\xi})^{-1} Q_r M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}$, nous avons :

$$\text{tr}(A) = \text{tr}(A^{-1}) = k. \quad (3.1.31)$$

A et A^{-1} étant symétriques et commutant, elles sont diagonalisables dans la même base. Soient $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ les valeurs propres de A . L'équation 3.1.31 implique :

$$\sum_{i=1}^k \left(\lambda_i + \frac{1}{\lambda_i} \right) = 2k, \quad (3.1.32)$$

qui n'est possible que si $\lambda_i = 1$, $i = 1, \dots, k$. Ainsi $A = I_k$ ce qui est bien la relation 3.1.14 recherchée.

3.1.3. Plans faiblement-invariants et invariance de la surface de réponse

Montrons maintenant la proposition plus générale ci-dessous précisant la relation entre matrices des moments et surface de variance.

Proposition 3.1.1. *Soient $M_1(\boldsymbol{\xi})$ et $M_2(\boldsymbol{\xi})$ deux matrices des moments définies positives. Les surfaces de variance $v_{M_1(\boldsymbol{\xi})}$ et $v_{M_2(\boldsymbol{\xi})}$ sont identiques si et seulement si les matrices $M_1(\boldsymbol{\xi})$ et $M_2(\boldsymbol{\xi})$ sont égales.*

Démonstration 3.1.2. Si $M_1 = M_2$, nous avons par définition que $v_{M_1(\boldsymbol{\xi})} = v_{M_2(\boldsymbol{\xi})}$. Réciproquement, avec les mêmes arguments que dans la démonstration du théorème 3.1.1, nous pouvons montrer que :

$$\text{tr}(M_1 M_2^{-1}) = \text{tr}(M_1^{-1} M_2) = k, \quad (3.1.33)$$

ce qui implique que $M_1 M_2^{-1} = I_k$.

Définition 3.1.4. *Un plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -fortement invariant s'il est \mathcal{G} -faiblement invariant et que la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ du plan est inversible.*

Remarque 3.1.3. *Puisque tous les éléments de \mathcal{Q} sont inversibles, si l'une des matrices des moments $M(\boldsymbol{\xi}^{g_0})$ est inversible alors toutes les $M(\boldsymbol{\xi}^g)$, $g \in \mathcal{G}$, le sont.*

Théorème 3.1.2. *Pour toute matrice des moments d'un plan $M(\boldsymbol{\xi})$ définie positive, la surface de variance $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est invariante par \mathcal{G} si et seulement si le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -fortement invariant.*

Démonstration 3.1.3. Nous appliquons, pour tout $g \in \mathcal{G}$, la proposition 3.1.1 aux matrices $M(\boldsymbol{\xi})$ et $Q_g M(\boldsymbol{\xi}) Q_g'$ qui sont définies positives.

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Exemples 3.1.1. *Les exemples 2.3.2, 2.3.3 et 2.3.4 du chapitre 2, pour des modèles pour lesquels la matrice des moments est inversible, donnent respectivement naissance aux notions de surface de variance invariante par permutation des coordonnées, par changement de signe des coordonnées, par le groupe hyperoctaédral.*

Définition 3.1.5. *Un plan ξ est fortement isovariant s'il est \mathcal{G}_{orth} -fortement invariant.*

Remarque 3.1.4. *Contrairement à l'approche générale envisagée dans le chapitre 2, nous supposons, dans le contexte de la méthodologie des surfaces de réponse, que les matrices des moments des plans sont inversibles. Ceci permet de préciser le corollaire 2.6.6 du chapitre 2.*

Corollaire 3.1.1. *Pour des questions évidentes d'estimabilité, voir le chapitre 6, nous avons les résultats suivants.*

- i- *Si $d = 1$, le support d'un plan fortement isovariant et A_1 -admissible plan est inclus dans la frontière de la boule \mathcal{B}_r .*
- ii- *Si $d = 2$, le support d'un plan fortement isovariant et A_2 -admissible plan est inclus dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et de l'origine $\mathbf{0}$.*
- iii- *Si $d = 3$, le support d'un plan fortement isovariant et A_3 -admissible plan est inclus dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$.*
- iv- *Si $d = 4$, le support d'un plan fortement isovariant et A_4 -admissible plan est :*
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière et d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$,
 - soit dans l'ensemble formé par l'union de cette frontière, d'une sphère de rayon $0 < \rho < R$ centrée en $\mathbf{0}$ et de l'origine $\mathbf{0}$.

3.2. Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Nous étudions une première possibilité pour étendre la notion de surface de réponse au cas où la matrice des moments n'est pas inversible. Nous reprenons les notions introduites dans le chapitre 2.

Dans la suite, nous considérons P le projecteur orthogonal de \mathbb{R}^k sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$ comme en 2.3.1 et P_1 le projecteur orthogonal de \mathbb{R}^k sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. Nous commençons par donner quelques propriétés des matrices des moments et des pseudo-inverses, dont celui de Moore-Penrose, voir [RM71] ou plus récemment [Bap00] par exemple, qui nous serviront tout au long de cette section.

Commençons par rappeler la définition et les propriétés élémentaires des pseudo-inverses d'une matrice A .

3.2.1. Définitions et propriétés des pseudo-inverses

Les propriétés exposées dans ce paragraphe sont assez classiques. Néanmoins elles ne sont généralement pas prouvées en détail et c'est pourquoi nous précisons maintenant ces dé-

monstrations.

Définition 3.2.1. Soit A une matrice à p lignes et q colonnes, $p \geq 1$ et $q \geq 1$. A^- est un pseudo-inverse¹ de A si A^- vérifie l'égalité :

$$AA^-A = A. \quad (3.2.1)$$

Si A^- est un pseudo-inverse de A qui vérifie également la condition

$$A^-AA^- = A^-, \quad (3.2.2)$$

A^- est un pseudo-inverse réflexif de A .

Enfin si A^- est un pseudo-inverse réflexif de A tel que

$$(AA^-)' = AA^- \quad (3.2.3)$$

$$(A^-A)' = A^-A \quad (3.2.4)$$

alors A^- est un inverse de Moore-Penrose de A .

Proposition 3.2.1.

-i- Si A^- est un pseudo-inverse de A alors :

$$\text{Rg}A = \text{Rg}AA^- = \text{Rg}A^-A \quad (3.2.5)$$

et

$$\text{Rg}A \leq \text{Rg}A^-. \quad (3.2.6)$$

-ii- Si $G \in \mathcal{M}_{q,p}$ est un pseudo-inverse de $A \in \mathcal{M}_{p,q}$, alors l'ensemble des pseudo-inverses de A est donné par l'ensemble :

$$\{G + (I_q - GA)U + V(I_p - AG), U \in \mathcal{M}_{q,p}, V \in \mathcal{M}_{q,p}\}. \quad (3.2.7)$$

-iii- Si A^- est un pseudo-inverse de A alors A^- est un pseudo-inverse réflexif de A si et seulement si la condition suivante est vérifiée :

$$\text{Rg}A = \text{Rg}A^-. \quad (3.2.8)$$

-iv- Il existe un unique inverse de Moore-Penrose de A ; nous le notons A^+ . Nous avons alors : $A^+ = (A'A)^+A'$.

Démonstration 3.2.1. Pour la démonstration de ces propriétés élémentaires des pseudo-inverses, nous renvoyons par exemple à [RM71] ou à [Bap00].

Nous aurons besoin de quelques propriétés spécifiques des inverses de Moore-Penrose que nous démontrerons au fil des lemmes suivants.

¹Certains auteurs appellent également A^- un inverse généralisé de A et pseudo-inverse l'inverse de Moore-Penrose.

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Lemme 3.2.1. *Quelque soit la matrice A à p lignes et q colonnes, p et q tous deux supérieurs à 1, nous avons $\text{Im}(AA') = \text{Im}(A)$. En particulier, en posant $X(\boldsymbol{\xi})$ la matrice $((f_j(x_i)))_{1 \leq i \leq r; 1 \leq j \leq k}$, nous avons :*

$$\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(X(\boldsymbol{\xi})') = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})). \quad (3.2.9)$$

Démonstration 3.2.2. En effet soit $z \in \text{Ker}(A')$, $AA'z = 0$. Réciproquement soit $z \in \text{Ker}(AA')$, $0 = z'AA'z = \|A'z\|^2$ donc $z \in \text{Ker}(A')$. Ainsi $\text{Ker}(A') = \text{Ker}(AA')$ par conséquent AA' et A' ont le même rang et de ce fait AA' et A ont le même rang. Puis $\text{Im}(AA') \subset \text{Im}(A)$ d'où l'égalité $\text{Im}(AA') = \text{Im}(A)$.

En posant W la matrice diagonale inversible $\text{diag}(\sqrt{\xi_i}, 1 \leq i \leq r)$, nous avons alors $(WX(\boldsymbol{\xi}))'WX(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})$. Or les égalités suivantes sont vraies $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(X(\boldsymbol{\xi})')$
 $= \text{Im}((WX(\boldsymbol{\xi}))') = \text{Im}((WX(\boldsymbol{\xi}))'WX(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$.

Remarque 3.2.1. *Il s'agit d'une justification formelle du fait que, pour un plan $\boldsymbol{\xi}$, la valeur des poids \mathbf{w} n'influent pas sur l'estimabilité des paramètres du modèle.*

Lemme 3.2.2. *Soit A une matrice à p lignes et q colonnes :*

$$(A')^+ = (A^+)'. \quad (3.2.10)$$

Démonstration 3.2.3. Montrons que $(A^+)'$ vérifie les propriétés caractéristique de l'inverse de Moore-Penrose de A' . $(A^+)A'(A^+) = (A^+AA^+)' = (A^+)'$, $A'(A^+)A' = (AA^+A) = A'$, $((A^+)A')' = AA^+ = (AA^+)' = (A^+)A'$ et $(A'(A^+)')' = A^+A = (A^+A)' = A'(A^+)'$.

Lemme 3.2.3. *Soit A une matrice carrée d'ordre k symétrique. Si A^+ est l'inverse de Moore-Penrose de A alors A^+ est symétrique et A et A^+ commutent. De plus si une matrice B carrée d'ordre k et AA^+ commutent alors B' et AA^+ commutent. Enfin $(AA^+)^+ = AA^+$ et si C , une matrice inversible d'ordre k , et AA^+ commutent alors $(AC)^+ = C^{-1}A^+$ et C^{-1} et AA^+ commutent.*

Démonstration 3.2.4. Appliquons le lemme 3.2.2 : $(A^+) = (A^+) = A^+$.

Par définition de l'inverse de Moore-Penrose, voir 3.2.1, nous avons : $(AA^+)' = AA^+$ et de ce fait $A^+A = A^+A' = (AA^+)' = AA^+$.

Puis, si une matrice B carrée d'ordre k , $B'A^+A = B'A^+A' = (AA^+B)' = (BAA^+)' = A^+A'B' = A^+AB'$.

Nous avons $AA^+AA^+AA^+ = AA^+$ et $(AA^+AA^+)' = (AA^+)' = AA^+$. Donc par unicité de l'inverse de Moore-Penrose : $(AA^+)^+ = AA^+$.

Si C , une matrice inversible d'ordre k , $C^{-1}A^+ACC^{-1}A^+ = C^{-1}A^+$, $ACC^{-1}A^+AC = AC$, $(ACC^{-1}A^+)' = (AA^+)' = AA^+$ et $(C^{-1}A^+AC)' = (A^+A)' = A^+A$.

Enfin $AA^+C^{-1} = (AA^+)^+C^{-1} = (CAA^+)^+ = (AA^+C)^+ = C^{-1}(AA^+)^+ = C^{-1}AA^+$.

Lemme 3.2.4. $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ est un projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. Nous avons de plus :

$$\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+), \quad (3.2.11)$$

$$\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(X(\boldsymbol{\xi})') = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})). \quad (3.2.12)$$

Les deux sous-espaces $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ et $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$ étant en somme directe orthogonale :

$$\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})) \oplus^{\perp} \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \mathbb{R}^k. \quad (3.2.13)$$

Démonstration 3.2.5. Une conséquence directe de la définition d'un pseudo-inverse 3.2.1 est la relation $(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))^2 = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$. La symétrie et la commutativité résultent du lemme 3.2.3 sur l'inverse de Moore-Penrose d'une matrice symétrique.

Ainsi $M(\boldsymbol{\xi})$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+$ se diagonalisent dans la même base orthonormée, les valeurs propres non nulles de $M(\boldsymbol{\xi})^+$ étant les inverses de celles de $M(\boldsymbol{\xi})$. Par conséquent les images de $M(\boldsymbol{\xi})$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+$ sont égales et orthogonales à leur noyau commun. Les rangs de $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ et $M(\boldsymbol{\xi})$ sont égaux car $M(\boldsymbol{\xi})^+$ est un pseudo-inverse réflexif de $M(\boldsymbol{\xi})$, propriété 3.2.1, d'où l'égalité $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$. Le théorème du rang permet d'affirmer que $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$. Enfin puisque $M(\boldsymbol{\xi})$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+$ commutent nous avons :

$$\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+), \quad (3.2.14)$$

$$\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+). \quad (3.2.15)$$

Enfin, nous avons montré au lemme 3.2.1 l'égalité :

$$\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})), \quad (3.2.16)$$

ce qui permet d'achever la démonstration.

Remarque 3.2.2. Si $M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un pseudo-inverse de $M(\boldsymbol{\xi})$ alors $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un projecteur d'image $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. L'orthogonalité du projecteur résulte du choix de l'inverse de Moore-Penrose parmi tous les pseudo-inverses de $M(\boldsymbol{\xi})$.

Proposition 3.2.2. Soit $M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un pseudo-inverse réflexif de $M(\boldsymbol{\xi})$.

$M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^-$ et $M(\boldsymbol{\xi})^-M(\boldsymbol{\xi})$ sont des projecteurs orthogonaux si et seulement si $M(\boldsymbol{\xi})^- = M(\boldsymbol{\xi})^+$.

Démonstration 3.2.6. Si $M(\boldsymbol{\xi})^- = M(\boldsymbol{\xi})^+$ alors le lemme 3.2.4 assure que $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ sont des projecteurs orthogonaux.

Réciproquement si $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un projecteur orthogonal alors :

$$(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^-)' = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^-. \quad (3.2.17)$$

Puis si $M(\boldsymbol{\xi})^-M(\boldsymbol{\xi})$ est un projecteur orthogonal alors :

$$(M(\boldsymbol{\xi})^-M(\boldsymbol{\xi}))' = M(\boldsymbol{\xi})^-M(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.2.18)$$

Par unicité de l'inverse de Moore-Penrose nous avons $M(\boldsymbol{\xi})^- = M(\boldsymbol{\xi})^+$.

Proposition 3.2.3. Nous pouvons désormais établir un lien entre P_1 et $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$:

$$M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = P_1. \quad (3.2.19)$$

Démonstration 3.2.7.

$$\begin{aligned} \text{tr}((M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) - P_1)^2) &= \text{tr}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) + \text{tr}(P_1) - 2\text{tr}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})P_1) \\ &= 2\dim\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) - 2\dim\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

$$= 0. \quad (3.2.21)$$

$M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ et P_1 sont symétriques et de ce fait $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) - P_1 = 0$.

3.2.2. Inverse de Moore-Penrose et invariance

Lemme 3.2.5. *Considérons un modèle de régression linéaire défini par l'équation 2.1.1 et $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant. Rappelons que les éléments du groupe \mathcal{Q} sont les $Q_g^* = Q_g P + I_k - P$ avec P le projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$.*

Pour tout $g \in \mathcal{G}$, si $M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un pseudo-inverse de $M(\boldsymbol{\xi})$ alors $Q_g^{-1} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_g^{*-1}$ est un pseudo-inverse de $M(g(\boldsymbol{\xi}))$. Si de plus $M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un pseudo-inverse réflexif de $M(\boldsymbol{\xi})$ alors $Q_{g^{-1}}^{*'} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_{g^{-1}}^* = Q_g^{*-1} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_g^{*-1}$ est un pseudo-inverse réflexif de $M(g(\boldsymbol{\xi}))$.*

Enfin, pour un $g \in \mathcal{G}$ tel que $Q_g^ \in \mathcal{O}_k$ ou tel que $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec Q_g^* , nous avons :*

$$(M(g(\boldsymbol{\xi})))^+ = Q_{g^{-1}}^{*'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_{g^{-1}}^* = Q_g^{*-1} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}. \quad (3.2.22)$$

Démonstration 3.2.8. L'égalité $Q_{g^{-1}}^{*'} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_{g^{-1}}^* = Q_g^{*-1} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_g^{*-1}$ est une conséquence de la propriété de morphisme de Ψ , lemme 2.3.4.

$$Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_g^{*-1} Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} = Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'}, \quad (3.2.23)$$

car $M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^- M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})$.

$Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}$ est donc un pseudo-inverse de $Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'}$.

De même avec l'hypothèse supplémentaire de réflexivité :

$$Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_g^{*-1} Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^- Q_g^{*-1} = Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}, \quad (3.2.24)$$

car $M(\boldsymbol{\xi})^- M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^- = M(\boldsymbol{\xi})^-$.

$Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}$ est donc un pseudo-inverse réflexif de $Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'}$.

Nous considérons maintenant $M(\boldsymbol{\xi})^+$ l'inverse de Moore-Penrose de $M(\boldsymbol{\xi})$. Nous avons alors :

$$\left(Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1} Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} \right)' = Q_g^* (M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}))' Q_g^{*-1} \quad (3.2.25)$$

$$= Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*-1}, \quad (3.2.26)$$

car $(M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}))' = M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})$. Si de plus Q_g^* est une matrice orthogonale

$$Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*-1} = Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1} Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'}, \quad (3.2.27)$$

ou si $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec Q_g^* , par le lemme 3.2.3, $Q_g^{*'}$ commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})$ et nous avons :

$$Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*-1} = M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^* Q_g^{*-1} \quad (3.2.28)$$

$$= Q_g^{*-1'} Q_g^{*'} M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.2.29)$$

$$= Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} \quad (3.2.30)$$

$$= Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1} Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} \quad (3.2.31)$$

$$(3.2.32)$$

Enfin :

$$\left(Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1} \right)' = Q_g^{*-1'} (M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^+)' Q_g^{*'} \quad (3.2.33)$$

$$= Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*'} \quad (3.2.34)$$

car $(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)' = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$.

Si de plus Q_g^* est une matrice orthogonale

$$Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*'} = Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}, \quad (3.2.35)$$

ou si $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ commute avec Q_g^* , par le lemme 3.2.3, $Q_g^{*'}$ commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ et nous avons :

$$Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*'} = Q_g^{*-1'} Q_g^{*'} M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ \quad (3.2.36)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^* Q_g^{*-1} \quad (3.2.37)$$

$$= Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*'} Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}. \quad (3.2.38)$$

Par unicité de l'inverse de Moore-Penrose nous avons :

$$(M(g(\boldsymbol{\xi})))^+ = Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1} = Q_{g^{-1}}^{*'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_{g^{-1}}^*. \quad (3.2.39)$$

Lemme 3.2.6. *Si $\text{Dim}(\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))) = \text{Dim}(\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi})))$, alors $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec Q_g^* .*

Démonstration 3.2.9. Le lemme 3.2.4 affirme que $M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})$ est un projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ inclus dans $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$. Par égalité des dimensions ces espaces sont égaux. Puis $\text{Im}(Q_g) \subset \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$ et $Q_g^* = Q_g P + I - P$.

Soit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$. Il existe $\mathbf{x}_1 \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$ et $\mathbf{x}_2 \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))^\perp$ tel que $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2$.

$$Q_g^*(M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{x})) = Q_g^*(\mathbf{x}_1) \quad (3.2.40)$$

$$= Q_g(\mathbf{x}_1) \quad (3.2.41)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_1)) \quad (3.2.42)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})(Q_g P(\mathbf{x}) + (I - P)\mathbf{x}) \quad (3.2.43)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi})(Q_g^*(\mathbf{x})). \quad (3.2.44)$$

Corollaire 3.2.1. *Si \mathcal{Q} est un sous-groupe du groupe orthogonal \mathcal{O}_k ou si nous avons l'égalité $\text{Dim}(\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))) = \text{Dim}(\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi})))$, l'action de \mathcal{G} sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ induit une action sur l'inverse de Moore-Penrose de $M(\boldsymbol{\xi})$ de la manière suivante :*

$$(M(g(\boldsymbol{\xi})))^+ = Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^{*-1}, \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.2.45)$$

Si $\mathcal{G} \subset \mathcal{O}_k$, il s'agit d'une action par congruence.

Démonstration 3.2.10. Il s'agit d'une conséquence directe des lemmes 3.2.5 et 3.2.6.

Remarque 3.2.3. \mathcal{G}_s , \mathcal{G}_p et \mathcal{G}_{sp} agissent par congruence sur l'inverse de Moore-Penrose de $M(\boldsymbol{\xi})$. Il n'en va pas de même pour le groupe \mathcal{G}_{orth} que nous avons considéré. Toutefois l'introduction des notations schlaëffliennes transforme le groupe \mathcal{Q}_{orth} en un groupe \mathcal{G}_{orth}^S qui est un sous-groupe du groupe orthogonal. Nous précisons cette approche dans la section 3.4.

Plus généralement :

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Lemme 3.2.7. *Si $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ et F_g , le supplémentaire orthogonal de $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ dans $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$, sont Q_g -stables alors $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec Q_g^* .*

Démonstration 3.2.11. Le lemme 3.2.4 affirme que $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ est un projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ inclus dans $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$. F_g est le supplémentaire orthogonal à $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ dans $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$. Puis $\text{Im}(Q_g) \subset \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$ et $Q_g^* = Q_gP + I - P$. Nous considérons la somme directe orthogonale :

$$\mathbb{R}^k = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \overset{\perp}{\oplus} F_g \overset{\perp}{\oplus} \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))^\perp. \quad (3.2.46)$$

Soit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$. Il existe $\mathbf{x}_1 \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$, $\mathbf{x}_2 \in F_g$ et $\mathbf{x}_3 \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))^\perp$ tel que $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3$.

$$Q_g^*(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(\mathbf{x})) = Q_g^*(\mathbf{x}_1) \quad (3.2.47)$$

$$= Q_g(\mathbf{x}_1) \quad (3.2.48)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_1)), \quad (3.2.49)$$

car $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g -stable. Nous avons également :

$$M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g^*(\mathbf{x})) = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_gP(\mathbf{x}) + (I - P)\mathbf{x}) \quad (3.2.50)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) + \mathbf{x}_3) \quad (3.2.51)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)) \quad (3.2.52)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_1)) + M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_2)) \quad (3.2.53)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(Q_g(\mathbf{x}_1)), \quad (3.2.54)$$

car F_g est Q_g -stable.

Remarque 3.2.4. *La condition 3.2.7 s'interprète partiellement de la manière suivante : une transformation g du plan ne doit pas changer les paramètres du modèle qui sont estimables ni ceux qui ne le sont pas. Le support du plan qui peut ajouter des confusions d'effets à celles naturellement associées au domaine $\boldsymbol{\chi}$ mais celles-ci ne doivent pas être modifiées par l'action de \mathcal{G} .*

3.2.3. Surface de variance extrapolée

Nous souhaitons désormais définir la surface de variance d'un plan dans le cas où la matrice des moments du plan n'est pas inversible. Comme nous l'avons vu dans la définition 3.2.1, lorsqu'une matrice n'est pas inversible il existe une infinité de pseudo-inverses. Lors de l'utilisation du modèle linéaire à des fins d'estimation d'une fonction linéaire estimable des paramètres du modèle, le choix du pseudo-inverse n'a pas d'influence sur la variance-covariance de l'estimateur construit à partir de ce pseudo-inverse, voir [Bap00]. En effet $X(X'X)^-X'$ ne dépend pas du pseudo-inverse choisi, en particulier nous pouvons prendre $X(X'X)^+X'$.

Dans le contexte des surfaces de réponse de degré d , la variance de l'estimateur de la

réponse moyenne en un point $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ tel que $\mathbf{f}_d(\mathbf{x}) \in \text{Vect}(\mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}))$ est donnée par la formule :

$$\text{Var}[\widehat{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x})] = \sigma^2 \mathbf{f}_d(\mathbf{x})' (X'X)^- \mathbf{f}_d(\mathbf{x}). \quad (3.2.55)$$

La variance en chacun des points du plan $\boldsymbol{\xi}$, ne dépend donc pas du pseudo-inverse choisi. Mais cette propriété n'est plus automatiquement vérifiée si $\mathbf{f}_d(\mathbf{x})$ n'appartient pas à $\text{Vect}(\mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}))$ quel que soit le point \mathbf{x} du domaine \mathcal{X} , ce qui est le cas dès que $\text{Vect}(\mathbf{f}_d(\boldsymbol{\xi}))$ est un sous-espace vectoriel strict de $\text{Vect}(\mathbf{f}_d(\mathcal{X}))$. C'est, par exemple, ce qui se produit pour un modèle polynomial complet de degré d supérieur ou égal à 2 si le domaine expérimental \mathcal{X} est une boule centrée $\mathbf{0}$ de rayon non nul et si le support du plan $\boldsymbol{\xi}$ est inclus dans une sphère centrée en $\mathbf{0}$. Dans cette section, nous nous plaçons dans ce cas. Nous introduisons une surface extrapolée à \mathcal{X} dont la définition ne se limite pas aux éléments du domaine expérimental \mathbf{x} tels que $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ est dans $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. Le choix de l'inverse de Moore-Penrose, outre la propriété d'unicité associée à cet inverse et qui permettra d'établir des identités qui seront utiles par la suite, est justifié par les considérations statistiques que nous allons exposer ci-dessous. Dans toute la suite, nous considérons un modèle donné par une fonction f donc la forme n'est pas nécessairement polynomiale.

Nous rappelons maintenant des résultats assez classiques sur les valeurs singulières de matrices, voir par exemple [RM71], [LT98] ou [Bap00].

Définition 3.2.2. *Nous appelons valeurs spectrales d'une matrice A réelle et carrée d'ordre k , les valeurs propres de $(AA')^{1/2}$. Il s'agit de nombres réels positifs $\sigma_i, 1 \leq i \leq k$ que nous ordonnons par ordre décroissant $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_k$.*

Proposition 3.2.4. *Décomposition spectrale*

Soit A une matrice carrée d'ordre k , il existe deux matrices orthogonales P et Q de \mathcal{O}_k telles que :

$$A = P \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \end{pmatrix} Q. \quad (3.2.56)$$

Une telle décomposition de A est appelée une décomposition spectrale de A .

Démonstration 3.2.12. Nous renvoyons par exemple à [Bap00].

Proposition 3.2.5. *Soit A une matrice carrée d'ordre k de rang r et*

$$A = P \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q \quad (3.2.57)$$

une décomposition spectrale de A , avec P et Q des matrices orthogonales de \mathcal{O}_k et $\Sigma = \text{Diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ la matrice diagonale des valeurs propres non nulles de AA' .

Les pseudo-inverses G de A sont donnés par la formule :

$$G = Q' \begin{pmatrix} \Sigma^{-1} & X \\ Y & Z \end{pmatrix} P' \quad (3.2.58)$$

où X, Y, Z sont des matrices quelconques de taille adéquate. Pour obtenir l'ensemble des pseudo-inverses réflexifs de A , il suffit d'ajouter à 3.2.58 la condition $Z = Y\Sigma X$. L'inverse

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

de Moore-Penrose de A est le pseudo-inverse A^+ pour lequel X , Y et Z sont les matrices nulles de taille adéquate :

$$A^+ = Q' \begin{pmatrix} \Sigma^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} P'. \quad (3.2.59)$$

Démonstration 3.2.13. Nous renvoyons par exemple à [Bap00].

Proposition 3.2.6. *Si A est symétrique semi définie positive alors les valeurs propres de A sont les valeurs spectrales de A . De plus, il existe une décomposition spectrale pour laquelle $Q = P^{-1} = P'$. Par conséquent, si s est un nombre réel non nul alors nous avons :*

$$(A^s)^+ = (A^+)^s. \quad (3.2.60)$$

Démonstration 3.2.14. A est symétrique semi définie positive, il existe donc une unique puissance s , s réel non nul, de A . Par conséquent $(AA')^{1/2} = A$ et les valeurs propres de A sont ses valeurs spectrales. Puis A est symétrique donc se diagonalise dans une base orthonormée ce qui montre l'existence d'une décomposition singulière de A avec $Q = P^{-1} = P'$.

Pour cette décomposition nous avons bien :

$$(A^+)^s = P \begin{pmatrix} \Sigma^{-s} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} P^{-1} \quad (3.2.61)$$

$$= P \left(\begin{pmatrix} \Sigma^s & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right)^+ P^{-1} \quad (3.2.62)$$

$$= \left(P \begin{pmatrix} \Sigma^s & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} P^{-1} \right)^+ \quad (3.2.63)$$

$$= (A^s)^+. \quad (3.2.64)$$

Proposition 3.2.7. *Soit A une matrice carrée d'ordre k de rang r de valeurs spectrales*

$$\sigma_1(A) \geq \dots \geq \sigma_r(A) > \sigma_{r+1}(A) = \dots = \sigma_n(A) = 0. \quad (3.2.65)$$

Soit G un pseudo-inverse de A de rang s de valeurs spectrales :

$$\sigma_1(G) \geq \dots \geq \sigma_s(G) > \sigma_{s+1}(G) = \dots = \sigma_n(G) = 0. \quad (3.2.66)$$

Alors :

$$\sigma_i(G) \geq \sigma_i(A^+), \quad 1 \leq i \leq n. \quad (3.2.67)$$

Démonstration 3.2.15. Il s'agit d'une conséquence directe de l'utilisation d'une décomposition spectrale pour décrire l'ensemble des pseudo-inverses de A , voir l'équation 3.2.58.

Corollaire 3.2.2. *Soit A une matrice carrée d'ordre k . Le plus petit élément, au sens de l'ordre de Loewner, de l'ensemble des pseudo-inverses de A est A^+ .*

Démonstration 3.2.16. Il s'agit d'une reformulation de la proposition 3.2.7.

Nous aboutissons désormais au résultat suivant sur le volume des pseudo-inverses de A .

Définition 3.2.3. Soit A une matrice carrée d'ordre k . Soit $C_l(A)$ la matrice à $\binom{k}{l}$ lignes et $\binom{k}{l}$ colonnes dont les lignes et les colonnes sont indexées par les parties de cardinal l de l'ensemble $\{1, \dots, k\}$, l'ensemble de ces parties est noté $Q_{l,k}$, et le terme général de $C_l(A)$ est le déterminant extrait d'ordre l de A associé aux lignes et colonnes considérées.

Le l -volume de A est :

$$\text{vol}_l A = \left(\text{tr} \left(C_l(AA') \right) \right)^{1/2} = \left(\sum_{I \in Q_{l,k}} \prod_{i \in I} \sigma_i^2 \right)^{1/2}, \quad (3.2.68)$$

où les σ_i , $1 \leq i \leq k$ sont les valeurs spectrales de A .

Proposition 3.2.8. Soit A une matrice carrée d'ordre k de rang r et $1 \leq l \leq r$. Alors A^+ minimise le volume $\text{vol}_l(G)$ dans la classe des pseudo-inverses G de A .

Démonstration 3.2.17. Il suffit d'appliquer la proposition 3.2.7 dans la définition 3.2.3.

Le volume de la matrice de variance covariance, lorsqu'il est non nul, est associé au critère de D -optimalité. Sa minimisation, dans le cas du modèle linéaire gaussien, revient à rendre minimal le volume de l'hyper-ellipsoïde de confiance associé aux paramètres du modèle. Le fait que l'inverse de Moore-Penrose, parmi l'ensemble des pseudo-inverses d'une matrice A , rende minimal le l -volume du pseudo-inverse de A et que le plus petit élément, au sens de l'ordre de Loewner, de l'ensemble des pseudo-inverses de A est A^+ , permet d'apporter un fondement statistique à son choix pour la définition 3.2.4 ci-dessous. Rappelons que, dans le contexte des surfaces que nous étudions ici, le choix d'un pseudo-inverse de A n'est pas nécessairement sans influence.

Définition 3.2.4. Considérons une matrice des moments d'un plan ξ . La surface de variance extrapolée à χ de l'estimateur de la réponse moyenne, $\widehat{\eta}(\mathbf{x})$ est :

$$v_{M(\xi)}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})' M(\xi)^+ \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \chi. \quad (3.2.69)$$

Remarque 3.2.5. Si la matrice $M(\xi)$ est inversible, alors nous avons : $M(\xi)^+ = M(\xi)^{-1}$ et les surfaces de variance définie en 3.1.2 et 3.2.4 coïncident. Nous pouvons ainsi les noter de la même manière par $v_{M(\xi)}$.

3.2.4. Surface de variance extrapolée et plans faiblement invariants

Définition 3.2.5. Une surface de variance extrapolée à χ est dite \mathcal{G} -invariante si :

$$v_{M(\xi)}(g(\mathbf{x})) = v_{M(\xi)}(\mathbf{x}), \quad \forall g \in \mathcal{G}, \forall \mathbf{x} \in \chi. \quad (3.2.70)$$

Nous nous intéressons désormais à un analogue du théorème 3.1.1 pour les surfaces de variance extrapolée à χ . Nous décomposons l'équivalence du théorème 3.1.1 en deux propositions.

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Proposition 3.2.9. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour lequel \mathcal{Q} est un sous-groupe du groupe orthogonal \mathcal{O}_k ou tel que Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$. Alors $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$, la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$, est \mathcal{G} –invariante si le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} –faiblement invariant.*

Démonstration 3.2.18. Nous rappelons la relation 3.1.5 qui découle du fait que Ψ est un morphisme, lemme 2.3.4 :

$$Q_{g^{-1}}^* = Q_g^{*-1}, \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.2.71)$$

Soit $\boldsymbol{\xi}$ un plan \mathcal{G} –faiblement invariant.

Le lemme 3.2.5 et la \mathcal{G} –invariance de la matrice des moments impliquent :

$$M(\boldsymbol{\xi})^+ = M(g(\boldsymbol{\xi}))^+ = Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^{*-1} = Q_{g^{-1}}^*M(\boldsymbol{\xi})^+Q_{g^{-1}}^*, \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.2.72)$$

Le passage de l'équation 3.2.75 ci-dessous dans l'équation 3.2.76 ci-dessous est valide dès que $(Q_{g^{-1}}^*M(\boldsymbol{\xi})Q_{g^{-1}}^*)^+ = Q_{g^{-1}}^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_{g^{-1}}^{*-1}$, et donc en particulier lorsque les conditions d'application du lemme 3.2.5 sont vérifiées, c'est-à-dire si \mathcal{Q} est un sous-groupe de \mathcal{O}_k ou si Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$.

Considérons la surface de variance extrapolée $v_{M(g(\boldsymbol{\xi}))}$ déduite de $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ par l'action d'un élément $g \in \mathcal{G}$:

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})(g(\boldsymbol{x}))} = \boldsymbol{f}(g(\boldsymbol{x}))'M(\boldsymbol{\xi})^+\boldsymbol{f}(g(\boldsymbol{x})), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi} \quad (3.2.73)$$

$$= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi} \quad (3.2.74)$$

$$= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'Q_{g^{-1}}^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_{g^{-1}}^{*-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi} \quad (3.2.75)$$

$$= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'M(g^{-1}(\boldsymbol{\xi}))^+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi} \quad (3.2.76)$$

$$= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'M(\boldsymbol{\xi})^+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi} \quad (3.2.77)$$

$$= v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi}. \quad (3.2.78)$$

Proposition 3.2.10. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant tel que Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$. Si $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$, la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$, est \mathcal{G} –invariante alors le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} –faiblement invariant.*

Démonstration 3.2.19. Montrons que si la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$ $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} –invariante alors le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} –faiblement invariant.

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})(g(\boldsymbol{x}))} = v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi}, \forall g \in \mathcal{G} \quad (3.2.79)$$

\Downarrow

$$\boldsymbol{f}(g(\boldsymbol{x}))'M(\boldsymbol{\xi})^+\boldsymbol{f}(g(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'M(\boldsymbol{\xi})^+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi}, \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.2.80)$$

Nous devons donc montrer que

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})'M(\boldsymbol{\xi})^+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\chi}, \forall g \in \mathcal{G} \quad (3.2.81)$$

\Downarrow

$$Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^* = M(\boldsymbol{\xi})^+, \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (3.2.82)$$

\Downarrow

$$M(\boldsymbol{\xi})^+ = Q_{g^{-1}}^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_{g^{-1}}^{*-1}, \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (3.2.83)$$

\Downarrow

$$M(\boldsymbol{\xi})^+ = (Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})Q_g^*)^+, \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (3.2.84)$$

\Downarrow

$$M(\boldsymbol{\xi})^+ = M(\boldsymbol{\xi}^g)^+, \quad \forall g \in \mathcal{G}, \quad (3.2.85)$$

en vertu du lemme 3.2.5 qui s'applique dans sa totalité puisque $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec Q_g^* pour tout g de \mathcal{G} .

Puisque $M(\boldsymbol{\xi})$ est une matrice des moments d'un plan nous avons, pour $g \in \mathcal{G}$:

$$\text{tr} \left(M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^* \right) = \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^* \right) \quad (3.2.86)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr} \left(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.2.87)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr} \left((Q_g^*\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i))'M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.2.88)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\boldsymbol{\xi}_i)) \quad (3.2.89)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad (3.2.90)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'M(\boldsymbol{\xi})^+\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.2.91)$$

$$= \text{tr} (M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) \quad (3.2.92)$$

$$= \text{rang}(M(\boldsymbol{\xi})) \quad (3.2.93)$$

$$= \text{DimVect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})). \quad (3.2.94)$$

Prouvons la même propriété pour $Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}M(\boldsymbol{\xi})^+$:

$$\text{tr} \left(Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}M(\boldsymbol{\xi})^+ \right) = \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'Q_g^{*-1'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^{*-1} \right) \quad (3.2.95)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr} \left(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'Q_g^{*-1'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^{*-1}\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.2.96)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \text{tr} \left((Q_{g^{-1}}^*\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i))'M(\boldsymbol{\xi})^+Q_{g^{-1}}^*\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.2.97)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(g^{-1}(\boldsymbol{\xi}_i)) \quad (3.2.98)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad (3.2.99)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'M(\boldsymbol{\xi})^+\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \right) \quad (3.2.100)$$

$$= \text{tr} \left(\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i)'M(\boldsymbol{\xi})^+ \right) \quad (3.2.101)$$

$$= \text{tr} (M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+) \quad (3.2.102)$$

$$= \text{rang}(M(\boldsymbol{\xi})) \quad (3.2.103)$$

$$= \text{DimVect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})). \quad (3.2.104)$$

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Enfin, posons $A = M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}$. Remarquons que A est symétrique définie positive.

Montrons que $B = (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}$ est l'inverse de Moore-Penrose de A .

Puisque $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ est un projecteur orthogonal, voir le lemme 3.2.4, $(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}$ est égal à $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$. Rappelons également que $M(\boldsymbol{\xi})$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+$ commutent et de ce fait $(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2} = (M(\boldsymbol{\xi}))^{1/2}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}$. Comme $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec Q_g^* , $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ commute avec $Q_g^{*'}$ et Q_g^{*-1} par le lemme 3.2.3.

Nous commençons par calculer BA :

$$\begin{aligned} BA &= (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \\ &= (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \end{aligned} \quad (3.2.105)$$

$$= (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \quad (3.2.106)$$

$$= (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \quad (3.2.107)$$

$$= (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \quad (3.2.108)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.2.109)$$

Puis nous calculons BAB :

$$BAB = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2} \quad (3.2.110)$$

$$= (M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2} \quad (3.2.111)$$

$$= (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2} \quad (3.2.112)$$

$$= B. \quad (3.2.113)$$

Enfin déterminons ABA :

$$ABA = M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.2.114)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))^{1/2} \quad (3.2.115)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \quad (3.2.116)$$

$$= A. \quad (3.2.117)$$

Comme A , B et $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ sont symétriques, nous avons :

$$AB = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ = (M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)' = (AB)' = B'A' = BA = M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+ = (BA)'. \quad (3.2.118)$$

Calculons $\text{tr}((A - P_1)A^+(A - P_1))$, avec P_1 le projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$:

$$\begin{aligned} \text{tr}(((A - P_1)A^+(A - P_1))) &= \text{tr}(AA^+A - P_1A^+A - AA^+P_1 + P_1A^+P_1) \\ &= \text{tr}(AA^+A) - 2\text{tr}(P_1A^+A) + \text{tr}(P_1A^+P_1) \\ &= \text{tr}(A) - 2\text{tr}(A^+A) + \text{tr}(A^+) \end{aligned} \quad (3.2.119)$$

car nous avons $P_1A = A = AP_1$ et $P_1A^+ = A^+ = A^+P_1$. En effet $P_1M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} = M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}P_1 = M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}$ puisque $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ et $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))^\perp$. Remarquons que, comme nous l'avons montré pour $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ dans le lemme 3.2.4,

AA^+ est un projecteur orthogonal sur $\text{Im}(A) = \text{Im}(AA^+ = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})))$.

Puis $\text{tr}(A) = \text{tr}(M(\boldsymbol{\xi})Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^*)$ et $\text{tr}(A^+) = \text{tr}(Q_g^{*-1} M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^{*-1'} M(\boldsymbol{\xi})^+)$. Ainsi nous obtenons :

$$\text{tr}((A - P_1)A^+(A - P_1)) = \text{tr}(A) - 2\text{tr}(A^+A) + \text{tr}(A^+) \quad (3.2.120)$$

$$\begin{aligned} &= \text{DimVect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) - 2\text{DimVect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) + \text{DimVect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.2.121)$$

Or, $\text{tr}((A - P_1)A^+(A - P_1)) = \text{tr}(((A^+)^{1/2}(A - P_1))'((A^+)^{1/2}(A - P_1)))$ donc $(A^+)^{1/2}(A - P_1) = 0$. En permutant le rôle de A et de A^+ nous obtenons également $A^{1/2}(A^+ - P_1) = 0$. Nous en déduisons que :

$$0 = A^{1/2}(A^+ - P_1) \quad (3.2.122)$$

$$= A^{1/2}(A^+)^{1/2}(A^+)^{1/2} - A^{1/2} \quad (3.2.123)$$

$$= (A^+)^{1/2}A^{1/2}(A^+)^{1/2} - A^{1/2} \quad (3.2.124)$$

$$= (A^+AA^+)^{1/2} - A^{1/2} \quad (3.2.125)$$

$$= (A^+)^{1/2} - A^{1/2}. \quad (3.2.126)$$

Par conséquent nous avons montré que $A = A^+$. Nous prouvons maintenant que $A = P_1$:

$$\text{tr}((A - P_1)'(A - P_1)) = \text{tr}(A^2) + \text{tr}(P_1) - 2\text{tr}(AP_1) \quad (3.2.127)$$

$$= \text{tr}(AA^+) - \text{tr}(AP_1) \quad (3.2.128)$$

$$= 0. \quad (3.2.129)$$

Ainsi si Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$:

$$P_1 = A \quad (3.2.130)$$

$$P_1 = M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^{1/2} \quad (3.2.131)$$

\Downarrow

$$M(\boldsymbol{\xi})^+ = (M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^{1/2}(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2} \quad (3.2.132)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^* M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^+ \quad (3.2.133)$$

$$= Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^* \quad (3.2.134)$$

$$= Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ Q_g^*, \quad (3.2.135)$$

ce qui achève la preuve de la proposition.

Nous aboutissons donc au théorème suivant :

Théorème 3.2.1. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant et un plan $\boldsymbol{\xi}$ tel que pour tout $g \in \mathcal{G}$, $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ et Q_g^* commutent. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.*
- ii- *La surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$, $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$, est \mathcal{G} -invariante.*

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Démonstration 3.2.20. Montrons le sens direct de l'équivalence.

Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$, par conséquent nous sommes dans les conditions d'applications de la proposition 3.2.9 et la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$ $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante puisque le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.

Montrons désormais l'implication réciproque.

Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$. Nous appliquons alors la proposition 3.2.10 et le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant puisque la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$ $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante.

Nous étudions désormais le rapport entre la condition Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ et les notions de \mathcal{G} -invariance faible et de \mathcal{G} -invariance de la surface de réponse extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$.

Lemme 3.2.8. Soit g_0 un élément de \mathcal{G} . Les deux assertions suivantes sont équivalentes :

- i- $Q_{g_0}^* M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^*$.
- ii- $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ et $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ sont $Q_{g_0}^*$ -stables.

Démonstration 3.2.21. Si $Q_{g_0}^* M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^*$, alors les sous-espaces propres de $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ sont stables par $Q_{g_0}^*$. Comme $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ est un projecteur orthogonal, $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) - I_k)$ et de ce fait $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ et $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ sont $Q_{g_0}^*$ -stables.

Réciproquement, supposons que $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ et $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ sont $Q_{g_0}^*$ -stables. Comme $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ est un projecteur orthogonal, nous avons la somme directe orthogonale $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) \oplus^\perp \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \mathbb{R}^k$. Pour $y \in \mathbb{R}^k$, soit $y = y_1 + y_2$ une décomposition associée à la somme directe précédente.

$$Q_{g_0}^* M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})y = Q_{g_0}^* y_1 + 0 \quad (3.2.136)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^* y_1 + M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^* y_2 \quad (3.2.137)$$

$$= M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^* y, \quad (3.2.138)$$

car $Q_{g_0}^* y_1 = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^* y_1$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_{g_0}^* y_2 = 0$ puisque $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ et $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ sont $Q_{g_0}^*$ stables.

Remarque 3.2.6. Si Q_{g_0} et $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ commutent alors $Q_{g_0}^*$ et $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ commutent.

Lemme 3.2.9. Soit un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant, tel que le plan $\boldsymbol{\xi}$ soit \mathcal{G} -faiblement invariant. Nous avons :

$$\text{Vect}(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\xi})) = Q_g^*(\text{Vect}(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\xi}))), \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.2.139)$$

Si de plus $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$ alors nous avons :

$$Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_g^*, \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.2.140)$$

Démonstration 3.2.22. Si le plan est faiblement invariant alors, pour $g \in \mathcal{G}$, nous avons $M(\boldsymbol{\xi}^g) = M(\boldsymbol{\xi})$. Par conséquent les deux projecteurs orthogonaux $M(\boldsymbol{\xi}^g)M(\boldsymbol{\xi}^g)^+$

et $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ sont égaux. De ce fait nous pouvons écrire :

$$\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) \quad (3.2.141)$$

$$= \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}^g)M(\boldsymbol{\xi}^g)^+) \quad (3.2.142)$$

$$= \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}^g)) \quad (3.2.143)$$

$$= \text{Vect}(Q_g^*\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \quad (3.2.144)$$

$$= Q_g^*(\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))) \quad (3.2.145)$$

$$= Q_g^*\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})). \quad (3.2.146)$$

Par conséquent $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable.

Si de plus $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$, alors nous pouvons appliquer alors le lemme précédent 3.2.8 et nous obtenons : $Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_g^*$.

Lemme 3.2.10. *Si $v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}_0) = 0$ pour un $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^v$, alors $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$. Si la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$, $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$, est \mathcal{G} -invariante alors $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ implique $Q_g^*\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$.*

Démonstration 3.2.23. Si $v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}_0) = 0$ alors nous avons :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)'M(\boldsymbol{\xi})^+\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = 0. \quad (3.2.147)$$

$M(\boldsymbol{\xi})^+$ étant symétrique semi définie positive, nous avons $\|(M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\|^2 = 0$.

Or $\text{Ker}((M(\boldsymbol{\xi})^+)^{1/2}) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ par le lemme 3.2.4 et la proposition 3.2.6. Par conséquent $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$.

Soit \mathbf{x}_0 tel que $v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}_0) = 0$. La \mathcal{G} -invariance de la surface de réponse extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$ donne :

$$(Q_g^*\mathbf{f}(\mathbf{x}_0))'M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^*\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = 0. \quad (3.2.148)$$

Nous avons $Q_g^*\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ puisque $M(\boldsymbol{\xi})^+$ est symétrique semi définie positive.

Remarque 3.2.1. Le résultat précédent n'implique pas nécessairement que $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$ si la surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$ $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante. En effet les éléments de $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ ne sont pas nécessairement tous de la forme $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$ avec $\mathbf{x}_0 \in \boldsymbol{\chi}$.

Nous allons maintenant considérer un cas particulier de groupe de matrices \mathcal{Q} . Établissons tout d'abord quelques résultats préliminaires.

Définition 3.2.6. *Une matrice A carrée d'ordre k est normale si $AA' = A'A$.*

Lemme 3.2.11. *Si N est une matrice normale alors pour tout sous-espace vectoriel H N -stable, son orthogonal H^\perp est N -stable.*

Démonstration 3.2.24. Dans une base adaptée à la somme directe $\mathbb{R}^k = H \oplus H^\perp$ nous avons :

$$NN' = \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' & 0 \\ B' & C' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AA' + BB' & BC' \\ CB' & CC' \end{pmatrix} \quad (3.2.149)$$

$$N'N = \begin{pmatrix} AA' & A'B \\ B'A & C'C + B'B \end{pmatrix}. \quad (3.2.150)$$

Par conséquent $BB' = 0$ et ainsi $\text{tr}(B'B) = 0$ ce qui implique que $B = 0$ donc que H^\perp est N -stable.

3.2 Cas général : matrice des moments quelconque, première approche

Lemme 3.2.12. *Si pour tout $g \in \mathcal{G}$, $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable, donc en particulier si le plan est \mathcal{G} -faiblement invariant, et si le groupe \mathcal{Q} est soit stable par transposition, soit constitué de matrices normales, donc en particulier si \mathcal{Q} est un sous-groupe de \mathcal{O}_k , alors $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$ et par conséquent $Q_g^*P_1 = P_1Q_g^*$.*

Démonstration 3.2.25. Le lemme 3.2.9 donne : $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable si le plan est faiblement \mathcal{G} -invariant. Si $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable alors $\mathbf{x} \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ équivaut à $\forall \mathbf{y} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})), \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0$. Si \mathcal{Q} est stable par transposition alors pour tout $g \in \mathcal{G}$, il existe $\theta(g)$ tel que $Q_g^{*'} = Q_{\theta(g)}^*$. $Q_g^*\mathbf{x} \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est équivalent à $\langle Q_g^*\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0$ pour tout $\mathbf{y} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$, c'est-à-dire $\langle \mathbf{x}, Q_{\theta(g)}^*\mathbf{y} \rangle = 0$ pour tout $\forall \mathbf{y} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$. Or $Q_{\theta(g)}^*(\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$, $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable.

Si \mathcal{Q} est constitué de matrices normales alors $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))^\perp = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable.

Lemme 3.2.13. *Si pour tout $g \in \mathcal{G}$, l'un des deux sous-espaces $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ ou $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable, et si le groupe \mathcal{Q} est soit stable par transposition, soit constitué de matrices normales, donc en particulier si \mathcal{Q} est un sous-groupe de \mathcal{O}_k , alors l'autre est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$ et par conséquent $Q_g^*M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})Q_g^*$.*

Démonstration 3.2.26. Si $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable alors $\mathbf{x} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ équivaut à $\forall \mathbf{y} \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})), \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0$. Si \mathcal{Q} est stable par transposition alors pour tout $g \in \mathcal{G}$, il existe $\theta(g)$ tel que $Q_g^{*'} = Q_{\theta(g)}^*$. $Q_g^*\mathbf{x} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est équivalent à $\langle Q_g^*\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0$ pour tout $\mathbf{y} \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$, c'est-à-dire $\langle \mathbf{x}, Q_{\theta(g)}^*\mathbf{y} \rangle = 0$ pour tout $\forall \mathbf{y} \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$. Or nous avons l'égalité $Q_{\theta(g)}^*(\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ et de ce fait $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable.

Si \mathcal{Q} est constitué de matrices normales alors $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))^\perp = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable.

De la même manière, nous montrons que si $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable alors $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable.

Toutefois, comme nous le rappellerons dans la section 3.4, dans le cas d'une action linéaire de \mathcal{G} sur $\boldsymbol{\chi}$, les groupes \mathcal{Q} n'héritent pas nécessairement des propriétés du groupe de matrices U_g défini dans la remarque 2.3.2.

Théorème 3.2.2. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant. Les deux assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant et $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)$ est Q_g^* -stable.*
- ii- *La surface de variance extrapolée à $\boldsymbol{\chi}$, $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$, est \mathcal{G} -invariante et $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ et Q_g^* commutent pour tout $g \in \mathcal{G}$.*

Démonstration 3.2.27. Pour le sens direct de l'équivalence, la condition de commutativité spécifiée dans l'énoncé du théorème 3.2.1 est automatiquement vérifiée en vertu du lemme 3.2.9. La réciproque est la même que celle du théorème 3.2.1.

Théorème 3.2.3. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{Q} constitué de matrices normales ou stable par transposition. Les deux assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- Le plan ξ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- ii- La surface de variance extrapolée à χ , $v_{M(\xi)}$, est \mathcal{G} -invariante et l'un des deux sous-espaces $\text{Ker}(M(\xi))$ ou $\text{Im}(M(\xi))$ est Q_g^* -stable.

Démonstration 3.2.28. Pour chaque sens de l'équivalence, la condition de commutativité spécifiée dans l'énoncé du théorème 3.2.1 est automatiquement vérifiée en vertu des lemmes 3.2.12 et 3.2.13.

Remarques 3.2.1.

- Si la matrice $M(\xi)$ est inversible alors $M(\xi)M(\xi)^+ = I_k$ et tout $Q_g = Q_g^*$ commute avec $M(\xi)M(\xi)^+$. Nous retrouvons les théorèmes 3.1.1 et 3.1.2.
- Les conditions $\text{Im}(M(\xi)M(\xi)^+)$ et $\text{Ker}(M(\xi)M(\xi)^+)$ Q_g^* -stables pour tout $g \in \mathcal{G}$ sont automatiquement vérifiées si $\text{Vect}(\mathbf{f}(\xi)) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\chi))$, c'est-à-dire si $P_1 = P$. En effet nous avons alors $\text{Ker}(P) = \text{Ker}(M(\xi)M(\xi)^+)$ et $\text{Im}(P) = \text{Im}(M(\xi)M(\xi)^+)$. Puis $Q_g^*P = Q_gP = Q_gP^2 = PQ_gP = PQ_g^*$.
- Si le choix d'un plan ξ ajoute des confusions supplémentaires à celles, naturelles, dues au choix d'un domaine expérimental χ , comme par exemple si χ est une sphère, alors ces confusions doivent être les mêmes pour tous les plans ξ^g déduits de ξ par l'action de $g \in \mathcal{G}$ et le noyau de $M(\xi^g)$ doit être Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$.
- Dans le cas général, le groupe \mathcal{Q} n'est pas un sous-groupe de \mathcal{O}_k . Nous allons voir dans la section 3.4 comment remédier à ce défaut dans le cas d'un modèle polynomial complet.

Remarque 3.2.2. Considérons un groupe \mathcal{Q} stable par transposition ou dont les éléments sont des matrices normales. Nous avons prouvé dans le théorème 3.2.3 l'équivalence de deux assertions, l'une portant sur l'invariance faible et une condition de stabilité, l'autre sur l'invariance de la surface de variance extrapolée et une autre condition de stabilité. Ces conditions de stabilité sont nécessaires et suffisantes comme le montre le théorème 3.2.4 ci-dessous.

Théorème 3.2.4. *Si le groupe \mathcal{Q} stable par transposition ou si ses éléments sont des matrices normales, alors les deux assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- Un plan ξ est \mathcal{G} -faiblement invariant si et seulement si la surface de réponse $v_{M(\xi)}$ est \mathcal{G} -invariante.
- ii- $M(\xi)M(\xi)^+$ et Q_g^* commutent pour tout $g \in \mathcal{G}$.

Démonstration 3.2.29. Montrons le sens direct de l'équivalence.

Soit ξ un plan \mathcal{G} -faiblement invariant et pour lequel la surface de réponse $v_{M(\xi)}$ est \mathcal{G} -invariante. Le lemme 3.2.9 assure que le sous-espace vectoriel $\text{Im}(M(\xi)M(\xi)^+)$ est Q_g^* -stables pour tout $g \in \mathcal{G}$. Le groupe \mathcal{Q} est soit stable par transposition soit constitué de matrices normales, nous pouvons donc appliquer le lemme 3.2.13 et en déduire que $M(\xi)M(\xi)^+$ et Q_g^* commutent.

La réciproque est le théorème 3.2.1.

Pour un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour lequel le groupe \mathcal{Q} est stable par transposition ou constitué de matrices normales, nous pouvons ainsi nous lancer dans la recherche de dispositifs pour lesquels la surface de réponse extrapolée à χ est invariante à l'aide de la caractérisation basée sur l'invariance de la matrice des moments pour l'action induite par

\mathcal{G} , c'est-à-dire l'invariance faible. En particulier dans cette recherche nous n'avons pas à nous préoccuper des difficultés d'estimabilité pouvant être liées à une forme particulière du domaine expérimental, une sphère par exemple. Nous utiliserons plus particulièrement ce résultat pour trouver des dispositifs isovariants à l'aide de diverses caractérisations portant sur le support du plan $\boldsymbol{\xi}$ et équivalentes à l'invariance de la matrice des moments pour l'action induite par le groupe orthogonal \mathcal{O}_s après avoir introduit les notations tensorielles d'un modèle polynomial qui permet de trouver un groupe \mathcal{Q} qui un sous-groupe d'un groupe orthogonal.

3.3. Cas général : matrice des moments quelconque, deuxième approche

3.3.1. Surface de variance généralisée

Les surfaces de variance extrapolées à $\boldsymbol{\chi}$, introduites dans la définition 3.2.4, ont un inconvénient majeur. Elles ne gardent aucune trace de l'image de la matrice des moments avec laquelle elles sont construites, ce qui, comme nous l'avons vu, a pour conséquence la condition de commutativité dans la réciproque du théorème 3.2.2.

Si $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \subsetneq \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$ alors les surfaces de variance extrapolées à $\boldsymbol{\chi}$ ne sont pas des surfaces de variance classiques. En effet la réponse moyenne n'est estimable que pour des points \boldsymbol{x} du domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ pour lesquels nous avons $\mathbf{f}(\boldsymbol{x}) \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$. Par conséquent il n'est pas statistiquement pertinent de définir cette variance en les points pour lesquels cette réponse moyenne n'est pas estimable.

La définition suivante d'une surface de variance généralisée réalise cette idée en attribuant une valeur infinie à la variance de l'estimateur de la réponse moyenne en les points pour lesquels cette réponse moyenne n'est pas estimable.

Remarque 3.3.1. Comme nous l'avons indiqué, le choix d'un pseudo-inverse pour $M(\boldsymbol{\xi})$ n'a pas d'influence sur la surface de variance dès que $\mathbf{f}(\boldsymbol{t})$ est dans $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. Pour les $\mathbf{f}(\boldsymbol{t})$ de $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$, nous posons donc $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{t}) = \mathbf{f}(\boldsymbol{t})' M(\boldsymbol{\xi})^+ \mathbf{f}(\boldsymbol{t})$. Par conséquent $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$, la surface d'information du plan $M(\boldsymbol{\xi})$, est définie par $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{t}) = (\mathbf{f}(\boldsymbol{t})' M(\boldsymbol{\xi})^+ \mathbf{f}(\boldsymbol{t}))^{-1}$ pour les $\mathbf{f}(\boldsymbol{t})$ de $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. Remarquons que $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est bien définie pour \boldsymbol{t} tel que $\mathbf{f}(\boldsymbol{t}) \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) \setminus \{\mathbf{0}\}$ puisque si $\mathbf{f}(\boldsymbol{t})' M(\boldsymbol{\xi})^+ \mathbf{f}(\boldsymbol{t}) = 0$ alors $\mathbf{f}(\boldsymbol{t}) \in \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+) = \text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))^\perp$. Par conséquent $\mathbf{f}(\boldsymbol{t}) = \mathbf{0}$. Ceci ne peut pas se produire si le modèle de régression utilisé contient une constante et donc en particulier s'il s'agit d'un modèle polynomial complet comme c'est le cas si nous utilisons une surface de réponse de degré d . En utilisant un argument de continuité, nous décidons de poser $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{t}) = +\infty$ et $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{t}) = 0$, si \boldsymbol{t} est tel que $\mathbf{f}(\boldsymbol{t}) \notin \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$.

Définition 3.3.1. Soit $M(\boldsymbol{\xi})$ une matrice des moments. La surface de variance généralisée $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est définie par :

$$\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{t}) = \begin{cases} \mathbf{f}(\boldsymbol{t})' M(\boldsymbol{\xi})^+ \mathbf{f}(\boldsymbol{t}) & \text{si } \mathbf{f}(\boldsymbol{t}) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \\ +\infty & \text{si } \mathbf{f}(\boldsymbol{t}) \notin \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})). \end{cases} \quad (3.3.1)$$

Définition 3.3.2. Soit $M(\boldsymbol{\xi})$ une matrice des moments. La surface d'information généralisée $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est définie par :

$$\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{t}) = \begin{cases} (\mathbf{f}(\mathbf{t})' M(\boldsymbol{\xi})^+ \mathbf{f}(\mathbf{t}))^{-1} & \text{si } \mathbf{f}(\mathbf{t}) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})) \\ 0 & \text{si } \mathbf{f}(\mathbf{t}) \notin \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi})). \end{cases} \quad (3.3.2)$$

Remarque 3.3.1. Si la matrice $M(\boldsymbol{\xi})$ est inversible, alors nous avons : $M(\boldsymbol{\xi})^+ = M(\boldsymbol{\xi})^{-1}$ et $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})) = \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi})) = \mathbb{R}^k$ et les surfaces de variance définie en 3.1.2, 3.2.4 et 3.3.1 coïncident.

La proposition suivante fait le lien entre les surfaces $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ et les matrices d'information réduites $C_K(\boldsymbol{\xi})$ introduites au chapitre 2 dans la définition 2.1.7.

Proposition 3.3.1. Soit $C_{\mathbf{f}(\mathbf{t})}(\boldsymbol{\xi})$ la matrice d'information réduite associée à $\mathbf{f}(\mathbf{t})$, pour $\mathbf{t} \in \boldsymbol{\chi}$. Nous avons alors :

$$\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{t}) = C_{\mathbf{f}(\mathbf{t})}(\boldsymbol{\xi}). \quad (3.3.3)$$

Démonstration 3.3.1. Nous renvoyons par exemple à [Puk93].

3.3.2. Invariances

Définition 3.3.3. Une surface de variance généralisée est dite \mathcal{G} -invariante si :

$$\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\mathbf{x})) = \mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}), \quad \forall g \in \mathcal{G}, \forall \mathbf{x} \in \boldsymbol{\chi}. \quad (3.3.4)$$

Définition 3.3.4. Une surface d'information généralisée est dite \mathcal{G} -invariante si :

$$\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\mathbf{x})) = \mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}), \quad \forall g \in \mathcal{G}, \forall \mathbf{x} \in \boldsymbol{\chi}. \quad (3.3.5)$$

Draper et Pukelsheim, dans [DP98], affirment qu'un plan est \mathcal{O}_k -faiblement invariant si et seulement si la surface d'information $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{O}_k -invariante. Nous pouvons facilement adapter les démonstrations de la section 3.2.4 pour obtenir ce résultat qui est énoncé dans [DP98] sans référence ni preuve mais qui a en fait été prouvé dans [Puk93]. La difficulté réside dans le fait que les auteurs utilisent la représentation tensorielle, introduite dans la section 3.4, ce qui rend automatiquement la matrice des moments $M(\boldsymbol{\xi})$ non inversible dès que le modèle est de degré supérieur ou égal à deux.

L'intérêt des surfaces de variance généralisée est que nous gardons une trace de ce qu'est l'image de la matrice des moments, ce qui permet de montrer le résultat suivant.

Lemme 3.3.1. Si la surface de variance généralisée $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante, alors le sous-espace vectoriel $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$. Si de plus $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$, alors

$$Q_g^* M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) = M(\boldsymbol{\xi})^+ M(\boldsymbol{\xi}) Q_g^*, \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (3.3.6)$$

Démonstration 3.3.2. Si $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{x}_0) = +\infty$ alors $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \notin \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. Par la \mathcal{G} -invariance de la surface d'information nous avons donc $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\mathbf{x}_0)) = +\infty$ et par conséquent $\mathbf{f}(g(\mathbf{x}_0)) \notin \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$, c'est-à-dire $Q_g^* \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \notin \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. L'inclusion réciproque s'obtient de la même manière. En passant aux complémentaires nous obtenons que $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable d'où le résultat de commutativité.

3.3 Cas général : matrice des moments quelconque, deuxième approche

Lemme 3.3.2. *Si pour tout $g \in \mathcal{G}$, $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi}))$ est Q_g^* -stable, donc en particulier si la surface de variance est \mathcal{G} -invariante, et si le groupe \mathcal{Q} est soit stable par transposition, soit constitué de matrices normales, donc en particulier si \mathcal{Q} est un sous-groupe de \mathcal{O}_k , alors $\text{Im}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$ et par conséquent Q_g^* et $M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+$ commutent.*

Démonstration 3.3.3. Preuve similaire à celle de la proposition 3.2.12.

Il est possible de montrer des résultats analogues pour les surfaces d'information $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$.

Remarque 3.3.2. Si deux surfaces de variances de type $v_{M(\boldsymbol{\xi})}$ coïncident il en va de même de leurs analogues de type $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$. Par conséquent si le plan est \mathcal{G} -faiblement invariant et si le groupe \mathcal{Q} est stable par transposition ou constitué de matrices normales, la surface de variance de type $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante et par conséquent la surface d'information $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante.

Nous montrons maintenant l'analogie de la proposition 3.2.10 pour les surfaces de variance de type $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$.

Proposition 3.3.2. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant tel que Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$. Si la surface de variance $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante alors le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.*

Démonstration 3.3.4. Nous avons $\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. La \mathcal{G} -invariance de $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ assure que $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\boldsymbol{\xi}_i)) < +\infty$ et ainsi que $\mathbf{f}(g(\boldsymbol{\xi}_i)) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$. La preuve de la proposition 3.3.2 repose sur le fait que

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) = v_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\boldsymbol{\xi}_i)). \quad (3.3.7)$$

Puisque $\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_i) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ et $\mathbf{f}(g(\boldsymbol{\xi}_i)) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ nous avons :

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) = \mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad (3.3.8)$$

$$v_{M(g(\boldsymbol{\xi}))}(\boldsymbol{\xi}_i) = \mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\boldsymbol{\xi}_i)). \quad (3.3.9)$$

D'où nous obtenons l'équivalence suivante :

$$v_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) = v_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\boldsymbol{\xi}_i)) \quad (3.3.10)$$

$$\Updownarrow$$

$$\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\boldsymbol{\xi}_i) = \mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\boldsymbol{\xi}_i)). \quad (3.3.11)$$

Cette dernière condition est vérifiée puisque la surface de variance $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante. La suite de la démonstration est inchangée et repose uniquement alors sur le fait que Q_g^* commute avec $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$, condition qui est une des hypothèses de la proposition.

Théorème 3.3.1. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour lequel le sous-espace vectoriel $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)$ est Q_g^* -stable, pour tout $g \in \mathcal{G}$. Les trois assertions suivantes sont équivalentes.*

- i- Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- ii- La surface de variance $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante.

-iii- La surface d'information $\mathbf{i}_M(\boldsymbol{\xi})$ est \mathcal{G} -invariante.

Démonstration 3.3.5. La seconde et la troisième assertion sont équivalentes par définition. Montrons que la première est équivalente à la seconde.

Pour chaque sens de l'équivalence, la condition de commutativité spécifiée dans l'énoncé du théorème 3.2.1 et dans la proposition 3.3.2 est automatiquement vérifiée en vertu des lemmes 3.2.9 et 3.3.1 qui compte tenu de l'hypothèse de Q_g^* -stabilité faite sur $\text{Ker}(M(\boldsymbol{\xi})M(\boldsymbol{\xi})^+)$ s'appliquent alors dans leur totalité. La remarque 3.3.2 permet d'appliquer le sens direct du théorème 3.2.1 à une surface de variance de type $\mathbf{v}_M(\boldsymbol{\xi})$.

Théorème 3.3.2. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{Q} constitué de matrices normales ou stable par transposition. Les trois assertions suivantes sont équivalentes.*

- i- Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- ii- La surface de variance $\mathbf{v}_M(\boldsymbol{\xi})$ est \mathcal{G} -invariante.
- iii- La surface d'information $\mathbf{i}_M(\boldsymbol{\xi})$ est \mathcal{G} -invariante.

Démonstration 3.3.6. Les conditions de commutativité spécifiée dans l'énoncé du théorème 3.3.1 sont automatiquement vérifiées en vertu du lemme 3.3.2 et de son analogue pour les surfaces d'information.

Nous indiquons maintenant le résultat de Pukelsheim, [Puk93]. La démarche adoptée par Pukelsheim permet de montrer que la condition de commutativité du théorème 3.3.1 est superflue dans le cas des surfaces de variance $\mathbf{v}_M(\boldsymbol{\xi})$ et d'information $\mathbf{i}_M(\boldsymbol{\xi})$. La démonstration tire parti du fait qu'il n'est pas nécessaire de spécifier le pseudo-inverse utilisé pour construire les surfaces de variance et d'information généralisées et de ce fait si $M(\boldsymbol{\xi})^-$ est un pseudo-inverse de $M(\boldsymbol{\xi})$ alors $Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^{*-1}$ est un pseudo-inverse de $M(\boldsymbol{\xi}^g)^-$, voir le lemme 3.2.5. Dans le cas de surfaces de variance extrapolées nous n'avions montré, au même lemme, que $M(\boldsymbol{\xi}^g)^+ = Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})^+Q_g^{*-1}$ que sous la condition que $M(\boldsymbol{\xi})^+M(\boldsymbol{\xi})$ et Q_g^* commutent.

Lemme 3.3.3. *Soient M et A deux matrices de moments. $\mathbf{i}_M = \mathbf{i}_A$ si et seulement si $M = A$. Par conséquent $\mathbf{v}_M = \mathbf{v}_A$ si et seulement si $M = A$.*

Démonstration 3.3.7. Puisque $\mathbf{i}_M = \mathbf{i}_A$, \mathbf{i}_M et \mathbf{i}_A s'annulent simultanément et par conséquent $\text{Im}(M) = \text{Im}(A)$. En effet si $\mathbf{f}(\mathbf{t}) \neq \mathbf{0}$ est dans $\text{Im}(M)$ alors $\mathbf{i}_M\mathbf{f}(\mathbf{t}) = \mathbf{i}_A\mathbf{f}(\mathbf{t}) > 0$. Soit $r = \dim(\text{Im}(M))$ et $A = KK'$ une décomposition telle que $\text{Rg}K = \text{Rg}K' = \text{Rg}A$ avec $K \in \mathcal{M}_{k,r}$ et L un inverse à gauche de K . K et M ont le même rang, $KLM = M$ et $MM^-K = K$.

La matrice définie positive $D = K'M^-K$ a la même trace que AM^- . Les surfaces d'informations étant égales nous avons :

$$\text{tr}(AM^-) = \text{tr}\left(\sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\mathbf{t})' M^- \mathbf{f}(\mathbf{t})\right) \quad (3.3.12)$$

$$= \text{tr}\left(\sum_{i=1}^r \mathbf{f}(\mathbf{t})' A^- \mathbf{f}(\mathbf{t})\right) \quad (3.3.13)$$

$$= \text{tr}(AA^-) \quad (3.3.14)$$

$$= r. \quad (3.3.15)$$

3.3 Cas général : matrice des moments quelconque, deuxième approche

Ainsi $\text{tr}(D) = r$. De même, comme $D^{-1} = LML'$, $\text{tr}(D^{-1}) = \text{tr}(MA^{-}) = \text{tr}(MM^{-}) = r$. Par conséquent nous avons

$$\text{tr}((D^{-1} - I_r)D(D^{-1} - I_r)) = \text{tr}(D^{-1} - I_r - I_r + D) = 0. \quad (3.3.16)$$

Comme D est symétrique, nous obtenons $D^{1/2}(D^{-1} - I_r) = 0$ d'où $D = I_r$. Par conséquent $M = KLML'K' = KK' = A$. La fin de la proposition est une conséquence directe du lien entre les surfaces $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ et $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$.

Théorème 3.3.3. *Considérons un modèle $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant. Les trois assertions suivantes sont équivalentes.*

- i- *Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.*
- ii- *La surface d'information $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante.*
- iii- *La surface de variance $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{G} -invariante.*

Démonstration 3.3.8. Pour tout $\mathbf{g} \in \mathcal{G}$, $\mathbf{f}(g(\mathbf{t})) \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$ si et seulement si $\mathbf{f}(\mathbf{t}) \in \text{Im}(Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'})$. Par le lemme 3.2.5 nous avons que $Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^{-}Q_g^*$ est un pseudo-inverse de $Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'}$ et ainsi :

$$\mathbf{f}(g(\mathbf{t}))'M(\boldsymbol{\xi})^{-}\mathbf{f}(g(\mathbf{t})) = \mathbf{f}(\mathbf{t})Q_g^{*'}M(\boldsymbol{\xi})^{-}Q_g^*\mathbf{f}(\mathbf{t}) \quad (3.3.17)$$

$$= \mathbf{f}(\mathbf{t})'(Q_g^{*-1}M(\boldsymbol{\xi})Q_g^{*-1'})^{-}\mathbf{f}(\mathbf{t}) \quad (3.3.18)$$

$$= \mathbf{f}(\mathbf{t})'(Q_{g^{-1}}^*M(\boldsymbol{\xi})Q_{g^{-1}}^{*'})^{-}\mathbf{f}(\mathbf{t}), \quad (3.3.19)$$

pour tout $\mathbf{t} \in \boldsymbol{\chi}$ tel que $\mathbf{t} \in \text{Im}(M(\boldsymbol{\xi}))$. Par conséquent, pour tout $\mathbf{t} \in \boldsymbol{\chi}$, $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\mathbf{t})) = \mathbf{i}_{Q_{g^{-1}}^*M(\boldsymbol{\xi})Q_{g^{-1}}^{*'}}(\mathbf{t})$.

Le sens direct de l'équivalence est une conséquence de l'égalité $M(\boldsymbol{\xi}) = Q_{g^{-1}}^*M(\boldsymbol{\xi})Q_{g^{-1}}^{*'}$. La réciproque découle de $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(\mathbf{t}) = \mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}(g(\mathbf{t})) = \mathbf{i}_{Q_{g^{-1}}^*M(\boldsymbol{\xi})Q_{g^{-1}}^{*'}}(\mathbf{t})$ et d'une application du lemme 3.3.3.

Corollaire 3.3.1. *Considérons un modèle $(\mathcal{O}_v, \mathcal{Q}_{\text{orth}})$ -équivariant. Les trois assertions suivantes sont équivalentes.*

- i- *Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{O}_v -faiblement invariant.*
- ii- *La surface d'information $\mathbf{i}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{O}_v -invariante.*
- iii- *La surface de variance $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ est \mathcal{O}_v -invariante.*

Démonstration 3.3.9. Il s'agit d'une conséquence directe du théorème 3.3.3.

Un résultat identique au lemme 3.3.3 existe-t-il pour les surfaces de variance de type $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$? Le point clef de la démonstration est que les surfaces de variance de type \mathbf{v} conservent dans leur définition ce qu'est l'image de $M(\boldsymbol{\xi})$ contrairement aux surfaces de variance extrapolées. Il ne semble donc pas possible de prouver un équivalent du lemme 3.3.3 dans le cas des surfaces de variance extrapolées.

3.4. Modèles polynomiaux pour surfaces de réponse

Nous avons introduit, dans la définition 2.3.4, les modèles polynomiaux de degré d complets ou non. Un terme de l'un de ces modèles n'est caractérisé que par son degré α , ainsi $t_1 \cdot t_2$ et $t_2 \cdot t_1$ correspondent au même terme. Clairement cette approche permet d'obtenir un système de fonctions polynomiales indépendantes sur le domaine expérimental, dès qu'il est d'intérieur non vide, il ne s'agit pas de la manière la plus adaptée pour comprendre l'action du groupe \mathcal{G} , au travers de \mathcal{Q} , sur $\mathbf{f}(\mathbf{x})$. La représentation polynomiale de la définition 2.3.4 est minimale pour le cas d'un domaine expérimental de type boule. Elle est semblable à celle que Box et Hunter, 1957 [BH57], ont utilisé pour lier isovariance et invariance de la surface de réponse par toute transformation du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v . Si l'on peut modifier une telle représentation à l'aide des notations schläfliennes et transformer \mathcal{Q} en un sous-groupe du groupe orthogonal, voir par exemple [MM02], ceci ne nous permet pas pour autant d'obtenir une description simple de l'action de \mathcal{G} sur $\mathbf{f}(\mathbf{x})$. Or, comme nous venons de le voir, il n'est pas nécessaire que la matrice des moments du plan soit inversible pour pouvoir lier isovariance et invariance de la surface de réponse par toute transformation du groupe orthogonal et de ce fait nous pouvons envisager de représenter nos modèles polynomiaux complets de degré d de manière surparamétrée, suivant ainsi une idée de Draper et Pukelsheim (1998), [DP98].

Pour souligner l'ampleur du problème, nous rappelons que Heiligers (1991), [Hei91], a indiqué que le « plus grand » groupe de transformations \mathcal{G} d'un modèle polynomial de type A tel que le modèle soit $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant et que le groupe \mathcal{Q} soit un sous-groupe du groupe orthogonal \mathcal{O}_k est le groupe \mathcal{G}_{sp} , introduit dans l'exemple 2.3.4. Bien entendu, le lemme 2.3.2, nous indique que, quelque soit le groupe de matrices \mathcal{Q} compact, il existe un produit scalaire E tel que \mathcal{Q} soit un sous-groupe de $\mathcal{O}_k(E)$, le groupe orthogonal de la forme quadratique associée à E . Or, la détermination d'un tel produit scalaire E se fait au cas par cas, par exemple dans le cas de l'action du groupe orthogonal sur un domaine expérimental d'intérieur non-vide, on peut avoir recours aux notations schläfliennes, [MM02].

Définition 3.4.1. Soient $A \in \mathcal{M}_{k,m}$ et $B \in \mathcal{M}_{l,n}$. Le produit de Kronecker de A et B est donné par la matrice $A \otimes B \in \mathcal{M}_{kl,mn}$ dont les blocs sont :

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{1,1}B & \dots & a_{1,m}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k,1}B & \dots & a_{k,m}B \end{pmatrix}. \quad (3.4.1)$$

Nous souhaitons souligner certaines des propriétés ordinaires du produit de Kronecker qui permettent de comprendre l'intérêt de son introduction. Nous renvoyons par exemple à [Sha83] pour les preuves de ces propriétés.

Propriétés 3.4.1. -i- Si $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^m$ et $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^n$ sont deux vecteurs alors $\mathbf{s} \otimes \mathbf{t}$ est le vecteur de \mathbb{R}^{mn} tel que :

$$\mathbf{s} \otimes \mathbf{t} = \begin{pmatrix} s_1 \mathbf{t} \\ \vdots \\ s_m \mathbf{t} \end{pmatrix} = (s_i t_j)_{\substack{i=1, \dots, m; \\ j=1, \dots, n}} \quad \text{dans l'ordre lexicographique} \quad (3.4.2)$$

3.4 Modèles polynomiaux pour surfaces de réponse

-ii- Soient $A \in \mathcal{M}_{k,m}$, $B \in \mathcal{M}_{l,n}$, $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^m$ et $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^n$. Nous avons :

$$(A \oplus B)(\mathbf{s} \oplus \mathbf{t}) = (A\mathbf{s}) \oplus (B\mathbf{t}). \quad (3.4.3)$$

-iii- Soient $A \in \mathcal{M}_{k,m}$ et $B \in \mathcal{M}_{l,n}$. Nous avons :

$$(A \oplus B)' = (A') \oplus (B'). \quad (3.4.4)$$

-iv- Soient $A \in \mathcal{M}_{k,m}$ et $B \in \mathcal{M}_{l,n}$. Nous avons :

$$(A \oplus B)^+ = (A^+) \oplus (B^+), \quad (3.4.5)$$

donc en particulier si A et B sont inversibles :

$$(A \oplus B)^{-1} = (A^{-1}) \oplus (B^{-1}). \quad (3.4.6)$$

-v- Soient $A \in \mathcal{O}_m$ et $B \in \mathcal{O}_n$. Nous avons :

$$(A \oplus B)' = (A') \oplus (B') = (A^{-1}) \oplus (B^{-1}) = (A \oplus B)^{-1}, \quad (3.4.7)$$

et $A \oplus B \in \mathcal{O}_{mn}$.

Proposition 3.4.1. Les modèles polynomiaux complets, respectivement de degré 1, 2, 3 et d , peuvent être représentés de la manière suivante :

$$\eta(\mathbf{t}, \Theta) = \theta_0 + \mathbf{t}'\boldsymbol{\theta}_1, \quad (3.4.8)$$

$$\eta(\mathbf{t}, \Theta) = \theta_0 + \mathbf{t}'\boldsymbol{\theta}_1 + (\mathbf{t} \oplus \mathbf{t})'\boldsymbol{\theta}_2, \quad (3.4.9)$$

$$\eta(\mathbf{t}, \Theta) = \theta_0 + \mathbf{t}'\boldsymbol{\theta}_1 + (\mathbf{t} \oplus \mathbf{t})'\boldsymbol{\theta}_2 + (\mathbf{t} \oplus \mathbf{t})'\boldsymbol{\theta}_3, \quad (3.4.10)$$

$$\eta(\mathbf{t}, \Theta) = \sum_{r=0}^d (\mathbf{t}^{\otimes r})'\boldsymbol{\theta}_r, \quad (3.4.11)$$

où $\boldsymbol{\theta}_r = (\theta_{1,\dots,1}, \dots, \theta_{i_1,\dots,i_r})'$, ordonné dans l'ordre lexicographique, et où nous faisons les restrictions naturelles découlant de la commutativité du corps de base : $\theta_{i_1,\dots,i_r} = \theta_{i_{\pi(1)},\dots,i_{\pi(r)}} = \theta_{\{i_1,\dots,i_r\}}$, pour toute permutation π de l'ensemble $\{1, \dots, r\}$.

Démonstration 3.4.1. Vérification calculatoire directe.

Nous posons alors :

$$\mathbf{f}_{1,\otimes} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{t} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Theta_{1,\otimes} = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \boldsymbol{\theta}_1 \end{pmatrix} \quad (3.4.12)$$

$$\mathbf{f}_{2,\otimes} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{t} \\ \mathbf{t} \otimes \mathbf{t} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Theta_{2,\otimes} = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \boldsymbol{\theta}_1 \\ \boldsymbol{\theta}_2 \end{pmatrix} \quad (3.4.13)$$

$$\mathbf{f}_{3,\otimes} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{t} \\ \mathbf{t} \otimes \mathbf{t} \\ \mathbf{t} \otimes \mathbf{t} \otimes \mathbf{t} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Theta_{3,\otimes} = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \boldsymbol{\theta}_1 \\ \boldsymbol{\theta}_2 \\ \boldsymbol{\theta}_3 \end{pmatrix} \quad (3.4.14)$$

$$\mathbf{f}_{d,\otimes} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{t} \\ \vdots \\ \mathbf{t}^{\otimes d} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Theta_{d,\otimes} = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\theta}_r \end{pmatrix} \quad (3.4.15)$$

Remarque 3.4.1. *Il s'agit simplement de la représentation des applications polynomiales à l'aide des tenseurs symétriques.*

L'intérêt de cette représentation est que si l'action du groupe \mathcal{G} sur le domaine expérimental \mathcal{X} est linéaire, au sens de l'équation 2.3.22, alors les matrices Q_g ont une forme facile à décrire.

Proposition 3.4.2. *Si le modèle polynomial complet exprimé à l'aide de produits de Kronecker est $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur \mathcal{X} , les matrices associées à cette action linéaire étant notées U_g , alors les matrices Q_g sont données par la formule suivante :*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_g & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & U_g^{\otimes d} \end{pmatrix}. \quad (3.4.16)$$

Si $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X})) \neq \mathbb{R}^k$ alors nous pouvons prendre comme matrices Q_g^* les $Q_g^* = Q_g P + I_k - P$ avec P le projecteur orthogonal sur $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{X}))$. Dans le cas d'une action linéaire de \mathcal{G} sur \mathcal{X} , nous notons indifféremment la matrice Q_g par Q_g ou Q_{U_g} et Q_g^* par Q_g^* ou $Q_{U_g}^*$.

Démonstration 3.4.2.

$$Q_g(\mathbf{f}_{d,\otimes}(\mathbf{x})) = \mathbf{f}_{d,\otimes}(U_g \mathbf{x}) \quad (3.4.17)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ U_g \mathbf{x} \\ \vdots \\ (U_g \mathbf{x})^{\otimes d} \end{pmatrix} \quad (3.4.18)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_g & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & U_g^{\otimes d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{x}^{\otimes d} \end{pmatrix}. \quad (3.4.19)$$

La fin de la proposition est une application du lemme 2.3.1.

Proposition 3.4.3. *Si le groupe de matrices U_g est un groupe de matrices normales, respectivement orthogonales, alors Q_g^* est un groupe de matrices normales, respectivement orthogonales.*

3.4 Modèles polynomiaux pour surfaces de réponse

Démonstration 3.4.3. C'est une conséquence des propriétés du produit tensoriel exposées en 3.4.1 :

$$Q_{U_g U'_g}^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_g U'_g & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & (U_g U'_g)^{\otimes d} \end{pmatrix} P + I_k - P \quad (3.4.20)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U'_g U_g & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & (U'_g U_g)^{\otimes d} \end{pmatrix} P + I_k - P \quad (3.4.21)$$

$$= Q_{U'_g U_g} P + I_k - P \quad (3.4.22)$$

$$= Q_{U'_g U_g}^*. \quad (3.4.23)$$

Si de plus $U'_g = U_g^{-1}$ alors $Q_{U_g U'_g}^* = Q_{I_v}^* = I_k P + I_k - P = I_k$ qui est bien la matrice identité.

Remarque 3.4.1. Soit \mathcal{G} un groupe dont l'action d'un élément g sur le domaine expérimental χ se traduit par une action linéaire associée à la matrice U_g . Supposons que le groupe de matrices $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un groupe de matrices normales. Considérons un modèle polynomial complet exprimé à l'aide de produits de Kronecker et $(\mathcal{G}, \mathcal{Q}_{\otimes})$ -équivariant pour le groupe \mathcal{Q}_{\otimes} construit, dans la proposition 3.4.2. Le lemme 3.4.3 permet d'affirmer que \mathcal{Q}_{\otimes} est un groupe de matrices normales. C'est le cas en particulier si $\mathcal{G} = \mathcal{O}_k$.

Théorème 3.4.1. *Considérons un modèle polynomial complet exprimé à l'aide de produits de Kronecker et $(\mathcal{G}, \mathcal{Q}_{\otimes})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} dont l'action d'un élément g sur le domaine expérimental χ se traduit par une action linéaire associée à la matrice U_g , le groupe de matrices $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ étant un groupe de matrices normales. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *Le plan ξ est \mathcal{G} -faiblement invariant.*
- ii- *La surface de variance extrapolée $v_{M(\xi)}$ est \mathcal{G} -invariante et l'un des sous-espaces $\text{Ker}(M(\xi)M(\xi)^+)$ et $\text{Im}(M(\xi)M(\xi)^+)$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$.*

Démonstration 3.4.4. Nous avons montré que les matrices $Q_g^* \in \mathcal{Q}_{\otimes}$ sont toutes normales. Il s'agit donc d'une application du corollaire 3.2.3.

Corollaire 3.4.1. *Considérons un modèle polynomial complet exprimé à l'aide de produits de Kronecker et $(\mathcal{O}_v, \mathcal{Q}_{orth, \otimes})$ -équivariant. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *Le plan ξ est \mathcal{O}_v -faiblement invariant.*
- ii- *La surface de variance extrapolée $v_{M(\xi)}$ est \mathcal{O}_v -invariante et l'un des sous-espaces $\text{Ker}(M(\xi)M(\xi)^+)$ et $\text{Im}(M(\xi)M(\xi)^+)$ est Q_g^* -stable pour tout $g \in \mathcal{G}$.*

Démonstration 3.4.5. Il s'agit donc d'une application du théorème 3.4.1 au cas particulier où le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est le groupe orthogonal \mathcal{O}_v .

Nous n'exposons ici qu'une fraction de l'intérêt de la représentation tensorielle d'un modèle polynomial. En effet Draper et Pukelsheim, [DP98], utilisent cette représentation pour obtenir des résultats d'optimalité au sens de l'ordre de Kiefer, qui présente l'avantage d'être indépendant du système de coordonnées choisi pour calculer la matrice des moments d'un plan. L'ordre de Kiefer a été introduit par Pukelsheim en 1993 dans [Puk93], il étend la notion d'optimalité universelle exposée par Kiefer en 1975, dans [Kie75], pour le cas particulier des plans en blocs, à tous les types de plans. Ils en déduisent des classes essentiellement complètes pour l'ordre de Kiefer pour des modèles polynomiaux de degré 1, 2 ou 3, étendant ainsi les résultats de Pukelsheim, [Puk93], ainsi qu'une manière constructive d'améliorer la qualité d'un plan au sens de l'ordre de Kiefer et, cette fois-ci, de tous les critères d'optimalité invariants pour l'action du groupe orthogonal puisque le groupe $\mathcal{Q}_{orth,\otimes}$ est un sous-groupe du groupe orthogonal. Ceci concerne en particulier les critères ϕ_p que nous avons évoqués en 2.2.1.

Théorème 3.4.2. *Considérons un modèle polynomial complet exprimé à l'aide de produits de Kronecker et $(\mathcal{G}, \mathcal{Q}_{\otimes})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} dont l'action d'un élément g sur le domaine expérimental χ se traduit par une action linéaire associée à la matrice U_g , le groupe groupe de matrices $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ étant un groupe de matrices normales. La première assertion est équivalente à chacune des deux autres :*

- i- *Le plan ξ est \mathcal{G} -faiblement invariant.*
- ii- *La surface de variance $\mathbf{v}_{M(\xi)}$ est \mathcal{G} -invariante.*
- iii- *La surface d'information $\mathbf{i}_{M(\xi)}$ est \mathcal{G} -invariante.*

Démonstration 3.4.6. Nous avons montré que les matrices $Q_g^* \in \mathcal{Q}_{\otimes}$ sont toutes normales. Il s'agit donc d'une application du corollaire 3.2.3.

Le résultat de Draper et Pukelsheim, sur le fait qu'un plan ξ est \mathcal{O}_k -faiblement invariant si et seulement si la surface d'information $\mathbf{i}_{M(\xi)}$ est \mathcal{O}_k -invariante, est alors également une conséquence du théorème 3.3.2 et de la représentation tensorielle du modèle polynomial complet de degré d utilisée puisque le groupe $\mathcal{Q}_{orth,\otimes}$ est un sous-groupe du groupe orthogonal. Nous aboutissons alors au corollaire 3.4.2 suivant.

Corollaire 3.4.2. *Considérons un modèle polynomial complet exprimé à l'aide de produits de Kronecker et $(\mathcal{O}_v, \mathcal{Q}_{orth,\otimes})$ -équivariant. La première assertion est équivalente à chacune des deux autres :*

- i- *Le plan ξ est \mathcal{O}_v -faiblement invariant.*
- ii- *La surface de variance $\mathbf{v}_{M(\xi)}$ est \mathcal{O}_v -invariante.*
- iii- *La surface d'information $\mathbf{i}_{M(\xi)}$ est \mathcal{O}_v -invariante.*

3.5. Conclusion

Nous commençons par mettre en relation les plans isovariants dont le support est inclus dans une sphère avec les t -plans sphériques de force paire. Ces derniers sont des objets combinatoires qui interviennent dans plusieurs domaines des mathématiques. L'étude de leur existence, celle de leurs propriétés ainsi que celle de leur caractérisation a de ce fait été l'objet de plusieurs travaux de recherche. Nous utilisons ceux-ci pour en déduire

3.5 Conclusion

l'existence de dispositifs isovariants. Toutefois les cardinaux des plans ainsi obtenus sont souvent importants et ne permettent pas de répondre de manière satisfaisante au problème de la construction de plans expérimentaux isovariants de faible cardinal.

Ce chapitre a également permis de mettre une nouvelle fois en avant l'intérêt des plans isovariants grâce aux résultats de Neumaier et Seidel [NS92] ainsi que de Hardin et Sloane [HS92] sur la D -efficacité et la I -efficacité. Nous avons également fait le lien entre les t -plans sphériques combinatoires et les plans isovariants. Les techniques de construction de ces premiers peuvent donc être utilisées pour obtenir des dispositifs isovariants. Or comme nous l'avons vu il n'est pas évident de construire des plans sphériques et de surcroît des plans pour lesquels la force est maximale, le cardinal du plan étant fixé à l'avance.

Nous proposons une méthode de construction de plans faiblement invariants et en particuliers de plans sphériques isovariants au chapitre suivant.

Chapitre 4

Plans sphériques de force t

Dans ce chapitre nous nous intéressons aux diverses caractérisations des plans isovariants dont le support est inclus dans une sphère. L'intérêt de ces objets, au travers de considérations sur l'optimalité et la recherche pratique de plans isovariants, a été mis en évidence tout au long du chapitre 2. Au chapitre 3 nous avons vu l'intérêt des surfaces de variance \mathcal{G}_{orth} -invariante ainsi que leur lien avec les plans \mathcal{G}_{orth} -faiblement invariants, c'est-à-dire les plans isovariants. Nous verrons que le support d'un plan isovariant, lorsqu'il est inclus dans une sphère, est un plan sphérique combinatoire dont la force est en relation directe avec le degré du modèle A_d pour lequel le plan est isovariant. Les plans sphériques de force t sont des objets mathématiques présentant de nombreux intérêts dans des domaines variés comme la théorie des codes, l'intégration numérique et les formules de cubature. Par conséquent, la question des conditions de leur existence a été étudiée intensivement par de nombreux auteurs dont nous rappellerons les résultats principaux. Enfin nous montrerons un résultat qui lie les critères de D -optimalité et I -optimalité et les plans sphériques combinatoires ainsi que les formules de cubature sur la boule ou la sphère.

4.1. Force et isovariance

4.1.1. Définition des plans sphériques

Nous introduisons la notion de plan sphérique de force t ainsi que quelques unes de leurs propriétés élémentaires qui nous seront utiles dans la suite. L'analogie entre les t -plans sphériques et les t -plans au sens combinatoire est exposée dans l'article fondateur de P. Delsarte, J.M. Goethals et J.J. Seidel, *cf.* [DGS77]. Rappelons que nous notons S^v la sphère unité de \mathbb{R}^v .

Définition 4.1.1. *Soit X un sous-ensemble fini de S^v et t un entier positif. X est un t -plan sphérique si l'égalité suivante est vérifiée :*

$$\int_{S^v} f(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{|X|} \sum_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}), \quad (4.1.1)$$

quel que soit le polynôme f de degré inférieur ou égal à t et où la mesure μ est l'unique mesure de probabilité sur la sphère S^v invariante par l'action du groupe orthogonal \mathcal{O}_v .

Remarque 4.1.1. Un t -plan sphérique est encore appelé un plan sphérique de force t .

Nous commençons par donner deux propriétés élémentaires des plans sphériques.

4.1.2. Premières propriétés des plans sphériques

Proposition 4.1.1. *Si \mathbf{X} est un t -plan sphérique dans \mathbb{R}^v , alors, pour tout $0 \leq s \leq t$, \mathbf{X} est un s -plan sphérique dans \mathbb{R}^v .*

Démonstration 4.1.1. C'est une conséquence directe de la définition 4.1.1 puisque, comme $s \leq t$, si l'égalité 4.1.1 est vérifiée pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à t , alors elle l'est a fortiori pour tout polynôme de degré inférieur ou à s .

Proposition 4.1.2. *Si \mathbf{X} est un t -plan sphérique dans \mathbb{R}^v alors il en va de même de $\sigma(\mathbf{X})$, où σ est un élément de \mathcal{O}_v .*

Démonstration 4.1.2. C'est une conséquence directe de la définition 4.1.1 puisque la mesure sur la sphère considérée est invariante par l'action du groupe orthogonal \mathcal{O}_v .

Remarque 4.1.2. La proposition 4.1.2 montre donc que les plans sphériques sont définis à une isométrie orthogonale près. Ceci définit une relation d'équivalence sur l'ensemble des plans sphériques dans \mathbb{R}^v , ce qui nous invite à n'étudier qu'un représentant \mathbf{X}_0 de cette classe d'équivalence \mathcal{X} . Par conséquent, au cours de la phase de construction d'un plan sphérique de force t dans \mathbb{R}^v , nous pouvons, puisque l'action du groupe orthogonal \mathcal{O}_v est transitive sur la sphère \mathcal{S}^v , fixer les coordonnées de l'un des points du plan comme étant celles d'un point arbitrairement choisi dans la sphère Ω_v , par exemple $(1, 0, \dots, 0)$. Cette possibilité sera exploitée aux chapitres 5 et 7 et aura pour conséquence une réduction sensible de la complexité des calculs.

Si nous rajoutons des conditions d'optimalité, données par les critères Φ_p ou Φ_I par exemple, nous ne pourrions nous contenter de l'étude d'un seul représentant \mathbf{X}_0 d'une classe d'équivalence \mathcal{X} de plans sphériques, modulo le groupe orthogonal \mathcal{O}_v , que pour les seuls critères d'optimalité qui seront invariants pour l'action du groupe orthogonal sur le domaine expérimental χ . C'est le cas de la D -optimalité, voir l'exemple 2.4.2, et de la I -optimalité, voir la proposition 2.4.4, pour un modèle (G_{orth}, Q_{orth}) -équivariant et un plan isovariant. C'est aussi le cas de tout critère d'optimalité Φ_p et de la I -optimalité lorsque le modèle polynomial complet de degré d est exprimé à l'aide des notations tensorielles puisqu'alors le groupe $Q_{orth, \otimes}$ est constitué de matrices orthogonales, voir la remarque 3.4.1, et que les critères Φ_p sont orthogonalement invariants, voir la proposition 2.4.1.

Proposition 4.1.3. *Si \mathbf{X}_1 et \mathbf{X}_2 sont deux t -plans sphériques **disjoints** de \mathbb{R}^v alors $\mathbf{X}_1 \cup \mathbf{X}_2$ est un t -plan sphérique de \mathbb{R}^v .*

Démonstration 4.1.3. C'est une conséquence directe de la définition 4.1.1.

Lemme 4.1.1. *Soient \mathbf{X}_0 et \mathbf{X}_1 deux sous-ensembles dénombrables de Ω_v , la sphère unité de \mathbb{R}^v avec $v \geq 2$. Il existe $\rho \in \mathcal{O}_v$ tel que :*

$$\rho(\mathbf{X}_0) \cap \mathbf{X}_1 = \emptyset. \tag{4.1.2}$$

Démonstration 4.1.4. Supposons que pour tout $\rho \in \mathcal{O}_v$, l'intersection $\rho(\mathbf{X}_0) \cap \mathbf{X}_1$ soit non vide. Pour tout $\rho \in \mathcal{O}_v$, nous avons de ce fait $\mathbf{x}_0 \in \mathbf{X}_0$ et $\mathbf{x}_1 \in \mathbf{X}_1$ tels que $\rho(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_1$ et par conséquent il existe une application surjective de $\mathbf{X}_0 \times \mathbf{X}_1$ dans \mathcal{O}_v . Ceci est impossible puisque le premier ensemble n'est pas dénombrable si $v \geq 2$ alors que le second l'est comme produit cartésien de deux ensembles qui, par hypothèse, sont dénombrables.

Proposition 4.1.4. *Soit v un entier naturel supérieur ou égal à 2. Si nous disposons de l plans sphériques de force t dans \mathbb{R}^v dont les cardinaux sont des entiers consécutifs, de r_0 à $r_0 + l - 1$, et que $l \geq r_0$, alors il existe des plans sphériques de force t pour n'importe quel cardinal supérieur ou égal à r_0 .*

Démonstration 4.1.5. La preuve de la proposition découle de l'utilisation conjointe des propositions 4.1.2 et 4.1.3 et du lemme 4.1.1.

Soit n_0 un entier supérieur ou égal à r_0 .

Si $n_0 \leq r_0 + l - 1$ alors il existe un plan sphérique de force t de cardinal n_0 par hypothèse de la proposition.

Si $n_0 > r_0 + l - 1$ alors $n_0 = a * r_0 + b$, avec $0 \leq b \leq r_0 - 1$ et $a \geq 1$. Nous pouvons construire, par applications successives du lemme 4.1.1, valide puisque $v \geq 2$, un plan sphérique de force t et de cardinal $(a - 1) * r_0$ comme l'union disjointe de $a - 1$ transformées par des éléments bien choisis du groupe orthogonal de \mathcal{O}_v d'un plan \mathbf{X}_0 de cardinal r_0 et de force t dont l'existence est donnée comme hypothèse de la proposition.

Puis, il existe un plan sphérique de cardinal $r_0 + b$ et de force t par hypothèse puisque $0 \leq b \leq r_0 - 1$. À nouveau, quitte à transformer le support de ce plan par un élément du groupe orthogonal \mathcal{O}_v et appliquer le lemme 4.1.1 valide puisque $v \geq 2$, nous pouvons obtenir un plan disjoint du plan de cardinal $a(r - 1)$ et de force t que nous venons de construire. L'union de ces deux plans disjoints est donc bien un plan de cardinal n_0 et de force t .

Remarque 4.1.3. Nous utiliserons, par exemple, la proposition 4.1.4 au théorème 7.1.3 du chapitre 7.

4.1.3. Plans isovariants et plans sphériques

Le théorème suivant permet de mettre en rapport les plans ξ isovariants et les plans sphériques.

Théorème 4.1.1. *Si un plan, pour lequel tous les poids sont égaux, a son support inclus dans une sphère de rayon 1 et que, pour un modèle polynomial complet de degré d ($\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth}$)-équivariant, il est \mathcal{G}_{orth} -faiblement invariant, alors les points support du plan forment un $2d$ -plan sphérique. Réciproquement tout plan dont les points support forment un plan sphérique de force $2d$ est un plan isovariant si nous choisissons tous les poids des points support du plan égaux.*

Démonstration 4.1.6. Montrons le sens direct du théorème. Le support du plan est inclus dans la sphère unité. Si le plan est isovariant pour un modèle de régression polynomiale complet de degré d alors sa matrice des moments est égale à la matrice des moments de la distribution uniforme sur la sphère et par conséquent l'équation 4.1.1 est vérifiée pour tout monôme de degré inférieur ou égal à $2d$. Par linéarité l'équation 4.1.1

est vérifiée pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à $2d$.

Montrons l'implication inverse. Si le plan est un $2d$ -plan sphérique alors son support est inclus dans la sphère unité. Considérons le plan formé des points support de ce plan de force $2d$ affectés de poids tous égaux. Chacun des termes de la matrice des moments est alors égal au membre de gauche de 4.1.1 pour un polynôme de degré inférieur ou égal à $2d$ et par conséquent à son membre de droite puisque le plan est de force $2d$. Ainsi la matrice des moments du plan est égale à celle de la distribution uniforme sur la sphère ce qui est bien la matrice des moments caractérisant les plans isovariants.

Remarque 4.1.4. Le lien entre l'isovariance d'un plan analysé à l'aide d'un modèle de degré e dans un domaine expérimental de type boule centrée en l'origine du repère et la notion de plan sphérique de force $2e$ a été mise en évidence, de manière analogue au théorème 4.1.1, par Neumaier et Seidel dans [NS92] mais dans le contexte plus général des mesures euclidiennes de force t que nous évoquerons à la section 4.8.

L'intérêt majeur de ce théorème est de faire le lien entre la problématique statistique et les nombreux travaux existant dans plusieurs domaines des mathématiques et concernant les plans sphériques. Les plans sphériques sont aussi bien utilisés dans la théorie des codes, en combinatoire, pour la classification des réseaux ou que dans l'analyse numérique comme formules de cubature sur la sphère. Plusieurs directions de recherche ont été et sont toujours poursuivies : généralisation de la notion de plan sphérique à d'autres espaces que \mathbb{R}^n , existence et construction explicite de plans d'une force et d'un cardinal donnés, lien entre les représentations de sous-groupes du groupe orthogonal et force du plan, détermination du nombre minimal de points nécessaires à obtenir une force donnée, du nombre minimal de points à partir duquel il existe toujours un plan sphérique d'une force donnée.

Certains des résultats obtenus font appel à des notions algébriques et arithmétiques complexes. Nous nous contenterons d'exposer ceux qui présentent un intérêt particulier dans notre contexte. Nous commençons par donner un résultat d'existence général concernant les plans sphériques de force t .

4.2. Existence de plans sphériques

Dans la section précédente nous nous sommes intéressés à des ensembles de points tous situés sur la sphère et possédant la propriété que la valeur moyenne d'un polynôme de degré inférieur ou égal à t soit la moyenne des valeurs de ce polynôme évalué en les points de l'ensemble. Il n'est pas du tout évident que de telles configurations existent. Une approche possible de ces ensembles de points est de les voir comme des généralisations du théorème de la moyenne.

Théorème 4.2.1. *Théorème de la moyenne*

Soit $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue. Il existe $x \in [0, 1]$ tel que :

$$t \mapsto f(t)$$

$$f(x) = \int_0^1 f(t) dt.$$

Démonstration 4.2.1. Évidente.

4.3 Extension de la notion de plan sphérique

Définition 4.2.1. [Weighted Averaging Set]

Soit f_1, \dots, f_m m fonctions continues de $[0, 1]$ dans \mathbb{R} . Un ensemble moyennneur pondéré est la donnée de m couples $(x_1, \alpha_1), \dots, (x_m, \alpha_m)$ tels que $\sum_{i=1, \dots, m} \alpha_i = 1$ et :

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1, \dots, m} \alpha_i \cdot f_j(x_i) = \int_0^1 f_j(t) dt, \quad \forall j \in [1, \dots, m].$$

Un résultat classique démontre l'existence de tels ensembles ; attention ici il s'agit d'une moyenne pondérée et le problème de départ quant à lui concerne une moyenne arithmétique. Le résultat que nous allons exposer dans cette sous-partie est en fait très général. Il a été obtenu en 1984 par Seymour et Zaslavsky [SZ84] dans le contexte plus général exposé ci-dessous.

Théorème 4.2.2. [Existence of averaging sets]

Soit (Ω, \mathcal{T}) un espace topologique connexe par arcs muni d'une mesure μ finie, positive et telle que tout ouvert non vide soit de mesure non nulle. Soient $f_1, \dots, f_m : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^p$ des fonctions continues et intégrables sur Ω . Il existe un sous-ensemble fini de Ω tel que

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1, \dots, m} f_j(x_i) = \frac{1}{\mu(\Omega)} \int_{\Omega} f_j(t) d\mu, \quad \forall j \in [1, \dots, m].$$

Le cardinal de X peut être n'importe quel entier naturel sauf un nombre fini d'entre eux. De plus nous pouvons choisir X de telle sorte que les vecteurs $(f_1(x), \dots, f_m(x))$, pour $x \in X$, soient tous distincts.

Démonstration 4.2.2. Nous renvoyons à [SZ84] pour la démonstration de ce résultat d'existence très général. Si toutefois le lecteur n'est intéressé que par le cas particulier des plans sphériques, nous renvoyons alors à la preuve de Arias de Reyna, [Ari88], qui s'appuie sur le théorème de Brouwer et suffit pour prouver l'existence des objets que nous considérons.

Remarque 4.2.1. Il s'agit d'un résultat d'existence non constructive.

4.3. Extension de la notion de plan sphérique

Si nous consultons le chapitre récapitulatif de [Hog96] sur les plans sphériques, nous nous apercevons que la notion de plan sphérique ne concerne pas nécessairement des sous-ensembles d'une sphère d'un espace vectoriel réel. En effet, la définition d'un plan sphérique réel a été étendue à celle d'un t -plan dans un espace de Delsarte par Neumaier dans [Neu80] et [Neu81].

Définition 4.3.1. Considérons un espace métrique (\mathbf{X}, d) de diamètre fini δ . Notons $\sqrt{c_{x,y}}$ la distance entre deux points x et y de \mathbf{X} et ω une mesure finie sur \mathbf{X} . (\mathbf{X}, d) est un espace de Delsarte pour la mesure ω si pour toute paire d'entiers positifs (i, j) , il existe un polynôme $f_{i,j}$ de degré inférieur ou égal à i et j tel que :

$$\int_{\mathbf{X}} c_{a,x}^i c_{b,x}^j d\omega(x) = f_{ij}(c_{ab}), \quad \forall (a, b) \in \mathbf{X}^2. \quad (4.3.1)$$

Remarque 4.3.1. Les seuls espaces de Delsarte infinis connus sont les sphères d -dimensionnelles, les espaces projectifs sur les réels, les complexes, les quaternions ainsi que la droite projective et le plan projectif sur les octaves de Cayley.

Neumaier, [Neu80], introduit alors, pour toute valeur de $\alpha \in [0, \delta]$, une suite de polynômes $(q_i(\alpha))_{i \in \mathbb{N}}$; leur rôle est identique à celui joué par les polynômes harmoniques dans le théorème 4.5.1.

Définition 4.3.2. *Un ensemble fini \mathcal{B} de b points dans un espace de Delsarte (\mathbf{X}, d) pour la mesure ω est un t -plan si :*

$$\sum_{x \in \mathcal{B}} q_i(c_{\alpha, x}) = 0, \quad \forall a \in \mathbf{X}, \forall i \in \{1, \dots, t\}. \quad (4.3.2)$$

Hoggar a alors proposé, dans [Hog82], une manière unifiée de calculer les fonctions spéciales servant à définir ce qu'est un t -plan dans un espace de Delsarte infini. Des exemples de construction de t -plans et une étude des propriétés générales de ces plans a été menée dans [Hog84a], [Hog92].

Remarque 4.3.2. Le résultat de Seymour et Zaslavsky, [SZ84], assure de l'existence de t -plans dans les espaces de Delsarte pour toute valeur de t .

Hoggar a également déterminé une borne inférieure sur le nombre de points à inclure dans le plan compte tenu de la force que nous souhaitons obtenir. Il s'agit d'une généralisation d'un résultat de Delsarte, Goethals et Seidel, [DGS77], pour les t -plans sphériques dans \mathbb{R}^v que nous indiquons maintenant.

Proposition 4.3.1. *Soit \mathbf{X} un t -plan sphérique de cardinal r dans \mathbb{R}^v . Nous avons alors :*

$$r \geq \binom{v+e-1}{v-1} - \binom{v+e-2}{v-1}, \quad \text{si } t = 2e, \quad (4.3.3)$$

$$r \geq 2 \binom{v+e-1}{v-1}, \quad \text{si } t = 2e + 1. \quad (4.3.4)$$

Goethals et Seidel, [GS79], ont montré que cette inégalité découle en fait d'un résultat plus général de Sidelnikov, [Sid74].

Définition 4.3.3. *Les t -plans sphériques dont le cardinal est donné par la formule 4.3.3 si t est pair ou par la formule 4.3.4 si t est impair sont des « tight » t -plans sphériques.*

La justification du fait que cette inégalité est du même type que celle dite de Fisher concernant les plans en blocs incomplets équilibrés peut se trouver par exemple dans le livre de C.D. Godsil, [God93]. La démonstration de l'inégalité de Fisher ainsi que celles, 4.3.3 et 4.3.4, de la proposition 4.3.1 y figurent également. Nous y introduisons également le formalisme qui permet de voir que ces deux inégalités découlent bien des mêmes considérations et précise également que le choix du nom des objets que nous étudions, les t -plans sphériques, a été fait suite à une analogie avec les t -plans combinatoires ces deux structures combinatoires présentant le même type de propriétés d'invariance.

Bien que particulièrement intéressants, puisqu'ils nécessitent un nombre minimal de points support, ces plans sont en fait des exceptions.

4.4. Résultats de non existence

Suite à l'introduction des t -plans sphériques et des t -plans dans les espaces de Delsarte, un champ de recherche particulièrement actif a été de trouver, en fonction de l'espace de Delsarte considéré, pour quelles valeurs de t et de r il existe un « tight » t -plan. Dans l'article fondant la théorie des plans sphériques de force t , [DGS77], Delsarte, Goethals et Seidel se sont déjà intéressés à ce problème. Comme nous le verrons dans la suite, les cas des dimensions 1 et 2 doivent être traités à part. Nous rappelons ici les résultats qui ont été obtenus pour indiquer quelle peut être la difficulté liée à la construction de plans sphériques de force importante et de cardinal réduit. Commençons par le résultat de Delsarte, Goethals et Seidel.

Théorème 4.4.1. *Pour chacune des valeurs de t suivantes, 2, 3, 4, 5, 7, 11, nous pouvons trouver $v(t)$ tel qu'il existe un « tight » plan sphérique de force t dans $\mathbb{R}^{v(t)}$.*

Exemple 4.4.1. Nous donnons quelques exemples de « tight » plan sphérique de force t .

- Pour tout v , les $v + 1$ sommets d'un simplexe régulier de \mathbb{R}^v sont des « tight » plans sphériques de force 2.
- Pour tout v , les $2v$ sommets de l'hyperoctaèdre régulier de \mathbb{R}^v sont des « tight » plans sphériques de force 3.
- Les sommets de l'icosaèdre forment un « tight » plan sphérique de force 5 dans \mathbb{R}^3 .
- Trois « tight » plan sphérique de force 4 ont été construits à l'aide de lignes équiangulaires, voir [LS73] : pour $v = 2$, et un cardinal $r = 5$, pour $v = 6$ et un cardinal $r = 27$, enfin pour $v = 22$ et un cardinal $r = 275$.

Remarque 4.4.1. Les trois premières affirmations sont démontrées au chapitre 8 en tirant profit des symétries des objets considérés au travers des invariants polynomiaux associés à ces groupes de symétries.

Bannai, [Ban79], a alors formulé la conjecture suivante concernant la possible existence de « tight » plan sphérique dans \mathbb{R}^v .

Conjecture 4.4.1. *Il n'existe pas de « tight » plan sphérique de force t dans \mathbb{R}^v si $v \geq 3$ et $t \neq 1, 2, 3, 4, 5, 7, 11$.*

Cette conjecture a été démontrée par Bannai et Damerell dans deux articles, l'un montrant le résultat dans le cas de la force paire, [BD79], et l'autre concernant le cas d'une force impaire [BD80]. La preuve de ces deux théorèmes s'appuie sur une étude des solutions d'équations diophantiennes. Nous indiquons maintenant les deux résultats de Bannai et Damerell.

Théorème 4.4.2. *Si $t = 2n$ et $n \geq 3$ et $v \geq 3$, alors il n'existe pas de « tight » plan sphérique de force t dans \mathbb{R}^v .*

Théorème 4.4.3. *Si $t = 2n + 1$ et $n \geq 4$ et $v \geq 3$, alors il n'existe pas de « tight » plan sphérique de force t dans \mathbb{R}^v sauf si $t = 11$ et $v = 24$, valeurs pour lesquelles un tel plan existe.*

Après avoir résolu le problème de l'existence des « tight » plans sphériques dans \mathbb{R}^v , celui-ci a été étendu au cas des t -plans dans les espaces de Delsarte et résolu dans le cas des

espaces compacts symétriques de rang 1. Nous renvoyons à Helgason, [Hel78], pour la définition de ces espaces et à Matsumoto, [Mat71], pour un résultat qui indique que les espaces riemanniens isotropes, c'est-à-dire deux homogènes, sont exactement les espaces euclidiens ou riemanniens symétriques de rang 1. Un résultat de classification, reproduit dans [CS99], indique qu'il s'agit en fait, dans le cas compact, soit d'une sphère \mathcal{S}^v de \mathbb{R}^v , d'un espace projectif réel $\mathbb{R}\mathbf{P}^v$, complexe, $\mathbb{C}\mathbf{P}^v$, quaternionique, $\mathbb{H}\mathbf{P}^v$, ou du plan projectif sur les octaves de Cayley, $\mathbb{O}\mathbf{P}^2$, et que par conséquent ce sont des espaces 2 homogènes et donc bien des espaces de Delsarte. Il s'agit du contexte général développé suivant les deux approches similaires de Conway et Sloane, [CS99] et de Godsil, [God93].

Le cas de la droite projective $\mathbb{O}\mathbf{P}^1$ et du plan projectif $\mathbb{O}\mathbf{P}^2$ sur les octaves de Cayley a été traité par Hoggar dans [Hog84b].

Théorème 4.4.4. *Tout « tight » plan de force t dans $\mathbb{O}\mathbf{P}^1$ est de force 2 ou 3. Tout « tight » plan sphérique de force t dans $\mathbb{O}\mathbf{P}^2$ est de force 2 ou 5.*

Le cas d'un espace projectif complexe et quaternionique a été abordé par Bannai et Hoggar dans [BH85] et résolu dans [BH89].

Théorème 4.4.5. *Si X est un « tight » plan de force t dans un des espaces projectifs $\mathbb{C}\mathbf{P}^v$ ou $\mathbb{H}\mathbf{P}^v$ alors $t \leq 5$.*

Remarque 4.4.2. Tous les « tight » plans de force t dans \mathbb{R}^d sont connus sauf pour les valeurs de $t = 4, 5$ et 7 .

Comme nous le verrons au cours des chapitres suivants, les « tight » plans sphériques de force t sont tous associés à des structures algébriques ou combinatoires régulières. Cette constatation nous incitera également à rechercher les plans sphériques de force t dans \mathbb{R}^v dont le cardinal est proche de celui d'un « tight » plan de force t sous la forme de dispositifs possédant encore une certaine régularité. Cette régularité se traduit par une invariance des points support du plan par un sous-groupe fini du groupe orthogonal de \mathcal{O}_v . L'étude des plans sphériques dans \mathbb{R}^2 , réalisée par Hong [Hon82] nous conforte dans le choix de cette approche.

Une étude plus détaillée des cardinaux pour lesquels il existe des plans sphériques de force t a été menée par Boyvalenkov et Nikova, [BN94] et [BN98], Boyvalenkov, Danev et Nikova, [BDN99], Boumova, [Bou02] et Boyvalenkov, Boumova et Danev [BBD02].

4.5. Caractérisations des t –plans sphériques

Nous introduisons ici quelques-unes des caractérisations équivalentes des plans sphériques de force t qui ont été utilisées pour construire de tels objets. Nous proposerons au chapitre 5 une nouvelle manière de construire des plans de force paire. La détermination de caractérisation des plans sphériques de force t a été l'objet de plusieurs travaux et a montré des liens entre ces objets et plusieurs problèmes appartenant à des domaines des mathématiques a priori sans rapport avec eux. Les premières caractérisations équivalentes des plans sphériques à l'aide des fonctions harmoniques sont apparues dans l'article fondateur de Delsarte, Goethals et Seidel, [DGS77]. La construction de plans sphériques comme union

4.5 Caractérisations des t -plans sphériques

de G -orbites d'un point de la sphère par un sous-groupe fini du groupe orthogonal a été développée par Goethals et Seidel dans [GS79]. Toutefois, compte tenu du lien entre plans sphériques et formules de cubature, ce résultat est identique à celui de Sobolev, [Sob62], concernant les formules de cubature sur la sphère et lui est donc attribué. La définition des plans sphériques en termes de tenseurs est également introduite dans [GS79].

Seidel résume, dans [Sei01], les quatre définitions équivalentes principales d'un plan sphérique en termes d'une formule de cubature, de tenseurs et d'une formulation associée au problème de Waring. Détaillons cette dernière : il s'agit de trouver une isométrie linéaire F de $(\mathbb{R}^v, \|\cdot\|_2)$ dans $(\mathbb{R}^r, \|\cdot\|_q)$ où q est un entier pair strictement positif et, pour tout $k \geq 1$, pour tout $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_l) \in \mathbb{R}^l$, $l \geq 1$, $\|(x_1, \dots, x_l)\|_k = \sqrt[k]{\sum_{i=1}^l |x_i|^k}$.

4.5.1. Polynômes harmoniques

Théorème 4.5.1. *Nous supposons $v \geq 2$. Les quatre assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- X est un t -plan sphérique.
- ii- Quels que soient le polynôme f homogène de degré inférieur ou égal à t et $\sigma \in \mathcal{SO}_v$, le groupe spécial orthogonal, nous avons :

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} f(\sigma(\mathbf{x})). \quad (4.5.1)$$

- iii- Pour tout polynôme harmonique homogène non constant de degré inférieur ou égal à t , nous avons :

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} f(\mathbf{x}) = 0. \quad (4.5.2)$$

- iv- Soit p le plus grand entier pair inférieur ou égal à t et i le plus grand entier impair inférieur ou égal à t . Quel que soit $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^v$, nous avons les deux égalités :

$$\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha} \rangle^p = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (p-1)}{v(v+2) \cdots (v+p+2)} |\mathbf{X}| \langle \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha} \rangle^{p/2} \quad \text{et} \quad \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha} \rangle^i = 0. \quad (4.5.3)$$

Démonstration 4.5.1. La démonstration de ce résultat est trop longue pour être reproduite ici. Nous renvoyons le lecteur au chapitre 1 de [Ven01].

Le théorème ci-dessus permet de montrer le résultat :

Proposition 4.5.1. *Si \mathbf{X} est un $2t$ -plan sphérique antipodal, c'est-à-dire $-\mathbf{X} = \mathbf{X}$ alors c'est un $2t+1$ -plan sphérique.*

Démonstration 4.5.2. Si \mathbf{X} est antipodal alors la condition $\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha} \rangle^i = 0$ est automatiquement vérifiée.

4.5.2. Formules de cubature

Définition 4.5.1. Une formule de cubature de cardinal N et de force t sur la sphère unité \mathcal{S}^v de \mathbb{R}^v est un ensemble de couples $\{(a_1, \mathbf{X}_1), \dots, (a_N, \mathbf{X}_N)\}$ où a_i est un nombre réel et \mathbf{X}_i un sous-ensemble fini de \mathcal{S}^v , pour $1 \leq i \leq N$, tel que :

$$\int_{\mathcal{S}^v} f(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \frac{a_i}{|\mathbf{X}_i|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}_i} f(\mathbf{x}), \quad (4.5.4)$$

pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à t .

Pour une étude détaillée des conditions d'existence de telles formules, à l'aide, par exemple, de la théorie des polynômes orthogonaux nous renvoyons au livre de Dunkl et de Xu, [DX01].

Remarques 4.5.1.

- i- Les plans sphériques de force t sont des formules de cubature formées par un seul ensemble \mathbf{X}_1 .
- ii- L'union de plusieurs plans sphériques de force t bien choisis peut donner une formule de cubature de force $> t$.

Sobolev a introduit la théorie des groupes afin de construire des formules de cubature comme union d'orbites d'ensembles de points par des groupes finis, voir [Sob62] et [Sob74]. Par conséquent, les polytopes sphériques et les systèmes de racines peuvent être associés à des formules de cubature. Les invariants des groupes finis utilisés sont liés avec la force maximale d'une formule de cubature. Goethals et Seidel ont repris cette idée en 1981 dans [GS81] et construisent de cette manière des plans sphériques remarquables : des plans de force 15 dans \mathbb{R}^{24} , de force 11 dans \mathbb{R}^8 , de force 19 dans \mathbb{R}^4 et de force 9 dans \mathbb{R}^3 . Pour cela ils utilisent la troisième caractérisation, du théorème 4.5.1, des points support des plans sphériques. Ils en déduisent alors que pour augmenter la force d'un plan il suffit de prendre la \mathcal{G} -orbite d'un point qui est le zéro d'un polynôme harmonique \mathcal{G} -invariant non constant et de plus petit degré. Cette même idée a été utilisée par Hardin et Sloane dans [HS92].

4.5.3. Représentation des groupes finis

Bannai a construit des plans sphériques comme union d'orbites de points de \mathcal{S}^r par un groupe fini. Certains de ces résultats ont été repris dans l'article récent de De la Harpe et Pache, [dP04] qui les présentent à l'aide de la théorie des représentations des groupes finis. Sobolev, [Sob62], a été le premier à utiliser cette approche. Nous développerons plus particulièrement ce point au chapitre 5 qui a un rapport direct avec l'approche que nous avons évoquée au paragraphe 4.5.2.

4.6. Résultats d'existence constructifs

Dans cette section, nous indiquons les nombreux résultats constructifs d'existence de plans sphériques qui ont été obtenus depuis leur définition par Delsarte, Goethals et Seidel en

1977 dans [DGS77]. Nous indiquerons au chapitre 5 pourquoi nous ne trouvons pas complètement satisfaisant, dans la plupart des cas et compte tenu de la finalité statistique de notre étude, de nous contenter de proposer leur application directe. Toutefois, eu égard aux théorèmes 4.1.1, 4.7.2 et 4.7.3, ces dispositifs présentent déjà des propriétés statistiques suffisamment attractives pour l'expérimentateur pour que nous les mentionnions ici et proposons leur utilisation.

4.6.1. Cas particulier de la dimension 2

Nous indiquons maintenant les résultats, propres à la dimension 2, que nous avons mentionnés dans l'introduction à la section 4.4.

Nous identifions \mathbb{R}^2 à \mathbb{C} . Nous avons alors $\Omega_2 = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$. Un plan sphérique \mathbf{X} est alors un ensemble fini $\{z_1, \dots, z_r\}$ de nombres complexes de module 1. Les fonctions polynomiales homogènes de degré m dans \mathbb{R}^2 sont des combinaisons linéaires à coefficients non tous nuls de $x^m, x^{m-1}y, \dots, xy^{m-1}, y^m$. Nous pouvons procéder à un changement de base et remplacer (x, y) par (z, \bar{z}) avec $z = x + iy$. Les polynômes harmoniques homogènes de degré m sont alors les combinaisons linéaires à coefficients tous deux non nuls de $\operatorname{Re}(z^m)$ et $\operatorname{Im}(z^m)$. Les polynômes harmoniques homogènes de degré inférieur ou égal à m , Harm_m , sont un espace vectoriel engendré par les $\operatorname{Re}(z^l)$ et $\operatorname{Im}(z^l)$ pour $0 \leq l \leq m$. La condition, *iii* du théorème 4.5.1 pour \mathbf{X} d'être un t -plan sphérique, qui s'écrit $\sum_{x \in \mathbf{X}} f(x)$, pour tout polynôme harmonique f de degré inférieur ou égal à t , est alors simplement $z_1^m + \dots + z_r^m = 0$ pour $0 \geq m \geq t$.

Proposition 4.6.1.

- L'ensemble des racines r -èmes de l'unité est un t -plan sphérique à r éléments pour tout $t < r$.
- Les plans sphériques de force $(r - 1)$ à r éléments sont les sommets des polygones réguliers à r côtés.

Démonstration 4.6.1. Nous renvoyons à [Ven01].

Théorème 4.6.1. Soit \mathbf{X} un plan sphérique de force t .

- Si $t + 1 \leq |\mathbf{X}| \leq 2t + 1$, alors \mathbf{X} est un polygone régulier.
- Si $|\mathbf{X}| = 2t + 2$, alors \mathbf{X} est la réunion de deux polygones réguliers à $t + 1$ côtés. En particulier \mathbf{X} peut être le polygone régulier à $2t + 2$ côtés.
- Il existe une infinité de classes d'équivalence, modulo le groupe orthogonal \mathcal{O}_2 , de t plans sphériques qui ne sont pas des unions de polygones réguliers si $|\mathbf{X}| \geq 2t + 3$.

Démonstration 4.6.2. Nous renvoyons à l'article de Hong, [Hon82].

Remarque 4.6.1. Un « tight » plan sphérique de force t dans \mathbb{R}^2 est un polygone régulier à $t + 1$ côtés. Il existe donc des « tight » plans sphériques de force t dans \mathbb{R}^2 pour toutes les valeurs de $t \geq 1$, ce qui contraste nettement avec les résultats que nous avons exposés sur les plans sphériques dans \mathbb{R}^v , $v \geq 3$. En particulier le seul « tight » plan sphérique de force 6 dans \mathbb{R}^v est obtenu pour $v = 2$ en considérant les sommets d'un heptagone régulier.

4.6.2. Cas général

La construction de plans sphériques s'est principalement axée autour de deux champs de recherche : la construction de plans de force arbitrairement grande sans considération particulière pour la dimension v de l'espace sous-jacent ou de manière complémentaire la construction de plans de force donnée t_0 quelque soit la dimension v de l'espace sous-jacent. Comme nous le verrons au chapitre 7, une détermination de la force maximale accessible avec un plan de cardinal r donné dans \mathbb{R}^v n'a été menée à bien que pour $v = 3$ et $1 \leq r \leq 100$ par Hardin et Sloane, [HS96] et débutée, il y a déjà plusieurs années, pour $v = 4$ toujours par Hardin et Sloane, [SHC03], sans qu'un résultat aussi complet que celui obtenu pour le cas $v = 3$ n'ait été pour l'instant publié.

Force 2

Commençons par le cas des 2-plans dans \mathbb{R}^v . L'inégalité 4.3.3 impose que le cardinal d'un 2-plan soit supérieur ou égal à $v + 1$. Mimura en 1990, dans [Mim90], a montré qu'il n'existe pas de 2-plan sphérique de cardinal r dans \mathbb{R}^v si v est impair et si $r = v + 2$ et a donné une construction explicite pour tous les autres cas possibles.

Théorème 4.6.2. *Soit un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 1, c'est-à-dire de régression linéaire multiple à v variables, défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant. Il existe un plan ξ , exact, dont les poids sont tous égaux, isovariant et dont le support est formé de A points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule si et seulement si v est pair ou v est impair et $A = v + 2$. Ces plans sont de surcroît A_1 -admissibles.*

Démonstration 4.6.3. L'existence d'un plan exact pour lequel tous les poids sont égaux et formé de points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule pour les cardinaux donnés dans l'énoncé du théorème est une conséquence des constructions de 2-plans sphériques par Mimura, [Mim90]. Le théorème 4.1.1 permet d'affirmer que ces plans sont isovariants pour un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 1, défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant.

Le théorème 2.6.4 et plus précisément le corollaire 2.6.6 indique que si, pour un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 1 $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant le support d'un plan ξ est inclus dans la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule alors ce plan est A_1 -admissible.

Force 3

Bajnok 1998, [Baj98], propose des constructions de 3-plans sphériques de cardinal r dans \mathbb{R}^v pour les valeurs de v et r suivantes : $v = 2$ et $r \geq 4$, $v = 3$ et $r = 6, 8, \geq 10$, $v = 4$ et $r = 8, \geq 10$, $v = 5$ et $r = 10, 12, \geq 14$ et $v \geq 6$ et si $r \geq 5(d + 1)/2$ est impair ou si $r \geq 2d + 2$ est pair.

Compte tenu de la proposition 4.1.1, ce sont des plans sphériques de force 2 et par conséquent chacun d'entre eux est associé à un plan ξ , exact, dont les poids sont tous égaux, isovariant, pour un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 1, c'est-à-dire de régression linéaire multiple à v variables, défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant

4.6 Résultats d'existence constructifs

et, dont le support est formé de points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule.

Force 4

Hardin et Sloane, en 1992 dans [HS92], se sont intéressés au problème de l'existence de plans de force 4 dans \mathbb{R}^v . Suite à une investigation numérique poussée, voir également [HS95], Hardin et Sloane ont formulé la conjecture 4.6.1.

Conjecture 4.6.1. *Il existe des 4-plans sphériques de cardinal A en dimension v pour les valeurs suivantes :*

v	A
1	2, 4, 6, 8, ...
2	≥ 5
3	12, 14, ≥ 16
4	≥ 20
5	≥ 29
6	27, 36, ≥ 39
7	≥ 53
8	≥ 69 .

Remarque 4.6.2. Rappelons que le théorème 4.2.2 de Seymour et Zaslavsky, [SZ84], assure qu'il existe des 4-plans sphériques pour toute valeur de A sauf un nombre fini d'entre elles. Nous sommes particulièrement intéressés de connaître toutes les valeurs pour lesquelles il existe un 4-plan sphérique.

Théorème 4.6.3. *Dans le cas de la dimension $v = 3$, la conjecture de Hardin et Sloane est vraie.*

Démonstration 4.6.4. Nous reviendrons sur ce résultat, démontré dans [HS92], au chapitre 7.

Remarques 4.6.1. Hardin et Sloane montrent également qu'il existe :

- i- une infinité non dénombrable de classes d'équivalence distinctes, modulo le groupe orthogonal \mathcal{O}_3 de \mathbb{R}^3 , de plans sphériques de force 4 dans \mathbb{R}^3 ,
- ii- un plan sphérique de force 4 dans \mathbb{R}^4 de cardinal 20,
- iii- un plan sphérique de force 6 dans \mathbb{R}^6 de cardinal 36.

Théorème 4.6.4. *Soit un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 2 dans \mathbb{R}^3 , défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant. Il existe un plan ξ , exact, dont les poids sont tous égaux, isovariant et dont le support est formé de A points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule et de B répétitions du point au centre du domaine expérimental si $A = 12$ ou $A = 14$ ou $A \geq 16$. Ces plans sont de surcroît A_2 -admissibles. Ils sont fortement isovariants si $B \geq 1$. En particulier il existe une infinité non dénombrable de classes d'équivalence distinctes, modulo le groupe orthogonal \mathcal{O}_3 de \mathbb{R}^3 , de plans sphériques de force 4 dans \mathbb{R}^3 dont la partie sphérique comporte $A = 12$ points.*

Démonstration 4.6.5. La démonstration est semblable à celle du théorème 4.6.2 mais en utilisant cette fois-ci les constructions de Hardin et Sloane de 1992, [HS92].

Remarques 4.6.2. Les deux autres résultats d'existence de plans sphériques de force 4, dans \mathbb{R}^4 et dans \mathbb{R}^6 , permettent de construire de la même manière qu'au théorème 4.6.4, des plans isovariants pour un régression multiple polynomiale complet de degré 2. Ces plans ont une partie sphérique de cardinal 20, respectivement 36. Ainsi il existe des plans fortement isovariants dans \mathbb{R}^4 dès que le cardinal du plan recherché est supérieur à 21 et dans \mathbb{R}^6 dès que le cardinal du plan recherché est supérieur à 37.

Force 5

La construction de plans sphériques de force 5 pour des valeurs arbitraires de v et r a été donnée par Bajnok en 1991, [Baj91b], à partir du moment où $r \geq v2^{v+1}$. L'existence de telles constructions a plus un intérêt théorique que pratique dans la mesure où les plans sphériques construits par Bajnok ont des cardinaux qui semblent très importants. Ainsi, si $v = 2$ alors nous obtenons un plan de taille supérieure ou égale à 16, si $v = 3$ alors nous obtenons un plan de taille supérieure ou égale à 48 et si $v = 4$ alors nous obtenons un plan de taille supérieure ou égale à 128. Or nous avons vu, à la proposition 4.6.1, qu'un 5-plan sphérique dans \mathbb{R}^2 est constitué par exemple des six sommets un hexagone régulier. L'icosaèdre est un 5-plan sphérique de \mathbb{R}^3 de cardinal 12 et $\{3, 4, 3\}$ est un 5-plan sphérique de \mathbb{R}^4 de cardinal 24. La définition du polytope régulier de \mathbb{R}^4 noté $\{3, 4, 3\}$, ainsi que la preuve que l'ensemble des sommets de polytope forment un 5-plan sphérique de \mathbb{R}^4 figurent au chapitre 8.

Théorème 4.6.5. *Soit un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 2, défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant. Il existe un plan ξ , exact, dont les poids sont tous égaux, isovariant et dont le support est formé de A points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule et de B répétitions du point au centre du domaine expérimental si $A \geq v2^{v+1}$. Ces plans sont de surcroît A_2 -admissibles. Ils sont fortement isovariants si $B \geq 1$.*

Démonstration 4.6.6. La démonstration est semblable à celle du théorème 4.6.2 mais en utilisant cette fois-ci les constructions de Bajnok de 1991, [Baj91b], et la proposition 4.1.1 qui montrent que ces plans sont aussi des plans sphériques de force 4.

Reznick en 1995, dans [Rez95], construit des plans de force 5 dans \mathbb{R}^3 en utilisant des polygones réguliers de \mathbb{R}^2 placés à des altitudes bien choisies dans la sphère de \mathbb{R}^3 . Il démontre ainsi que nous pouvons construire des plans sphériques de force 5 pour toutes les valeurs de r suivantes : 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24 et tout entier supérieur ou égal à 26.

Théorème 4.6.6. *Soit un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré 2 dans \mathbb{R}^3 , défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant. Il existe un plan ξ , exact, dont les poids sont tous égaux, isovariant et dont le support est formé de A points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule et de B répétitions du point au centre du domaine expérimental si $A = 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, \geq 26$. Ces plans sont de surcroît A_2 -admissibles. Ils sont fortement isovariants si $B \geq 1$.*

Démonstration 4.6.7. La démonstration est semblable à celle du théorème 4.6.2 mais en utilisant cette fois-ci les constructions de Reznick, [Rez95], et la proposition 4.1.1 qui montre que ces plans sont aussi des plans sphériques de force 4.

Force t en dimension 3

Bajnok en 1991, [Baj91a], s'est intéressé à la construction de plans sphériques de force t dans \mathbb{R}^3 à l'aide d'un « averaging set » \mathbf{A} , $\{a_1, \dots, a_l\}$, voir la définition 4.2.1, sur l'intervalle $[-1, 1]$ pour lequel tous les poids sont égaux, et de plans sphériques $\mathbf{Y} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m\}$ dans \mathbb{R}^2 .

Nous introduisons le plan \mathbf{X} dont le support est inclus dans les plans d'équation $x = x_i$, $1 \leq i \leq l$, et pour lequel, dans chacun de ces plans, les éléments de \mathbf{X} se déduisent de ceux de \mathbf{Y} par l'homothétie ρ_i de rapport $\sqrt{1 - x_i^2}$ qui amène ces points sur la sphère unité de \mathbb{R}^3 . Le plan \mathbf{X} est ainsi un plan sphérique. Bajnok montre que si l'on choisit \mathbf{A} de telle sorte que \mathbf{A} soit un « averaging set » sur l'intervalle $[-1, 1]$ pour les polynômes de degré inférieur ou égal à t , et \mathbf{Y} un polygone régulier à m côtés avec $m \geq t + 1$, alors \mathbf{X} est un t -plan sphérique de force t .

Théorème 4.6.7. *Soit $m(t)$ le cardinal minimal d'un « averaging set » sur l'intervalle $[-1, 1]$ pour les polynômes de degré inférieur ou égal à t . Le cardinal minimal, $M(t)$, d'un t -plan sphérique dans \mathbb{R}^3 est tel que :*

$$M(t) \leq (t + 1)m(t). \tag{4.6.1}$$

Les valeurs de $m(t)$ sont connues pour $1 \leq t \leq 9$: $m(1) = 1$, $m(2) = m(3) = 2$, $m(4) = m(5) = 4$, $m(6) = m(7) = 6$ et $m(8) = m(9) = 9$. Un résultat de Bernstein, repris dans [Kry62], montre que $m(t) \leq t$ si et seulement si $t \leq 7$ ou $t = 9$. Bajnok, dans [Baj91a], montre que $m(t) \leq 2t^2(t + 1)\sqrt{(t + 2)(2t + 1)(2t + 2\sqrt{2t + 4} + 5)}$. Ceci permet donc d'obtenir la borne générale sur $M(t)$ suivante :

$$M(t) \leq 2t^2(t + 1)^2\sqrt{(t + 2)(2t + 1)(2t + 2\sqrt{2t + 4} + 5)}. \tag{4.6.2}$$

Une borne inférieure pour $M(t)$ a déjà été indiquée à la proposition 4.3.1 :

$$M(t) \geq \begin{cases} \frac{t^2}{4} + t + \frac{3}{4} & \text{si } t \text{ est pair,} \\ \frac{t^2}{4} + t + 1 & \text{si } t \text{ est impair.} \end{cases} \tag{4.6.3}$$

Pour des plans de force 1 à 9 nous obtenons les résultats plus précis suivants :

$$\begin{aligned} M(1) &\leq 2m(1) = 2 & M(2) &\leq 3m(2) = 6 & M(3) &\leq 4m(2) = 8 \\ M(4) &\leq 5m(4) = 20 & M(5) &\leq 6m(5) = 24 & M(6) &\leq 7m(6) = 42 \\ M(7) &\leq 8m(7) = 48 & M(8) &\leq 9m(8) = 81 & M(9) &\leq 10m(9) = 90. \end{aligned}$$

Nous pouvons obtenir les valeurs exactes de $M(t)$ pour $t = 1, 2, 3, 5$ puisque pour ces forces nous connaissons des « tight » plans sphériques de force t dans \mathbb{R}^3 . Nous avons d'ailleurs vu qu'il s'agissait des seules forces pour lesquelles de tels plans existaient.

Proposition 4.6.2. *Nous avons $M(1) = 2$, $M(2) = 4$, $M(3) = 8$ et $M(5) = 12$.*

Pour les autres valeurs de t entre 1 et 9, nous comparerons la borne 4.6.2 avec celles déduites de l'étude de cas du chapitre 7 portant sur les résultats de Hardin et Sloane,

[HS96], et nous verrons que, bien que ce type de construction soit intéressante du fait de sa simplicité, elle ne permet pas de construire des t -plans sphériques dans \mathbb{R}^3 de cardinal minimal ou proche de ce minimum que si $t = 1, 2$ ou 3 . Or pour ces trois valeurs de force nous savons déjà construire des « tight » plans sphériques, voir l'exemple 4.4.1.

Théorème 4.6.8. *Soit un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré d dans \mathbb{R}^3 , défini en 2.3.4, $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariant. Il existe un plan ξ , exact, dont les poids sont tous égaux, isovariant et dont le support est formé de A points qui appartiennent à la frontière sphérique du domaine expérimental χ de type boule si $A \geq (2d + 1)m(2d)$ et donc a fortiori si $A \geq 4d^2(2d + 1)^2 \sqrt{(2d + 2)(4d + 1)(4d + 2\sqrt{4d + 4} + 5)}$. Ces plans sont de surcroît A_d -admissibles.*

Démonstration 4.6.8. La démonstration est semblable à celle du théorème 4.6.2 mais en utilisant cette fois-ci les constructions de Bajnok de 1991, [Baj91a].

4.7. 4-plans sphériques, modèles A_2 , D -efficacité et I -efficacité

Nous considérons un plan ξ , dont le support est inclus dans le domaine expérimental χ égal à la boule unité de \mathbb{R}^v , analysé à l'aide d'une surface de réponse de degré 2. Hardin et Sloane ont procédé à une étude très poussée des dispositifs D -optimaux et I -optimaux à l'aide du logiciel Gosset, qu'ils ont créé à cet effet, voir [HS91]. Nous rapportons ici certains de leurs résultats qui soulignent une nouvelle fois l'intérêt de l'utilisation des t -plans sphériques. Nous renvoyons à [HS92], à [HS93] et à [HS95] pour plus de détails.

Définition 4.7.1. *Soit $\mathcal{I}(v, r)$ (respectivement $\mathcal{D}(v, r)$), l'ensemble des plans, de cardinal r , I -optimaux (respectivement D -optimaux) pour un modèle polynomial complet de degré 2 et un domaine expérimental χ égal à la boule unité centrée en l'origine de \mathbb{R}^v .*

Remarque 4.7.1. Rappelons que le nombre de paramètres d'un modèle de degré 2 en dimension v est $\binom{v+2}{v}$. Par conséquent, un plan D -optimal ou I -optimal comporte au moins $r \geq \binom{v+2}{v}$ points support distincts.

Compte tenu des nombreux résultats numériques qu'ils ont obtenus, Hardin et Sloane formulent la conjecture suivante :

Conjecture 4.7.1. *Pour toutes valeurs de r et de v , $\mathcal{D}(v, r)$ ne contient que des plans dont le support est formé d'une partie sphérique et de point(s) au centre du domaine expérimental. Il n'en va pas de même pour les éléments de $\mathcal{I}(v, r)$, mais la perte de I -efficacité observée, lorsque nous contraignons les éléments de $\mathcal{I}(v, r)$ à être de la même forme que précédemment, est inférieure à 0,01 %.*

Nous considérons désormais un plan dont le support est l'union de B points appartenant à la surface de la boule unité de \mathbb{R}^v et de C répétitions du point au centre du domaine expérimental χ . Nous avons alors $r = B + C$ en tout. Hardin et Sloane observent

alors que les valeurs, pour les meilleurs plans ξ , des critères I - et D - sont souvent donnés par les formules suivantes :

$$\Phi_I(\xi) = \frac{1}{(v+2)(v+4)} \left(\frac{v^2(v^2+5v+10)}{2\beta} + \frac{8}{\gamma} \right) \quad (4.7.1)$$

$$\Phi_{0,HS}(\xi) = \frac{v}{\beta} (v+2)^{\frac{v-1}{v+2}} \left(\frac{\beta}{v\gamma 2^{v-1}} \right)^{\frac{2}{(v+1)(v+2)}}, \quad (4.7.2)$$

où $\beta = \frac{B}{r}$ et $\gamma = \frac{c}{r}$ et $\Phi_{0,HS}$ est le critère de D -optimalité considéré par Hardin et Sloane. Ce critère est égal à $\Phi_0^{\frac{2v}{(v+1)(v+2)}}$, où Φ_0 est le critère que nous avons introduit à l'exemple 2.2.1. Remarquons que $\Phi_{0,HS}$ est l'image de Φ_0 par une fonction bijective strictement croissante et que ces deux critères définissent les mêmes notions d'optimalité, les plans maximisant l'efficacité pour l'un, maximisent également l'efficacité pour l'autre.

Le théorème suivant fait le lien entre la D -efficacité et la I -efficacité maximale d'un plan et les 4-plans sphériques.

Théorème 4.7.1. *Pour des valeurs données de r , v , B et C , la I -efficacité et la D -efficacité d'un plan sont maximisées si les points de la partie sphérique du plan peuvent être placés de telle sorte qu'ils forment un 4-plan sphérique.*

Démonstration 4.7.1. En ce qui concerne la D -efficacité, ce résultat est une conséquence des travaux de Box et Hunter, [BH57], et de Kiefer, [Kie60]. Pour la I -efficacité, il s'agit d'un résultat de Hardin et Sloane, [HS92].

Corollaire 4.7.1. *Pour des valeurs données de r , v et B le nombre de répétitions, supérieur ou égal à 1, le théorème 4.7.1 permet d'affirmer que la I -efficacité et la D -efficacité d'un plan seront maximisées par les plans introduits aux théorèmes 4.6.4, 4.6.5 et 4.6.6, pour lesquels le cardinal de la partie sphérique est égal à $r - B$.*

Les théorèmes 4.7.2 et 4.7.3 permettent de préciser les conditions sous lesquelles un plan constitué d'une partie sphérique comportant B points et de C points au centre, $C \geq 0$ ont une valeur des critères $\Phi_{0,HS}$ et Φ_I donnée par les formules 4.7.2 et 4.7.1.

Théorème 4.7.2. *Un plan ξ analysé à l'aide d'un modèle A_2 a une valeur du critère $\Phi_{0,HS}$ donné par 4.7.2 si et seulement si les B points de sa partie sphérique forment un 4-plan sphérique.*

$$\Phi_{0,HS}(\xi) = \frac{v}{\beta} (v+2)^{\frac{v-1}{v+2}} \left(\frac{\beta}{v\gamma 2^{v-1}} \right)^{\frac{2}{(v+1)(v+2)}}. \quad (4.7.3)$$

Démonstration 4.7.2. Il s'agit d'un résultat de Neumaier et Seidel, [NS92].

Théorème 4.7.3. *Un plan ξ analysé à l'aide d'un modèle A_2 a une valeur du critère Φ_I donné par 4.7.1 si et seulement si les B points de sa partie sphérique forment un 4-plan sphérique.*

$$\Phi_I(\xi) = \frac{1}{(v+2)(v+4)} \left(\frac{v^2(v^2+5v+10)}{2\beta} + \frac{8}{\gamma} \right). \quad (4.7.4)$$

Démonstration 4.7.3. Il s'agit d'un résultat de Hardin et Sloane, [HS95].

Proposition 4.7.1. *Pour des valeurs données de r , v , B et C , la I -efficacité et la D -efficacité d'un plan sont maximales si et seulement si la partie sphérique est un 4-plan sphérique.*

Démonstration 4.7.4. En ce qui concerne la D -efficacité il s'agit d'un résultat de Neumaier et Seidel, [NS92]. Le cas de la I -efficacité a été traité par Hardin et Sloane dans [HS92] par exemple.

Nous utilisons désormais les résultats précédents pour trouver la manière optimale de répartir les r essais du plan entre B dans la partie sphérique et C répétitions du point au centre du domaine expérimental.

Proposition 4.7.2. *Pour v assez grand, la fraction γ de points au centre d'un dispositif I -optimal est :*

$$\gamma = \frac{4v\sqrt{v^2 + 5v + 10} - 16}{(v-1)(v+2)(v^2 + 4v + 8)}. \quad (4.7.5)$$

Démonstration 4.7.5. Nous renvoyons encore à [HS92].

Proposition 4.7.3. *Pour v assez grand, la fraction γ de points au centre d'un dispositif D -optimal est :*

$$\gamma = \frac{2}{(v+2)(v+4)}. \quad (4.7.6)$$

Démonstration 4.7.6. Il s'agit d'un théorème dû à Kiefer, voir [Kie60].

Nous obtenons alors les valeurs limites des critères $\Phi_{0,HS}$ et Φ_I en substituant les valeurs de γ , obtenus aux équations 4.7.5 et 4.7.6 ci-dessus, dans les expressions 4.7.1 et 4.7.2.

Proposition 4.7.4. *Les valeurs limites des critères I et D sont égales à :*

$$I_\infty = \frac{v+2}{2(v+4)} \left(\frac{(v-1)(v^2 + 4v + 8)}{v\sqrt{v^2 + 5v + 10} - 4} \right)^2, \quad (4.7.7)$$

$$D_\infty = \frac{(v+1)(v+2)^{\frac{2v}{v+1}}}{v+3} \left(\frac{v+3}{2^v} \right)^{\frac{2}{(v+1)(v+2)}}. \quad (4.7.8)$$

Ce résultat permet de calculer la D -efficacité et la I -efficacité de tout plan.

Étant donné un nombre d'essais r à réaliser, les résultats présentés dans cette section nous indiquent comment choisir, pour des plans isovariants et A_2 -admissibles, le nombre de répétitions du point au centre pour obtenir la D -efficacité ou la I -efficacité maximale. En effet si le plan est isovariant et A_2 -admissible alors le corollaire 2.6.4 permet d'affirmer que le plan comporte B points sur la surface de la frontière du domaine expérimental, qui est ici la boule unité de \mathbb{R}^v , et C points au centre du domaine expérimental. La minimisation des équations 4.7.1 et 4.7.2 permet de préciser la répartition des points entre la partie sphérique et le centre du domaine expérimental à partir du moment où nous pouvons répartir les B points de la partie sphérique du plan de telle sorte qu'elle forme un 4-plan sphérique. Reste alors à connaître les valeurs de B pour lesquelles il existe un 4-plan sphérique comportant B . La conjecture 4.6.1 formulée par Hardin et Sloane prend alors une dimension statistique particulièrement importante.

4.8. $2d$ –plans sphériques, modèles A_d et D –efficacité

Dans la section précédente, 4.7, nous avons appliqué un résultat de Neumaier et Seidel, [NS92], liant les plans sphériques complétés par des points au centre du domaine expérimental et la D –optimalité statistique pour un modèle de degré 2. Un plan sphérique complété par des points au centre est une mesure euclidienne, définie par Neumaier et Seidel dans [NS88].

Théorème 4.8.1. *Un plan est isovariant si et seulement si c’est un plan euclidien de force t .*

Démonstration 4.8.1. Nous renvoyons à [NS92].

Théorème 4.8.2. *Un plan ξ dans le domaine expérimental $\chi \subset \mathbb{R}^v$ égal à la sphère unité centrée en l’origine du repère est D –optimal pour un modèle polynomial sphérique de degré d , voir la définition 7.1.1, si et seulement si le support du plan ξ est une formule de cubature sur la sphère de \mathbb{R}^v de force $2d$.*

Démonstration 4.8.2. Nous renvoyons à [NS92].

Il existe un résultat analogue lorsque le domaine expérimental χ est la boule unité centrée en l’origine du repère. Celui introduit un nouveau type d’objet, les mesures euclidiennes qui sont des unions de plans sphériques. Il s’agit d’un domaine d’étude en soi qui ne peut être détaillé dans le cadre de ce travail. Nous renvoyons à [NS92] pour plus de détails.

4.9. Conclusion

Nous commençons par mettre en relation les plans isovariants dont le support est inclus dans une sphère avec les t –plans sphériques de force paire. Ces derniers sont des objets combinatoires qui interviennent dans plusieurs domaines des mathématiques. L’étude de leur existence, celle de leurs propriétés ainsi que celle de leur caractérisation a de ce fait été l’objet de plusieurs travaux de recherche. Nous utilisons ceux-ci pour en déduire l’existence de dispositifs isovariants. Toutefois les cardinaux des plans ainsi obtenus sont souvent importants et ne permettent pas de répondre de manière satisfaisante au problème de la construction de plans expérimentaux isovariants de faible cardinal.

Ce chapitre a également permis de mettre une nouvelle fois en avant l’intérêt des plans isovariants grâce aux résultats de Neumaier et Seidel [NS92] ainsi que de Hardin et Sloane [HS92] sur la D –efficacité et la I –efficacité. Nous avons également fait le lien entre les t –plans sphériques combinatoires et les plans isovariants. Les techniques de construction de ces premiers peuvent donc être utilisées pour obtenir des dispositifs isovariants. Or comme nous l’avons vu il n’est pas évident de construire des plans sphériques et de surcroît des plans pour lesquels la force est maximale, le cardinal du plan étant fixé à l’avance.

Nous proposons une méthode de construction de plans faiblement invariants et en particuliers de plans sphériques isovariants au chapitre suivant.

Chapitre 5

Construction polynomiale de plans faiblement invariants et applications à la construction de plans sphériques

La plupart des recherches sur la construction de plans sphériques concernent des plans de force impaire. La proposition 4.5.1, permet d'affirmer que si un plan sphérique est antipodal et de force paire $2t$ alors il est automatiquement de force $2t + 1$. Nous avons vu que la notion d'isovariance d'un plan pour un modèle polynomial complet de degré d est équivalente à celle d'être un plan sphérique de force $2d$, donc de force paire. Ainsi les nombreux résultats d'existence de plans sphériques dont nous venons de faire état servent à construire des plans dont la force n'est pas nécessairement adaptée à la problématique statistique. En effet, si un plan de force $2d + 1$ est également un plan de force de $2d$ et par conséquent un plan isovariant pour un modèle polynomial d'ordre d , les contraintes imposées au plan par le fait d'être de force $2d + 1$ auraient peut-être pu être utilisées pour améliorer la qualité statistique du plan. Par exemple, la maximisation de l'efficacité alphabétique du plan si nous ajoutons des termes complémentaires au modèle polynomial, ou éventuellement des conditions de blocage orthogonal du plan. En ce qui concerne la première possibilité que nous venons d'évoquer, nous renvoyons à l'étude détaillée du cas du plan de cardinal 11 que nous réaliserons au chapitre 11 de la deuxième partie. En effet dans ce cas, au lieu d'obtenir un seul représentant d'une classe d'équivalence de plans de force 3 à une isométrie près, nous obtenons une famille infinie de classes d'équivalence de plans de force 2 à une isométrie orthogonale près puis nous cherchons, parmi ces représentants, le ou les plans les plus efficaces de sens de chacun des critères Φ_p . La remarque 4.1.2 nous indique que cette démarche est bien adaptée au cas de la recherche de dispositifs pour lesquels la D -efficacité et la I -efficacité sont maximales, parmi cette famille infinie de classes d'équivalence, modulo une isométrie orthogonale, de plans.

Dans ce chapitre nous proposons une méthodologie très générale de construction de plans faiblement invariants satisfaisant à certaines contraintes. Nous introduisons pour ce faire la notion de problème de construction de type polynomial. Nous revenons alors sur des résultats obtenus aux chapitres 2 et 3 qui nous permettent de formuler le problème de la construction d'un dispositif faiblement invariant comme un problème de construction de type polynomial. Nous utilisons alors le fait que la construction d'un plan faiblement invariant peut être résolue en construisant un plan isovariant. Ainsi nous nous concentrons

sur la manière de déterminer une famille de représentants de plans isovariants de cardinal donné puis nous indiquons comment sélectionner parmi ceux-ci celui qui présente les meilleures propriétés.

Enfin nous montrons qu'un problème de construction de type polynomial est en fait un problème de programmation semi-définie positive pour lequel il existe des algorithmes de résolution numérique qui peuvent servir à guider une résolution exacte du problème de construction initial.

5.1. Invariance faible et invariants polynomiaux

Nous cherchons maintenant une caractérisation polynomiale de l'invariance faible d'un plan expérimental analysé à l'aide d'un modèle polynomial. Nous pourrions alors reformuler le problème de l'invariance faible dans le contexte de l'algèbre commutative computationnelle ce qui va nous permettre de le résoudre algorithmiquement à l'aide de techniques utilisant les bases de Gröbner.

Nous considérons désormais des modèles polynomiaux et des groupes \mathcal{G} qui agissent linéairement sur le domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v . L'action du groupe \mathcal{G} induit une action sur l'algèbre des polynômes à v indéterminées à coefficients réels, voir par exemple [KR00].

5.1.1. Polynômes invariants pour l'action d'un groupe de matrices

Nous commençons par quelques généralités sur les polynômes invariants par l'action d'un groupe de matrices. Nous renvoyons le lecteur à [Hil82], [Hum90] et [Kan01] pour un exposé détaillé des propriétés des invariants polynomiaux dans le cas de l'action d'un groupe fini de matrices ainsi qu'au paragraphe 8.1.6 du chapitre 8 où les notions abordées ci-après sont détaillées dans le cas de l'action d'un groupe fini de matrices. Nous adaptons certains de ces résultats au cas de l'action d'un groupe compact de matrices.

Proposition 5.1.1. *Soit $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ le groupe des matrices réelles inversibles d'ordre v . Le groupe $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ opère sur l'algèbre de polynômes $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ de la manière suivante :*

$$\Theta_{\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})} : \begin{cases} \mathcal{GL}_v(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] & \rightarrow \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] \\ (\mathbf{A}, P) & \mapsto P(\mathbf{A}\mathbf{x}), \end{cases} \quad (5.1.1)$$

où $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)'$.

Proposition 5.1.2. *Soit \mathcal{G} un sous-groupe de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. Le groupe \mathcal{G} opère sur l'algèbre de polynômes $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ de la manière suivante :*

$$\Theta_{\mathcal{G}} : \begin{cases} \mathcal{G} \times \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] & \rightarrow \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] \\ (\mathbf{A}, P) & \mapsto P(\mathbf{A}\mathbf{x}), \end{cases} \quad (5.1.2)$$

où $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_v)'$.

Définition 5.1.1. *Soit \mathcal{G} un sous-groupe de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. Un polynôme P de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ est \mathcal{G} -invariant si :*

$$\Theta_{\mathcal{G}}(g, P) = P, \quad \forall g \in \mathcal{G}. \quad (5.1.3)$$

5.1 Invariance faible et invariants polynomiaux

Nous pouvons alors définir la \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ constituée des polynômes qui sont invariants pour l'action de \mathcal{G} , un sous-groupe de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$, obtenue par la restriction de l'action $\Theta_{\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})}$, introduite dans la définition 5.1.1, à $\mathcal{G} \times \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.

Définition 5.1.2. Soit \mathcal{G} un sous-groupe de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. La \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ constituée des polynômes \mathcal{G} -invariants, notée $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$, est :

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}} = \{P \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] \mid \Theta_{\mathcal{G}}(g, P) = P, \forall g \in \mathcal{G}\}. \quad (5.1.4)$$

Remarque 5.1.1. Chaque élément de \mathcal{G} est inversible ce qui implique que le degré total d'un polynôme est invariant pour l'action de \mathcal{G} . Nous en déduisons que la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ est une \mathbb{R} -sous-algèbre graduée de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$. De plus si un polynôme P est homogène alors $\Theta_{\mathcal{G}}(g, P)$ est encore un polynôme homogène, pour tout élément g de \mathcal{G} . Par conséquent nous pouvons restreindre l'action de \mathcal{G} à tout espace vectoriel qui est somme d'espaces $\mathcal{H}om_i(\mathbb{R})[x_1, \dots, x_v]$, avec $i \in I \subset \mathbb{N}$ et $\mathcal{H}om_j$ le sous espace vectoriel des polynômes homogènes de degré j pour $j \in \mathbb{N}$. Par exemple nous pouvons restreindre l'action de \mathcal{G} à $\mathbb{R}_d[x_1, \dots, x_v]$ l'espace vectoriel des polynômes à v indéterminées à coefficients réels et de degré total inférieur ou égal à d .

Nous introduisons maintenant les opérateurs de Reynolds pour l'action d'un groupe de matrices compact. Ces opérateurs sont introduits dans la définition 8.1.67 du chapitre 8 dans le cas de l'action d'un groupe de matrices fini et leurs premières propriétés sont montrées dans la proposition 8.1.51 du chapitre 8. Nous avons avant tout besoin d'un objet permettant de généraliser la somme finie qui apparaît dans la définition 8.1.67 du chapitre 8 : la mesure de Haar sur un groupe compact.

Théorème 5.1.1. Soit \mathcal{G} un groupe compact. Il existe une unique fonctionnelle linéaire μ définie sur $\mathcal{C}(\mathcal{G})$, le \mathbb{C} -espace vectoriel des fonctions continues $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{C}$ continues, telle que μ est invariante à gauche et à droite pour l'action de \mathcal{G} :

$$\int_{\mathcal{G}} f(gx)\mu(dx) = \int_{g \in \mathcal{G}} f(xg)\mu(dx) = \int_{g \in \mathcal{G}} f(x)\mu(dx), \quad \forall f \in \mathcal{C}(\mathcal{G}) \quad (5.1.5)$$

et

$$\mu(1_{\mathcal{G}}) = 1. \quad (5.1.6)$$

Démonstration 5.1.1. Nous renvoyons par exemple à [MT86] et à [Far06] ou à [Wei65] pour un résultat plus général.

Définition 5.1.3. Soit $\mathcal{G} \subset \mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ un groupe compact de matrices, l'opérateur de Reynolds associé à \mathcal{G} est l'application $R_{\mathcal{G}}$ définie ainsi :

$$\begin{aligned} R_{\mathcal{G}} : \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] &\rightarrow \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] \\ P(\mathbf{x}) &\mapsto R_{\mathcal{G}}(P) = \int_{g \in \mathcal{G}} P(g\mathbf{x})\mu(dg), \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

où μ est la mesure de Haar dont l'existence est assurée par le théorème 5.1.1.

Remarque 5.1.1. Nous avons ici implicitement identifié fonctions polynomiales sur \mathbb{R}^v et polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$. Ceci sera possible dans la suite dès que le domaine expérimental considéré sera par exemple d'intérieur non vide. Le symbole $\int_{g \in \mathcal{G}} P(g\mathbf{x})\mu(dg)$ de l'équation 5.1.7 est défini de la manière suivante. Le groupe \mathcal{G} étant un groupe de matrice il préserve le degré total d'un polynôme. Nous restreignons alors l'action de \mathcal{G} sur les fonctions polynomiales à celle sur les fonctions polynomiales homogènes de degré d qui est sous-espace de dimension finie \mathcal{G} -stable. Considérons un polynôme $P = \sum_{\alpha \in A} a_\alpha \mathbf{x}^\alpha$ homogène de degré d et la fonction Ω_P définie par :

$$\Omega_P : \begin{cases} \mathcal{G} \times \mathcal{X} & \rightarrow \mathbb{C} \\ (g, \mathbf{x}) & \mapsto P(g(\mathbf{x})) = \sum_{\alpha \mid |\alpha|=d} f_\alpha(g)\mathbf{x}^\alpha. \end{cases} \quad (5.1.8)$$

La fonction Ω_P est continue sur $\mathcal{G} \times \mathcal{X}$ pour la topologie usuelle puisque composée d'une fonction polynomiale homogène de degré d et de la multiplication matricielle. Nous pouvons donc intégrer cette fonction par rapport à g sur \mathcal{G} en utilisant la mesure de Haar sur le groupe compact \mathcal{G} introduite dans le théorème 5.1.1. Il suffit alors d'identifier la fonction polynomiale obtenue au polynôme de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ correspondant.

Proposition 5.1.3.

Soit $R_{\mathcal{G}}$ l'opérateur de Reynolds associé au groupe compact de matrices \mathcal{G} .

- i- $R_{\mathcal{G}}$ est \mathbb{R} -linéaire.
- ii- Si $P \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ et si $Q \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, alors $R_{\mathcal{G}}(PQ) = PR_{\mathcal{G}}(Q)$.
- iii- L'image de $R_{\mathcal{G}}$ est égale à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$.
- iv- L'opérateur de Reynolds est un projecteur : $R_{\mathcal{G}} \circ R_{\mathcal{G}} = R_{\mathcal{G}}$.

Démonstration 5.1.2. La première assertion est une conséquence de la linéarité de l'intégrale. La seconde assertion est une conséquence de la définition 5.1.1 de la \mathcal{G} -invariance. La troisième assertion et la quatrième assertion résultent de l'invariance de la mesure de Haar.

Nous indiquons maintenant un résultat concernant la structure de la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.

Théorème 5.1.2. Soit $\mathcal{G} \subset \mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ un groupe de matrices compact. La \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ est une \mathbb{R} -algèbre de type fini, dans le sens introduit dans la définition 8.1.1. Il existe donc un nombre fini de polynômes homogènes f_1, \dots, f_k de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, tous de degré ≥ 1 , tels que :

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k], \quad (5.1.9)$$

où l'ensemble $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ est introduit dans la définition 8.1.66.

Démonstration 5.1.3. Soit I l'idéal de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ engendré par tous les polynômes homogènes $P \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ de degré total strictement positif. Soit f_1, \dots, f_k un système de générateurs homogènes de I . Nous remarquons que les f_1, \dots, f_k peuvent être choisis dans $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$. Supposons que $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}} \not\subseteq I$ et choisissons un polynôme $Q_1 \in I \setminus \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ de degré minimal. Comme l'idéal I est homogène, chacune des composantes homogènes de Q_1 est dans I . Par conséquent les composantes homogènes de Q_1 de degré strictement inférieur à celui de Q_1 appartiennent à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ par minimalité du degré

5.1 Invariance faible et invariants polynomiaux

de Q_1 . Posons Q la composante homogène de Q_1 de degré Q_1 . Il existe des polynômes homogènes h_1, \dots, h_k de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ tels que le polynôme Q se décompose en $Q = \sum_{i=1}^s h_i f_i$ avec $\deg h_i > 0$ et $\deg h_i + \deg f_i = \deg q$, voir par exemple [KR00]. Nous appliquons alors l'opérateur de Reynolds à cette décomposition et nous déduisons de ses propriétés, voir la proposition 5.1.3, les égalités suivantes :

$$R_{\mathcal{G}}(Q) = R_{\mathcal{G}}\left(\sum_{i=1}^s h_i f_i\right) \quad (5.1.10)$$

$$= \sum_{i=1}^s R_{\mathcal{G}}(h_i) f_i \quad (5.1.11)$$

$$= \sum_{i=1}^s h_i f_i \quad (5.1.12)$$

$$= Q \quad (5.1.13)$$

où nous avons, pour $i = 1, \dots, s$, les égalités $R_{\mathcal{G}}(h_i) = h_i$ puisque $\deg h_i < \deg Q$ et que Q est un polynôme homogène de $I \setminus \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ de degré minimal. Appliquons maintenant le lemme 5.1.3 : le polynôme $Q = R_{\mathcal{G}}(Q)$ appartient à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ ce qui est en contradiction avec notre hypothèse.

Remarque 5.1.2. Le théorème 5.1.2 implique le théorème 8.1.34 puisqu'un sous-groupe fini de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ est compact pour la topologie discrète.

Remarque 5.1.3. Les générateurs f_1, \dots, f_k introduits dans le théorème 5.1.2 ne sont pas nécessairement algébriquement indépendants comme nous le montrent les résultats 8.1.53 et 8.1.54 du chapitre 8 qui concernent les groupes finis de matrices. Le théorème de Shephard-Todd-Chevalley, voir par exemple [Hil82], [Hum90] ou [Kan01], affirme, dans le cas d'un groupe fini \mathcal{G} , l'équivalence entre l'existence d'un isomorphisme de \mathbb{R} -algèbres entre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ et $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ et le fait que le groupe \mathcal{G} est un groupe de pseudo-réflexions. Nous serons donc dans cette situation dès que nous chercherons des invariances pour l'action d'un groupe de Coxeter sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.

Remarque 5.1.4. La détermination de tous les polynômes \mathcal{G} -invariants consiste donc à trouver les générateurs homogènes, f_1, \dots, f_k de la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$. Ceci peut être réalisé de manière algorithmique lorsque le groupe \mathcal{G} est fini. Nous indiquons maintenant dans la proposition 5.1.4 l'une des manières d'y parvenir. Il existe des procédés plus raffinés, utilisant le théorème de Molien et la fonction génératrice de Hilbert en autres. Nous renvoyons par exemple à [KR05] pour l'exposé de certains d'entre eux.

Proposition 5.1.4. *Lorsque le groupe \mathcal{G} est fini, l'algorithme suivant aboutit au calcul de polynômes homogènes f_1, \dots, f_k tels que : $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$.*

- i- Poser $\mathbf{L} = \emptyset$. Choisir un ordre $<$ sur les monômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ compatible avec le degré total. Calculer le vecteur (t_1, \dots, t_N) formé des N termes de degré plus petit que l'ordre du groupe \mathcal{G} , $|\mathcal{G}|$, et ordonné de manière croissante pour l'ordre $<$.
- ii- Pour tout $l = 1, \dots, N$, calculer $R_{\mathcal{G}}(t_l)$. Utiliser le critère d'appartenance à une sous-algèbre, introduit dans la proposition 8.1.52 du chapitre 8, pour décider si $R_{\mathcal{G}}(t_l) \in \mathbb{R}[P, P \in \mathbf{L}]$. Si cela n'est pas le cas ajouter $R_{\mathcal{G}}(t_l)$ à \mathbf{L} .

-iii- Renvoyer l'ensemble \mathbf{L} .

Démonstration 5.1.4. Nous renvoyons par exemple à [KR00] pour la preuve de cette proposition.

Remarque 5.1.5. Nous avons utilisé un ensemble de programmes Maple, le package *Invar* [Kem93], pour obtenir la détermination complète de la structure des invariants polynomiaux pour l'action d'un groupe fini de matrices, c'est-à-dire aussi bien le calcul d'un système de générateurs homogènes de \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$, les invariants principaux, que celle d'un système de générateurs de l'idéal premier I_F des relations, introduit dans la définition 8.1.53 du chapitre 8. Nous renvoyons à la section 5.5 pour une application de ces procédures au calcul des invariants polynomiaux de certains des groupes finis de matrices. Les degrés des invariants principaux pour les groupes dont nous nous servons dans la suite ont été regroupés dans la table 8.8 du chapitre 8.

Corollaire 5.1.1. *Soit \mathcal{G} un groupe de matrices compact. Un polynôme P est \mathcal{G} -invariant si et seulement si P appartient à $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ avec $f_i, i = 1, \dots, k$, les polynômes homogènes de degré supérieur ou égal à 1 introduits dans le théorème 5.1.2.*

Démonstration 5.1.5. Il s'agit d'une conséquence immédiate du théorème 5.1.2.

Remarque 5.1.6. La décision de l'appartenance d'un polynôme P à la sous-algèbre $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ se traite de manière algorithmique à l'aide des bases de Gröbner et du critère introduit dans la proposition 8.1.52 du chapitre 8.

Nous concluons cette section par la caractérisation des polynômes invariants pour l'action du groupe orthogonal.

Proposition 5.1.5. *Les polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action du groupe orthogonal \mathcal{O}_v sont les polynômes « radiaux » :*

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{O}_v} = \mathbb{R} \left[\sum_{i=1}^v x_i^2 \right]. \quad (5.1.14)$$

Démonstration 5.1.6. Nous renvoyons par exemple à [Ven01].

5.1.2. Utilisation de l'invariance de la surface de réponse généralisée ou de la surface de variance extrapolée

Dans le chapitre 2, nous avons mis en avant les plans expérimentaux qui possèdent la propriété d'isovariance introduite dans la définition 2.3.7. Dans le théorème 3.1.1 nous avons montré que cette propriété était équivalente à la propriété d'isovariance de la surface de réponse, introduite dans la définition 3.1.3 du chapitre 3, si la matrice des moments du plan est inversible. Nous alors avons étendu cette équivalence au cas de l'invariance d'une matrice des moments d'un plan singulière pour l'action d'un groupe \mathcal{G} quelconque et de la surface de variance généralisée. Cette équivalence entre les invariances des objets, introduits dans les définitions 3.3.1 et 3.3.3 du chapitre 3, a été démontrée dans le théorème 3.3.3 du chapitre 3.

5.1 Invariance faible et invariants polynomiaux

Nous reprenons les notations de la section 3.3.1 du chapitre 3 et nous considérons des modèles polynomiaux $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariants sur un domaine expérimental χ . Nous devons distinguer deux situations. Si la matrice $M(\xi)$ des moments du plan ξ n’est pas singulière alors la surface de variance $v_{M(\xi)}$, qui coïncide alors à la fois avec la surface de variance généralisée $\mathbf{v}_{M(\xi)}$ et avec la surface de variance extrapolée à χ , introduite dans la définition 3.2.4, est une fonction polynomiale sur le domaine expérimental χ en entier. Nous pouvons alors appliquer les résultats du paragraphe 5.1.1 et aboutir au théorème de caractérisation 5.1.3. Sinon la surface d’information généralisée, $\mathbf{v}_{M(\xi)}$, n’est une fonction polynomiale que sur l’ensemble des points \mathbf{t} du domaine expérimental tels que $\mathbf{t} \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\mathbf{t}))$. En effet pour tout autre point du domaine expérimental la valeur de la surface de variance est égale à $+\infty$.

Inversement la fonction de variance extrapolée à χ reste une fonction polynomiale même si la matrice $M(\xi)$ des moments du plan ξ est singulière. Mais l’équivalence entre la \mathcal{G} –invariance faible du plan ξ et la \mathcal{G} –invariance de la fonction de variance extrapolée à χ n’a été démontrée que sous l’une ou l’autre des conditions supplémentaires suivantes : \mathcal{Q} est un sous-groupe du groupe orthogonal \mathcal{O}_k ou Q_g^* commute avec $M(\xi)^+M(\xi)$ pour tout g de \mathcal{G} .

Ainsi pour la construction d’un plan isovariant dans le cas d’une matrice des moments singulière, l’une ou l’autre des caractérisations des plans présente un avantage et un inconvénient.

Nous commençons par étudier le cas où la matrice des moments du plan est inversible. Remarquons que dans ce cas les fonctions polynomiales appartenant au modèle forment une famille libre sur χ et nous pouvons de ce fait les identifier au sous-espace vectoriel de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ correspondant. Ainsi partout où nous supposons le domaine expérimental χ d’intérieur non vide afin de pouvoir réaliser cette identification nous n’avons plus besoin de cette hypothèse.

Théorème 5.1.3. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v , un modèle polynomial $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour un groupe compact \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ et un plan expérimental ξ dont le support est inclus dans χ et pour lequel la matrice des moments $M(\xi)$ est non singulière. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *Le plan ξ est \mathcal{G} –faiblement invariant.*
- ii- *La surface de réponse $v_{M(\xi)}$ est \mathcal{G} –invariante.*
- iii- *La surface de réponse $v_{M(\xi)}$ appartient à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$. La \mathbb{R} –sous-algèbre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ a été introduite dans la définition 5.1.2 et les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1.*

Démonstration 5.1.7. Pour l’équivalence de la première et de la seconde assertions il s’agit du théorème 3.1.2. La seconde assertion est équivalente au fait que la surface de variance est un polynôme \mathcal{G} –invariant. Puis l’existence d’un nombre fini de générateurs homogènes découle du théorème 5.1.2.

Corollaire 5.1.2. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v , un modèle polynomial de degré d $(\mathcal{O}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ –équivariant et un plan expérimental ξ dont le support*

est inclus dans χ et pour lequel la matrice des moments $M(\xi)$ est non singulière. Les trois assertions suivantes sont équivariantes.

- i- Le plan ξ est isovariant.
- ii- La surface de réponse $v_{M(\xi)}$ est isovariante.
- iii- La surface de réponse $v_{M(\xi)}$ appartient à $\mathbb{R}[\sum_{i=1}^v x_i^2]$.

Démonstration 5.1.8. Nous déduisons de la proposition 5.1.5 l'égalité :

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{O}_v} = \mathbb{R} \left[\sum_{i=1}^v x_i^2 \right]. \quad (5.1.15)$$

Une application du théorème 5.1.3 permet alors de conclure.

Corollaire 5.1.3. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v , un modèle polynomial de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour \mathcal{G} un sous-groupe du groupe orthogonal \mathcal{O}_v et un plan expérimental ξ dont le support est inclus dans χ et pour lequel la matrice des moments $M(\xi)$ est non singulière. Soit $\mathcal{D} = (d_1, \dots, d_t)$ la suite finie des degrés des invariants principaux inférieurs ou égaux à $2d$. Si \mathcal{D} est réduite à $(d_1 = 2)$ alors le plan est \mathcal{G} -faiblement invariant.*

Démonstration 5.1.9. Une application du théorème 5.1.3 indique que la surface de réponse $v_{M(\xi)}$ appartient à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$. Or cette \mathbb{R} -sous-algèbre d'invariants est égale à $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ par application du théorème 5.1.2. Nous pouvons supposer que les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont ordonnés par degré total croissant. L'hypothèse du corollaire implique alors que le seul polynôme de degré supérieur ou égal à 1 et inférieur ou égal à $2d$ est un polynôme en f_1 avec f_1 de degré 2. Puis le polynôme $\sum_{i=1}^v x_i^2$ est un polynôme \mathcal{G} -invariant de degré 2 puisqu'il est \mathcal{O}_v -invariant par la proposition 5.1.5. Ainsi la surface de réponse $v_{M(\xi)}$ est un polynôme en $\sum_{i=1}^v x_i^2$ et appartient alors à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$.

Remarque 5.1.7. L'application du corollaire 5.1.3 est facilitée par l'existence de tables, comme la table 8.8, constituée des degrés des polynômes invariants pour l'action de nombreux groupes finis. Si nous utilisons un groupe fini pour lequel une telle information n'est pas disponible il est toujours possible de calculer les degrés des invariants polynomiaux en utilisant un ensemble de procédures prévu à cet effet comme le package *Invar*, cf. [Kem93], développé pour le logiciel Maple, [Map05].

Considérons désormais le cas où la matrice des moments est singulière. Bien que les surfaces de variance extrapolées à χ soient des polynômes et permettent de ce fait la même approche que nous avons développée ci-dessus, au théorème 5.1.3, pour le cas d'une matrice des moments non singulière, nous allons nous concentrer sur les surfaces de variance généralisées puisque nous avons montré au chapitre 3 qu'il s'agit de l'objet statistique le plus naturel à considérer dans ce cas.

Supposons que le domaine expérimental χ est d'intérieur non vide. La singularité de la matrice des moments du plan peut provenir alors d'une surparamétrisation du modèle comme dans le cas de la notation tensorielle d'un modèle polynomial introduite dans la section 3.4 du chapitre 3.

Théorème 5.1.4. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide, un modèle polynomial $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe compact \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ et un plan expérimental ξ dont le support est inclus dans χ . La première assertion implique la seconde et la troisième qui sont équivalentes :*

5.1 Invariance faible et invariants polynomiaux

- i- Il existe un polynôme P \mathcal{G} -invariant tel que la restriction de P aux points \mathbf{t} tels que $\mathbf{f}(\mathbf{t}) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ coïncide avec la surface de réponse $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$ sur ce même ensemble de points. Le polynôme P appartient alors à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ a été introduit dans la définition 5.1.2 et les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes de degrés supérieur ou égal à 1.
- ii- Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- iii- La surface de réponse généralisée, $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$, est \mathcal{G} -invariante.

Démonstration 5.1.10. L'équivalence entre la deuxième et la troisième assertions résulte du théorème 3.3.3. Supposons la première assertion vérifiée. La \mathcal{G} -invariance du polynôme P sur \mathbb{R}^v implique celle de la fonction polynomiale associée à P sur les points \mathbf{t} tels que $\mathbf{f}(\mathbf{t}) \in \text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}))$ et par conséquent celle de la surface de réponse généralisée $\mathbf{v}_{M(\boldsymbol{\xi})}$. La structure de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$ résulte du théorème 5.1.2

Remarques 5.1.1.

- Même dans le cas d'une matrice des moments non singulière l'utilisation des invariants polynomiaux passe par le calcul de l'inverse de la matrice des moments du plan qui est d'autant plus long que le modèle polynomial comporte de termes. De surcroît nous cherchons à construire des plans dont les coordonnées des points support sont exactes et de ce fait peuvent être des expressions algébriques complexes ce qui rend le calcul encore plus difficile à effectuer. En effet même l'outil informatique, en l'occurrence Maple [Map05], ne parvient pas nécessairement à effectuer toutes les simplifications possibles. Nous verrons au chapitre 10 comment nous avons remédié à cette difficulté supplémentaire et relativement inattendue.
- La détermination de l'invariance par un sous-groupe de matrices compact passe par celle de la \mathbb{R} -sous-algèbre de ses invariants polynomiaux.

Nous allons voir à la section 5.1.3 comment éviter ces deux étapes toujours lorsque l'action du groupe de matrices compact sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ est linéaire mais pour des modèles polynomiaux complets.

5.1.3. Utilisation de la fonction génératrice des moments

Nous avons introduit dans la section 2.8 du chapitre 2 la fonction E -génératrice des moments d'un plan $\boldsymbol{\xi}$ lorsque le groupe \mathcal{G} agit linéairement sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$. Nous en avons déduit au théorème 2.8.2 une caractérisation nécessaire et suffisante de l'invariance faible d'un plan par celle de l'invariance de la fonction E -génératrice des moments du plan lorsque le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ est d'intérieur non vide. Ce résultat est toujours valide si les fonctions polynomiales appartenant au modèle forment une famille libre sur le domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ donc en particulier si la matrice des moments du plan n'est pas singulière.

Théorème 5.1.5. *Considérons un domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur $\boldsymbol{\chi}$. Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur $\boldsymbol{\chi}$, est compact. Soit E l'une des matrices symétriques réelles définies positives telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(E)$, pour l'existence de E voir la remarque 2.8.4 ou le lemme 5.1.1. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- Le plan ξ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- ii- La fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, est \mathcal{G} -invariante.
- iii- La fonction E -génératrice des moments $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$ appartient à $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}}$ de $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]$ a été introduite dans la définition 5.1.2 et les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1.

Démonstration 5.1.11. Le théorème 2.8.2 donne l'équivalence entre les deux premières assertions. La E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, étant une fonction polynomiale sur \mathbb{R}^v nous l'identifions avec la fonction polynomiale qui lui est canoniquement associée. En effet nous avons dans la définition 2.8.3 :

$$\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)(\mathbf{t}) = \mathbb{E}_{\xi} \left[(1 + \langle \mathbf{t}, \mathbf{X} \rangle_E)^{2d} \right], \forall \mathbf{t} \in \mathbb{R}^v, \quad (5.1.16)$$

où $\langle \mathbf{t}, \mathbf{x} \rangle_E = \mathbf{t}' E \mathbf{x}$ pour tout (\mathbf{t}, \mathbf{x}) de $\mathbb{R}^v \times \mathbb{R}^v$. Nous appliquons alors le théorème 5.1.2 et le corollaire 5.1.1 ce qui nous permet de montrer que la deuxième et la troisième assertions sont équivalentes.

Nous souhaitons ramener la caractérisation polynomiale de l'invariance faible pour un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ à celle de l'invariance d'une fonction génératrice des moments pour l'action d'un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v(\mathbb{R})$. Nous pourrions nous appuyer sur des résultats existants qui faciliteront grandement la détermination de la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}}$.

Nous commençons par rappeler l'énoncé du lemme 2.8.6 dont nous nous sommes servis au chapitre 2.

Lemme 5.1.1. *Soit \mathcal{G} un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. Le sous-groupe \mathcal{G} est conjugué à un sous-groupe \mathcal{K} du groupe orthogonal \mathcal{O}_v , c'est-à-dire il existe $A \in \mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ tel que $\mathcal{G} = A\mathcal{K}A^{-1}$.*

Remarque 5.1.8. Nous rappelons également que si \mathcal{G} un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ alors il existe, conformément à la remarque 2.8.4 du chapitre 2, une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v(E)$ le groupe orthogonal de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire associé à E . Un calcul direct a montré que nous pouvions prendre $E = (AA')^{-1}$.

Nous rappelons l'énoncé du théorème 2.8.3 du chapitre 2 dont nous nous sommes servis pour réduire la construction de plans expérimentaux \mathcal{G} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe de matrices compact à celle de plans expérimentaux \mathcal{K} -faiblement invariants pour l'action d'un sous-groupe compact du groupe orthogonal.

Théorème 5.1.6. *Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur χ , est compact. Soit A l'une des matrices inversibles telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est conjugué à \mathcal{K} un sous-groupe de \mathcal{O}_v , pour l'existence de A voir le lemme 5.1.1. La matrice $E = (AA')^{-1}$ est une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v(E)$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- La fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, est \mathcal{G} -invariante.

5.1 Invariance faible et invariants polynomiaux

-ii- La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}})$, est \mathcal{K} -invariante.

Nous en déduisons alors la caractérisation polynomiale de l'invariance faible énoncée dans le théorème 5.1.7 suivant.

Théorème 5.1.7. *Considérons un domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur $\boldsymbol{\chi}$. Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur $\boldsymbol{\chi}$, est compact. Soit A l'une des matrices inversibles telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est conjugué à un sous-groupe de \mathcal{O}_v , pour l'existence de A voir le lemme 5.1.1. La matrice $E = (AA')^{-1}$ est une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v(E)$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- ii- La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}})$, est \mathcal{K} -invariante.
- iii- La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi}^{A^{-1}})$ appartient à $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{K}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{K}}$ de $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]$ a été introduite dans la définition 5.1.2 et les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1.

Démonstration 5.1.12. Il s'agit d'une conséquence directe du théorème 5.1.5 et du théorème 5.1.6.

Nous spécifions ces résultats pour un sous-groupe compact du groupe orthogonal \mathcal{O}_v .

Corollaire 5.1.4. *Considérons un domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur $\boldsymbol{\chi}$. Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur $\boldsymbol{\chi}$, est un sous-groupe de \mathcal{O}_v . Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- Le plan $\boldsymbol{\xi}$ est \mathcal{G} -faiblement invariant.
- ii- La fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$, est \mathcal{G} -invariante.
- iii- La fonction E -génératrice des moments $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ appartient à $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où la \mathbb{R} -sous-algèbre $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}}$ de $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]$ a été introduite dans la définition 5.1.2 et les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1.

Démonstration 5.1.13. Puisque le groupe \mathcal{G} est un sous-groupe compact de \mathcal{O}_v nous pouvons appliquer le théorème 5.1.7 en choisissant $A = I_v$.

Remarque 5.1.9. Il est fréquent de chercher des dispositifs qui présentent la propriété de \mathcal{G}_{sp} -invariance faible, cf. l'exemple 2.3.4. Cette invariance par rapport au groupe hyperoctaédral, qui est fini donc compact pour la topologie usuelle sur $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, est également qualifiée de \mathcal{B}_m -invariance faible. Le théorème 5.1.4 montre donc l'équivalence entre la \mathcal{B}_m -invariance faible du plan et la \mathcal{B}_m -invariance de la fonction génératrice des moments. Nous renvoyons par exemple à [Col02] pour une étude plus détaillée des propriétés qui découlent de cette invariance ainsi que son lien avec l'isovariance d'un plan.

Corollaire 5.1.5. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur χ , est un groupe compact **maximal** de $\text{GL}_n(\mathbb{R})$. Soit A l'une des matrices inversibles telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est conjugué à un sous-groupe de \mathcal{O}_v , pour l'existence de A voir le lemme 5.1.1. La matrice $E = (AA')^{-1}$ est une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v(E)$. Les assertions suivantes sont équivalentes :*

- i- *Le plan ξ est \mathcal{G} –faiblement invariant.*
- ii- *La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})$, est \mathcal{O}_v –invariante.*
- iii- *La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})$ appartient à $\mathbb{R}[\sum_{i=1}^v x_i^2]$, la \mathbb{R} –sous-algèbre des polynômes radiaux.*

Démonstration 5.1.14. Si le groupe \mathcal{G} est un sous-groupe compact maximal de $\mathcal{GL}_v\mathbb{R}$ il est conjugué à \mathcal{O}_v tout entier car \mathcal{O}_v est un sous-groupe compact maximal de $\mathcal{GL}_v\mathbb{R}$. Nous appliquons alors le théorème 5.1.7 puis la proposition 5.1.5 ce qui permet d'aboutir au résultat recherché.

Nous spécifions ces résultats dans le cas de l'isovariance :

Corollaire 5.1.6. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v , un modèle polynomial de degré d $(\mathcal{O}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ –équivariant et un plan expérimental ξ dont le support est inclus dans χ .*

- i- *Le plan ξ est isovariant.*
- ii- *La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\xi)$, est \mathcal{O}_v –invariante.*
- iii- *La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}^{A_d}(\xi)$ appartient à $\mathbb{R}[\sum_{i=1}^v x_i^2]$, qui est la \mathbb{R} –sous-algèbre des polynômes radiaux.*

Démonstration 5.1.15. Nous déduisons de la proposition 5.1.5 l'égalité :

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{O}_v} = \mathbb{R} \left[\sum_{i=1}^v x_i^2 \right]. \quad (5.1.17)$$

Une application du théorème 5.1.7 permet alors de conclure.

Nous utiliserons le corollaire 5.1.7 suivant dans la section 5.3.2 pour identifier directement des dispositifs isovariants.

Corollaire 5.1.7. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide, un modèle polynomial de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ –équivariant pour \mathcal{G} un sous-groupe du groupe orthogonal \mathcal{O}_v et un plan expérimental ξ dont le support est inclus dans χ . Soit $\mathcal{D} = (d_1, \dots, d_t)$ la suite finie des degrés des invariants principaux du groupe \mathcal{G} inférieurs ou égaux à $2d$. Si \mathcal{D} est réduite à $(d_1 = 2)$ alors le plan est isovariant.*

Démonstration 5.1.16. Une application du corollaire 5.1.4 indique que la fonction génératrice des moments $\text{MGF}^{A_d}(\xi)$ appartient à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$. Or cette \mathbb{R} –sous-algèbre d'invariants est égale à $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ par application du théorème 5.1.2. Nous pouvons

supposer que les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont ordonnés par degré total croissant. L'hypothèse du corollaire implique alors que le seul polynôme de degré supérieur ou égal à 1 et inférieur ou égal à $2d$ est un polynôme en f_1 avec f_1 de degré 2. Puis le polynôme $\sum_{i=1}^v x_i^2$ est un polynôme \mathcal{G} -invariant de degré 2 puisqu'il est \mathcal{O}_v -invariant par la proposition 5.1.5. Ainsi la fonction génératrice des moments $\text{MGF}^{A_d}(\boldsymbol{\xi})$ est un polynôme en $\sum_{i=1}^v x_i^2$ et appartient alors en fait à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{O}_v}$. Une application du corollaire 5.1.6 permet alors de conclure.

Ainsi l'utilisation de la fonction génératrice des moments nous permet de nous ramener, dans le cas de l'étude d'un plan appartenant à domaine expérimental d'intérieur non vide ou pour lequel les fonctions du modèle forment une famille libre, à des caractérisations d'invariance polynomiales pour un groupe compact \mathcal{G} ou pour un sous-groupe de \mathcal{O}_v auquel il est conjugué. De surcroît, contrairement à la caractérisation polynomiale obtenue à la section 5.1.2 lorsque la matrice des moments du plan est non singulière, nous n'avons pas à calculer cet inverse ce qui rend l'utilisation de la caractérisation basée sur la fonction génératrice des moments plus efficace.

5.2. Construction ou augmentation de plans expérimentaux

5.2.1. Problème de construction de type polynomial

Nous commençons par définir ce que nous entendons par un problème de construction de type polynomial d'un plan expérimental.

Définition 5.2.1. *Un problème de construction de type polynomial d'un plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$ de support \mathbf{X} , un sous-ensemble de \mathbb{R}^v de cardinal r , est défini de la manière suivante :*

- i- *Une liste Obj d'objectifs à remplir. Ces objectifs peuvent être de trois types et de priorité variable :*
 - (i) *Appartenance à un domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$ inclus dans \mathbb{R}^v fixé à l'avance caractérisé par les inéquations polynomiales $g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_u(\mathbf{x}) \leq 0$, c'est-à-dire $\boldsymbol{\chi} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^v \mid g_i(\mathbf{x}) \leq 0, 1 \leq i \leq u\}$.*
 - (ii) *Les points support du plan $\boldsymbol{\xi}$ sont les solutions d'un système d'équations polynomiales $f_1(\mathbf{x}) = \dots = f_s(\mathbf{x}) = 0$ associé à l'idéal $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$ de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, c'est-à-dire que les points support du plan $\boldsymbol{\xi}$ appartiennent à une variété algébrique $\mathbf{V}(I)$ réelle fixée.*
 - (iii) *Minimisation de critères polynomiaux h_1, \dots, h_t en les coordonnées des points support du plan $\boldsymbol{\xi}$.*
- ii- *Un ensemble de r_0 points supports du plan \mathbf{X}_0 , fixés par l'expérimentateur et dont les coordonnées sont connues de manière exacte, qui doivent nécessairement appartenir au support \mathbf{X} du plan $\boldsymbol{\xi}$.*
- iii- *Un nombre, égal à $r - r_0$, de points dont nous souhaitons déterminer les coordonnées de manière exacte de telle sorte que le plan expérimental remplisse les objectifs Obj .*

Nous utiliserons principalement des techniques liées aux bases de Gröbner, introduites dans le paragraphe 8.1.3 du chapitre 8, ou à la programmation semi-définie positive, cf.

5.4, pour résoudre ces problèmes qui sont étroitement liés au théorème des zéros réel, cf. 5.4.2. Par résolution nous entendons soit l'obtention des coordonnées exactes des points support du plan soit la preuve qu'il n'existe pas de dispositif satisfaisant aux objectifs spécifiés.

Définition 5.2.2. *Un critère d'optimalité, voir la section 2.2, est dit polynomial si l'une de ces puissances est un polynôme en les coordonnées des points du plan.*

Proposition 5.2.1. *Les critères ϕ_p , pour p entier positif, donc le critère de D -optimalité, et le critère de I -optimalité sont des critères d'optimalité polynomiaux.*

Démonstration 5.2.1. Il s'agit d'une conséquence immédiate de la définition.

Remarque 5.2.1.

Le premier objectif, l'appartenance des points support du plan à un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v fixé à l'avance caractérisé par les inéquations polynomiales $g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_u(\mathbf{x}) \leq 0$, couvre les cas suivants :

- i- Une boule centrée ou non à l'origine de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique si les coordonnées de chacun des points support du plan sont solution de $\sum_{i=1}^v x_i^2 - r \leq 0$ avec $r \geq 0$.
- ii- Un ellipsoïde centré ou non à l'origine de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique si les coordonnées de chacun des points support du plan sont solution de $\sum_{i=1}^v a_i^2 x_i^2 - r \leq 0$, avec $a_i > 0$, pour $i = 1, \dots, v$ et $r \geq 0$.
- iii- Plus généralement une boule centrée ou non à l'origine de \mathbb{R}^v muni d'un produit scalaire quelconque $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$ associé à la forme quadratique q_E si les coordonnées de chacun des points support du plan sont solution de $q_E(x_1, \dots, x_v) \leq r$ avec $r \geq 0$.
- iv- Un simplexe centré ou non à l'origine de \mathbb{R}^v puisqu'il est décrit comme l'intersection de demi-espaces affines. Les coordonnées de chacun des points support du plan devant alors être solution du système d'inéquations affines associé.
- v- Un cube centré ou non à l'origine de \mathbb{R}^v comme l'intersection de demi-espaces affines. Les coordonnées de chacun des points support du plan devant alors être solution de du système d'inéquations affines associé.

Nous retrouvons dans cette énumération les formes de domaines expérimentaux les plus couramment utilisées en planification expérimentale.

Remarque 5.2.2.

Le second objectif, les points support du plan ξ sont les solutions d'un système d'équations polynomiales $f_1(\mathbf{x}) = \dots = f_s(\mathbf{x}) = 0$ associé à l'idéal $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$ de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, c'est-à-dire que les points support du plan ξ appartiennent à une variété algébrique $\mathbf{V}(I)$ réelle fixée, permet de considérer les domaines expérimentaux suivants :

- i- Une sphère centrée ou non à l'origine de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique pour $\sum_{i=1}^v (x_i - c_i)^2 - r = 0$ avec $c_i > 0$, pour $i = 1, \dots, v$ et $r \geq 0$.
- ii- La frontière d'un ellipsoïde centré ou non à l'origine de \mathbb{R}^v muni du produit scalaire canonique pour $\sum_{i=1}^v a_i^2 (x_i - c_i)^2 - r = 0$, avec $a_i > 0$, pour $i = 1, \dots, v$, $c_i \in \mathbb{R}$, pour $i = 1, \dots, v$, et $r \geq 0$.

- iii- Plus généralement une sphère centrée ou non à l'origine de \mathbb{R}^v muni d'un produit scalaire quelconque $\langle \cdot, \cdot \rangle_E$ associé à la forme quadratique q_E pour $q_E(x_1, \dots, x_v) \leq r$ avec $r \geq 0$.

Nous retrouvons ici le cas de la sphère et d'autres domaines expérimentaux d'intérieur vide.

Remarques 5.2.1.

Le problème de construction d'un plan expérimental appartenant à un domaine expérimental χ , inclus dans \mathbb{R}^v fixé à l'avance caractérisé par les inéquations polynomiales $g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_u(\mathbf{x}) \leq 0$, est un problème de construction de type polynomial, tel que nous l'avons énoncé dans la définition 5.2.1, dans les cas particuliers suivants que nous développerons dans le paragraphe indiqué :

- i- Construction de plans faiblement invariants pour l'action d'un groupe de matrices compact, *cf.* 5.2.2.
- ii- Construction de plans optimaux pour un critère polynomial, *cf.* 5.2.3.
- iii- Construction de plans partiellement invariants pour l'action d'un groupe de matrices compact et optimaux pour un critère polynomial, *cf.* 5.2.4.
- iv- Construction de plans bloqués orthogonalement, *cf.* 5.2.5.
- v- Augmentation de plans invariants pour l'action d'un groupe de matrices compact, *cf.* 5.2.2.
- vi- Augmentation de plans optimaux pour un critère polynomial, *cf.* 5.2.3.
- vii- Augmentation de plans partiellement invariants pour l'action d'un groupe de matrices compact et optimaux pour un critère polynomial, *cf.* 5.2.4.
- viii- Augmentation de plans bloqués orthogonalement, *cf.* 5.2.5.

Remarques 5.2.2. Par rapport au contexte usuel de la recherche de plans expérimentaux optimaux nous nous sommes imposés la condition supplémentaire de la détermination exacte des coordonnées des points support du plan. Ainsi les algorithmes numériques couramment utilisés par les planificateurs ne peuvent s'appliquer dans notre contexte. Il s'agit par exemple de l'algorithme de construction de plans expérimentaux D -optimaux de Federov-Wynn [NM92], du recuit-simulé [CMMR87] ou de l'algorithme du simplexe [GW00]. Nous renvoyons à [BOB07] pour un exemple d'application, réalisé par l'auteur, de ces algorithmes à des données réelles. Il en va de même en ce qui concerne la construction de plans isovariants par des méthodes numériques comme celles proposées par Hardin et Sloane dans leur logiciel Gosset, [HS91]. Toutefois nous verrons au chapitre 7 comment il nous est possible d'utiliser leurs résultats numériques pour guider, en la simplifiant, notre méthodologie de construction exacte.

5.2.2. Construction ou augmentation faiblement-invariante d'un plan expérimental

Les résultats que nous avons obtenus dans les sections 5.1.2 et 5.1.3 permettent alors de montrer que la construction ou l'augmentation d'un plan expérimental est un problème de construction de type polynomial, comme introduit dans la définition 5.2.1. Nous renvoyons au chapitre 7 pour plusieurs applications pratiques de ce théorème.

Théorème 5.2.1. *Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v , d'intérieur non vide et caractérisé par les inéquations polynomiales $g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_u(\mathbf{x}) \leq 0$. Soit un modèle polynomial complet de degré d $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ —équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur χ , est compact. Le problème de la construction, si $\mathbf{X}_0 = \emptyset$, ou de l'augmentation, si $\mathbf{X}_0 \neq \emptyset$, d'un plan expérimental ξ est équivalent à un problème de construction de type polynomial.*

Démonstration 5.2.2. Nous appliquons le théorème 5.1.5 dont les conditions d'utilisation sont remplies. Soit E l'une des matrices symétriques réelles définies positives telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est un sous-groupe de $\mathcal{O}_v(E)$, pour l'existence de E voir la remarque 2.8.4 ou le lemme 5.1.1. Les assertions suivantes sont donc équivalentes :

- i- Le plan ξ est \mathcal{G} —faiblement invariant.
- ii- La fonction E —génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, est \mathcal{G} —invariante.
- iii- La fonction E —génératrice des moments $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$ appartient à $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où la \mathbb{R} —sous-algèbre $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}}$ de $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]$ a été introduite dans la définition 5.1.2 et les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1.

La dernière assertion permet d'aboutir à un système d'équations polynomiales en les coefficients de la matrice des moments qui sont eux-mêmes des polynômes en les coordonnées des points support du plan. Il s'agit donc d'une condition qui peut s'exprimer à l'aide du second objectif aussi bien dans le cas de la construction que de l'augmentation. L'appartenance à un domaine expérimental caractérisé par les inéquations polynomiales $g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_u(\mathbf{x}) \leq 0$ est une condition du type premier objectif. D'où le résultat annoncé.

Remarque 5.2.3. Nous avons ici préféré utiliser la caractérisation à l'aide de la fonction génératrice des moments, obtenue dans le paragraphe 5.1.3, à la place de celles faisant intervenir la surface de variance ou la surface de variance généralisée, obtenue dans le paragraphe 5.1.2, puisqu'elle permet d'éviter le calcul de l'inverse de la matrice des moments. Toutefois, lorsque nous cherchons une matrice des moments non singulière, cette caractérisation permet de formuler un problème de construction de type polynomial puisque nous obtiendrons cette fois-ci un système d'équations polynomiales en des fractions rationnelles des coefficients des points du plan. Il suffit alors d'utiliser l'objectif trois pour imposer la non nullité des dénominateurs de ces fractions rationnelles ou du déterminant de la matrice des moments qui est un polynôme en les coefficients des points du plan. Nous renvoyons au chapitre 7 pour plusieurs applications pratiques de cette approche.

5.2.3. Construction ou augmentation optimale d'un plan expérimental

Considérons un critère d'optimalité polynomial en les coefficients des points du plan, il s'agit par exemple des critères de D —optimalité, de I —optimalité ou ϕ_p , avec p entier, que nous avons introduits dans la section 2.2 du chapitre problématique. Nous proposerons de suivre la méthodologie du paragraphe 5.4.5 pour résoudre ce problème de construction. Toutefois nous avons montré dans le chapitre 2 que lors de la recherche de plans optimaux pour un critère orthogonalement invariant il est possible de restreindre sa recherche à des

plans faiblement invariants. Nous avons particularisé ce résultat au cas de l'isovariance et de la D -optimalité et de la I -optimalité dans le chapitre 4. Ainsi nous ne développerons la recherche de plans minimisant un critère d'optimalité donné que de la manière indiquée par le paragraphe 5.2.4.

5.2.4. Plans partiellement faiblement-invariants et optimalité

Cette idée vient du constat suivant : lors de la recherche de plans faiblement invariants, suivant la méthode indiquée en 5.2.2, il est possible si nous obtenons un ensemble de solutions réelles $\mathbf{V}(I)$ non vide que celui-ci comporte plusieurs solutions voire une infinité. Le premier exemple de ce type que nous avons rencontré dans le chapitre 7 est l'ensemble infini de plans $\xi_{11}(s)$, dont la partie sphérique est de cardinal $r = 11$, isovariants pour un modèle polynomial de degré 1, et non déductibles l'un de l'autre par une transformation orthogonale. Or il n'existe pas de plan isovariant pour un modèle polynomial de degré 2 dont la partie sphérique est de cardinal inférieur ou égal à 12. Toutefois il est possible d'analyser les plans $\xi_{11}(s)$, complétés par un essai à l'origine, avec un modèle polynomial complet d'ordre 2. Nous ne pouvons pas alors appliquer les résultats de Hardin et Sloane qui nous assureraient que tous les plans $\xi_{11}(s)$, complétés par un essai à l'origine, minimisent les critères de D -optimalité et de I -optimalité parmi les plans comportant une partie sphérique de cardinal 11 et 1 essai à l'origine. Par conséquent nous sélectionnons parmi cette famille de plans celui qui minimise le critère de D -optimalité. Il s'avère alors qu'il minimise tous les critères d'optimalité alphabétique parmi les plans de cette famille. Nous renvoyons au chapitre 7 pour les détails de cette étude.

La formulation en termes de problème de construction polynomiale, introduit dans la définition 5.2.1, est la suivante. Résoudre en premier les objectifs 1 et 2 associés aux contraintes sur le domaine expérimental et la formulation polynomiale de l'invariance faible. Étudier le comportement des critères d'optimalité polynomiaux sur l'ensemble des solutions obtenues. Nous pouvons également nous servir de la programmation semi-définie positive, 5.4, pour résoudre ce problème.

De la même manière nous pouvons chercher s'il est possible d'augmenter un plan existant pour qu'il vérifie ou continue à vérifier ces propriétés.

5.2.5. Plans bloqués orthogonalement

Il s'agit d'une possible extension de la méthode proposée ici puisque les relations de blocage orthogonal sont également polynomiales en les coordonnées des points support du plan, voir par exemple [BD88] pour plus de détails à ce sujet. Pour certains dispositifs de forme simple, les conditions de blocage orthogonal et d'isovariance ne sont pas nécessairement compatibles pour des modèles polynomiaux complets de degré supérieur ou égal à 2, voir [Mon01]. La démarche alors adoptée est souvent la suivante : réaliser le blocage orthogonal avec un faible défaut d'isovariance ou l'isovariance avec un faible défaut de blocage orthogonal. Ce défaut d'isovariance peut être caractérisé par la discrédance du dispositif, voir le paragraphe 7.1.1 du chapitre 7, qui est un critère polynomial en les coordonnées des points support du plan, ou tout autre mesure polynomiale en les coordonnées des points support du plan. Il est ainsi possible de chercher des plans bloqués orthogonalement de

discrédance minimale à l'aide de la programmation semi-définie positive, voir la section 5.4.

5.3. Éléments de résolution du problème de construction polynomiale

5.3.1. Construction « à vue » en utilisant les symétries du plan expérimental

Le calcul des invariants polynomiaux du groupe fini de symétries utilisé pour créer le plan permet dans certains cas simples d'affirmer directement l'invariance faible du plan. Nous renvoyons à [dP04] pour un résumé des résultats découlant de cette approche. Nous renvoyons également à l'étude de la force des plans en une orbite que nous réaliserons dans le chapitre 8 et dont les résultats sont repris dans la table 8.8. Nous indiquons dans la suite de cette partie, 5.5.1, comment l'utilisation du package *Invar*, [Kem93], de Maple 10, [Map05], permet le calcul automatique de ces invariants et calculerons les invariants polynomiaux de certains des groupes que nous utiliserons pour établir la table 8.8.

5.3.2. Réduction du nombre d'inconnues : utilisation de groupes finis de symétries

La méthode de construction proposée dans le paragraphe 5.2.1 présente un défaut. Si nous souhaitons construire un plan expérimental dont le support est un ensemble de cardinal r et inclus dans un domaine expérimental qui est une partie de \mathbb{R}^v , alors nous devons résoudre de manière exacte un système d'équations polynomiales à $r \cdots v$ inconnues. Il est donc nécessaire de diriger la construction en essayant de réduire le nombre d'inconnues de manière appropriée au problème posé. Nous indiquons maintenant une possibilité pour parvenir à ce résultat qui est une conséquence des nombreux travaux consacrés à la recherche de dispositifs isovariants ainsi que de l'étude numérique systématique réalisée par Hardin et Sloane, [HS92].

Pour un nombre de points support du plan expérimental fixé, il existe des plans isovariants qui de surcroît vérifient certaines symétries : ce sont une union d'ensembles de points obtenus comme orbite par des groupes de réflexions finis. Par conséquent nous chercherons de tels plans ce qui aura pour effet d'introduire des relations linéaires en les coordonnées des points support du plan et diminuera ainsi le nombre d'inconnues du problème de construction que nous considérerons et augmentera de ce fait nos chances d'obtenir une résolution en un temps acceptable du problème de construction polynomiale que nous nous sommes fixés. Pour plus de détails sur les groupes finis dont nous nous sommes servis nous renvoyons aux sections 8.2 et 8.4 ainsi qu'à la section 8.3 qui présente leur rapport avec les polyèdres convexes.

Pour obtenir un plan isovariant, il faut donc déterminer quelles sont les coordonnées des points dont nous devons prendre l'orbite par un groupe fini. Le choix du groupe fini utilisé est donc crucial dans l'étude du problème posé et, afin de le réaliser de manière adéquate

pour notre étude de la construction de plans isovariants, nous nous sommes appuyés sur les résultats de Hardin et Sloane que nous avons rappelés au paragraphe 7.1.1.

5.3.3. Résolution du système d'équations polynomiales : utilisation des bases de Gröbner

Les bases de Gröbner, combinées à l'utilisation de l'ordre lexicographique, sont des outils qui permettent de résoudre des systèmes d'équations polynomiales. Nous renvoyons par exemple aux livres de [KR00], [KR05] ou [CLO96] pour un exposé détaillé de cette application des bases de Gröbner. Nous avons indiqué comment procéder dans le paragraphe 8.1.3 du chapitre 8 ainsi qu'un exemple de résolution effective 8.1.4. Nous renvoyons également au chapitre 7 puisque nous nous sommes servis de cette approche pour résoudre les problèmes de construction polynomiale que nous avons traités.

Remarque 5.3.1. Dans ce chapitre, les bases de Gröbner interviennent à deux étapes distinctes de la construction de type polynomiale de plans expérimentaux :

- La caractérisation de l'invariance faible à l'aide de la fonction génératrice des moments se traduit par l'appartenance de cette dernière une sous-algèbre de polynômes ce qui se traduit par un système d'équations polynomiales en les coordonnées des points support du plan.
- La résolution effective du système d'équations polynomiales traduisant les diverses contraintes que doivent vérifier les points support du plan en calculant une base de Gröbner pour l'ordre lexicographique.

5.4. Programmation semi-définie positive

5.4.1. Introduction

Nous nous sommes donc ramenés à la résolution d'un système d'équations polynomiales à coefficients réels. Bien entendu nous pourrions utiliser la théorie de l'élimination et les bases de Gröbner pour trouver toutes les solutions complexes de ce système d'équations polynomiales. Or, nous ne nous sommes intéressés que par les solutions réelles puisque celles-ci permettront de connaître les coordonnées des points dont il faudra prendre l'orbite pour construire le support d'un plan qui sera isovariant. Une manière efficace de résoudre ce problème passe par la combinaison de la théorie des bases de Gröbner et de la théorie de la programmation semi-définie positive. Nous verrons même que cette approche permettra non seulement de déterminer si une solution existe mais aussi de sélectionner parmi toutes les solutions possibles celle qui minimise un critère de type polynomial. Ainsi nous pourrions combiner la résolution des équations d'isovariance à la recherche d'un plan optimal pour un critère d'optimalité qui puisse s'écrire de manière polynomiale. Nous renvoyons le lecteur vers le livre de Sturmfels [Stu02] et la thèse de Parrilo [Par00] pour une introduction plus détaillée à cette problématique.

Il existe deux types génériques de problèmes que nous pouvons aborder en utilisant la théorie de la programmation semi-définie positive : le problème de l'existence d'une solution ou le problème de la recherche d'une solution optimale. Nous introduisons maintenant

le cadre mathématique de la théorie.

Nous rappelons que nous notons $\mathcal{S}_n^+(\mathbb{R})$ l'ensemble des matrices carrées d'ordre n à coefficients réels qui sont de surcroît semi-définies positives.

Proposition 5.4.1.

$\mathcal{S}_n^+(\mathbb{R})$ est un cône convexe fermé de l'espace vectoriel $\text{Sym}_n(\mathbb{R})$ des matrices carrées d'ordre n symétriques réelles de dimension $\mathbb{R}^{n(n+1)/2}$.

Remarque 5.4.1.

Nous cherchons l'intersection entre des sous-espaces affines de $\text{Sym}_n(\mathbb{R})$ et le cône $\mathcal{S}_n^+(\mathbb{R})$ des matrices semi-définies positives.

Il existe des procédures numériques très efficaces permettant de résoudre les deux problèmes suivants :

Problème 5.4.1. *Programmation semi-définie positive : existence d'une solution.*

Considérons un sous-espace affine \mathcal{V} de $\text{Sym}_n(\mathbb{R})$, existe-t-il un élément A de $\mathcal{S}_n^+(\mathbb{R})$ qui appartienne à \mathcal{V} ?

Problème 5.4.2. *Programmation semi-définie positive : optimisation.*

Considérons un sous-espace affine \mathcal{V} de $\text{Sym}_n(\mathbb{R})$ et une forme affine l_0 sur $\text{Sym}_n(\mathbb{R})$, comment minimiser $l_0(A)$ pour A appartenant à $\mathcal{V} \cap \mathcal{S}_n^+(\mathbb{R})$?

Nous allons voir maintenant que ces deux problèmes permettent de trouver les solutions réelles de systèmes d'équations polynomiales ou de montrer l'absence d'existence d'une solution réelle.

5.4.2. Théorème des zéros : cas réel

Nous considérons un système d'équations et d'inéquations polynomiales en v indéterminées (x_1, \dots, x_v) . Le cas réel du théorème des zéros affirme que ce système possède une solution réelle $u \in \mathbb{R}^v$ ou qu'il existe l'assurance qu'aucune solution réelle n'existe, ce qui se traduit par une identité polynomiale appelée **réfutation**. Ce résultat est à la fois une généralisation du théorème des zéros de Hilbert, voir le théorème 8.1.14 du chapitre 8, pour les équations polynomiales sur \mathbb{C} , et de la programmation linéaire duale, pour les inégalités sur \mathbb{R} . En effet le théorème des zéros de Hilbert indique que k polynômes à coefficients complexes, p_1, \dots, p_k ont une solution complexe commune ou qu'il existe l'assurance qu'il n'existe pas de solution, la réfutation est alors une relation de la forme $\sum_{i=1}^k p_i f_i = 1$, où les p_i sont des multiplicateurs polynomiaux. La programmation linéaire duale indique qu'un système d'inégalités linéaires strictes $h_1(x) > 0, \dots, h_t(x) > 0$ possède soit une solution soit qu'il existe des nombres réels $\alpha_l, 1 \leq l \leq t$ positifs et non tous nuls tels que $\sum_{l=1}^t \alpha_l h_l(x) = 0$ ce qui est une réfutation de l'existence d'une solution réelle.

Théorème 5.4.1. *Théorème des zéros : cas réel*

Soient $f_1, \dots, f_r, g_1, \dots, g_s, h_1, \dots, h_t$ des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$. Le système d'équations et d'inéquations polynomiales :

$$\begin{aligned} f_1(x) = 0, & \quad f_2(x) = 0, \quad \dots, \quad f_r(x) = 0, \\ g_1(x) \geq 0, & \quad g_2(x) \geq 0, \quad \dots, \quad g_s(x) \geq 0, \\ h_1(x) > 0, & \quad h_2(x) > 0, \quad \dots, \quad h_t(x) > 0, \end{aligned} \tag{5.4.1}$$

5.4 Programmation semi-définie positive

a soit une solution réelle dans \mathbb{R}^v soit il existe une identité polynomiale, appelée réfutation :

$$\sum_{i=1}^r a_i f_i + \sum_{\nu \in \{0,1\}^s} \left(\sum_j b_{j\nu}^2 \right) \cdot g_1^{\nu_1} \cdots g_s^{\nu_s} + \sum_{\nu \in \{0,1\}^t} \left(\sum_j c_{j\nu}^2 \right) \cdot h_1^{\nu_1} \cdots h_t^{\nu_t} + \sum_k d_k^2 + \prod_{l=1}^t h_l^{u_l} = 0, \quad (5.4.2)$$

où $u_j \in \mathbb{N}$ et $a_i, b_{j\nu}, c_{j\nu}, d_k$ sont de polynômes réels.

Démonstration 5.4.1. La formulation précédente du théorème des zéros réels est due à Stengle [Ste96].

Dans un premier dans nous nous intéressons spécifiquement au cas où $s = t = 0$. Sans la présence d'inégalités nous avons donc à résoudre :

$$\begin{cases} f_1(x) = 0 \\ f_2(x) = 0 \\ \vdots \\ f_r(x) = 0. \end{cases} \quad (5.4.3)$$

Corollaire 5.4.1.

Tout polynôme positif ou nul sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ est une somme de carrés d'éléments de $\mathbb{R}(x_1, \dots, x_v)$.

Démonstration 5.4.2. Nous appliquons le théorème 5.4.1 avec $t = 1$. Si l'équation $h_1(x) > 0$ n'a pas de solution sur \mathbb{R}^v alors $-h(x) \geq 0$ sur \mathbb{R}^v . Par conséquent il existe une réfutation de la forme :

$$\left(\sum_j c_j \right)^2 \cdot h + \sum_k d_k^2 + h^u = 0, \quad (5.4.4)$$

avec $u = 0$ ou $u = 1$. Dans les deux cas $-h$ s'écrit comme une somme de carrés de fractions rationnelles.

Corollaire 5.4.2.

Si I un idéal de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ dont la variété réelle $\mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^v$ est vide, alors -1 est une somme de carrés de polynômes modulo I .

Démonstration 5.4.3. L'expression $\prod_{l=1}^t h_l^{u_l}$ dans la réfutation du théorème 5.4.1 est le produit vide qui par convention vaut 1.

5.4.3. Calcul algorithmique des réfutations

Parrilo a montré dans [Par00] et [Par03] que, si nous restreignons le degré maximal possible pour une réfutation, il est alors possible de la calculer avec le *semidefinite programming*. Cette remarque a donné lieu à une approche algorithmique du calcul des réfutations : fixer un degré D très grand et déterminer s'il existe une réfutation de degré plus petit que D .

Il existe des bornes sur le degré maximal D de la réfutation intervenant dans le théorème des zéros réels mais les bornes que nous pourrions déterminer à l'avance sont généralement très importantes, par exemple triplement exponentielles en le nombre des variables,

[Lom92].

S'il existe des solutions, nous pouvons alors minimiser un polynôme $f(x)$ sur l'ensemble de ces solutions.

5.4.4. Décomposition en sommes de carrés

Soit V un espace vectoriel réel de dimension m . Toute forme quadratique q sur V se décompose sous la forme d'une somme de carrés comme conséquence par exemple de l'algorithme de Gauss ou de la diagonalisation des endomorphismes symétriques en base orthonormée. Il est possible de réaliser rapidement cette réduction à l'aide de plusieurs logiciels comme Matlab [Mat07] et Maple [Map05]. Cette constatation est le point de départ du calcul algorithmique des réfutations.

L'utilisation du logiciel *sostools* [PPSP04b] permet d'obtenir de manière approchée l'existence de telles décompositions et de ce fait résoudre le problème qui nous intéresse.

L'article [PS03] de Parrilo et Sturm expose une possibilité dont nous allons tirer parti : sélectionner une solution minimisant un critère polynomial. Nous pouvons également utiliser l'invariance, pour l'action d'un groupe fini, des polynômes intervenant dans la formulation du problème de programmation pour simplifier celui-ci, cf. [GP04] et [PPSP04a].

5.4.5. Optimisation sur une variété réelle

Une approche pour résoudre le problème de déterminer la valeur minimale d'un polynôme f sur une variété réelle $\mathbf{V}(I)$ peut être la suivante. Un système de générateurs de la variété I , dont l'existence est assurée par le théorème 8.1.3, permet de trouver un entier r et des polynômes f_1, \dots, f_r tels que $\mathbf{V}(I)$ est l'ensemble des solutions du système $f_1(x) = \dots = f_r(x) = 0$.

Problème 5.4.3.

Étant donné un système $f_1(x) = \dots = f_r(x) = 0$ définissant la variété réelle $\mathbf{V}(I)$ et un polynôme $f \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, nous cherchons désormais à trouver le plus grand $\lambda \in \mathbb{R}$ tel qu'il n'existe pas de réfutations de degré au plus D sur \mathbb{R}^v au système :

$$\begin{cases} f_1(x) = \dots = f_r(x) = 0 \\ f(x) - \lambda < 0. \end{cases} \quad (5.4.5)$$

Cette approche nous permet, par exemple, de combiner la recherche de plans isovariants à celle de la minimisation d'un critère d'optimalité qui puisse s'exprimer sous forme polynomiale en les coordonnées des points du plan comme le critère de D -optimalité ou de I -optimalité. Son intérêt est particulièrement prononcé lorsque nous cherchons à trouver des plans isovariants pour des modèles polynomiaux d'un degré d donné. Nous pouvons alors ajouter des termes polynomiaux à ce modèle et déterminer les modèles optimaux pour cet ajout qui conserve la propriété d'isovariance pour ce degré d donné. Pour résoudre des problème d'optimisation non linéaire il est possible d'utiliser le package Maple, [Map05], *Exact solving of nonlinear optimization problems* de Domarkas, [Dom01].

5.4.6. Variétés réelles de dimension 0

Soit I un idéal de dimension 0 dans $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$. Supposons que nous ayons calculé une base de Gröbner G de I pour l'ordre τ . Par définition, voir le 8.1.29 du chapitre 8, d'une base de Gröbner nous avons : $\langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle = \langle \text{LT}(I) \rangle$. La proposition 8.1.41 du chapitre 8 indique que l'ensemble $\{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle = \langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle\}$, de cardinal n , est une base du \mathbb{R} -espace vectoriel $\mathcal{V} = \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$ et de ce fait $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I \cong \mathbb{R}^n$. Toute forme quadratique q sur \mathcal{V} peut être associée à une matrice A carrée d'ordre n dont les lignes et les colonnes sont indexées par une base de \mathcal{V} , en l'occurrence les éléments de $\{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle = \langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle\}$. Notons M le vecteur dont les composantes sont les monômes de $\{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle = \langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle\}$ ordonnés de la même manière que les colonnes et les lignes de A . Le produit $M'AM$ est un polynôme appartenant à $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ dont nous pouvons calculer la forme normale, $\overline{M'AM}^G$, modulo la base de Gröbner G . Cette forme normale $\overline{M'AM}^G$ est alors un élément de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$. Nous appliquons désormais la programmation semi-définie positive aux formes quadratiques $\overline{M'AM}^G$ définie sur $\mathcal{V} = \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$.

Théorème 5.4.2.

Soient I un idéal de dimension 0 dans $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.

Les trois assertions suivantes sont équivalentes :

- $\mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^v = \emptyset$.
- La constante -1 est une somme de carrés dans $\mathcal{V} = \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$
- Il existe une matrice A carrée d'ordre m semi-définie positive, dont les lignes et les colonnes sont indexées par une base de \mathcal{V} , les éléments de $\{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle\}$, telle que

$$M'AM + 1 \in I, \tag{5.4.6}$$

où M est le vecteur dont les composantes sont les éléments de $\{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle\}$ ordonnés de la même manière que les colonnes et les lignes de A .

Démonstration 5.4.4. L'équivalence

$$M'AM + 1 \in I \iff \overline{M'AM + 1}^G = 0, \tag{5.4.7}$$

découle du corollaire 8.1.5 du chapitre 8. Supposons que la troisième assertion soit vérifiée, nous avons alors $\overline{M'AM}^G = \overline{-1}^G$ avec A semi-définie positive d'où -1 est une somme de carrés dans \mathcal{V} et la seconde assertion est vérifiée. La réciproque est immédiate. Supposons la deuxième assertion vérifiée et que l'intersection $\mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^v$ soit non vide ; posons $(x_{0,1}, \dots, x_{0,v}) \in \mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^v$. Nous avons $-1 = \sum_{i=1}^k \alpha_i (x_{0,1}, \dots, x_{0,v})^2 + f(x_{0,1}, \dots, x_{0,v})$ et $f(x_{0,1}, \dots, x_{0,v}) = 0$ car $(x_{0,1}, \dots, x_{0,v}) \in \mathbf{V}(I)$. Puis comme $(x_{0,1}, \dots, x_{0,v}) \in \mathbb{R}^v$ nous avons, en utilisant de la compatibilité de la relation d'ordre sur \mathbb{R} avec les opérations élémentaires, $\sum_{i=1}^k \alpha_i (x_{0,1}, \dots, x_{0,v})^2 \geq 0 > -1$. Ainsi la première assertion est vérifiée. La première assertion implique la deuxième par réduction au cas $v = 1$ puis par le fait qu'un polynôme de $\mathbb{R}[x]$ sans zéro réel est un produit de trinômes dont les discriminants sont négatifs.

L'existence d'une solution est alors simplement une conséquence de l'impossibilité de trouver une matrice $A \in \mathcal{S}_n^+(\mathbb{R})$ vérifiant l'équation 5.4.6. La condition $\overline{M'AM + 1}^G = 0$ est un système d'équations linéaires en les coefficients de la matrice A qui doit appartenir à \mathcal{S}_n^+ . Ainsi déterminer si $\mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^v$ est l'ensemble vide revient à résoudre un problème de programmation semi-définie positive du type 5.4.1. Il est possible de résoudre ce problème avec le logiciel Matlab, [Mat07], et l'ensemble de procédures SOSTools [PPSP04b].

5.4.7. Minimisation de polynômes sur une variété de dimension 0

Comme nous l'avons l'exposé au paragraphe 5.4.6, lorsque l'ensemble des solutions est une variété de dimension 0, il est également possible de tirer parti de la structure particulière qu'il en découle, [PPSP04a], comme nous l'avons fait dans le paragraphe 5.4.6 précédent pour ce qui concerne l'existence d'une solution d'un système d'équations. Dans ce paragraphe nous nous intéressons au problème suivant :

Problème 5.4.4. *Optimisation sur une variété réelle.*

Étant donné un polynôme $f \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, nous cherchons désormais à minimiser $f(u)$ pour $u \in \mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^n$.

Une approche pour résoudre ce problème peut être la suivante.

Problème 5.4.5. *Somme des carrés dans un anneau artinien.*

Étant donné un polynôme $f \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, nous cherchons désormais à trouver le plus grand $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que

$$M'AM - f(x) - \lambda \in I \text{ avec } A \in \mathcal{S}_n^+(\mathbb{R}). \quad (5.4.8)$$

Ce problème se reformule aisément dans le contexte de la programmation semi-définie positive 5.4.2 et conduit toujours à l'obtention de la valeur optimale de λ .

Théorème 5.4.3.

Soit I un idéal de dimension 0 de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$. Si $g \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ est un polynôme qui est positif sur $\mathbf{V}(I) \cap \mathbb{R}^v$ alors g est une somme de carrés dans $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$.

Démonstration 5.4.5. Pour chaque racine réelle de I , nous choisissons un polynôme $p_u(x)$ qui s'annule sur $\mathbf{V}(I) \setminus \{u\}$ et tel que $p_u(u) = 1$. Pour chaque paire de racines complexes conjuguées $U = \{u, \bar{u}\}$, nous construisons un polynôme $q_U(x)$ à coefficients réels qui s'annule sur $\mathbf{V}(I) \setminus \{U\}$ mais tel que $q_U(u) = q_U(\bar{u}) = 1$ et nous construisons une somme de carrés $s_U(x) \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ telle que g est congru à s_U modulo $\langle x - u \rangle \cap \langle x - \bar{u} \rangle$. Le polynôme suivant est une somme de carrés :

$$G(x) = \sum_{u \in \mathbf{V}(I) \setminus \{u\}} g(u) \cdot p_u(x)^2 + \sum_{u \in \mathbf{V}(I) \setminus \{U\}} s_U(x) \cdot q_U(x)^2. \quad (5.4.9)$$

Par construction la différence $g(x) - G(x)$ s'annule sur la variété complexe de I . Le théorème des zéros forts de Hilbert, 8.1.14 du chapitre 8, affirme que $\sqrt{I} = \mathbf{I}(\mathbf{V}(I))$ et comme I est un idéal radical, $\sqrt{I} = I$. Par conséquent $g(x) - G(x)$ appartient à I , c'est-à-dire $\overline{G(x)}^G = \overline{g(x)}^G$, et de ce fait g est une somme de carrés dans $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]/I$.

Corollaire 5.4.3.

Si I est un idéal radical alors le problème 5.4.4 est résolu de manière exacte par la procédure 5.4.5.

Remarque 5.4.2.

Rappelons que les critères de D -optimalité, de I -optimalité et ϕ_p , pour p entier, sont des critères d'optimalité polynomiaux en les coordonnées des points du plan, cf. la définition 5.2.2.

5.5. Calculs algorithmiques des générateurs, des éléments et des invariants polynomiaux de sous-groupes finis du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v

```
> restart;

> read("C:\\Donnes\\Thèse\\Maple V Release 5\\SHARE\\invar\\Invar.mpl");
PATHDATA:="C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\";

      PATHDATA := "C:\\Données \\Thèse\\Maple \\MapleData\\"

> with(invar);protocol_level:=1;

[alginsolve, aver_orb, check_nullspace, classes, derive, elements, elesym, generators, inv,
 invarspace, invring, lingroup, mklingroup, monoms, monoms_base, multiply, onesoff,
 out, poincare, poinrep, primaries, proj, reci, reduce, relations, renormal, repfrac,
 represent, secondaries, showbasis, showprims, showrels, showseconds, throw, valueof
]

      protocol_level := 1

> GENTOGROUPE:=proc(NOMGROUPE,GENS,MINPOL)
local TEMPGROUPE,GROUPE,IGENTOGROUPE,JGENTOGROUPE;
TEMPGROUPE[geners]:=GENS: if nargs=3 then TEMPGROUPE[minpol]:=MINPOL:
fi: elements(TEMPGROUPE): IGENTOGROUPE:=nops(op(1,GENS)):
JGENTOGROUPE:=nops(op(1,op(1,GENS))): GROUPE:=map(temp ->
Matrix(IGENTOGROUPE, JGENTOGROUPE, temp, datatype = anything,
storage = rectangular, order = Fortran_order, shape =
[]),TEMPGROUPE[eles]): save GROUPE, cat(PATHDATA,NOMGROUPE,".txt");
lprint(cat("Done, ",PATHDATA,NOMGROUPE,".txt"));lprint(); gc();
end;
```

```

GENTOGROUPE := proc(NOMGROUPE, GENS, MINPOL)
  local TEMPGROUPE, GROUPE, IGENTOGROUPE, JGENTOGROUPE;
    TEMPGROUPEgens := GENS;
  if nargs = 3 then TEMPGROUPEminpol := MINPOL fi;
  elements(TEMPGROUPE);
  IGENTOGROUPE := nops(op(1, GENS));
  JGENTOGROUPE := nops(op(1, op(1, GENS)));
  GROUPE := map(temp → Matrix(IGENTOGROUPE, JGENTOGROUPE, temp,
    datatype = anything, storage = rectangular, order = Fortran_order, shape = []),
    TEMPGROUPEeles);
  ?GROUPE, cat(PATHDATA, NOMGROUPE, ".txt");
  lprint(cat("Done, ", PATHDATA, NOMGROUPE, ".txt"));
  lprint();
  gc()
end

```

5.5.1. Construction de quelques groupes dérivés des groupes de permutations

```

> GENTOGROUPE("Sn_4",{[[0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0],
  [0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0]], [[0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0]]}):

```

Calculating all elements of the group G ...

It has 24 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\Sn_4.txt"

```

> GENTOGROUPE("Sn_5",{[[0, 1, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0]]}):

```

Calculating all elements of the group G ...

It has 120 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\Sn_5.txt"

```

> GENTOGROUPE("Sn_6",{[[0, 0, 0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0]], [[0, 1, 0, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 0, 0, 1]]}):

```

Calculating all elements of the group G ...

It has 720 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\Sn_6.txt"

```
> GENTOGROUPE("An_4",{[[[0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1], [0, 0, 1, 0]], [[0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 1], [0, 0, 0, 1], [0, 0, 1, 0]], [[0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 1], [0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0]], [0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0]], [[0, 0, 0, 1], [0, 0, 1, 0], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0]], [[0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0]], [[0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 0, 1, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1]]]]):
```

Calculating all elements of the group G ...

It has 12 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\An_4.txt"

```
> GENTOGROUPE("An_5",{[[[0, 0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0]], [[0, 0, 0, 0, 1], [0, 0, 0, 0, 1], [0, 0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0]], [[0, 0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1]]]]):
```

Calculating all elements of the group G ...

It has 60 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\An_5.txt"

```
> GENTOGROUPE("An_6",{[[[0, 0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 0, 1]], [[0, 0, 0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0, 0]], [[0, 0, 0, 0, 0, 1], [0, 1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0, 0]], [[0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0]], [[0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 1, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0]]]]):
```

Calculating all elements of the group G ...

It has 360 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\An_6.txt"

```
> GENTOGROUPE("Bn_4",{[[[1, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, -1]], [[0, 0, 0, 1], [1, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0]], [[-1, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0], [0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 1]], [[0, 1, 0, 0], [1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 1]]]]):
```

Calculating all elements of the group G ...

It has 384 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\Bn_4.txt"

```
> GENTOGROUPE("Bn_5",{[[0, 0, 0, 0, 1], [1, 0,
0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0]], [[1, 0,
0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0,
0, -1]], [[0, 1, 0, 0, 0], [1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 1, 0, 0], [0, 0, 0,
1, 0], [0, 0, 0, 0, 1]], [[-1, 0, 0, 0, 0], [0, 1, 0, 0, 0], [0, 0, 1,
0, 0], [0, 0, 0, 1, 0], [0, 0, 0, 0, 1]]}):
```

Calculating all elements of the group G ...

It has 3840 elements.

"Done, C:\\Fred\\MapleData\\Bn_5.txt"

```
> GENTOGROUPE("Sloane192_alg",{[[1, 0], [0,
1/6*a+1/6*a^3]], [[5/12*a-1/12*a^3, 5/12*a-1/12*a^3],
[5/12*a-1/12*a^3, -5/12*a+1/12*a^3]]},a^4-2*a^2+9);
```

Calculating all elements of the group G ...

It has 192 elements.

"Done, C:\\Donnes\\Thèse\\Maple\\MapleData\\Sloane192.txt"

5.5.2. Construction de quelques groupes finis de réflexions

Groupes diédraux $[n]$

```
> for k from 1 to 40 do read
cat(PATHDATA,"Gen_["k,"].txt");
GENTOGROUPE(cat(["k,"]_alg),op(RepG)); od;
```

Groupes de type $[n]^+$

```
> for k from 1 to 40 do read
cat(PATHDATA,"Gen_["k,"]+.txt");
GENTOGROUPE(cat(["k,"]+_alg),op(RepG)); od;
```

Associés aux groupes diédraux $[2, p]$

```
> for k from 1 to 40 do read
cat(PATHDATA,"Gen_[2,"k,"].txt");
GENTOGROUPE(cat("[2,"k,"]_alg),op(RepG)); od;
```

Groupes $[2^+, p]$

```
> for k from 1 to 40 do read
cat(PATHDATA,"Gen_[2+,"k,"].txt");
GENTOGROUPE(cat("[2+,"k,"]_alg),op(RepG)); od;
```

Groupes $[2, p]^+$

```
> for k from 1 to 40 do read
cat(PATHDATA,"Gen_[2,"k,"]+.txt"); print(cat("Reading
",cat(PATHDATA,"Gen_[2,"k,"]+.txt")));
GENTOGROUPE(cat("[2,"k,"]+_alg),op(RepG)); od;
```

Groupes $[2^+, p^+]$

```
> for k from 1 to 40 do read
  cat(PATHDATA,"Gen_[2+,"k,"+].txt"); print(cat("Reading
",cat(PATHDATA,"Gen_[2+,"k,"+].txt")));
  GENTOGROUPE(cat("[2+,"k,"+]_alg"),op(RepG)); od;
```

Groupes $[p, q]$ associés aux polyèdres réguliers

```
> GENTOGROUPE("[3,3]_alg",{[[1/3, 0,
1/3*a^3-3*a], [0, 1, 0], [1/3*a^3-3*a, 0, -1/3]], [[-1/2,
-11/4*a+1/4*a^3, 0], [11/4*a-1/4*a^3, -1/2, 0], [0, 0, 1]]},
-10*a^2+a^4+1);
```

```
'\Calculating all elements of the group G ...\'
```

```
'\It has 24 elements.\'
```

```
''
```

```
"Done, C:\\\\Donnes\\\\Thèse\\\\Maple\\\\MapleData\\\\[3,3]_alg.txt"
```

```
''
```

```
> GENTOGROUPE("[3,4]_alg",{[[1, 0, 0], [0, 1,
0], [0, 0, -1]], [[0, 0, 1], [1, 0, 0], [0, 1, 0]], [[-1, 0, 0], [0,
1, 0], [0, 0, 1]], [[0, 1, 0], [1, 0, 0], [0, 0, 1]]});
```

```
'\Calculating all elements of the group G ...\'
```

```
'\It has 48 elements.\'
```

```
''
```

```
"Done, C:\\\\Donnes\\\\Thèse\\\\Maple\\\\MapleData\\\\[3,4]_alg.txt"
```

```
''
```

```
> GENTOGROUPE("[3,5]_alg",
{[[74/95*a^2-5/38*a^4+1/190*a^6-47/95, 0,
-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95], [0, 1, 0],
[-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95, 0,
-74/95*a^2+5/38*a^4-1/190*a^6+47/95]], [[1, 0, 0], [0, -1, 0], [0, 0,
1]], [[7/19-37/38*a^2+25/152*a^4-1/152*a^6,
-187/152*a^2+47/304*a^4-3/608*a^6+39/38, 0],
[187/152*a^2-47/304*a^4+3/608*a^6-39/38,
7/19-37/38*a^2+25/152*a^4-1/152*a^6, 0], [0, 0,
1]]},-272*a^2+204*a^4-28*a^6+16*a^8);
```

```
'\Calculating all elements of the group G ...\'
```

```
'\It has 120 elements.\'
```

```
''
```

```
"Done, C:\\\\Donnes\\\\Thèse\\\\Maple\\\\MapleData\\\\[3,5]_alg.txt"
```

```
''
```

Sous-groupes d'isométries directes associés aux polyèdres réguliers $[p, q]^+$

```
> GENTOGROUPE("[3,3]+_alg",{[[-1/2,
-11/4*a+1/4*a^3, 0], [11/4*a-1/4*a^3, -1/2, 0], [0, 0, 1]], [[-2/3,
11/6*a-1/6*a^3, -1/6*a^3+3/2*a], [11/6*a-1/6*a^3, 0, -1/6*a^2+5/6],
[-1/6*a^3+3/2*a, -1/6*a^2+5/6, -1/3]]}, -10*a^2+a^4+1);
```

```

'\Calculating all elements of the group G ...\'
'\It has 12 elements.\'
''
"Done, C:\\\\Donnes\\Th
èse\\Maple\\MapleData\\[3,3]+_alg.txt"
''
> GENTOGROUPE("[3,4]+_alg",{[[[0, 1, 0], [0, 0,
1], [1, 0, 0]], [[1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, 1]], [[0, 1, 0], [-1, 0,
0], [0, 0, 1]], [[-1, 0, 0], [0, -1, 0], [0, 0, 1]], [[0, 0, 1], [1,
0, 0], [0, 1, 0]]});
'\Calculating all elements of the group G ...\'
'\It has 24 elements.\'
''
"Done, C:\\\\Donnes\\Th
èse\\Maple\\MapleData\\[3,4]+_alg.txt"
''
> GENTOGROUPE("[3,5]+_alg",{[[-1, 0, 0], [0,
1, 0], [0, 0, -1]], [[-37/190*a^2+5/152*a^4-1/760*a^6+71/190,
429/760*a^2-119/1520*a^4+1/380*a^6-113/380,
-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95],
[55/152*a^2-25/304*a^4+1/304*a^6+43/76,
-37/38*a^2+25/152*a^4-1/152*a^6+33/38, 0],
[37/95*a^2-5/76*a^4+1/380*a^6-71/95,
-429/380*a^2+119/760*a^4-1/190*a^6+113/190,
-74/95*a^2+5/38*a^4-1/190*a^6+47/95]],
[[74/95*a^2-5/38*a^4+1/190*a^6-47/95, 0,
-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95], [0, -1, 0],
[-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95, 0,
-74/95*a^2+5/38*a^4-1/190*a^6+47/95]]
},-272*a^2+204*a^4-28*a^6+16*a^8);
'\Calculating all elements of the group G ...\'
'\It has 60 elements.\'
''
"Done, C:\\\\Donnes\\Th
èse\\Maple\\MapleData\\[3,5]+_alg.txt"
''
Associés aux polyèdres réguliers et de type  $[p^+, q]$ 
> GENTOGROUPE("[3+,4]_alg",{[[-1, 0, 0], [0,
-1, 0], [0, 0, -1]], [[-1/2, -11/4*a+1/4*a^3, 0], [11/4*a-1/4*a^3,
-1/2, 0], [0, 0, 1]], [[-2/3, 11/6*a-1/6*a^3, -1/6*a^3+3/2*a],
[11/6*a-1/6*a^3, 0, -1/6*a^2+5/6], [-1/6*a^3+3/2*a, -1/6*a^2+5/6,
-1/3]]}, -10*a^2+a^4+1);
'\Calculating all elements of the group G ...\'

```

```
\‘It has 24 elements.\‘
```

```
‘
```

```
“Done, C:\\\\Donnes\\Th
èse\\Maple\\MapleData\\[3+,4]_alg.txt”
```

```
‘
```

5.5.3. Calcul du degrés des invariants polynomiaux

```
> Tetra:=lingroup({[[1/3, 0, 1/3*a^3-3*a], [0,
1, 0], [1/3*a^3-3*a, 0, -1/3]], [[-1/2, -11/4*a+1/4*a^3, 0],
[11/4*a-1/4*a^3, -1/2, 0], [0, 0, 1]]}, -10*a^2+a^4+1);
```

$$Tetra := \text{lingroup}(\left\{ \left[\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3}a^3 - 3a \right], [0, 1, 0], \left[\frac{1}{3}a^3 - 3a, 0, \frac{-1}{3} \right], \right. \\ \left. \left[\frac{-1}{2}, -\frac{11}{4}a + \frac{1}{4}a^3, 0 \right], \left[\frac{11}{4}a - \frac{1}{4}a^3, \frac{-1}{2}, 0 \right], [0, 0, 1] \right\}, -10a^2 + a^4 + 1)$$

```
> invring(Tetra);
```

```
Splitting off unit-characters ...
There is none.
```

```
Calculating the poincare-series ...
It is
```

$$P(s) = -\frac{1}{(s^3 - s^2 - s + 1)(s + 1)(1 + s^2 + s)(s^2 + 1)(s - 1)}$$

```
Try the representation
```

$$P(s) = \frac{1}{(1 - s^2)(1 - s^3)(1 - s^4)}$$

```
The primaries are (by their symbolic names):
```

```
s1 of degree 2   s2 of degree 3   s3 of degree 4
```

```
Finding secondary generators ...
```

```
We'll get a basis of invariants of degrees 0.
```

```
The invariant ring is a free module over Q[{primaries}] with basis
1 of degree 0
```

```
> Cube:=lingroup({[[1, 0, 0], [0, 1, 0], [0,
0, -1]], [[0, 0, 1], [1, 0, 0], [0, 1, 0]], [[-1, 0, 0], [0, 1, 0],
[0, 0, 1]], [[0, 1, 0], [1, 0, 0], [0, 0, 1]]});
```

$$Cube := \text{lingroup}(\left\{ [1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, -1], [-1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, 1], \right. \\ \left. [0, 0, 1], [1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 1, 0], [1, 0, 0], [0, 0, 1] \right\})$$

```
> invring(Cube);
```

```
Splitting off unit-characters ...
There is none.
```

Calculating the poincare-series ...

It is

$$P(s) = -\frac{1}{(s^3 - 1)(s^2 - s - 1 + s^3)(1 + s^3)(s - 1 + s^3 - s^2)}$$

Try the representation

$$P(s) = \frac{1}{(1 - s^2)(1 - s^4)(1 - s^6)}$$

The primaries are (by their symbolic names):

s1 of degree 2 s2 of degree 4 s3 of degree 6

We'll get a basis of invariants of degrees 0.

The invariant ring is a free module over $\mathbb{Q}[\{\text{primaries}\}]$ with basis

1 of degree 0

```
> Icosa:=lingroup(
[[[74/95*a^2-5/38*a^4+1/190*a^6-47/95, 0,
-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95], [0, 1, 0],
[-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95, 0,
-74/95*a^2+5/38*a^4-1/190*a^6+47/95]], [[1, 0, 0], [0, -1, 0], [0, 0,
1]], [[7/19-37/38*a^2+25/152*a^4-1/152*a^6,
-187/152*a^2+47/304*a^4-3/608*a^6+39/38, 0],
[187/152*a^2-47/304*a^4+3/608*a^6-39/38,
7/19-37/38*a^2+25/152*a^4-1/152*a^6, 0], [0, 0,
1]]], -272*a^2+204*a^4-28*a^6+16+a^8);
```

```
Icosa := lingroup({[[1, 0, 0], [0, -1, 0], [0, 0, 1]], [
[ $\frac{7}{19} - \frac{37}{38}a^2 + \frac{25}{152}a^4 - \frac{1}{152}a^6, -\frac{187}{152}a^2 + \frac{47}{304}a^4 - \frac{3}{608}a^6 + \frac{39}{38}, 0$ ],
[ $\frac{187}{152}a^2 - \frac{47}{304}a^4 + \frac{3}{608}a^6 - \frac{39}{38}, \frac{7}{19} - \frac{37}{38}a^2 + \frac{25}{152}a^4 - \frac{1}{152}a^6, 0$ ], [0, 0, 1]], [
[ $\frac{74}{95}a^2 - \frac{5}{38}a^4 + \frac{1}{190}a^6 - \frac{47}{95}, 0, -\frac{148}{95}a^2 + \frac{5}{19}a^4 - \frac{1}{95}a^6 + \frac{94}{95}$ ], [0, 1, 0],
[ $-\frac{148}{95}a^2 + \frac{5}{19}a^4 - \frac{1}{95}a^6 + \frac{94}{95}, 0, -\frac{74}{95}a^2 + \frac{5}{38}a^4 - \frac{1}{190}a^6 + \frac{47}{95}$ ]]],
-272a^2 + 204a^4 - 28a^6 + 16 + a^8)
```

```
> invring(Icosa);
```

Splitting off unit-characters ...

There is none.

Calculating the poincare-series ...

It is

$$P(s) = -\frac{1}{(-1 + s^2)(1 + s^3)(s^5 - 1)(s^2 - s - s^3 + 1 + s^4)(s + 1)(-1 + s^3)}$$

Try the representation

$$P(s) = \frac{1}{(1 - s^2)(1 - s^6)(1 - s^{10})}$$

The primaries are (by their symbolic names):

5.5 Calculs relatifs aux sous-groupes finis du groupe orthogonal de \mathbb{R}^v

s1 of degree 2 s2 of degree 6 s3 of degree 10

Finding secondary generators ...

We'll get a basis of invariants of degrees 0.

The invariant ring is a free module over $\mathbb{Q}[\{\text{primaries}\}]$ with basis
1 of degree 0

```
> IcosaPlus:=lingroup({[[-1, 0, 0], [0, 1, 0],
[0, 0, -1]], [[-37/190*a^2+5/152*a^4-1/760*a^6+71/190,
429/760*a^2-119/1520*a^4+1/380*a^6-113/380,
-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95],
[55/152*a^2-25/304*a^4+1/304*a^6+43/76,
-37/38*a^2+25/152*a^4-1/152*a^6+33/38, 0],
[37/95*a^2-5/76*a^4+1/380*a^6-71/95,
-429/380*a^2+119/760*a^4-1/190*a^6+113/190,
-74/95*a^2+5/38*a^4-1/190*a^6+47/95]],
[[74/95*a^2-5/38*a^4+1/190*a^6-47/95, 0,
-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95], [0, -1, 0],
[-148/95*a^2+5/19*a^4-1/95*a^6+94/95, 0,
-74/95*a^2+5/38*a^4-1/190*a^6+47/95]]
},-272*a^2+204*a^4-28*a^6+16+a^8);
> invring(IcosaPlus);
```

```
IcosaPlus := lingroup({[[-1, 0, 0], [0, 1, 0], [0, 0, -1]], [
[- $\frac{37}{190}a^2 + \frac{5}{152}a^4 - \frac{1}{760}a^6 + \frac{71}{190}$ ,  $-\frac{119}{1520}a^4 + \frac{1}{380}a^6 - \frac{113}{380} + \frac{429}{760}a^2$ , %1],
[ $\frac{55}{152}a^2 - \frac{25}{304}a^4 + \frac{1}{304}a^6 + \frac{43}{76}$ ,  $\frac{25}{152}a^4 - \frac{1}{152}a^6 + \frac{33}{38} - \frac{37}{38}a^2$ , 0], [
 $\frac{37}{95}a^2 - \frac{5}{76}a^4 + \frac{1}{380}a^6 - \frac{71}{95}$ ,  $\frac{119}{760}a^4 - \frac{1}{190}a^6 + \frac{113}{190} - \frac{429}{380}a^2$ ,
 $-\frac{74}{95}a^2 + \frac{5}{38}a^4 - \frac{1}{190}a^6 + \frac{47}{95}$ ]],
[[ $\frac{74}{95}a^2 - \frac{5}{38}a^4 + \frac{1}{190}a^6 - \frac{47}{95}$ , 0, %1], [0, -1, 0], [%1, 0,  $-\frac{74}{95}a^2 + \frac{5}{38}a^4 - \frac{1}{190}a^6 + \frac{47}{95}$ ]]
}, -272a^2 + 204a^4 - 28a^6 + 16 + a^8)
%1 :=  $-\frac{148}{95}a^2 + \frac{5}{19}a^4 - \frac{1}{95}a^6 + \frac{94}{95}$ 
```

Splitting off unit-characters ...

There is none.

Calculating the poincare-series ...

It is

$$P(s) = -\frac{s^8 + s^7 - s^5 - s^4 - s^3 + s + 1}{(s^2 - 1)(s + 1)(s^3 - 1)(s^3 + s^2 + s + 1 + s^4)(s - 1)}$$

Try the representation

$$P(s) = \frac{s^{15} + 1}{(1 - s^2)(1 - s^6)(1 - s^{10})}$$

The primaries are (by their symbolic names):

s1 of degree 2 s2 of degree 6 s3 of degree 10

Finding secondary generators ...

We'll get a basis of invariants of degrees 0,15.

```

\The secondary generators are:\
\ t1 of degree 15\
\The invariant ring is a free module over Q[{primaries}] with
basis\
\ \ 1 \ of degree 0\
\ \ t1 \ of degree 15\

```

5.6. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons commencé par étaler un résultat de structure pour l'ensemble des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ induite par l'action linéaire d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact sur \mathbb{R}^v . Ces polynômes invariants forment une \mathbb{R} -sous-algèbre de type fini de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ dont il est possible de déterminer algorithmiquement un système de générateur lorsque le groupe \mathcal{G} est fini. Si le groupe \mathcal{G} est le groupe orthogonal, cette \mathbb{R} -sous-algèbre de type fini n'est autre que la \mathbb{R} -sous-algèbre des polynômes radiaux, c'est-à-dire $\mathbb{R}[\sum_{i=1}^v x_i^2]$. Or, lorsque nous connaissons un système de générateurs d'une \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ de type fini, il est possible de déterminer si un polynôme P donné de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ est un élément de cette \mathbb{R} -sous-algèbre en utilisant des techniques reposant sur le calcul du reste du polynôme P modulo une base de Gröbner judicieusement choisie.

Nous conférons alors aux résultats que nous avons obtenus dans les chapitres 2 et 3 un champ d'application nouveau : la caractérisation de l'invariance faible pour des modèles polynomiaux à l'aide d'invariants polynomiaux. Nous avons introduit trois objets, la fonction E -génératrice des moments, la surface de variance extrapolée et la surface de variance généralisée, et étudié les liens entre leur invariance pour l'action d'un groupe compact de matrices \mathcal{G} et l'invariance faible du plan expérimental. Si la matrice des moments du plan n'est pas singulière alors la surface de variance extrapolée et la surface de variance généralisée sont égales et sont des fonctions polynomiales : elles sont invariantes pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact si et seulement si elles appartiennent à la \mathbb{R} -sous-algèbre des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ induite par l'action linéaire du groupe \mathcal{G} sur \mathbb{R}^v . Si la matrice des moments du plan est singulière, la surface de variance généralisée n'est pas un polynôme et nous perdons l'équivalence que nous menons de mentionner. Toutefois, si la surface de variance généralisée coïncide avec un polynôme \mathcal{G} -invariant sur l'ensemble des valeurs du domaine expérimental pour lesquelles elle est finie, alors elle est \mathcal{G} -invariante et le plan expérimental est faiblement invariant. Nous avons pour objectif de remédier à ce défaut en introduisant, dans le chapitre 3, la surface de variance extrapolée. En effet, cette dernière présente l'avantage d'être une fonction polynomiale sur l'ensemble du domaine expérimental même lorsque la matrice des moments est singulière, ce qui nous permet d'obtenir une caractérisation polynomiale équivalente de la \mathcal{G} -invariance de la surface de variance extrapolée : cette dernière est invariante pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact si et seulement si elle appartient à la \mathbb{R} -sous-algèbre des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ induite par l'action linéaire du groupe \mathcal{G} sur \mathbb{R}^v . Malheureusement nous n'avons pu montrer l'équivalence entre la \mathcal{G} -invariance faible du plan expérimental et celle de la surface de variance extrapolée que sous une condition de commutativité, ce qui réduit les possibilités d'application de cette caractérisation. Enfin, lorsque les fonctions

polynomiales qui interviennent dans le modèle polynomial complet utilisé pour analyser le plan expérimental forment une famille libre sur le domaine expérimental et le groupe \mathcal{G} est un groupe de matrices compact, nous avons montré que la fonction E -génératrice des moments permet d'obtenir l'équivalence suivante : la E -fonction génératrice des moments est \mathcal{G} -invariante si et seulement si le plan est \mathcal{G} -faiblement invariant. Puis nous avons utilisé un résultat que nous avons prouvé au chapitre 2 pour ramener le problème général de la caractérisation de l'invariance faible d'un plan expérimental ξ par l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact quelconque à celle de la \mathcal{K} -invariance de la fonction génératrice des moments d'un plan expérimental Ψ , image du plan expérimental ξ par une application linéaire inversible, où \mathcal{K} est un sous-groupe du groupe orthogonal conjugué à \mathcal{G} . En particulier si le groupe \mathcal{G} de matrices compact est un sous-groupe maximal de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ alors le plan expérimental Ψ que nous devons construire est isovariant. Par conséquent, la connaissance de plans expérimentaux isovariants permet de résoudre complètement le problème de la construction de plans expérimentaux \mathcal{G} -invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact. Remarquons que, si le groupe \mathcal{G} de matrices n'est pas compact mais inclus dans un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$, son adhérence dans \mathcal{GL}_v , $\overline{\mathcal{G}}$, pour la topologie induite par la topologie usuelle sur $\mathcal{M}_v(\mathbb{R})$ est compacte. En effet il s'agit d'une partie fermée d'un compact. Le groupe \mathcal{G} est un groupe topologique, pour la topologie induite par la topologie usuelle sur $\mathcal{M}_v(\mathbb{R})$, dont l'action est continue sur \mathbb{R}^v , par continuité de la multiplication matricielle, et de fait les égalités définissant des propriétés de \mathcal{G} -invariance ou de \mathcal{G} -invariance faible sont équivalentes à celles définissant la $\overline{\mathcal{G}}$ -invariance ou la $\overline{\mathcal{G}}$ -invariance faible. Notre approche permet donc de résoudre le problème de la construction de plans expérimentaux \mathcal{G} -invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} inclus dans un groupe de matrices compact.

Nous sommes principalement intéressés par la construction de plans expérimentaux dont les coordonnées des points support sont connues exactement ; nous indiquons les raisons motivant ce choix dans le chapitre 6. C'est en ayant cette préoccupation à l'esprit que nous introduisons alors un problème de construction de type polynomial que nous définissons par trois objectifs que doivent vérifier les points support du plan. Ces objectifs sont constitués soit par un ensemble d'inéquations soit par un ensemble d'équations polynomiales en les coordonnées des points support d'un plan expérimental satisfaisant aux critères imposés par le problème de construction. Nous montrons alors, à l'aide des résultats liant invariance faible et invariants polynomiaux obtenus dans le début de ce chapitre, que la recherche plans expérimentaux faiblement invariants pour l'action d'un groupe de matrices inclus dans un groupe de matrices compact est un problème de construction de type polynomial. Il en va de même de la recherche de plans expérimentaux qui, pour un nombre fixé d'essais, minimise un critère d'optimalité dont l'image par une fonction strictement croissante est une fonction polynomiale ; les critères de D -optimalité, de I -optimalité ou les critères ϕ_p , pour p entier positif, satisfont par exemple à cette condition. Il est également possible de considérer des domaines expérimentaux de formes variées qu'il soient d'intérieur non vide, boule, ellipsoïde, cube ou simplexe, ou d'intérieur vide, sphère, frontière d'un ellipsoïde, d'un cube ou d'un simplexe. Un problème de construction de type polynomial englobe également la construction de plans bloqués orthogonalement. Il est naturellement possible de rechercher simultanément ou séquentiellement chacune de ces propriétés des plans expérimentaux.

Un problème de construction de type polynomial est équivalent à la formulation obtenue par Stengle en 1974, *cf.* [Ste96], du théorème des zéros réels. Il est donc possible d'utiliser la programmation semi-définie positive pour résoudre dans un premier lieu numériquement un problème de construction polynomiale et guider ainsi une résolution exacte. Nous indiquons de nombreux exemples de résolution de problèmes de construction de type polynomial au chapitre 7 ainsi qu'un exemple de résolution d'un problème de construction de type polynomial séquentiel dans le chapitre 7. À condition de mener de manière adéquate notre résolution du problème de construction de type polynomial, nous obtiendrons un plan expérimental solution dont les coordonnées des points support du plan seront connues de manière exacte.

Nous avons dans le chapitre 2 que la réduction de la dimension d'un problème d'optimisation est une étape cruciale dans la résolution de celui-ci. Nous nous sommes concentrés sur le cas particulier de la construction de type polynomial d'un plan isovariant. Nous avons alors indiqué comment réduire le nombre d'inconnues présentes dans les systèmes d'équations ou d'inéquations polynomiales définissant un problème de construction de type polynomial d'un plan isovariant. En effet, la recherche de dispositifs isovariants, comme nous l'avons vu au chapitre 4, est équivalente à la recherche de plans sphériques de force paire. Or, Hardin et Sloane ont montré empiriquement que, pour un cardinal donné, parmi tous les plans sphériques de force maximale certains forment des configurations régulières : chacun d'entre eux est une union d'orbites d'un point par un sous-groupe d'un groupe fini de réflexions. Cette propriété a de ce fait ramené le problème de construction de dispositifs isovariants à celui du choix des points dont nous allons prendre l'orbite ainsi que du sous-groupe du groupe de réflexions à utiliser pour construire ces orbites. Cette démarche est celle qui a été adoptée systématiquement dans le chapitre 7 auquel nous renvoyons le lecteur où il pourra contater l'intérêt de la méthodologie proposée au travers des nombreux exemples de construction qui y figurent ainsi qu'aux résultats qu'il a été possible de démontrer en les utilisant.

Nous développerons dans le chapitre 6 suivant les multiples possibilités qui sont offertes à l'expérimentateur dès lors qu'il connaît de manière exacte les coordonnées des points support du plan dont il se sert.

Chapitre 6

Analyse des confusions d'effets

6.1. Bases de Gröbner en planification expérimentale

Cette section aura pour but de reprendre les notions d'algèbre commutative permettant de traiter le problème des confusions d'effets associées à un plan expérimental. L'accent sera mis sur la nécessité de connaître les coordonnées des points support du plan de manière exacte et de ce fait permettra de justifier les efforts réalisés pour obtenir des constructions exactes de plans. Nous renvoyons à [PW96] et surtout à [PRW00a] pour une introduction détaillée à différentes possibilités d'utilisation de l'algèbre commutative en statistique. Nous renvoyons également à [BGRW98], [RW99], [HPRW99], [GRW00] et [PRW00b] pour des exemples d'études de cas utilisant la méthodologie que nous allons exposer dans ce chapitre.

6.1.1. Modèles algébriques

Nous commençons par reformuler certaines idées statistiques à l'aide de notions géométriques et algébriques. Nous renvoyons le lecteur aux paragraphes 8.1.1, 8.1.2 et 8.1.5 de la section 8.1 du chapitre 8 pour un exposé détaillé de ces notions.

Définition 6.1.1. *Soit Θ un ensemble dit ensemble des paramètres. Soient \mathbb{k} un corps, appelé corps des constantes, et \mathbb{K} un corps de fonctions $\phi : \Theta \rightarrow \mathbb{k}$, appelé corps des fonctions paramétriques.*

Notons $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)$ les variables explicatives, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_p)$ les réponses et $(\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_h))$ les variables muettes.

Un modèle algébrique est alors une liste finie de polynômes $f_1, \dots, f_q, h_1, \dots, h_l$ telle que $f_i \in \mathbb{K}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{t}]$, pour $i \in \{1, \dots, q\}$, et $h_j \in \mathbb{k}[\mathbf{x}, \mathbf{t}]$, pour $j \in \{1, \dots, l\}$. La variété algébrique $\mathbf{V}(f_i, h_j, i \in \{1, \dots, q\}, j \in \{1, \dots, l\}) \in \mathbb{K}^{d+p+h}$ est appelée variété du modèle et la variété algébrique $\mathbf{V}(h_j, j \in \{1, \dots, l\})$ est appelée la variété support. Le terme de variété algébrique est défini dans la définition 8.1.19 au chapitre 8.

Exemples 6.1.1.

- i- Le modèle linéaire $y = a + bx$ est associé au modèle algébrique $f_1 = y - a - bx \in \mathbb{Q}(a, b)[x, y]$.
- ii- Le modèle implicite $y = \frac{1}{a + bx}$ est associé au modèle algébrique $f_1 = (a + bx)y - 1, f_2 = (a + bx)t - 1 \in \mathbb{Q}(a, b)[x, y]$.
- iii- Dans un contexte de régression linéaire simple $y = a + bx$ où le facteur explicatif x est contrôlé et fixé aux valeurs $-1, 0$ et 1 , nous obtenons : $f_1 = y - a - bx \in \mathbb{Q}(a, b)[x, y]$ et $h_1 = (x + 1)x(x - 1)$.
- iv- Enfin l'utilisation des variables muettes permet d'introduire la notion d'erreur statistique dans le modèle. Posons $\mathbf{t} = (\eta, \epsilon)$ et $f_1 = \eta - a - bx$ et $f_2 = y - \eta - \epsilon$. Le polynôme f_1 modélise la réponse moyenne $\eta = a + bx$ et le polynôme f_2 modélise l'écart à la moyenne $\epsilon = y - \eta$.

Les relations entre les idéaux polynomiaux, définis en 8.1.20 au chapitre 8, et les variétés algébriques exposées au paragraphe 8.1.5 du chapitre 8 permettent de faire le lien et d'obtenir la caractérisation des modèles en termes d'idéaux polynomiaux.

Définition 6.1.2. Soient \mathbb{k} et \mathbb{K} deux corps et un modèle algébrique $f_1, \dots, f_q, h_1, \dots, h_l$ tels que $f_i \in \mathbb{K}[\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{t}]$, pour $i \in \{1, \dots, q\}$, et $h_j \in \mathbb{k}[\mathbf{x}, \mathbf{t}]$, pour $j \in \{1, \dots, l\}$ vérifiant les propriétés de la définition 6.1.1. L'idéal du modèle est l'idéal construit à partir de la variété du modèle et l'idéal support est l'idéal associé à la variété support.

Définition 6.1.3. Deux modèles sont algébriquement équivalents s'ils engendrent la même variété.

Cette définition de l'équivalence algébrique de deux modèles permet de modifier le système de générateurs de la variété associé au modèle algébrique à partir du moment où la variété engendrée par le modèle n'est pas modifiée par ce changement. Ceci permet de recourir à des bases spéciales, plus adaptées aux besoins algorithmiques, les bases de Gröbner définies dans la définition 8.1.29 du paragraphe 8.1.3 du chapitre 8. L'introduction de ces objets est motivée en détail dans ce même paragraphe. Un exposé rapide de leurs propriétés est également fait au paragraphe 8.1.4 de ce même chapitre.

Plus particulièrement nous avons montré au théorème 8.1.3 que tout idéal de $\mathbb{k}[\mathbf{x}]$ admettait une base, au sens de la définition 8.1.22, et que, pour tout ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[\mathbf{x}]$, défini en 8.1.17, tout idéal de $\mathbb{k}[\mathbf{x}]$ différent de $\{0\}$ admettait un type particulier de base : une base de Gröbner. Rappelons enfin qu'une base de Gröbner d'un idéal I est un sous-ensemble fini $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ de polynômes de I tels que :

$$\langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle = \langle \text{LT}(I) \rangle, \tag{6.1.1}$$

où $\text{LT}(g_i)$ est le terme dominant du polynôme g_i , $1 \leq i \leq s$. La notion de terme dominant est définie en 8.1.27 au chapitre 8.

La proposition 8.1.12 du chapitre 8 montre qu'un idéal I différent de $\{0\}$ admet une unique base de Gröbner réduite, c'est-à-dire minimale au sens de la définition 8.1.33. L'intérêt de ces bases est qu'il est possible de les calculer grâce à l'algorithme de Buchberger [Buc66]

introduit en 1966 et qui est rappelé au théorème 8.1.6 du chapitre 8. L'amélioration des algorithmes d'obtention de bases de Gröbner est d'ailleurs toujours un sujet de recherche actif.

6.1.2. Idéal d'un plan expérimental et estimabilité

Les outils de géométrie algébrique que nous avons introduits à la section 6.1.1 vont nous permettre de répondre aux questions suivantes. Étant un plan expérimental ξ et un ensemble de modèles algébriques \mathcal{M} , polynomiaux par exemple, quels sont les modèles M appartenant à \mathcal{M} dont nous pouvons estimer tous les termes à l'aide du plan ξ , c'est-à-dire les modèles M de \mathcal{M} identifiables par ξ ?

La théorie des bases de Gröbner permettra de répondre en particulier aux trois interrogations suivantes :

- i- Quel est l'ensemble des modèles polynomiaux qu'un plan donné ξ permet d'identifier ?
- ii- Un modèle donné M est-il identifiable par un plan donné ξ ?
- iii- Quelles sont les relations de confusions d'effets pour un modèle M donné ou une classe de modèles \mathcal{M} donnée et un plan ξ donné ?

Au chapitre 2, nous avons noté \mathbf{X} , le support d'un plan ξ appartenant à un domaine expérimental de χ inclus dans \mathbb{R}^v . \mathbf{X} est donc un ensemble de points $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ de \mathbb{R}^v et de ce fait une variété algébrique de dimension 0 de \mathbb{R}^v ou plus généralement de \mathbb{k}^v où \mathbb{k} est un corps contenant les coordonnées de tous les points de \mathbf{X} . En particulier si le plan expérimental est un plan factoriel complet ou fractionnaire, nous pouvons prendre par exemple $\mathbb{k} = \mathbb{Q}$. Dans notre contexte de plans sphériques, nous serons amenés à considérer des corps qui sont des extensions algébriques finies de \mathbb{Q} . C'est un cas qui est déjà couvert par la théorie existante développée dans [PRW00a] mais qui n'a pas encore été exploré. Nous commençons par associer un idéal aux points support du plan.

Définition 6.1.4. *Soit un plan ξ d'un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v . Soit \mathbb{k} un corps tel que \mathbf{X} soit inclus dans \mathbb{k}^v . L'idéal $\mathbf{I}(\xi)$ du plan ξ dans \mathbb{k}^v est l'idéal associé aux points support \mathbf{X} du plan ξ , c'est-à-dire l'ensemble des polynômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ qui s'annulent en tous les points de \mathbf{X} . Par définition nous avons donc :*

$$\mathbf{I}(\xi) = \mathbf{I}(\mathbf{X}). \quad (6.1.2)$$

Nous notons indifféremment $\mathbf{I}(\xi)$ ou $\mathbf{I}(\mathbf{X})$ pour l'idéal associé au plan ξ de points support \mathbf{X} .

Remarques 6.1.1. L'idéal $\mathbf{I}(\xi)$ du plan ξ est également appelé idéal support du plan ξ ou idéal des points du plan ξ .

Lemme 6.1.1. *Soit un plan ξ d'un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v . La variété associée à l'idéal annulateur des points support du plan ξ est égale aux points support du plan ξ c'est-à-dire :*

$$\mathbf{V}(\mathbf{I}(\xi)) = \mathbf{V}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) = \mathbf{X}. \quad (6.1.3)$$

Démonstration 6.1.1. Il s'agit d'une application directe du théorème 8.1.16 du chapitre 8.

Théorème 6.1.1. Soit un plan ξ d'un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v .

-i- L'idéal du plan ξ est l'intersection des idéaux associés aux points support de ξ :

$$\mathbf{I}(\xi) = \mathbf{I}(\mathbf{X}) = \mathbf{I}(\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}) = \mathbf{I}\left(\bigcup_{i=1}^r \{\mathbf{x}_i\}\right) = \bigcap_{i=1}^r \mathbf{I}(\{\mathbf{x}_i\}). \quad (6.1.4)$$

-ii- Le support du plan expérimental ξ est une variété algébrique.

-iii- L'idéal du plan ξ , $\mathbf{I}(\xi)$ est un idéal radical.

Démonstration 6.1.2. Il s'agit d'une application directe du lemme 6.1.1 et de résultats du chapitre 8.

Remarques 6.1.2. Il existe plusieurs méthodes pour calculer la base de Gröbner réduite associée à l'idéal annulateur d'un ensemble de points. Il est possible d'utiliser la théorie de l'élimination, voir, dans le chapitre 8, le théorème 8.1.19 et la remarque 8.1.10 qui le suit directement. Toutefois nous avons constaté, en particulier dans la pratique de l'étude de cas du chapitre 7, que cette manière de procéder requiert un temps de calcul très élevé. Il serait également possible d'utiliser l'algorithme de Buchberger [Buc66], voir 8.1.6. Toutefois Marinari, Möller et Mora (1993), [MMM93], ont mis au point des techniques d'algèbre linéaire spécialisées dans le calcul des idéaux de dimension nulle. C'est cet algorithme que nous avons implémenté en Maple, voir la section 6.2 puis la description et le code des programmes au chapitre 10, et utilisé pour réaliser les calculs de l'étude de cas du chapitre 7.

Nous indiquons maintenant le comportement des idéaux support d'un plan vis-à-vis des opérations usuelles. Nous commençons par le produit cartésien des supports de deux plans.

Théorème 6.1.2. Soient ξ_1 un plan expérimental dont le support $\mathbf{X}_1 = \{\mathbf{x}_{1,1}, \dots, \mathbf{x}_{1,r_1}\}$ est inclus dans \mathbb{k}^{v_1} et ξ_2 un plan expérimental dont le support $\mathbf{X}_2 = \{\mathbf{x}_{2,1}, \dots, \mathbf{x}_{2,r_2}\}$ est inclus dans \mathbb{k}^{v_2} . Le produit des supports \mathbf{X}_1 et \mathbf{X}_2 , noté $\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2$, est le support formé de $\{(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{x}_{2,j}), 1 \leq i \leq r_1 \text{ et } 1 \leq j \leq r_2\}$. L'idéal support de $\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2$ est :

$$\mathbf{I}(\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2) = \langle \mathbf{I}(\mathbf{X}_1), \mathbf{I}(\mathbf{X}_2) \rangle. \quad (6.1.5)$$

Soit τ est un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_{v_1+v_2}]$. Si G_1 est une base de Gröbner pour l'idéal $\mathbf{I}(\mathbf{X}_1)$ pour la restriction de l'ordre τ à $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_{v_1}]$ et G_2 est une base de Gröbner pour l'idéal $\mathbf{I}(\mathbf{X}_2)$ pour la restriction de l'ordre τ à $\mathbb{k}[x_{v_1+1}, \dots, x_{v_2}]$, alors $\{g_1, g_2, (g_1, g_2) \in G_1 \times G_2\}$ est une base de Gröbner de l'idéal $\mathbf{I}(\mathbf{X}_1 \times \mathbf{X}_2)$ pour l'ordre τ .

Démonstration 6.1.3. Il s'agit d'une application directe du théorème 8.1.5 du chapitre 8.

Nous continuons maintenant avec la restriction du support d'un plan expérimental ξ . Nous rappelons que la somme de deux idéaux I et J , notée $I + J$, est définie en 8.1.42 au chapitre 8. La proposition 8.1.18 montre qu'il s'agit du plus petit idéal contenant I et J et que si B_I est une base de l'idéal I et B_J est une base de l'idéal J , alors $B = \{B_I, B_J\}$ est une base de l'idéal $I + J$.

Théorème 6.1.3. Soient ξ un plan expérimental dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v et J un idéal de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. La variété associée à l'idéal $I + J$ est égale à la restriction de \mathbf{X} à la variété engendrée $\mathbf{V}(J)$, c'est-à-dire $\mathbf{X} \cap \mathbf{V}(J)$.

Démonstration 6.1.4. Le théorème 8.1.17 du chapitre 8 donne que $\mathbf{V}(\mathbf{I}(\mathbf{X}) + J) = \mathbf{V}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \cap \mathbf{V}(J)$ puis le lemme 6.1.1 que $\mathbf{V}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \cap \mathbf{V}(J) = \mathbf{X} \cap \mathbf{V}(J)$.

Théorème 6.1.4. Soient ξ_1 un plan expérimental dont le support \mathbf{X}_1 est inclus dans \mathbb{k}^v , ξ_2 un plan expérimental dont le support \mathbf{X}_2 est inclus dans \mathbb{k}^v , τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_d]$, G_1 une base de Gröbner de $\mathbf{I}(\xi_1)$ pour τ et G_2 une base de Gröbner de $\mathbf{I}(\xi_2)$ pour l'ordre τ . Une base de Gröbner pour l'ordre τ de l'idéal $\mathbf{I}(\mathbf{X}_1 \cup \mathbf{X}_2)$ associé à un plan de points support $\mathbf{X}_1 \cup \mathbf{X}_2$ est définie par :

$$\{g_1 \cdot g_2, g_1 \in G_1 \text{ et } g_2 \in G_2\}. \quad (6.1.6)$$

Démonstration 6.1.5. Il s'agit d'une conséquence du théorème 8.1.18 du chapitre 8.

Nous finissons par l'image d'un plan expérimental ξ .

Théorème 6.1.5. Soient ξ un plan expérimental dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v et f_1, \dots, f_s des éléments de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. L'image de ξ par f_1, \dots, f_s , notée $\xi^{\{f_1, \dots, f_s\}}$, est définie par :

$$\xi^{\{f_1, \dots, f_s\}} = \{f_1, \dots, f_s\}(\xi) = \{((f_1(\mathbf{x}), \dots, f_s(\mathbf{x})), \xi(\mathbf{x})), \mathbf{x} \in \mathbf{X}\}. \quad (6.1.7)$$

Si τ est un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et G une base de Gröbner de $\mathbf{I}(\xi)$ pour l'ordre τ , alors

$$\mathbf{I}(\xi^{\{f_1, \dots, f_s\}}) = \langle G, y_i - f_i, 1 \leq i \leq s \rangle \cap \mathbb{k}[y_1, \dots, y_s] \quad (6.1.8)$$

à une base de Gröbner pour un ordre d'élimination des indéterminées x_1, \dots, x_d dont la restriction aux indéterminées x_1, \dots, x_d est compatible avec l'ordre τ .

Démonstration 6.1.6. Il s'agit d'une conséquence du théorème 8.1.7 du chapitre 8.

6.1.3. Le *span* d'un plan expérimental

Nous considérons un plan expérimental ξ dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v et des fonctions de réponse polynomiales d'un sous-ensemble de \mathbf{X} à valeurs dans une extension algébrique de \mathbb{k} . Avec la terminologie du chapitre 8, nous considérons donc les fonctions polynomiales sur la variété \mathbf{X} , ou sur un sous-ensemble de \mathbf{X} , à valeurs dans \mathbb{l} , une extension du corps \mathbb{k} . Nous avons noté, à la définition 8.1.54 du chapitre 8, les fonctions polynomiales sur la variété \mathbf{X} et à valeurs dans \mathbb{l} par $\mathbb{l}[\mathbf{X}]$. La proposition 8.1.37 et le théorème 8.1.30 nous indiquent que les fonctions polynomiales $\mathbb{k}[\mathbf{X}]$ sont en correspondance bijective avec les éléments de l'anneau quotient $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\mathbf{X})$ et cette correspondance est compatible avec la structure d'anneau.

Nous en déduisons à l'aide des propositions 8.1.40 et 8.1.41 que l'ensemble des fonctions polynomiales $\mathbb{k}[\mathbf{X}]$, c'est-à-dire l'anneau quotient $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\mathbf{X})$, est isomorphe en tant que \mathbb{k} -espace vectoriel à $S = \text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \rangle)$. Les opérations dans $\mathbb{k}[\mathbf{X}]$ se déduisent alors de la proposition 8.1.42 que nous adaptons maintenant à notre contexte.

Proposition 6.1.1. *Soient un plan expérimental ξ dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v et G une base de Gröbner pour $\mathbf{I}(\mathbf{X})$ pour un ordre τ sur les monômes arbitraire. Pour chaque $[f] \in \mathbb{k}[\mathbf{X}]$, nous obtenons le représentant $\bar{f} = \overline{f}^G$ dans le sous-espace vectoriel $S = \text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \rangle)$. Nous avons alors les relations suivantes :*

- i- *Le représentant de $[f] + [g]$ est $\bar{f} + \bar{g}$.*
- ii- *Le représentant de $[f] \cdot [g]$ est $\overline{\bar{f} + \bar{g}}^G \in S$.*

Démonstration 6.1.7. La démonstration est identique à celle de la proposition 8.1.42 du chapitre 8.

Définition 6.1.1.

Soient un plan expérimental ξ dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v et G une base de Gröbner pour $\mathbf{I}(\mathbf{X})$ pour un ordre τ . Une τ -base formée de monômes des fonctions polynomiales sur le plan expérimental ξ est une base des fonctions polynomiales sur la variété \mathbf{X} induite par la base de Gröbner pour l'ordre τ que nous appelons l'ensemble des représentants de degré minimal des fonctions polynomiales estimables pour le plan ξ et l'ordre τ . Nous notons cet ensemble $\text{Est}_\tau(\xi)$ et nous avons alors :

$$\text{Est}_\tau(\xi) = \text{Est}_\tau(\mathbf{X}) \tag{6.1.9}$$

$$= \{x^\alpha, x^\alpha \text{ n'est pas divisible par l'un quelconque} \tag{6.1.10}$$

$$\text{des termes dominants des éléments de la base } G\} \tag{6.1.11}$$

$$= \{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}_\tau(g), g \in \mathbf{I}(\mathbf{X}) \rangle\}. \tag{6.1.12}$$

Corollaire 6.1.1. *L'ensemble $\text{Est}_\tau(\xi)$ est de forme ordonnée c'est-à-dire que si $x^\alpha \in \text{Est}_\tau(\xi)$ et x^β divise x^α alors x^β appartient aussi à $\text{Est}_\tau(\xi)$.*

Démonstration 6.1.8. Il s'agit d'une conséquence directe de la définition 6.1.1.

Nous pouvons également particulariser les conditions nécessaires et suffisantes du théorème 8.1.31 du chapitre 8 au cas des variétés algébriques qui sont formées des points support des plans.

Théorème 6.1.6. *Soit un plan expérimental ξ dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v , où \mathbb{k} un sous-corps de \mathbb{C} , et un ordre τ sur les monômes de $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$. Les assertions suivantes sont toutes vraies :*

- i- *\mathbf{X} est un ensemble fini.*
- ii- *Pour chaque $i, 1 \leq i \leq n$, il existe $m_i \geq 0$ telle que $x_i^{m_i} \in \langle \text{LT}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \rangle$.*
- iii- *Soit G une base de Gröbner pour $\mathbf{I}(\mathbf{X})$. Alors pour chaque $i, 1 \leq i \leq v$, il existe $m_i \geq 0$ tel que $x_i^{m_i} = \text{LM}(g)$ pour un $g \in G$.*
- iv- *Le \mathbb{C} -espace vectoriel $S = \text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \rangle)$ est de dimension finie.*
- v- *Le \mathbb{C} -espace vectoriel $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\mathbf{X})$ est de dimension finie.*

Démonstration 6.1.9. La première assertion du théorème 8.1.31 du chapitre 8 est vérifiée puisque par définition le support \mathbf{X} du plan expérimental ξ est fini.

Nous pouvons même préciser la dimension du \mathbb{C} -espace vectoriel $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]/\mathbf{I}(\mathbf{X})$.

6.1 Bases de Gröbner en planification expérimentale

Théorème 6.1.7. *Soit un plan expérimental ξ dont le support \mathbf{X} est inclus dans \mathbb{k}^v . Le nombre de points de \mathbf{X} est égal à la dimension $\dim_{\mathbb{C}}(\mathbb{C}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\xi))$.*

Démonstration 6.1.10. Considérons l'idéal $\mathbf{I}(\xi)$. Le théorème 8.1.16 du chapitre 8 indique que $\mathbf{V}(\mathbf{I}(\xi)) = \mathbf{V}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) = \mathbf{X}$. Ainsi la variété $\mathbf{V}(\mathbf{I}(\xi))$ est finie puisque \mathbf{X} l'est. De plus l'idéal $\mathbf{I}(\xi)$ est radical en vertu du corollaire 8.1.9 du chapitre 8. Nous pouvons donc appliquer le second point de la proposition 8.1.43 du chapitre 8 et par conséquent nous avons l'égalité suivante :

$$|\mathbf{X}| = \dim_{\mathbb{C}}(\mathbb{C}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\xi)). \quad (6.1.13)$$

Nous cherchons maintenant à préciser la dimension de $\text{Est}_{\tau}(\xi)$. Il s'agit d'un résultat constructif qui découle du théorème 6.1.8 suivant.

Définition 6.1.2. *Soient τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v . Soit L , l'ensemble des exposants des éléments de $\text{Est}_{\tau}(\xi)$. La matrice $\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)$ du modèle $\text{Est}_{\tau}(\xi)$ est définie de la manière suivante :*

$$\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi) = ((\mathbf{x}_l^{\alpha}))_{1 \leq l \leq r \quad \alpha \in L}. \quad (6.1.14)$$

Remarque 6.1.1. Il s'agit de la matrice $\mathbf{X}(\xi)$ du plan ξ analysé à l'aide du modèle polynomial $A = L$ de degré d où d est plus grand degré des éléments de $\text{Est}_{\tau}(\mathbf{X})$, voir le lemme 3.2.1 et la définition 2.3.4. Nous retrouvons la matrice des moments du plan ξ pour le modèle polynomial $\text{Est}_{\tau}(\mathbf{X})$, voir la proposition 2.6.1, en effectuant le produit $(WX)'WX$, voir la démonstration du lemme 3.2.1.

Théorème 6.1.8. *Soient τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v . Soient l'ensemble des exposants des éléments de $\text{Est}_{\tau}(\xi)$, L , et la matrice du modèle $\text{Est}_{\tau}(\xi)$, $\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)$, définie comme en 6.1.2.*

- La matrice $\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)$ est inversible. Le modèle $\text{Est}_{\tau}(\xi)$ est donc saturé.
- Soit e_i un vecteur dont toutes les composantes sont nulles sauf la i -ème qui est égale à 1. Pour tout $i = 1, \dots, v$ il existe un vecteur $c_i \in \mathbb{k}^v$ tel que $Zc_i = e_i$ et le polynôme $\sum_{\alpha \in L} c_{i,\alpha} \mathbf{x}^{\alpha}$ est un polynôme interpolateur de la fonction indicatrice du point \mathbf{x}_i appartenant au support \mathbf{X} du plan ξ c'est-à-dire :

$$\sum_{\alpha \in L} c_{i,\alpha} \mathbf{x}^{\alpha} = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} = \mathbf{x}_i \\ 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_i \text{ et } \mathbf{x} \in \mathbf{X}. \end{cases} \quad (6.1.15)$$

Démonstration 6.1.11. Il s'agit d'une conséquence directe de la définition 6.1.2 de $\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)$.

Remarque 6.1.2. En notant \mathbf{y} le vecteur des observations. L'estimateur usuel des moindres carrés ϕ des paramètres du modèle polynomial $\text{Est}_{\tau}(\xi)(\xi)$ est égal à :

$$\phi = (\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi) \mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)')^{-1} \mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi) \mathbf{y}, \quad (6.1.16)$$

ce qui se simplifie, puisque $\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)$ est inversible, en $(\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)^{-1} \mathbf{y})'$. Le vecteur des coefficients $\mathbf{c} = (c_{\alpha})_{\alpha \in L}$ intervenant dans la décomposition de l'équation 6.1.15 est en fait égal à $\mathbf{X}_{\text{Est}_{\tau}(\xi)}(\xi)^{-1} \mathbf{y}$.

Corollaire 6.1.2. *Le cardinal de l'ensemble $\text{Est}_\tau(\xi)$ ne dépend pas de l'ordre τ sur les monômes considérés.*

Démonstration 6.1.12. La matrice $\mathbf{X}_{\text{Est}_\tau(\xi)}(\xi)$ est toujours carrée d'ordre r où r est le cardinal du support du plan ξ .

6.1.4. Modèles et identificabilité

L'objet de cette section est de présenter d'une manière algébrique puis de traiter les problèmes de confusions d'effets d'un plan ξ analysé avec un modèle polynomial. Ces résultats étendent en particulier la théorie en pratique pour l'analyse des plans fractionnaires à l'aide de la théorie des groupes abéliens finis, voir par exemple [Col95]. Un exemple complexe et concret de l'application de cette méthodologie a été réalisé dans [PRW00b].

Définition 6.1.3. *Un modèle*

$$\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_\tau(\xi)} \theta_\alpha x^\alpha \tag{6.1.17}$$

est dit identifiable si le système d'équations linéaires en les inconnues θ_α , $\alpha \in \text{Est}_\tau(\xi)$

$$y_i = \sum_{x^\alpha \in \text{Est}_\tau(\xi)} \theta_\alpha \mathbf{x}_i^\alpha \tag{6.1.18}$$

a une et une seule solution. \mathbf{X} permet d'estimer simultanément tous les termes du modèle.

Théorème 6.1.9. *Soient τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v . Le modèle*

$$\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_\tau(\xi)} \theta_\alpha x^\alpha \tag{6.1.19}$$

est identifiable.

Démonstration 6.1.13. Il s'agit d'une reformulation du théorème 6.1.8.

Corollaire 6.1.3. *Soit un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v . Il est possible d'identifier des modèles comportant au plus r termes distincts.*

Démonstration 6.1.14. Le nombre maximal de termes que nous pouvons estimer ne dépend pas de l'ordre utilisé en vertu du corollaire 6.1.2 et en utilisant l'ordre lexicographique et la théorie de l'élimination nous déduisons que ce nombre est égal à r .

Remarque 6.1.3. Bien que les modèles saturés $\text{Est}_\tau(\xi)$ aient tous le même cardinal, et ce quelque soit l'ordre τ sur les monômes considérés, les ensembles $\text{Est}_\tau(\xi)$ sont suffisamment variés pour proposer différentes stratégies d'analyse du plan ξ en fonction des attentes du planificateur. Par exemple, nous nous servons de l'ordre total du degré ou encore appelé parfois ordre lexicographique gradué, introduit dans la définition 8.1.25 du chapitre 8, si nous ne souhaitons privilégier aucun des facteurs contrôlés. En revanche si l'un d'entre eux semble avoir une importance supérieure aux autres, l'utilisation de l'ordre lexicographique $^{\text{lex}}>$, introduit dans la définition 8.1.24 du chapitre 8, permettra de maximiser le nombre de termes estimables dans le modèle comportant ce facteur. Nous détaillerons les avantages et les particularités de cette approche à la section 6.3.

Remarque 6.1.4. Tous les modèles saturés $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ sont des idéaux ordonnés ce qui signifie que tous les facteurs apparaissant dans un terme d'interaction du modèle apparaissent aussi séparément dans le modèle. Ceci découle de la propriété caractéristique des idéaux ordonnés $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$: si $x^\alpha \in \text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ et si $\beta \succ^\tau \alpha$ alors $x^\beta \in \text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$. Cette propriété des modèles ainsi obtenus reflète l'approche qui est la plus communément adoptée par les expérimentateurs dans la pratique.

Corollaire 6.1.4. Soient un plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. Tout élément de $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ est le représentant d'une classe d'équivalence pour la relation d'équivalence associée à la base de Gröbner pour l'ordre τ de $\mathbf{I}(\mathbf{X})$. En particulier il est possible de substituer aux monômes de $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ des polynômes qui ne sont pas des monômes.

Démonstration 6.1.15. Il s'agit d'une conséquence immédiate du théorème 6.1.9 et des définitions des objets considérés.

Remarque 6.1.5. Un modèle f est donc identifiable si le reste de la division euclidienne de f par la base de Gröbner G de l'idéal des points support du plan $\boldsymbol{\xi}$ pour un quelconque ordre τ sur les monômes est égal à f . Ainsi si f est identifiable pour un ordre particulier sur les monômes il l'est aussi pour tous les autres.

Corollaire 6.1.5. Soient un plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. Si un modèle f est identifiable par le plan $\boldsymbol{\xi}$ pour l'ordre τ sur les monômes fixé, il l'est pour tout autre ordre τ' sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$.

Démonstration 6.1.16. Les ensembles $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ et $\text{Est}_{\tau'}(\boldsymbol{\xi})$ sont l'image l'un de l'autre par une application linéaire bijective puisque ce sont deux bases du sous-espace vectoriel $\text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(\mathbf{I}(\mathbf{X})) \rangle)$.

Théorème 6.1.10. Pour tout plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v et tout ordre gradué τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$, défini de manière semblable à la définition 8.1.25, le nombre de termes de $\text{Est}_\tau(\boldsymbol{\xi})$ du même degré d est le même.

Démonstration 6.1.17. Nous renvoyons à [PRW00a].

Nous en arrivons maintenant à la notion centrale en statistique de confusion d'effets (également appelée, improprement en langue française, *aliasing*).

Remarque 6.1.6. Chacune des classes d'équivalence de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\boldsymbol{\xi})$ peut être considérée comme une classe de confusions d'effets dans la mesure où il ne peut y avoir qu'un seul des éléments d'une même classe dans un modèle qui sera identifiable. Ainsi chacune des classes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\boldsymbol{\xi})$ est une famille infinie de modèles qui ne sont pas distinguables par le plan $\boldsymbol{\xi}$.

Définition 6.1.4.

Soit un plan expérimental $\boldsymbol{\xi}$ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans \mathbb{k}^v . Deux modèles f et g sont confondus pour le plan $\boldsymbol{\xi}$ si et seulement si $f - g$ appartient à l'idéal du plan $\mathbf{I}(\boldsymbol{\xi})$ c'est-à-dire si les restes des divisions euclidiennes de f et g par une base de Gröbner pour un ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ quelconque sont égaux.

Remarques 6.1.3. Nous indiquons maintenant le lien entre identificabilité et estimabilité algébrique.

– La formulation algébrique de l'estimabilité se traduit par l'application suivante :

$$\mathcal{I}_{\xi, \tau} : \begin{cases} \mathbb{Q}(\theta_0, \dots, \theta_p)[x_1, \dots, x_v] & \rightarrow \mathbb{Q}(\theta_0, \dots, \theta_p)[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\mathbf{X}) \\ f & \mapsto \bar{f}^G, \end{cases} \quad (6.1.20)$$

où \bar{f}^G est le reste de la division euclidienne de f par une base de Gröbner de l'idéal $\mathbf{I}(\xi)$ pour l'ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$.

– La formulation algébrique de l'estimabilité se traduit par l'application suivante :

$$\mathcal{I}_{\xi, \tau} : \begin{cases} \mathbb{Q}(\theta_0, \dots, \theta_p)[x_1, \dots, x_v] \times \mathbb{Q}^r & \rightarrow \mathbb{Q}[x_1, \dots, x_v]/\mathbf{I}(\mathbf{X}) \\ (f, \mathbf{y}) & \mapsto \mathbf{R} \left(\mathbf{X}_{\bar{f}^G}(\xi) \mathbf{X}_{\bar{f}^G}(\xi)' \right)^{-1} \mathbf{X}_{\bar{f}^G}(\xi) \mathbf{y}', \end{cases} \quad (6.1.21)$$

où r est le nombre de points support du plan ξ , $\mathbf{R} = \mathbf{X}_{\bar{f}^G}(\xi)(x)$ est le vecteur de régression associé au reste \bar{f}^G de la division euclidienne de f par une base de Gröbner de l'idéal $\mathbf{I}(\xi)$ pour l'ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et $\mathbf{X}_{\bar{f}^G}(\xi)$ est la matrice du modèle pour le plan analysé à l'aide du modèle \bar{f}^G .

L'étape suivante dans l'analyse des propriétés des modèles identifiables par un plan expérimental ξ est la détermination du *fan* du plan expérimental ξ . Nous renvoyons au livre [PRW00a] pour plus de détails à ce sujet. Ce point sera développé dans le futur et fait partie des ouvertures possibles du travail de cette thèse.

6.2. Algorithmes

Le choix des algorithmes à utiliser pour déterminer les confusions d'effets sera discuté dans cette section. Il s'agit avant tout de préciser que, compte tenu de la nature du problème à résoudre i.e. trouver l'idéal annulateur d'un ensemble de points, il est judicieux d'utiliser l'algorithme de Marinari, Moeller et Mora (1993), [MMM93]. En particulier nous indiquons que l'approche récente proposée par J. Abbott, A. Bigatti, M. Kreuzer et L. Robbiano (2000), [ABKR00], n'est pas adaptée à notre contexte puisqu'elle concerne des calculs sur \mathbb{Q} et que cette restriction n'est pas raisonnable puisque nos plans ont presque toujours des coordonnées, qui bien qu'elles soient algébriques sur \mathbb{Q} , ne sont pas pour autant rationnelles. En particulier nous précisons pourquoi il a été nécessaire de créer une implémentation, en utilisant le logiciel Maple 10 [Map05], de cet algorithme ainsi que des divers outils utilisés dans ce chapitre. La description de ce travail fait l'objet du chapitre 10.

6.3. Modèles saturés, sous-modèles et analyse de régression

6.3.1. Sous-modèles et algorithme de calcul de l'ensemble des représentants des fonctions polynomiales estimables

Il est donc possible d'obtenir tous les modèles saturés pour un dispositif expérimental donné, chaque modèle étant associé à un ordre sur les polynômes de $\mathbb{R}[X]$. En fonction des termes que l'expérimentateur souhaite voir figurer dans le modèle, certains ordres sont plus appropriés que d'autres.

Proposition 6.3.1. *Nous reprenons les notations et les objets du théorème 6.1.2. Le $\text{Est}_\tau(\xi_1 \times \xi_2)$ est le produit de $\text{Est}_\tau(\xi_1)$ et de $\text{Est}_\tau(\xi_2)$.*

Démonstration 6.3.1. La preuve est immédiate.

Nous arrivons maintenant à l'un des avantages de l'approche algébrique que nous avons introduite dans ce chapitre : la possibilité d'étudier l'évolution séquentielle de l'ensemble $\text{Est}_\tau(\xi)$ lorsque nous ajoutons ou nous supprimons des points au support du plan expérimental ξ .

Théorème 6.3.1. *Soient ξ_1 et ξ_2 deux plans expérimentaux dont les supports respectifs X_1 et X_2 sont inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et pour lesquels $X_1 \subseteq X_2$ alors pour le même ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ nous avons l'inclusion suivante :*

$$\text{Est}_\tau(\xi_1) \subseteq \text{Est}_\tau(\xi_2). \quad (6.3.1)$$

Démonstration 6.3.2.

$$X_1 \subseteq X_2 \iff I(X_1) \supseteq I(X_2) \quad (6.3.2)$$

$$\iff \{\text{LT}(I(X_1))\} \supseteq \{\text{LT}(I(X_2))\} \quad (6.3.3)$$

$$\iff \text{Est}_\tau(\xi_1) \subseteq \text{Est}_\tau(\xi_2). \quad (6.3.4)$$

Corollaire 6.3.1. *Soient ξ_1 et ξ_2 deux plans expérimentaux dont les supports respectifs X_1 et X_2 sont inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ alors pour le même ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ nous avons l'inclusion suivante :*

$$\text{Est}_\tau(X_1 \cup X_2) \subseteq \text{Est}_\tau(\xi_1) \cap \text{Est}_\tau(\xi_2) \quad (6.3.5)$$

$$\subseteq \text{Est}_\tau(\xi_1) \cup \text{Est}_\tau(\xi_2) \quad (6.3.6)$$

$$\subseteq \text{Est}_\tau(\xi_1 \cup \xi_2). \quad (6.3.7)$$

Démonstration 6.3.3. La première et la dernière inclusion sont une application du théorème 6.3.1.

Remarque 6.3.1. Ainsi les ajouts successifs, un point après l'autre, au support d'un plan expérimental ξ se traduisent par l'ajout d'exactly un terme à $\text{Est}_\tau(\xi)$ à chaque étape. Le théorème 6.3.2 suivant traduit cette constatation par des conditions que doit vérifier le monôme ainsi ajouté à $\text{Est}_\tau(\xi)$ à chaque étape.

Théorème 6.3.2. Soient ξ_r un plan expérimental dont le support \mathbf{X}_r est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. L'addition d'un point $\mathbf{x}_{r+1} \notin \mathbf{X}_r$ au support du plan expérimental ξ_r permet de définir une famille de nouveaux plans expérimentaux ξ_{r+1} qui partagent tous le même support élargi \mathbf{X}_{r+1} . Le cardinal de l'ensemble $\text{Est}_\tau(\xi_{r+1})$ est alors égal à $r + 1$ et l'ensemble $\text{Est}_\tau(\xi_{r+1})$ diffère de $\text{Est}_\tau(\xi_r)$ par un seul monôme noté $x^{\alpha_{r+1}}$: $\text{Est}_\tau(\xi_{r+1}) = \{x^{\alpha_{r+1}}\} \cup \text{Est}_\tau(\xi_r)$. Ce monôme $x^{\alpha_{r+1}}$ vérifie alors les propriétés suivantes :

- i- $x^{\alpha_{r+1}} \notin \text{Est}_\tau(\xi_{r+1})$.
- ii- La matrice du modèle $\text{Est}_\tau(\xi_{r+1})$ pour le plan $\text{Est}_\tau(\xi_{r+1})$ est inversible.
- iii- $x^{\alpha'} \stackrel{\tau}{>} x^{\alpha_{r+1}}$ pour tout autre $x^{\alpha'}$ vérifiant les conditions a et b.

Démonstration 6.3.4. Nous renvoyons à [PRW00a] pour les détails de cette démonstration.

Nous en déduisons une formule de mise à jour séquentielle pour les polynômes interpolateurs définis dans l'énoncé du théorème 6.1.8 et que nous noterons ici p_r où r est le cardinal du support du plan ξ .

Corollaire 6.3.2. Soient ξ_r un plan expérimental dont le support \mathbf{X}_r est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et un point $\mathbf{x}_{r+1} \notin \mathbf{X}_r$. La formule de mise à jour du polynôme interpolateur du plan ξ_r en le polynôme interpolateur du plan ξ_{r+1} :

$$p_{r+1}(x) = p_r(x) + (y_{r+1} - p_r(\mathbf{x}_{r+1})) \frac{g_r(x)}{g_r(\mathbf{x}_{r+1})}, \quad (6.3.8)$$

où g_r est l'élément de la base de Gröbner pour l'ordre τ de $\mathbf{I}(\mathbf{X}_r)$ dont le terme dominant est égal à $x^{\alpha_{r+1}}$, avec $\text{Est}_\tau(\xi_{r+1}) = \{x^{\alpha_{r+1}}\} \cup \text{Est}_\tau(\xi_r)$, et y_{r+1} est la valeur de la réponse pour le point \mathbf{x}_{r+1} .

Démonstration 6.3.5. Il s'agit d'une vérification directe à l'aide du théorème 6.3.2.

Remarque 6.3.2. Soient ξ un plan expérimental dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. Nous aboutissons à la formulation algorithmique suivante pour le calcul de $\text{Est}_\tau(\xi)$ et du polynôme interpolateur du plan ξ .

Initialisation :

- i- $\mathbf{X}_1 = \{\mathbf{x}_1\}$ et $\text{Est}_\tau(\mathbf{X}_1) = \{1\}$.

Passage de l'étape t à l'étape $t + 1$, avec $t \geq 1$:

- i- Ajouter le point \mathbf{x}_{t+1} à \mathbf{X}_t pour définir \mathbf{X}_{t+1} .
- ii- Mettre à jour $\text{Est}_\tau(\mathbf{X}_{t+1}) = \text{Est}_\tau(\mathbf{X}_t) \cup \{x^{\alpha_{t+1}}\}$ où $x^{\alpha_{t+1}}$ est le premier terme, pour l'ordre τ , non encore utilisé qui rend la matrice $\mathbf{X}_{\text{Est}_\tau(\mathbf{X}_{t+1})}(\mathbf{X}_{t+1})$ inversible.
- iii- Construire $p_{t+1}(x)$ en calculant $\mathbf{X}_{\text{Est}_\tau(\mathbf{X}_{t+1})}(\mathbf{X}_{t+1})^{-1} Y_{(t)}(x^\alpha)_{x^\alpha \in \text{Est}_\tau(\mathbf{X}_{t+1})}$ où $Y_{(t)}$ est le vecteur (y_1, \dots, y_t) ordonné de manière à concorder avec l'ordre de $\text{Est}_\tau(\mathbf{X}_{t+1})$.
- iv- Déterminer, à un scalaire près, le polynôme $g_t(x)$ comme $g_t(x) = p_{t+1}(x) - p_t(x)$.

6.3.2. Critère de discrimination entre modèles saturés

Étant un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans l'algèbre $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$, il peut exister différents modèles saturés qui interpolent exactement les données et ne laissent pas de place à l'aléatoire sur lequel est basé la théorie des tests statistiques. En effet, deux ordres τ_1 et τ_2 sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ sont généralement associés à des ensembles $\text{Est}_{\tau_1}(\xi)$ et $\text{Est}_{\tau_2}(\xi)$ qui sont des modèles saturés différents. Or bien que différents ces modèles possèdent généralement un certain nombre de termes en commun. Un exemple particulièrement marquant de cette situation est donné dans [BGRW98] où les deux modèles considérés sont des modèles linéaires polynomiaux de degré 2 sur \mathbb{R}^2 et comportent donc chacun sept termes. Ils ont six termes en commun, $\{1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2\}$ et diffèrent par la présence de x_1^3 dans l'un au lieu de x_2^3 dans l'autre. Les estimations des sept paramètres de ces deux modèles sont pourtant fort éloignées les unes des autres, en particulier en ce qui concerne la valeur moyenne ou les effets principaux des deux facteurs. Quel critère pouvons-nous utiliser pour choisir le modèle le plus adéquat entre les deux proposés ?

Considérons un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$ des ordres sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. Le plan ξ analysé successivement à l'aide des modèles $\text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})$, $1 \leq s \leq n$, donne naissance aux modèles de régression suivants :

$$Y = \mathbf{Z}_s \theta_s + \epsilon \quad (6.3.9)$$

où $1 \leq s \leq n$, \mathbf{Z}_s est la matrice du modèle $\text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})$ pour le plan ξ , $\mathbf{Z}_s = ((\mathbf{x}_i^\alpha))_{1 \leq i \leq r, \alpha \in L_s}$ avec L_s l'ensemble des degrés de $\text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})$ c'est-à-dire $\text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X}) = \{x^\alpha, \alpha \in L_s\}$. Nous avons montré que les matrices \mathbf{Z}_s sont carrées et inversibles c'est-à-dire que les modèles $\text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})$, $1 \leq s \leq n$, sont tous saturés.

Le critère proposé dans [BGRW98] est basé sur la comparaison de la somme des courbures des modèles estimés $\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_{\alpha,s} x^\alpha$, $1 \leq s \leq n$, en chacun des points \mathbf{x}_i , $1 \leq i \leq r$, du plan expérimental ξ . Une famille de mesures de la courbure d'un modèle estimé $\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_{\alpha,s} x^\alpha$, $1 \leq s \leq n$, en un des points \mathbf{x}_i du support du plan expérimental \mathbf{X} est donnée par :

$$\gamma_{\delta, \tau_s}(\mathbf{x}_i) = \text{tr} (H_{\tau_s}(\mathbf{x}_i)^\delta) \quad (6.3.10)$$

où $\delta > 1$ et $H_{\tau_s}(\mathbf{x}_i)$ est la matrice hessienne du modèle estimé $\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_{\alpha,s} x^\alpha$ évaluée au point \mathbf{x}_i . La mesure globale de la courbure d'un modèle estimé $\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_{\alpha,s} x^\alpha$, $1 \leq s \leq n$, pour le plan ξ est alors définie par :

$$\Gamma(\delta, \tau_s) = \left(\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \gamma_{\delta, \tau_s}(\mathbf{x}) \right)^{\frac{1}{\delta}}. \quad (6.3.11)$$

Nous utiliserons la mesure globale de courbure associée à la valeur de δ égale à 2.

Définition 6.3.1. *Considérons un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. La mesure de la courbure globale du plan ξ analysé à l'aide du modèle $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$, notée $\Gamma(\tau)$, est définie*

par :

$$\Gamma(\tau) = \left(\sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \gamma_{2,\tau}(\mathbf{x}) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.3.12)$$

Proposition 6.3.2. *Le carré, $\Gamma^2(\tau)$, de la mesure de la courbure globale du plan ξ analysé à l'aide du modèle $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ est une forme quadratique en le vecteur $\widehat{\boldsymbol{\theta}}$.*

Démonstration 6.3.6. Pour tout $1 \leq a, b \leq v$, nous avons l'égalité suivante :

$$\frac{\partial^2 \left(\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_{\alpha,s} x^\alpha \right)}{\partial x_a \partial x_b} = \sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_\alpha \frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial x_a \partial x_b}. \quad (6.3.13)$$

Nous en déduisons donc que :

$$\Gamma^2(\tau) = \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \text{tr} (H_\tau(\mathbf{x})^2) \quad (6.3.14)$$

$$= \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \sum_{1 \leq a, b \leq v} \left(\sum_{x^\alpha \in \text{Est}_{\tau_s}(\mathbf{X})} \widehat{\theta}_\alpha \frac{\partial^2 x^\alpha}{\partial x_a \partial x_b} \right)^2. \quad (6.3.15)$$

Par conséquent il existe une matrice $\mathbf{G}(\tau)$ positive, dont les coefficients ne dépendent que du plan ξ et de l'autre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$, telle que :

$$\Gamma^2(\tau) = \widehat{\boldsymbol{\theta}}' \mathbf{G}(\tau) \widehat{\boldsymbol{\theta}}. \quad (6.3.16)$$

Remarque 6.3.3. La procédure préconisée dans [BGRW98] est alors de sélectionner le modèle qui a la mesure de la courbure globale pour le plan ξ minimale.

6.3.3. Applications à l'analyse de régression

Notations

Considérons un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. Le plan ξ analysé à l'aide du modèle $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ donne le modèle de régression suivant :

$$Y = \mathbf{Z}\boldsymbol{\theta} + \epsilon \quad (6.3.17)$$

où \mathbf{Z} est la matrice du modèle $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ pour le plan ξ , $\mathbf{Z} = ((\mathbf{x}_i^\alpha))_{1 \leq i \leq r, \alpha \in L}$ avec L l'ensemble des degrés de $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ c'est-à-dire $\text{Est}_\tau(\mathbf{X}) = \{x^\alpha, \alpha \in L\}$. Nous avons montré que la matrice \mathbf{Z} est carrée et inversible c'est-à-dire que le modèle $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ est saturé.

Les outils que nous venons d'exposer dans le début de ce chapitre permettent de proposer plusieurs stratégies d'analyse *a posteriori* d'un plan d'expérience ξ . Il s'agit en particulier de procéder au choix d'un modèle adéquat parmi tous ceux qui sont à disposition de l'expérimentateur. Nous renvoyons à [PRW00a] et plus particulièrement à [BGRW98] et à [GRW00], pour des exemples d'utilisation de cette approche dans une démarche de choix de modèle lors de l'étude de cas pratiques.

Remarque 6.3.4. Tout sous-modèle $M = \{x^\alpha, \alpha \in L'\}$ de $\text{Est}_\tau(\mathbf{X}) = \{x^\alpha, \alpha \in L\}$, c'est-à-dire $L' \subseteq L$, est identifiable et peut servir, par exemple, de point de départ à l'utilisation de régression stepwise.

Orthogonalisation d'un modèle identifiable

Une propriété qui est particulièrement appréciée lors de l'analyse de plans expérimentaux à l'aide de modèles, polynomiaux en particulier, est la propriété d'orthogonalité des estimateurs des paramètres des coefficients des termes du modèle. Il s'avère qu'il est possible de toujours construire des modèles identifiables pour lesquels cette propriété est vérifiée. Nous indiquons maintenant comment procéder et nous renvoyons le lecteur à [GRW00], une étude de cas réalisée à l'aide des idées exposées ci-dessous.

Considérons un plan expérimental ξ dont le support $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\}$ est inclus dans $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ et τ un ordre sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$. Le plan ξ analysé à l'aide du modèle $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ donne le modèle de régression suivant :

$$Y = \mathbf{W}\theta + \epsilon \quad (6.3.18)$$

où $\mathbf{W} = \mathbf{Z}_\tau \mathbf{U}_\tau^{-1}$, \mathbf{Z}_τ est la matrice d'un sous-modèle M de $\text{Est}_\tau(\mathbf{X})$ pour le plan ξ , $\mathbf{Z}_\tau = ((\mathbf{x}_i^\alpha))_{1 \leq i \leq r, \alpha \in L'}$ avec L' l'ensemble des degrés de \mathbb{M} c'est-à-dire $M = \{x^\alpha, \alpha \in L' \subseteq L\}$ et \mathbf{U}_τ est l'unique matrice triangulaire supérieure telle que $\mathbf{Z}_\tau \mathbf{Z}_\tau' = \mathbf{U}_\tau \mathbf{U}_\tau'$.

Les polynômes :

$$(h_\alpha)_{\alpha \in L'} = \left(\mathbf{U}_\tau'\right)^{-1} (x^\alpha)_{\alpha \in L'} \quad (6.3.19)$$

sont orthogonaux pour le plan expérimental ξ . Nous pouvons alors écrire :

$$h_\alpha(x) = \sum_{\alpha \succ \beta} c_{\alpha, \beta} x^\beta. \quad (6.3.20)$$

Le modèle peut alors s'écrire :

$$\sum_{\alpha \in L'} \phi_\alpha h_\alpha(x). \quad (6.3.21)$$

Les estimateurs sans biais de variance minimale des ϕ_α sont les $\widehat{\phi}_\alpha = h(\widehat{\theta}_\alpha)$ où les $\widehat{\theta}_\alpha$ sont les estimateurs des moindres carrés des paramètres θ_α du modèle 6.3.17. La contribution à la somme des carrés usuelle de chacun des $\widehat{\phi}_\alpha$ est alors $\widehat{\phi}_\alpha^2$. L'orthogonalité se traduit alors dans le contexte du modèle linéaire gaussien par l'indépendance des estimateurs $\widehat{\theta}_\alpha$.

Cette possibilité d'orthogonalisation n'est pas souvent utilisée puisque les termes du modèle ainsi obtenus n'ont pas une interprétation aisée en termes d'effet des facteurs. En effet les polynômes orthogonaux ainsi obtenus ne sont généralement pas des monômes. Donnons toutefois un exemple pratique où le recours à une base de polynômes orthogonaux pour le modèle de régression est le cas le plus fréquent. Il s'agit des polynômes de Zernike couramment utilisés dans les problématiques d'aberrations optiques et dont l'interprétation est alors directe en termes d'effets optiques, voir par exemple [PL02].

Amélioration d'un modèle

Nous reprenons dans ce paragraphe des idées introduites par Box et Draper pour certains types de plans expérimentaux, factoriels et fractionnaires factoriels avec des points au centre du domaine expérimental pour un modèle polynomial complet de degré 1 ou composites centrés de Box et Wilson pour un modèle de degré deux, pour détecter le manque d'ajustement d'un modèle à la réponse expérimentale, *cf.* [BD82]. Nous renvoyons également au cours de Master 2ème Année de Collombier, [Col02], qui a repris cette approche. Draper, Davis, Pozueta et Grove ont réalisé une étude similaire dans le des plans expérimentaux de Box-Bhenken et d'un modèle polynomial complet de degré 2, *cf.* [DDPG94].

Supposons que l'hypothèse nulle d'adéquation d'un modèle que nous souhaitons utiliser soit rejetée par un test de Fisher. Pouvons-nous, sans réaliser d'essai supplémentaire, compléter le modèle avec des termes polynomiaux de degré supérieur afin que le modèle ainsi obtenu ne soit plus rejeté par le test de Fisher? Comment déterminer quels termes nous devons choisir pour augmenter le modèle initial?

Les articles de Box et Draper et Draper, Davis, Pozueta et Grove ainsi que le cours de Collombier utilisent des contrastes orthogonaux afin de proposer des tests qui permettent de déterminer les contributions au défaut d'ajustement qui ne sont pas significatives ou des « half normal plots ».

La possibilité de toujours orthogonaliser le modèle, que nous avons exposée au paragraphe 6.3.3, permet ainsi de recourir systématiquement, et non plus dans les cas particuliers précédemment étudiés, à cette approche pour augmenter, en utilisant des critères statistiques, un modèle dont l'ajustement n'est pas satisfaisant.

Planification séquentielle ou augmentation de plans expérimentaux

Le théorème 6.3.2 est utile lorsque nous souhaitons soit faire de la planification expérimentale séquentielle, soit effectuer des essais supplémentaires pour compléter une analyse déjà réalisée tout en ayant l'assurance que tous les nouveaux modèles considérés conserveront les termes qui étaient estimables comme tels. Toutefois les polynômes orthogonaux h_α , définis ci-dessus, ne se conserveront pas nécessairement lorsque nous ajoutons des points au support du plan.

Importance relative des différents facteurs

Il est possible d'adapter l'ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$ de telle sorte que certains des facteurs apparaissent dans plus de termes du modèle que les autres. En effet les facteurs les plus petits seront présents dans plus de termes du modèle, le cas le plus extrême étant associé à l'utilisation de l'ordre lexicographique $\overset{\text{lex}}{>}$ comme nous l'avons fait remarquer en 6.1.3. Nous constaterons cette propriété dans l'étude de cas réalisée au chapitre 7. Les articles [HPRW99], [PRW00b] et plus particulièrement [GRW00] présentent des applications intéressantes de cette propriété.

Modèles linéaires non polynomiaux

Enfin il est possible d'étudier des modèles linéaires qui ne sont pas de type polynomial. Il est indiqué dans [PRW00a] que la seule condition est que l'ensemble des modèles considérés soit en correspondance bijective avec l'espace quotient d'un anneau de polynômes. Ainsi par exemple nous pouvons étendre les considérations ci-dessus au cas des modèles de régression de Fourier ou des modèles de régression exponentielle.

Définition 6.3.2. Soit \mathbf{A} un sous-ensemble fini de \mathbb{Z}^v . Le modèle de régression de Fourier, ou trigonométrique, associé à \mathbf{A} est défini comme le modèle linéaire

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{h} \in \mathbf{A}} a_{\mathbf{h}} \exp\left(2\pi i \mathbf{h} \mathbf{x}'\right) + \epsilon(\mathbf{x}) \quad (6.3.22)$$

où $a_{\mathbf{h}}$ appartient à $\mathbb{k}(i)$, l'extension du corps des constantes par le nombre imaginaire i .

Nous pouvons également considérer des modèles de régression de Fourier réels.

Définition 6.3.3. Soit \mathbf{A}^+ un sous-ensemble fini de $\mathbb{Z}^v \setminus \{\mathbf{0}\}$ et tel que si $\mathbf{h} \in \mathbf{A}^+$ alors $-\mathbf{h} \notin \mathbf{A}^+$. Le modèle de régression complet de Fourier, ou trigonométrique, associé à \mathbf{A} est défini comme le modèle linéaire

$$Y(x) = \theta_0 + \sqrt{2} \sum_{\mathbf{h} \in \mathbf{A}^+} \left(\theta_{\mathbf{h}} \sin\left(2\pi \mathbf{h} \mathbf{x}'\right) + \phi_{\mathbf{h}} \cos\left(2\pi \mathbf{h} \mathbf{x}'\right) \right) + \epsilon(\mathbf{x}) \quad (6.3.23)$$

$$= \alpha_0 + \sum_{\mathbf{h} \in \mathbf{A}^+} \left(\beta_{\mathbf{h}} \exp\left(2\pi i \mathbf{h} \mathbf{x}'\right) + \delta_{\mathbf{h}} \cos\left(2\pi i \mathbf{h} \mathbf{x}'\right) \right) + \epsilon(\mathbf{x}) \quad (6.3.24)$$

$$(6.3.25)$$

où

$$\alpha_0 = \theta_0 \quad (6.3.26)$$

$$\beta_{\mathbf{h}} = \frac{\phi_{\mathbf{h}} - i\theta_{\mathbf{h}}}{\sqrt{2}} \quad (6.3.27)$$

$$\delta_{\mathbf{h}} = \frac{\phi_{\mathbf{h}} + i\theta_{\mathbf{h}}}{\sqrt{2}}. \quad (6.3.28)$$

La bijection entre les modèles de régression de Fourier, ou trigonométrique, est définie à l'aide des identités suivantes :

$$s_l = \sin(2\pi x_l), \quad 1 \leq l \leq v \quad (6.3.29)$$

$$c_l = \cos(2\pi x_l), \quad 1 \leq l \leq v. \quad (6.3.30)$$

Théorème 6.3.3. Il y a une correspondance bijective entre l'ensemble de tous les modèles de Fourier, ou trigonométriques, et le quotient de l'anneau de polynôme suivant :

$$\mathbb{k}(i)[c_1, \dots, c_v, s_1, \dots, s_v] / \langle s_1^2 + c_1^2 - 1, \dots, s_v^2 + c_v^2 - 1 \rangle. \quad (6.3.31)$$

Démonstration 6.3.7. Nous renvoyons à [CR98].

Le logiciel Maple 10.0, [Map05], permet d'utiliser ce type d'approche algébrique de la régression de Fourier.

Un autre exemple sont les modèles de régression définis comme combinaisons d'exponentielles croissantes.

Définition 6.3.4. *L'ensemble des modèles de régression exponentielle est définie par*

$$\mathcal{E} = \left\{ \sum_{\mathbf{h} \in \mathbf{A}} \theta_{\mathbf{h}} \exp(\mathbf{h}\mathbf{x}'), \mathbf{A} \subset \mathbb{Z}_+^d, |\mathbf{A}| < +\infty, \theta_{\mathbf{h}} \in \mathbb{k} \right\}, \quad (6.3.32)$$

où \mathbb{k} est le corps des constantes usuel.

Théorème 6.3.4. *L'ensemble \mathcal{E} est en correspondance bijective avec l'anneau de polynômes $\mathbb{k}[t_1, \dots, t_v]$.*

Démonstration 6.3.8. La preuve est immédiate.

6.4. Conclusion

Ce chapitre nous a permis de montrer quelles conséquences pratiques peut tirer l'expérimentateur de la connaissance des coordonnées des points support du plan expérimental de manière exacte. En effet pouvoir utiliser les bases de Gröbner dans un contexte de planification expérimentale lui permet non seulement de traiter complètement le problème des confusions d'effets mais lui apporte aussi des options supplémentaires comme la possibilité de trouver un modèle saturé, d'orthogonaliser un modèle pour un plan donné, de privilégier certains des facteurs expérimentaux dans l'étude de la réponse au travers du choix de l'ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$.

Chapitre 7

Résultats de l'étude de cas

7.1. Cas de la dimension 3

7.1.1. Les résultats de Hardin et Sloane

Dans ce chapitre nous nous intéressons à une série de dispositifs qui ont été construits ou étudiés par Hardin et Sloane dans leur article [HS96].

L'objectif des deux auteurs a été de déterminer, dans le cas de la dimension 3, quelle était la force maximale possible pour un plan sphérique de cardinal donné ainsi que de proposer un dispositif possédant cette propriété. Les inégalités obtenues par Delsarte, Seidel et Goethals, [DGS77], donnent une première majoration de la force possible d'un plan, voir la proposition 4.3.1. Toutefois les résultats d'existence plus précis, voir la section 4.4, obtenus par Bannaï montrent que les « tight designs » sont rares même en dimension 3.

Les résultats obtenus par Hardin et Sloane sont résumés dans le tableau 7.1 :

- La première colonne N correspond au cardinal des plans sphériques considérés.
- La deuxième colonne $\tau_3(N)$ correspond à la force maximale qu'il a été possible d'obtenir avec un plan sphérique de cardinal N .
- La troisième colonne « Proof » indique comment le dispositif maximisant la force et décrit par les colonnes suivantes a été obtenu. V1 indique qu'il existe une preuve de nature algébrique de la force de ce dispositif. Une valeur entre crochet fait référence à l'article où l'existence d'un dispositif de même taille et de même force a été prouvée. V2 indique que la preuve de la force de ce dispositif est basée sur une méthode par intervalles pour s'assurer que les équations polynomiales définissant les conditions de force $\tau_3(N)$ ont bien une solution. Enfin V3 indique que la discrétion Δ du plan est inférieure à 10^{-26} .
- La quatrième colonne « Group » correspond au groupe de symétries utilisé pour construire les orbites dont le plan sphérique est l'union.
- La cinquième colonne « Order » est égale à l'ordre du groupe apparaissant dans la colonne « Group ».
- La sixième colonne « Orbits (Description) » précise le cardinal des orbites à assembler pour obtenir le plan sphérique. Si la configuration obtenue correspond à un polytope remarquable, son nom est indiqué entre parenthèses.

Rappelons qu'un t -plan sphérique de \mathbb{R}^3 muni de sa structure euclidienne canonique est un ensemble de N points $\mathcal{P} = \{\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N\}$ de la sphère unité $\mathcal{S}^3 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \|\mathbf{x}\| = 1\}$ tel que l'égalité

$$\int_{\mathcal{S}^3} f(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{P}_i), \quad (7.1.1)$$

où μ est la mesure de probabilité uniforme sur \mathcal{S}^3 , soit vérifiée pour tout polynôme de $\mathbb{R}[\mathbf{x}]$ de degré inférieur ou égal à t .

Étant donné un polynôme f , nous notons $\Delta_f(\mathcal{P})$ la valeur absolue de la différence entre le membre de gauche et le membre de droite de l'égalité 7.1.1.

Si nous appelons \mathcal{F}_d l'ensemble des monômes unitaires de degré total égal à d , il suffit de vérifier la validité de l'équation 7.1.1 sur l'ensemble $\mathcal{F} = \bigcup_{1 \leq d \leq t} \mathcal{F}_d$, ce qui justifie l'introduction de la discrèpance, notée $\Delta(\mathcal{P})$, définie par :

$$\Delta(\mathcal{P}) = \sum_{f \in \mathcal{F}} \Delta_f(\mathcal{P})^2. \quad (7.1.2)$$

Hardin et Sloane ont mis en libre disposition les coordonnées approchées de ces plans sphériques. Toutefois comme nous l'avons précisé dans les chapitres précédents ces informations ne peuvent être utilisées qu'à des fins de vérification de nos calculs.

TAB. 7.1: « Conjectured values of $\tau_3(N)$, the largest t for which an N -point configuration on the sphere in 3 dimensions forms a spherical t -designs. »

N	$\tau_3(N)$	Proof	Group	Order	Orbits (Description)
1	0	V1	∞	∞	1 (single point)
2	1	V1	∞	∞	2 (two antipodal points)
3	1	V1	[2,3]	12	3 (equilateral triangle)
4	2	V1	[3,3]	24	4 (regular tetrahedron)
5	1	V1	[2,3]	12	3 + 2 (triangular bipyramid)
6	3	V1	[3,4]	48	6 (regular octahedron)
7	2	[23]	[3]	6	$3^2 + 1$
8	3	V1	[3,4]	48	8 (cube)
9	2	[23]	[2,3]	12	6 + 3 (triangular bipyramid)
10	3	[2]	[2 ⁺ ,10]	20	10 (pentagonal prism)
11	3	[2]	[2,3] ⁺	6	6 + 3 + 2
12	5	V1	[3,5]	120	12 (regular icosahedron)
13	3	[2]	[4]	8	$4^3 + 1$
14	4	[16]	[2,3] ⁺	6	$6^2 + 2$
15	3	[2]	[2,5]	20	10 + 5
16	5	[16]	[3,3] ⁺	12	12 + 4 (hexakis truncated tetrahedron)

7.1 Cas de la dimension 3

N	$\tau_3(N)$	Proof	Group	Order	Orbits (Description)
17	4	[16]	$[2,3]^+$	6	$6^2 + 3 + 2$
18	5	[25]	$[2^+,6]$	12	$12 + 6$
19	4	[16]	[3]	6	$6^2 + 3^2 + 1$
20	5	V1	$[3,5]$	120	20 (regular dodecahedron)
21	4	[16]	$[2,3]$	12	$12 + 6 + 3$
22	5	[25]	$[2^+,10]$	20	$10^2 + 2$
23	5	V2	$[2,3]^+$	6	$6^3 + 3 + 2$
24	7	[22]	$[3,4]^+$	24	24 (improved snub cube)
25	5	V1	$[2,5]^+$	10	$10^2 + 5$
26	6	V3	$[2,3]^+$	6	$6^4 + 2$
27	5	[25]	$[2,3]$	12	$12^2 + 3$
28	6	V3	$[2^+,4]$	8	$8^3 + 4$
29	6	V3	$[2^+]$	2	$2^{14} + 1$
30	7	V1	$[3,4]^+$	24	$24 + 6$ (tetrakis snub cube)
31	6	V3	$[5^+]$	5	$5^6 + 1$
32	7	V1	$[3,4]^+$	24	$24 + 8$ (snub cube + cube)
33	6	V3	$[2,3]^+$	6	
34	7	V3	$[2,4]^+$	8	
35	6	V3	$[2,5]^+$	10	$10^3 + 5$
36	8	V3	$[3,3]^+$	12	12^3 (three snub tetrahedra)
37	7	V3	$[3^+]$	3	
38	7	V3	$[3,4]^+$	24	$24 + 8 + 6$
39	7	V3	$[2,3]^+$	6	
40	8	V3	$[3,3]^+$	12	$12^3 + 4$
41	7	V3	$[2,3]^+$	6	
42	8	V3	$[2,4]^+$	8	
43	7	V3	$[6^+]$	6	
44	8	V3	$[3,3]^+$	12	$12^3 + 4^2$
45	8	V3	$[2^+]$	2	
46	8	V3	$[2,4]^+$	8	
47	8	V3	$[2,3]^+$	6	
48	9	V1	$[3,4]^+$	24	24^2 (two snub cubes)
49	8	V3	$[4^+]$	4	
50	9	V3	$[2,6]^+$	12	$12^4 + 2$
51	8	V3	$[2,3]^+$	6	
52	9	V3	$[3,3]^+$	12	$12^4 + 4$
53	8	V3	$[2,3]^+$	6	
54	9	V3	$[3,4]^+$	24	$24^2 + 6$
55	9	V3	$[2^+]$	2	
56	9	V3	$[3^+,4]$	24	$24^2 + 8$
57	9	V3	$[2,3]^+$	6	
58	9	V3	$[2,4]^+$	8	
59	9	V3	$[2,3]^+$	6	
60	10	V3	$[3,3]^+$	12	12^5 (five snub tetrahedra)

N	$\tau_3(N)$	Proof	Group	Order	Orbits (Description)
61	9	V3	$[6^+]$	6	
62	10	V3	$[2,3]^+$	6	
63	9	V3	$[2,7]^+$	14	$14^4 + 7$
64	10	V3	$[3,3]^+$	12	$12^5 + 4$
65	10	V3	$[2^+]$	2	
66	10	V3	$[2,4]^+$	8	
67	10	V3	$[2^+]$	2	
68	10	V3	$[2^+,4]$	8	
69	10	V3	$[4^+]$	4	
70	11	V3	$[2,5]^+$	10	10^7
71	10	V3	$[2,3^+]$	6	
72	11	V3	$[3,5]^+$	60	$60 + 12$ (pentakis truncated icosahedron)
73	10	V3	$[4^+]$	4	
74	11	V3	$[2,6]^+$	12	$12^6 + 2$
75	11	V3	$[2^+]$	2	
76	11	V3	$[3,3]^+$	12	$12^6 + 4$
77	11	V3	$[4^+]$	4	
78	11	V3	$[3,4]^+$	24	$24^3 + 6$
79	11	V3	$[2^+]$	2	
80	11	V3	$[3,5]^+$	60	$60 + 20$ (hexakis truncated icosahedron)
81	11	V3	$[4^+]$	4	
82	11	V3	$[2^+,10^+]$	10	$10^8 + 2$
83	11	V3	$[2,3]^+$	6	
84	12	V3	$[3,3]^+$	12	12^7 (seven snub tetrahedra)
85	11	V3	$[2,5]^+$	10	
86	12	V3	$[2,2]^+$	4	
87	12	V3	$[1^+]$	1	
88	12	V3	$[3,3]^+$	12	$12^7 + 4$
89	12	V3	$[2^+]$	2	
90	12	V3	$[2,4]^+$	8	
91	12	V3	$[2^+]$	2	
92	12	V3	$[3,3]^+$	12	$12^7 + 4^2$
93	12	V3	$[4^+]$	4	
94	13	V3	$[2^+,2^+]$	2	
95	12	V3	$[2^+]$	2	
96	13	V3	$[3,3]^+$	12	12^8 (eight snub tetrahedra)
97	12	V3	$[4^+]$	4	
98	13	V3	$[2,4]^+$	8	
99	12	V3	$[2]$	4	
100	13	V3	$[3,3]^+$	12	$12^8 + 4$

Nous résumons ici les informations concernant la nature de la preuve de la force des dispositifs de la liste précédente.

- Pour des plans de cardinal N de 1 à 22, 24, 25, 27, 30, 32 et 48 les résultats obtenus l'ont été par des preuves algébriques.
- L'existence du dispositif à 23 points de force 5 proposé repose sur l'utilisation d'une méthode par intervalle.
- Tous les autres dispositifs, $N = 28, 29, 31, 33$ à 47, 49 à 100, ont été retenus pour leur discrétance inférieure à 10^{-26} .

7.1.2. Utilisation des informations de Hardin et Sloane

Rappelons que nous avons caractérisé la nature radiale de la variance de l'estimateur de la réponse moyenne à l'aide de la fonction génératrice des moments. Un plan est un $2t$ -plan sphérique si et seulement si la partie polynomiale limitée au degré $2t$ de la fonction génératrice des moments est radiale. Tous les plans du tableau 7.1 dont la force est supérieure à $2t$ sont donc des plans pour lesquels la partie polynomiale limitée au degré $2t$ de la fonction génératrice des moments est radiale.

Théorème 7.1.1. *Les dispositifs de cardinal $N=4, 6$ à 100 sont des dispositifs isovariants lorsqu'ils sont analysés avec un modèle polynomial d'ordre 1.*

Les dispositifs de cardinal $N=12, 14, 16$ à 100, augmentés d'au moins un point au centre, sont des dispositifs fortement isovariants lorsqu'ils sont analysés avec un modèle polynomial d'ordre 2.

Démonstration 7.1.1. En premier, les dispositifs dont le support est un plan sphérique de force supérieure ou égale à deux et analysés à l'aide d'un modèle d'ordre 1 sont isovariants.

Considérons en second lieu un dispositif expérimental analysé à l'aide d'un modèle d'ordre 2. Tous les plans sphériques pour lesquels $\tau_3(N) \geq 2$, augmentés d'au moins un point au centre, sont des dispositifs isovariants.

Enfin précisons que certains des dispositifs proposés par Hardin et Sloane sont de force impaire $2t + 1$ ce qui n'est pas utile pour les considérations d'isovariance. Considérer un dispositif de force paire $2t$ de même cardinal permettra l'ajout d'une recherche d'optimalité alphabétique.

7.1.3. Résultats

La construction des dispositifs exacts détaillée dans la deuxième partie de ce travail au chapitre 11 a comme première conséquence les théorèmes suivants sur l'existence de plans isovariants dont les coordonnées des points support sont connues de manière exacte pour un modèle de degré 2.

Théorème 7.1.2. *Il existe pour $N \in \{13, 15\} \cup [17, +\infty[$ des dispositifs expérimentaux de cardinal N qui, analysés avec un modèle polynomial complet de degré 2, sont isovariants. De plus ces dispositifs présentent la particularité suivante : le support de chacun des plans est l'union d'un plan sphérique et d'un point au centre du domaine expérimental. Dans tous les cas, ils peuvent ne comporter aucune répétition dans leur partie sphérique.*

En fonction du cardinal du plan recherché, ils peuvent comporter un nombre partiel ou total de répétitions.

Pour chacune des valeurs de N suivantes 13, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 31, 33, 37, 39, 49, 55, 57, 61, 73, 81, les coordonnées exactes de ces plans sont connues et ces plans ne sont pas construits comme l'union de deux plans de cardinal inférieur.

Démonstration 7.1.2. L'existence et le calcul des coordonnées exactes des plans sphériques de force supérieure ou égale à 4 lorsque N est égal à 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 60, 72, 80 découlent de l'étude de cas précédente. L'ajout d'un point au centre à ces dispositifs les rend donc isovariants lorsqu'ils sont analysés par un modèle de degré 2 et nous obtenons les valeurs de cardinaux mentionnées dans le théorème ci-dessus. Ce qui prouve la seconde partie du théorème.

Rappelons que l'union de deux plans sphériques de force t est un plan sphérique de force t . Ainsi pour tout cardinal N pouvant s'écrire comme $1 + N_1 + N_2 + \dots + N_k$ où N_1, N_2, \dots, N_k sont k entiers de la liste 12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 60, 72, 80 sont des plans isovariants pour un modèle de degré 2. En particulier si nous disposons d'une suite de 12 valeurs consécutives C_1, \dots, C_{12} pour lesquelles il existe un tel dispositif alors en ajoutant le nombre convenable de fois un plan sphérique de cardinal 12, l'icosaèdre, nous pourrions obtenir des plans isovariants pour un modèle d'ordre pour tous les cardinaux supérieurs ou égaux à $C - 1$.

Considérons la suite de valeurs 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28. Il manque la valeur 27. Or $27=1+12+14$, ainsi il existe un plan isovariant de cardinal 27 pour un modèle d'ordre 2. Nous le construisons comme l'union d'un plan sphérique de cardinal 12 de force supérieure à 4, d'un plan sphérique de cardinal 14 de force supérieure à 4 et d'un point au centre. Nous obtenons alors 12 valeurs consécutives de 17 à 28, ce qui donne l'existence pour $N \in \{13, 15\} \cup [17, +\infty[$. Ces plans peuvent comporter des répétitions.

Nous raffinons la construction précédente de la manière suivante : l'image d'un plan sphérique par une transformation orthogonale est un plan sphérique. Nous éviterons ainsi les répétitions en transformant les dispositifs dont nous prenons l'union par une rotation. Reste à trouver une famille infinie de rotations dont les coefficients de la matrice sont algébriques. Ce problème se réduit à savoir s'il existe une famille infinie Θ de valeurs de θ pour lesquelles $\cos(\theta)$ est algébrique. Nous pouvons aborder ce problème à l'aide de la théorie des polygones réguliers à n côtés constructibles à la règle et au compas. En effet leurs coordonnées dans un repère s'expriment alors comme $(\cos(2\pi * k/n), \sin(2\pi * k/n))$. Si un polygone régulier à n côtés est constructible à la règle et au compas alors $\cos(2\pi * k/n)$ et $\sin(2\pi * k/n)$ sont algébriques sur \mathbb{Q} et leurs degrés sont une puissance de 2. Il existe une famille infinie de tels polygones, ceux pour lesquels nous avons $n = 2^i F_1^{j_1} F_2^{j_2} \dots F_k^{j_k}$ où i est un entier naturel supérieur à 1 et pour $p \in [1, k]$, $j_p = 0$ ou $j_p = 1$ et F_j sont les nombres premiers de Fermat c'est-à-dire les nombres premiers de la forme $2^{2^j} + 1$, voir par exemple [Car01]. Puisqu'il existe des nombres de Fermat premiers, par exemple 3, 5, 17, 257 et 65537, il existe bien une infinité de polygones réguliers dont les coordonnées sont algébriques.

Conjecture 7.1.1. *La valeur, conjecturée comme égale à 3 par Hardin et Sloane, de $\tau(13)$ et $\tau(15)$ permet de formuler la conjecture suivante : il n'existe pas de dispositif, union d'un*

7.1 Cas de la dimension 3

plan sphérique et d'un point au centre et de cardinal 14 et 16, qui soit isovariant s'il est analysé à l'aide d'un modèle polynomial de degré 2.

Théorème 7.1.3. *Pour $N \in \llbracket 13, +\infty \llbracket$, il existe des dispositifs expérimentaux de cardinal N qui, analysés avec un modèle polynomial de degré 2, sont isovariants.*

Précisons la nature de chacun de ces dispositifs :

- *Le support de chacun d'entre eux est l'union d'un plan sphérique et d'au moins un point au centre. Il est possible de spécifier le nombre total d'essais N et le nombre $k \geq 1$ de répétitions au centre du domaine arbitrairement dès que $N \geq k + 16$, $N = k + 14$ ou $N = k + 12$. Les valeurs de N et de k pour lesquelles nous avons $N = k + 15$ ou $N = k + 13$ ne sont pas accessibles, il suffit de prendre à la place de la valeur k la valeur $k' = k + 1$ ou la valeur $k'' = k - 1$.*
- *Pour toutes les valeurs de N possibles, il est possible de construire des dispositifs ne comportant aucune répétition hormis à l'origine du repère.*
- *En fonction de la valeur de N , il est possible de construire des dispositifs possédant un nombre partiel ou total de répétitions dans la partie sphérique du dispositif.*

Démonstration 7.1.3. Puisque nous autorisons plus d'une répétition au centre du domaine, les cardinaux de 14 et 16 deviennent accessibles : $14 = 12 + 2$, $16 = 12 + 4 = 14 + 2$ ce qui prouve le premier point du théorème.

Si $N \geq k + 16$, $N = k + 14$ ou $N = k + 12$, le théorème 7.1.2 précédent indique qu'il existe un plan isovariant pour un modèle de degré construit comme l'union d'un plan sphérique de cardinal $N - k$ et d'un point au centre. L'ajout d'essais au centre ne modifiant pas le caractère isovariant d'un dispositif, un dispositif formé d'un plan sphérique de cardinal $N - k$ et de k points au centre est isovariant lorsqu'il est analysé à l'aide un modèle d'ordre 2. Si $N = 13$ ou $N = 15$, le changement de k en k' ou en k'' découle des mêmes considérations.

Signalons enfin, que les plans construits ici, héritent, pour leur partie sphérique, des propriétés des plans construits au théorème 7.1.2, en particulier la possibilité de les obtenir sans répétitions dans leur partie sphérique.

La situation se complique lorsque nous considérons des plans analysés par des modèles de degré supérieur ou égaux à trois en raison des confusions d'effets qui sont plus complexes à éliminer. En effet il faut alors ajouter d'autres points que des points au centre du domaine ce qui modifiera la fonction génératrice des moments du plan et affectera la propriété d'isovariance.

Il existe plusieurs manières de traiter cette difficulté. L'approche par les t -mesures euclidiennes est une possibilité pour obtenir des dispositifs isovariants. Une autre manière de remédier à cette situation est de considérer des modèles qui sont naturellement adaptés au contexte sphérique.

Nous introduisons pour cela les fonctions polynomiales définies sur la sphère unité, pour plus de détails voir le chapitre 8 sur les notions algébriques.

Proposition 7.1.1. *Les fonctions polynomiales définies sur la sphère unité sont isomorphes à l'anneau quotient $M_S = \mathbb{R}[\mathbf{x}]/(X^2 + Y^2 + Z^2 - 1)$, nous notons $M_{S,k} = \mathbb{R}_k[\mathbf{x}]/(X^2 + Y^2 + Z^2 - 1)$. Une base de $M_{S,k}$ est constituée par la somme directe orthogonale de l sous-espaces vectoriels chacun engendré par une base orthonormale de polynômes harmoniques de degré l , pour $0 \leq l \leq k$.*

Définition 7.1.1. *Nous appelons modèle polynomial sphérique de degré d , un modèle pour lequel $\text{Vect}(\mathbf{f}(\mathcal{S})) = M_{\mathcal{S},d}$.*

Théorème 7.1.4. *Si, à la place du modèle polynomial classique d'ordre k , où k est un entier supérieur ou égal à 1, nous considérons le modèle polynomial sphérique pour analyser un dispositif expérimental sphérique, alors il n'y a plus aucune confusion d'effets systématique liée à la nature du domaine expérimental considéré : quelque soit le sous-ensemble de fonctions polynomiales linéairement indépendantes sur la sphère, il existe un plan sphérique pour lequel tous les termes de ce modèle sont estimables.*

Démonstration 7.1.4. Soit d le degré maximal des termes du modèle. Le théorème 4.2.2 du chapitre 4, non constructif, de Seymour et Slavasky sur l'existence des plans sphériques de force arbitraire et donc en particulier de force $2d$. Or la preuve de l'inégalité sur le nombre minimal de points d'un plan sphérique de force $2d$ implique qu'un tel plan rend estimable tous les paramètres associés au modèle sphérique d'ordre k .

Théorème 7.1.5. *Les dispositifs de cardinal $N=4,6$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 1. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 1 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.*

Les dispositifs de cardinal $N=12,14,16$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 2. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 2 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.

Les dispositifs de cardinal $N=24,26,28$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 3. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 3 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.

Les dispositifs de cardinal $N=36,40,42,44$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 4. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 4 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.

Les dispositifs de cardinal $N=60,62,64$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 5. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 5 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.

Les dispositifs de cardinal $N=84,86$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 6. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 6 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.

Le tableau 7.1.5 indique les plans dont les coordonnées exactes sont connues ainsi que le degré jusqu'auquel les propriétés d'orthogonalité et de Φ_p -optimalité sont vérifiées.

Degré	Cardinal du plan N
1	4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 60, 72, 80.
2	12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 59, 72, 80.
3	24, 26, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 59, 72, 80.
4	36, 48, 54, 56, 59, 72, 80.
5	60, 72, 80.

TAB. 7.2 – Plans sphériques orthogonaux exacts

Démonstration 7.1.5. Il s’agit d’une conséquence directe de la caractérisation des plans sphériques à l’aide des polynômes harmoniques et du résultat de Dette, Melas et Pepelyshev, *cf.* [DMP05].

7.2. Cas de la dimension 4

7.2.1. Les résultats de Hardin et Sloane

Dans ce chapitre nous nous intéressons à une série de dispositifs ayant été construits ou étudiés par Sloane, Hardin et Cara dans leur rapport préliminaire [SHC03].

L’objectif des trois auteurs a été similaire à celui que nous avons exposé pour le cas de la dimension 3 à la section 7.1.1 : pour un cardinal donné, construction du plan sphérique dont la force est maximale et les symétries les plus importantes.

Les résultats obtenus par Sloane, Hardin et Cara forment le tableau 7.3 :

- La première colonne N correspond au cardinal des plans sphériques considérés.
- La deuxième colonne $\tau_4(N)$ correspond à la force maximale qu’il a été possible d’obtenir avec un plan sphérique de cardinal N .
- La troisième colonne « Group Order » est égal à l’ordre du plus grand groupe de symétries du dispositif.
- La quatrième colonne « Remarks » précise parfois succinctement la structure du plan.

Rappelons qu’un t -plan sphérique de \mathbb{R}^4 muni de sa structure euclidienne canonique est un ensemble de N points $\mathcal{P} = \{\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N\}$ de la sphère unité $\mathcal{S}^4 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4 \mid \|\mathbf{x}\| = 1\}$ tels que l’égalité

$$\int_{\mathcal{S}^4} f(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{P}_i), \quad (7.2.1)$$

où μ est la mesure de probabilité uniforme sur \mathcal{S}^4 , soit vérifiée pour tout polynôme de $\mathbb{R}[\mathbf{x}]$ de degré inférieur ou égal à t .

Le processus de recherche des plans sphériques est identique à celui utilisé dans le cas de la dimension 3 et décrit à la section 7.1.1.

TAB. 7.3: « Conjectured values of $\tau_4(N)$, the largest t for which an N -point configuration on the sphere in 4 dimensions forms a spherical t -designs. »

N	$\tau_4(N)$	Group Order	Remarks
1	0	∞	single point
2	1	∞	two antipodal points
3	1	∞	equilateral triangle
4	1	48	regular tetrahedron
5	2	120	regular simplex
6	2	72	join of two triangles
7	2	14	$\{(\omega^j, \omega^{2j})\}$
8	3	384	orthoplex
9	2	72	$\{(\omega^j, \omega^k)\}$
10	3	240	diplo-simplex
11	3	22	
12	3	288	join of two hexagons
13	3	52	$\{(\omega^j, \omega^{5j})\}$
14	3	392	
15	3	60	
16	3	512	join of two octagons
17	3	68	
18	3	648	
19	3	48	
20	4	20	[HS92]
21	4	14	
22	4	6	
23	4	6	
24	5	1152	24-cell
25	4	20	
26	4	52	
27	4	18	
28	5	28	
29	4	8	
30	5	40	
31	4	12	
32	5	192	
33	5	10	
34	5	12	
35	5	10	
36	5	144	
37	5	12	
38	5	48	

7.2 Cas de la dimension 4

N	$\tau_4(N)$	Group Order	Remarks
39	5	26	
40	5	240	
41	5	12	
42	6	42	
43	5	12	
44	5	96	
45	5	30	
46	5	96	
47	5	12	
48	7	2304	two 24-cells
49	5	4	
50	6	100	
51	6	4	
52	6	52	
53	6	6	
54	7	54	
55	6	20	
56	7	16	
57	6	9	
58	6	116	
59	6	12	
60	7	240	
61	6	8	
62	7	8	
63	6	18	
64	7	256	
65	6	52	
66	7	66	
67	6	12	
68	7	136	
69	7	3	
70	7	40	
71	7	6	
72	7	576	
73	7	6	
74	7	16	
75	7	6	
76	7	38	
77	7	22	
78	7	52	
79	7	8	
80	7	256	
81	7	36	
82	7	164	

N	$\tau_4(N)$	Group Order	Remarks
83	7	12	
84	7	144	
85	7	34	
86	7	24	
87	7	18	
88	7	128	
89	7	12	
90	7	180	
91	7	52	
92	7	48	
93	7	36	
94	7	96	
95	7	38	
96	8	6	
97	8	1	
98	8	4	
99	8	11	
100	8	20	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
120	11	14400	600-cell [DGS77]

Nous résumons ici les informations concernant la nature de la preuve de la force des dispositifs de la liste précédente.

- Pour des plans de cardinal N de 1 à 20, 24, 48, et 120 les résultats d'existence se trouvent dans [Mim90], [Baj92], [Baj98], [HS92] et [DGS77].
- L'existence des plans de cardinaux $N = 21, 22, 23, 25, 26, 27, 31$ avait été conjecturée dans [HS92].
- Sloane, Hardin et Cara affirment avoir montré l'existence des plans de cardinaux $N = 21, 26, 28, 32, 36, 39, 40, 42, 44, 52, 54, 60, 65, 66, 72, 78, 84, 90$. Toutefois aucune indication précise sur la structure, comme union d'orbites de groupes finis, de ces plans n'est indiquée dans [SHC03].

7.2.2. Utilisation des informations de Hardin et Sloane

Rappelons que nous avons caractérisé la nature radiale de la variance de l'estimateur de la réponse moyenne à l'aide de la fonction génératrice des moments. Un plan est un $2t$ -plan sphérique si et seulement si la partie polynomiale limitée au degré $2t$ de la fonction génératrice des moments est radiale. Tous les plans du tableau 7.3 dont la force est supérieure à $2t$ sont donc des plans pour lesquels la partie polynomiale limitée au degré $2t$ de la fonction génératrice des moments est radiale.

Théorème 7.2.1. *Les dispositifs de cardinal $N = 5$ à 100 et 120 sont des dispositifs iso-variants lorsqu'ils sont analysés avec un modèle polynomial d'ordre 1. Les dispositifs de cardinal $N = 20$ à 100 et 120, augmentés d'au moins un point au centre,*

7.3 Conclusion

sont des dispositifs fortement isovariants lorsqu'ils sont analysés avec un modèle polynomial d'ordre 2.

Démonstration 7.2.1. En premier, les dispositifs dont le support est un plan sphérique de force supérieure ou égale à 2 et analysés à l'aide d'un modèle d'ordre 1 sont isovariants. Considérons en second lieu un dispositif expérimental analysé à l'aide d'un modèle d'ordre 2. Tous les plans sphériques pour lesquels $\tau_4(N) \geq 2$, augmentés d'au moins un point au centre, sont des dispositifs isovariants.

Enfin précisons que certains des dispositifs proposés par Sloane, Hardin et Cara sont de force impaire $2t + 1$ ce qui n'est pas utile pour les considérations d'isovariance. Considérer un dispositif de force paire $2t$ de même cardinal permettra l'ajout d'une recherche d'optimalité alphabétique.

7.3. Conclusion

Cette étude de cas a permis de montrer que la méthodologie introduite dans le chapitre 5 permet d'aboutir à la construction de plans expérimentaux dont les coordonnées sont connues de manière exacte. Nous avons alors montré l'existence et indiqué comment obtenir de tels dispositifs pour tous les cardinaux pour lesquels il existe des plans isovariants pour des modèles polynomiaux complets de degré 2 en dimension 3. Nous en avons également tiré l'existence de dispositifs orthogonaux et Φ_p -optimaux pour des problèmes de régression sphérique dont le modèle est spécifié en termes d'harmoniques sphériques d'ordre inférieur 1, 2, 3, 4, 5 ou 6 dans le cas de la dimension 3 et 4. Rappelons que ces dispositifs ont une application particulièrement intéressante dans les problèmes de reconnaissance de formes tridimensionnelles, cf. [DMP05].

Chapitre 8

Notions algébriques

Introduction

Le domaine expérimental choisi, la sphère dans \mathbb{R}^n euclidien canonique, ainsi que les objets statistiques utilisés, moments du plan, surfaces de réponse, font naturellement intervenir des fonctions polynomiales. Afin de manipuler ces objets de manière efficace nous allons faire un petit détour du côté de l'Algèbre et plus particulièrement du côté de la Géométrie algébrique qui, comme nous allons le voir, va mettre à notre disposition des outils particulièrement efficaces. En effet, certaines propriétés fort recherchées par le planificateur, symétrie du plan, estimabilité des paramètres d'un modèle, optimalité alphanétique vont toutes se traduire de la même manière sous la forme d'une appartenance à un ensemble de zéros d'un idéal de polynômes bien choisi.

Si nous nous référons aux équations obtenues au chapitre 4 et qui caractérisent l'isovariance d'un dispositif, nous pouvons immédiatement établir la proposition suivante. Sans perte de généralité, nous nous ramenons au cas où le dispositif est inclus dans la sphère unité \mathcal{S} de l'espace considéré. Pour commencer considérons le cas réel et posons μ l'unique mesure sur la sphère unité \mathcal{S} invariante par l'action du groupe orthogonal.

Proposition 8.0.1. *Soient n , p et t trois entiers naturels tous non nuls, l'ensemble des dispositifs fortement isovariants de force t à p points $\{P_1, \dots, P_p\}$ de \mathbb{R}^n , est une variété algébrique définie par les équations suivantes :*

-i- *Les points supports du plan doivent être un plan sphérique de force t :*

$$\forall i \in \{1, \dots, p\}, P_i \in \mathcal{S}. \quad (8.0.1)$$

$$\forall f \in \mathbb{R}_t[x], \int_{\mathcal{S}} f(x) d\mu(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(P_i). \quad (8.0.2)$$

-ii- *Tous les termes du modèle polynomial d'ordre t doivent être estimables avec ce plan. Cette condition se traduit par l'inversibilité de la matrice des moments du plan. Elle s'exprime donc également à l'aide d'une équation polynomiale.*

Résoudre ce système permet de connaître tous les dispositifs isovariants possibles. Certes quelques auteurs ont proposé des constructions de dispositifs de cardinal plus ou moins

élevé et de force généralement 3, 4 ou 5. L'approche proposée ici est de considérer la variété de tous les dispositifs isovariants (ou d'un autre type à partir du moment où la caractérisation utilisée amène à un système d'équations polynomiales) possibles puis de déterminer si celle-ci est vide, finie ou infinie et le cas échéant d'en obtenir une paramétrisation.

Autant la résolution d'un système d'équations linéaires est un problème maîtrisé depuis Gauss et formalisé à l'aide de la théorie des espaces vectoriels, autant la résolution d'un système d'équations polynomiales reste un domaine de recherche très actif. Les notions de géométrie algébrique abordées par la suite resteront très élémentaires, elles seront néanmoins suffisantes à une résolution théorique du problème posé ci-dessus, voir [Stu03, PRW00a, KR00, KR05].

Nota bene

Dans notre cas, il va de soi que nous ne pouvons nous contenter d'une résolution formelle du problème posé. Nous souhaitons obtenir une résolution explicite qui permette d'aboutir à la construction d'un dispositif expérimental. Nous en venons donc à la raison principale motivant ce nouvel angle d'approche du problème : il existe désormais des méthodes systématiques de résolution des systèmes polynomiaux qui mettent en jeu des algorithmes malheureusement complexes et coûteux en temps de calcul mais dont le raffinement ne cesse de croître, voir [FGLM93, MMM93, CLO96, ABKR00, Tra00, FG03].

Les algorithmes que nous allons évoquer permettent de résoudre de manière exacte ce type de système d'équations polynomiales lorsque le nombre d'inconnues n'est pas trop important (moins de 10) mais très rapidement nous nous apercevons qu'il faut guider la construction des plans en les réalisant comme assemblage d'orbites de points de la sphère par des groupes de Coxeter. L'utilisation de leurs symétries permet alors de réduire le système d'équations précédent à un système plus simple, [CM84].

Puisque nous nous intéressons aux symétries possibles d'ensembles finis de points inclus dans une sphère, un détour par les groupes de Coxeter et leurs invariants polynomiaux s'avéra utile par la suite.

Il faut ici faire le parallèle avec la démarche que Sloane et Hardin ont suivie, dans le cas de la dimension 3, lorsqu'ils ont utilisé leur logiciel Gosset, [HS91], qui, quant à lui, propose une résolution numérique du système précédent. Leurs résultats ont été publiés dans [HS96]; des travaux sont toujours en cours depuis ce moment en ce qui concerne le cas de la dimension 4. Une telle approche est nécessaire dans la mesure où elle permet de constater quelles sont les symétries du dispositif qui à un nombre de points fixés permet d'obtenir la force maximale, symétries dont nous nous servons alors comme point de départ pour obtenir une construction comme union d'orbites et ainsi pouvoir résoudre de manière exacte les équations d'isovariance.

Afin de mieux reconnaître et classifier les dispositifs que nous obtiendrons, nous allons également donner quelques éléments de la théorie des polyèdres, en particulier en dimension 3 et en dimension 4. Nous renvoyons à [Cox73] pour certaines preuves particulièrement

techniques.

8.1. Un détour par l'algèbre moderne

Le lecteur souhaitant plus de précisions pourra consulter [CLO96] pour une introduction plus simple et plus fournie ou [KR00, KR05] s'il cherche à approfondir certaines des notions abordées ici. Nous omettrons ici les démonstrations des résultats qui peuvent se trouver par exemple dans l'un des trois ouvrages suivants [CLO96, KR00, PRW00a].

8.1.1. Anneaux et modules

Ce paragraphe a pour but de familiariser le lecteur avec les objets et les notations employées. Nous commençons donc par rappeler les définitions et les premières propriétés des objets que nous allons utiliser ultérieurement.

Définition 8.1.1. Monoïde [Monoid]

Un monoïde $(\mathbb{S}, *_{\mathbb{S}})$ est un ensemble \mathbb{S} muni d'une application $*_{\mathbb{S}} : \mathbb{S} \times \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{S}$, appelée loi de composition interne, qui est associative et pour laquelle il existe un élément neutre, i.e. $\exists 1_{\mathbb{S}} \in \mathbb{S} \mid \forall s \in \mathbb{S}, s = 1_{\mathbb{S}} *_{\mathbb{S}} s = s *_{\mathbb{S}} 1_{\mathbb{S}}$.

Un monoïde $(\mathbb{S}, *_{\mathbb{S}})$ est commutatif [commutative] si $\forall (s, s') \in \mathbb{S}^2, s *_{\mathbb{S}} s' = s' *_{\mathbb{S}} s$.

Définition 8.1.2. Groupe [Group]

Un groupe $(\mathbb{G}, *_{\mathbb{G}})$ est un monoïde $(\mathbb{G}, *_{\mathbb{G}})$ pour lequel tout élément est inversible, i.e. $\forall g \in \mathbb{G}, \exists g' \in \mathbb{G} \mid g *_{\mathbb{G}} g' = g' *_{\mathbb{G}} g = 1_{\mathbb{G}}$.

Un groupe $(\mathbb{G}, *_{\mathbb{G}})$ est commutatif si le monoïde $(\mathbb{G}, *_{\mathbb{G}})$ est commutatif.

Définition 8.1.3. Anneau [Ring]

Un anneau $(\mathbb{A}, +_{\mathbb{A}}, *_{\mathbb{A}})$ est un ensemble \mathbb{A} muni de deux lois de composition interne $+_{\mathbb{A}} : \mathbb{A} \times \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{A}$ et $*_{\mathbb{A}} : \mathbb{A} \times \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{A}$ telles que $(\mathbb{A}, +_{\mathbb{A}})$ soit un groupe commutatif d'élément neutre noté $0_{\mathbb{A}}$ et $(\mathbb{A} - \{0\}, *_{\mathbb{A}})$ soit un monoïde commutatif d'élément neutre $1_{\mathbb{A}}$ pour lesquels les propriétés de distributivité de $*_{\mathbb{A}}$ par rapport à $+_{\mathbb{A}}$ sont vérifiées.

Un anneau $(\mathbb{A}, +_{\mathbb{A}}, *_{\mathbb{A}})$ est dit intègre si $\forall (a, b) \in \mathbb{A}^2, a *_{\mathbb{A}} b = 0_{\mathbb{A}} \implies (a = 0 \text{ ou } b = 0)$.

Remarque 8.1.1. Tous les anneaux et les corps que nous utiliserons dans la suite seront donc commutatifs.

Définition 8.1.4. Corps [Field]

Un corps $(\mathbb{K}, +_{\mathbb{K}}, *_{\mathbb{K}})$ est un anneau $(\mathbb{K}, +_{\mathbb{K}}, *_{\mathbb{K}})$ pour lequel tout élément différent de $0_{\mathbb{K}}$ est inversible pour $*_{\mathbb{K}}$, i.e. $\forall k \in \mathbb{K}, \exists k' \in \mathbb{K} \mid k *_{\mathbb{K}} k' = k' *_{\mathbb{K}} k = 1_{\mathbb{K}}$.

Définition 8.1.5. \mathbb{A} -Module [\mathbb{A} -Module]

Un \mathbb{A} -Module \mathcal{M} est un groupe commutatif $(\mathcal{M}, +_{\mathcal{M}})$ muni d'une opération $\cdot_{\mathcal{M}} : \mathbb{A} \times \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$, appelée loi multiplicative externe, telle que $1_{\mathbb{A}} \cdot_{\mathcal{M}} m = m, \forall m \in \mathcal{M}$ et que les propriétés d'associativité et de distributivité soient vérifiées.

Un sous-groupe commutatif \mathcal{N} de \mathcal{M} est appelé un \mathbb{A} -sous-module si nous avons $\mathbb{A} \cdot_{\mathcal{M}} \mathcal{N} \subseteq \mathcal{N}$. Si $\mathcal{N} \neq \mathcal{M}$ alors \mathcal{N} est appelé un sous-module propre. Un \mathbb{A} -sous-module du \mathbb{A} -module \mathbb{A} est appelé un idéal de \mathbb{A} .

Définition 8.1.6. *Homomorphisme, isomorphisme* [homomorphism, isomorphism]

Soient $(\mathbb{A}_1, +_{\mathbb{A}_1}, *_{\mathbb{A}_1})$, $(\mathbb{A}_2, +_{\mathbb{A}_2}, *_{\mathbb{A}_2})$, $(\mathbb{A}_3, +_{\mathbb{A}_3}, *_{\mathbb{A}_3})$ des anneaux commutatifs.

- i- Une application $\phi : \mathbb{A}_1 \rightarrow \mathbb{A}_2$ est un isomorphisme d'anneaux si :
 - (i) ϕ est un morphisme additif : $\phi(r +_{\mathbb{A}_1} r') = \phi(r) +_{\mathbb{A}_2} \phi(r')$, $\forall (r, r') \in \mathbb{A}_1^2$.
 - (ii) ϕ est un morphisme multiplicatif : $\phi(r *_{\mathbb{A}_1} r') = \phi(r) *_{\mathbb{A}_2} \phi(r')$, $\forall (r, r') \in \mathbb{A}_1^2$.
 - (iii) ϕ est bijective.
- ii- Deux anneaux \mathbb{A}_1 et \mathbb{A}_2 sont dits isomorphes s'il existe un isomorphisme d'anneaux $\phi : \mathbb{A}_1 \rightarrow \mathbb{A}_2$. Nous écrivons alors $\mathbb{A}_1 \cong \mathbb{A}_2$.
- iii- Une application $\phi : \mathbb{A}_1 \rightarrow \mathbb{A}_2$ est un homomorphisme d'anneaux si ϕ est un morphisme additif et multiplicatif et que $\phi(1_{\mathbb{A}_1}) = 1_{\mathbb{A}_2}$. Dans ce cas \mathbb{A}_2 est une \mathbb{A}_1 -algèbre d'homomorphisme de structure ϕ .
- iv- Si \mathbb{A}_2 et \mathbb{A}_3 sont deux \mathbb{A}_1 -algèbres d'homomorphismes de structure respectifs $\phi : \mathbb{A}_1 \rightarrow \mathbb{A}_2$ et $\psi : \mathbb{A}_1 \rightarrow \mathbb{A}_3$ alors un homomorphisme d'anneau $\rho : \mathbb{A}_2 \rightarrow \mathbb{A}_3$ est un homomorphisme de \mathbb{A}_1 -algèbre si nous avons $\rho(\phi(r) *_{\mathbb{A}_2} s) = \psi(r) *_{\mathbb{A}_3} \rho(s)$, $\forall (r, s) \in \mathbb{A}_1 \times \mathbb{A}_2$.
- v- Si \mathcal{M} et \mathcal{N} sont deux \mathbb{A}_1 -modules, une application $\phi : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{N}$ est un homomorphisme de \mathbb{A}_1 -modules ou une application \mathbb{A}_1 -linéaire si $\phi(m +_{\mathcal{M}} m') = \phi(m) +_{\mathcal{N}} \phi(m')$, $\forall (m, m') \in \mathcal{M}^2$ et $\phi(r \cdot_{\mathcal{M}} m) = r \cdot_{\mathcal{N}} \phi(m)$, $\forall (r, m) \in \mathbb{A}_1 \times \mathcal{M}$.

Définition 8.1.7. *Générateurs et bases d'un \mathbb{A} -module* [Generators and bases]

Soit \mathcal{M} un \mathbb{A} -module.

- i- Un ensemble $\{m_\lambda \mid \lambda \in \Lambda\}$ d'éléments de \mathcal{M} est appelé un système de générateurs de \mathcal{M} si tout $m \in \mathcal{M}$ a une représentation $m = r_1 m_{\lambda_1} + \dots + r_n m_{\lambda_n}$ telle que $n \in \mathbb{N}$, $r_1, \dots, r_n \in \mathbb{A}$ et $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \Lambda$. Dans ce cas nous écrivons $\mathcal{M} = \langle m_\lambda \mid \lambda \in \Lambda \rangle$. L'ensemble vide est un système de générateurs du module $\{0\}$.
- ii- Le module \mathcal{M} est de type fini s'il a un système fini de générateurs. Si \mathcal{M} est engendré par un seul élément il est dit cyclique. Un idéal cyclique est appelé un idéal principal.
- iii- Un système de générateurs $\{m_\lambda \mid \lambda \in \Lambda\}$ est une \mathbb{A} -base de \mathcal{M} si chaque élément de \mathcal{M} a une représentation unique $m = r_1 m_{\lambda_1} + \dots + r_n m_{\lambda_n}$, avec $n \in \mathbb{N}$, $r_1, \dots, r_n \in \mathbb{A}$ et $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \Lambda$. Si \mathcal{M} a une \mathbb{A} -base, il s'agit d'un \mathbb{A} -module libre.
- iv- Si \mathcal{M} est un \mathbb{A} -module de type fini et $\{m_1, \dots, m_r\}$ une \mathbb{A} -base de \mathcal{M} , alors r est appelé le rang de \mathcal{M} et noté $\text{Rg}\mathcal{M}$. Toutes les bases ayant le même cardinal, le rang est bien défini.

Définition 8.1.8. *Base canonique* [Canonical basis]

Pour $n \in \mathbb{N}$, l'ensemble $\mathbb{A}^n = \{(r_1, \dots, r_n) \mid r_1, \dots, r_n \in \mathbb{A}\}$ de tous les n -uplets est un \mathbb{A} -module libre pour l'addition composante par composante et la multiplication par un scalaire. Pour $1 \leq i \leq n$, soit e_i le t -uplet défini par $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ avec un 1 à la i -ème position. L'ensemble $\{e_1, \dots, e_n\}$ est une \mathbb{A} -base de \mathbb{A}^n . Nous l'appelons base canonique de \mathbb{A} .

Définition 8.1.9. *Anneau de polynômes* [Polynomial ring]

Soit \mathbb{A} un anneau, $\mathbb{A}^{(\mathbb{N})}$ l'ensemble des suites (r_0, r_1, \dots) de terme général appartenant à \mathbb{A} et ne comportant qu'un nombre fini de termes non nuls et $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots)$ avec un 1 en $i + 1$ -ème position. Nous munissons $\mathbb{A}^{(\mathbb{N})}$ de l'addition composante par composante

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

et de la multiplication par un scalaire ce qui en fait un \mathbb{A} -module et $\{e_i \mid i \in \mathbb{N}\}$ est une \mathbb{A} -base du \mathbb{A} -module libre $\mathbb{A}^{(\mathbb{N})}$. Nous définissons alors la multiplication de deux éléments $r = \sum_{i \in \mathbb{N}} r_i e_i = \sum_{i \in I_r} r_i e_i$ et $s = \sum_{i \in \mathbb{N}} s_i e_i = \sum_{i \in I_s} s_i e_i$ de \mathbb{A} ainsi $(\sum_{i \in I_r} r_i e_i) \cdot (\sum_{i \in I_s} s_i e_i) = \sum_{i \in \mathbb{N}} \left(\sum_{j=0}^i r_j s_{i-j} \right) e_i$.

- i- Si nous posons $x = e_1$, l'anneau $\mathbb{A}^{(\mathbb{N})}$ est appelé l'anneau des polynômes à une indéterminée x sur \mathbb{A} et est noté $\mathbb{A}[x]$. Il s'agit d'un anneau commutatif et chaque élément de $\mathbb{A}[x]$ a une unique représentation $\sum_{i \in \mathbb{N}} r_i x^i$ avec $r_i \in \mathbb{A}$ et $r_i \neq 0$ seulement pour un nombre fini d'indices $i \in \mathbb{N}$.
- ii- Pour $n \geq 1$, nous définissons par récurrence $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n] = (\mathbb{A}[x_1, \dots, x_{n-1}])[x_n]$, appelé anneau des polynômes à n indéterminées sur \mathbb{A} .

Proposition 8.1.1.

Soit \mathbb{A} un anneau intègre.

- i- Les unités de $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ sont les unités de \mathbb{A} .
- ii- L'anneau des polynômes $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ est un anneau intègre.

Définition 8.1.10. Monôme [Monomial]

Un monôme en les indéterminées x_1, \dots, x_n est un produit de la forme :

$$x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot x_n^{\alpha_n}, \quad (8.1.1)$$

où tous les exposants partiels $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ sont des entiers positifs ou nuls.

Le degré total est égal à la somme $\sum_{i=1}^n \alpha_i$.

Nous simplifions la notation pour les monômes de la manière suivante : si $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ est un n -uple d'entier positifs ou nuls, nous posons

$$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot x_n^{\alpha_n} \quad \text{et} \quad |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i. \quad (8.1.2)$$

Par convention, si $\alpha = (0, \dots, 0)$, $x^\alpha = 1$.

Définition 8.1.11. Polynôme [Polynomial]

Un polynôme f en les indéterminées x_1, \dots, x_n est une combinaison linéaire à coefficients dans \mathbb{A} de monômes. Nous écrivons un polynôme sous la forme suivante :

$$f = \sum_{\alpha \in D} a_\alpha x^\alpha, \quad (8.1.3)$$

où la somme est prise sur un ensemble D fini de n -uples α .

Définition 8.1.12. Division [Division]

Soient $f, g \in \mathbb{A}[x]$. Le polynôme f est divisible par le polynôme g dès lors qu'il existe un polynôme h de $\mathbb{A}[x]$ tel que $f = gh$.

Définition 8.1.13. Terme et degré [Term and degree]

Soit $n \geq 1$.

- i- Un polynôme $f \in \mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ de la forme $f = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$, avec $(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$, est appelé un terme, un produit de puissances ou encore un monôme. L'ensemble des termes de $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ est noté \mathbb{T}^n ou $\mathbb{T}(x_1, \dots, x_n)$.
- ii- Pour un terme $t = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n} \in \mathbb{T}^n$, le nombre $\deg(t) = \alpha_1, \dots, \alpha_n$ est appelé degré de t .
- iii- L'application $\log : \mathbb{T}^n \rightarrow \mathbb{N}^n$ définie par $x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n} \rightarrow (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ est appelé le logarithme d'un terme.
- iv- Si $r \geq 1$ et $M = (\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n])^r$ est le $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ -module libre de type fini de base canonique e_1, \dots, e_r , alors un terme de M est un élément de la forme te_i , tel que $t \in \mathbb{T}^n$ et $1 \leq i \leq r$. L'ensemble des termes de M est noté par $\mathbb{T}^n \langle e_1, \dots, e_r \rangle$ ou par $\mathbb{T}(x_1, \dots, x_n) \langle e_1, \dots, e_r \rangle$.

Définition 8.1.14. Coefficients, support et degré d'un polynôme [Coefficients, support and degree of a polynomial]

Soit $n \geq 1$, $f = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} c_\alpha t_\alpha \in \mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ un polynôme et $m = \sum_{i=1}^r \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} c_{\alpha,i} t_{\alpha,i} e_i \in M = (\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n])^r$.

- i- Pour chaque $\alpha \in \mathbb{N}^n, i \in \{1, \dots, r\}$, l'élément $c_{\alpha,i} \in \mathbb{A}$ est appelé le coefficient du terme $t_\alpha e_i$ dans m .
- ii- L'ensemble $\{t_\alpha e_i \in \mathbb{T}^n \langle e_1, \dots, e_r \rangle \mid c_{\alpha,i} \neq 0\}$ est noté $\text{Supp}(m)$ et appelé le support de m .
- iii- Si $f \neq 0$, le nombre $\max \{\deg t_\alpha \mid t_\alpha \in \text{Supp}(f)\}$ est appelé le degré de f et est noté $\deg f$.

Proposition 8.1.2. Propriété universelle [Universal property]

Soit \mathcal{S} une \mathbb{A} -algèbre avec un homomorphisme $\phi : \mathbb{A} \rightarrow \mathcal{S}$, $n \geq 1$ et s_1, \dots, s_n des éléments de \mathcal{S} . Alors il existe un unique homomorphisme d'anneaux $\psi : \mathbb{A}[x_1, \dots, x_n] \rightarrow \mathcal{S}$ tel que $\psi|_{\mathbb{A}} = \phi$ et $\psi(x_i) = s_i$ pour $i = 1, \dots, n$.

Définition 8.1.15. Générateurs d'une \mathbb{A} -algèbre [Generators of an \mathbb{A} -algebra]

Soit \mathcal{S} une \mathbb{A} -algèbre.

- i- Un ensemble $\{s_\lambda \mid \lambda \in \Lambda\}$ d'éléments de \mathcal{S} est appelé un système de générateurs de \mathcal{S} si pour tout élément $s \in \mathcal{S}$ il existe un sous-ensemble fini $\{\lambda_1, \dots, \lambda_t\}$ de Λ et un polynôme $f(x_1, \dots, x_t) \in \mathbb{A}[x_1, \dots, x_t]$ tel que $s = f(s_{\lambda_1}, \dots, s_{\lambda_t})$.
- ii- La \mathbb{A} -algèbre \mathcal{S} est dite de type fini si elle admet un système fini de générateurs.

Corollaire 8.1.1. Description des \mathbb{A} -algèbres de type fini

Une \mathbb{A} -algèbre \mathcal{S} est de type fini si et seulement si il existe un entier $n \in \mathbb{N}$ et un homomorphisme de \mathbb{A} -algèbre surjectif $\phi : \mathbb{A}[x_1, \dots, x_n] \rightarrow \mathcal{S}$. C'est-à-dire chaque \mathbb{A} -algèbre \mathcal{S} de type fini est de la forme $\mathcal{S} \cong \mathbb{A}[x_1, \dots, x_n] / I$ où I est un idéal de $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$.

Définition 8.1.16. Syzygy [Syzygy]

Soit \mathbb{A} un anneau, \mathcal{M} un \mathbb{A} -module et $\mathcal{G} = (g_1, \dots, g_n)$ un t -uple d'éléments de \mathcal{M} .

- i- Un syzygy de \mathcal{G} est un t -uple $(f_1, \dots, f_s) \in \mathbb{A}^s$ tel que $f_1 g_1 + \dots + f_s g_s = 0$.
- ii- L'ensemble de tous les syzygies de \mathcal{G} est un \mathbb{A} -module appelé le premier syzygy module de \mathcal{G} , noté $\text{Syz}_{\mathbb{A}}(\mathcal{G})$ ou $\text{Syz}_{\mathbb{A}}(g_1, \dots, g_s)$.

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Nous introduisons ici la notion d'ordre sur les termes ou les monômes d'une algèbre de polynômes, voir le paragraphe 8.1.3 sur les bases de Gröbner pour plus de détails.

Définition 8.1.17. *Ordre sur les monômes [monomial ordering]*

Un ordre sur les monômes de $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$ est une relation binaire $>$ sur \mathbb{N}^n (ou de manière équivalente sur l'ensemble des monômes $\{x^\alpha, \alpha \in \mathbb{N}^n\}$ de $\mathbb{A}[x_1, \dots, x_n]$) telle que :

- i- $>$ est un ordre total sur \mathbb{N}^n .
- ii- $>$ est compatible avec l'addition, si $(\alpha, \beta, \gamma) \in (\mathbb{N}^n)^3$ alors $\alpha < \beta \implies \alpha + \gamma < \beta + \gamma$.
- iii- $>$ est un well-ordering sur \mathbb{N}^n , i.e. tout sous-ensemble non-vide de \mathbb{N}^n admet un plus petit élément pour $>$.

Lemme 8.1.1. Une relation d'ordre $>$ sur \mathbb{N}^n est un well-ordering si et seulement si chaque suite strictement décroissante de terme général dans \mathbb{N}^n est stationnaire.

Remarque 8.1.2.

Soit \mathbb{K} un corps, $n \geq 1$, $P = \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ un anneau de polynômes, $r \geq 1$, σ un ordre sur les monômes de $\mathbb{T}^n \langle e_1, \dots, e_r \rangle$, $g_1, \dots, g_s \in P^r - \{0\}$, $M = \langle g_1, \dots, g_s \rangle \subseteq P^r$ et $\mathcal{G} = (g_1, \dots, g_s)$. Nous considérons alors le P -module P^s de base canonique $\{\epsilon_1, \dots, \epsilon_s\}$ et l'homomorphisme $\lambda : P^s \rightarrow M$ défini par $\epsilon_j \rightarrow g_j$, pour $1 \leq j \leq s$. Dans ce cas $\text{Syz}_P(\mathcal{G}) = \text{Ker}(\lambda)$.

Propriété 8.1.1.

La suite exacte suivante

$$0 \longrightarrow M \longrightarrow P^r \longrightarrow P^r/M \longrightarrow 0 \quad (8.1.4)$$

s'étend en une suite exacte longue car $\text{Syz}_P(\mathcal{G}) = \text{Ker}(\lambda)$ et $\lambda(P^s) = P^r$. Nous obtenons ainsi :

$$0 \longrightarrow \text{Syz}_P(\mathcal{G}) \longrightarrow P^s \xrightarrow{\lambda} P^r \longrightarrow P^r/M \longrightarrow 0. \quad (8.1.5)$$

8.1.2. Idéaux d'une \mathbb{K} -algèbre de polynômes

Définition 8.1.18. *Espace affine [Affine space]*

Soient un corps \mathbb{K} et n un entier strictement positif, l'espace affine de dimension n sur \mathbb{K} est l'ensemble

$$\mathbb{K}^n = \{(a_1, \dots, a_n) : a_1, \dots, a_n \in \mathbb{K}\}. \quad (8.1.6)$$

\mathbb{K}^1 est appelé « la droite affine » et \mathbb{K}^2 « le plan affine ».

Le lien entre espaces affines et polynômes est le suivant : si le nombre d'indéterminées n intervenant dans un polynôme f de $\mathbb{K}[\mathbf{x}]$ est égal à la dimension d'un espace affine de dimension n sur \mathbb{K} , nous pouvons définir une fonction

$$\tilde{f} : \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{K} \\ (a_1, \dots, a_n) \mapsto \sum_{\alpha} a_{\alpha} \cdot a^{\alpha} \quad (8.1.7)$$

et cette association est injective dès que \mathbb{K} est infini. C'est-à-dire que la seule fonction polynomiale identiquement nulle sur l'espace affine est celle associée au polynôme nul.

Définition 8.1.19. *Variété affine* [Affine variety]

Soient \mathbb{K} un corps et f_1, \dots, f_s des polynômes de $\mathbb{K}[\mathbf{x}]$. Nous posons :

$$\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s) = \{(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{K}^n \mid f_i(a_1, \dots, a_n) = 0 \forall i \in [1, s]\}. \quad (8.1.8)$$

Nous appelons $\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$ la variété affine définie par f_1, \dots, f_s .

Exemples 8.1.1.

- i- $\mathbf{V}(0) = \mathbb{K}^n$, l'espace affine \mathbb{K}^n en entier.
- ii- $\mathbf{V}(\sum_{i=1}^n x_i^2 - 1)$, la sphère de centre 0 et de rayon 1.
- iii- Dans \mathbb{R}^3 , $\mathbf{V}(z^2 - x^2 - y^2)$ est un cône et $\mathbf{V}(y - x^2, z - x^3)$ est une courbe appelée twisted cubic.
- iv- Un système linéaire de m équations à n inconnues est également un type particulier de variété affine de \mathbb{K}^n : une variété linéaire.
- v- Dans \mathbb{R}^2 , la variété affine $\mathbf{V}(x^2 + y^2 + 1) = \emptyset$ et plus généralement la variété affine $\mathbf{V}(xy, xy - 1) = \emptyset$ quelque soit le corps considéré.

Proposition 8.1.3.

Si $V, W \in \mathbb{K}^n$ sont des variétés affines alors il en va de même de $V \cup W$ et $V \cap W$. De plus, si $V = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$ et $W = \mathbf{V}(g_1, \dots, g_t)$ alors nous avons :

$$\begin{aligned} V \cap W &= \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s, g_1, \dots, g_t) \\ V \cup W &= \mathbf{V}(f_i g_j, (i, j) \in [1, s] \times [1, t]). \end{aligned} \quad (8.1.9)$$

Si $V \in \mathbb{K}^n$ et $W \in \mathbb{K}^m$ sont des variétés affines alors il en va de même de $V \times W \in \mathbb{K}^{n+m}$. De plus, si $V = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$ avec $f_i \in \mathbb{K}[\mathbf{x}]$ et $W = \mathbf{V}(g_1, \dots, g_t)$ avec $g_i \in \mathbb{K}[\mathbf{y}]$ alors nous avons :

$$V \times W = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s, g_1, \dots, g_t) \quad (8.1.10)$$

où f_i et g_i sont vus comme des éléments de $\mathbb{K}[\mathbf{x}, \mathbf{y}]$.

Cette proposition implique qu'une intersection finie ou qu'une union finie de variété affines reste une variété affine.

Remarque 8.1.3.

Nous nous demandons alors immédiatement s'il est possible de répondre aux questions suivantes, comme dans le cas des variétés linéaires :

- $\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$ est-il vide, c'est-à-dire le système d'équations polynomiales est-il compatible ?
- $\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$ est-il fini et dans ce cas pouvons-nous déterminer toutes les solutions ?
- Quelle est la « dimension » de $\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$?

Nous verrons par la suite la réponse à ces questions dans les cas qui nous intéressent.

Nous reprenons ici la définition 8.1.5 précédente afin de la mettre en avant puisqu'elle va être à la base de tout ce qui va suivre.

Définition 8.1.20. *Idéal* [Ideal]

Nous appelons idéal une partie non-vide \mathcal{I} d'un anneau commutatif $(\mathbb{A}, +_{\mathbb{A}}, *_{\mathbb{A}})$ si les conditions suivantes sont vérifiées :

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

-i- $\forall (f, g) \in \mathcal{I}^2, f +_{\mathbb{A}} g \in \mathcal{I}$.

-ii- $\forall (f, g) \in \mathbb{A} \times \mathcal{I}, f *_{\mathbb{A}} g \in \mathbb{A}$.

Nous posons $\mathbb{I} = \{\mathcal{I}, \mathcal{I} \text{ idéal de } \mathbb{A}\}$.

Définition 8.1.21.

Soient $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{K}[x]$. Nous posons alors :

$$\langle f_1, \dots, f_s \rangle = \left\{ \sum_{i=1}^s h_i f_i \mid h_1, \dots, h_s \in \mathbb{K}[x] \right\}. \quad (8.1.11)$$

Proposition 8.1.4.

Si $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{K}[\mathbf{x}]$ alors $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$ est un idéal appelé idéal engendré par les f_1, \dots, f_s .

Définition 8.1.22. Base d'un idéal [Ideal basis]

Un idéal \mathcal{I} est engendré par un nombre fini d'éléments s'il existe $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{K}[\mathbf{x}]$ tels que $\mathcal{I} = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$. f_1, \dots, f_s est alors appelé base de \mathcal{I} .

Nous montrerons par la suite que tout idéal de $\mathbb{K}[\mathbf{x}]$ admet une base et qu'un certain type particulier de bases, les bases de Gröbner, nous sera particulièrement utile.

La proposition suivante repose sur l'équivalence entre les systèmes d'équations ci-dessous :

$$\begin{cases} f_1 = 0 \\ \dots \\ f_s = 0 \end{cases} \iff \forall (h_1, \dots, h_s) \in \mathbb{K}[\mathbf{x}]^s, h_1 f_1 + \dots + h_s f_s = 0. \quad (8.1.12)$$

Proposition 8.1.5.

Si f_1, \dots, f_s et g_1, \dots, g_t sont des bases d'un même idéal de $\mathbb{K}[x]$ alors $\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s) = \mathbf{V}(g_1, \dots, g_t)$.

Définition 8.1.23.

Soit $V \subset \mathbb{K}^n$ une variété affine. Nous posons :

$$\mathbf{I}(V) = \{f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n] \mid f(a_1, \dots, a_n) = 0, \forall (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{K}^n\}. \quad (8.1.13)$$

Lemme 8.1.2. Idéal annulateur [Ideal of a variety]

Si $V \subset \mathbb{K}^n$ une variété affine alors $\mathbf{I}(V) \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est un idéal de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Nous l'appelons idéal annulateur de V .

Remarque 8.1.4.

Étant donnés s polynômes f_1, \dots, f_s dans $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, nous considérons la variété affine $\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$ de \mathbb{K}^n puis son idéal annulateur $\mathbf{I}(\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s))$.

Avons-nous $\langle f_1, \dots, f_s \rangle = \mathbf{I}(\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s))$?

La réponse à cette question dépend du corps \mathbb{K} et des polynômes de départ. Nous avons néanmoins toujours la relation ci-dessous.

Lemme 8.1.3.

Si f_1, \dots, f_s sont des éléments de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, alors $\langle f_1, \dots, f_s \rangle \subset \mathbf{I}(\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s))$ et l'égalité peut ne pas avoir lieu.

Exemples 8.1.2.

$\langle x^2, y^2 \rangle \subsetneq \mathbf{I}(\mathbf{V}(x^2, y^2)) = \langle x, y \rangle$.

Proposition 8.1.6. *Caractérisation des variétés par des idéaux*

Soient V et W deux variétés affines de \mathbb{K}^n . Alors :

- i- $V \subset W$ si et seulement si $\mathbf{I}(V) \subset \mathbf{I}(W)$.
- ii- $V = W$ si et seulement si $\mathbf{I}(V) = \mathbf{I}(W)$.

Remarque 8.1.5.

Nous aboutissons à trois problèmes :

- [P_1 Générateurs] Est-ce que tout idéal $I \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ peut s'écrire comme $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$ pour des $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$?
- [P_2 Appartenance] Si f_1, \dots, f_s sont des éléments de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, existe-t-il un algorithme permettant de savoir si un élément f de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est dans $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$?
- [P_3 Nullstellensatz] Étant donnés f_1, \dots, f_s des éléments de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, quelle est la nature exacte de la relation entre $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$ et $\mathbf{I}(\mathbf{V}(f_1, \dots, f_s))$?

En ce qui concerne les polynômes à une indéterminée ($n = 1$), ces trois problèmes sont résolus par l'existence d'un algorithme de division qui nous fournit un quotient et un reste uniques. Or, comme nous allons le voir dans la suite, lorsqu'il y a plusieurs indéterminées mises en jeu, l'algorithme de division généralisé ne conserve plus ces bonnes propriétés à moins qu'il ne soit réalisé avec une base bien choisie.

Nous commençons par quelques considérations techniques, puis nous intéresserons aux résultats que va nous apporter la mise en relation de la géométrie et de l'algèbre.

8.1.3. Bases de Gröbner

Rappelons nos objectifs principaux :

Problèmes 8.1.1.

- i- Tout idéal $I \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ admet-il un ensemble fini de générateurs ? i.e. Existe-t-il $(f_1, \dots, f_s) \in (\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n])^s$ tel que $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$.
- ii- Soit $(I, f) \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n \times \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Avons-nous $f \in I$?
- iii- Résolution des systèmes d'équations polynomiales : déterminer l'ensemble des solutions dans \mathbb{K}^n de

$$f_1(x_1, \dots, x_n) = \dots = f_s(x_1, \dots, x_n) = 0. \tag{8.1.14}$$

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

-iv- Soit $V \subset \mathbb{K}^n$ dont une paramétrisation est :

$$\begin{aligned} x_1 &= g_1(t_1, \dots, t_m) \\ &\vdots \\ x_n &= g_n(t_1, \dots, t_m). \end{aligned} \tag{8.1.15}$$

Si les g_i sont des polynômes ou des fractions rationnelles en les variables t_j , alors V sera une variété affine ou une partie d'une telle variété. Comment trouver un système d'équations polynomiales en les x_i définissant V ?

Les bases de Gröbner permettent de donner une réponse à ces questions sous une forme algorithmique ce qui en fait leur principal intérêt. En effet il est alors possible de recourir au support informatique pour éliminer cette partie souvent laborieuse de l'analyse.

Définition 8.1.24. *Ordre lexicographique* [lexicographic order]

Soient $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ et $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n)$ des éléments de \mathbb{N}^n . Nous disons que $\alpha >^{\text{lex}} \beta$ si lorsque nous parcourons les composantes du vecteur $\alpha - \beta \in \mathbb{N}^n$ de la gauche vers la droite, la première composante non nulle est strictement positive. Par abus de notation nous écrirons que $x^\alpha >^{\text{lex}} x^\beta$ si $\alpha >^{\text{lex}} \beta$.

Définition 8.1.25. *Ordre lexicographique gradué* [graded lexicographic order]

Soient $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ et $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n)$ des éléments de \mathbb{N}^n . Nous avons $\alpha >^{\text{grlex}} \beta$ si :

$$|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i > |\beta| = \sum_{i=1}^n \beta_i, \quad \text{ou} \quad |\alpha| = |\beta| \text{ et } \alpha >^{\text{lex}} \beta. \tag{8.1.16}$$

Définition 8.1.26. *Ordre lexicographique gradué renversé* [graded reverse lexicographic order]

Soient $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ et $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n)$ des éléments de \mathbb{N}^n . Nous disons que $\alpha >^{\text{grevlex}} \beta$ si :

$$|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i > |\beta| = \sum_{i=1}^n \beta_i, \quad \text{ou} \quad |\alpha| = |\beta| \tag{8.1.17}$$

et si lorsque nous parcourons les composantes du vecteur $\alpha - \beta \in \mathbb{N}^n$ de la droite vers la gauche, la première composante non nulle est strictement négative.

Proposition 8.1.7.

- L'ordre lexicographique sur \mathbb{N}^n est un ordre sur les monômes.
- L'ordre lexicographique gradué sur \mathbb{N}^n est un ordre sur les monômes.
- L'ordre lexicographique gradué renversé sur \mathbb{N}^n est un ordre sur les monômes.

Définition 8.1.27. *Un peu de vocabulaire*

Soient $f = \sum_{\alpha} a_{\alpha} x^{\alpha}$ un polynôme non nul de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ et $>$ un ordre sur les degrés.

-i- Le degré multivarié [multidegree] de f est

$$\text{multideg}(f) = \max(\alpha \in \mathbb{N}^n \text{ tel que } a_{\alpha} \neq 0). \tag{8.1.18}$$

-ii- Le coefficient dominant [leading coefficient] de f est

$$\text{LC}(f) = a_{\text{multideg}(f)}. \quad (8.1.19)$$

-iii- Le monôme dominant [leading monomial] de f est

$$\text{LM}(f) = x^{\text{multideg}(f)}. \quad (8.1.20)$$

-iv- Le terme dominant [leading term] de f est

$$\text{LT}(f) = a_{\text{multideg}(f)} \cdot x^{\text{multideg}(f)} = \text{LC}(f) \cdot \text{LM}(f). \quad (8.1.21)$$

Proposition 8.1.8.

Soient $(f, g) \in (\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n])^2$ deux polynômes non nuls. Alors :

- i- $\text{multideg}(f \cdot g) = \text{multideg}(f) + \text{multideg}(g)$.
- ii- Si $f + g \neq 0$, alors $\text{multideg}(f + g) \leq \max(\text{multideg}(f), \text{multideg}(g))$. Si de plus, $\text{multideg}(f) \neq \text{multideg}(g)$ alors l'inégalité précédente se transforme en une égalité.

Pour la suite de cette sous-section, nous supposons avoir choisi un ordre $>$ sur les monômes de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ par rapport auquel toutes les quantités $\text{multideg}(f)$, $\text{LC}(f)$, $\text{LM}(f)$ et $\text{LT}(f)$ seront calculées pour f un polynôme de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$.

Nous cherchons désormais à généraliser l'algorithme de la division euclidienne que nous connaissons dans le cas des algèbres de polynômes à une indéterminée. Le but est d'obtenir un algorithme de division d'un polynôme de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ par $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Nous voulons donc mettre f sous la forme :

$$f = a_1 \cdot f_1 + \dots + a_s \cdot f_s + r, \quad (8.1.22)$$

avec $a_1, \dots, a_s, r \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. L'intérêt principal de la division euclidienne est l'unicité du couple quotient–reste. C'est cette propriété que nous cherchons à obtenir. Comme le montre les exemples suivants, il y a là une difficulté supplémentaire par rapport au cas univarié.

Exemples 8.1.3.

-i- $f = xy^2 + 1$, $f_1 = xy + 1$, $f_2 = y + 1$ et $>$ est l'ordre lexicographique $\overset{\text{lex}}{>}$ pour lequel $x > y$.

$$\begin{array}{l} xy + 1, \quad a_1 : \\ y + 1, \quad a_2 : \\ \quad \quad \quad xy^2 + 1. \end{array} \quad (8.1.23)$$

Les termes dominants de f_1 , $\text{LT}(f_1) = xy$, et de f_2 , $\text{LT}(f_2) = y$, divisent tous les deux le terme dominant de f , $\text{LT}(f) = xy^2$. Nous utilisons alors la réduction par f_1 puisque f_1 est listé en premier. Notons que ce choix arbitraire va s'avérer problématique avec l'exemple suivant.

$$\begin{array}{l} xy + 1, \quad a_1 : \quad y \\ y + 1, \quad a_2 : \\ \quad \quad \quad xy^2 + 1 \\ \quad \quad \quad xy^2 + y \\ \quad \quad \quad - y + 1. \end{array} \quad (8.1.24)$$

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Seul le terme dominant de f_2 , $\text{LT}(f_2) = y$, divise le terme dominant de $f - a_1f_1 = -y + 1$, $\text{LT}(-y + 1) = -y$.

$$\begin{array}{r}
 xy + 1, \quad a_1 : y \\
 y + 1, \quad a_2 : -1 \\
 xy^2 + 1 \\
 xy^2 + y \\
 - y + 1 \\
 - y - 1 \\
 2.
 \end{array} \tag{8.1.25}$$

Puisqu'aucun des termes dominants de f_1 ou f_2 ne divisent plus $f - a_1f_1 - a_2f_2 = 2$. Nous arrêtons l'algorithme ici. Nous obtenons alors :

$$xy^2 + 1 = y(xy + 1) + (-1)(y + 1) + 2. \tag{8.1.26}$$

$a_1 = y$, $a_2 = -1$ et $r = 2$. Nous remarquons que $(a_1, a_2, r) \in (\mathbb{K}[x, y])^3$.

-ii- $f = x^2y + xy^2 + y^2$, $f_1 = xy - 1$, $f_2 = y^2 - 1$ et $>$ est l'ordre lexicographique $>^{\text{lex}}$ pour lequel $x > y$.

$$\begin{array}{r}
 xy - 1, \quad a_1 : \\
 y^2 - 1, \quad a_2 : \\
 x^2y + xy^2 + y^2.
 \end{array} \tag{8.1.27}$$

Le terme dominant de f_1 , $\text{LT}(f_1) = xy$, divise le terme dominant de f , $\text{LT}(f) = x^2y$. Nous utilisons la réduction par f_1 .

$$\begin{array}{r}
 xy - 1, \quad a_1 : x \\
 y^2 - 1, \quad a_2 : \\
 x^2y + xy^2 + y^2 \\
 x^2y - x \\
 xy^2 + x + y^2.
 \end{array} \tag{8.1.28}$$

Les deux termes dominants de f_1 , $\text{LT}(f_1) = xy$ et de f_2 , $\text{LT}(f_2) = y^2$, divisent le terme dominant de $f - a_1f_1 = xy^2 + x + y^2$, $\text{LT}(xy^2 + x + y^2) = xy^2$.

$$\begin{array}{r}
 xy - 1, \quad a_1 : x + y \\
 y^2 - 1, \quad a_2 : \\
 x^2y + xy^2 + y^2 \\
 x^2y - x \\
 xy^2 + x + y^2 \\
 xy^2 - y \\
 x + y^2 + y.
 \end{array} \tag{8.1.29}$$

Puisqu'aucun des termes dominants de f_1 ou f_2 ne divisent plus le terme dominant de $f - a_1f_1 - a_2f_2 = x + y^2 + y$, c'est-à-dire x . Nous le mettons de côté comme

première contribution au reste de la division r .

$$\begin{array}{r}
 xy - 1, \quad a_1 : \quad x + y \\
 y^2 - 1, \quad a_2 : \\
 \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\
 \quad x^2y - x \\
 \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\
 \quad \quad xy^2 - y \\
 \quad \quad \quad x + y^2 + y \\
 \quad \quad \quad y^2 + y \quad \longrightarrow \quad x.
 \end{array} \quad \underline{r} \tag{8.1.30}$$

Nous pouvons alors procéder à une réduction par f_2 puisque y^2 divise y^2 .

$$\begin{array}{r}
 xy - 1, \quad a_1 : \quad x + y \\
 y^2 - 1, \quad a_2 : \quad 1 \\
 \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\
 \quad x^2y - x \\
 \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\
 \quad \quad xy^2 - y \\
 \quad \quad \quad x + y^2 + y \\
 \quad \quad \quad \quad y^2 + y \quad \longrightarrow \quad x \\
 \quad \quad \quad \quad y^2 - 1 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad y + 1 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad 1 \longrightarrow x + y \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad 0 \longrightarrow x + y + 1.
 \end{array} \quad \underline{r} \tag{8.1.31}$$

$$x^2y + xy^2 + y^2 = (x + y)(xy - 1) + 1(y^2 - 1) + x + y + 1. \tag{8.1.32}$$

$a_1 = x + y$, $a_2 = 1$ et $r = x + y + 1$. Nous remarquons que $(a_1, a_2, r) \in (\mathbb{K}[x, y])^3$.

-iii- $f = x^2y + xy^2 + y^2$, $f_1 = y^2 - 1$, $f_2 = xy - 1$ et $>$ est l'ordre lexicographique $\overset{\text{lex}}{>}$ pour lequel $x > y$.

$$\begin{array}{r}
 y^2 - 1, \quad a_1 : \\
 xy - 1, \quad a_2 : \\
 \quad x^2y + xy^2 + y^2.
 \end{array} \tag{8.1.33}$$

Le terme dominant de f_2 , $\text{LT}(f_2) = xy$, divise le terme dominant de f , $\text{LT}(f) = x^2y$. Nous utilisons la réduction par f_2 .

$$\begin{array}{r}
 y^2 - 1, \quad a_1 : \\
 xy - 1, \quad a_2 : \quad x \\
 \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\
 \quad x^2y - x \\
 \quad \quad xy^2 + x + y^2.
 \end{array} \tag{8.1.34}$$

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Les deux termes dominants de f_1 , $\text{LT}(f_1) = y^2$ et de f_2 , $\text{LT}(f_2) = xy$, divisent le terme dominant de $f - a_2 f_2 = xy^2 + x + y^2$, $\text{LT}(xy^2 + x + y^2) = xy^2$.

$$\begin{array}{r}
 y^2 - 1, \quad a_1 : x \\
 xy - 1, \quad a_2 : x \\
 \quad \quad \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\
 \quad \quad \quad x^2y - x \\
 \quad \quad \quad \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad xy^2 - x \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad 2x + y^2.
 \end{array} \tag{8.1.35}$$

Puisqu'aucun des termes dominants de f_1 ou f_2 ne divisent plus le terme dominant de $f - a_1 f_1 - a_2 f_2 = 2x + y^2$, c'est-à-dire $2x$. Nous le mettons de côté comme première contribution au reste de la division r .

$$\begin{array}{r}
 y^2 - 1, \quad a_1 : x \\
 xy - 1, \quad a_2 : x \\
 \quad \quad \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\
 \quad \quad \quad x^2y - x \\
 \quad \quad \quad \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad xy^2 - x \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad 2x + y^2 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad y^2 \quad \quad \longrightarrow 2x.
 \end{array} \tag{8.1.36}$$

Nous pouvons alors procéder à une réduction par f_1 puisque y^2 divise y^2 .

$$\begin{array}{r}
 y^2 - 1, \quad a_1 : x + 1 \\
 xy - 1, \quad a_2 : x \\
 \quad \quad \quad x^2y + xy^2 + y^2 \\
 \quad \quad \quad x^2y - x \\
 \quad \quad \quad \quad \quad xy^2 + x + y^2 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad xy^2 - x \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad 2x + y^2 \\
 \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad y^2 \quad \quad \longrightarrow 2x \\
 \quad y^2 - 1 \\
 \quad 1 \\
 \quad 0 \quad \longrightarrow 2x + 1.
 \end{array} \tag{8.1.37}$$

$$x^2y + xy^2 + y^2 = (x + 1)(y^2 - 1) + x(xy - 1) + 2x + 1. \tag{8.1.38}$$

$a_1 = x + 1$, $a_2 = x$ et $r = 2x + 1$. Nous remarquons que $(a_1, a_2, r) \in (\mathbb{K}[x, y])^3$.

Remarque 8.1.6.

Nous constatons que le reste n'est pas le même dans l'exemple ii et dans l'exemple iii alors que $f = x^2y + xy^2 + y^2$ et $\{f_1, f_2\} = \{xy - 1, y^2 - 1\}$. C'est ici une difficulté qui apparaît lorsque plusieurs indéterminées sont en jeu : l'unicité du reste n'est plus garantie.

Théorème 8.1.1. *Algorithme de division dans $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$*

Soient $>$ un ordre sur les monômes de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ et $F = (f_1, \dots, f_s)$ un s -uplet de polynômes dans $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors chaque $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ peut s'écrire ainsi :

$$f = a_1 \cdot f_1 + \dots + a_s \cdot f_s + r, \tag{8.1.39}$$

avec $a_1, \dots, a_s, r \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ et soit $r = 0$, soit r est une combinaison linéaire à coefficients dans \mathbb{K} de monômes dont aucun n'est divisible par l'un des $\text{LT}(f_1), \dots, \text{LT}(f_s)$. r est un reste de f pour la division par F . De plus, si $a_i f_i \neq 0$ alors nous avons :

$$\text{multideg}(f) \geq \text{multideg}(a_i f_i). \quad (8.1.40)$$

Définition 8.1.1.

Un idéal $I \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est un idéal de monômes s'il existe un sous-ensemble $A \subset \mathbb{N}^n$ (fini ou infini) tel que I soit constitué de tous les polynômes qui sont des sommes finies de la forme $\sum_{\alpha \in A} h_{\alpha} x^{\alpha}$, où $h_{\alpha} \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Dans ce cas nous écrivons $I = \langle x^{\alpha}, \alpha \in A \rangle$. Nous notons $\mathcal{MI}_{\mathbb{K}}^n$ l'ensemble des idéaux de monômes.

Lemme 8.1.4.

Soit $I = \langle x^{\alpha}, \alpha \in A \rangle \in \mathcal{MI}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal de monômes. Alors un monôme x^{β} appartient à I si et seulement si x^{β} est divisible par l'un des x^{α} pour $\alpha \in A$.

Lemme 8.1.5.

Soit $I \in \mathcal{MI}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal de monômes et f un élément de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- i- $f \in I$.
- ii- Tout terme de f est un élément de I .
- iii- f est une combinaison \mathbb{K} -linéaire des monômes de I .

Corollaire 8.1.2.

Deux idéaux de monômes sont égaux si et seulement si ils contiennent les mêmes monômes.

Théorème 8.1.2. Lemme de Dickson

Soit $I = \langle x^{\alpha}, \alpha \in A \rangle \in \mathcal{MI}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal de monômes. Il existe $A_1 \subset A$, $|A_1| < +\infty$, tel que $I = \langle x^{\alpha}, \alpha \in A_1 \rangle$. En particulier, I a une base finie.

Corollaire 8.1.3.

Soit $>$ une relation binaire sur \mathbb{N}^n telle que :

- i- $>$ est un ordre total sur \mathbb{N}^n .
- ii- $>$ est compatible avec l'addition, si $(\alpha, \beta, \gamma) \in (\mathbb{N}^n)^3$ alors $\alpha < \beta \implies \alpha + \gamma < \beta + \gamma$.

Alors $>$ est un well-ordering sur \mathbb{N}^n , si et seulement si $\alpha \geq 0$ pour tout $\alpha \in \mathbb{N}^n$.

Définition 8.1.28.

Soit $I \in \mathcal{I}_{\mathbb{K}}^n$, $I \neq \{0\}$.

- i- Nous notons, $\text{LT}(I)$, l'ensemble des termes dominants des éléments de I .

$$\text{LT}(I) = \{cx^{\alpha}, \exists f \in I \mid \text{LT}(f) = cx^{\alpha}\}. \quad (8.1.41)$$

- ii- Nous notons, $\langle \text{LT}(I) \rangle$ l'idéal engendré par les éléments de $\text{LT}(I)$.

Proposition 8.1.9.

Soit $I \in \mathcal{I}_{\mathbb{K}}^n$.

- i- $\langle \text{LT}(I) \rangle$ est un idéal de monômes.

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

-ii- Il existe $g_1, \dots, g_s \in I$ tels que $\langle \text{LT}(I) \rangle = \langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle$.

Théorème 8.1.3. *Théorème de Hilbert [Hilbert Basis Theorem]*

Chaque idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ admet un ensemble générateur de cardinal fini : il existe $g_1, \dots, g_s \in I$ tels que $I = \langle g_1, \dots, g_s \rangle$.

Définition 8.1.29. *Base de Gröbner [Gröbner Basis]*

Nous fixons un ordre sur les monômes. Un sous-ensemble $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ d'un idéal I est une base de Gröbner si

$$\langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s) \rangle = \langle \text{LT}(I) \rangle. \quad (8.1.42)$$

Corollaire 8.1.4.

Nous fixons un ordre sur les monômes. Alors tout idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ différent de $\{0\}$ admet une base de Gröbner. De plus, toute base de Gröbner d'un idéal I est une base de I .

Théorème 8.1.4.

Toute suite croissante d'idéaux de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est stationnaire.

Définition 8.1.30.

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. Nous notons $\mathbf{V}(I)$ l'ensemble :

$$\mathbf{V}(I) = \{(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{K}^n \mid f(a_1, \dots, a_n) = 0, \forall f \in I\}. \quad (8.1.43)$$

Proposition 8.1.10.

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. Alors $\mathbf{V}(I)$ est une variété affine. En particulier, si $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$, alors $\mathbf{V}(I) = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s)$.

Proposition 8.1.11.

Soit $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ une base de Gröbner pour un idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ et $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors il existe un unique $r \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ qui vérifie les deux propriétés suivantes :

- i- Aucun de r n'est divisible par l'un des $\text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_s)$.
- ii- Il existe un $g \in I$ tel que $f = g + r$.

En particulier, r est le reste de la division de f par le s -uplet G et ne dépend pas de l'ordre avec lequel les éléments de G sont listés lorsque nous effectuons l'algorithme de division.

Corollaire 8.1.5.

Soient $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ une base de Gröbner pour un idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ et $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors $f \in I$ si et seulement si le reste de la division de f par G est nul.

Définition 8.1.31.

Nous notons \overline{f}^F le reste de la division de f par le s -uplet $F = (f_1, \dots, f_s)$. Si F est une base de Gröbner pour $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$, alors il suffit de retenir F comme un ensemble.

Définition 8.1.32.

Soient $f, g \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ des polynômes non nuls.

- i- Si $\text{multideg}(f) = \alpha$ et $\text{multideg}(g) = \beta$, alors soit $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_n)$, où $\gamma_i = \max(\alpha_i, \beta_i)$ pour tout i . Nous appelons x^γ le plus petit commun multiple de $\text{LM}(f)$ et de $\text{LM}(g)$, noté $x^\gamma = \text{LCM}(\text{LM}(f), \text{LM}(g))$.

-ii- Le S -polynôme de f et de g est la combinaison :

$$S(f, g) = \frac{x^\gamma}{\text{LT}(f)} \cdot f - \frac{x^\gamma}{\text{LT}(g)} \cdot g. \quad (8.1.44)$$

Lemme 8.1.6.

Supposons que nous ayons une somme $\sum_{i=1}^s c_i f_i$, avec $c_i \in \mathbb{K}$ et $\text{multideg}(f_i) = \delta \in \mathbb{N}^n$ pour tout i . Si $\text{multideg}(\sum_{i=1}^s c_i f_i) < \delta$, alors $\sum_{i=1}^s c_i f_i$ est une combinaison linéaire à coefficients dans \mathbb{K} des S -polynômes $S(f_j, f_k)$ pour $1 \leq j, k \leq s$. De plus, chaque $S(f_j, f_k)$ a un multidegré $< \delta$.

Théorème 8.1.5.

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. Une base $G = \{g_1, \dots, g_s\}$ de I est une base de Gröbner de I si et seulement si pour toute paire $i \neq j$, le reste de la division de $S(g_i, g_j)$ par G (pour un certain ordre) est nul.

Théorème 8.1.6. Algorithme de Buchberger

Soit $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \neq \{0\}$ un idéal de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors une base de Gröbner pour I peut être construite en un nombre fini d'applications de l'algorithme suivant :

Entrée : $F = (f_1, \dots, f_s)$.

Sortie : une base de Gröbner $G = (g_1, \dots, g_t)$ pour I , avec $F \subset G$.

$G := F$

RÉPÉTER

$G' := G$

POUR toute paire $\{p, q\}$, $p \neq q$ dans G' FAIRE

$S := \overline{S(p, q)}^{G'}$

Si $S \neq 0$ ALORS $G := G \cup \{S\}$

JUSQU'À CE QUE $G = G'$

Lemme 8.1.7.

Soit G une base de Gröbner pour l'idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. Soit $p \in G$ un polynôme tel que $\text{LT}(p) \in \langle \text{LT}(G - \{p\}) \rangle$. Alors $G - \{p\}$ est encore une base de Gröbner pour I .

Définition 8.1.33.

Une base de Gröbner G d'un idéal I est dite minimale si :

-i- $\text{LC}(p) = 1, \forall p \in G$.

-ii- $\forall p \in G, \text{LT}(p) \notin \langle \text{LT}(G - \{p\}) \rangle$.

Proposition 8.1.12. Base de Gröbner réduite [Reduced Gröbner Basis]

Soit $I \neq \{0\}$ un idéal de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors pour tout ordre sur les monômes, il existe une unique base de Gröbner réduite c'est-à-dire minimale au sens de la définition .

Corollaire 8.1.6. Décision de l'égalité de deux idéaux [Ideal equality algorithm]

Deux idéaux I, J de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ sont égaux si et seulement si, pour un ordre sur les monômes fixés, ils ont la même base de Gröbner réduite.

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Corollaire 8.1.7. *Décision de l'appartenance à un idéal [Ideal membership algorithm]*
 Soient $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ et $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ avec $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$. Il existe une base de Gröbner $G = \{g_1, \dots, g_t\}$ associée à I . Nous avons alors :

$$f \in I \iff \bar{f}^G = 0. \quad (8.1.45)$$

Remarque 8.1.7.

Une base de Gröbner pour l'ordre lexicographique permet de résoudre les systèmes d'équations polynomiales de manière semblable à l'algorithme d'élimination des variables du pivot de Gauss.

Exemples 8.1.4.

Nous cherchons à résoudre :

$$\begin{cases} x^2 + y + z = 1, \\ x + y^2 + z = 1, \\ x + y + z^2 = 1. \end{cases} \quad (8.1.46)$$

En posant I l'idéal :

$$I = \langle x^2 + y + z - 1, x + y^2 + z - 1, x + y + z^2 - 1 \rangle, \quad (8.1.47)$$

une base de Gröbner de I pour $\overset{\text{lex}}{>}$, initialisé par $x \overset{\text{lex}}{>} y \overset{\text{lex}}{>} z$, est :

$$\begin{aligned} g_1 &= x + y + z^2 - 1, \\ g_2 &= y^2 - y - z^2 + z, \\ g_3 &= 2yz^2 + z^4 - z^2, \\ g_4 &= z^6 - 4z^4 + 4z^3 - z^2. \end{aligned} \quad (8.1.48)$$

Les solutions du premier système d'équations sont les mêmes que celles de :

$$\begin{cases} g_1 = 0, \\ g_2 = 0, \\ g_3 = 0, \\ g_4 = 0. \end{cases} \quad (8.1.49)$$

Mais puisque g_4 ne comporte que l'indéterminée z , nous obtenons la factorisation suivante :

$$g_4 = z^2(z-1)^2(z^2+2z-1) \quad (8.1.50)$$

et donc

$$g_4 = 0 \iff z \in \{0, 1, -1 \pm \sqrt{2}\}. \quad (8.1.51)$$

Nous en déduisons les valeurs possibles de y puis celles de x . Finalement, en notant \mathcal{S} l'ensemble des solutions :

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = \{ & (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (-1 + \sqrt{2}, -1 + \sqrt{2}, -1 + \sqrt{2}), \\ & (-1 - \sqrt{2}, -1 - \sqrt{2}, -1 - \sqrt{2}) \}. \end{aligned} \quad (8.1.52)$$

Remarque 8.1.1. Nous avons procédé en deux étapes pour aboutir au résultat :

- Nous éliminons le plus de variables possibles et le cas échéant nous nous ramenons à un problème mettant en jeu moins d'indéterminées, ici univarié et formulé à l'aide de g_4 .

- Après avoir résolu l'équation $g_4 = 0$, nous déterminons les valeurs de y puis celles de x possibles afin d'étendre ces solutions à des solutions du problème de départ.

Nous formalisons cette idée avec la théorie de l'élimination.

Définition 8.1.34.

Soit $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, le l -ème idéal d'élimination I_l est l'idéal de $\mathbb{K}[x_{l+1}, \dots, x_n]$ défini par :

$$I_l = I \cap \mathbb{K}[x_{l+1}, \dots, x_n]. \tag{8.1.53}$$

Théorème 8.1.7. *Élimination d'indéterminées* [The elimination theorem]

Soient $I \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ un idéal et G une base de Gröbner de I pour l'ordre lexicographique $\overset{\text{lex}}{>}$, initialisé par $x_1 \overset{\text{lex}}{>} x_2 \overset{\text{lex}}{>} \dots \overset{\text{lex}}{>} x_n$. Alors, pour tout $0 \leq l \leq n$, l'ensemble

$$G_l = G \cap \mathbb{K}[x_{l+1}, \dots, x_n] \tag{8.1.54}$$

est une base de Gröbner du l -ème idéal d'élimination.

Théorème 8.1.8. [The extension theorem]

Soient $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \subset \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ et I_1 le premier idéal d'élimination de I . Pour tout $1 \leq i \leq s$, nous écrivons f_i sous la forme

$$f_i = g_i(x_2, \dots, x_n) x_1^{N_i} + \text{des termes en lesquels } x_1 \text{ a un degré } < N_i, \tag{8.1.55}$$

avec $N_i \geq 0$ et $g_i \in \mathbb{C}[x_2, \dots, x_n]$ est non nul. Nous supposons qu'il existe une solution partielle $(a_2, \dots, a_n) \in \mathbf{V}(I_1)$. Si $(a_2, \dots, a_n) \notin \mathbf{V}(g_1, \dots, g_s)$, alors il existe $a_1 \in \mathbb{C}$ tel que $(a_1, \dots, a_n) \in \mathbf{V}(I)$.

Corollaire 8.1.8.

Soient $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \subset \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ et I_1 le premier idéal d'élimination de I . Nous supposons qu'il existe i_0 , $1 \leq i_0 \leq s$, tel que f_{i_0} puisse s'écrire sous la forme

$$f_{i_0} = c x_1^{N_{i_0}} + \text{des termes en lesquels } x_1 \text{ a un degré } < N_{i_0}, \tag{8.1.56}$$

avec $N_{i_0} > 0$ et la constante $c \in \mathbb{C}$ est non nulle. Nous supposons qu'il existe une solution partielle $(a_2, \dots, a_n) \in \mathbf{V}(I_1)$, alors il existe $a_1 \in \mathbb{C}$ tel que $(a_1, \dots, a_n) \in \mathbf{V}(I)$.

Définition 8.1.35. *Projection d'une variété affine*

Soit $V = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s) \subset \mathbb{C}^n$. Pour éliminer les l premières variables x_1, \dots, x_l , nous introduisons la projection

$$\begin{aligned} \pi_l : \quad \mathbb{C}^n &\rightarrow \mathbb{C}^{n-l} \\ a_1, \dots, a_n &\mapsto a_{l+1}, \dots, a_n \end{aligned} \tag{8.1.57}$$

Ainsi si $V \subset \mathbb{C}^n$, alors $\pi_l(V) \subset \mathbb{C}^{n-l}$.

Lemme 8.1.8.

Soit $I_l = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \cap \mathbb{C}[x_{l+1}, \dots, x_n]$ le l -ème idéal d'élimination de I . Alors, dans \mathbb{C}^{n-l} , nous avons :

$$\pi_l(V) \subset \mathbf{V}(I_l). \tag{8.1.58}$$

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Théorème 8.1.9.

Soit $V = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s) \subset \mathbb{C}^n$. Pour tout $1 \leq i \leq s$, nous écrivons f_i sous la forme

$$f_i = g_i(x_2, \dots, x_n) x_1^{N_i} + \text{des termes en lesquels } x_1 \text{ a un degré } < N_i, \quad (8.1.59)$$

avec $N_i \geq 0$ et $g_i \in \mathbb{C}[x_2, \dots, x_n]$ est non nul.

Si I_1 est le premier idéal d'élimination de $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$ alors nous avons l'égalité suivante dans \mathbb{C}^{n-1} :

$$\mathbf{V}(I_1) = \pi_1(V) \cup (\mathbf{V}(g_1, \dots, g_s) \cap \mathbf{V}(I_1)), \quad (8.1.60)$$

où $\pi_1 : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^{n-1}$ est la projection sur les $n - 1$ dernières composantes.

Théorème 8.1.10. [The Closure Theorem]

Soit $V = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s) \subset \mathbb{C}^n$ et I_l le l -ème idéal d'élimination de $\langle f_1, \dots, f_s \rangle$. Alors :

- i- $\mathbf{V}(I_l)$ est la plus petite variété affine contenant $\pi_l(V) \subset \mathbb{C}^{n-l}$.
- ii- Lorsque $V \neq \emptyset$, il existe une variété affine $W \stackrel{\neq}{\subset} \mathbf{V}(I_l)$ telle que $\mathbf{V}(I_l) - W \subset \pi_l(V)$.

Théorème 8.1.11. [Polynomial Implicitization]

Si \mathbb{K} est un corps infini, $F : \mathbb{K}^m \rightarrow \mathbb{K}^n$ une fonction donnée par une paramétrisation polynomiale :

$$\begin{cases} x_1 = f_1(t_1, \dots, t_m) \\ \vdots \\ x_n = f_n(t_1, \dots, t_m) \end{cases} \quad (8.1.61)$$

où $f_1, \dots, f_n \in \mathbb{K}[t_1, \dots, t_m]$.

Soit $I = \langle x_1 - f_1, \dots, x_n - f_n \rangle \subset \mathbb{K}[t_1, \dots, t_m, x_1, \dots, x_n]$ et $I_m = I \cap \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ le m -ème idéal d'élimination de I . Alors $\mathbf{V}(I_m)$ est la plus petite variété de \mathbb{K}^n contenant $F(\mathbb{K}^m)$.

Théorème 8.1.12. [Rational Implicitization]

Si \mathbb{K} est un corps infini, $F : \mathbb{K}^m - W \rightarrow \mathbb{K}^n$ une fonction donnée par une paramétrisation rationnelle :

$$\begin{cases} x_1 = \frac{f_1(t_1, \dots, t_m)}{g_1(t_1, \dots, t_m)} \\ \vdots \\ x_n = \frac{f_n(t_1, \dots, t_m)}{g_n(t_1, \dots, t_m)} \end{cases} \quad (8.1.62)$$

où $f_1, \dots, f_n, g_1, \dots, g_n \in \mathbb{K}[t_1, \dots, t_m]$ et $W = \mathbf{V}(g_1 g_2 \dots g_n)$.

Soit $J = \langle g_1 x_1 - f_1, \dots, g_n x_n - f_n, 1 - gy \rangle \subset \mathbb{K}[y, t_1, \dots, t_m, x_1, \dots, x_n]$ où $g = g_1 g_2 \dots g_n$ et $J_{m+1} = J \cap \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ le $m + 1$ -ème idéal d'élimination de J . Alors $\mathbf{V}(J_{m+1})$ est la plus petite variété de \mathbb{K}^n contenant $F(\mathbb{K}^m - W)$.

8.1.4. Algorithmes

Proposition 8.1.13. Soit un anneau A , $A[x_1, \dots, x_n]$ un anneau de polynômes à coefficients dans R , $f_1, \dots, f_n \in R$ et $\psi : R[x_1, \dots, x_n] \rightarrow R$ l'homomorphisme d'évaluation défini par $\psi(x_i) = f_i$ pour $i = 1, \dots, n$.

- i- Le noyau de ψ est l'idéal $\langle f_i - x_i, \dots, f_n - x_n \rangle$ de $R[x_1, \dots, x_n]$.

-ii- Pour tout $g \in R[x_1, \dots, x_n]$, il existe $h_1, \dots, h_n \in R[x_1, \dots, x_n]$ tels que :

$$g = \sum_{i=1}^n h_i (x_i - f_i) + g(f_1, \dots, f_n). \quad (8.1.63)$$

8.1.5. Le dictionnaire Algèbre-Géométrie [*The Algebra-Geometry Dictionary*]

Nous commençons par rappeler la définition des opérations de conversion entre idéal et variété affine introduites ci-dessus.

Définition 8.1.36. $\mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ et $\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$

Nous notons $\mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ l'ensemble des variétés affines de \mathbb{K}^n et $\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ l'ensemble des idéaux de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$.

Définition 8.1.37. \mathbf{I} et \mathbf{V}

Nous définissons les deux applications suivantes \mathbf{I} et \mathbf{V} :

$$\begin{aligned} \mathbf{I} : \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n &\rightarrow \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n \\ V &\mapsto \mathbf{I}(V) \end{aligned} \quad (8.1.64)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V} : \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n &\rightarrow \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n \\ I &\mapsto \mathbf{V}(I). \end{aligned} \quad (8.1.65)$$

Remarque 8.1.8.

- L'application \mathbf{V} n'est pas bijective ; $\mathbf{V}(x) = \mathbf{V}(x^2) = 0$ alors que $\langle x \rangle \neq \langle x^2 \rangle$.
- Si \mathbb{K} n'est pas algébriquement clos alors $\mathbf{V}(I)$ peut être vide. Prendre $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ et $I_1 = \langle 1 \rangle = \mathbb{R}[x]$ ou $I_2 = \langle 1 + x^2 \rangle$.

Nous allons voir comment éviter ces deux difficultés.

Le théorème suivant permet de passer la seconde mais pas la première.

Théorème 8.1.13. Zéros faibles [Weak Nullstellensatz]

Soient \mathbb{K} un corps algébriquement clos et $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ tel que $\mathbf{V}(I) = \emptyset$. Alors $I = \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$.

Théorème 8.1.14. Zéros forts [Strong Nullstellensatz]

Soit \mathbb{K} un corps algébriquement clos. Si les polynômes $f, f_1, \dots, f_s \in \mathbb{K}[x]$ sont tels que $f \in \mathbf{V}(\mathbf{I}(f_1, \dots, f_s))$. Alors il existe un entier m supérieur ou égal à 1 tel que $f^m \in \langle f_1, \dots, f_s \rangle$.

Lemme 8.1.9.

Soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$, si $f^m \in \mathbf{I}(V)$, alors $f \in \mathbf{I}(V)$.

Définition 8.1.38. Idéal radical [Radical ideal]

Un idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ est dit radical si quelque soit m supérieur ou égal 1 et f de $\mathbb{K}[x]$ tels que $f^m \in I$, nous avons $f \in I$.

Corollaire 8.1.9.

$\mathbf{I}(\mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n)$ est constitué d'idéaux radicaux.

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Définition 8.1.39. *Radical d'un idéal* [Radical of an ideal]

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. Le radical de I , noté \sqrt{I} , est l'ensemble : $\{f \mid \exists m \in \mathbb{N}^* f^m \in I\}$.

Proposition 8.1.14.

Si $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ alors $\sqrt{I} \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ et \sqrt{I} est un idéal radical.

Nous pouvons alors reformuler le théorème des zéros forts de Hilbert.

Théorème 8.1.15. *Zéros forts* [Strong Nullstellensatz]

Soit \mathbb{K} un corps algébriquement clos. Si $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$, alors :

$$\mathbf{I}(\mathbf{V}(I)) = \sqrt{I}. \quad (8.1.66)$$

Théorème 8.1.16. *La dualité idéal - variété* [Ideal-Variety Correspondence]

Soit \mathbb{K} un corps quelconque.

-i- Les applications \mathbf{I} et \mathbf{V} sont décroissantes au sens de l'inclusion et quelque soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ nous avons :

$$\mathbf{V}(\mathbf{I}(V)) = V. \quad (8.1.67)$$

De sorte que \mathbf{I} est injective.

-ii- Si \mathbb{K} est algébriquement clos, et si nous restreignons \mathbf{I} et \mathbf{V} aux idéaux qui sont radicaux alors \mathbf{I} et \mathbf{V} sont des bijections qui sont mutuellement réciproques.

Remarque 8.1.9.

Les idéaux radicaux se trouvent donc au centre de la problématique géométrique.

- *Générateurs du radical* [Radical Generators]

Il y a-t-il un algorithme qui permet de déterminer un ensemble de générateurs de \sqrt{I} ?

- *Idéal est radical* [Radical Ideal]

Il y a-t-il un algorithme qui permet de déterminer si un idéal est un idéal radical ?

- *Appartenance au radical* [Radical Membership]

Il y a-t-il un algorithme qui permet de déterminer si un polynôme appartient au radical d'un idéal ?

Proposition 8.1.15. *Appartenance au radical* [Radical Membership]

Soit \mathbb{K} un corps quelconque et $I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ un idéal. Alors $f \in \sqrt{I}$ si et seulement si le polynôme constant 1 appartient à l'idéal $\tilde{I} = \langle f_1, \dots, f_s, 1 - yf \rangle \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y]$.

Proposition 8.1.16. *Radical d'un idéal principal*

Soit \mathbb{K} un corps quelconque, $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ et $I = \langle f \rangle$ l'idéal principal engendré par f . Si $f = f_1^{\alpha_1} f_2^{\alpha_2} \cdots f_r^{\alpha_r}$ est la décomposition en produit d'irréductibles de f alors :

$$\sqrt{I} = \sqrt{\langle f \rangle} = \langle f_1 f_2 \cdots f_r \rangle. \quad (8.1.68)$$

Définition 8.1.40. *Polynôme réduit* [Reduced polynomial]

Soit un polynôme $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, nous définissons la réduction de f , notée f_{red} , le polynôme tel que $\langle f_{\text{red}} \rangle = \sqrt{\langle f \rangle}$. Un polynôme est dit réduit ou sans terme carré si $f = f_{\text{red}}$.

Définition 8.1.41. PGCD [GCD]

Soit un polynôme $f, g \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors $h \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est appelé un plus grand commun diviseur (PGCD) de f et g , noté $h = f \wedge g$, si :

-i- h divise f et g .

-ii- Si p est un polynôme qui divise à la fois f et g , alors p divise h .

Proposition 8.1.17.

Nous supposons que \mathbb{K} est un corps qui contient le corps des rationnels \mathbb{Q} et soit $I = \langle f \rangle$ un idéal principal de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Alors $\sqrt{I} = \langle f_{\text{red}} \rangle$, où

$$f_{\text{red}} = \frac{f}{f \wedge \frac{\partial f}{\partial x_1} \wedge \frac{\partial f}{\partial x_2} \cdots \wedge \frac{\partial f}{\partial x_n}}. \quad (8.1.69)$$

Voici quelques opérations élémentaires sur les idéaux dont nous nous servons constamment.

Définition 8.1.42. Somme d'un idéal [Sum of an ideal]

Pour $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, nous appelons somme de I et J , notée $I + J$, l'ensemble suivant :

$$I + J = \{f + g \mid f \in I \text{ et } g \in J\}. \quad (8.1.70)$$

Proposition 8.1.18.

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors $I + J \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. De plus il s'agit du plus petit idéal contenant I et J et si $I = \langle f_1, \dots, f_r \rangle$ et $J = \langle g_1, \dots, g_s \rangle$ alors $I + J = \langle f_1, \dots, f_r, g_1, \dots, g_s \rangle$.

Corollaire 8.1.10.

Si $f_1, \dots, f_r \in \mathbb{K}[x]$ alors :

$$\langle f_1, \dots, f_r \rangle = \langle f_1 \rangle + \dots + \langle f_r \rangle. \quad (8.1.71)$$

Théorème 8.1.17. Somme et variétés

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors $\mathbf{V}(I + J) = \mathbf{V}(I) \cap \mathbf{V}(J)$.

Définition 8.1.43. Produit d'idéaux [Product of ideals]

Pour $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, nous appelons produit de I par J , noté $I \cdot J$, l'idéal suivant :

$$I \cdot J = \langle f \cdot g \mid f \in I \text{ et } g \in J \rangle. \quad (8.1.72)$$

Proposition 8.1.19.

Si $I = \langle f_1, \dots, f_r \rangle$ et $J = \langle g_1, \dots, g_s \rangle$. Alors $I \cdot J$ est engendré par l'ensemble des produits des générateurs de I et J :

$$I \cdot J = \langle f_i \cdot g_j \mid 1 \leq i \leq r, 1 \leq j \leq s \rangle. \quad (8.1.73)$$

Théorème 8.1.18. Produit et variétés

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors $\mathbf{V}(I \cdot J) = \mathbf{V}(I) \cup \mathbf{V}(J)$.

Définition 8.1.44. Intersection d'idéaux [Intersection of ideals]

Pour $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, nous appelons intersection de I et J , noté $I \cap J$, l'ensemble suivant :

$$I \cap J = \{f \mid f \in I \text{ et } f \in J\}. \quad (8.1.74)$$

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Lemme 8.1.10.

- i- Si I est un idéal de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ engendré par $p_1(x), \dots, p_r(x)$ alors $f(t)I$ est un idéal de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, t]$ engendré par $f(t) \cdot p_1(x), \dots, f(t) \cdot p_r(x)$.
- ii- Si $g(x, t) \in f(t)I$ et si a est un élément du corps \mathbb{K} , alors $g(x, a) \in I$.

Théorème 8.1.19. Intersection et élimination

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors :

$$I \cap J = (tI + (1-t)J) \cap \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]. \quad (8.1.75)$$

Remarque 8.1.10. A l'aide de la théorie de l'élimination et des bases de Gröbner nous pouvons calculer algorithmiquement des intersections d'idéaux.

Définition 8.1.45. PPCM [LCM]

Un polynôme h de $\mathbb{K}[x]$ est appelé un plus petit commun multiple de f, g éléments de $\mathbb{K}[x]$, noté $h = \text{PPCM}(f, g)$ si :

- i- f divise h et g divise h .
- ii- h divise tout polynôme que divise à la fois f et g .

Proposition 8.1.20.

- i- L'intersection de deux idéaux principaux I, J de $\mathbb{K}[x]$ est un idéal principal de $\mathbb{K}[x]$.
- ii- Si $I = \langle f \rangle, J = \langle g \rangle$ et $I \cap J = \langle h \rangle$, alors $h = \text{PPCM}(f, g)$.

Remarque 8.1.11.

L'algorithme permettant d'obtenir l'intersection de deux idéaux trouve ici une autre application puisqu'il permet le calcul du PPCM de deux polynômes.

Proposition 8.1.21.

Soit $f, g \in \mathbb{K}[x]$. Alors :

$$\text{PPCM}(f, g) \cdot \text{PGCD}(f, g) = f \cdot g. \quad (8.1.76)$$

Théorème 8.1.20. Variété et union

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors :

$$\mathbf{V}(I \cap J) = \mathbf{V}(I) \cup \mathbf{V}(J). \quad (8.1.77)$$

Proposition 8.1.22. Radical et intersection

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors :

$$\sqrt{I \cap J} = \sqrt{I} \cap \sqrt{J}. \quad (8.1.78)$$

Proposition 8.1.23.

Si $S \in \mathbb{K}^n$, la variété affine $\mathbf{V}(\mathbf{I}(S))$ est la plus petite variété contenant S .

Définition 8.1.46. Fermeture de Zariski [Zariski closure]

La fermeture de Zariski d'un sous-ensemble d'un espace affine est la plus petite variété algébrique affine qui contient cet ensemble. Si $S \in \mathbb{K}^n$, la fermeture de Zariski de S , notée \overline{S} , est égale à $\mathbf{V}(\mathbf{I}(S))$.

Théorème 8.1.21. *Projection, fermeture et élimination*

Soit \mathbb{K} un corps algébriquement clos. Nous supposons que $V = \mathbf{V}(f_1, \dots, f_s) \in \mathbb{K}^n$. Posons $\pi_l : \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{K}^{n-l}$ la projection sur les $n - l$ dernières composantes. Si I_l est le $l^{\text{ème}}$ idéal d'élimination, $I_l = \langle f_1, \dots, f_s \rangle \cap \mathbb{K}[x_{l+1}, \dots, x_n]$, alors $\mathbf{V}(I_l)$ est la fermeture de Zariski de $\pi_l(V)$.

Proposition 8.1.24.

Si V et W sont deux variétés avec $V \subset W$, alors $W = V \cup (\overline{W - V})$.

Définition 8.1.47. *Idéal quotient [colon ideal]*

Pour $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors $I : J$ est l'ensemble

$$\{f \in \mathbb{K}[x] \mid f \cdot g \in I, \forall g \in J\}. \quad (8.1.79)$$

C'est un idéal appelé idéal quotient de I par J .

Proposition 8.1.25.

Si $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors $I : J \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ et $I : J$ contient I .

Théorème 8.1.22.

Soit $(I, J) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^2$. Alors :

$$\mathbf{V}(I : J) \supset \overline{\mathbf{V}(I) - \mathbf{V}(J)}. \quad (8.1.80)$$

Si, de plus, \mathbb{K} est algébriquement clos et I est un idéal radical, alors :

$$\mathbf{V}(I : J) = \overline{\mathbf{V}(I) - \mathbf{V}(J)}. \quad (8.1.81)$$

Corollaire 8.1.11.

Si $(V, W) \in (\mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n)^2$, alors :

$$\mathbf{I}(V) : \mathbf{I}(W) = \mathbf{I}(V - W). \quad (8.1.82)$$

Proposition 8.1.26.

Soit $(I, J, K) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n)^3$. Alors :

- i- $I : \mathbb{K}[x] = I$.
- ii- $I \cdot J \subset K$ si et seulement si $I \subset K : J$.
- iii- $J \subset I$ si et seulement si $I : J = \mathbb{K}[x]$.

Proposition 8.1.27.

Soit $(I, I_i, J, J_i, K) \in (\mathbb{I}_{\mathbb{K}}^{2r+3})$. Alors :

$$\begin{aligned} \left(\bigcap_{i=1}^r I_i \right) : J &= \bigcap_{i=1}^r (I_i : J), \\ I : \left(\sum_{i=1}^r J_i \right) &= \bigcap_{i=1}^r (I : J_i), \\ (I : J) : K &= I : (J \cdot K). \end{aligned} \quad (8.1.83)$$

Théorème 8.1.23.

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ et $g \in \mathbb{K}[x]$. Si $\{h_1, \dots, h_p\}$ est une base de l'idéal $I \cap \langle g \rangle$, alors $\left\{ \frac{h_1}{g}, \dots, \frac{h_p}{g} \right\}$ est une base de l'idéal $I : \langle g \rangle$.

Remarque 8.1.12.

Ce théorème ainsi que la procédure obtenue ci-dessus pour calculer l'intersection d'idéaux permet d'obtenir un algorithme pour le calcul des idéaux quotients.

Définition 8.1.48. Variété irréductible [Irreducible variety]

Une variété affine $V \subset \mathbb{K}^n$ est dite irréductible si dès que V s'écrit $V = V_1 \cup V_2$, où V_1 et V_2 sont des variétés affines, nous avons soit $V_1 = V$ ou $V_2 = V$.

Définition 8.1.49. Idéal premier [Prime ideal]

Un idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ est dit premier si :

$$(f, g \in \mathbb{K}[x] \text{ et } f \cdot g \in I) \implies (f \in I \text{ ou } g \in I). \quad (8.1.84)$$

Proposition 8.1.28.

Soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ une variété affine. Alors V est irréductible si et seulement si $\mathbf{I}(V)$ est un idéal premier.

Corollaire 8.1.12.

Si \mathbb{K} est algébriquement clos, les fonctions \mathbf{I} et \mathbf{V} induisent une correspondance bijective entre les variétés irréductibles de \mathbb{K}^n et les idéaux premiers de $\mathbb{K}[x]$.

Proposition 8.1.29.

Si \mathbb{K} est un corps infini et $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ une variété affine définie paramétriquement par :

$$\begin{aligned} x_1 &= f_1(t_1, \dots, t_m), \\ &\vdots \\ x_n &= f_n(t_1, \dots, t_m), \end{aligned} \quad (8.1.85)$$

où (f_1, \dots, f_n) sont des polynômes de $\mathbb{K}[t_1, \dots, t_m]$, alors V est irréductible.

Proposition 8.1.30.

Si \mathbb{K} est un corps infini et $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ une variété affine définie par la paramétrisation rationnelle suivante :

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{f_1(t_1, \dots, t_m)}{g_1(t_1, \dots, t_m)}, \\ &\vdots \\ x_n &= \frac{f_n(t_1, \dots, t_m)}{g_n(t_1, \dots, t_m)}, \end{aligned} \quad (8.1.86)$$

où $(f_1, \dots, f_n, g_1, \dots, g_n)$ sont des polynômes de $\mathbb{K}[t_1, \dots, t_m]$, alors V est irréductible.

Définition 8.1.50. Idéal maximal [Maximal ideal]

Un idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ est dit maximal si $I \neq \mathbb{K}[x]$ et si pour tout idéal J contenant I nous avons $J = I$ ou $J = \mathbb{K}[x]$.

Définition 8.1.51. Idéal propre [Proper Ideal]

Un idéal est dit propre si I n'est pas égal à $\mathbb{K}[x]$ tout entier.

Proposition 8.1.31.

Si \mathbb{K} est un corps quelconque, un idéal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ de la forme

$$I = \langle x_1 - a_1, \dots, x_n - a_n \rangle, \quad (8.1.87)$$

où $(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{K}^n$, est maximal.

Proposition 8.1.32.

Si \mathbb{K} est un corps, un idéal maximal $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ est premier.

Théorème 8.1.24.

Si \mathbb{K} est un corps algébriquement clos, alors tout idéal maximal I de $\mathbb{K}[x]$ est de la forme

$$I = \langle x_1 - a_1, \dots, x_n - a_n \rangle \quad (8.1.88)$$

avec $(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{K}^n$.

Corollaire 8.1.13.

Si \mathbb{K} est un corps algébriquement clos, alors il y a une correspondance bijective entre les points de \mathbb{K}^n et les idéaux maximaux de $\mathbb{K}[x]$.

Proposition 8.1.33. [The descending chain condition]

Tout chaîne décroissante de variétés affines $(V_{k+1})_{k \in \mathbb{N}} \in (\mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n)^{\mathbb{N}}$ où

$$V_1 \subset V_2 \subset V_3 \subset \dots, \quad (8.1.89)$$

est stationnaire, i.e. il existe $N \in \mathbb{N}$ tel que $\forall k \geq N, V_k = V_N$.

Théorème 8.1.25.

Soit $V \in \mathbb{K}^n$ une variété affine. Alors V peut s'écrire comme une union finie

$$V = V_1 \cup \dots \cup V_m, \quad (8.1.90)$$

où chaque V_i est une variété irréductible.

Définition 8.1.52.

Soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ une variété affine. Une décomposition

$$V = V_1 \cup \dots \cup V_m, \quad (8.1.91)$$

où chaque V_i est une variété irréductible est appelée décomposition minimale si $i \neq j \implies V_i \neq V_j$.

Théorème 8.1.26.

Soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ une variété affine. Alors V a une décomposition minimale

$$V = V_1 \cup \dots \cup V_m, \quad (8.1.92)$$

(où chaque V_i est une variété irréductible et $i \neq j \implies V_i \neq V_j$). De plus, cette décomposition minimale est unique à l'ordre des m facteurs V_1, \dots, V_m près.

Théorème 8.1.27. Décomposition minimale [Minimal decomposition]

Si \mathbb{K} est algébriquement clos, alors chaque idéal radical dans $\mathbb{K}[x]$ peut s'écrire comme l'intersection d'un nombre fini d'idéaux premiers, $I = P_1 \cap \dots \cap P_r$, où $i \neq j \implies P_i \neq P_j$, et cette décomposition est unique. Nous l'appelons décomposition minimale de l'idéal radical I .

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Théorème 8.1.28.

Si \mathbb{K} est algébriquement clos et I est un idéal propre et radical tel que

$$I = \bigcap_{i=1}^r P_i \quad (8.1.93)$$

soit la décomposition minimale de I en tant qu'intersection d'idéaux premiers, alors les P_i sont exactement les idéaux propres premiers qui appartiennent à l'ensemble

$$\{I : f, f \in \mathbb{K}[x]\}. \quad (8.1.94)$$

Remarque 8.1.2.

Nous résumons tout ceci dans le tableau suivant. Le corps \mathbb{K} sous-jacent est supposé algébriquement clos et les idéaux radicaux.

ALGEBRA		GEOMETRY	
idéaux radicaux			variétés
I	\longrightarrow	$\mathbf{V}(I)$	
$\mathbf{I}(V)$	\longleftarrow	V	
addition d'idéaux		intersection d'idéaux	
$I + J$	\longrightarrow	$\mathbf{V}(I) \cap \mathbf{V}(J)$	
$\sqrt{\mathbf{I}(V) + \mathbf{I}(W)}$	\longleftarrow	$V \cap W$	
produit d'idéaux		union de variétés	
$I \cdot J$	\longrightarrow	$\mathbf{V}(I) \cup \mathbf{V}(J)$	
$\sqrt{\mathbf{I}(V) \cdot \mathbf{I}(W)}$	\longleftarrow	$V \cup W$	
quotient d'idéaux		différence de variétés	
$I : J$	\longrightarrow	$\overline{\mathbf{V}(I) - \mathbf{V}(J)}$	
$\mathbf{I}(V) : \mathbf{I}(W)$	\longleftarrow	$\overline{V - W}$	
élimination de variables		projection de variétés	
$\sqrt{I \cap \mathbb{K}[x_{l+1}, \dots, x_n]}$	\longleftrightarrow	$\pi_l(\overline{\mathbf{V}(I)})$	
idéal premier		variété irréductible	
idéal maximal		point d'un espace affine	
chaîne ascendante stationnaire		chaîne descendante stationnaire	

Définition 8.1.53. [Polynomial mapping]

Soit $(V, W) \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ deux variétés affines. Une fonction $\phi : V \rightarrow W$ est une application polynomiale s'il existe des polynômes f_1, \dots, f_n éléments de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_m]$ tels que

$$\phi(a_1, \dots, a_m) = (f_1(a_1, \dots, a_m), \dots, f_n(a_1, \dots, a_m)) \quad (8.1.95)$$

pour tout $(a_1, \dots, a_m) \in V$. Nous disons alors que le n -uple de polynômes

$$(f_1, \dots, f_n) \in (\mathbb{K}[x_1, \dots, x_m]) \quad (8.1.96)$$

représente ϕ .

Proposition 8.1.34.

Soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^m$ une variété affine. Alors

-i- f et g , deux éléments de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_m]$, représentent la même fonction polynomiale sur V si et seulement si $f - g \in \mathbf{I}(V)$.

-ii- (f_1, \dots, f_n) et (g_1, \dots, g_n) représentent la même application polynomiale de V dans \mathbb{K}^n si et seulement si $f_i - g_i \in \mathbf{I}(V)$ pour tout i , $1 \leq i \leq n$.

Définition 8.1.54. $\mathbb{K}[V]$

Nous appelons $\mathbb{K}[V]$ l'ensemble des fonctions polynomiales $\phi : V \rightarrow \mathbb{K}$.

Proposition 8.1.35. Variété, idéal et $\mathbb{K}[V]$.

Soit $V \in \mathbb{V}_{\mathbb{K}}^n$ une variété affine. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- i- V est irréductible.
- ii- $\mathbf{I}(V)$ est un idéal premier.
- iii- $\mathbb{K}[V]$ est anneau intègre.

Définition 8.1.55. Congruent modulo I [Congruent modulo I]

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal et $(f, g) \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^2$. Nous disons que f et g sont congruents modulo I , nous notons

$$f \equiv g \pmod{I}, \quad (8.1.97)$$

si $f - g \in I$.

Proposition 8.1.36.

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal. La congruence modulo I est une relation d'équivalence sur l'algèbre $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$.

Proposition 8.1.37.

Les fonctions polynomiales $\phi : V \rightarrow \mathbb{K}$ sont en correspondance bijective avec les classes d'équivalence de polynômes pour la relation de congruence modulo $\mathbf{I}(V)$.

Définition 8.1.56. Classe de f modulo I

Pour $f \in \mathbb{K}[x]$, nous appelons la classe de f modulo I , notée $[f]_I$, l'ensemble :

$$[f]_I = \{g \in \mathbb{K}[x], g \equiv f \pmod{I}\}. \quad (8.1.98)$$

Définition 8.1.57. Quotient de $\mathbb{K}[x]$ modulo I [Quotient of $\mathbb{K}[x]$ modulo I]

Le quotient de $\mathbb{K}[x]$ modulo I , noté $\mathbb{K}[x]/I$, est l'ensemble des classes d'équivalence pour la congruence modulo I :

$$\mathbb{K}[x]/I = \{[f]_I, f \in \mathbb{K}[x]\}. \quad (8.1.99)$$

Définition 8.1.58. Opérations dans $\mathbb{K}[x]/I$

Nous définissons :

- i- l'addition : $[f] +_I [g] = [f + g]$, à partir de l'addition dans $\mathbb{K}[x]$,
- ii- la multiplication : $[f] \cdot_I [g] = [f \cdot g]$, à partir de la multiplication dans $\mathbb{K}[x]$.

Proposition 8.1.38. Les opérations ci-dessus, $+_I$ et \cdot_I , sont bien définies sur les classes d'équivalence.

Théorème 8.1.29. Anneau quotient [Quotient ring]

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$. Le quotient $\mathbb{K}[x]/I$ muni des lois $+_I$ et \cdot_I est un anneau commutatif.

Théorème 8.1.30.

La correspondance bijective entre les éléments de $\mathbb{K}[V]$ et les éléments de $\mathbb{K}[x]/\mathbf{I}(V)$ est compatible avec la structure d'anneau.

Proposition 8.1.39.

Soit I un idéal de $\mathbb{K}[x]$. Les idéaux de l'anneau quotient $\mathbb{K}[x]/I$ sont en correspondance bijective avec les idéaux de $\mathbb{K}[x]$ contenant I .

Corollaire 8.1.14. *Type fini*

Chaque idéal de l'anneau quotient $\mathbb{K}[x]/I$ est engendré par un nombre fini d'éléments.

Proposition 8.1.40.

Soit un ordre sur les monômes de $\mathbb{K}[x]$ et $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal. Notons $\langle \text{LT}(I) \rangle$, l'idéal engendré par l'ensemble contenant le terme de plus haut degré de chaque polynôme f élément de I .

- i- Chaque élément $f \in \mathbb{K}[x]$ est congru modulo I à un unique polynôme r qui est une combinaison \mathbb{K} -linéaire des monômes appartenant au complémentaire de $\langle \text{LT}(I) \rangle$.
- ii- Les éléments $\{x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle\}$ sont linéairement indépendants modulo I . C'est-à-dire, si

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha} x^{\alpha} \equiv 0 \pmod{I}, \tag{8.1.100}$$

où les x^α qui apparaissent dans la somme appartiennent au complémentaire de $\langle \text{LT}(I) \rangle$, alors $c_{\alpha} = 0$ pour tout α .

Proposition 8.1.41.

Soit $I \in \mathbb{I}_{\mathbb{K}}^n$ un idéal. Alors $\mathbb{K}[x]/I$ est isomorphe en tant que \mathbb{K} -espace vectoriel à $S = \text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle)$.

Proposition 8.1.42. *Calcul des opérations dans $\mathbb{K}[x]/I$*

Soit I un idéal dans $\mathbb{K}[x]$ et G une base de Gröbner pour I pour un ordre sur les monômes arbitraire. Pour chaque $[f] \in \mathbb{K}[x]/I$, nous obtenons le représentant $\bar{f} = \overline{f}^G$ dans $S = \text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle)$. Nous avons alors les relations suivantes :

- i- le représentant de $[f] + [g]$ est $\bar{f} + \bar{g}$ et
- ii- le représentant de $[f] \cdot [g]$ est $\overline{\bar{f} \cdot \bar{g}}^G \in S$.

Nous arrivons maintenant à un algorithme permettant de savoir si une variété ne contient qu'un nombre fini de points.

Théorème 8.1.31. Soit $V = \mathbf{V}(I)$ une variété affine dans \mathbb{C}^n et fixons un ordre sur les monômes de $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$. Alors les assertions suivantes sont équivalentes :

- i- V est un ensemble fini.
- ii- Pour chaque $i, 1 \leq i \leq n$, il existe $m_i \geq 0$ telle que $x_i^{m_i} \in \langle \text{LT}(I) \rangle$.
- iii- Soit G une base de Gröbner pour I . Alors pour chaque $i, 1 \leq i \leq n$, il existe $m_i \geq 0$ tel que $x_i^{m_i} = \text{LM}(g)$ pour un $g \in G$.
- iv- Le \mathbb{C} -espace vectoriel $S = \text{Vect}(x^\alpha, x^\alpha \notin \langle \text{LT}(I) \rangle)$ est de dimension finie.
- v- Le \mathbb{C} -espace vectoriel $\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]/I$ est de dimension finie.

Corollaire 8.1.15.

Soit $I \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ un idéal tel que pour chaque i il existe m_i tel que $x_i^{m_i} \in \langle \text{LT}(I) \rangle$. Alors le nombre de points de $\mathbf{V}(I)$ est inférieur ou égal à $m_1 \cdot m_2 \cdots m_n$.

Proposition 8.1.43.

Soit $I \in \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ un idéal tel que $V = \mathbf{V}(I)$ est un ensemble fini.

- i- Le nombre de points de V est au plus $\dim_{\mathbb{C}}(\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]/I)$.
- ii- Si I est un idéal radical, alors le nombre de points de V est égal à la dimension $\dim_{\mathbb{C}}(\mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]/I)$.

8.1.6. Invariants des groupes finis

Définition 8.1.59. Polynômes symétriques [Symetric polynomials]

Un polynôme $f \in \mathbb{K}[x]$ est symétrique si

$$f(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}) = f(x_1, \dots, x_n) \tag{8.1.101}$$

pour toute permutation possible x_{i_1}, \dots, x_{i_n} des variables x_1, \dots, x_n .

Définition 8.1.60. Polynômes symétriques élémentaires

Nous définissons $(\sigma_1, \dots, \sigma_n) \in (\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n])^n$ par :

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= x_1 + \dots + x_n, \\ &\vdots \\ \sigma_r &= \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_r} x_{i_1} \cdot x_{i_2} \cdots x_{i_r}, \\ &\vdots \\ \sigma_n &= x_1 \cdot x_2 \cdots x_n. \end{aligned} \tag{8.1.102}$$

Théorème 8.1.32.

Tout polynôme symétrique de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ s'écrit de manière unique comme un polynôme en les polynômes symétriques élémentaires $\sigma_1, \dots, \sigma_n$.

Proposition 8.1.44.

Dans l'anneau $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n]$, nous choisissons un ordre sur les monômes tels que tout monôme dans lequel apparaît l'une des indéterminées x_1, \dots, x_n est supérieur à tout monôme de $\mathbb{K}[y_1, \dots, y_n]$. Soit G une base de Gröbner de l'idéal $\langle \sigma_1 - y_1, \dots, \sigma_n - y_n \rangle$ inclus dans $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n]$. Soit $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, et $g = \overline{f}^G$ le reste de la division de f par G . Alors :

- i- f est symétrique si et seulement si $g \in \mathbb{K}[y_1, \dots, y_n]$.
- ii- Si f est symétrique, alors $f = g(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ est l'unique expression de f comme polynôme en les polynômes symétriques élémentaires $\sigma_1, \dots, \sigma_n$.

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

Proposition 8.1.45.

Nous considérons $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n]$ muni de l'ordre lexicographique $x_1 > \dots > x_n > y_1 > \dots > y_n$. Les polynômes

$$g_k = h_k(x_k, \dots, x_n) + \sum_{i=1}^k (-1)^i h_{k-i}(x_k, \dots, x_n) y_i, \quad k = 1, \dots, n \quad (8.1.103)$$

forment une base de Gröbner de l'idéal $\langle \sigma_1 - y_1, \dots, \sigma_n - y_n \rangle$.

Définition 8.1.61.

Un polynôme $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est homogène de degré total k dès que tous les termes apparaissant dans f sont de degré total k .

Proposition 8.1.46.

Un polynôme $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est symétrique si et seulement si toutes ses composantes homogènes sont symétriques.

Définition 8.1.62. Sommes de puissances k -èmes

Nous définissons $(s_1, \dots, s_n) \in (\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n])^n$ par :

$$s_k = x_1^k + \dots + x_n^k, \quad 1 \leq k \leq n. \quad (8.1.104)$$

Théorème 8.1.33.

Si \mathbb{K} est un corps contenant le corps des nombres rationnels \mathbb{Q} , alors tout polynôme symétrique de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ peut s'écrire comme un polynôme en les sommes de puissances k -èmes s_1, \dots, s_n .

Définition 8.1.63.

Soit $\text{GL}(n, \mathbb{K})$ l'ensemble de toutes les matrices carrées de taille $n \times n$ à termes dans le corps \mathbb{K} .

Définition 8.1.64.

Un sous-ensemble fini $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ est un groupe fini de matrices dès qu'il est non vide et qu'il s'agit d'une partie stable pour la multiplication matricielle. Le nombre des éléments de G est appelé l'ordre de G , noté $|G|$.

Proposition 8.1.47.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices. Alors :

- i- $I_n \in G$.
- ii- Si $A \in G$, alors il existe $m \in \mathbb{N}^*$ tel que $A^m = I_n$.
- iii- Si $A \in G$, alors $A^{-1} \in G$.

Définition 8.1.65.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices. Alors un polynôme $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est invariant sous l'action de G si

$$f(x) = f(A \cdot x) \quad (8.1.105)$$

pour tout $A \in G$. L'ensemble des polynômes invariants est noté $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$.

Exemples 8.1.5.

$$\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^{\mathcal{S}_n} = \mathbb{K}[\sigma_1, \dots, \sigma_n]. \quad (8.1.106)$$

Proposition 8.1.48.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices. Alors $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$ est stable pour l'addition, la multiplication et contient les polynômes constants.

Proposition 8.1.49.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices. Un polynôme $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est G -invariant si et seulement si toutes ses composantes homogènes sont G -invariantes.

Proposition 8.1.50.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices et $\{A_1, \dots, A_m\} \subset G$ une partie génératrice de G . Alors $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ est G -invariant si et seulement si :

$$f(x) = f(A_1 \cdot x) = \dots = f(A_m \cdot x). \quad (8.1.107)$$

Définition 8.1.66.

Soit $f_1, \dots, f_m \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, et soit $\mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ le sous-ensemble de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ constitué de toutes les expressions polynomiales en les f_1, \dots, f_m à coefficients dans \mathbb{K} .

Définition 8.1.67.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices, l'opérateur de Reynolds associé à G est l'application R_G définie ainsi :

$$\begin{aligned} R_G : \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n] &\rightarrow \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n] \\ f(\mathbf{x}) &\mapsto R_G(f)(\mathbf{x}) = \frac{1}{|G|} \sum_{A \in G} f(A \cdot \mathbf{x}). \end{aligned} \quad (8.1.108)$$

Proposition 8.1.51.

Soit R_G l'opérateur de Reynolds associé au groupe fini de matrices G .

- i- R_G est \mathbb{K} -linéaire.
- ii- Si $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$, alors $R_G(f) \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$.
- iii- Si $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$, alors $R_G(f) = f$.

Théorème 8.1.34.

Soit $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ un groupe fini de matrices. Nous avons alors :

$$\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n] = \mathbb{K}[R_G(x^\beta), |\beta| \leq |G|]. \quad (8.1.109)$$

En particulier, $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$ est engendré par un nombre fini d'invariants homogènes.

Proposition 8.1.52.

Fixons $f_1, \dots, f_m \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ et un ordre sur les monômes de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m]$ pour lequel un monôme contenant l'une quelconque des indéterminées x_1, \dots, x_n est supérieur à tous les monômes de $\mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$. Soit G une base de Gröbner de l'idéal $\langle f_1 - y_1, \dots, f_m - y_m \rangle \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m]$. Considérons $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$ et $g = \overline{f}^G$ le reste de f par la division par G . Alors :

8.1 Un détour par l'algèbre moderne

- i- $f \in \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ si et seulement si $g \in \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$.
- ii- Si $f \in \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ alors $f = g(f_1, \dots, f_m)$ est une expression de f comme polynôme en les f_1, \dots, f_m .

Problème de l'écriture unique de la décomposition :

Définition 8.1.68. *L'idéal des relations I_F*

Pour $F = (f_1, \dots, f_m) \in (\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n])^n$, nous posons l'ensemble I_F :

$$I_F = \{h \in \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m], h(f_1, \dots, f_m) = 0_{\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]}\}. \quad (8.1.110)$$

Proposition 8.1.53.

Soit $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ et $I_F \subset \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$ pour $F = (f_1, \dots, f_m)$. Alors :

- i- I_F est un idéal premier de $\mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$.
- ii- Si $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$ et si $f = g(f_1, \dots, f_m)$ est une écriture de f comme polynôme en les f_1, \dots, f_m , alors toutes les écritures s'obtiennent par la formule suivante :

$$f = g(f_1, \dots, f_m) + h(f_1, \dots, f_m), \quad (8.1.111)$$

où h décrit I_F .

Proposition 8.1.54. *Description de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$*

Soit $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ et $I_F \subset \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$ pour $F = (f_1, \dots, f_m)$ l'idéal des relations. Il y a alors un isomorphisme d'anneaux

$$\mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]/I_F \cong \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G \quad (8.1.112)$$

entre le quotient de $\mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$ par I_F et l'anneau des invariants $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$.

Proposition 8.1.55.

Si $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ considérons l'idéal

$$J_F = \langle f_1 - y_1, \dots, f_m - y_m \rangle \subset \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m]. \quad (8.1.113)$$

- i- I_F est le n -ème idéal d'élimination de J_F . Ainsi, $I_F = J_F \cap \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$.
- ii- Fixons un ordre sur les monômes de $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m]$ pour lequel un quelconque monôme contenant l'un des x_1, \dots, x_n est plus grand que tous les monômes de $\mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$. Soit G un base de Gröbner de J_F . Alors $G \cap \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$ est une base de Gröbner de I_F pour l'ordre sur les monômes induit sur $\mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$.

Définition 8.1.69. V_F

Soit $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ et $I_F \subset \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$ pour $F = (f_1, \dots, f_m)$ l'idéal des relations. Alors la variété affine

$$V_F = \mathbf{V}(I_F) \subset \mathbb{K}^m. \quad (8.1.114)$$

Proposition 8.1.56.

Soit $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$ et $I_F \subset \mathbb{K}[y_1, \dots, y_m]$ pour $F = (f_1, \dots, f_m)$ l'idéal des relations et V_F la variété affine associée.

-i- V_F est la plus petite variété de \mathbb{K}^n contenant la paramétrisation

$$\begin{aligned} y_1 &= f_1(x_1, \dots, x_n) \\ &\vdots \\ y_m &= f_m(x_1, \dots, x_n). \end{aligned} \tag{8.1.115}$$

-ii- $I_F = \mathbf{I}(V_F)$, de telle sorte que I_F est l'idéal annulateur de toutes les fonctions polynomiales s'annulant sur V_F .

-iii- V_F est une variété irréductible.

-iv- Soit $\mathbb{K}[V_F]$ l'anneau des coordonnées de V_F . Alors il y a un isomorphisme d'anneau.

$$\mathbb{K}[V_F] \cong \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G. \tag{8.1.116}$$

Lemme 8.1.11.

Si $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m] = \mathbb{K}[f'_1, \dots, f'_{m'}]$, posons $F = (f_1, \dots, f_m)$ et $F' = (f'_1, \dots, f'_{m'})$. Alors $V_F \subset \mathbb{K}^m$ et $V_{F'} \subset \mathbb{K}^{m'}$ sont isomorphes.

Pour la suite, nous supposons que \mathbb{K} est algébriquement clos.

Définition 8.1.70.

Soit un groupe fini de matrices $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ et $\mathbf{a} \in \mathbb{K}^n$, la G -orbite de \mathbf{a} est l'ensemble :

$$G \cdot \mathbf{a} = \{A \cdot \mathbf{a}, A \in G\}. \tag{8.1.117}$$

L'ensemble de toutes les G -orbites dans \mathbb{K}^n , noté \mathbb{K}^n/G , est appelé l'espace des orbites.

Théorème 8.1.35.

Soit un groupe fini de matrices $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$, avec \mathbb{K} algébriquement clos. Supposons que $\mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G = \mathbb{K}[f_1, \dots, f_m]$. Alors :

-i- L'application polynomiale $F : \mathbb{K}^n \rightarrow V_F$ définie par $F(\mathbf{a}) = (f_1(\mathbf{a}), \dots, f_m(\mathbf{a}))$ est surjective. Ainsi la paramétrisation $y_i = f_i(x_1, \dots, x_n)$ décrit bien V_F en entier.

-ii- L'application associant la G -orbite $G \cdot \mathbf{a} \subset \mathbb{K}^n$ au point $F(\mathbf{a}) \in V_F$ induit une correspondance bijective

$$\mathbb{K}^n/G \cong V_F. \tag{8.1.118}$$

Lemme 8.1.12.

Soit un groupe fini de matrices $G \subset \text{GL}(n, \mathbb{K})$ et $f \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]$. Posons $N = |G|$. Alors il existe des invariants $g_1, \dots, g_N \in \mathbb{K}[x_1, \dots, x_n]^G$ tels que

$$f^N + g_1 f^{N-1} + \dots + g_N = 0. \tag{8.1.119}$$

8.2. Groupes de réflexions dans un espace réel euclidien

Une réflexion dans un espace euclidien est la plus simple des applications orthogonales indirectes que nous puissions construire. Elle laisse invariante point par point un hyperplan

8.2 Groupes de réflexions dans un espace réel euclidien

H de l'espace tout en agissant comme l'opposé de l'identité sur le supplémentaire orthogonal de H . Certains groupes engendrés par des réflexions sont finis et sont associés avec des configurations particulières de points sur la sphère. Réciproquement à toute configuration de points sur la sphère nous pouvons associer le groupe des symétries orthogonales qui la laisse globalement invariante. Dans le cas de la dimension 3, nous avons par exemple les groupes des symétries des solides platoniciens ou des solides archimédiens. Comme nous allons le voir il est possible de classer ces groupes en introduisant la notion de système et de groupe de Coxeter. Nous obtenons ainsi toutes les briques élémentaires possibles permettant de construire des dispositifs expérimentaux comme union d'orbites de points. Nous pourrions alors procéder à une étude systématique des invariants polynomiaux associés à ces groupes de matrices. Plusieurs exposés très détaillés de ces résultats existent, par exemple [Bou81], [Hil82], [Hum90] ou le plus récent [Kan01].

Nous considérons donc dans la suite un espace vectoriel $(\mathbb{E}, (,))$ réel euclidien de dimension supérieure ou égale à 2.

8.2.1. Groupes de réflexions

Définition 8.2.1. *Une réflexion [a reflection]*

Soit α un vecteur de $\mathbb{E} \setminus \{0\}$. Nous posons $H_\alpha = \{\mathbf{x} \mid (\mathbf{x}, \alpha) = 0\}$. Une application linéaire s est une réflexion orthogonale par rapport à α ou H_α si :

$$\begin{cases} s(\mathbf{x}) = \mathbf{x} & \text{si } \mathbf{x} \in H_\alpha = \text{Vect}(\alpha)^\perp. \\ s(\mathbf{x}) = -\mathbf{x} & \text{si } \mathbf{x} \in H_\alpha^\perp = \text{Vect}(\alpha). \end{cases} \quad (8.2.1)$$

Nous la notons alors indifféremment s_α ou s_{H_α} .

Voici les propriétés sur lesquelles sont basées les résultats qui vont être exposés.

Propriété 8.2.1. Soit $\alpha \in \mathbb{E} \setminus \{0\}$ et s_α la réflexion orthogonale par rapport à α .

- i- $s_\alpha(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \frac{2(\mathbf{x}, \alpha)}{(\alpha, \alpha)}\alpha$ pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{E}$.
- ii- $(s_\alpha(\mathbf{x}), s_\alpha(\mathbf{y})) = (\mathbf{x}, \mathbf{y})$ pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{E}^2$.
- iii- $\det s_\alpha = -1$.
- iv- Si ϕ est un automorphisme orthogonal de \mathbb{E} alors

$$\begin{aligned} \phi \cdot H_\alpha &= H_{\phi \cdot \alpha} \\ \phi s_\alpha \phi^{-1} &= s_{\phi \cdot \alpha}. \end{aligned} \quad (8.2.2)$$

Définition 8.2.2. *Groupe orthogonal [Orthogonal group]*

Nous rappelons la définition du groupe orthogonal $\mathcal{O}(\mathbb{E})$ dans un espace euclidien $(\mathbb{E}, (,))$:

$$\mathcal{O}(\mathbb{E}) = \{f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E} \text{ linéaire et } (f(\alpha), f(\beta)) = (\alpha, \beta) \forall (\alpha, \beta) \in \mathbb{E}^2\}. \quad (8.2.3)$$

Nous pouvons maintenant définir ce qu'est un groupe de réflexions.

Définition 8.2.3. *groupe de réflexions [Reflection group]*

Soit $W \subset \mathcal{O}(\mathbb{E})$. W est un groupe de réflexions si W est engendré, en tant que groupe, par ses réflexions.

Deux groupes de réflexions $W \in \mathcal{O}(\mathbb{E})$ et $W' \in \mathcal{O}(\mathbb{E}')$ sont dits isomorphes s'il existe un isomorphisme linéaire $f : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}'$ conservant le produit scalaire et conjuguant W et W' , i.e. :

$$(f(\mathbf{x}), f(\mathbf{y})) = (\mathbf{x}, \mathbf{y}), \forall (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{E}^2. \quad (8.2.4)$$

$$fWf^{-1} = W'. \quad (8.2.5)$$

Exemple 8.2.1. Le groupe symétrique \mathcal{S}_n [The Symetric Group]

Pour $n \geq 1$, \mathcal{S}_n agit sur \mathbb{R}^n par permutation des coordonnées. À chaque permutation nous associons de manière unique un endomorphisme orthogonal de $\mathcal{O}(\mathbb{E})$. Cette représentation de \mathcal{S}_n est alors un groupe de réflexions. En effet la transformation orthogonale associée à la transposition (i, j) , $1 \leq i \neq j \leq n$ n'est autre que la symétrie $s_{\alpha_{i,j}}$ avec $\alpha_{i,j}$ le vecteur dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la i -ème qui vaut 1 et la j -ème qui vaut -1, ce qui permet de conclure puisque les transpositions engendrent \mathcal{S}_n .

Exemple 8.2.2. Le groupe alterné \mathcal{A}_n [The Alternating Group]

La signature de tous les éléments de \mathcal{A}_n étant égale à 1, le déterminant de l'application linéaire associée pour l'action par permutation des coordonnées est donc aussi égal à 1. Ainsi aucun élément de \mathcal{A}_n ne peut être une réflexion. \mathcal{A}_n n'est pas un groupe de réflexions bien qu'étant un sous-groupe de \mathcal{S}_n qui lui est un groupe de réflexions.

Voici une notion qui sera fondamentale lorsque nous établirons la classification des groupes de réflexions.

Définition 8.2.4. Irréductibilité [Irreducible]

W est dit irréductible si dès qu'il existe $(W_1, W_2) \in \mathcal{O}(\mathbb{E})$ tels que $W = W_1 \times W_2$ nous avons $W_1 = \{\text{Id}\}$ ou $W_2 = \{\text{Id}\}$.

Commençons par s'intéresser au cas du plan euclidien et considérons les groupes des isométries des polygones réguliers à n cotés P_n , $n \geq 2$, que nous noterons $\text{Isom}(P_n)$. La définition d'un polygone régulier est donné par la définition 8.3.4 et leur existence est assurée par la proposition 8.3.3. Les groupes $\text{Isom}(P_n)$ sont des groupes de réflexions et réciproquement tout groupe de réflexions du plan est le groupe des isométries d'un polygone régulier. Afin de préciser la structure de $\text{Isom}(P_n)$ nous rappelons les définitions suivantes. Pour plus de détails sur les objets algébriques introduits voir [Lan84] ou [Per96].

Définition 8.2.5. Sous-groupe distingué [Normal subgroup]

Soit G un groupe et H un sous-groupe de G , nous notons $H < G$. H est un sous-groupe distingué si $gH = Hg$ pour tout g de G nous écrivons dans ce cas $H \triangleleft G$.

Définition 8.2.6. Produit semi-direct [Semidirect Product]

Soit G un groupe et H et N deux sous-groupes de G tels que :

- i- $G = H \cdot N$.
- ii- $N \triangleleft G$.
- iii- $H \cap N = \{1\}$.

Nous disons alors que G est le produit semi-direct de H par N et nous notons $G = N \rtimes H$

Remarque 8.2.1.

De manière équivalente nous pouvons définir le produit semi direct de deux groupes H par N en se donnant un morphisme de groupes $\phi : N \rightarrow \text{Aut}(H)$. Le produit semi-direct $H \rtimes N$ est alors l'ensemble $G = H \times N$ muni de la loi de composition interne $*_G$ définie par :

$$\forall (h_1, h_2, n_1, n_2) \in H^2 \times N^2, (h_1, n_1) *_G (h_2, n_2) = (h_1 [\phi(n_1) h_2], n_1 n_2) \quad (8.2.6)$$

Ainsi si nous considérons H et N comme des sous-groupes de $G = H \rtimes N$, l'action de N sur H correspond exactement à $\phi : N \rightarrow \text{Aut}(H)$. Nous pouvons donc définir le produit semi-direct à partir de la donnée de cette action.

La notion de sous-groupe normal et de produit semi-direct est au centre de la théorie des groupes. Nous nous contenterons de nous en servir étudier les groupes de réflexions. L'exemple suivant, qui joue un rôle particulier dans la construction de dispositifs expérimentaux réguliers ou isovariants, montre la notion de produit semi-direct en situation.

Exemple 8.2.3. Groupe hyperoctaédral [Hyperoctaedral group]

Considérons $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l \rtimes \mathcal{S}_l$ construit comme le produit semi-direct de $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l$ et de \mathcal{S}_l pour l'action de \mathcal{S}_l sur $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l$ qui consiste à permuter les facteurs de $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l$.

Le groupe des automorphismes du carré correspond au cas $l = 2$ et celui du cube au cas $l = 3$. L'action de $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l \rtimes \mathcal{S}_l$ sur un élément $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_l)$ de \mathbb{R}^l peut se comprendre ainsi : \mathcal{S}_l agit sur \mathbf{x} par permutation des coordonnées et $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l$ par changement de signe. Chacun de ces deux sous-groupes étant un groupe de réflexions, il en va de même de leur produit semi-direct.

Nous sommes maintenant à même d'introduire le groupe diédral D_n .

Définition 8.2.7. Groupe diédral [Dihedral group]

Le groupe diédral est le groupe $D_n = \mathbb{Z}/n\mathbb{Z} \rtimes \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ où, si x est un générateur de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, alors $xyx = y^{-1}, \forall y \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$.

Remarques 8.2.1.

- i- $D_2 = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$.
- ii- $D_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z} \rtimes \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$
- iii- Comme annoncé plus haut D_n est le groupe des automorphismes de P_n . Nous obtenons cette structure diédrale en choisissant pour x l'une quelconque des symétries orthogonales appartenant à $\text{Isom}(P_n)$ et pour sous-groupe cyclique d'ordre n celui des rotations de $\text{Isom}(P_n)$. En posant y l'une de ces rotations, nous obtenons une définition de D_n par générateurs et relations. C'est ce que nous appelons une présentation du groupe.

Proposition 8.2.1. Présentation 1 de D_n

$$D_n = \langle x, y \mid x^2 = y^n = (xy)^2 = 1 \rangle. \quad (8.2.7)$$

Afin de mettre en avant le fait que D_n est un groupe de réflexions, nous préférons la présentation suivante qui met en évidence le fait que D_n est engendré par des réflexions.

Proposition 8.2.2. *Présentation 2 de D_n*

$$D_n = \langle s_1, s_2 \mid s_1^2 = s_2^2 = (s_1 s_2)^n = 1 \rangle. \quad (8.2.8)$$

Théorème 8.2.1. *Classification des groupes de réflexions du plan*

Les seuls sous-groupes finis de $\mathcal{O}(\mathbb{R}^2)$ sont les groupes cycliques de rotations $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ et les groupes diédraux D_n engendrés par des réflexions. Ainsi les seuls groupes de réflexions du plan sont les groupes diédraux D_n .

Ainsi la description des groupes de réflexions du plan s'est avérée facile à obtenir. Ceci n'est en rien semblable avec la situation en dimension supérieure. Afin de s'en convaincre, intéressons-nous à ce qui se passe en dimension 3.

Les groupes diédraux étant naturellement associés aux polygones réguliers, nous allons donc nous intéresser aux groupes d'automorphismes des polyèdres réguliers dont une définition est donnée par la remarque 8.3.1. Or, contrairement aux polygones réguliers qui existent quelque soit le nombre de côtés que nous imposons, les polyèdres réguliers sont au nombre de neuf. Il sont composés des cinq solides platoniciens, qui sont de surcroît les seuls à être convexes, Figure 8.1, et des quatre polyèdres étoilés de Kepler-Poinsot, Figure 8.2. L'existence des polyèdres réguliers convexes est assurée par la proposition 8.3.4.

Nous nous intéresserons uniquement aux solides platoniciens et puisque qu'un polyèdre et son polyèdre dual ont le même groupe d'automorphismes nous ne considérerons que le cas du tétraèdre, du cube et du dodécaèdre. En effet, le cube et l'octaèdre tout comme le dodécaèdre et l'isocaèdre sont des polyèdres duaux.

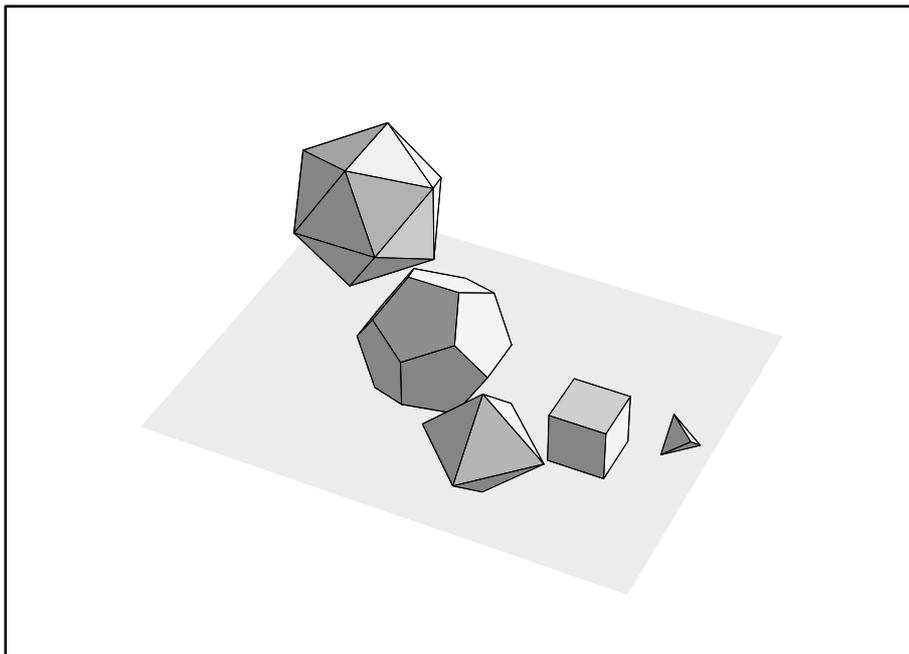


FIG. 8.1 – Les cinq solides platoniciens.

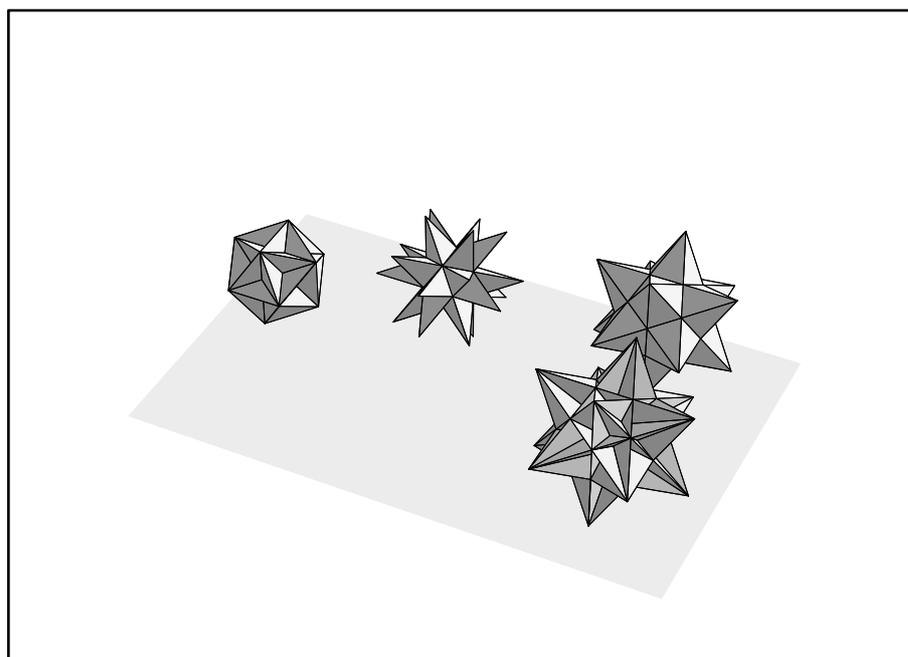


FIG. 8.2 – Les quatre solides de Kepler-Poinsot.

Théorème 8.2.2. *Groupes d'automorphismes des solides platoniciens*

-i- Le tétraèdre.

Chaque automorphisme du tétraèdre est déterminé par la permutation des sommets qu'il induit. Si nous souhaitons transposer deux sommets, il suffit d'utiliser la réflexion dont l'hyperplan d'appui est orthogonal au segment joignant ces deux sommets et passe en son centre. Celui-ci contient les deux autres sommets. Ainsi chaque transposition des sommets induit un automorphisme du tétraèdre ; les transpositions engendrent \mathcal{S}_4 . Toutes les permutations de \mathcal{S}_4 induisent donc un automorphisme du tétraèdre. Le groupe des automorphismes du tétraèdre, $\text{Isom}(\triangle)$ a donc 24 éléments et est isomorphe à \mathcal{S}_4 .

-ii- Le cube.

Par une démarche similaire à celle employée dans le cas du tétraèdre, nous montrons, voir [Kan01], que $\text{Isom}(\square)$ est isomorphe à $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^3 \rtimes \mathcal{S}_3$. Ce qui est bien le résultat annoncé ci-dessus.

-iii- Le dodécaèdre.

Ici aussi nous cherchons à déterminer le groupe des automorphismes du dodécaèdre grâce à l'action qu'il a sur les vingt sommets du dodécaèdre. Un automorphisme du dodécaèdre est déterminé par l'image de l'un des vingt sommets et des trois arêtes qui lui sont attachées. Le groupe des automorphismes du dodécaèdre compte donc au plus $20(3!) = 120$ éléments. En considérant les permutations de cinq tétraèdres inscrits et la symétrie centrale nous déduisons que le groupe des isométries du dodécaèdre est isomorphe à un sous-groupe de $\mathcal{A}_5 \times 2\mathbb{Z}$. Un petit raisonnement permet de montrer que le sous-groupe H engendré par les réflexions est distingué dans $\mathcal{A}_5 \times 2\mathbb{Z}$. \mathcal{A}_5 étant simple, il s'agit donc soit de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$, soit de \mathcal{A}_5 soit de $\mathcal{A}_5 \times 2\mathbb{Z}$. \mathcal{A}_5 . Nous constatons qu'il y a quinze réflexions dans H et que \mathcal{A}_5 ne contient pas de réflexion. Le groupe des automorphismes du dodécaèdre est donc isomorphe à $\mathcal{A}_5 \times 2\mathbb{Z}$.

Remarque 8.2.2.

Les deux premiers types de polyèdres réguliers, le simplexe et le cube, se généralisent en polytopes réguliers en dimension supérieure : le n -simplexe et le n -cube. Ceci donnera donc deux familles infinies de groupes de réflexions. Ce n'est pas le cas du dodécaèdre, nous allons donc qualifier le groupe qui lui est associé de groupe exceptionnel. Ce n'est pas le seul comme nous le verrons plus tard.

Comment obtenir une présentation pour ces trois groupes ? La notion de chambre de Weyl et de système de racines associés à un groupe de réflexions permet de construire facilement une présentation du groupe.

Définition 8.2.8. *Chambre de Weyl* [Weyl Chamber]

Soit W un groupe de réflexions inclus dans $\mathcal{O}(\mathbb{E})$. A chaque réflexion s_α , nous associons H_α l'hyperplan laissé fixe par s_α . Une chambre de W est alors une partie connexe de $\mathbb{E} \setminus (\bigcup_\alpha H_\alpha)$.

Remarque 8.2.3.

Soit $W \subset \mathcal{O}(\mathbb{E})$. Nous remplaçons chaque s_α de W par $\left\{ -\frac{\alpha}{\|\alpha\|}, \frac{\alpha}{\|\alpha\|} \right\}$. Nous obtenons alors l'ensemble Δ suivant :

$$\Delta = \{ \alpha \mid s_\alpha \in W \text{ et } \|\alpha\| = 1 \}. \tag{8.2.9}$$

Cette ensemble Δ présente les propriétés suivantes :

- i- Si $\alpha \in \Delta$, alors $\lambda\alpha \in \Delta$ si et seulement si $\lambda = \pm 1$.
- ii- Si $\alpha, \beta \in \Delta$ alors $s_\alpha(\beta) \in \Delta$.

Nous avons alors $W = \{ s_\alpha, \alpha \in \Delta \}$.

Définition 8.2.9. *Système de racines* [Root system]

Un ensemble Δ de vecteurs non nuls de \mathbb{E} est un système de racines s'il satisfait aux conditions -i- et -ii- de la remarque 8.2.3. Chaque élément de Δ est alors appelé une racine.

Une théorie complète des systèmes de racines peut être consultée dans [Bou81, Hil82, Hum90, Kan01]. Nous introduirons ici les notions dont nous aurons besoin par la suite sans prétendre à une quelconque exhaustivité.

Remarque 8.2.4.

Nous avons vu à la remarque 8.2.3 que si W est un groupe de réflexions nous pouvons lui associer un système de racines. Soit Δ un système de racines nous posons :

$$W(\Delta) = \langle s_\alpha, \alpha \in \Delta \rangle, \tag{8.2.10}$$

où $\langle A \rangle$ désigne le sous-groupe engendré par A .

$W(\Delta)$ est un groupe de réflexions.

En effet il est non seulement engendré par des réflexions mais aussi d'ordre fini puisque qu'il agit par permutation sur Δ (propriété -ii- de la remarque 8.2.3). En décomposant $\mathbb{E} = \mathbb{E}_\Delta \cup \mathbb{E}^\Delta$, avec $\mathbb{E}_\Delta = \text{Vect}(\Delta)$ et $\mathbb{E}^\Delta = \bigcap_{\alpha \in \Delta} H_\alpha$, nous voyons que si un automorphisme f de $W(\Delta)$ fixe Δ alors $f = \text{Id}$.

Exemples 8.2.1. Réseaux de racines

- i- $\Delta = \{(1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1)\} \implies W(\Delta) \cong \mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$.
- ii- $\Delta = \left\{ (1, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), (-1, 0), \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \right\} \implies W(\Delta) = D_3 \cong \mathcal{S}_3$.
- iii- $\Delta = \left\{ (1, 0), \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right), (0, 1), \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right), (-1, 0), \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right), (0, -1), \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right) \right\} \implies W(\Delta) = D_4$.

Nous nous intéressons maintenant à certaines parties d'un réseau de racines qui permettront de mieux mettre en évidence la relation entre une chambre et un réseau de racines.

Définition 8.2.10. Système fondamental [Fundamental system]

Soit $\Delta \in \mathbb{E}$ un réseau de racines. Une partie Σ de Δ est un système fondamental de Δ si :

- i- Σ est un système libre.
- ii- Tout élément δ de Δ est une combinaison linéaire à coefficients tous du même signe d'éléments de Σ . Nous dirons alors que δ est une racine positive ou négative pour Σ , en fonction de ce signe.

Les éléments de Σ sont alors appelé racines fondamentales. Nous utilisons aussi souvent l'appellation de système simple pour Σ et de racines simple pour les éléments de Σ .

Nous pouvons décomposer Δ en deux sous-ensembles disjoints Δ^+ et Δ^- en fonction du signe de chaque $\delta \in \Delta$.

Proposition 8.2.3. Existence d'un système fondamental

Soit Δ un système de racines. Il existe un système fondamental Σ associé à Δ .

Démonstration 8.2.1. La démonstration de ce résultat est assez longue mais son idée est la suivante. Nous associons à Δ le groupe de réflexions $W(\Delta)$ puis la chambre de Weyl définie par ce groupe qui permet de déterminer un Δ^+ et d'extraire de cet ensemble un système fondamental. Voir [Hum90, Kan01, Bou81] pour plus de détails.

Théorème 8.2.3.

Les chambres de Weyl et les systèmes fondamentaux d'un système de racines Δ sont en correspondance bijective.

Définition 8.2.11. Mur d'une chambre de Weyl [Wall of a Weyl Chamber]

Soit une chambre \mathcal{C} . Les murs de \mathcal{C} sont les hyperplans H_α où α appartient au système fondamental associé à \mathcal{C} .

Les efforts que nous venons de faire pour définir les murs d'une chambre de Weyl s'expliquent par la définition et la proposition suivante.

Nous considérons un groupe de réflexions W , Δ un système de racines associé à W et Σ un système fondamental de Δ .

Définition 8.2.12. Réflexions fondamentales [Fundamental reflexions]

L'ensemble des réflexions $\{s_\alpha, \alpha \in \Sigma\}$ est appelé ensemble fondamental de réflexions pour W .

Le qualificatif fondamental s'explique par la proposition suivante :

Proposition 8.2.4. *Les réflexions fondamentales engendrent W*

Si Σ est un système fondamental de Δ , alors $\{s_\alpha, \alpha \in \Sigma\}$ est une partie génératrice de $W = W(\Delta)$.

Nous sommes alors en bon chemin pour obtenir une présentation du groupe W puisque nous avons trouvé un système minimal de générateurs. Il reste à préciser un ensemble complet de relations entre les générateurs. Pour ce faire nous introduisons la notion de longueur d'un élément.

Définition 8.2.13. *Longueur d'un élément [Length of an element]*

Soit S un ensemble de générateurs d'un groupe G , la longueur d'un élément g par rapport à S est le nombre minimal d'éléments de S qu'il faut utiliser pour construire g .

La notion de longueur est fondamentale puisqu'elle permet d'obtenir le théorème suivant qui sert à montrer que les groupes de relations sont des groupes de Coxeter.

Théorème 8.2.4. *Condition de réduction de Matsumoto [Matsumoto Cancellation Property]*

Soit $\phi \in W(\Delta)$, si $\phi = s_{\alpha_1} \cdots s_{\alpha_k}$ et $l(\phi) < k$ alors il existe $1 \leq i < j \leq k$ tels que :

$$\phi = s_{\alpha_1} \cdots \widehat{s_{\alpha_i}} \cdots \widehat{s_{\alpha_j}} \cdots s_{\alpha_k}, \quad (8.2.11)$$

où l'accent circonflexe signifie que le terme associé n'apparaît pas dans la décomposition.

Une application de ces relations permet d'établir la relation suivante entre les trois objets que nous avons introduits précédemment : les chambres, les systèmes fondamentaux et $W(\Delta)$.

Théorème 8.2.5.

Etant donné un système de racines Δ , les trois ensembles suivants sont en correspondance bijective :

- L'ensemble des chambres de Δ .
- L'ensemble des systèmes fondamentaux de Δ .
- Le groupe de réflexions associé à Δ , $W(\Delta)$.

Une dernière remarque sur la structure de certains groupes de réflexions classiques :

Nous notons ici $\{e_1, \dots, e_n\}$ une base orthonormale de \mathbb{R}^n euclidien.

Proposition 8.2.5. *Groupe des symétries du n -cube*

Pour $l \geq 1$, nous posons $I^l = \left\{ \sum_{i=1}^l c_i e_i \mid -1 \leq c_i \leq +1 \right\}$.

Le groupe des automorphismes de I^l est isomorphe au groupe $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l \rtimes \mathcal{S}_l$.

Proposition 8.2.6. *Groupe des symétries du n -simplexe*

Pour $l \geq 1$, nous posons $\Delta_l = \left\{ \sum_{i=1}^{l+1} c_i e_i \mid \forall i \in [1, l+1], c_i \geq 0 \text{ et } \sum_{i=1}^{l+1} c_i = 1 \right\}$.

Le groupe des automorphismes de I^l est isomorphe au groupe $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^l \rtimes \mathcal{S}_l$.

Il s'agit d'une généralisation directe de ce que nous avons établi ci-dessus.

8.2.2. Groupes de Coxeter

Bien que la donnée d'un système de racines puisse caractériser un groupe de Coxeter, celle-ci ne donne pas de manière explicite le comportement des éléments du groupe pour la loi de celui-ci. Nous nous souvenons alors que pour les groupes diédraux, nous avons trouvé une manière fort commode de décrire un groupe donné à l'aide d'une présentation de celui-ci, voir les propositions 8.2.1 et 8.2.2. Nous introduisons alors la notion de groupe de Coxeter.

Définition 8.2.14.

Une groupe W est un groupe de Coxeter [Coxeter Group] s'il existe $S \subset W$ tel que :

$$W = \langle s \in S \mid (ss')^{m_{ss'}} = 1 \rangle, \quad (8.2.12)$$

où $m_{ss} = 1$ et $m_{ss'} \in \{2, 3, \dots\} \cup +\infty$ si $s \neq s'$. La paire (W, S) est appelée un système de Coxeter.

Nous nous intéresserons aux systèmes de Coxeter qui sont finis c'est-à-dire ceux pour lesquels W est fini. Commençons par un peu de vocabulaire.

Définition 8.2.15.

Deux systèmes de Coxeter (W_1, S_1) et (W_2, S_2) sont dits isomorphes s'il existe un isomorphisme de groupes de W_1 sur W_2 qui envoie S_1 sur S_2 . Le groupe de Coxeter est de rang l si $|S| = l$.

Définition 8.2.16. Réductible

Un système de Coxeter (W, S) est dit réductible s'il existe (W_1, S_1) et (W_2, S_2) tels que $W = W_1 \times W_2$, $S = S_1 \cup S_2$ et $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Si une telle décomposition n'est pas possible, le système de Coxeter est dit irréductible.

Nous avons déjà rencontré des systèmes de Coxeter.

Proposition 8.2.7.

Le groupe diédral d'ordre n , D_n , est un groupe de Coxeter pour la présentation de la proposition 8.2.2 rappelée ci-dessous :

$$D_n = \langle s_1, s_2 \mid s_1^2 = s_2^2 = (s_1 s_2)^n = 1 \rangle. \quad (8.2.13)$$

Ainsi $(D_n, \{s_1, s_2\})$ est un système de Coxeter.

Proposition 8.2.8.

Si nous nous intéressons aux exemples des groupes de symétries des polyèdres réguliers introduit au théorème 8.2.2, nous avons, entre autres, les présentations suivantes :

-i- Pour le groupe des réflexions du tétraèdre

$$\langle s_1, s_2, s_3 \mid (s_1)^2 = (s_2)^2 = (s_3)^2 = (s_1 s_3)^2 = (s_1 s_2)^3 = (s_2 s_3)^3 = 1 \rangle. \quad (8.2.14)$$

-ii- Pour le groupe des réflexions du cube

$$\langle s_1, s_2, s_3 \mid (s_1)^2 = (s_2)^2 = (s_3)^2 = (s_1 s_3)^2 = (s_1 s_2)^3 = (s_2 s_3)^4 = 1 \rangle. \quad (8.2.15)$$

-iii- Pour le groupe des réflexions du dodécaèdre

$$\langle s_1, s_2, s_3 \mid (s_1)^2 = (s_2)^2 = (s_3)^2 = (s_1 s_3)^2 = (s_1 s_2)^3 = (s_2 s_3)^5 = 1 \rangle. \quad (8.2.16)$$

Ainsi $\text{Isom}(\Delta)$, $\text{Isom}(\square)$ et le groupe des isométries du dodécaèdre sont des systèmes de Coxeter.

Comme l'indique les remarques suivantes nous ne pouvons nous contenter de considérer un groupe de Coxeter W . Si nous voulons éviter certaines difficultés nous devons raisonner sur les systèmes de Coxeter.

Remarque 8.2.5.

Un groupe de Coxeter peut posséder différents systèmes de Coxeter. Par exemple le groupe diédral D_6 possède deux systèmes de Coxeter de rang différent.

- i- $D_6 = \langle s_1, s_2 \mid s_1^2 = s_2^2 = (s_1 s_2)^n = 1 \rangle$ de rang 2.
- ii- Comme $D_6 = D_3 \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ nous avons également un système de Coxeter réductible dont la première composante est $D_3 = \langle s_1, s_2 \mid s_1^2 = s_2^2 = (s_1 s_2)^n = 1 \rangle$ et la seconde $= \langle s_3 \mid s_3^2 = 1 \rangle$ de rang 3.

Un des outils les plus utilisés pour étudier les systèmes de Coxeter est la représentation sous forme de graphe que nous pouvons en faire.

Définition 8.2.17. *Graphe de Coxeter [Coxeter Graph]*

Nous disons qu'un graphe X est un graphe de Coxeter s'il existe (W, S) un système de Coxeter tel que X est un graphe où chaque arrête est étiquetée par un nombre entier supérieur ou égal à 3 de la manière suivante :

- i- S est l'ensemble des sommets du graphe X .
- ii- Si s et s' appartiennent à S , il n'y a pas d'arrête entre s et s' si $m_{ss'} = 2$.
- iii- Si s et s' appartiennent à S , il y a arrête une entre s et s' étiquetée par $m_{ss'}$ si $m_{ss'} \geq 3$.

Proposition 8.2.9.

La définition 8.2.17 définit une relation bijective entre les graphes de Coxeter et les systèmes de Coxeter (W, S) .

Exemples 8.2.1.

Voici les graphes associés à $\text{Isom}(\Delta)$ et à $\text{Isom}(\square)$:

Théorème 8.2.6.

Soit W un groupe de réflexions. W est un groupe de Coxeter pour la présentation suivante :

$$W(\Delta) = \langle \{s_{\alpha_i}\} \mid (s_{\alpha_i} s_{\alpha_j})^{m_{i,j}} = 1 \rangle, \quad (8.2.17)$$

où $\{\alpha_1, \dots, \alpha_l\} = \Sigma$ est un système fondamental d'un réseau de racines Δ tel que $W = W(\Delta)$, les s_{α_i} étant alors les réflexions fondamentales associées aux éléments de Σ , et m_{ij} est l'ordre de $s_{\alpha_i} s_{\alpha_j}$.

Proposition 8.2.10. Deux groupes de réflexions finis et essentiels sont isomorphes si et seulement si les systèmes de Coxeter qui leur sont associés sont isomorphes.

Ainsi la correspondance introduite ci-dessus entre les classes d'isomorphisme des groupes réflexions finis et les classes d'isomorphismes des systèmes de Coxeter finis sont isomorphes est bien définie et injective.

La suite de la théorie consiste à associer à un système de Coxeter une forme bilinéaire. Celle-ci permettra d'établir une classification des groupes de Coxeter.

8.3. Polytopes convexes

8.3.1. Polytopes réguliers

Nous nous intéressons aux polytopes réguliers principalement pour le fait qu'ils s'obtiennent comme une orbite unique par un groupe de réflexions et de ce fait sont des plans sphériques. L'étude des degrés des invariants polynomiaux associés au groupe permet alors d'obtenir directement la force de ce plan. Nous nous intéressons uniquement aux polytopes convexes puisque seul le support du polytope présente un intérêt pour notre étude.

Définition 8.3.1. *Polytope*

Un polytope Π_n de \mathbb{R}^n est une partie compacte convexe de l'espace \mathbb{R}^n délimitée par une intersection d'hyperplans de \mathbb{R}^n .

Un polytope de \mathbb{R}^2 est un polygone.

Un polytope de \mathbb{R}^3 est un polyèdre.

Définition 8.3.2. *Cellule*

Nous appelons cellule d'un polytope Π_n de \mathbb{R}^n l'intersection du polytope Π_n et d'un des hyperplans le délimitant.

Proposition 8.3.1.

Une cellule d'un polytope Π_n de \mathbb{R}^n est un polytope Π_{n-1} de \mathbb{R}^{n-1} . Les cellules de Π_{n-1} sont des polytopes de \mathbb{R}^{n-2} . Pour un polytope Π_n de \mathbb{R}^n , nous construisons ainsi des suites de polytopes $\Pi_{n-1}, \Pi_{n-2}, \dots, \Pi_1, \Pi_0$ de $\mathbb{R}^{n-1}, \mathbb{R}^{n-2}, \dots, \mathbb{R}^1, \mathbb{R}^0$. Nous notons N_{n-1} le nombre de cellules du polytope, N_{j-1} le nombre de polytopes de \mathbb{R}^j contenus dans Π_n et N_0 le nombre de sommets de Π_n .

Exemples 8.3.1. *Cas de la dimension 4*

Un polytope Π_4 de \mathbb{R}^4 a donc des cellules Π_3 qui sont des polyèdres de \mathbb{R}^3 , des faces polygonales Π_2 , chacune séparant deux cellules, des arêtes Π_1 et des sommets Π_0 .

Symbole de Schläfli

La symbole de Schläfli permet de classer les polytopes réguliers. Nous en donnons une définition ci-dessous et pour cela nous commençons par définir ce que nous entendons par « vertex figure » d'un sommet O d'un polytope.

Définition 8.3.3. « Vertex figure » d'un sommet d'un polytope

Considérons un polytope en dimension $n \geq 2$. Si tous les milieux des arêtes issues d'un même sommet O du polytope appartiennent au même hyperplan, alors ces milieux sont les sommets d'un polytope dans un espace de dimension $n - 1$. Ce polytope est la « vertex figure » du sommet O du polytope de départ.

Remarques 8.3.1. Cas des dimensions 2 et 3

- La « Vertex figure » d'un sommet O d'un polygone est le segment joignant les milieux des deux côtés contenant O .

- La « Vertex figure » d'un sommet O d'un polyèdre est, lorsqu'elle existe, le polygone dont les côtés sont les « vertices figures » de O dans toutes les faces contenant O . Il s'agit donc du polygone dont les sommets sont les milieux des arêtes contenant O .

Définition 8.3.4. *Polytope régulier*

Nous définissons la notion de régularité pour un polytope par récurrence de la manière suivante.

Nous appelons polygone régulier du plan, un polytope de \mathbb{R}^2 dont tous les angles et toutes les longueurs des côtés sont égaux. Un polygone régulier possède donc au moins trois côtés.

Un polytope Π_n de \mathbb{R}^n , avec $n > 2$, est régulier si ses cellules Π_{n-1} sont des polytopes réguliers $\Pi_{i,n-1}$ de \mathbb{R}^{n-1} et qu'il existe une « vertex figure » qui est un polytope régulier $\Pi'_{j,n-1}$ de \mathbb{R}^{n-1} en chacun des sommets de Π_n .

Proposition 8.3.1. *Propriété des « vertices figures » d'un polytope régulier*

Si le polytope Π_n de \mathbb{R}^n est régulier, alors toutes ses cellules sont égales à un même polytope Π_{n-1} de \mathbb{R}^{n-1} et toutes ses « vertices figures » sont égales à un même polytope Π'_{n-1} de \mathbb{R}^{n-1} .

Remarque 8.3.1. *Cas de la dimension 3*

Une polyèdre régulier, c'est-à-dire un polytope de \mathbb{R}^3 régulier, est donc tel que chacune de ses faces soit un polygone régulier à p côtés et que chacune de ses « vertices figures » soit un polygone régulier à q côtés, c'est-à-dire que chacun de ses sommets appartienne au même nombre q de ces polygones à p côtés.

Définition 8.3.5. *Symbole de Schläfli*

Le symbole de Schläfli est défini de manière récursive pour un polytope régulier en dimension $n \geq 2$.

Un polygone régulier à q côtés a pour symbole de Schläfli $\{q\}$. Un polytope régulier Π_n de \mathbb{R}^2 a pour symbole de Schläfli $\{p_1, p_2, \dots, p_{n-1}\}$ si les cellules du polytope ont un symbole de Schläfli égal à $\{p_1, p_2, \dots, p_{n-2}\}$ et si ses « vertices figures » ont pour symbole de Schläfli $\{p_2, \dots, p_{n-1}\}$.

Proposition 8.3.2. *Dual d'un polytope et symbole de Schläfli*

Le polytope régulier de symbole $\{p_1, p_2, \dots, p_{n-1}\}$ se déduit du polytope régulier de symbole $\{p_{n-1}, \dots, p_2, p_1\}$ par l'opération de dualité sur les polytopes.

Dimension 2

La situation particulière de la dimension est liée au résultat suivant :

Proposition 8.3.3. *Existence des polygones réguliers*

Pour toutes valeurs de q , il existe un polygone régulier à q côtés, dont le symbole de Schläfli est $\{q\}$.

8.3 Polytopes convexes

Symbole de Schläfli	N_1	N_0	Ordre du groupe des symétries
$\{q\}, q \geq 3$	q	q	$2q$

TAB. 8.1 – Polygones réguliers

Dimension 3

Proposition 8.3.4. *Existence des polyèdres réguliers Il n'existe des polyèdres réguliers que pour les symboles de Schläfli $\{p, q\}$ suivants :*

- $\{3, 3\}$: le tétraèdre régulier,
- $\{3, 4\}$: l'octaèdre régulier,
- $\{4, 3\}$: le cube,
- $\{3, 5\}$: l'icosaèdre régulier,
- $\{5, 3\}$: le dodécaèdre régulier.

Symbole de Schläfli	N_2	N_1	N_0	Ordre du groupe des symétries
$\{3, 3\}$	4	6	4	24
$\{3, 4\}$	8	12	6	48
$\{4, 3\}$	6	12	8	48
$\{3, 5\}$	20	30	12	120
$\{5, 3\}$	12	30	20	120

TAB. 8.2 – Polyèdres réguliers

Signalons la propriété suivante qui permet d'identifier certains groupes d'isométries affines préservant les polyèdres réguliers.

Proposition 8.3.5. *Dual d'un polyèdre régulier*

Le polyèdre régulier de symbole $\{q, p\}$ se déduit du polyèdre régulier de symbole $\{p, q\}$ par l'opération de dualité suivante : modulo une similitude de rapport convenable, le centre des faces de $\{p, q\}$ sont les sommets de $\{q, p\}$. Puisque l'image d'un barycentre par une application affine est le barycentre des images et qu'une isométrie agit en permutant les sommets d'un polyèdre régulier, si elle laisse $\{p, q\}$ globalement invariante il en va de même de son enveloppe convexe qui contient $\{q, p\}$.

Corollaire 8.3.1. *Le cube et l'octaèdre régulier ont le même groupe d'isométries affines. Il en va de même de l'icosaèdre régulier et du dodécaèdre régulier.*

Le tétraèdre régulier, l'octaèdre régulier et le cube sont associés au groupes A_3 et B_3 . L'icosaèdre régulier et le dodécaèdre régulier sont des polyèdres exceptionnels liés à la dimension 3.

Dimension 4

Le symbole de Schläfli d'un polytope en dimension 4 est du type $\{p, q, r\}$ où p, q et r sont des entiers positifs.

Proposition 8.3.6.

Un polytope régulier en dimension 4 de symbole de Schläfli de type $\{p, q, r\}$ où p, q et r sont des entiers positifs possède les caractéristiques suivantes :

- i- il a des cellules de type $\{p, q\}$.
- ii- il a des « vertices figures » de type $\{q, r\}$.

Proposition 8.3.7. Existence des polytopes réguliers en dimension 4

Il n'existe des polytopes réguliers, en dimension 4, que pour les symboles de Schläfli $\{p, q, r\}$ suivants :

- $\{3, 3, 3\}$: le 4-simplex, appelé également pentatope.
- $\{3, 3, 4\}$: le 4-hyperoctaèdre, appelé également 16-cells.
- $\{4, 3, 3\}$: le 4-hypercube, appelé également tesseract,
- $\{3, 4, 3\}$: le 24-cells.
- $\{3, 3, 5\}$: le 600-cells.
- $\{5, 3, 3\}$: le 120-cells.

Symbole de Schläfli	N_3	N_2	N_1	N_0	Ordre du groupe des symétries
$\{3, 3, 3\}$	5	10	10	5	120
$\{3, 3, 4\}$	16	32	24	8	384
$\{4, 3, 3\}$	8	24	32	16	384
$\{3, 4, 3\}$	24	96	96	24	1152
$\{3, 3, 5\}$	600	1200	720	120	14400
$\{5, 3, 3\}$	120	720	1200	600	14400

TAB. 8.3 – Polytopes réguliers en dimension 4

Les polytopes de symbole $\{3, 3, 5\}$ et $\{5, 3, 3\}$ ont respectivement 120 et 600 sommets ce qui les rend difficiles à utiliser comme support d'un dispositif expérimental. Restent les polytopes de symbole $\{3, 3, 3\}$, $\{4, 3, 3\}$, $\{3, 3, 4\}$ et $\{3, 4, 3\}$. Parmi ces quatre polytopes, nous trouvons le 4-simplex, 4-hypercube et le 4-hyperoctaèdre dont l'utilisation est déjà courante en planification expérimentale.

Cas de la dimension ≥ 5

Théorème 8.3.1. Existence des polytopes réguliers en dimension $n \geq 5$

Il n'existe des polytopes réguliers, en dimension $n \geq 5$, que pour les symboles de Schläfli $\{p_1, p_2, p_{n-1}\}$ suivants :

- $\underbrace{\{3, \dots, 3\}}_{n-1}$: le n -simplex.
- $\underbrace{\{3, \dots, 3, 4\}}_{n-2}$: le n -hyperoctaèdre.
- $\{4, \underbrace{\{3, \dots, 3\}}_{n-2}\}$: le n -hypercube.

8.3 Polytopes convexes

Démonstration 8.3.1. La démonstration est similaire à celle permettant de déterminer les valeurs des entiers p et q pour lesquelles le groupe de réflexions de symbole $[p, q]$ est fini. Nous renvoyons à [Cox73] pour le détail de la démonstration qui consiste à déterminer le volume d'un domaine fondamental pour l'action du groupe fini de réflexions naturellement associé au polytope.

Symbole de Schläfli	N_{n-1}	N_j	N_0	Ordre du groupe des symétries
$\underbrace{\{3, \dots, 3\}}_{n-1}$	$n + 1$	$\binom{n+1}{j+1}$	$n + 1$	$(n + 1)!$
$\{4, \underbrace{3, \dots, 3}_{n-2}\}$	$2n$	$2^{j+1} \binom{n}{j+1}$	2^n	$2^n n!$
$\underbrace{\{3, \dots, 3, 4\}}_{n-2}$	2^n	$2^{n-j} \binom{n}{j}$	$2n$	$2^n n!$

TAB. 8.4 – Polytopes réguliers en dimension $n \geq 5$

8.3.2. Conclusion

Le cas de la dimension 2 est exceptionnel et permet la construction de plans sphériques de n'importe quel cardinal $n \geq 1$ qui sont alors de force $n - 1$, voir 8.8. Ainsi, si nous utilisons un plan dont la partie sphérique est un polygone à $n \geq 5$ côtés, complété par $k \geq 1$ points au centre, le dispositif obtenu, de cardinal $n + k$, est isovariant pour un modèle de degré deux.

En dimension 3, il n'y a que 5 polyèdres réguliers convexes dont l'un est particulièrement remarquable, l'icosaèdre puisqu'il s'agit d'un 5-plan, voir 8.8, et d'un « tight design ». L'octaèdre, le cube et le tétraèdre ne sont pas des 4-plans sphériques, voir 8.8 : les dispositifs que nous obtenons si nous les complétons par au moins un point au centre ne sont donc pas isovariants pour un modèle d'ordre 2.

En dimension 4, il n'y a que 6 polyèdres réguliers convexes dont deux, $\{5, 3, 3\}$ et $\{3, 3, 5\}$, ont plus d'une centaine de sommets ce qui les rend inutilisables comme support d'un plan. Un modèle de degré deux dans \mathbb{R}^4 comporte 14 termes non constants. Si nous cherchons un dispositif qui soit isovariant si nous l'analysons avec un modèle de degré deux, la partie sphérique du plan doit comporter au moins 14 points ce qui ne laisse, après avoir éliminé $\{5, 3, 3\}$ et $\{3, 3, 5\}$, que $\{4, 3, 3\}$ et $\{3, 4, 3\}$ qui comportent respectivement 16 et 24 sommets. En effet les paramètres associés aux termes non constants du modèle doivent être estimables. Or les degrés des invariants d'un fondamental d'invariants associé au groupe de symétries de $\{4, 3, 3\}$ et $\{3, 4, 3\}$ sont respectivement 2, 4, 6, 8 et 2, 6, 8, 12. Seul $\{3, 4, 3\}$ est un plan sphérique de force supérieure ou égale à 5, sa force est égale à 5, voir 8.8, et de ce fait, complété par k points au centre, avec $k \geq 1$, il s'agit du support d'un dispositif isovariant pour un modèle de degré 2. Ce dispositif est formé de $24 + k$ points.

Enfin en dimension n supérieure ou égale à 5, il ne reste que les trois familles infinies associées au n -simplexe, au n -hyperoctaèdre et au n -hypercube. Un modèle de degré 2

dans \mathbb{R}^n comporte $n + n(n + 1)/2$ termes non constants. Si $n \geq 2$ alors n -simplexe et le n -hyperoctaèdre ne permettent pas d'estimer tous les paramètres associés au termes non constants d'un modèle de degré 2. Ainsi le n -hypercube est le seul polytope régulier qui pourrait être le support de la partie sphérique d'un plan isovariant pour un modèle de degré 2. Or il comporte 2^n sommets. Cette croissance exponentielle du nombre de sommets est beaucoup plus rapide que la croissance quadratique, respectivement polynomiale, du nombre de termes non constants d'un modèle de degré 2, respectivement de degré $q \geq 2$. Les degrés des invariants fondamentaux du groupe de symétries du n -hypercube sont 2, 4, ..., $2n$, voir 8.8. Ainsi un dispositif dont la partie sphérique est constituée des sommets d'un n -hypercube et complété par $k \geq 1$ points au centre n'est pas isovariant pour un modèle de degré 2.

Ainsi nous ne pouvons nous contenter de proposer des dispositifs expérimentaux dont le support est un polytope régulier. C'est cette constatation qui nous a amené à étudier des plans dont le support est un polytope semi-régulier ou plus généralement encore une union d'orbites de points par des groupes de Coxeter. Nous retrouvons, en utilisant cette méthodologie, des polytopes déduits des polytopes réguliers comme les prismes et le cube ou le tétraèdre adoucis.

8.3.3. Polytopes déduits des polytopes réguliers

Prismes

Définition 8.3.6. *Prisme*

Un polytope de Π_n de \mathbb{R}^n est un prisme s'il peut être construit comme le produit rectangulaire de deux polytopes Π_j et Π_k de dimension j et k appartenant à des espaces orthogonaux. Le produit rectangulaire de deux polytopes consiste à faire glisser l'enveloppe convexe des sommets de l'un des polytopes parallèlement à l'enveloppe convexe des sommets de l'autre. Nous obtenons ainsi l'enveloppe convexe du nouveau polytope.

Exemples 8.3.2. *Prismes*

- i- Un p -prisme de \mathbb{R}^3 est décrit par le symbole $\{ \} \times \{ p \}$.
- ii- Un p - q -duoprisme uniforme est décrit par le symbole $\{ p \} \times \{ q \}$. C'est un polytope de \mathbb{R}^4 dont les cellules sont q - p -prismes et p - q -prismes.

Pyramide, bipyramide et antiprisme

Dans le cas des polyèdres nous définissons également la notion de pyramide, de bipyramide et d'antiprisme.

Définition 8.3.7. *Pyramide*

Un polytope est une q -pyramide s'il peut être construit de la manière suivante : il existe un point A de \mathbb{R}^3 et un polygone à q côtés tels que les arêtes de la q -pyramide sont l'union des côtés du polygone et de celles construites en reliant A à tous les sommets de ce polygone.

Définition 8.3.8. *Bipyramide*

Un polyèdre est une q -bipyramide s'il peut être construit comme reliant les sommets d'un polygone à côtés à deux points de \mathbb{R}^3 .

Définition 8.3.9. *Antiprisme*

Un polyèdre est un q -antiprisme s'il peut être déduit d'un prisme de la manière suivante : le prisme comporte des faces rectangulaires et deux faces qui sont des q -gones. Nous faisons tourner l'une de ces deux faces q -gonales, dans le plan défini par cette face, par rapport à l'autre puis nous relient les sommets de ces deux faces de telle sorte que les polygones ainsi obtenus soient des triangles.

Certains des dispositifs étudiés sont des prismes, des pyramides, des bipyramides ou des antiprismes.

8.4. Relations et générateurs pour certains groupes de réflexions

8.4.1. Introduction

Le diagramme de Cayley, voir par exemple [CM84] ou [de 00], d'un groupe fini \mathcal{G} d'ordre n est une manière de représenter la table de multiplication du groupe \mathcal{G} , étant donné un ensemble de ces générateurs $\{s_1, \dots, s_k\}$, à l'aide d'un graphe pour lequel chacun des sommets est un élément du groupe. Nous confondons alors le sommet et l'élément g qu'il représente. À chaque générateur s_i nous associons un ensemble d'arrêtes orientées, s_i -arrêtes, dont la direction est indiquée par une flèche. Deux sommets g_1 et g_2 sont reliés par une s_i -arrête orientée de V à W si et seulement si nous avons $g_2 = s_i g_1$.

8.4.2. Groupes de réflexion en dimension 2 : les groupes cycliques et diédraux

Une rotation du plan d'angle $2\pi/q$ engendre un groupe isomorphe au groupe cyclique \mathcal{C}_q . Si nous combinons cette rotation avec une réflexion dont l'axe passe par le centre de la rotation nous obtenons le groupe diédral \mathcal{D}_q , d'ordre $2q$, qui est le groupe des isométries du polygone régulier à q côtés, noté $\{q\}$, voir la proposition 8.3.3.

Rappelons le théorème 8.2.1 : les groupes de type \mathcal{C}_q et de type \mathcal{C}_q sont les seuls groupes finis de symétries en dimension 2.

8.4.3. Groupes engendrés par des rotations de \mathbb{R}^3

La classification des groupes finis de symétries en dimension 3 a été obtenue en 1830 par Hessel.

Considérons un groupe fini de transformations affines orthogonales. Ce groupe laisse un point invariant P_0 : le barycentre des images d'un point par tous les éléments du groupe. Toute transformation orthogonale appartenant à ce groupe fini est une réflexion dont le support contient le point invariant P_0 ou est le produit d'au plus deux ou trois réflexions de ce type. En fonction du nombre de réflexions élémentaires composant la transformation

orthogonale, cette transformation conserve ou non l'orientation. Ainsi toutes les transformations de ce groupe conservant l'orientation ont un point fixe et sont donc des rotations. Un groupe fini d'isométries affines positives est donc un groupe de rotations, voir [CM84].

Théorème 8.4.1. *Un groupe fini d'isométries affines positives est le groupe de symétries de l'un des polyèdres suivants :*

- La pyramide dont la base un polygone à q côtés, appelée q -pyramide.
- Le prisme ou la bipyramide dont la base est un polygone à q côtés. Nous les appelons respectivement q -prisme et q -bipyramide.
- Le tétraèdre régulier $\{3, 3\}$.
- Le cube $\{4, 3\}$ ou l'octaèdre $\{3, 4\}$.
- Le dodécaèdre $\{5, 3\}$ ou l'icosaèdre $\{3, 5\}$.

Démonstration 8.4.1. Nous renvoyons à [CM84] pour la démonstration de ce résultat.

Corollaire 8.4.1. *Nous obtenons ainsi les groupes finis de rotations suivants :*

- Le groupe des isométries affines positives de la q -pyramide est isomorphe au groupe cyclique C_q d'ordre q .
- Le groupe des isométries affines positives du q -prisme ou de la q -bipyramide est isomorphe au groupe diédral D_q d'ordre $2q$.
- Le groupe des isométries affines positives du tétraèdre régulier $\{3, 3\}$ isomorphe au groupe alterné A_4 d'ordre 12.
- Le groupe des isométries affines positives du cube $\{4, 3\}$ isomorphe au groupe symétrique S_4 d'ordre 24.
- Le groupe des isométries affines positives du dodécaèdre $\{5, 3\}$ isomorphe au groupe alterné A_5 d'ordre 60.

Démonstration 8.4.2. Pour le cas des polyèdres réguliers convexes, il s'agit d'une conséquence du théorème 8.2.2. En ce qui concerne la q -pyramide, le q -prisme ou la q -bipyramide, il s'agit d'une conséquence du théorème 8.2.1.

8.4.4. Groupes engendrés par des réflexions de \mathbb{R}^3

Nous nous intéressons au cas des groupes finis engendrés par des réflexions de \mathbb{R}^n . Les plans invariants par chacune des réflexions ont une intersection non vide ce qui définit un ou des points invariants par l'action du groupe. Si nous considérons une sphère de rayon non nul placé en l'un de ces points invariants, alors l'intersection des plans invariants et de la sphère détermine une configuration de grands cercles sur la sphère. Ces grands cercles décompose la sphère en un nombre fini de régions : hémisphères, lunes ou triangles sphériques dont les angles sont des fractions de π , voir [CM84]. Ces régions se déduisent l'une de l'autre pour l'action du groupe.

Exemples

Le groupe le plus simple est le groupe $[1]$, d'ordre 2, engendré par une seule réflexion dont le plan coupe la sphère en deux hémisphères.

8.4 Relations et générateurs pour certains groupes de réflexions

Considérons un groupe engendré par deux réflexions s_1 et s_2 . Pour que le groupe soit d'ordre fini il faut que l'angle θ entre les deux plans soit égal à une fraction de π : $\theta = \frac{\pi}{q}$ avec $q \geq 2$ pour que les plans supports des réflexions soient différents. Nous notons alors $[q]$ ce groupe. Les orbites des plans supports des réflexions découpent une sphère dont, le centre est pour l'action du groupe, en $2q$ lunes. Le diagramme de Cayley associé au groupe est alors un polygone régulier à $2q$ cotés dont chaque sommet appartient à une des $2q$ lunes. De ce fait $[q]$ est isomorphe au groupe diédral \mathcal{D}_q d'ordre $2q$ et dont une présentation est :

$$s_1^2 = s_2^2 = (s_1 s_2)^q = 1. \quad (8.4.1)$$

Cas général

Passons au cas où le groupe fini de réflexions sont engendrés par trois réflexions s_1 , s_2 et s_3 . Un tel groupe va découper la sphère en triangles sphériques d'angles $\frac{\pi}{p_{23}}$, $\frac{\pi}{p_{31}}$ et $\frac{\pi}{p_{12}}$. Les relations vérifiées par les générateurs de ce groupe sont alors :

$$s_1^2 = s_2^2 = s_3^2 = (s_1 s_2)^{p_{12}} = (s_2 s_3)^{p_{23}} = (s_3 s_1)^{p_{31}} = 1. \quad (8.4.2)$$

Nous pouvons alors montrer, voir [CM84] ou la section sur les groupes de Coxeter 8.2.2, que toute autre relation entre les générateurs du groupe se déduit des relations 8.4.2. Les réflexions doivent être différentes et de ce fait les valeurs de p_{12} , p_{23} et p_{31} sont toutes supérieures ou égales à 2.

Nous obtenons le diagramme de Cayley du groupe en construisant le graphe dont les arêtes coupent les côtés de chaque triangle sphérique. Ce graphe n'est pas orienté puisque les générateurs du groupe sont d'ordre 2. Chaque sommet du graphe de Cayley appartient à trois polygones réguliers à $2p_{12}$, $2p_{23}$ et $2p_{31}$ côtés représentant les trois dernières relations 8.4.2.

Proposition 8.4.1. *Les valeurs possibles de $\{p_{12}, p_{23}, p_{31}\}$ sont :*

$$\{2, 2, q\}, \{2, 3, 3\}, \{2, 3, 4\}, \{2, 3, 5\}, \quad (8.4.3)$$

où q est un entier non nul. Le groupe associé est alors noté respectivement $[2, q]$, $[3, 3]$, $[3, 4]$, $[3, 5]$ ou de manière générique par le symbole $[p, q]$. Le groupe de symbole $[p, q]$ est le groupe des isométries affines des deux polyèdres réciproques de symbole $\{p, q\}$ et $\{q, p\}$. L'ordre d'un groupe $[p, q]$ est alors :

$$\frac{8pq}{4 - (p-2)(q-2)}. \quad (8.4.4)$$

Démonstration 8.4.3. Nous avons vu comment le groupe définit un pavage de la sphère en triangles sphériques identiques. La somme des angles de ces triangles vérifie donc la relation suivante :

$$\frac{\pi}{p_{12}} + \frac{\pi}{p_{23}} + \frac{\pi}{p_{31}} > \pi. \quad (8.4.5)$$

Comme $\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1 \leq 1$, l'un des p_{12} , p_{23} , p_{31} , noté r est inférieur ou égal à 2. Comme p_{12} , p_{23} et p_{31} sont tous les trois supérieurs à 2 nous en déduisons que $r = 2$. Notons p et

q les deux valeurs des p_{12} , p_{23} et p_{31} qui n'ont pas encore été attribuées. Nous obtenons alors la condition suivante :

$$(p - 2)(q - 2) < 4. \tag{8.4.6}$$

Si $p = 2$ alors toute valeur de q convient, nous notons $[2, q]$ ce groupe.

Si $p = 3$ alors $q = 3, 4, 5$. Nous obtenons ainsi trois groupes que nous notons respectivement $[3, 3]$, $[3, 4]$, $[3, 5]$.

Ces groupes sont définis, en permutant de manière convenable le nom des générateurs, par les présentations suivantes :

$$s_1^2 = s_2^2 = s_3^2 = (s_1 s_2)^2 = (s_2 s_3)^p = (s_3 s_1)^q = 1. \tag{8.4.7}$$

Le groupe de symbole $[p, q]$ est le groupe des isométries affines des deux polyèdres réciproques de symbole $\{p, q\}$ et $\{q, p\}$.

Le domaine fondamental du groupe est le triangle sphérique d'angle $\frac{\pi}{p_{23}}$, $\frac{\pi}{p_{31}}$ et $\frac{\pi}{p_{12}}$, pour une démonstration de ce résultat voir la section sur les groupes de Coxeter 8.2. Ainsi l'ordre de $[p, q]$ est égal au nombre de triangles nécessaires pour couvrir la sphère. L'aire de chaque triangle est égal à :

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{p} + \frac{1}{q} - 1. \tag{8.4.8}$$

L'aire de la sphère est égale à 4π et de ce fait nous avons besoin de

$$\frac{4}{\frac{1}{p} + \frac{1}{q} - \frac{1}{2}} \tag{8.4.9}$$

triangles pour recouvrir la sphère.

8.4.5. Sous-groupes des groupes de réflexion

Considérons un groupe fini engendré par les réflexions s_1 , s_2 et s_3 et de symbole $[p, q]$. Une présentation de ce groupe est alors :

$$s_1^2 = s_2^2 = s_3^2 = (s_1 s_2)^2 = (s_2 s_3)^p = (s_3 s_1)^q = 1. \tag{8.4.10}$$

Nous introduisons les trois isométries affines : $r_1 = s_1 s_2$, $r_2 = s_2 s_3$ et $r_3 = s_3 s_1$. r_1 , r_2 et r_3 sont des rotations d'angles respectifs $\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{p}$ et $\frac{\pi}{q}$.

Théorème 8.4.2. *Si nous considérons le groupe engendré par les trois rotations, seulement deux parmi les trois suffisent, nous obtenons l'un des groupes évoqués à la proposition 8.4.1 dont une présentation est alors :*

$$r_1^p = r_2^q = r_3^2 = r_1 r_2 r_3 = 1. \tag{8.4.11}$$

Nous notons ce groupe $[p, q]^+$. Nous avons $[p, q]^+ = [q, p]^+$ et l'ordre de ce groupe est :

$$\frac{4pq}{4 - (p - 2)(q - 2)}. \tag{8.4.12}$$

8.5 Conclusion

Proposition 8.4.2. *Lorsque $p = 3$ et $q = 4$ ou $q = 5$, l'élément $(s_1s_2s_3)^{2q-5}$ de $[p, q]$ est la symétrie centrale Z . Ainsi $[p, q]$ est le produit direct du groupe $\{1, Z\}$ et du sous-groupe de rotations $[p, q]^+$.*

Proposition 8.4.3. *Si q est pair alors $[p, q]$ a un autre sous-groupe d'indice 2, noté $[p^+, q]$ ou $[q, p^+]$, engendré par $r_1 = s_1s_2$ et s_3 . Une présentation de ce groupe est :*

$$r_1^p = s_3^2 = (r_1^{-1}s_3r_1s_3)^{\frac{q}{2}} = 1. \quad (8.4.13)$$

Si $q = 2$, $[p^+, 2]$ et $[2, p^+]$, est le produit direct du groupe cyclique d'ordre p engendré par r_1 , isomorphe à \mathcal{C}_p et du groupe cyclique d'ordre 2 engendré par s_3 , isomorphe à \mathcal{C}_2 .

Un groupe du type $[p^+, q]$ dont nous nous servons particulièrement est le groupe $[3^+, 4]$, qui est le produit direct du groupe engendré par $(r_1s_3)^3$, qui n'est autre que la symétrie centrale par application de la proposition 8.4.2, et du groupe $[3, 3]^+$, engendré par r_1 et $s_3r_1s_3$, qui est le groupe des isométries positives du tétraèdre. Géométriquement ce groupe s'interprète comme le groupe des isométries du dodécaèdre avec un cube inscrit ou, par passage aux polyèdres duaux, de l'octaèdre avec un icosaèdre inscrit.

Proposition 8.4.4. *Si q et p sont pairs, c'est-à-dire, $p = 2$ et q pair, alors la présentation 8.4.13 devient :*

$$r_1^2 = s_3^2 = (r_1s_3)^q = 1, \quad (q \text{ pair}). \quad (8.4.14)$$

Dans ce groupe diédral $[2^+, q]$, l'élément $s_1s_2s_3 = r_1s_3$ engendre un sous-groupe cyclique d'ordre q . Nous le notons $[2^+, q^+]$. Il s'agit d'un sous-groupe d'indice 4 de $[2, q]$ engendré par s_1, s_2, s_3 .

Remarquons que si q est impair alors s_1, s_2, s_3 engendre $[2, q^+]$.

8.4.6. Tableaux récapitulatifs

Nous faisons la synthèse des résultats présentés aux paragraphes 8.4.2, 8.4.3, 8.4.4 et 8.4.5 ci-dessus dans le tableau 8.5.

Nous utilisons ces groupes lors de l'étude des dispositifs proposés par Hardin et Sloane dans l'article [HS96]. Nous renvoyons donc le lecteur à la section 7.1.1 et en particulier au tableau 7.1.

Le tableau 8.6 établit la correspondance entre les dénominations des systèmes de Coxeter irréductibles, les diagrammes de Coxeter de ces groupes irréductibles et le symbole de ces groupes lorsqu'il s'agit du groupe des isométries affines d'un polytope régulier.

Le tableau 8.7 établit le lien entre les groupes finis de réflexions irréductibles et les pavages de la sphère qui sont associés à certains d'entre eux. Nous indiquons alors le symbole de Schläfli des polytopes réguliers dont ils sont les groupes d'isométries affines.

Le tableau 8.8 rappelle les degrés d'un système de générateurs de la \mathbb{R} -algèbre polynomiale des invariants des groupes apparaissant dans le tableau 8.7.

8.5. Conclusion

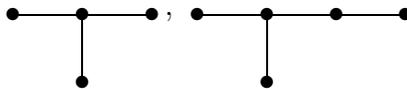
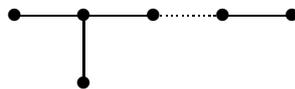
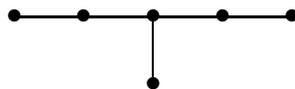
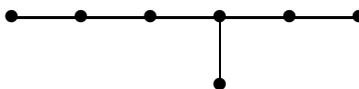
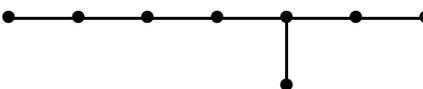
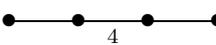
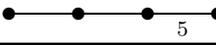
Ce chapitre est constitué par un rappel des résultats algébriques sur lesquels certaines démonstrations contenues dans les chapitres 5 et 6 reposent. Ainsi nous donnons au lecteur

Symbole	Structure	Ordre	q
$[q]^+$	\mathcal{C}_p	q	$1, 2, \dots$
$\left. \begin{matrix} [2^+, 2^+] \\ [1] \end{matrix} \right\}$	$\mathcal{C}_2 \cong \mathcal{D}_1$	2	
$\left. \begin{matrix} [2^+, 2q^+] \\ [2, q^+] \end{matrix} \right\}$	$\mathcal{C}_{2q} \cong \mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_q$	$2q$	impair
$\left. \begin{matrix} [2^+, 2q^+] \\ [2, q^+] \end{matrix} \right\}$	$\left. \begin{matrix} \mathcal{C}_{2q} \\ \mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_q \end{matrix} \right\}$	$2q$	pair
$\left. \begin{matrix} [2, 2]^+ \\ [2] \end{matrix} \right\}$	$\mathcal{D}_2 \cong \mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2$	4	
$\left. \begin{matrix} [2, q]^+ \\ [q] \end{matrix} \right\}$	\mathcal{D}_q	$2q$	$2, 3, \dots$
$[2^+, 4]$	\mathcal{D}_4	8	
$[2^+, 2q]$	\mathcal{D}_{2q}	$4q$	pair
$\left. \begin{matrix} [2^+, 2q] \\ [2, q] \end{matrix} \right\}$	$\mathcal{D}_{2q} \cong \mathcal{C}_2 \times \mathcal{D}_q$	$4q$	impair
$[2, 2]$	$\mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2 \times \mathcal{C}_2$	8	
$[2, q]$	$\mathcal{C}_2 \times \mathcal{D}_q$	$4q$	pair
$[3, 3]^+$	\mathcal{A}_4	12	
$[3^+, 4]$	$\mathcal{C}_2 \times \mathcal{A}_4$	24	
$\left. \begin{matrix} [3, 4]^+ \\ [3, 3] \end{matrix} \right\}$	\mathcal{S}_4	24	
$[3, 4]$	$\mathcal{C}_2 \times \mathcal{S}_4$	48	
$[3, 5]^+$	\mathcal{A}_5	60	
$[3, 5]$	$\mathcal{C}_2 \times \mathcal{A}_5$	120	

TAB. 8.5 – Groupes engendrés par des réflexions en dimension en dimension 3

des rudiments de géométrie algébrique ainsi que la définition des bases de Gröbner. Nous précisons quelles les propriétés qui nous ont été utiles ainsi que les algorithmes qui en découlent et sur lesquels reposent le code des programmes reproduit dans le chapitre 10. Nous avons également réalisé la classification ainsi que rappelé les premières propriétés des groupes de Coxeter qui seront utilisés tout au long des chapitres 11 et 7.

8.5 Conclusion

Groupe	Diagramme	Noeuds	Symbole
A_1		1	$[1]$
A_2, A_3		2, 3	$[3], [3, 3]$
A_n		$n \geq 1$	$\underbrace{[3, \dots, 3]}_{n-1} = [3^{n-1}]$
B_4, B_5		4, 5	$[3^{1,1,1}], [3^{2,1,1}]$
B_n		$n \geq 4$	$[3^{n-3,1,1}]$
E_6		6	$[3^{2,2,1}]$
E_7		7	$[3^{3,2,1}]$
E_8		8	$[3^{4,2,1}]$
C_2, C_3		2, 3	$[4], [4, 3]$
C_n		$n \geq 2$	$\underbrace{[4, 3, \dots, 3]}_{n-2} = [4, 3^{n-2}]$
F_4		4	$[3, 4, 3]$
D_2^p		2	$[p]$
G_3		3	$[3, 5]$
G_4		4	$[3, 3, 5]$

TAB. 8.6 – Groupes de Coxeter irréductibles, diagrammes de Coxeter et symbole du groupe

Groupe	Symbole	Schläfli	Sommets	Ordre
A_1	[1]	{1}	2	2
A_2, A_3	[3], [3, 3]	{3}, {3, 3}	3, 4	6, 24
A_n	$[3^{n-1}]$	$\{3^{n-1}\}$	$(n+1)$	$(n+1)!$
B_4, B_5	$[3^{1,1,1}], [3^{2,1,1}]$			192, 1920
B_n	$[3^{n-3,1,1}]$			$2^{n-1}n!$
E_6	$[3^{2,2,1}]$			$72 \cdot 6!$
E_7	$[3^{3,2,1}]$			$8 \cdot 9!$
E_8	$[3^{4,2,1}]$			$192 \cdot 10!$
C_2, C_3	[4], [4, 3]	{4}, $\left\{ \begin{array}{l} \{3, 4\} \\ \{4, 3\} \end{array} \right.$	$4, \begin{array}{l} 6 \\ 8 \end{array}$	8, 48
C_n	$[4, 3^{n-2}]$	$\left\{ \begin{array}{l} \{3^{n-2}, 4\} \\ \{4, 3^{n-2}\} \end{array} \right.$	$\begin{array}{l} 2n \\ 2^n \end{array}$	$2^n n!$
F_4	[3, 4, 3]	{3, 4, 3}	24	1152
D_2^p	[p]	{p}	p	$2p$
G_3	[3, 5]	$\left\{ \begin{array}{l} \{3, 5\} \\ \{5, 3\} \end{array} \right.$	$\begin{array}{l} 12 \\ 20 \end{array}$	120
G_4	[3, 3, 5]	$\left\{ \begin{array}{l} \{3, 3, 5\} \\ \{5, 3, 3\} \end{array} \right.$	$\begin{array}{l} 120 \\ 600 \end{array}$	120^2

TAB. 8.7 – Groupes de Coxeter irréductibles et nomenclature des polytopes réguliers

Groupe	Symbole	Degrés des invariants principaux	Force
A_n	$[3^{n-1}]$	2, 3, ..., $n+1$	2
B_n	$[3^{n-3,1,1}]$	2, 4, ..., $2n-2, n$	3
E_6	$[3^{2,2,1}]$	2, 5, 6, 8, 9, 12	4
E_7	$[3^{3,2,1}]$	2, 6, 8, 10, 12, 14, 18	5
E_8	$[3^{4,2,1}]$	2, 8, 12, 14, 18, 20, 24, 30	7
C_n	$[4, 3^{n-2}]$	2, 4, ..., $2n$	3
F_4	[3, 4, 3]	2, 6, 8, 12	5
D_2^p	[p]	2, p	$p-1$
G_3	[3, 5]	1, 6, 10	5
G_4	[3, 3, 5]	1, 12, 20, 30	11

TAB. 8.8 – Groupes de Coxeter irréductibles et degrés des invariants et force d'un plan sphérique naturellement associé au groupe

Chapitre 9

Conclusion

9.1. Résumé

Nous commençons par reprendre les résultats principaux qui ont été démontrés dans les chapitres 2 à 8 afin souligner la cohérence de l'ensemble des thèmes qui ont été abordés. Nous insistons principalement sur les démarches nouvelles propres à ce travail.

9.1.1. Chapitre 2

Dans ce chapitre, nous avons considéré en particulier des modèles de régression multiple polynomiale $(\mathcal{G}_{orth}, \mathcal{Q}_{orth})$ -équivariants et établi que les plans isovariants et admissibles forment une classe essentiellement complète. Nous avons également montré que la recherche de dispositifs D -optimaux et I -optimaux pour un modèle de régression polynomiale complet de degré d peut se restreindre à la recherche des plans qui sont de plus isovariants. Enfin nous avons souligné que la construction explicite d'un plan isovariant solution au problème de D -optimalité ou de I -optimalité nécessite la connaissance de dispositifs qui sont isovariants. La notion d'isovariance semble également avoir un intérêt dans d'autres domaines de la statistique ; nous renvoyons par exemple à [Her88] pour un exemple qui met en avant la notion d'isovariance pour la comparaison estimateurs par moindres carrés ordinaires et des estimateurs par moindres carrés généralisés.

Lors de la détermination de la matrice des moments d'un plan isovariant nous avons introduit la fonction génératrice des moments du plan. Il s'agissait avant tout d'une manière simple pour déterminer la valeur des moments d'un plan isovariant en utilisant le fait que la fonction génératrice des moments était radiale puisque qu'invariante par toute transformation du groupe orthogonal. La démonstration proposée a été simplifiée par rapport à celle de [MM02]. Nous avons montré qu'il est possible d'étendre ce résultat dans plusieurs directions. La première, le cas des sous-groupes du groupe orthogonal et d'un modèle polynomial complet, est déjà connue, *cf.* [Col02]. La seconde permet de s'intéresser au sous-groupes du groupe orthogonal et aux modèles polynomiaux qui ne sont pas nécessairement complets. Il s'agit d'un résultat nouveau puisque la fonction génératrice des moments n'est employée qu'avec des modèles polynomiaux complets. Enfin dans le troisième point nous démontrons que l'invariance faible pour un groupe compact et un modèle polynomial est équivalente à l'invariance de la fonction E -génératrice des moments. L'introduction de cette fonction ainsi que le théorème de caractérisation font

partie des nouveautés apportées par ce travail. Elles permettent l'utilisation de techniques d'algèbre commutative computationnelle qui, comme nous le verrons au chapitre 5, nous permettent une approche algorithmique de la construction de plans faiblement invariants pour l'action non seulement du groupe orthogonal mais aussi d'un groupe compact qui agit linéairement sur le domaine expérimental. Nous avons enfin montré comment il est possible, en utilisant les propriétés de la fonction génératrice des moments que nous avons montrées, de ramener le problème de la construction de plans \mathcal{G} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact à celui de la construction de plans \mathcal{K} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe de matrices \mathcal{K} qui est un sous-groupe compact du groupe orthogonal. Ainsi si nous sommes à mêmes de construire des dispositifs isovariants nous pouvons construire des plans qui sont \mathcal{G} -faiblement invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact quelque soit le groupe \mathcal{G} de matrices compact considéré.

Nous allons maintenant nous intéresser, dans le chapitre 3 suivant, au lien qui existe entre la notion d'isovariance, ou plus généralement d'invariance faible, et certaines propriétés de symétrie de la surface de variance d'une surface de réponse.

9.1.2. Chapitre 3

Dans ce chapitre, nous introduisons la notion de surface de réponse ainsi que celle de surface de variance si la matrice des moments du plan expérimental n'est pas singulière. Nous avons alors investigué les liens entre la \mathcal{G} -invariance d'une surface de réponse et la \mathcal{G} -invariance faible de la matrice des moments du plan. Ces deux propriétés sont équivalentes ce qui permet de traduire la propriété d'invariance faible du plan expérimental par l'invariance d'une fonction polynomiale par l'action du groupe \mathcal{G} . Si la matrice des moments du plan est singulière, nous introduisons la surface de variance extrapolée, $v_{M(\xi)}$, dont, si $M(\xi)M(\xi)^+$ et Q_g^* commutent pour tout $g \in \mathcal{G}$, la \mathcal{G} -invariance est équivalence à la \mathcal{G} -invariance de la matrice des moments $M(\xi)$ du plan ξ . Cette surface de variance extrapolée présente l'avantage d'être une fonction polynomiale sur le domaine expérimental χ tout entier contrairement à la généralisation, usuellement proposée, de la surface de variance au cas où la matrice des moments du plan n'est pas inversible. Par contre la \mathcal{G} -invariance de cette seconde surface de variance, appelée surface de variance généralisée et notée $\mathbf{v}_{M(\xi)}$, est équivalence à la \mathcal{G} -invariance de la matrice des moments $M(\xi)$ du plan ξ . Nous nous servons de ces caractérisations dans le chapitre 5. Nous nous intéressons particulièrement au cas particulier d'une invariance par toute transformation du groupe orthogonal \mathcal{O}_v , la caractérisation de matrices des moments \mathcal{Q}_{orth} -invariante est précisément l'objet du prochain chapitre.

9.1.3. Chapitre 4

Nous commençons par mettre en relation les plans isovariants dont le support est inclus dans une sphère avec les t -plans sphériques de force paire. Ces derniers sont des objets combinatoires qui interviennent dans plusieurs domaines des mathématiques. L'étude de leur existence, celle de leurs propriétés ainsi que celle de leur caractérisation a de ce fait été l'objet de plusieurs travaux de recherche. Nous utilisons ceux-ci pour en déduire l'existence de dispositifs isovariants. Toutefois les cardinaux des plans ainsi obtenus sont

souvent importants et ne permettent pas de répondre de manière satisfaisante au problème de la construction de plans expérimentaux isovariants de faible cardinal.

Ce chapitre a également permis de mettre une nouvelle fois en avant l'intérêt des plans isovariants grâce aux résultats de Neumaier et Seidel [NS92] ainsi que de Hardin et Sloane [HS92] sur la D -efficacité et la I -efficacité. Nous avons également fait le lien entre les t -plans sphériques combinatoires et les plans isovariants. Les techniques de construction de ces premiers peuvent donc être utilisées pour obtenir des dispositifs isovariants. Or comme nous l'avons vu il n'est pas évident de construire des plans sphériques et de surcroît des plans pour lesquels la force est maximale, le cardinal du plan étant fixé à l'avance.

Nous proposons une méthode de construction de plans faiblement invariants et en particuliers de plans sphériques isovariants au chapitre suivant.

9.1.4. Chapitre 5

Dans ce chapitre nous avons commencé par étaler un résultat de structure pour l'ensemble des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ induite par l'action linéaire d'un groupe \mathcal{G} de matrices compactes sur \mathbb{R}^v . Ces polynômes invariants forment une \mathbb{R} -sous-algèbre de type fini de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ dont il est possible de déterminer algorithmiquement un système de générateur lorsque le groupe \mathcal{G} est fini. Si le groupe \mathcal{G} est le groupe orthogonal, cette \mathbb{R} -sous-algèbre de type fini n'est autre que la \mathbb{R} -sous-algèbre des polynômes radiaux, c'est-à-dire $\mathbb{R}[\sum_{i=1}^v x_i^2]$. Or, lorsque nous connaissons un système de générateurs d'une \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ de type fini, il est possible de déterminer si un polynôme P donné de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ est un élément de cette \mathbb{R} -sous-algèbre en utilisant des techniques reposant sur le calcul du reste du polynôme P modulo une base de Gröbner judicieusement choisie.

Nous conférons alors aux résultats que nous avons obtenus dans les chapitres 2 et 3 un champ d'application nouveau : la caractérisation de l'invariance faible pour des modèles polynomiaux à l'aide d'invariants polynomiaux. Nous avons introduit trois objets, la fonction E -génératrice des moments, la surface de variance extrapolée et la surface de variance généralisée, et étudié les liens entre leur invariance pour l'action d'un groupe compact de matrices \mathcal{G} et l'invariance faible du plan expérimental. Si la matrice des moments du plan n'est pas singulière alors la surface de variance extrapolée et la surface de variance généralisée sont égales et sont des fonctions polynomiales : elles sont invariantes pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compactes si et seulement si elles appartiennent à la \mathbb{R} -sous-algèbre des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ induite par l'action linéaire du groupe \mathcal{G} sur \mathbb{R}^v . Si la matrice des moments du plan est singulière, la surface de variance généralisée n'est pas un polynôme et nous perdons l'équivalence que nous menons de mentionner. Toutefois, si la surface de variance généralisée coïncide avec un polynôme \mathcal{G} -invariant sur l'ensemble des valeurs du domaine expérimental pour lesquelles elle est finie, alors elle est \mathcal{G} -invariante et le plan expérimental est faiblement invariant. Nous avons pour objectif de remédier à ce défaut en introduisant, dans le chapitre 3, la surface de variance extrapolée. En effet, cette dernière présente l'avantage d'être une fonction polynomiale sur l'ensemble du domaine expérimental même lorsque la matrice des moments est singulière, ce qui nous permet d'obtenir une caractérisation polynomiale équivalente de la \mathcal{G} -invariance de la surface de variance extrapolée : cette

dernière est invariante pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact si et seulement si elle appartient à la \mathbb{R} -sous-algèbre des polynômes de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ invariants pour l'action sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ induite par l'action linéaire du groupe \mathcal{G} sur \mathbb{R}^v . Malheureusement nous n'avons pu montrer l'équivalence entre la \mathcal{G} -invariance faible du plan expérimental et celle de la surface de variance extrapolée que sous une condition de commutativité, ce qui réduit les possibilités d'application de cette caractérisation. Enfin, lorsque les fonctions polynomiales qui interviennent dans le modèle polynomial complet utilisé pour analyser le plan expérimental forment une famille libre sur le domaine expérimental et le groupe \mathcal{G} est un groupe de matrices compact, nous avons montré que la fonction E -génératrice des moments permet d'obtenir l'équivalence suivante : la E -fonction génératrice des moments est \mathcal{G} -invariante si et seulement si le plan est \mathcal{G} -faiblement invariant. Puis nous avons utilisé un résultat que nous avons prouvé au chapitre 2 pour ramener le problème général de la caractérisation de l'invariance faible d'un plan expérimental ξ par l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact quelconque à celle de la \mathcal{K} -invariance de la fonction génératrice des moments d'un plan expérimental Ψ , image du plan expérimental ξ par une application linéaire inversible, où \mathcal{K} est un sous-groupe du groupe orthogonal conjugué à \mathcal{G} . En particulier si le groupe \mathcal{G} de matrices compact est un sous-groupe maximal de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ alors le plan expérimental Ψ que nous devons construire est isovariant. Par conséquent, la connaissance de plans expérimentaux isovariants permet de résoudre complètement le problème de la construction de plans expérimentaux \mathcal{G} -invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} de matrices compact. Remarquons que, si le groupe \mathcal{G} de matrices n'est pas compact mais inclus dans un sous-groupe compact de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$, son adhérence dans $\mathcal{GL}_v, \overline{\mathcal{G}}$, pour la topologie induite par la topologie usuelle sur $\mathcal{M}_v(\mathbb{R})$ est compacte. En effet il s'agit d'une partie fermée d'un compact. Le groupe \mathcal{G} est un groupe topologique, pour la topologie induite par la topologie usuelle sur $\mathcal{M}_v(\mathbb{R})$, dont l'action est continue sur \mathbb{R}^v , par continuité de la multiplication matricielle, et de fait les égalités définissant des propriétés de \mathcal{G} -invariance ou de \mathcal{G} -invariance faible sont équivalentes à celles définissant la $\overline{\mathcal{G}}$ -invariance ou la $\overline{\mathcal{G}}$ -invariance faible. Notre approche permet donc de résoudre le problème de la construction de plans expérimentaux \mathcal{G} -invariants pour l'action d'un groupe \mathcal{G} inclus dans un groupe de matrices compact.

Nous sommes principalement intéressés par la construction de plans expérimentaux dont les coordonnées des points support sont connues exactement ; nous indiquons les raisons motivant ce choix dans le chapitre 6. C'est en ayant cette préoccupation à l'esprit que nous introduisons alors un problème de construction de type polynomial que nous définissons par trois objectifs que doivent vérifier les points support du plan. Ces objectifs sont constitués soit par un ensemble d'inéquations soit par un ensemble d'équations polynomiales en les coordonnées des points support d'un plan expérimental satisfaisant aux critères imposés par le problème de construction. Nous montrons alors, à l'aide des résultats liant invariance faible et invariants polynomiaux obtenus dans le début de ce chapitre, que la recherche plans expérimentaux faiblement invariants pour l'action d'un groupe de matrices inclus dans un groupe de matrices compact est un problème de construction de type polynomial. Il en va de même de la recherche de plans expérimentaux qui, pour un nombre fixé d'essais, minimise un critère d'optimalité dont l'image par une fonction strictement croissante est une fonction polynomiale ; les critères de D -optimalité, de I -*optimality* ou les critères ϕ_p , pour p entier positif, satisfont par exemple à cette condition. Il est également possible de considérer des domaines expérimentaux de formes variées qu'il soient

d'intérieur non vide, boule, ellipsoïde, cube ou simplexe, ou d'intérieur vide, sphère, frontière d'un ellipsoïde, d'un cube ou d'un simplexe. Un problème de construction de type polynomial englobe également la construction de plans bloqués orthogonalement. Il est naturellement possible de rechercher simultanément ou séquentiellement chacune de ces propriétés des plans expérimentaux.

Un problème de construction de type polynomial est équivalent à la formulation obtenue par Stengle en 1974, *cf.* [Ste96], du théorème des zéros réels. Il est donc possible d'utiliser la programmation semi-définie positive pour résoudre dans un premier lieu numériquement un problème de construction polynomiale et guider ainsi une résolution exacte. Nous indiquons de nombreux exemples de résolution de problèmes de construction de type polynomial au chapitre 7 ainsi qu'un exemple de résolution d'un problème de construction de type polynomial séquentiel dans le chapitre 7. À condition de mener de manière adéquate notre résolution du problème de construction de type polynomial, nous obtiendrons un plan expérimental solution dont les coordonnées des points support du plan seront connues de manière exacte.

Nous avons dans le chapitre 2 que la réduction de la dimension d'un problème d'optimisation est une étape cruciale dans la résolution de celui-ci. Nous nous sommes concentrés sur le cas particulier de la construction de type polynomial d'un plan isovariant. Nous avons alors indiqué comment réduire le nombre d'inconnues présentes dans les systèmes d'équations ou d'inéquations polynomiales définissant un problème de construction de type polynomial d'un plan isovariant. En effet, la recherche de dispositifs isovariants, comme nous l'avons vu au chapitre 4, est équivalente à la recherche de plans sphériques de force paire. Or, Hardin et Sloane ont montré empiriquement que, pour un cardinal donné, parmi tous les plans sphériques de force maximale certains forment des configurations régulières : chacun d'entre eux est une union d'orbites d'un point par un sous-groupe d'un groupe fini de réflexions. Cette propriété a de ce fait ramené le problème de construction de dispositifs isovariants à celui du choix des points dont nous allons prendre l'orbite ainsi que du sous-groupe du groupe de réflexions à utiliser pour construire ces orbites. Cette démarche est celle qui a été adoptée systématiquement dans le chapitre 7 auquel nous renvoyons le lecteur où il pourra contater l'intérêt de la méthodologie proposée au travers des nombreux exemples de construction qui y figurent ainsi qu'aux résultats qu'il a été possible de démontrer en les utilisant.

Nous développerons dans le chapitre 6 suivant les multiples possibilités qui sont offertes à l'expérimentateur dès lors qu'il connaît de manière exacte les coordonnées des points support du plan dont il se sert.

9.1.5. Chapitre 6

Ce chapitre nous a permis de montrer quelles conséquences pratiques peut tirer l'expérimentateur de la connaissance des coordonnées des points support du plan expérimental de manière exacte. En effet pouvoir utiliser les bases de Gröbner dans un contexte de planification expérimentale lui permet non seulement de traiter complètement le problème des confusions d'effets mais lui apporte aussi des options supplémentaires comme la possibilité de trouver un modèle saturé, d'orthogonaliser un modèle pour un plan donné, de

privilégier certains des facteurs expérimentaux dans l'étude de la réponse au travers du choix de l'ordre τ sur les monômes de $\mathbb{k}[x_1, \dots, x_v]$.

9.1.6. Chapitre 7

Cette étude de cas a permis de montrer que la méthodologie introduite dans le chapitre 5 permet d'aboutir à la construction de plans expérimentaux dont les coordonnées sont connues de manière exacte. Nous avons alors montré l'existence et indiqué comment obtenir de tels dispositifs pour tous les cardinaux pour lesquels il existe des plans isovariants pour des modèles polynomiaux complets de degré 2 en dimension 3. Nous en avons également tiré l'existence de dispositifs orthogonaux pour des problèmes de régression sphérique en dimension 3.

9.1.7. Chapitre 8

Ce chapitre est constitué par un rappel des résultats algébriques sur lesquels certaines démonstrations contenues dans les chapitres 5 et 6 reposent. Ainsi nous donnons au lecteur des rudiments de géométrie algébrique ainsi que la définition des bases de Gröbner. Nous précisons quelles les propriétés qui nous ont été utiles ainsi que les algorithmes qui en découlent et sur lesquels reposent le code des programmes reproduit dans le chapitre 10. Nous avons également réalisé la classification ainsi que rappelé les premières propriétés des groupes de Coxeter qui seront utilisés tout au long des chapitres 11 et 7.

9.2. Synthèse des résultats originaux

Nous faisons maintenant la liste par chapitre des résultats qui sont propres à l'approche que nous avons développée et qui est résumée à la section 9.1.

9.2.1. Chapitre 2

- i- La démonstration du lemme 2.3.4 simplifie celle généralement proposée en évitant le recours à un argument constructif.
- ii- La démonstration de la proposition 2.7.2 n'utilise que les propriétés de la fonction génératrice des moments d'un modèle polynomial complet de degré d . Ceci permet d'éviter l'étude de l'action induite par le groupe \mathcal{G} sur le modèle polynomial et de ce fait par exemple le recours aux notations schläfliennes.
- iii- La définition 2.8.1 de la fonction génératrice des moments pour un modèle polynomial qui n'est pas nécessairement complet.
- iv- L'équivalence entre l'invariance de la fonction génératrice des moments pour un modèle polynomial qui n'est pas nécessairement complet et celle de la matrice des moments du plan expérimental, *cf.* théorème 2.8.1.
- v- La définition 2.8.3 de la fonction E -génératrice des moments d'un modèle polynomial complet et l'utilisation qu'il en est faite. Il s'agit en particulier des points suivants.

9.2 Synthèse des résultats originaux

- vi- L'équivalence entre l'invariance de la fonction E -génératrice des moments d'un modèle polynomial complet et l'invariance faible du plan expérimental, *cf.* théorème 2.8.2.
- vii- L'équivalence entre l'invariance de la matrice des moments d'un plan expérimental ξ et celle d'un plan déduit de ξ pour l'action d'un sous-groupe du groupe ortho
- viii- La réduction du problème de la \mathcal{G} -invariance faible au cas de l'invariance faible par un sous-groupe du groupe orthogonal, *cf.* le théorème 2.8.3.
- ix- La construction de dispositifs \mathcal{G} -invariants à l'aide de dispositifs isovariants, *cf.* remarques 2.8.11 et 2.8.12.

9.2.2. Chapitre 3

- i- La définition 3.2.4 des surfaces de variance extrapolées à χ ainsi que leurs propriétés.
- ii- L'étude des liens entre leur \mathcal{G} -invariance et celle de la matrice des moments du plan expérimental. Il s'agit des théorèmes 3.2.1, 3.2.2 et 3.2.3.
- iii- Les conséquences de l'utilisation de la notation tensorielle d'un modèle polynomial complet sur la caractérisation de la \mathcal{G} -invariance de la surface de variance extrapolée à l'aide de la \mathcal{G} -invariance de la matrice des moments du plan expérimental, *cf.* théorème 3.4.1.

9.2.3. Chapitre 4

La construction de plans expérimentaux isovariants dont le support est sphérique à partir des résultats connus concernant l'existence de plans sphériques. Il s'agit des résultats de la section 4.6.

9.2.4. Chapitre 5

- i- La démonstration de la structure de \mathbb{R} -algèbre des invariants polynomiaux pour l'action d'un groupe de matrices compact utilisant les opérateurs de Reynolds pour un groupe de matrices compact, *cf.* proposition 5.1.3 et théorème 5.1.2.
- ii- La caractérisation polynomiale équivalente de la \mathcal{G} -invariance faible d'un plan expérimental déduite de la surface de variance extrapolée et ses conséquences : la surface de variance extrapolée appartient à une \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, *cf.* théorème 5.1.3. Cette appartenance peut se vérifier à l'aide d'un algorithme basé sur les bases Gröbner.
- iii- La condition polynomiale suffisante de la \mathcal{G} -invariance faible d'un plan expérimental déduite de la surface de variance généralisée et ses conséquences : la surface de variance généralisée appartient à une \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, *cf.* théorème 5.1.4. Cette appartenance peut se vérifier à l'aide d'un algorithme basé sur les bases Gröbner.
- iv- La caractérisation polynomiale équivalente de la \mathcal{G} -invariance faible d'un plan expérimental déduite de la fonction E -génératrice des moments d'un modèle polynomial complet et ses conséquences : la fonction E -génératrice des moments appartient à une \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, *cf.* paragraphe 5.1.3. Cette appartenance peut se vérifier à l'aide d'un algorithme basé sur les bases Gröbner.

- v- Les conséquences en termes d'invariants polynomiaux de la réduction du problème de la construction d'un dispositif \mathcal{G} –faiblement invariant à celui d'un plan isovariant, *cf.* corollaire 5.1.7.
- vi- La définition 5.2.1 d'un problème de construction de type polynomial.
- vii- La reformulation en termes de problème de construction de type polynomiale des propriétés d'invariance faible, de la plupart des critères d'optimalité alphabétique et du blocage orthogonal d'un plan expérimental, *cf.* théorème 5.2.1, les remarques 5.2.1, 5.2.2, 5.2.1 ainsi que le contenu des paragraphes 5.2.3, 5.2.4, et 5.2.5.
- viii- L'extension de l'utilisation des groupes de Coxeter pour construire des plans sphériques de force t à celle des problèmes de construction de type polynomial afin d'en réduire le nombre d'inconnues, *cf.* paragraphe 5.3.2.
- ix- Le lien entre un problème de construction de type polynomial et la programmation semi-définie positive exposée dans la section 5.4.

9.2.5. Chapitre 7

Nous obtenons plusieurs résultats concernant l'existence de plans dont les coordonnées sont connues de manière exacte au paragraphe 7.1.3. Il s'agit d'un résumé des résultats calculatoires du travail dont les volumineux détails sont donnés dans la deuxième partie au chapitre 11.

- i- Si $N = 4$ ou $N \geq 6$ alors il existe un dispositif de cardinal N qui, lorsqu'il est analysé avec un modèle polynomial complet de degré 1, est isovariant et dont les coordonnées sont connues de manière exacte.
- ii- Il existe des plans sphériques de force 4, dont les coordonnées des points support sont connues de manière exacte, dès que le cardinal du plan sphérique est égal à 12, 14 ou supérieur ou égal à 16. Pour chacune des valeurs de N suivantes 13, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 31, 33, 37, 39, 49, 55, 57, 61, 73, 81, les coordonnées exactes de ces plans sont connues et ces plans ne sont pas construits comme l'union de deux plans de cardinal inférieur. Pour tous ces dispositifs nous calculons la matrice des moments du plan expérimental ξ qui leur est naturellement associé, les ensembles $\text{Est}_{\text{lex}}(\xi)$ et $\text{Est}_{\text{grlex}}(\xi)$ et la variance de l'estimateur de Gauss-Markov correspondant. Nous donnons également une représentation graphique de l'enveloppe convexe des points support de la partie sphérique du plan ξ .
- iii- Le théorème 7.1.2 assure de l'existence de dispositifs fortement isovariants, dont le support est inclus dans l'union d'une sphère et de $\{\mathbf{0}\}$ et ne comportant aucune répétition, pour des modèles polynomiaux complets de degré 2 dès que le cardinal du dispositif est égal à 13, 15 ou supérieur ou égal à 17. Pour $N \in \llbracket 13, +\infty \llbracket$, il existe des dispositifs expérimentaux de cardinal N qui, analysés avec un modèle polynomial de degré 2, sont isovariants.
Précisons la nature de chacun de ces dispositifs :
 - Le support de chacun d'entre eux est l'union d'un plan sphérique et d'au moins un point au centre. Il est possible de spécifier le nombre total d'essais N et le nombre $k \geq 1$ de répétitions au centre du domaine arbitrairement dès que $N \geq k + 16$, $N = k + 14$ ou $N = k + 12$. Les valeurs de N et de k pour lesquelles nous avons

9.3 Ouvertures et extensions envisagées

- $N = k + 15$ ou $N = k + 13$ ne sont pas accessibles, il suffit de prendre à la place de la valeur k la valeur $k' = k + 1$ ou la valeur $k'' = k - 1$.
- Pour toutes les valeurs de N possibles, il est possible de construire des dispositifs ne comportant aucune répétition hormis à l'origine du repère.
 - En fonction de la valeur de N , il est possible de construire des dispositifs possédant un nombre partiel ou total de répétitions dans la partie sphérique du dispositif.
- iv- Les dispositifs de cardinal $N=4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 60, 72, 80$ sont des dispositifs dont les coordonnées sont connues de manière exacte et orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 1. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 1 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.
 - v- Les dispositifs de cardinal $N=12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 59, 72, 80$ sont des dispositifs dont les coordonnées sont connues de manière exacte et orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 2. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 2 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.
 - vi- Les dispositifs de cardinal $N=24, 26, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 59, 72, 80$ sont des dispositifs dont les coordonnées sont connues de manière exacte et orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 3. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 3 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.
 - vii- Les dispositifs de cardinal $N=36, 48, 54, 56, 59, 72, 80$ sont des dispositifs dont les coordonnées sont connues de manière exacte et orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 4. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 4 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.
 - viii- Les dispositifs de cardinal $N=60, 72, 80$ sont des dispositifs dont les coordonnées sont connues de manière exacte et orthogonaux lorsque qu'ils sont analysés avec un modèle polynomial sphérique d'ordre 5. Ils sont optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 6 pour tous les critères d'optimalité Φ_p introduits par Kiefer et repris dans l'exemple 2.2.1 du chapitre 2.

9.3. Ouvertures et extensions envisagées

Nous indiquons quelques pistes possibles pour généraliser ou approfondir les résultats que nous avons utilisés ou montrés.

En premier lieu nous proposons une utilisation systématique de la théorie des représentations linéaires des groupes compacts pour :

- i- Construire le groupe \mathcal{Q} dans le lemme 2.3.1 avec un projecteur dont l'image, égale à $\text{Vect}(\mathbf{f}(\boldsymbol{\chi}))$, et le noyau sont \mathcal{G} -stables.
- ii- Étudier l'impact du choix précédent pour définir le groupe \mathcal{Q} sur les liens entre les symétries de la surface de variance extrapolée et l'invariance faible de la matrice des moments du plan ; en particulier sur la condition de commutativité sous laquelle l'équivalence démontrée dans le théorème 3.2.1 du chapitre 3 a été démontrée.
- iii- Caractériser les modèles, qu'ils soient polynomiaux ou non, équivariants. Cette ouverture concerne le théorème en particulier 2.3.2.

Une seconde piste est l'utilisation du fait que tout sous-groupe \mathcal{G} compact maximal du groupe linéaire soit conjugué au groupe orthogonal pour étudier les liens entre l'admissibilité et la \mathcal{G} -invariance faible en étudiant la possibilité de développer des résultats analogues à ceux de la section 2.6 en particulier le théorème 2.6.4, ce qui peut permettre d'obtenir des résultats pour des domaines expérimentaux de type ellipsoïde.

Un troisième point est l'utilisation des transformations décrites dans le livre de Dunkl et Xu, [DX01], afin de construire des plans dans des domaines expérimentaux qui n'ont pas la forme d'une boule centrée en l'origine et pour lesquels la variance est constante sur des ensembles déduits par homothétie, centrée en l'origine du repère, de la frontière du domaine expérimental. Nous renvoyons, par exemple, à l'article de Cornell et Khuri, [CK79], qui applique cette stratégie au cas du simplexe. Les résultats de Dunkl et Xu permettent d'étendre cette idée à des domaines expérimentaux ayant d'autres formes.

Enfin, l'utilisation des mesures euclidiennes, qui sont des unions de plans sphériques concentriques en l'origine du domaine expérimental, permet d'obtenir des dispositifs isovariants pour lesquels la matrice des moments du plan expérimental n'est pas singulière. Jusqu'à très récemment les seules mesures euclidiennes connues étaient construites comme un assemblage de plans sphériques isovariants concentriques. Les articles de Bannai et Bannai, [BB06b] et [BB06a], Bajnok, [Baj06] et [Baj07], et Bannai, Bannai et Supriyanto, [BBS07], proposent de nouvelles constructions dont nous pourrions tirer parti pour construire des dispositifs \mathcal{G} -faiblement invariants et pour lesquels la matrice des moments n'est pas singulière.

Liste des figures

8.1	Les cinq solides platoniciens.	220
8.2	Les quatre solides de Kepler-Poinsot.	221

Liste des tableaux

7.1	Conjectured values of $\tau_3(N)$	168
7.2	Plans sphériques orthogonaux exacts	175
7.3	Conjectured values of $\tau_4(N)$	176
8.1	Polygones réguliers	229
8.2	Polyèdres réguliers	229
8.3	Polytopes réguliers en dimension 4	230
8.4	Polytopes réguliers en dimension $n \geq 5$	231
8.5	Groupes finis engendrés par des réflexions en dimension 3	238
8.6	Diagrammes et symboles de groupes Coxeter irréductibles	239
8.7	Groupes de Coxeter irréductibles et nomenclature des polytopes réguliers .	240
8.8	Degrés des invariants fondamentaux et force d'un plan sphérique	240

Bibliographie de la première partie

- [ABKR00] J. Abbott, A. Bigatti, M. Kreuzer, and L. Robbiano. Computing ideals of points. *J. Symbolic Computation*, 30 :341–356, 2000.
- [AD92] A.C. Atkinson and A.N. Donev. *Optimum Experimental Designs*. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [AKR01] J. Abbott, M. Kreuzer, and L. Robbiano. Computing zero-dimensional schemes. *J. Symbolic Computation*, 11, 2001.
- [Ale99] M. Alessandri. *Thèmes de géométrie : groupes en situation*. Dunod, 1999.
- [Ari88] J. Arias de Reyna. A generalised mean-value theorem. *Mth. Math.*, 106 :95–97, 1988.
- [Baj91a] B. Bajnok. Construction of spherical 4- and 5-designs. *Graphs and Combinatorics*, 7 :219–233, 1991.
- [Baj91b] B. Bajnok. Constructions of designs on the 2-sphere. *Europ. J. Combinatorics*, 12 :377–382, 1991.
- [Baj92] B. Bajnok. Construction of spherical t -designs. *Geom. Dedicata*, 43 :167–179, 1992.
- [Baj98] B. Bajnok. Constructions of spherical 3-designs. *Graphs and Combinatorics*, 14 :97–107, 1998.
- [Baj06] B. Bajnok. On euclidean designs. *Advances in Geometry*, 6 :423–438, 2006.
- [Baj07] B. Bajnok. Orbits of the hyperoctahedral group as euclidean designs. *Journal of Algebraic Combinatorics*, 25 :375–397, 2007.
- [Ban79] E. Bannai. On tight spherical designs. *Journal of Combinatorial Theory, Series A*, 26 :38–47, 1979.
- [Bap00] R.B. Bapat. *Linear algebra and linear models*. Springer-Verlag, New York, second edition, 2000.
- [BB58] G.E.P. Box and D.W. Behnken. Some new three level second order designs for surface fitting. Technical Report 26, Statistical Techniques Research Group, Eindhoven University, 1958.
- [BB60] G.E.P. Box and D.W. Behnken. Some new three level designs for the study of quantitative variables. *Technometrics*, 2 :455–475, 1960.
- [BB06a] E. Bannai and E. Bannai. On euclidean tight 4-designs. *Journal of the Mathematical Society of Japan*, 58 :775–804, 2006.
- [BB06b] E. Bannai and E. Bannai. On optimal tight 4-designs on 2 concentric spheres. *European Journal of Combinatorics*, 27 :179–192, 2006.
- [BBD02] P. Boyvalenkov, S. Boumova, and D. Danev. New nonexistence results for spherical designs. In B. Bojanov, editor, *Constructive Function Theory*, Sofia, 2002. Varna 2002, DARBA.
- [BBS07] E. Bannai, E. Bannai, and D. Suprijanto. On the strong non-rigidity of certain tight euclidean designs. *European Journal of Combinatorics*, 28 :1662–1680, 2007.

- [BC59] R.C. Bose and R.L. Carter. Complex representation in the construction of rotatable designs. *Ann. Math. Stat.*, 30 :771–780, 1959.
- [BD59] R.C. Bose and N.R. Draper. Second order rotatable designs in three dimensions. *Ann. Math. Statist.*, 30 :1097–1112, 1959.
- [BD79] E. Bannai and R.M. Damerell. Tight spherical designs, i. *J. Math. Soc. Japan*, 31 :199–207, 1979.
- [BD80] E. Bannai and R.M. Damerell. Tight spherical designs, ii. *J. London Math. Soc.*, 21 :13–30, 1980.
- [BD82] G.E.P. Box and N.R. Draper. Measures of lack of fit for response surface designs and predictor variable transformations. *Technometrics*, 24 :1–8, 1982.
- [BD88] G.E.P. Box and N.R. Draper. *Empirical model building and response surfaces*. Wiley, New York, 1988.
- [BD07] G.E.P. Box and N.R. Draper. *Response Surfaces, Mixtures and Ridge Analyses*. Wiley, New York, second edition edition, 2007.
- [BDN99] P. Boyvalenkov, D. Danev, and S. Nikova. Nonexistence of certain spherical designs of odd strengths and cardinalities. *Discr. and Comp. Geom.*, 21 :143–156, 1999.
- [BGRW98] R.A. Bates, B. Giglio, E. Riccomagno, and H.P. Wynn. Gröbner basis methods in polynomial modelling. *Proceedings of COMPSTAT '98*, pages 179–184, 1998.
- [BH57] G.E.P. Box and J.S. Hunter. Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces. *Annals of Mathematical Statistics*, 28 :195–241, 1957.
- [BH85] E. Bannai and S.G. Hoggar. On tight t -designs in compact symmetric spaces of rank one. *Proc. Japan Acad., Series A*, 61 :78–82, 1985.
- [BH89] E. Bannai and S.G. Hoggar. Tight t -designs and squarefree integers. *Europ. J. Combinatorics*, 10 :113–135, 1989.
- [BM01] R.M. Block and R.W. Mee. Some new second-order designs. preprint, 2001.
- [BN94] P. Boyvalenkov and S. Nikova. New lower bounds for some spherical designs. *Lecture Notes in Computer Science*, 781 :207–216, 1994.
- [BN98] P. Boyvalenkov and S. Nikova. Improvements of the lower bounds for the size of some spherical designs. *Mathematica Balkanica*, 12 :151–160, 1998.
- [BOB07] F. Bertrand, A. Ourliac, and B. Boulanger. Recherche numérique de plans d -optimaux pour des problèmes de pharmacocinétique et pharmacodynamique : une étude de cas. *Actes des Journées de la Statistique organisée par la Société Française de Statistique*, 2007.
- [Bou81] N. Bourbaki. *Éléments de mathématique : Groupes et algèbres de Lie. Chapitre 4, 5 et 6*. Masson, 1981.
- [Bou02] S.P. Boumova. *Applications of polynomials to spherical codes and designs*. Phd thesis, Eindhoven University of Technology, 2002.
- [Buc66] B. Buchberger. *On Finding a Vector Space Basis of the Residue Class Ring Modulo a Zero Dimensional Polynomial Ideal*. PhD thesis, Department of Mathematics, University of Innsbruck, 1966.

- [Car01] J.-C. Carréga. *Théorie des corps. La règle et le compas*. Hermann, Paris, 2001.
- [CK79] J.A. Cornell and A.I. Khuri. Obtaining constant prediction variance on concentric triangles for ternary mixture systems. *Technometrics*, 21 :147–157, 1979.
- [CLO96] D. Cox, J. Little, and D. O’Shea. *Ideals, Varieties and Algorithms : An introduction to Computational Algebraic Geometry and Commutative Algebra*. Springer-Verlag, New York, 2nd edition, 1996.
- [CM84] H.S.M. Coxeter and W.O.J. Moser. *Generators and Relations for Discrete Groups*. Springer-Verlag, New-York, 4th edition, 1984.
- [CMMR87] A. Corana, B.L. Marchesi, C. Martini, and S. Ridella. Minimizing multimodal functions of continuous variables with the *simulated annealing* algorithm. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 13 :262–280, 1987.
- [Col95] D. Collombier. *Plans d’expérience factoriels*, volume 21 of *SMAI*. Springer, 1995.
- [Col02] D. Collombier. Plans d’expérience euclidiens. Cours de Master 2ème année, Université Louis Pasteur, 2002.
- [Cox73] H.S.M. Coxeter. *Regular Polytopes*. Dover, New-York, 3rd edition, 1973.
- [CR98] M. Caboara and E. Riccomagno. An algebraic computational approach to the identifiability of fourier models. *J. Symbolic Comput.*, 26 :245–260, 1998.
- [CR00] D.R. Cox and N. Reid. *The Theory of the Design of Experiments*, volume 86 of *Monographs on Statistics and Applied Probability*. Chapman & Hall/ CRC, Boca Raton, 2000.
- [CS99] J.H. Conway and N.J.A. Sloane. *Sphere Packings, Lattices and Groups*. A Series of Comprehensive Studies in Mathematics. Springer-Verlag, 1999.
- [Das61] M.N. Das. Construction of rotatable designs from factorial designs. *J. Indian Soc. Agric. Statist.*, 1961.
- [DDPG94] N.R. Draper, T.P. Davis, L. Pozueta, and D.M. Grove. Isolation of degrees of freedom for box-behnken designs. *Technometrics*, 36 :283–291, 1994.
- [de 00] P. de la Harpe. *Topics in Geometric Group Theory*. Chicago Lectures in Mathematics. University of Chicago Press, Chicago, 2000.
- [DFS97] J.J. Dreesbeke, J. Fine, and G. Saporta, editors. *Plans d’expériences : Applications à l’entreprise*. Éditions Technip, Paris, 1997.
- [DGP91] N.R. Draper, N. Gaffke, and F. Pukelsheim. First and second order rotatability of experimental designs, moment matrices, and information surfaces. *Metrika*, 38 :129–161, 1991.
- [DGP93] N.R. Draper, N. Gaffke, and F. Pukelsheim. Rotatability of variance surfaces and moment matrices. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 36 :347–356, 1993.
- [DGS77] P. Delsarte, J.M. Goethals, and J.J. Seidel. Spherical codes and designs. *Geometricae Dedicata*, 6 :363–388, 1977.
- [DH68] N.R. Draper and A.M. Herzberg. Further second order designs. *The Annals of Mathematical Statistics*, 39 :1995–2001, 1968.

-
- [DHP96] N.R. Draper, B. Heiligers, and F. Pukelsheim. On optimal third order rotatable designs. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 48 :395–402, 1996.
- [DMG67] N.R. Draper and J.F. Mc Gregor. Some forty point four factor second order rotatable designs. Technical report, Wisconsin Univ. Madison Dept. of Statistics, 1967.
- [DMP05] H. Dette, V.B. Melas, and A. Pepelyshev. Optimal designs for three-dimensional shape analysis with spherical harmonic descriptors. *The Annals of Statistics*, 33 :2758–2788, 2005.
- [DN62] M.N. Das and V.L. Narasimham. Construction of rotatable designs through balanced incomplete block designs. *The Annals of Mathematical Statistics*, 33 :1421–1439, 1962.
- [Dom01] A. Domarkas. *Exact solving of nonlinear optimization problems*. Maplesoft, 2001.
- [DP90] N.R. Draper and F. Pukelsheim. Another look at rotatability. *Technometrics*, 32 :195–202, 1990.
- [DP94] N.R. Draper and F. Pukelsheim. On third order rotatability. *Metrika*, 41 :137–161, 1994.
- [DP98] N.R. Draper and F. Pukelsheim. Polynomial representation for response surface modeling. In *New Developments and Applications in Experimental Design*, volume 34 of *IMS Lectures Notes – Monograph Series*, pages 199–212. IMS, 1998.
- [dP04] P. de la Harpe and C. Pache. Spherical designs and finite group representations (some results of E. Bannai). *European Journal of Combinatorics*, 25 :213–227, 2004.
- [Dra60a] N.R. Draper. Second-order rotatable designs in four or more dimensions. *Ann. Math. Statist.*, 31 :23–33, 1960.
- [Dra60b] N.R. Draper. Third order rotatable designs in three dimensions. *Ann. Math. Statist.*, 31 :865–874, 1960.
- [Dra61] N.R. Draper. Third order rotatable designs in three dimensions : Some specific designs. *The Annals of Mathematical Statistics*, 32 :910–913, 1961.
- [DX01] C.F. Dunkl and Y. Xu. *Orthogonal Polynomials of Several Variables*, volume 81 of *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [Far06] J. Faraut. *Analyse sur les groupes de Lie*. Calvage & Mounet, Paris, 2006.
- [FG03] J. Farr and S. Gao. Computing gröbner bases for vanishing ideals of finite sets of points. preprint, 2003.
- [FGLM93] J.C. Faugère, P. Gianni, D. Lazard, and T. Mora. Efficient computation of zero-dimensional gröbner bases by change of ordering. *Journal of Symbolic Computation*, 16 :329–344, 1993.
- [GD75] T.K. Gupta and A. Dey. On some new second order rotatable designs. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 27 :167–175, 1975.

- [GGH59] D.A. Gardiner, A.H.E. Grandage, and R.J. Hader. Third order rotatable designs for exploring response surfaces. *Ann. Math. Statist.*, 30 :1082–1096, 1959.
- [GH95b] N. Gaffke and B. Heiligers. Computing optimal approximate invariant designs for cubic regression on multidimensional balls and cubes. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 47 :347–376, 1995.
- [GH96] N. Gaffke and B. Heiligers. Approximate designs for polynomial regression : Invariance, admissibility and optimality. In S. Ghosh and C.R. Rao, editors, *Handbook of Statistics*, volume 13, chapter 30, pages 1149–1199. Elsevier Science B.V., 1996.
- [GK79] Z. Galil and J. Kiefer. Extrapolation designs and ϕ_p -optimum designs for cubic regression on the q -ball. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 3 :27–38, 1979.
- [God93] C.D. Godsil. *Algebraic Combinatorics*. Chapman and Hall, 1993.
- [GP04] K. Gatermann and P.A. Parrilo. Symmetry groups, semidefinite programs, and sums of squares. *Journal of Pure and Appl. Algebra*, 192 :95–128, 2004.
- [GRW00] B. Giglio, E. Riccomagno, and H.P. Wynn. Gröbner basis strategies in regression. *Journal of Applied Statistics*, 27 :923–938, 2000.
- [GS79] J.M. Goethals and J.J. Seidel. Spherical designs. In D.K. Ray-Chaudhuri, editor, *Relations Between Combinatorics and Other Parts of Mathematics*, volume 34, pages 255–272. Proceedings of Symposia in Pure Mathematics, 1979.
- [GS81] J.M. Goethals and J.J. Seidel. Cubature formulae, polytopes and spherical designs. In *The Geometric Vein, the Coxeter Festschrift*, pages 203–218. Springer, 1981.
- [GW00] J. Gabrielsson and D. Weiner. *Pharmacokinetic and Pharmacodynamic Data Analysis : Concepts and Applications*. Swedish Pharmaceutical Press, 2000.
- [Hei91] B. Heiligers. Admissibility of experimental designs in linear regression with constant term. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 28 :107–123, 1991.
- [Hel78] S. Helgason. *Differential Geometry, Lie Groups and Symmetric Spaces*. Pure and Applied Mathematics. Academic Press, New York, 1978.
- [Her64] A.M. Herzberg. Two third order rotatable designs in four dimensions. *The Annals of Mathematical Statistics*, 35 :445–446, 1964.
- [Her88] A.M. Herzberg. Some further results for the equivalence of ordinary least squares and weighted least squares estimators : an advantage for rotatable designs. In Y. Dodge, V.V. Fedorov, and H.P. Wynn, editors, *Optimal Design and Analysis of Experiments*, pages 185–193. Elsevier Science Publishers B.V., North-Holland, 1988.
- [Hex63] G.R. Hext. The estimation of second-order tensors, with related tests and designs. *Biometrika*, 50 :353–373, 1963.
- [HH66] W.J. Hill and W.G. Hunter. A review of response surface methodology : A literature survey. *Technometrics*, 8 :571–590, 1966.

- [Hil82] H. Hiller. *Geometry of Coxeter groups*, volume 54 of *Research Notes in Mathematics*. Pitman, Boston, 1982.
- [Hog82] S.G. Hoggar. t -designs in projective spaces. *Europ. J. Combinatorics*, 3 :233–254, 1982.
- [Hog84a] S.G. Hoggar. Parameters of t -designs in $\mathbb{F}p^{d-1}$. *Europ. J. Combinatorics*, 5 :29–36, 1984.
- [Hog84b] S.G. Hoggar. Tight t -designs and octonions. In *Coxeter Festschrift, Teil III*, pages 1–16. University of Giessen, 1984.
- [Hog92] S.G. Hoggar. t -designs with general angle set. *Europ. J. Combinatorics*, 13 :257–271, 1992.
- [Hog96] S.G. Hoggar. Spherical t -designs. In C.J. Colbourn and J.H. Dinitz, editors, *The CRC handbook of combinatorial designs*. CRC Press, Boca Raton, 1996.
- [Hon82] Y. Hong. On spherical t -designs in \mathbb{R}^2 . *Europ. J. Combin.*, 3 :255–258, 1982.
- [HPRW99] T. Holliday, G. Pistone, E. Riccomagno, and H.P. Wynn. The application of computational algebraic geometry to the analysis of designed experiments : a case study. *Computational Statistics*, 14 :213–231, 1999.
- [HS91] R.H. Hardin and N.J.A. Sloane. *Operatig Manual for Gosset : A general-Purpose Program for Constructing Experimental Designs*, volume 98 of *Statistics Research Report*. AT&T Bell Labs, Murray Hill, second edition, 1991.
- [HS92] R.H. Hardin and N.J.A. Sloane. New spherical 4-designs. *Discrete Mathematics*, 106/107 :255–264, 1992.
- [HS93] R.H. Hardin and N.J.A. Sloane. A new approach to the construction of optimal designs. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 37 :339–369, 1993.
- [HS95] R.H. Hardin and N.J.A. Sloane. Codes (spherical) and (designs) experiments. In *Proceedings of Symposia in Applied Mathematics*, volume 50, pages 179–206. American Mathematical Society, 1995.
- [HS96] R.H. Hardin and N.J.A. Sloane. McLaren’s improved snub cube and other new spherical designs in three dimensions. *Discrete Compu. Geom.*, 15 :429–441, 1996.
- [Hud82] S. Huda. Some third-order rotatable designs in three dimensions. *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 34 :365–371, 1982.
- [Hum90] J.E. Humphreys. *Reflection groups and Coxeter groups*, volume 29 of *Cambridge Studies in Advanced Mathematics*. Cambridge University Press, 1990.
- [Kan01] R.M. Kane. *Reflection groups and invariant theory*. Number 5 in CMS books in mathematics. Springer-Verlag, New-York, 2001.
- [KC96] A.I. Khuri and J.A. Cornell. *Response Surfaces : Designs and Analyses*. Marcel Dekker, New York, 2nd edition edition, 1996.
- [Kem93] S. Kemper. The invar package for calculating rings of invariants. IWR Preprint Universitat Heidelberg, 93–94., 1993.
- [Khu06] A.I. Khuri, editor. *Response Surface Methodology and Related Topics*. World Scientific Publishing Co, Singapore, 2006.

- [Kie56] J. Kiefer. Optimum experimental designs. *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B*, 21 :272–304, 1956.
- [Kie60] J. Kiefer. Optimum experimental designs v, with applications to systematic and rotatable designs. In *Proc. 4th Berkeley Sympos. Math. Statist. and Probability*, volume 1, pages 381–405, Calif., 1960. Univ. Calif. Press.
- [Kie74] J. Kiefer. General equivalence theory for optimum designs (approximate theory). *Annals of Statistics*, 2 :849–879, 1974.
- [Kie75] J. Kiefer. Construction and optimality of generalized youden designs. In J.N. Srivastava, editor, *A Survey of Statistical Design and Linear Models*, pages 333–353. North-Holland Publishing Compagny, Amsterdam, 1975.
- [KR00] M. Kreuzer and L. Robiano. *Computational Commutative Algebra 1*. Springer, Berlin-Heidelberg, 2000.
- [KR05] M. Kreuzer and L. Robiano. *Computational Commutative Algebra 2*. Springer, Berlin-Heidelberg, 2005.
- [Kra83] O. Krafft. A matrix optimisation problem. *Lin. Algebra Appl.*, 51 :137–142, 1983.
- [Kry62] V.I. Krylov. *Approximative Calculation of Integrals*. Macmillan, New York, 1962.
- [KS66] S. Karlin and W.J. Studden. Optimal experimental designs. *Annals of Mathematical Statistics*, 37 :783–815, 1966.
- [Kup70] L.L. Kupper. Optimal response surface techniques using fourier and spherical harmonics. Technical Report 678, Inst. Statist., 1970.
- [Kup72] L.L. Kupper. Fourier series and spherical harmonics regression. *Applied Statistics*, 21 :121–130, 1972.
- [Kup73] L.L. Kupper. Minimax designs for fourier series and spherical harmonics regressions : A characterisation of rotatable arrangements. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Methodological)*, 35 :493–500, 1973.
- [Lan84] S. Lang. *Algebra*. Addison-Wesley Publishing Co., 1984.
- [LMSS02] E.P. Liski, N.K. Mandal, K.R. Shah, and B.K. Sinha. *Topics in Optimal Design*. Number 163 in Lecture Notes in Statistics. Springer-Verlag, New-York, 2002.
- [Lom92] H. Lombardi. Une borne sur les degrés pour le théorème des zéros réel effectif. In M. Coste, L. Mahé, and M.-F. Roy, editors, *Real Algebraic Geometry*, volume 1524 of *Lectures Notes in Mathematics*, pages 323–345. Rennes 1991, Springer-Verlag, 1992.
- [LS73] P.W.H. Lemmens and J.J. Seidel. Equiangular lines. *J. Alg.*, 24 :494–512, 1973.
- [LT98] P. Lascaux and R. Théodor. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur*, volume 1. Masson, Paris, 2ème édition edition, 1998.
- [Map05] Maplesoft. *Maple 10.0*. Maplesoft, Waterloo, 2005.
- [Mar75] K.V. Mardia. Statistics of directional data (with discussion). *Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Methodological)*, 37 :349–393, 1975.

- [Mat71] H. Matsumoto. Quelques remarques sur les espaces riemanniens isotropes. *C.R. Acad. Sc. Paris, Série A*, 272 :316–319, 1971.
- [Mat07] The MathWorks. *Matlab 2007a*. The MathWorks, Naticj, 2007.
- [MD68] J.S. Mehta and M.N. Das. Asymmetric rotatable designs and orthogonal transformations. *Technometrics*, 10 :313–322, 1968.
- [Mee00] R.W. Mee. New box-behnken designs. Technical report, The University of Tennessee, Knoxville, 2000.
- [Mim90] Y. Mimura. A construction of spherical 2–designs. *Graphs and Combinatorics*, 6 :369–372, 1990.
- [MJ00] K.V. Mardia and P.E. Jupp. *Directional Statistics*. Wiley, Chichester, 2000.
- [MM02] R.H. Myers and D.C. Montgomery. *Response Surface Methodology*. Wiley, New York, second edition, 2002.
- [MMM93] M.G. Marinari, H.M. Möller, and T. Mora. Gröbner bases of ideals defined by functionals with an application to ideals of projective points. *Appl. Algebra Engrg. Comm. Comput.*, 4 :103–145, 1993.
- [MMM96] M.G. Marinari, H.M. Möller, and T. Mora. On multiplicities in polynomial system solving. *Transactions of the American Mathematical Society*, 348 :3283–3321, 1996.
- [Mon01] D.C. Montgomery. *Design and Analysis of Experiments*. Wiley, New York, fifth edition, 2001.
- [MP75] R. Mead and D.J. Pike. A biometrics invited paper. a review of response surface methodology from a biometric viewpoint. *Biometrics*, 31 :803–851, 1975.
- [MP05] K.V. Mardia and V. Patrangenary. Directions and projective shapes. *The Annals of Statistics*, 33 :1666–1699, 2005.
- [MT86] R. Mneimné and F. Testard. *Introduction à la théorie des groupes de lie classiques*. Hermann, Paris, 1986.
- [Neu80] A. Neumaier. Distances, graphs and designs. *Europ. J. Combinatorics*, 1 :163–174, 1980.
- [Neu81] A. Neumaier. Combinatorial configurations in terms of distances. Memorandum 81–09, Dept. Of Math., Eindhoven University, 1981.
- [NM92] N.-K. Nguyen and A.J. Miller. A review of some exchange algorithms for constructing discrete d-optimal design. *Computational Statistics & Data Analysis*, 14 :489–498, 1992.
- [NS88] A. Neumaier and J.J. Seidel. Discrete measures for spherical designs, eutactic stars and lattices. *Proc. Nederl. Akad. Wetensch., A*, 91 :321–334, 1988.
- [NS92] A. Neumaier and J.J. Seidel. Measures of strength $2e$, and optimal designs of degree e . *Sankhyā*, 54 :299–309, 1992. Dedicated to the memory of R.C. Bose.
- [Par00] P.A. Parrilo. *Structured semidefinite programs ans semialgebraic geometry methods in robustness and optimization*. PhD thesis, California Institute of Technology, 2000.

- [Par03] P.A. Parrilo. Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems. *Mathematical Programming Ser. B*, 96 :293–320, 2003.
- [Per96] D. Perrin. *Cours d’algèbre*. Ellipses, Paris, 1996.
- [Pic73] G. Pichon. *Groupes de Lie, représentations linéaires et applications*. Hermann, Paris, 1973.
- [PL02] M. Pawlak and S.X. Liao. On the recovery on a function on a circular domain. *IEEE Transactions on Information Theory*, 48 :2736–2753, 2002.
- [PPSP04a] S. Prajna, A. Papachristodoulou, P. Seiler, and P.A. Parrilo. New developments in sum of squares optimization and sostoools. In *Proceedings of the American Control Conference (ACC)*, Boston, 2004.
- [PPSP04b] S. Prajna, A. Papachristodoulou, P. Seiler, and P.A. Parrilo. *SOSTOOLS : Sum of squares optimization toolbox for MATLAB*. Available from <http://www.cds.caltech.edu/sostoools> and <http://www.mit.edu/~parrilo/sostoools>, 2004.
- [Pre86] M.J. Prentice. Orientation statistics without parametric assumptions. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Methodological)*, 48 :214–222, 1986.
- [Pre89] M.J. Prentice. Spherical regression on matched pairs of orientation statistics. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Methodological)*, 51 :241–248, 1989.
- [PRW00a] G. Pistone, E. Riccomagno, and H.P. Wynn. *Algebraic Statistics : Computational Commutative Algebra in Statistics*, volume 89 of *Monographs on Statistics and Applied Probability*. Chapman&Hall/CRC, 2000.
- [PRW00b] G. Pistone, E. Riccomagno, and H.P. Wynn. Gröbner basis methods for structuring and analysing complex industrial experiments. *International Journal of Reliability, Quality and Safety Engineering*, 7 :285–300, 2000.
- [PS03] P.A. Parrilo and B. Sturmfels. Minimizing polynomial functions. In S. Basu and L. Gonzalez-Vega, editors, *Algorithmic and quantitative real algebraic geometry*, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, pages 83–99. AMS, 2003.
- [Puk93] F. Pukelsheim. *Optimal Design of Experiments*. Wiley, New-York, 1993.
- [PW96] G. Pistone and H.P. Wynn. Generalised confounding with gröbner bases. *Biometrika*, 83 :653–666, 1996.
- [Rag71] D. Raghavarao. *Constructions and Combinatorial Problems in Design of Experiments*. Wiley series in Probability and Mathematical Statistics. 1971. Reprinted by Dover Pub., New York, 1988.
- [Rez95] B. Reznick. Some constructions of spherical 5–designs. *Linear Algebra Appl.*, 226–228 :163–196, 1995.
- [RM71] C.R. Rao and S.K. Mitra. *Generalized Inverse of Matrices and Its Applications*. Wiley, New York, 1971.
- [RW99] E. Riccomagno and H.P. Wynn. Gröbner bases in experimental design : an overview. *Sigsam Bulletin*, March 1999.

-
- [Sch96] R. Schwabe. *Optimum Designs for Multi-Factor Models*. Number 113 in Lecture Notes in Statistics. Springer-Verlag, 1996.
- [Sei01] J.J. Seidel. Definitions for spherical designs. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 95 :307–313, 2001.
- [Ser78] J.-P. Serre. *Représentations linéaires des groupes finis*. Hermann, Paris, 1978.
- [Sha83] R. Shaw. *Linear Algebra and Group Representations*, volume II. Academic Press, New York, 1983.
- [SHC03] N.J.A. Sloane, R.H. Hardin, and P. Cara. Spherical designs in four dimensions. Extended Abstract, 2003.
- [Sid74] V.M. Sidelnikov. New bounds for the density of sphere packings in an n -dimensional euclidean space. *Math. USSR Sbornik*, 24 :147–157, 1974.
- [Sob62] S.L. Sobolev. Cubature formulas on the spheres invariant under finite groups of rotations. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 146 :310–313, 1962.
- [Sob74] S.L. Sobolev. *Introduction to the Theory of Cubature Formulas*. Nauka, 1974.
- [Ste96] G. Stengle. A nullstellensatz and a positivstellensatz in semialgebraic geometry. *Math. Ann.*, 207 :87–97, 1996.
- [Stu02] B. Sturmfels. *Solving Systems of Polynomial Equations*, volume 97 of *Conference Board of the Mathematical Sciences : Regional Conference Series in Mathematics*. American Mathematical Society, 2002.
- [Stu03] B. Sturmfels. Design of experiments. John von Neumann Lectures, 2003. Lecture.
- [SZ84] P.D. Seymour and T. Zaslavsky. Averaging sets : A generalisation of mean values and spherical designs. *Advances in Mathematics*, 52 :213–240, 1984.
- [Tra00] Q.N. Tran. A fast algorithm for gröbner basis conversion and its applications. *J. Symbolic Computation*, 30 :151–167, 2000.
- [Ven01] B. Venkov. Réseaux et designs sphériques. In J. Martinet, editor, *Réseaux euclidiens, designs sphériques et formes modulaires : Autour des travaux de Boris Venkov*, volume 37 of *Monographies de L’Enseignement Mathématique*, chapter 1. L’enseignement mathématique, Genève, 2001.
- [Wei65] A. Weil. *L’intégration dans les groupes topologiques et ses applications*. Hermann, Paris, 1965.

Résumé - Ce travail comporte deux parties, l'une théorique et l'autre pratique, et porte sur l'utilisation combinée d'outils combinatoires et algébriques pour la construction et l'analyse de plans d'expérience. Nous nous intéressons en particulier à des caractérisations polynomiales des propriétés d'invariance faible d'un plan expérimental et proposons une définition ainsi qu'un cadre de résolution d'un problème de construction de type polynomial à l'aide de la géométrie algébrique réelle et du lien entre l'optimisation semi-définie positive et le théorème des zéros réels. Nous nous intéresserons ici également à la méthodologie des surfaces de réponse et plus particulièrement à la propriété d'isovariance statistique, ce qui nous amène à étudier plus particulièrement des plans dont le support est inclus dans une sphère. Les principaux avantages de l'approche développée dans ce travail sont sa grande généralité, son automatisation et l'obtention des coordonnées exactes des points support du plan ce qui permet une détermination complète des confusions d'effets contrairement à la construction numérique de plans d'expérience euclidiens qui ne permet pas l'analyse exacte des confusions d'effets qui apparaissent nécessairement lorsque nous nous intéressons à des plans euclidiens de petite taille. Or une connaissance précise des confusions d'effets est nécessaire pour rendre possible l'utilisation de modèles polynomiaux qui ne seront plus limités au degré 2 comme c'est trop souvent le cas dans la théorie et dans la pratique. De nombreux exemples de construction de plans isovariants, l'étude de leurs caractéristiques ainsi que les programmes ayant permis d'obtenir ces résultats sont également présentés.

INSTITUT DE RECHERCHE MATHÉMATIQUE AVANCÉE
 UMR 7501
 Université Louis Pasteur et CNRS
 7 Rue René Descartes
 67084 STRASBOURG CEDEX



CENTRE NATIONAL
 DE LA RECHERCHE
 SCIENTIFIQUE



ISSN 0755-3390

Tél. 03 90 24 01 29
 Fax 03 90 24 03 28

<http://www-irma.u-strasbg.fr>
 irma@math.u-strasbg.fr

IRMA 2007/14
 TEL 00188330