



HAL
open science

Plans d'expérience pour mélanges à deux niveaux et facteurs externes

Hanen Hanna

► **To cite this version:**

Hanen Hanna. Plans d'expérience pour mélanges à deux niveaux et facteurs externes. Mathématiques [math]. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2010. Français. NNT: . tel-00564885

HAL Id: tel-00564885

<https://theses.hal.science/tel-00564885>

Submitted on 10 Feb 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE
présentée à

L'UNIVERSITÉ DE PAU ET DES PAYS DE L'ADOUR
ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES EXACTES ET DE LEURS APPLICATIONS

par
Hanan HANNA
pour obtenir le grade de
Docteur
Spécialité : MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

*Plans d'expérience pour mélanges à deux
niveaux et facteurs externes*

SOUTENUE LE 16 DÉCEMBRE 2010 DEVANT LE JURY COMPOSÉ DE MESSIEURS :

Christophe BIERNACKI,	Professeur à l'Université Lille 1	Rapporteur
Laurent BORDES,	Professeur à l'UPPA	Directeur
Pierre DRUILHET,	Professeur à l'Université Blaise Pascal	Rapporteur
Walter TINSSON,	Maître de conférences à l'UPPA	Codirecteur

Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications - Pau - UMR CNRS 5142
Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA)

Remerciements

J'adresse ma profonde gratitude à Walter Tinsson qui a guidé mes travaux de recherche. Merci d'avoir partagé avec moi tes idées, tes connaissances et ton expérience. J'ai eu beaucoup de chance de t'avoir comme directeur de thèse.

J'exprime toute mon admiration au Professeur Laurent Bordes, Directeur du Laboratoire de Mathématiques. J'ai bien apprécié votre capacité à exercer l'autorité dans l'équilibre de la fermeté et la gentillesse.

Je remercie sincèrement les Rapporteurs, Professeurs Christophe Biernacki et Pierre Druilhet, qui ont accepté la responsabilité de rapporter sur mon travail malgré leurs multiples occupations.

Je suis contente d'avoir rencontré tous ces jeunes doctorants avec qui j'ai partagé des moments très agréables au sein du laboratoire. Je remercie ceux qui m'ont tant aidée à surmonter les difficultés de la langue lors de la rédaction de cette thèse.

Je remercie le personnel de la Bibliothèque Mathématiques/Géologie, tout particulièrement Lina Goncalves pour son service de qualité et son efficacité.

Pendant ces trois ans j'ai reçu du Laboratoire de Mathématiques de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour le support matériel nécessaire à la réalisation de mes travaux ainsi que le financement pour ma participation à des congrès. Merci.

A la Universidad de Carabobo debo el apoyo financiero que hizo posible desarrollar este trabajo durante una estadía extraordinaria de tres años y tres meses continuos en Francia. Gracias.

*A Dios agradezco la fortaleza que me hace
afrentar las dificultades con entusiasmo*

Résumé

Les plans d'expérience pour mélanges traitent des cas où les propriétés du mélange sont dépendantes uniquement des proportions de ses composants.

Ce travail porte sur les systèmes de mélanges à deux niveaux où chaque composant principal (CP) est lui-même un sous-mélange de composants secondaires (CS). Ces systèmes sont classés en :

- Mélanges de type A : les proportions des CP sont fixées et celles des CS sont variables.
- Mélanges de type B : les proportions des CP et des CS sont toutes variables.

Afin d'analyser les deux types de mélanges on propose des modèles additifs. Ce type de modèles est bien adapté pour l'expérimentation avec de nombreux composants car le nombre de paramètres est considérablement inférieur au nombre de paramètres des modèles multiplicatifs proposés dans la littérature.

On construit des plans vérifiant deux hypothèses, l'une d'orthogonalité à l'intérieur de chaque groupe de CS et l'autre d'équilibre entre sous-mélanges de CS par couple de CP. Pour ce type de plans, dit orthogonal-équilibré (OE), on obtient de manière explicite les estimateurs des moindres carrés des paramètres du modèle additif ainsi que sa matrice de dispersion. À partir de la dispersion on déduit l'optimalité uniforme des plans composés de sous-mélanges purs dans la classe de plans OE.

L'identification entre les plans orthogonaux factoriels classiques et cette sous-classe de plans OE permet d'obtenir des plans de taille restreinte pour certaines configurations des systèmes de mélanges. On établit aussi l'identification entre les sous-mélanges purs et les expériences axiales, ceci donne une méthode pour la construction de plans OE où les proportions des CS et des CP sont non nulles.

On considère aussi la modélisation conjointe de mélanges et facteurs externes. C'est le cas par exemple d'un médicament pour lequel la performance dépend de la formulation ainsi que de la dose appliquée. On propose toujours des modèles additifs pour les mélanges de type A et de type B tenant compte des facteurs externes. On utilise de même les techniques classiques de construction de fractions orthogonales de tailles réduites à partir d'un plan factoriel complet composé du rassemblement des trois groupes de variables : proportions des CS, proportions des CP et facteurs externes.

Mots-clés : mélanges à deux niveaux, modèle additif, plan orthogonal-équilibré, expériences axiales, fraction orthogonale.

Table des matières

Introduction	3
1 Plans d'expérience pour mélanges	7
1.1 Notations, définitions et propriétés	7
1.1.1 Notations	7
1.1.2 Combinatoire	8
1.1.3 Définitions	9
1.1.4 Déterminant	10
1.1.5 Matrices binaires	13
1.2 Modèle linéaire et estimabilité	16
1.2.1 Modèle linéaire usuel	16
1.2.2 Surface de réponse polynomiale	17
1.2.3 Estimabilité	18
1.3 Critères d'optimalité	19
1.4 Plans pour mélanges classiques	21
1.4.1 Domaine expérimental	21
1.4.2 Parties du simplexe S_q	24
1.4.3 Plan d'expérience axial	25
1.4.4 Réseaux de Scheffé	27
1.4.5 Polynôme reparamétré de degré deux	30
1.4.6 Polynôme général de Scheffé	31
1.4.7 Modèle de Cox	32
1.5 Systèmes pour mélanges à deux niveaux	34
1.5.1 Généralités	34
1.5.2 Exemples et remarques	35
1.5.3 Système MoM de type A	37
1.5.4 Système MoM de type B	38
1.6 Plans et modèles pour systèmes MoM	38
1.6.1 Réseau multiple de Scheffé	38
1.6.2 Modèle multiplicatif	39
1.7 Bases de Gröbner	40

2	Modèle et plan pour système MoM de type A	47
2.1	Modèle additifs	48
2.1.1	Identifiabilité du modèle additif	48
2.1.2	Contraintes d'identification	50
2.1.3	Interprétation des paramètres	51
2.2	Plan orthogonal-équilibré (OE)	52
2.3	Estimation des paramètres du modèle additif	57
2.3.1	Matrice d'information	57
2.3.2	Factorisation de l'inverse de la matrice d'information	58
2.3.3	Estimateurs des moindres carrés	63
2.3.4	Espérance et dispersion des estimateurs	65
2.3.5	U-optimalité dans la classe de plans OE	67
2.4	Plan strictement orthogonal-équilibré (SOE)	68
2.4.1	Réseaux multiples d'ordre un	70
2.4.2	Rappel : plans factoriels et fractions orthogonales	73
2.4.3	Exemples de fractions <i>SOE</i> de petites tailles	75
2.5	Plan centroïde pour le modèle additif	76
2.6	Modèle croisé	79
3	Modèle et plan pour système MoM de type B	83
3.1	Domaine expérimental	83
3.2	Modélisation	85
3.2.1	Modèle additif général (AG)	85
3.2.2	Modèle CP-additif	87
3.3	Plan OE pour le système MoM de type B (OE_B)	89
3.4	Estimation des paramètres du modèle AG pour un plan OE_B	91
3.5	Plan partiellement OE_B (POE_B)	93
3.5.1	Plan axial- OE_A	93
3.5.2	Plan POE_B construit à partir de plans axiaux- OE_A	98
3.6	Exemple	102
4	Mélanges à deux niveaux et facteurs externes	105
4.1	Mélange classique et facteur externe	105
4.2	Facteur masse et système MoM de type A	107
4.3	Système MoM de type A et facteurs externes	111
4.3.1	Modèle	111
4.3.2	Plan	111
4.4	Système MoM de type B et facteurs externes	114
	Conclusions	117
	Perspectives	119
	Références	121

Introduction

Les plans d'expérience pour mélanges traitent les cas où certaines propriétés que l'on cherche à modéliser sont dépendantes des proportions des composants intervenant dans le mélange. Le domaine expérimental est caractérisé par la contrainte qui met en relation les proportions, ainsi, si $x_i \in [0, 1]$ est la proportion du i -ème composant, pour $i = 1, \dots, q$, on a :

$$x_1 + x_2 + \dots + x_q = 1 \quad (1)$$

La modélisation et l'analyse de données pour mélanges sont traitées dans de nombreux articles repris en partie dans le livre de Cornell (2002) consacré à ce sujet. La théorie et la méthodologie des plans pour mélanges ont été développées face à diverses applications de l'industrie depuis les quatre dernières décennies. On peut citer Kissell (1967), Draper & St. John (1977a), Snee (1981), Chick & Piepel (1984), Cornell & Ramsey (1998). Les plus récentes éditions des ouvrages sur les plans d'expérience pour surfaces de réponse, précisément Myers & Montgomery (2002) et Box & Draper (2006), ont incorporé des chapitres sur les plans pour mélange. D'où l'importance atteinte par ce sujet pendant les dernières années.

Bien que la première mention à des plans pour mélanges date de 1953 (Quenouille, 1953), les articles les plus reconnus sont ceux de Scheffé (1958, 1963) car ils ont introduit les plans en réseaux pour modèles polynomiaux reparamétrés en concordance avec la contrainte (1). Ces articles sont les bases de travaux postérieurs tels que ceux de Lambrakis (1968) qui a fait l'extension pour des réseaux multiples de Scheffé. Il s'agit de la première référence sur ce que plus tard on appellera plans d'expérience pour mélange de mélanges. Ceci est l'objet d'étude dans cette thèse.

Un système de mélange à deux niveaux (mélange de mélanges) se caractérise par le fait que chaque composant est lui-même un mélange d'autres composants. Ils sont appelés *composants principaux* et sont des sous-mélanges de *composants secondaires*.

Pour la plupart des références les proportions des composants principaux sont fixes. Cornell & Ramsey (1998) introduisent par contre des proportions variables pour des composants principaux dans une application associée à la fabrication de circuits intégrés. D'autre part Piepel (1999) traite la formulation de médicaments comme un système à double mélange et introduit l'appellation MoM (*mixture-of-mixtures*) ainsi que sa classification en deux types de systèmes à propos de l'article de Cornell et Ramsey.

Les modèles MoM que nous avons trouvé dans la bibliographie sont des surfaces polynomiales comme celle proposée par Lambrakis (1968). Il s'agit de modèles multiplicatifs obtenus par produits des polynômes reparamétrés selon les contraintes des sous-mélanges. Ce type de modèle est estimé sur un réseau multiple construit par le produit cartésien des réseaux de Scheffé, où chaque réseau est associé aux composants secondaires liés à un unique composant principal.

Bien que le modèle multiplicatif soit identifiable sur le réseau multiple, on se pose des questions sur sa taille et la faisabilité économique de sa mise en place lorsqu'on excède deux composants principaux et que de nombreux composants secondaires sont considérés.

Très peu de modèles alternatifs existent dans la bibliographie. Suite aux travaux de Lambrakis (1968, 1969), les auteurs Nigam (1973), Kumari & Mittal (1986) et Murthy & Murty (1989) proposent des modèles polynomiaux quadratiques pour les cas où les composants principaux sont conçus comme des facteurs et non pas comme composants dans une formule.

D'autre part, nous nous intéressons aux problèmes mélange-facteur, c'est-à-dire, aux cas où la réponse dépend de facteurs autres que les proportions de mélanges à deux niveaux. Dans la bibliographie l'inclusion de facteurs externes n'a été considérée que pour des mélanges classiques. On y trouve des modèles polynomiaux du plus simple (additif) au plus complexe (multiplicatif). Par exemple, Czitrom (1988, 1989) propose le regroupement de mélanges par blocs orthogonaux soumis au critère de D-optimalité en obtenant l'expression analytique d'un tel critère pour trois et quatre composants. Prescott & Draper (1998) construisent aussi des plans à blocs orthogonaux tenant compte de bornes supplémentaires sur les proportions des composants. Kowalski, Cornell & Vining (2000), et Prescott (2004) sont plutôt orientés vers l'inclusion sélective de termes croisés afin de réduire la taille du plan.

Un type particulier des problèmes de mélange-facteur est la formulation d'un médicament où la réponse mesurée est fonction de la formule et de la dose. Pour cette application on n'a qu'un facteur externe qui est la quantité du mélange. Un autre exemple, associé à la production d'hydrocarbures, est le mélange d'essences où la performance dépend des proportions des composants raffinés ainsi que de la taille du véhicule et de la vitesse, il y a donc deux facteurs externes.

Dans cette thèse le but est de construire des modèles polynomiaux et des plans de petite taille pour :

- (I) Système MoM à proportions de composants principaux fixées.
- (II) Système MoM à proportions de composants principaux variables.
- (III) Inclusion de facteurs externes dans les deux cas.

Ce document est constitué de quatre chapitres :

Chapitre 1. On met à disposition les outils mathématiques utilisés dans ce travail. On fait des rappels sur les thèmes de mélanges classiques et de mélanges à deux

niveaux.

Chapitre 2. On introduit les notions de plan orthogonal-équilibré (OE) et de plan strictement orthogonal-équilibré (SOE) pour le système de mélanges indiqué en (I). Ce type de plans sont analysés à l'aide d'un modèle polynomial d'ordre un. Ce modèle est surparamétré à cause des contraintes du système MoM, on impose alors des contraintes d'identification supplémentaires.

Chapitre 3. On généralise le modèle et le type de plans du chapitre 2 pour les système MoM où les proportions de composants principaux ne sont plus fixées.

Chapitre 4. Sur la base des plans de classe OE pour les deux type de systèmes MoM on construit des plans pour une surface polynomiale d'ordre un tenant compte de facteurs externes.

Chapitre 1

Plans d'expérience pour mélanges

Ce chapitre rassemble des notations, définitions et théories qui seront très souvent utilisées par la suite

On fait tout d'abord des rappels pour certaines propriétés d'analyse combinatoire, quelques opérations matricielles et quelques résultats d'algèbre linéaire.

On présente ensuite des généralités sur l'estimabilité pour le modèle linéaire utilisé. En particulier nous nous intéressons dans le cadre de la thèse à l'estimation des moindres carrés de modèles sur-paramétrés soumis à des contraintes d'identification.

La troisième partie, la plus importante du chapitre, est consacrée aux modèles et plans d'expérience pour des modèles classiques de mélanges, tel que les réseaux de Scheffé ou les plans utilisant les axes de Cox. Une approche du modèle de Cox généralisé est envisagée comme une alternative aux modèles multiplicatifs proposés dans la littérature pour le système de mélanges à deux niveaux ou, en terminologie anglaise, système MoM (*mixture of mixtures*).

La dernière partie du chapitre utilise les bases de Gröbner, selon l'article de Pistone et Wynn (1996), en construisant des modèles identifiables à partir d'un plan donné. Cette méthode est bien appropriée aux systèmes MoM du fait que le plan du départ peut être mis sous la forme d'un système d'équations polynomiales contenant les contraintes propres aux systèmes MoM.

1.1 Notations, définitions et propriétés

1.1.1 Notations

- ▷ $\mathbb{1}_n$: vecteur de \mathbb{R}^n dont les composantes sont égales à 1.

- ▷ $\mathbb{M}_{m,n}(K)$: ensemble des matrices de m lignes et n colonnes à éléments dans le corps K . Pour la taille, on dit matrice d'ordre $m \times n$ et si $m = n$ on dit ordre n . Si $K = \mathbb{R}$ on utilise la notation $\mathbb{R}^{m \times n}$ au lieu de $\mathbb{M}_{m,n}(\mathbb{R})$.

▷ A' : transposée de la matrice A .

▷ $|A|$: déterminant de la matrice carrée A .

▷ $J_{m,n}$: matrice d'ordre $m \times n$ dont les composantes sont égales à 1, ainsi

$$J_{m,n} = \mathbf{1}_m \mathbf{1}_n'$$

Lorsque $n = m$ on remplace $J_{n,n}$ par J_n .

▷ $0_{m,n}$: matrice d'ordre $m \times n$ dont les composantes sont égales à zéro.

▷ 0_n : vecteur d'ordre n dont les composantes sont égales à zéro.

▷ I_n : matrice identité d'ordre n .

▷ $\mathbb{B}_q = \{e_1, \dots, e_q\}$: base canonique de \mathbb{R}^q .

▷ $\wp(A)$: ensemble des parties de l'ensemble A .

▷ $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$

▷ $\text{Im}A$: sous-espace engendré par les colonnes de la matrice A .

▷ $\text{rg}A$: dimension de $\text{Im}A$.

▷ $\ker A$: noyau de la matrice A .

▷ $N(A)$: dimension de $\ker A$.

1.1.2 Combinatoire

Ces résultats de l'analyse combinatoire vont être utilisés ici pour déterminer la taille des plans traités par la suite.

Lemme 1.1 *Le nombre de combinaisons sans répétition de k éléments parmi n est égal à C_n^k . De plus,*

$$\sum_{k=1}^n C_k^n = 2^n - 1$$

Lemme 1.2 Soient n et k deux entiers tels que $2 \leq k \leq n$, le nombre de solutions de l'équation

$$l_1 + l_2 + \cdots + l_k = n$$

dans \mathbb{N}^* est égal à C_{n-1}^{k-1} .

Lemme 1.3

$$\sum_{i=1}^{\min(k,n)} C_n^i C_{k-1}^{i-1} = C_{n+k-1}^k$$

Ces résultats de l'analyse combinatoire peuvent être trouvés dans Comptet (1970).

1.1.3 Définitions

Enveloppe convexe.

Soit l'ensemble $A = \{v_1, \cdots, v_n\} \subset \mathbb{R}^q$, on définit l'enveloppe convexe de A , notée $\text{Conv}(A)$ ou $\text{Conv}(v_1, \cdots, v_n)$, par :

$$\text{Conv}(A) = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^q : \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \lambda_i v_i, \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0, i = 1, \cdots, n \right\} \quad (1.1)$$

On note $\underline{\text{Conv}}(A)$ le sous-ensemble de $\text{Conv}(A)$ obtenu en remplaçant $\lambda_i \geq 0$ par $\lambda_i > 0$ dans (1.1).

Simplexe.

On appelle simplexe l'enveloppe convexe de \mathbb{B}_q , noté S_q .

Matrice de permutation.

Définition 1.1 Soit σ une permutation de l'ensemble $\{1, 2, \cdots, n\}$. On appelle matrice de permutation associée à σ la matrice carrée suivante :

$$P_\sigma = \left[e_{\sigma(1)} | \cdots | e_{\sigma(n)} \right]'$$

Autrement dit, P_σ est une permutation des lignes de la matrice identité d'ordre n .

Remarque : l'ensemble des matrices de permutation $n \times n$ avec le produit matriciel est un groupe fini de cardinal $n!$.

Produit d'Hadamard.

Soient $v = (a_1, \cdots, a_n)$ et $w = (b_1, \cdots, b_n)$ deux vecteurs, on appelle produit d'Hadamard de v et w le vecteur $v \odot w = (a_1 \cdot b_1, \cdots, a_n \cdot b_n)$.

Le produit d'Hadamard est défini aussi pour les matrices de même taille. Soient $A = (a_{ij})$ et $B = (b_{ij})$ deux matrices de même taille, on appelle produit d'Hadamard de A et B la matrice $A \odot B = B \odot A = (a_{ij} b_{ij})$.

Produit tensoriel.

Soient $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $B \in \mathbb{R}^{r \times p}$. On appelle produit tensoriel (ou produit de Kronecker) de A et B , la matrice en $\mathbb{R}^{mr \times np}$ définie par :

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

Lemme 1.4 Soient A et B deux matrices à composantes réelles, alors,

$$\text{rg}(A \otimes B) = (\text{rg}A)(\text{rg}B) = \text{rg}(B \otimes A)$$

Démonstration.

Pour la démonstration on peut consulter le livre de Laub (2005). \diamond

1.1.4 Déterminant

Lemme 1.5 Soit la matrice inversible $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ et $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$, alors

$$\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = |A| |D - CA^{-1}B|$$

Démonstration.

Le résultat est immédiat après la factorisation suivante :

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ CA^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

La matrice $D - CA^{-1}B$ est appelée le **complément de Schur** de A . \diamond

Lemme 1.6 La matrice $A = aI_n + bJ_n$ est inversible si et seulement si $a \neq 0$ et $a \neq -nb$. De plus,

a) $A^{-1} = \frac{1}{a}I_n - \frac{b}{a(a+nb)}J_n$

b) $|A| = a^{n-1}(a+nb)$

Démonstration.

a) Le produit entre matrices du type $B = xI_n + yJ_n$ est commutatif, ainsi :

$$BA = AB = axI_n + (ay + bx + nby)J_n$$

On cherche les valeurs de x et y telles que $AB = I_n$. Ceci correspond à la résolution du système :

$$\begin{cases} (a+b)x + (a+nb)y = 1 \\ bx + (a+nb)y = 0 \end{cases}$$

qui a une solution unique si et seulement si $a(a + nb) \neq 0$. Donc, pour $a \neq 0$ et $a \neq -nb$, la matrice B est l'inverse de A si $x = \frac{1}{a}$ et $y = -\frac{b}{a(a + nb)}$.

b) Après le lemme 1.5 on a :

$$|aI_{n+1} + bJ_{n+1}| = \left| \frac{A}{b\mathbf{1}'_n} \middle| \frac{b\mathbf{1}_n}{a+b} \right| = |A| \left[a + b - b^2\mathbf{1}'_n A^{-1}\mathbf{1}_n \right] \quad (1.3)$$

où $A = aI_n + bJ_n$.

Or, du résultat démontré en a), on obtient :

$$b^2\mathbf{1}'_n A^{-1}\mathbf{1}_n = b^2 \left(\frac{1}{a}\mathbf{1}'_n - \frac{bn}{a(a + nb)}\mathbf{1}'_n \right) \mathbf{1}_n = \frac{b^2n}{a + nb}$$

Pour arriver au résultat on applique le principe de récurrence. On vérifie d'abord la propriété pour une matrice d'ordre 2 :

$$\begin{vmatrix} a+b & b \\ b & a+b \end{vmatrix} = (a+b)^2 - b^2 = a(a+2b)$$

Puis on suppose vraie la propriété pour une matrice d'ordre n :

$$|aI_n + bJ_n| = a^{n-1}(a + nb)$$

En remplaçant dans (1.3) les calcul ci-dessus, on déduit la propriété pour une matrice d'ordre $n + 1$:

$$|aI_{n+1} + bJ_{n+1}| = a^{n-1}(a + nb) \left(a + b - \frac{b^2n}{a + nb} \right) = a^n [a + (n + 1)b].$$

◇

Un type de matrice plus générale, comme celle-ci :

$$\begin{bmatrix} a_1 & b & \cdots & \cdots & b \\ b & a_2 & \cdots & \cdots & b \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & b \\ b & \cdots & \cdots & b & a_n \end{bmatrix}$$

est aussi inversible sous certaines conditions des valeurs a_1, \dots, a_n et b , précisées dans le lemme suivant.

Lemme 1.7 *Pour $\{i_1, \dots, i_{n-1}\} \subset \{1, \dots, n\}$, soit $q = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{b}{b-a_{i_k}}$. Alors, la matrice $A = \text{diag}(a_1 - b, \dots, a_n - b) + bJ$ est inversible si et seulement si l'une des trois conditions est satisfaite :*

1) $b = 0$ et $a_i \neq 0$, pour tout $i = 1, \dots, n$. Auquel cas,

$$|A| = \prod_{i=1}^n a_i$$

2) Au moins $n - 1$ valeurs de la diagonale de A , $\{a_{i_1}, \dots, a_{i_{n-1}}\}$, sont distinctes de b et $q = 1$.

3) Au moins $n - 1$ valeurs de la diagonale de A , $\{a_{i_1}, \dots, a_{i_{n-1}}\}$, sont distinctes de b et $\frac{a_{i_n}}{b} \neq \frac{q}{q-1}$.

Voici le déterminant pour le deux dernier cas :

$$|A| = [a_{i_n} - q(a_{i_n} - b)] \prod_{k=1}^{n-1} (a_{i_k} - b)$$

Démonstration.

1) Il est clair que :

$$A^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{a_1}, \dots, \frac{1}{a_n}\right) \Leftrightarrow b = 0 \text{ et } a_i \neq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$$

et

$$|A| = \prod_{i=1}^n a_i$$

Soit maintenant $b \neq 0$ et $C = \frac{1}{b}A = \text{diag}(\lambda_1 - 1, \dots, \lambda_n - 1) + J$, où $\lambda_i = \frac{a_i}{b}$. Sans perte de généralité, on suppose que $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ sont les $n - 1$ valeurs de la diagonale de C distinctes de 1.

Soient f_1, \dots, f_n les lignes de C et E_{nk} la matrice élémentaire associée à l'opération de ligne $f_n - f_k \rightarrow f_k$, pour tout $k = 1, \dots, n - 1$. Ainsi, $E_{kn} = I + [b_{ij}]$ où $[b_{ij}]$ est une matrice avec $b_{kn} = -1$ et $b_{ij} = 0 \quad \forall (i, j) \neq (k, n)$. Chaque matrice E_{kn} est triangulaire supérieure car $k < n$, d'où la matrice $T = E_{1n} \cdots E_{(n-1)n}$ est aussi triangulaire supérieure et $|T| = 1$. Après ces opérations élémentaires on obtient la matrice :

$$T.C = \left[\begin{array}{c|c} \text{diag}(\lambda_1 - 1, \dots, \lambda_{n-1} - 1) & (1 - \lambda_n)\mathbf{1}_{n-1} \\ \hline \mathbf{1}'_{n-1} & \lambda_n \end{array} \right]$$

L'hypothèse $\lambda_i \neq 1$, $1 \leq i \leq n - 1$, permet de calculer $|T.C|$ selon le lemme 1.5 :

$$\begin{aligned} |T.C| &= \prod_{i=1}^{n-1} (\lambda_i - 1) \left[\lambda_n + \mathbf{1}'_{n-1} \text{diag}\left(\frac{1 - \lambda_n}{1 - \lambda_1}, \dots, \frac{1 - \lambda_n}{1 - \lambda_{n-1}}\right) \mathbf{1}_{n-1} \right] \\ &= \prod_{i=1}^{n-1} (\lambda_i - 1) \left[\lambda_n + (1 - \lambda_n) \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{1 - \lambda_i} \right] \\ &= s[\lambda_n + q(1 - \lambda_n)] \end{aligned}$$

Comme $s \neq 0$, $q \neq 0$ et $|T.C| = |C|$, on a

$$|C| \neq 0 \Leftrightarrow \lambda_n + q(1 - \lambda_n) \neq 0 \quad (1.4)$$

Les solutions de (1.4) ne sont atteintes que pour ces deux conditions sur q :

2) $q = 1$, auquel cas il n'y a aucune contrainte sur λ_n car $\lambda_n + q(1 - \lambda_n) = 1 \neq 0$. Alors, $|A| = b^n |C| = b^n s = b^n \prod_{i=1}^{n-1} \left(\frac{a_i - b}{b}\right) = b \prod_{i=1}^{n-1} (a_i - b)$.

3) $q \neq 1$, donc il est nécessaire que $\lambda_n \neq \frac{q}{q-1}$. Alors :

$$|A| = b \prod_{i=1}^{n-1} (a_i - b) \left[\frac{a_n}{b} + q \left(\frac{b - a_n}{b} \right) \right] = [a_n - q(a_n - b)] \prod_{i=1}^{n-1} (a_i - b).$$

En fait, cette dernière formule de $|A|$ engendre la précédente lorsque $q = 1$. \diamond

1.1.5 Matrices binaires

Nous construisons ici un type de matrice, appelée binaire, qui permet de caractériser aisément des plans tel que les réseaux centrés de Scheffé, ainsi que les plans pour le modèle croisé proposés dans le chapitre deux.

Définition 1.2 Soit $(r, n) \in (\mathbb{N}^*)^2$ tel que $1 \leq r \leq n$ et $\xi_{r,n} \subset (\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^n$ l'ensemble de tous les points de la forme $e_{i_1} + \dots + e_{i_r}$, pour tout $\{i_1, \dots, i_r\} \subset \{1, \dots, n\}$. Toute matrice dont les lignes correspondent aux points de $\xi_{r,n}$ est appelée matrice binaire.

Remarque : Après le lemme 1.1 le cardinal de $\xi_{r,n}$ est égal à C_n^r . Ainsi, toute matrice binaire associée à $\xi_{r,n}$ est d'ordre $C_n^r \times n$.

Exemple :

Pour $r = 2$ et $n = 3$, on a

$$\begin{aligned} \xi_{2,3} &= \{e_1 + e_2, e_1 + e_3, e_2 + e_3\} \\ &= \{(1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1)\} \end{aligned}$$

Il y a $3!$ façons de construire une matrice binaire associée à $\xi_{2,3}$. Nous allons suivre l'ordre lexicographique pour les lignes : $1 \rightarrow \{e_1, e_2\}$, $2 \rightarrow \{e_1, e_3\}$ et $3 \rightarrow \{e_2, e_3\}$. Ainsi, cette matrice binaire, notée $D_{2,3}$, est la suivante :

$$D_{2,3} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

Remarque : Il y a $(C_n^r)!$ matrices binaires distinctes dont les lignes sont les points de $\xi_{r,n}$.

Le résultat suivant concerne le calcul du produit d'Hadamard de r colonnes de toute matrice binaire associée à $\xi_{r,n}$. En fait, nous allons construire par colonne une matrice P avec tous ces produits. Si l'on revient sur l'exemple ci-dessus, les produits d'Hadamard de couples de colonnes de $D_{2,3}$ donnent l'ensemble \mathbb{B}_3 (base canonique de \mathbb{R}^3). La matrice P est carrée d'ordre $C_3^2 = 3$ et il y a $3!$ possibilités pour sa construction.

Proposition 1.1 Soit $D = [d_1 | \cdots | d_n]$ une matrice binaire associée à $\xi_{r,n}$, où d_i est la i -ème colonne de D . La matrice P dont les colonnes sont les produits de la forme

$$d_{i_1} \odot \cdots \odot d_{i_r}$$

$$\forall \{i_1, \dots, i_r\} \subset \{1, \dots, n\},$$

est une matrice de permutation. De plus, le produit d'Hadamard de $r + 1$ colonnes de D est égal au vecteur nul.

Démonstration.

Puisque il n'y a pas de lignes répétées dans D , il existe une correspondance bijective entre les colonnes de la matrice P et les lignes de la matrice D . Soit donc la ligne $e_{i_1} + \cdots + e_{i_r}$ de D associée à la colonne $v = d_{i_1} \odot \cdots \odot d_{i_r}$ de P et soit k la position de cette ligne dans la matrice D . Les deux valeurs possibles pour les composantes de v sont 0 et 1.

Si v_k est la k -ième composante de v , alors, $v_k = 1$ car $(d_{i_j})_k = 1$ pour tout $j \in \{i_1, \dots, i_r\}$. Or, s'il existait $t \neq k$ tel que $v_t = 1$, cela impliquerait que le point $e_{i_1} + \cdots + e_{i_r}$ se répéterait sur les deux lignes t et k de la matrice D . Ainsi, $d_{i_1} \odot \cdots \odot d_{i_r} = e_k$. D'autre part, pour chaque $k \in \{1, 2, \dots, C_n^r\}$ il existe un unique sous-ensemble $\{i_1, \dots, i_r\}$ tel que $e_k = d_{i_1} \odot \cdots \odot d_{i_r}$, d'où les colonnes de la matrice P correspondent à la base canonique de $\mathbb{R}^{C_n^r}$, P est donc une matrice de permutation.

Tout produit d'Hadamard de $r + 1$ colonnes de la matrice D est de la forme $e_i \odot d_i$. S'il y avait une composante de $e_i \odot d_i$ distincte à zéro, alors, il y aurait une ligne de D avec au moins $r + 1$ composantes égales à 1, ce qui est contraire à la définition de matrice binaire. \diamond

Remarque : pour les valeurs extrêmes $r = 1$ et $r = n$, les ensembles $\xi_{1,n}$ et $\xi_{n,n}$ correspondent à \mathbb{B}_n et $\mathbb{1}'_n$ respectivement.

Construction d'une matrice binaire par récurrence

On note $D_{r,n}$ la matrice binaire de $\xi_{r,n}$ construite en suivant l'ordre lexicographique. Pour obtenir une relation de récurrence on définit les deux matrices suivantes :

$$D_{1,n} = I_n \text{ et } D_{n,n} = \mathbb{1}'_n.$$

Puis on commence par la matrice binaire de plus petite taille possible avec deux composantes non nulles, celle obtenue en (1.5) :

$$D_{2,3} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_2 & D_{1,2} \\ 0 & D_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_2 & I_2 \\ 0 & \mathbb{1}'_2 \end{bmatrix}$$

Par exemple, pour $r = 2$, $n = 4$ et pour tout $i \neq j$ dans $\{1, 2, 3, 4\}$, les lignes de $D_{2,4}$ correspondent aux point de $\xi_{2,4}$ rangés de la façon suivante :

$$D_{2,4} = \left[\begin{array}{c|cc} \mathbb{1}_3 & D_{1,3} \\ \hline 0_{C_3^2} & D_{2,3} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right]$$

On généralise la procédure de façon que pour construire $D_{r,n+1}$ sont requises les deux matrices $D_{r,n}$ et $D_{r-1,n}$. Ainsi, pour tout entier $n \geq 3$ et $r \in \{2, \dots, n\}$, la suite de matrices est bien définie par :

$$D_{r,n+1} = \left[\begin{array}{c|c} \mathbb{1}_{C_n^{r-1}} & D_{r-1,n} \\ \hline 0_{C_n^r} & D_{r,n} \end{array} \right]$$

Pour la valeur r entre 2 et n , on a la suite matricielle suivante :

$$\begin{array}{ccccccc} D_{2,3} & \rightarrow & D_{2,4} & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & D_{2,n-r+2} & \rightarrow & D_{2,n-r+3} \\ \downarrow & & \downarrow & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & \downarrow & & \downarrow \\ D_{3,4} & \rightarrow & D_{3,5} & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & & & \\ \downarrow & & & & & & \downarrow & & \downarrow \\ \vdots & & & & & & \vdots & & \vdots \\ \downarrow & & & & & & \downarrow & & \downarrow \\ \vdots & & & & & & D_{r-1,n-1} & \rightarrow & D_{r-1,n} \\ \downarrow & & & & & & \downarrow & & \downarrow \\ D_{r,r+1} & \rightarrow & D_{r,r+2} & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & D_{r,n} & \rightarrow & D_{r,n+1} \end{array}$$

La structure rectangulaire ci-dessus illustre quelles matrices sont requises pour la construction de celle placée sur le sommet *droit-inférieur*. Par exemple, pour avoir $D_{3,5}$ il faut $D_{2,4}$ et $D_{3,4}$, et pour ces deux dernières il faut $D_{2,3}$.

Dans la suite du travail nous reprenons les matrices binaires $D_{2,n}$ pour la construction de plans permettant d'estimer les paramètre d'un modèle polynomial d'ordre deux. La matrice binaire générale, $D_{r,n}$, est utilisée dans ce chapitre pour démontrer l'estimabilité du modèle synergique sur le réseau de Scheffé centré.

Proposition 1.2 *Soit $D_{2,n}$ une matrice binaire, alors*

$$D'_{2,n} D_{2,n} = (n-2)I_n + J_n$$

Démonstration.

Si $n = 3$, par calcul direct on a :

$$D'_{2,3} D_{2,3} = I_3 + J_3$$

Par récurrence on suppose vrai que $D'_{2,n}D_{2,n} = (n-2)I_n + J_n$, puis on vérifie la propriété pour $n+1$:

$$D_{2,n+1} = \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{1}_n & I_n \\ \hline 0_{C_n^2} & D_{2,n} \end{array} \right]$$

$$D'_{2,n+1}D_{2,n+1} = \left[\begin{array}{cc} n & \mathbf{1}'_n \\ \mathbf{1}_n & I_n \end{array} \right] + \left[\begin{array}{cc} 0 & 0'_{C_n^2} \\ 0_{C_n^2} & (n-2)I_n + J_n \end{array} \right]$$

$$D'_{2,n+1}D_{2,n+1} = \left[\begin{array}{cc} (n-1) + 1 & \mathbf{1}'_n \\ \mathbf{1}_n & (n-1)I_n + J_n \end{array} \right] = (n-1)I_{n+1} + J_{n+1}$$

Ainsi, $D'_{2,n}D_{2,n} = (n-2)I_n + J_n$ pour tout entier $n \geq 2$. \diamond

1.2 Modèle linéaire et estimabilité

Soit y une variable qui représente la réponse observée d'un phénomène aléatoire pour q facteurs quantitatifs contrôlés afin de conduire l'expérimentation. Soit le vecteur $\mathbf{x} \in \mathcal{S} \subset \mathbb{R}^q$ la condition expérimentale sur laquelle on va mesurer l'observation Y . On suppose que cette observation peut être modélisée sous la forme suivante :

$$y = \eta(\mathbf{x}, \beta) + \varepsilon \quad (1.6)$$

La fonction η est appelée loi de réponse pour \mathbf{x} et elle correspond à la partie déterministe du modèle et ε est la composante aléatoire, dite résidu, liée aux erreurs expérimentales. Sa présence dans le modèle implique que l'on peut avoir deux observations différentes sous la même condition expérimentale \mathbf{x} .

L'ensemble \mathcal{S} , dit domaine expérimental, est l'espace où l'expérimentation est possible.

La fonction η est inconnue mais on suppose qu'elle admet un développement de Taylor en tout point $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$, ce qui justifie son approximation par un polynôme sur le domaine expérimental.

1.2.1 Modèle linéaire usuel

On dit que le modèle (1.6) est linéaire lorsque η est une fonction linéaire par rapport à β , c'est-à-dire, $\eta(\mathbf{x}, \beta) = \beta' f(\mathbf{x})$, où β est le vecteur des p paramètres inconnus du modèle.

La fonction vectorielle $f : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^p$ est choisie *a priori* par le chercheur sur la base de la connaissance du phénomène à observer.

Considérons l'ensemble de n points de \mathcal{S} , $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$, appelé **plan d'expérience**. Pour chaque t_i on a l'observation Y_i . Alors le modèle $Y_i = \beta' f(t_i) + \varepsilon_i$, $i = 1, \dots, n$, est représenté matriciellement par :

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (1.7)$$

Avec

X : **matrice du modèle**, d'ordre $n \times p$, où la ligne i est composée des coordonnées de $f(t_i)$, $i = 1, \dots, n$.

Y : vecteur des n observations.

ϵ : vecteur des n erreurs expérimentales liées aux n observations.

Définition 1.3 *Le modèle linéaire (1.7) est appelé **modèle de Gauss-Markov** lorsque la distribution du vecteur aléatoire Y vérifie les relations suivantes :*

$$\begin{cases} \mathbb{E}(Y) &= X\beta \\ \mathbb{V}(Y) &= \sigma^2 I_n \end{cases}$$

où $\mathbb{E}(Y)$ désigne l'espérance de Y et $\mathbb{V}(Y)$ désigne la matrice de variance-covariance de Y (si Y est une variable aléatoire réelle on utilise la notation $\text{Var}(Y)$ au lieu de $\mathbb{V}(Y)$).

Définition 1.4 *On appelle matrice du plan, notée D , la matrice d'ordre $n \times q$ dont les lignes sont les coordonnées des points du plan t_1, \dots, t_n .*

Définition 1.5 *On appelle matrice d'information la matrice $X'X$, où X est la matrice du modèle.*

1.2.2 Surface de réponse polynomiale

Dans ce qui suit, sous l'hypothèse de régularité de la loi de réponse dans le domaine expérimental, on va s'intéresser exclusivement à des modèles de Gauss-Markov où $\beta' f(\mathbf{x})$ est de type polynomial.

Par exemple, le cas le plus simple pour une loi de réponse est le développement de Taylor d'ordre un au voisinage d'un point $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_q)$. Ainsi, si $Y_{\mathbf{x}}$ est la variable aléatoire qui représente la réponse observée en \mathbf{x} et $f(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, \dots, x_q)'$, on a :

$$\mathbb{E}(Y_{\mathbf{x}}) = \beta_o + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_q x_q \quad (1.8)$$

Si D est la matrice d'un plan donné de n points, alors la matrice X du modèle (1.7) pour le polynôme (1.8) est une matrice d'ordre $n \times (q+1)$ de la forme $X = [\mathbb{1}_n \mid D]$.

Le développement polynomial d'ordre deux de l'espérance de $Y_{\mathbf{x}}$ est :

$$\mathbb{E}(Y_{\mathbf{x}}) = \beta_o + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j \quad (1.9)$$

La matrice X pour le polynôme (1.9) est alors :

$$X = [\mathbb{1}_n \mid D \mid A] \quad (1.10)$$

Le nombre de colonne de la matrice X est égal à $1 + q + C_{q+1}^2$. La matrice A dans (1.10) est d'ordre $n \times C_{q+1}^2$ et ses colonnes sont obtenues par le produit d'Hadamard des couples de colonnes de la matrice D .

1.2.3 Estimabilité

L'estimateur des moindres carrés $\hat{\beta}$ de β dans le modèle (1.7) est défini par :

$$\hat{\beta} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} (Y - X\beta)'(Y - X\beta)$$

Théorème 1.1 *Tout estimateur des moindres carrés du paramètre β dans le modèle linéaire $Y = X\beta + \epsilon$ est solution du système d'équations normales :*

$$X'X\hat{\beta} = X'Y$$

Démonstration.

Pour la démonstration on peut consulter le livre de Carmona (2005). \diamond

Lorsque la matrice X est de plein rang le paramètre β est estimé de façon unique par $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$.

Fonction paramétrique estimable

Si X n'est pas de plein rang le paramètre β n'est pas estimable car l'ensemble des solutions du système d'équations normales $X'X\hat{\beta} = X'Y$ est infini. Bien qu'il ait un nombre infini de $\hat{\beta}$ tels que $\hat{Y} = X\hat{\beta}$ (\hat{Y} est la projection orthogonale de Y sur le sous-espace $\text{Im}X$), le vecteur \hat{Y} est bien unique. Toute solution du système d'équations normales est de la forme $\hat{\beta} = (X'X)^-X'Y$, où $(X'X)^-$ est une inverse généralisée de $X'X$ (A^- est une inverse généralisée de A si $AA^-A = A$).

Or, la projection orthogonale de Y sur $\text{Im}X$ est obtenue pour une matrice $(X'X)^-$ quelconque par :

$$\hat{Y} = X\hat{\beta} = X(X'X)^-X'Y = P_{\text{Im}X}Y$$

mais la matrice $P_{\text{Im}X}$ est unique alors elle ne dépend pas de l'inverse généralisée choisie.

Bien que β ne soit pas estimable, le vecteur $X\beta$ l'est, c'est pourquoi il est intéressant de savoir quelles fonctions linéaires de β sont estimables.

Définition 1.6 *Toute fonction linéaire ψ des paramètres du modèle (1.7) est appelée fonction paramétrique. On dit que cette fonction est estimable s'il existe une combinaison linéaire $\hat{\psi}$ des observations Y telle que $\mathbb{E}(\hat{\psi}) = \psi(\beta)$, $\forall \beta$.*

Théorème 1.2 *Soit $\psi = K'\beta$ une fonction paramétrique associée au modèle linéaire $Y = X\beta + \epsilon$. Alors :*

- 1) ψ est estimable si et seulement si le vecteur K est combinaison linéaire des lignes de X .
- 2) Le nombre maximal de fonctions paramétriques estimables linéairement indépendantes est égal à $\text{rg}(X)$.

Démonstration.

Pour la démonstration on peut consulter le livre de Carmona (2005). \diamond

Théorème 1.3 (Gauss-Markov) Soit $\psi = K'\beta$ une fonction paramétrique estimable et $\hat{\beta}$ un estimateur des moindres carrés de β . Alors :

- 1) L'estimateur $\hat{\psi} = K'\hat{\beta}$ de ψ est unique.
- 2) $\hat{\psi}$ est l'estimateur sans biais de variance minimale.

Démonstration.

Pour la démonstration on peut consulter le livre de Carmona (2005). \diamond

En général, dans la modélisation de mélanges par surfaces polynomiales classiques, la matrice X du modèle n'est pas de plein rang à cause de la relation entre les proportions des composants. Dans le cadre de la thèse nous ne nous intéressons pas aux fonctions paramétrique estimables mais aux modèles sujets aux contraintes paramétriques du type $C\beta = 0$, qui permettent d'estimer de façon unique le vecteur β . Ainsi, pour la suite du travail le résultat suivant est primordial.

Proposition 1.3 Soient $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $C \in \mathbb{R}^{r \times p}$ et $Y \in \mathbb{R}^n$. Avec $\text{rg}X = p - r$, $\text{rg}C = r$ et $\ker X \cap \ker C = \{0\}$. Alors,

- 1) La matrice $\begin{bmatrix} X \\ C \end{bmatrix}$ est de plein rang.
- 2) L'estimateur des moindres carrés $\hat{\beta}$ de β sous les contraintes $C\beta = 0$ est unique.
- 3) $\hat{\beta} = (X'X + C'C)^{-1} X'Y$.

Démonstration.

Pour la démonstration on peut consulter le livre de Colombier (1996). \diamond

Remarque. La matrice $(X'X + C'C)^{-1}$ est une inverse généralisée de la matrice $X'X$.

1.3 Critères d'optimalité

Les critères d'optimalité sont utilisés pour la comparaison de plans de même taille analysés à l'aide d'un même modèle. On dit qu'un plan est meilleur qu'un autre, pour l'estimation des paramètres du modèle adopté, toujours par rapport à un critère.

Les fondements des critères d'optimalité sont dus en grande partie aux travaux de Kiefer rassemblés dans l'ouvrage Brown et *al.*, 1985. Nous ne présentons pas cette théorie en totalité ici mais les critères de U-optimalité, A-optimalité, D-optimalité et E-optimalité. Ces critères mesurent la qualité du plan pour estimer le paramètre β en fonction de sa matrice de dispersion $\mathbb{V}(\hat{\beta})$ ou de la matrice d'information.

Notation. Soit ξ un plan pour l'estimation du paramètre β . On note $\mathbb{V}_\xi(\hat{\beta})$ la matrice de dispersion du paramètre β lorsqu'il est estimé avec le plan ξ . On note D_ξ et X_ξ les matrices du plan et du modèle respectivement.

U-optimalité (optimalité uniforme)

Soit Θ une classe de plans de même taille pour l'estimation du vecteur de paramètres

β . On dit que le plan $\xi^* \in \Theta$ est U-optimal dans le sein de la classe Θ si pour tout plan $\xi \in \Theta$ la matrice $\mathbb{V}_\xi(\hat{\beta}) - \mathbb{V}_{\xi^*}(\hat{\beta})$ est semi-définie positive.

Il s'agit en fait de l'ordre de Loewner défini sur matrices symétriques, on utilise pour ce critère la notation plus simple :

$$\mathbb{V}_{\xi^*}(\hat{\beta}) \leq \mathbb{V}_\xi(\hat{\beta}), \quad \forall \xi \in \Theta$$

Remarque : Il n'est pas toujours possible de comparer les plans avec le critère de U-optimalité.

A-optimalité

Soit la matrice X_ξ de plein rang pour tout plan $\xi \in \Theta$. On dit que le plan $\xi^* \in \Theta$ est A-optimal pour l'estimation de $\beta \in \mathbb{R}^p$ si :

$$\text{Trace} \left[(X'_{\xi^*} X_{\xi^*})^{-1} \right] \leq \text{Trace} \left[(X'_\xi X_\xi)^{-1} \right], \quad \forall \xi \in \Theta$$

D-optimalité

Soit la matrice X_ξ de plein rang pour tout plan $\xi \in \Theta$. On dit que le plan $\xi^* \in \Theta$ est D-optimal pour l'estimation de $\beta \in \mathbb{R}^p$ si :

$$|X'_{\xi^*} X_{\xi^*}| \geq |X'_\xi X_\xi|, \quad \forall \xi \in \Theta$$

ou de manière équivalente :

$$|(X'_{\xi^*} X_{\xi^*})^{-1}| \leq |(X'_\xi X_\xi)^{-1}|, \quad \forall \xi \in \Theta$$

On définit pour un plan quelconque ξ_1 dans Θ sa D-efficacité, par rapport à un plan ξ_2 , de la façon suivante :

$$D_{eff} = \left(\frac{|X'_{\xi_1} X_{\xi_1}|}{|X'_{\xi_2} X_{\xi_2}|} \right)^{\frac{1}{p}}$$

E-optimalité

Le critère de E-optimalité est lié à la variance de \hat{Y}_x , réponse prédite en un point x du domaine expérimental \mathcal{S} .

Soit le modèle linéaire $\mathbb{E}(Y_x) = \beta' f(x)$, alors, pour un plan $\xi \in \Theta$ on a :

$$\text{Var}_\xi(\hat{Y}_x) = \sigma^2 f(x)' \mathbb{V}_\xi(\hat{\beta}) f(x).$$

Soit la fonction $G_\xi(x) = \frac{n}{\sigma^2} \text{Var}_\xi(\hat{Y}_x)$, on dit que le plan ξ^* est E-optimal dans la classe Θ des plans de taille n si :

$$\max_{x \in \mathcal{S}} G_{\xi^*}(x) \leq \max_{x \in \mathcal{S}} G_\xi(x)$$

L'intérêt de ce critère vient du fait que $\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}} G_\xi(\mathbf{x})$ est supérieur ou égal au nombre de paramètres p (voir Myers & Montgomery). On peut donc déterminer la E-efficacité d'un plan par :

$$E_{eff} = \frac{p}{\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}} G_\xi(\mathbf{x})}$$

Remarque. La E-efficacité peut être exprimée en termes des valeurs propres de la matrice $\mathbb{V}_\xi(\hat{\beta})$, puisque

$$\arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}} G_\xi(\mathbf{x}) = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{S}} [f(\mathbf{x})' \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p) f(\mathbf{x})]$$

où $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ sont les valeurs propres de la matrice $\mathbb{V}_\xi(\hat{\beta})$.

Résultat

Un plan U-optimal pour l'estimation de β est aussi A-optimal, D-optimal et E-optimal (voir le chapitre 10 du livre de Tinsson, 2010).

1.4 Plans pour mélanges classiques

Dans un système de mélanges classique on suppose que les propriétés à modéliser dépendent uniquement des proportions des ingrédients de la formule. Par conséquent les variables qui expliquent la réponse sont dépendantes, elle sont liées par la contrainte de proportionnalité donnant comme domaine expérimental un simplexe.

Les plans d'expérience sur le simplexe complet que nous citons ici sont ceux de Scheffé. Il s'agit d'un type de plans saturés ¹ pour le modèle polynomial reparamétré sur la contrainte qui lie les proportions des composants du mélange. C'est cette contrainte supplémentaire qui distingue les plans d'expérience pour mélanges des autres types de plans.

Nous introduisons aussi les plans de type axial, ce sont des plans construits sur les axes du simplexe et sont caractérisés par le fait que toutes les proportions d'un mélange dépendent d'un même paramètre. Ce type de plan est utilisé pour estimer les paramètres de modèles surparamétrés d'ordre un et deux sous contraintes d'identification linéaires.

1.4.1 Domaine expérimental

Un mélange de q composants, où x_i est la proportion du composant i , pour tout $i = 1, \dots, q$, est défini par le point (x_1, x_2, \dots, x_q) de \mathbb{R}^q satisfaisant les contraintes suivantes :

$$\begin{aligned} 0 &\leq x_i \leq 1 \\ x_1 + x_2 + \dots + x_q &= 1 \end{aligned} \tag{1.11}$$

¹On dit plan saturé lorsque la taille du plan est égale au nombre de paramètres linéairement indépendant

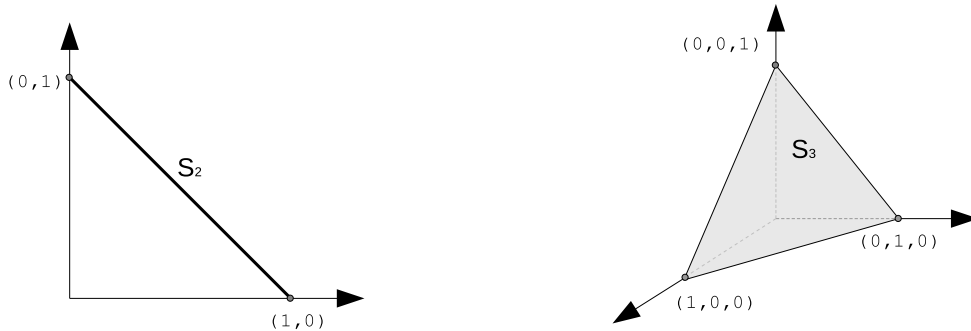


FIG. 1.1: *Domaine expérimental pour mélanges à 2 et 3 composants.*

Les contraintes ci-dessus délimitent le domaine expérimental. Cet ensemble peut être exprimé comme l'enveloppe convexe de la base canonique de \mathbb{R}^q , c'est le simplexe S_q que l'on a défini au paragraphe 1.1.3.

Sur la Figure 1.1 on peut visualiser le domaine expérimental pour $q = 2$ et $q = 3$. Le segment de droite S_2 correspond à des mélanges à deux composants. L'ensemble des mélanges à trois composants est le triangle équilatéral S_3 où les sommets représentent les corps purs, les arêtes sont les mélanges de deux composants (mélanges binaires) et l'intérieur correspond aux mélanges dont les trois composants sont présents (mélanges ternaires).

Sous-ensembles de S_q

Pour certains cas d'application il faut restreindre les proportions des composants. Les contraintes les plus fréquentes sont celles de type linéaires, où les proportions du mélange, voire de leurs combinaisons linéaires, sont bornées :

$$0 \leq l_i \leq x_i \leq u_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, q$$

$$c_k \leq a_{1k}x_1 + a_{2k}x_2 + \dots + a_{qk}x_q \leq d_k, \quad k = 1, \dots, h$$

Les contraintes supplémentaires décrites ci-dessus correspondent à des sous-ensembles convexes de S_q appelés polyèdres. Divers algorithmes ont été proposés pour construire des plans sur ce type de domaine, ils peuvent être consultés en détail dans le livre de Cornell (2002).

Un autre type de sous-ensemble, non polyédrique, est constitué des points particuliers du simplexe, situés sur ses axes. Chaque axe est une enveloppe convexe définie par :

$$A_k = \left\{ \mathbf{x} \in S_q : \mathbf{x} = \lambda e_k + \frac{1-\lambda}{q-1} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^q e_i, \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \right\} \quad (1.12)$$

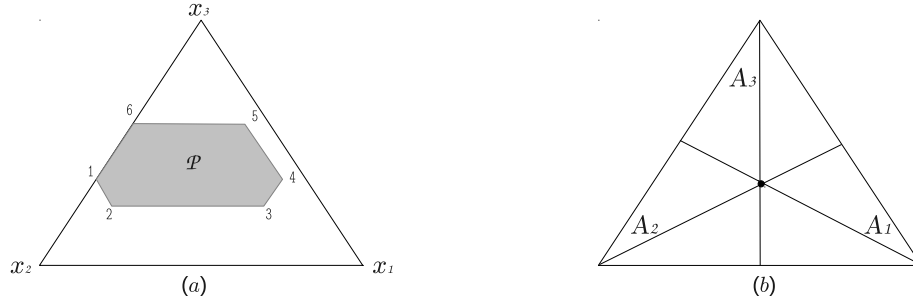


FIG. 1.2: (a) Polyèdre \mathcal{P} défini par les contraintes $x_1 + x_2 + x_3 = 1$, $0 \leq x_1 \leq .5$, $.1 \leq x_2 \leq .6$ et $.3 \leq x_3 \leq .6$. (b) Axes du simplexe S_3 .

L'ensemble de points correspondant aux axes de S_q est donc la réunion $\bigcup_{k=1}^q A_k$. Ces deux types de sous-ensembles du simplexe S_3 sont illustrés sur la Figure 1.2.

Applications

Diverses applications peuvent se trouver dans le domaine de la formulation de produits à partir de mélanges de plusieurs ingrédients. Par exemple, la préparation de boissons, pâtes, gâteaux et des autres produits de l'industrie alimentaire, ainsi que la fabrication de savons, détergents et mélanges de produits dérivés du pétrole.

Exemple 1. Les plastiques sont des mélanges complexes de polymères et additifs. Pour la formulation d'un type particulier de plastique il est important d'étudier la performance d'une résine pure dans un milieu composé de microsphères et fibres de verre. Un plan d'expérience a été conduit par Smith & Cornell (1993) afin de mesurer des propriétés telles que la résistance à la traction et la déformation. Certaines spécifications dans la fabrication de plastiques imposent des contraintes de type bornées sur les proportions des composants, x_1 (résine), x_2 (fibres de verre) et x_3 (microsphères). Ainsi, le domaine expérimental est le sous-ensemble de S_3 défini par :

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + x_3 &= 1 \\ x_1 &\geq 0.8, \quad 0 \leq x_2 \leq 0.2, \quad 0 \leq x_3 \leq 0.2 \end{aligned}$$

Exemple 2. Plusieurs variétés de pesticide peuvent être mélangées pour améliorer leur efficacité. On propose un plan d'expérience pour combattre des populations d'insectes sur des plantations des fraisiers (voir Cornell, 2002). On utilise quatre pesticides, les expériences sont menées en appliquant les produits individuellement et par combinaisons de deux, trois et quatre composants à proportions égales (c'est-à-dire, pour les mélanges de deux produits on utilise 50% de chacun, pour trois on

utilise 33,3333% et pour les quatre pesticides on utilise 25% de chacun). On a donc un plan de 15 expériences pour estimer les 15 paramètres du modèle suivant :

$$\begin{aligned}\eta &= \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 \\ &+ \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{14} x_1 x_4 + \beta_{23} x_2 x_3 + \beta_{24} x_2 x_4 + \beta_{34} x_3 x_4 \\ &+ \beta_{123} x_1 x_2 x_3 + \beta_{134} x_1 x_3 x_4 + \beta_{124} x_1 x_2 x_4 + \beta_{234} x_2 x_3 x_4 \\ &+ \beta_{1234} x_1 x_2 x_3 x_4\end{aligned}$$

où x_1, x_2, x_3 et x_4 sont les proportions des pesticides.

Ce plan appartient à un type de plan dit réseau centré de Scheffé que nous allons définir par la suite.

Exemple 3. Dans l'exemple précédent on suppose que la réponse à modéliser est fonction uniquement des proportions du mélange de pesticides car on a fixé la dose par mètre carré de terre ou par nombre de fraisier. Néanmoins, des variations sur la quantité appliquée pourraient changer l'efficacité du produit. En considérant cette nouvelle variable le modèle ci-dessus n'est plus valable car cette variable là n'est pas une proportion. Ce type de problème est un cas particulier de plan pour mélanges et facteurs externes, il est appelé plan d'expérience mélange-quantité (en anglais *mixture-amount*) où le seul facteur externe est la quantité du mélange. Ce type de plan est aussi très utilisé pour des applications en pharmacologie.

1.4.2 Parties du simplexe S_q

Ayant déjà défini le domaine expérimental pour q composants par l'enveloppe convexe de la base canonique de \mathbb{R}^q , on va le caractériser par sous-ensembles de mélanges selon le nombre de ses composants de proportions non nulles.

Définition 1.7 Une *k-face* est la partie de S_q obtenue en mélangeant exactement k composants. C'est-à-dire, pour chaque $b \in \wp(\mathbb{B}_q)$ de cardinal k , l'ensemble $\underline{\text{Conv}}(b)$ est une *k-face*.

Les mélanges dits purs de S_q sont ceux ayant un unique composant, ils correspondent aux points de la base canonique \mathbb{B}_q , ainsi on a q ensembles du type *1-face*.

Les mélanges dits binaires sont ceux constitués par deux composants. À chaque couple $\{e_i, e_j\}$ dans \mathbb{B}_q , où $i \neq j$, correspond une *2-face*. Alors on aura C_q^2 ensembles de ce type là.

Les mélanges strictement constitués par q composants correspondent à l'intérieur du simplexe S_q . Autrement dit, *q-face* = $\underline{\text{Conv}}(\mathbb{B}_q)$, il n'y a qu'une *q-face*.

Nombre de k-faces. Pour un entier k fixé entre 1 et q , le nombre de *k-faces* est égal à C_q^k (c'est le nombre de façon de choisir k vecteurs de la base canonique de \mathbb{R}^q sans ordre ni répétition).

Définition 1.8 Le point $\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k e_{i_j} \in S_q$ est appelé *centroïde* de la *k-face* correspondant à $\underline{\text{Conv}}(e_{i_1}, \dots, e_{i_k})$.

Le centroïde du simplexe S_q est le mélange $\left(\frac{1}{q}, \frac{1}{q}, \dots, \frac{1}{q}\right)$. De manière générale, le centroïde d'une k -*face* est le mélange (unique) où les composants intervenant ont tous les mêmes proportions.

Exemple. Dans le triangle équilatéral à gauche dans la Figure 1.3, les mélanges peuvent se distinguer par des sommets (trois 1 -*faces*), des arêtes sans les extrêmes (trois 2 -*faces*) et l'intérieur du triangle (une 3 -*face*). Les centroïdes des arêtes sont les points $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$, $\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ et $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, le centroïde du triangle est le point $\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$.

Remarque : toutes les k -*faces*, pour $k = 1, \dots, q$, sont des ensembles disjoints. En fait, on peut les numéroter sous la notation k -*faces* $_i$ et représente S_q comme la réunion disjointe suivante :

$$S_q = \bigcup_{k=1}^q \left(\bigcup_{i=1}^{C_q^k} k\text{-faces}_i \right)$$

1.4.3 Plan d'expérience axial

Un plan axial est un type de plan construit sur les axes du simplexe S_q , il s'agit des sous-ensembles définis en (1.12).

Les mélanges d'un plan axial se positionnent de façon à ce que leur distance du centroïde soit la même. Soit v_k un mélange sur l'axe A_k , alors :

$$v_k = \lambda e_k + \left(\frac{1-\lambda}{q-1}\right) (\mathbb{1}'_{k-1}, 0, \mathbb{1}'_{q-k})$$

pour un $\lambda \in [0, 1]$ et pour tout $k = 1, \dots, q$.

À l'aide de la matrice binaire $D_{q-1,q}$ on construit la matrice de ce plan :

$$D = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_p \end{bmatrix} = \lambda I_q + \left(\frac{1-\lambda}{q-1}\right) P_\sigma D_{q-1,q}$$

où P_σ est la matrice de permutation pour $\sigma(k) = q - k + 1$, $k \in \{1, 2, \dots, q\}$.

Or, la matrice $P_\sigma D_{q-1,q}$ peut être réécrite ainsi :

$$P_\sigma D_{q-1,q} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ & 0 & \cdots & \vdots \\ & & \ddots & 1 \\ Sym & & & 0 \end{bmatrix} = J_q - I_q$$

Ceci donne un format plus maniable de la matrice D :

$$D = D_{(\lambda)} = \left(\frac{\lambda q - 1}{q - 1}\right) I_q + \left(\frac{1 - \lambda}{q - 1}\right) J_q, \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

Exemple. Soit $q = 3$, alors :

$$D_{2,3} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad P_\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad P_\sigma D_{2,3} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$D_{(\lambda)} = \lambda I_3 + \frac{1}{2}(1 - \lambda)P_\sigma D_{2,3} = \frac{1}{2}(3\lambda - 1)I_3 + \frac{1}{2}(1 - \lambda)J_3.$$

$$D_{(\lambda)} = \begin{bmatrix} \lambda & \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} & \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} \\ \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} & \lambda & \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} \\ \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} & \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} & \lambda \end{bmatrix}$$

On a comme cas particuliers :

$$D_{(1)} = I_3, \quad D_{(\frac{1}{3})} = \frac{1}{3}J_3, \quad D_{(0)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad D_{(\frac{1}{2})} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Propriété 1.1 Soit $D_{(\lambda)}$ la matrice d'un plan axial pour q composants. Alors :

$$\text{rg}D_{(\lambda)} = \begin{cases} 1 & \text{si } \lambda = \frac{1}{q} \\ q & \text{sinon} \end{cases}$$

Démonstration.

D'après le lemme 1.6 on a :

$$|(q-1)D_{(\lambda)}| = |(q\lambda - 1)I_q + (1 - \lambda)J_q| \neq 0 \Leftrightarrow \lambda \neq \frac{1}{q}$$

auquel cas la matrice $D_{(\lambda)}$ est de plein rang.

Si $\lambda = \frac{1}{q}$ alors $D_{(\lambda)} = \frac{1}{q}J_q$, c'est un plan à q réplification du centroïde de S_q , donc le rang de $D_{(\lambda)}$ est égal à 1. \diamond

Cas particuliers :

Avec $\lambda = 1$

Le plan est la base canonique de \mathbb{R}^q et $D = I_q$.

Avec $\lambda = 0$

Ce plan correspond aux centroïdes de toutes les $(q-1)$ -faces et $D = \left(\frac{1}{q-1}\right) P_\sigma D_{q-1,q}$.

Le plan axial pour $\lambda \in]0, 1[$ est très utile lorsque les proportions des composants doivent être strictement positives, c'est le cas des systèmes de mélanges à deux niveaux de type B qui est traité dans le chapitre 3.

1.4.4 Réseaux de Scheffé

On introduira brièvement les plans en réseaux de Scheffé, ce type de plans est construit sur le simplexe sans contrainte supplémentaire.

Définition 1.9 Soient q et m deux entiers positifs, on appelle réseau de Scheffé, noté $\{q, m\}$, l'ensemble de points \mathbf{x} dans S_q tels que :

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^q \lambda_i e_i$$

avec :

$$\lambda_i \in \left\{ 0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, \frac{m-1}{m}, 1 \right\}.$$

(On ne pose pas la condition $\sum_{i=1}^q \lambda_i = 1$ car elle reste sous entendue lorsque $\mathbf{x} \in S_q$).

Exemple :

Avec $m=2$

Par définition

$$\{q, 2\} = \left\{ \mathbf{x} \in S_q : \mathbf{x} = \sum_{i=1}^q \lambda_i e_i; \lambda_i = 0, \frac{1}{2}, 1 \right\}$$

Le réseau $\{q, 2\}$ ne contient que les mélanges purs et les mélanges binaires équilibrés, ainsi :

$$\{q, 2\} = \{e_1, \dots, e_q\} \cup \left\{ x \in S_q : \mathbf{x} = \frac{1}{2}e_i + \frac{1}{2}e_j, 1 \leq i < j \leq q \right\}$$

On a donc q mélanges purs et C_q^2 mélanges binaires.

Avec $q=3, m=2$

Pour $q = 3$ et $m = 2$ le réseau $\{3, 2\}$ est composé de 6 points, voici la matrice du plan :

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Avec $q=3, m=3$

Pour $q = 3$ et $m = 3$ les proportions possibles appartiennent à $\{0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1\}$ et les

points satisfaisant $x_1 + x_2 + x_3 = 1$ correspondent aux lignes de la matrice :

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

Le nombre de points du réseau $\{3, 3\}$ est égal à C_5^3 . Il y a trois points de type *1-face*, six de type *2-face* et un de type *3-face*.

Sur la figure 1.3 on observe les deux réseaux de l'exemple.

Par rapport à la taille de ce type de plan, on a le résultat général :

Proposition 1.4 *La taille du réseau $\{q, m\}$ est égale à C_{q+m-1}^m .*

Démonstration.

Soit $\underline{Conv}(e_{i_1}, \dots, e_{i_k})$ une *k-face* du S_q , si $\mathbf{x} \in \underline{Conv}(e_{i_1}, \dots, e_{i_k}) \cap \{q, m\}$ alors

$$\mathbf{x} = \lambda_1 e_{i_1} + \dots + \lambda_k e_{i_k} \quad (1.13)$$

avec,

$$\lambda_1, \dots, \lambda_k \in \left\{ \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, \frac{m-1}{m} \right\} \quad \text{et} \quad \sum_{j=1}^k \lambda_j = 1$$

Donc,

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j = \frac{a_1}{m} + \dots + \frac{a_k}{m} \iff a_1 + \dots + a_k = m \quad (1.14)$$

Or, le nombre de points dans $\{q, m\}$ qui sont sur une *k-face* est égal au nombre de solutions de l'équation (1.14), qui est C_{m-1}^{k-1} d'après le lemme 1.2.

D'autre part, le nombre de *k-faces* est C_q^k , alors le réseau contient $C_q^k C_{q-1}^{k-1}$ points à exactement *k* composants non nuls.

Par conséquent, la taille de $\{q, m\}$ est $\sum_{k=1}^{\min(q,m)} C_q^k C_{q-1}^{k-1}$, qui d'après le lemme 1.3 est égal à C_{q+m-1}^m . \diamond

Un deuxième type de plan attribué à Scheffé est le plan en réseau centré avec la particularité que pour chaque point toutes les proportions non nulles sont égales. Voici la définition.

Définition 1.10 *On appelle réseau centré de Scheffé le plan composé des centroïdes des *k-faces* pour $k = 1, \dots, q$.*

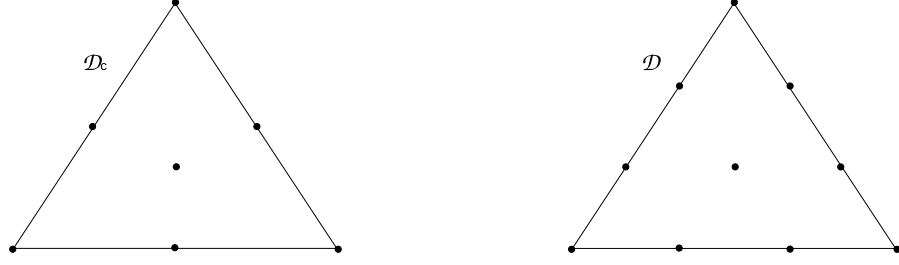


FIG. 1.3: Plans d'expérience pour 3 composants : $\mathcal{D}_c = \{3, 2\} \cup \{(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})\}$ est un réseau de Scheffé centré et $\mathcal{D} = \{3, 3\}$ est un réseau de Scheffé d'ordre trois.

Remarques : la taille du réseau centré est égale à $2^q - 1$ d'après le lemme 1.1.

Exemple : soit $q = 4$ et A_k l'ensemble de points du réseau centré à k composants non nuls, $k = 1, 2, 3, 4$.

Alors,

$$\begin{aligned}
A_1 &= \{(1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 0), (0, 0, 1, 0), (0, 0, 0, 1)\} \\
A_2 &= \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \frac{1}{2}(e_i + e_j), 1 \leq i < j \leq 4 \right\} \\
&= \left\{ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \right\} \\
A_3 &= \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \frac{1}{3}(e_i + e_j + e_k), 1 \leq i < j < k \leq 4 \right\} \\
&= \left\{ \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3}\right), \left(\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right), \left(0, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) \right\} \\
A_4 &= \left\{ \mathbf{x} : \mathbf{x} = \frac{1}{4}(e_1 + e_2 + e_3 + e_4) \right\} \\
&= \left\{ \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) \right\}
\end{aligned}$$

La réunion $A = A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup A_4$ est le réseau de Scheffé centré pour le simplexe S_4 . Celui-ci était le plan utilisé dans l'exemple 2 sur les mélanges de pesticides.

On observe que $\{4, 2\} \subset A$ car $\{4, 2\} = A_1 \cup A_2$.

Bien que le plan centré soit de grande taille, il permet d'estimer tous les effets associés aux mélanges de 2 à q composants en employant la surface polynomiale suivante :

$$\eta = \sum_{i=1}^q \alpha_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \alpha_{ij} x_i x_j + \cdots + \alpha_{12 \dots q} x_1 x_2 \cdots x_q \quad (1.15)$$

Le modèle (1.15) est appelé modèle synergique et nous montrons maintenant qu'il est identifiable sur le réseau centré.

Proposition 1.5 *Le modèle synergique est estimable sur le réseau centré de Scheffé.*

Démonstration.

La matrice du plan centré de Scheffé est facilement représentée à l'aide des matrices

binaires définies au paragraphe 1.1.5 :

$$D' = \left[I_q \left| \frac{1}{2}D'_{2,q} \right| \cdots \left| \frac{1}{q-1}D'_{q-1,q} \right| \frac{1}{q}\mathbf{1}_q \right]$$

Le réseau centré de Scheffé est un plan saturé pour le modèle synergique, par conséquent la matrice X du plan est carrée donc il suffit de prouver $|X| \neq 0$ afin de vérifier que le modèle est bien identifiable.

On calcule la matrice X du modèle à l'aide de la proposition 1.1, elle a la forme suivante :

$$X = \begin{bmatrix} I_q & 0_{q,C_q^2} & \cdots & \cdots & 0_{q,q} & 0 \\ \frac{1}{2}D_{2,q} & \frac{1}{4}P_2 & \cdots & \cdots & 0_{q,q} & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ \frac{1}{q-1}D_{q-1,q} & \cdots & \cdots & \left(\frac{1}{q-1}\right)^{q-1} P_{q-1} & 0_q \\ \frac{1}{q}\mathbf{1}'_q & \cdots & \cdots & \cdots & \left(\frac{1}{q}\right)^q \end{bmatrix}$$

où P_i pour tout $i = 2, \dots, q-1$, est une matrice de permutation et le déterminant d'une telle matrice est égal a 1 ou -1 . Or,

$$|X| = a|I||P_2| \cdots |P_{q-1}| \quad \text{avec} \quad a = \prod_{k=2}^q k^{-k}$$

comme $a > 0$ alors $|X| \neq 0$ et ceci montre que le modèle (1.15) est bien identifiable sur le réseau centré. \diamond

1.4.5 Polynôme reparamétré de degré deux

La contrainte du mélange (1.11) rend le modèle polynomial usuel d'ordre m surparamétré, c'est-à-dire que ses monômes deviennent linéairement dépendants. Il est ainsi nécessaire de reparamétriser le modèle afin de supprimer cette dépendance là.

Une façon simple de reparamétrisation consiste à remplacer la variable x_q par $1 - \sum_{i=1}^{q-1} x_i$. On obtient alors un polynôme d'ordre m en $q-1$ variables.

La méthode la plus recommandée pour éviter la suppression de variables est celle proposée par Scheffé où certains monômes peuvent être supprimés à partir d'un maillage adéquat de la contrainte $x_1 + x_2 + \cdots + x_q = 1$.

Considérons le polynôme usuel d'ordre deux :

$$\eta = \beta_o + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j \quad (1.16)$$

Le nombre de paramètres de ce modèle est égal à $1 + 2q + C_q^2$.

Si l'on introduit la contrainte de mélange en remplaçant β_o par $\beta_o(\sum_{i=1}^q x_i)^2$ et $\sum_{i=1}^q \beta_i x_i$ par $(\sum_{i=1}^q x_i) \sum_{i=1}^q \beta_i x_i$, alors on déduit que ce polynôme peut être remplacé par la forme homogène :

$$\eta = \sum_{1 \leq i < j \leq q} \lambda_{ij} x_i x_j \quad (1.17)$$

Voici les paramètres λ_{ij} par rapport au modèle (1.16) :

$$i, j = 1, 2, \dots, q; \quad i < j$$

$$\begin{cases} \lambda_{ii} = \beta_o + \beta_i + \beta_{ii} \\ \lambda_{ij} = 2\beta_o + \beta_i + \beta_j + \beta_{ij} \end{cases}$$

Une autre forme polynomiale, dite canonique de Scheffé, de degré deux en q composants est obtenue après substitution de β_o et x_i^2 par $\beta_o \sum_{i=1}^q x_i$ et $x_i(1 - \sum_{k \neq i} x_k)$ respectivement en (1.16), d'où on obtient :

$$\eta = \sum_{i=1}^q \delta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \delta_{ij} x_i x_j \quad (1.18)$$

On déduit que :

$$\begin{cases} \delta_i = \beta_o + \beta_i + \beta_{ii} \\ \delta_{ij} = \beta_{ij} - \beta_{jj} - \beta_{ii} \end{cases}$$

Les modèles (1.17) et (1.18) comportent $q + C_q^2$ paramètres et coïncident avec la taille du plan $\{q, 2\}$, alors que le polynôme usuel a $q + 1$ coefficients de plus.

Le polynôme canonique d'ordre trois est développé dans Scheffé (1959). Plus tard Lambrakis (1969) a présenté la forme canonique générale liée au réseau $\{q, m\}$.

1.4.6 Polynôme général de Scheffé

Le polynôme canonique ou polynôme de Scheffé de degré $m \leq q$ a la forme suivante :

$$\eta = \sum_{i=1}^q \delta_i x_i + \sum_{k=2}^m \left[\sum_{1 \leq i < j \leq q} \delta_{ij}^{(k)} x_i x_j (x_i - x_j)^{k-2} \right]$$

$$+ \sum_{k=3}^m \left[\sum_{\substack{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq q \\ \sum_{i=1}^k a_i = m; a_i \in \{1, \dots, m\}}} \delta_{i_1^{a_1} \dots i_k^{a_k}} x_{i_1}^{a_1} \dots x_{i_k}^{a_k} \right] \quad (1.19)$$

Le nombre de paramètres du modèle ci-dessus (δ_i , $\delta_{ij}^{(k)}$ et $\delta_{i_1^{a_1} \dots i_k^{a_k}}$) peut être facilement calculé sur les trois groupes de sommes. Le nombre de δ_i est égal à C_q^1 . Pour k fixé

le nombre de $\delta_{ij}^{(k)}$ est égal à C_q^2 , donc, pour $k = 2, \dots, m$ on a $(m-1)C_q^2$. Dans le troisième groupe de paramètres on a C_q^k manières de choisir l'indice $i_1 \dots i_k$ et C_{m-1}^{k-1} façon de résoudre $a_1 + \dots + a_k = m$ d'après le lemme 1.2, donc le nombre de paramètres est égal à $C_{m-1}^{k-1}C_q^k$, pour $k = 3, \dots, m$, le nombre total de paramètres des trois groupes est égal à :

$$C_q^1 C_{m-1}^0 + C_q^2 C_{m-1}^1 + \sum_{k=3}^m C_q^k C_{m-1}^{k-1}$$

D'où on vérifie, à l'aide du lemme 1.3, le résultat suivant :

Proposition 1.6 *Le nombre de monômes du polynôme canonique d'ordre m en q variables est égal à C_{q+m-1}^m .*

Le nombre de paramètres du modèle (1.19) coïncide avec la taille du réseau $\{q, m\}$ donc il est un plan saturé pour ce modèle.

Le livre de Cornell (2002) fait les calculs pour estimer les paramètres des polynômes canoniques d'ordre $m = 1, 2, 3$ et 4 sur le réseau de Scheffé correspondant. D'un point de vue pratique cela peut être suffisant.

Dans la thèse de Boulanger (1999) le modèle (1.19) est proposé pour un ordre m quelconque en remplaçant m par $\min(q, m)$ dans la somme des monômes dont le nombre de variables est égal ou supérieur à trois. Nous y trouverons aussi la démonstration de la régularité de la matrice du modèle ajusté au réseau $\{q, m\}$.

1.4.7 Modèle de Cox

L'interprétation des paramètres du polynôme de Scheffé d'ordre inférieur à trois est toujours claire dès que l'on se restreint aux points du réseau qui lui est associé. Par exemple, le polynôme de Scheffé d'ordre un, $\eta = \beta_1 x_1 + \dots + \beta_q x_q$, est estimé sur les sommets du simplexe S_q (ceci correspond au réseau $\{q, 1\}$). Pour ce plan le paramètre β_i représente l'espérance de la réponse lorsque seul le corps pur e_i est présent, pour tout $i = 1, \dots, q$. Dans des cas où les mélanges à un seul composant sont exclus, une interprétation aussi simple des paramètres n'est plus possible.

Le modèle de Cox (Cox, 1971) est introduit comme une alternative aux polynômes de Scheffé pour l'analyse de mélanges classiques. L'idée consiste à utiliser un autre type de modèle, basé sur les polynômes usuels, qui donne du sens à l'interprétation des paramètres pour des mélanges hors des réseaux de Scheffé.

L'analyse se développe ici autour d'un point $\mathbf{c} \in S_q$, appelé *mélange de référence*. La question se pose sur la variation subie par la réponse lorsqu'on se déplace de \mathbf{c} à chacun des sommets du simplexe.

Soit $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_q)$ le mélange de référence. Pour chaque $i \in \{1, \dots, q\}$, on considère les points $(x_1, \dots, x_q) \in S_q$ de la forme :

$$(x_1, \dots, x_q) = (1 - \lambda)e_i + \lambda\mathbf{c}$$

$$\forall \lambda \in [0, 1 + t]$$

Afin d'assurer que (x_1, \dots, x_q) appartienne au simplexe, on choisit la valeur de t de façon à ce que $x_i = 0$. Ainsi, pour $\lambda = 1 + t$,

$$x_i = 1 - \lambda + \lambda c_i = t(c_i - 1) + c_i = 0 \implies t = \frac{c_i}{1 - c_i}$$

En d'autres termes, pour $i = 1, \dots, q$, les points décrits correspondent à l'enveloppe convexe $Conv(e_i, \mathbf{v}_i)$ où $\mathbf{v}_i = \frac{1}{1-c_i}(\mathbf{c} - c_i e_i)$. On remarque que \mathbf{v}_i est un mélange de la $(q-1)$ -*faces* _{i} .

Les ensembles $Conv(e_i, \mathbf{v}_i)$ sont appelés directions de Cox par rapport au mélange de référence. Lorsque le mélange de référence est le centroïde de S_q , ces directions là coïncident avec les axes du simplexe.

Tout point \mathbf{x} appartenant à la direction $Conv(e_i, \mathbf{v}_i)$ peut être écrit de la façon suivante :

$$\mathbf{x} = e_i + \frac{\delta}{1 - c_i} (c_1, \dots, c_i - 1, \dots, c_q) \quad (1.20)$$

avec $\delta \in [0, 1]$.

En ce qui concerne l'estimation des paramètres, la contrainte d'identification considérée est celle liée au mélange de référence, à savoir,

$$c_1 \beta_1 + \dots + c_q \beta_q = 0 \quad (1.21)$$

Cette contrainte est justifiée du fait que la différence $\eta(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{c})$ est de la forme suivante :

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{c}) &= \beta_o + \frac{c_1 \delta}{1 - c_i} \beta_1 + \dots + (1 - \delta) \beta_i + \dots + \frac{c_q \delta}{1 - c_i} \beta_q - \beta_o - \sum_{k=1}^q \beta_k c_k \\ &= \frac{\Delta}{1 - c_i} \beta_i - \frac{\Delta}{1 - c_i} \sum_{k=1}^q c_k \beta_k \end{aligned}$$

avec $\Delta = \delta + c_i - 1$.

D'après la contrainte d'identification (1.21), cette différence reste en fonction d'un seul paramètre, celui associé à l'unique composant dont la proportion change selon la direction (1.20) :

$$\eta(\mathbf{x}) - \eta(\mathbf{c}) = \left(\frac{\delta + c_i - 1}{1 - c_i} \right) \beta_i$$

La contrainte (1.21) implique aussi que $\eta(\mathbf{c}) = \beta_o$, d'où le paramètre β_o représente la réponse espérée sur le mélange de référence, alors que β_i est interprété comme la pente de la réponse pour des changements dans la proportion du i -ème composant à partir de \mathbf{c} et dans la direction de (1.20).

On a déjà introduit les plans de type axial dans le paragraphe 1.4.3. Ce type de plan, ainsi que les contraintes d'identification liées au centroïde, vont être généralisés pour le système de mélanges à deux niveaux, ce thème est donc fondamental pour la suite du travail.

1.5 Systèmes pour mélanges à deux niveaux

Les plans pour mélanges classiques que l'on vient de présenter ne permettent que l'exploration d'un seul mélange à la fois. Il y a des cas où l'expérience pour mélanges est conduite afin de modéliser les propriétés de plusieurs types de mélange en même temps. Dans ce cas on suppose que la formulation est un "mélange de mélanges" que l'on appellera système MoM (*Mixture of Mixtures*).

1.5.1 Généralités

Pour la représentation la plus générale possible, considérons un système MoM dont les composants "principaux" (CP) sont des mélanges de composants "secondaires" (CS). Écrivons ainsi le système en termes de relations entre les proportions de chaque type de composants.

Soit p le nombre de CP dont les proportions dans le mélange sont données par le vecteur :

$$\mathbf{w}' = (w_1, w_2, \dots, w_p)$$

Supposons alors que chaque CP est un mélange de q CS dont le i -ème CP (CP_i) a des proportions $(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iq})$, $i = 1, \dots, p$. Autrement dit, x_{ij} est la proportion *relative* du CS_j dans le CP_i .

D'autre part, on peut représenter la formule en termes des proportions *réelles* des CS, donc si u_j est la proportion réelle du CS_j dans le mélange, $j = 1, \dots, q$, alors la relation de proportionnalité entre composants est calculée par :

$$u_j = x_{1j}w_1 + x_{2j}w_2 + \dots + x_{pj}w_p$$

La quantité $x_{ij}w_i$ est la proportion du CS_j apportée par le CP_i , ainsi u_j est la proportion totale du CS_j dans le mélange. Lorsque le CS_j est uniquement utilisé par le CP_i , u_j et $x_{ij}w_i$ coïncident, auquel cas on remplace u_j par u_{ij} dans la notation.

On construit la matrice de mélange M dont des lignes donnent la composition de chaque CP en fonction des proportions relatives des CS :

$$M = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1q} \\ x_{21} & \cdots & \\ \vdots & & \vdots \\ x_{p1} & \cdots & x_{pq} \end{bmatrix}$$

Chaque ligne de M est un mélange de CS, c'est pourquoi

$$\sum_{j=1}^q x_{ij} = 1$$

et $0 \leq x_{ij} \leq 1$, $\forall i = 1, \dots, p$ et $j = 1, \dots, q$. Cette matrice est appelée matrice de mélange et on notera \mathbf{M}_{pq} l'ensemble de matrices des mélanges à p composants

principaux et q composants secondaires.

Pour une matrice donnée $M \in \mathbf{M}_{pq}$ la relation entre \mathbf{w} et $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_q)$ peut être représentée matriciellement par :

$$\mathbf{w}'M = \mathbf{u} \quad (1.22)$$

$$\mathbf{w} \in S_p$$

Il faut souligner dans la représentation (1.22) que la matrice M n'est pas forcément à coefficients constants afin de ne pas confondre un système MoM général avec un système linéaire d'équations lorsque \mathbf{u} est fixé.

1.5.2 Exemples et remarques

Exemple 1

a) Supposons que l'on s'intéresse à des mélanges de jus de fruits. La recherche est menée sous les condition suivantes.

Considérons le cas du mélange de 4 types de jus de fruits pour préparer un cocktail. Chaque type de jus représente un CP dont les fruits sont des CS. De plus, les CP sont des produits finis fournis par différents distributeurs, par conséquent il est matériellement impossible de séparer les CS d'un CP. On en déduit que la matrice de mélanges est constante, voici la composition des CP donnée par les fabricants :

$$\begin{aligned} CP_1 &: 10\%CS_1, 70\%CS_3 \text{ et } 20\%CS_4 \\ CP_2 &: 20\%CS_1, 20\%CS_2 \text{ et } 60\%CS_3 \\ CP_3 &: 10\%CS_2, 80\%CS_3 \text{ et } 10\%CS_5 \\ CP_4 &: 100\%CS_3 \end{aligned}$$

Alors, la matrice de mélange est :

$$M = \begin{bmatrix} 0.1 & 0 & 0.7 & 0.2 & 0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.6 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1 & 0.8 & 0 & 0.1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Pour les cinq fruits (CS) intervenant on observe lesquels sont répétés dans les CP, le CS_5 n'est employé que par le CP_3 alors que le CS_3 apparaît dans tous les CP et le CP_4 est un mélange pur de CS_3 .

Soit \mathbf{w}_o un mélange donné en termes des CP : $30\%CP_1, 40\%CP_2, 20\%CP_3$ et $10\%CP_4$. Le cocktail est de même un mélange de CS, donc pour obtenir le vecteur v des proportions des CS à partir de la formule $\mathbf{w}'_o = (0.3, 0.4, 0.2, 0.1)$ des 4 types de jus il faut tout simplement le calcul matriciel $\mathbf{w}'_o M = \mathbf{u}$ d'où $\mathbf{u} = (0.11, 0.1, 0.71, 0.06, 0.02)$.

Par contre, obtenir un mélange \mathbf{w} de CP à partir d'une formule fixée \mathbf{u}_o de CS, équivaut à résoudre le système linéaire suivant :

$$M' \mathbf{w} = \mathbf{u}'_o \quad \mathbf{w} \in S_p$$

Ce système pourrait ne pas avoir de solution.

b) L'exemple du cocktail ci-dessus est similaire à celui de mélanges d'hydrocarbures, où les huiles lourdes correspondent aux CP, chaque huile est en même temps un sous-mélange de certaines substances chimiques telles que les saturés, aromatiques, maltènes et asphaltènes. Ces substances correspondent donc à des CS et elles ne peuvent être séparées physiquement, c'est-à-dire, il n'existe pas un processus industriel pour la décomposition des huiles. Cependant, l'intérêt pour cette approche vient du fait que les propriétés du mélange sont plus stables sous le domaine des CS.

Ces deux exemples appartiennent au type de problème où les CP sont constitués par les mêmes CS lesquels ne sont pas séparés physiquement donc les éléments de la matrice M sont constants. Ce cas n'est pas traité dans notre travail.

Exemple 2

La formulation d'un médicament comporte le mélange de deux CP à proportions fixées, une pâte solide de proportion w_1 et un gel de proportion w_2 . Le laboratoire reçoit trois matières premières pour préparer la pâte et deux pour le gel. Ainsi on a cinq CS, chacun d'eux associé à un unique CP. Voici la matrice de mélange :

$$M = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x_{21} & x_{22} \end{bmatrix}$$

Les contraintes (1.22) associées au CP_1 sont $w_1 x_{11} = u_{11}$, $w_1 x_{12} = u_{12}$, $w_1 x_{13} = u_{13}$ et celles associées au CP_2 sont $w_2 x_{21} = u_{21}$, $w_2 x_{22} = u_{22}$. On ne pose pas la contrainte $w_1 + w_2 = 1$ car ces proportions sont fixées. Alors, le système MoM s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} i = 1; j = 1, 2, 3 \quad \text{et} \quad i = 2; j = 1, 2 \\ x_{11} + x_{12} + x_{13} &= 1 \\ x_{21} + x_{22} &= 1 \\ x_{ij} &= \frac{u_{ij}}{w_i} \\ u_{ij} &\geq 0 \end{aligned}$$

Exemple 3

Considérons l'exemple 2 pour une formulation non fixée, c'est-à-dire, les proportions des CP, w_1 et w_2 , sont variables. Une telle considération permettrait de mesurer les effets des CP de même que des CS sur les propriétés du mélange. Dans ce cas la relation entre proportions réelles et relatives n'est plus linéaire car $x_{ij} = \frac{u_{ij}}{w_i}$ et par

conséquent tout modèle polynomial en x_{ij} n'est pas polynomial en u_{ij} . En remplaçant le second membre de celle-ci dans les contraintes précédentes on en déduit le système linéaire suivant :

$$\begin{aligned}
 i = 1; j = 1, 2, 3 \quad \text{et} \quad i = 2; j = 1, 2 \\
 u_{11} + u_{12} + u_{13} &= w_1 \\
 u_{21} + u_{22} &= w_2 \\
 w_1 + w_2 &= 1 \\
 u_{ij} &\geq 0 \\
 w_i &> 0
 \end{aligned}$$

Remarque. Lors de la continuation du travail nous traiterons uniquement des systèmes MoM comme ceux des exemples 2 et 3, en fait, ces exemples appartiennent au cas général où les composants secondaires sont regroupés en *sous-mélanges*. Ainsi, chaque composant principal est un sous-mélange de composants secondaires et chaque composant secondaire est lié à un seul CP. On n'utilise donc pas le même CS pour la préparation de deux sous-mélanges. Ici nous employons la dénomination de Piepel (1999), qui a classé les systèmes de sous-mélanges en système MoM de type A et système MoM de type B.

1.5.3 Système MoM de type A

On appelle système MoM de type A la généralisation de l'exemple 2 pour un nombre $p \geq 2$ de composants principaux ($p = 1$ correspond au système de mélange classique). Les proportions des composants principaux sont fixées et elles sont strictement positives.

Pour tout $i = 1, \dots, p$ et $j = 1, \dots, q_i$, on a :

$q = q_1 + \dots + q_p$: nombre total de CS, où $q_i \geq 2$ est le nombre de CS associés au CP_i .

x_{ij} : proportion relative du CS_{ij} dans le CP_i .

u_{ij} : proportion du CS_{ij} dans la formule.

w_i : proportion fixée du CP_i dans la formule.

Le rapport $x_{ij} = \frac{u_{ij}}{w_i}$ entre les variables x_{ij} et u_{ij} , est linéaire car w_i est constante.

Voici les contraintes du système MoM de type A :

$$i = 1, \dots, p \quad \text{et} \quad j = 1, \dots, q_i$$

$$\sum_{j=1}^{q_i} x_{ij} = 1 \tag{1.23}$$

$$x_{ij} \geq 0$$

Les équations de (1.23) sont indépendantes, en fait, chacune d'elles correspond à un sous-mélange dans le simplexe S_{q_i} , pour $i = 1, \dots, p$.

1.5.4 Système MoM de type B

On appelle système MoM de type B le système où les deux type de composants, CP et CS, apparaissent en proportions variables. Par rapport au système de type A, on a p variables de plus. Voici les contraintes pour les variables définies préalablement.

$$i = 1, \dots, p \text{ et } j = 1, \dots, q_i$$

$$w_i - \sum_{j=1}^{q_i} u_{ij} = 0$$

$$w_1 + w_2 + \dots + w_p = 1$$

$$w_i > 0; \quad u_{ij} \geq 0$$

À la différence du système de type A, ici on considère le cas $q_i \geq 1$ car les w_i sont variables. Quand $q_i = 1$ cela veut dire que le CP_i n'est pas un sous-mélange ou tout simplement il est composé d'un unique CS.

1.6 Plans et modèles pour systèmes MoM

Les réseaux multiples de Scheffé sont une extension des plans $\{q, m\}$ à plusieurs simplexes, où chaque simplexe correspond aux composants secondaires liés à un composant principal. Cette généralisation a été introduite par Lambrakis (1968) aux système MoM de type A.

Les plans multiples de Scheffé ont été aussi adaptés aux cas où les proportions de CP ne sont pas fixées. Le premier travail sur le sujet est dû à Cornell & Ramsey (1998), il s'agit de la première publication sur des systèmes MoM de type B développée dans le cadre d'une application liée à la photolithographie.

1.6.1 Réseau multiple de Scheffé

Considérons le cas de p composants principaux à proportions fixées (MoM de type A) avec $\{q_i, m_i\}$ le réseau de Scheffé du CP_i , $i = 1, 2, \dots, p$. On appelle réseau multiple de Scheffé l'ensemble de points $(x_{11}, \dots, x_{1q_1}; x_{21}, \dots, x_{2q_2}; \dots; x_{p1}, \dots, x_{pq_p})$ appartenant au produit cartésien des réseaux individuels $\{q_1, m_1\} \times \{q_2, m_2\} \times \dots \times \{q_p, m_p\}$.

La taille du réseau multiple, dénoté par $\{q_1, q_2, \dots, q_p; m_1, m_2, \dots, m_p\}$, est égale à

$$\prod_{i=1}^p C_{q_i+m_i-1}^{m_i} \quad (1.24)$$

Les applications présentées dans les articles consultés n'utilisent que deux composants principaux, c'est pourquoi la taille du plan multiple ne pose pas de problème en termes pratiques. Par contre si l'on s'intéresse à des cas où les CP et les CS sont nombreux la viabilité de cette méthode entre en question.

Par exemple, pour $p = 4$, $q_1 = q_2 = 3$, $q_3 = 4$, $q_4 = 2$ et $m_i = 2$, $i = 1, 2, 3, 4$; la taille du plan calculée par (1.24) est très grande, il comporte 1080 points.

Le plan proposé pour le système de type B est similaire à celui de type A, la seule différence se trouve dans la composition du bloc associé aux composants principaux, car ces proportions sont non-nulles. Alors, si ξ représente le plan individuel composé sur le simplexe S_p , le plan multiple est le produit cartésien $\mathcal{D} = \{q_1, q_2, \dots, q_p; m_1, m_2, \dots, m_p\} \times \xi$.

1.6.2 Modèle multiplicatif

Le modèle multiplicatif est le produit de polynômes canoniques liés aux réseaux individuels $\{q_i, m_i\}$. Ainsi, l'ordre du polynôme obtenu est égal à $m_1 + m_2 + \dots + m_p$ et le nombre de monômes est égal à la taille du réseau multiple indiqué par (1.24). Ce polynôme est appelé polynôme multiple de Scheffé.

Pour un système de type A avec trois composants principaux, soit le réseau multiple de Scheffé $\{q_1, q_2, q_3; m_i = 1, i = 1, 2, 3\}$, le polynôme multiple qui lui est associé a la forme suivante :

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) &= (x_{11} + \dots + x_{1q_1})(x_{21} + \dots + x_{2q_2})(x_{31} + \dots + x_{3q_3}) \\ &= \sum_{i=1}^{q_1} \sum_{j=1}^{q_2} \sum_{k=1}^{q_3} x_{1i} x_{2j} x_{3k} \end{aligned}$$

où $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{iq_i})$ pour $i = 1, 2, 3$.

Pour le système de type B le modèle est composé du produit polynomial :

$$\eta = P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)Q(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_p)$$

où Q est le polynôme de Scheffé associé aux composants principaux.

Le plan $\mathcal{D} = \{q_1, q_2, q_3; 1, 1, 1\} \times \xi$ n'est donc pas un réseau de Scheffé car les CP sont à proportion positives. Cela ne pose pas de problème d'identification du modèle multiplicatif à condition que Q soit identifiable sur le plan ξ , ce qui est justifié ci-dessous.

Le modèle multiplicatif de Scheffé est identifiable pour le réseau multiple d'après la proposition suivante.

Proposition 1.7 *Soient η_1 et η_2 les surfaces de réponse pour deux modèles linéaires identifiables sur les plans $\xi_1 \subset \mathbb{R}^{q_1}$ et $\xi_2 \subset \mathbb{R}^{q_2}$ respectivement. Alors, le modèle linéaire, dit modèle multiplicatif, donné par le produit $\eta_1 \cdot \eta_2$, est aussi identifiable sur le plan obtenu par le produit cartésien $\xi_1 \times \xi_2$.*

Démonstration.

Soient $X_1 = [\mathbf{F}(t_i)]_{1 \leq i \leq m}$ et $X_2 = [\mathbf{G}(z_j)]_{1 \leq j \leq n}$ les matrices des modèles η_1 et η_2 écrites par lignes, où $\xi_1 = \{t_1, \dots, t_m\}$, $\xi_2 = \{z_1, \dots, z_n\}$, avec $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_p)$ et $\mathbf{G} = (G_1, \dots, G_q)$ des fonctions vectorielles, $m \geq p$ et $n \geq q$.

Le modèle multiplicatif a donc la forme :

$$\eta(t_i, z_j) = \sum_{l=1}^q \sum_{k=1}^p \beta_{kl} F_k(t_i) G_l(z_j)$$

Ce modèle là comporte $p.q$ paramètres, ainsi la matrice X du modèle pour tout $(t_i, z_j) \in \xi_1 \times \xi_2$ est d'ordre $mn \times pq$ et elle peut s'écrire par blocs :

$$X = \begin{bmatrix} F_1(t_1)\mathbf{G}(z_1) & F_2(t_1)\mathbf{G}(z_1) & \cdots & F_p(t_1)\mathbf{G}(z_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ F_1(t_1)\mathbf{G}(z_n) & F_2(t_1)\mathbf{G}(z_n) & \cdots & F_p(t_1)\mathbf{G}(z_n) \\ \hline \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \hline F_1(t_m)\mathbf{G}(z_1) & F_2(t_m)\mathbf{G}(z_1) & \cdots & F_p(t_m)\mathbf{G}(z_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ F_1(t_m)\mathbf{G}(z_n) & F_2(t_m)\mathbf{G}(z_n) & \cdots & F_p(t_m)\mathbf{G}(z_n) \end{bmatrix}$$

Pour tout $i = 1, \dots, m$ et $k = 1, \dots, p$ le bloc (i, k) de la matrice X est de la forme $F_k(t_i)X_2$, d'autre part $X_1 = [F_k(t_i)]$. La matrice du modèle multiplicatif s'écrit donc comme le produit tensoriel :

$$X = X_1 \otimes X_2$$

Les matrices X_1 et X_2 sont de plein rang car on a supposé que les modèles η_1 et η_2 sont identifiables sur ξ_1 et ξ_2 respectivement. D'après le lemme 1.4 la matrice X est aussi de plein rang d'où le résultat. \diamond

1.7 Bases de Gröbner

L'utilisation de la théorie des bases de Gröbner comme un moyen pour obtenir des modèles polynomiaux identifiables a été proposée dans l'article de Pistone et Wynn (1996). Le but de l'article est d'aborder le problème de confusion d'effets et d'identifiabilité en employant des méthodes de la géométrie algébrique. Notre intérêt pour cette méthode vient du fait que les contraintes de mélange peuvent être intégrées dans la représentation algébrique du plan.

L'idée de la méthode consiste à sélectionner un plan d'expérience de taille adéquate, ce plan doit être représenté sous la forme d'un système d'équations polynomiales de la forme :

$$\begin{cases} P_1 = 0 \\ \vdots \\ P_k = 0 \end{cases}$$

avec P_i polynômes de degrés quelconque dont les racines sont les coordonnées des points du plan.

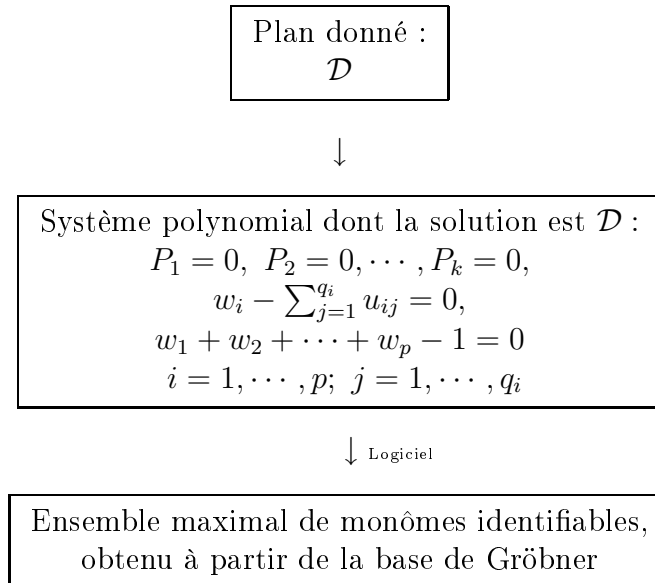
Par exemple, le plan contenant le point (a, b, c) est la solution du système d'équations $x - a = 0$, $y - b = 0$, $z - c = 0$ et le plan $\{-1, 0, 1\}$ est la solution de l'équation $x(x - 1)(x + 1) = 0$.

La solution du système d'équations polynomiales définit une variété affine, notée $\mathcal{D}_{(P_1, \dots, P_k)}$, dont l'idéal associé, noté $I(\mathcal{D})$, est l'ensemble de polynômes P_1, \dots, P_k . D'un point de vue pratique le problème consiste à construire le système d'équations polynomiales pour un plan d'expérience donné (ici le départ est le plan et non pas le modèle). Autrement dit, pour une variété donnée \mathcal{D} il faut trouver l'idéal $I(\mathcal{D})$.

Lorsqu'on obtient $I(\mathcal{D})$ la démarche peut être menée par un logiciel permettant d'obtenir une base de Gröbner associée à $I(\mathcal{D})$. Il n'y a pas unicité de la base car elle est dépendante de l'ordre monomial introduit. Les deux ordres monomiaux les plus courants sont le lexicographique et le lexicographique renversé (ordre sur les degrés puis ordre lexicographique pour ordonner les monômes de même ordre). Ces deux ordres sont appelés en Maple `plex` et `tdex` respectivement.

À partir de la base de Gröbner on obtient l'ensemble de monômes qui composent un modèle identifiable. Pour chaque polynôme de la base de Gröbner on sélectionne le terme dominant selon l'ordre choisi. On construit alors l'ensemble des monômes non-divisibles par l'ensemble de ces termes dominants. D'après les propriétés de divisibilité des bases de Gröbner il en résulte que tout modèle polynomial engendré par ce dernier ensemble est un modèle identifiable pour le plan donné. Bien que l'ensemble de monômes obtenu ne soit pas unique, sa taille est toujours égale à la taille du plan donné.

Schéma de la méthode avec contraintes de mélange



Exemple 1. Soit le système MoM de type A pour 2 CP à 2 CS chacun, le système de contraintes est donc :

$$MoM \rightarrow \begin{cases} x_{11} + x_{12} = 1 \\ x_{21} + x_{22} = 1 \end{cases}$$

et soit ξ le réseau multiple de Scheffé suivant :

$$\xi = \{2, 2\} \times \{2, 2\} \Rightarrow x_{ij} \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$$

La matrice du plan donné ξ est :

$$D_\xi = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right]$$

Représentation du plan ξ par le système d'équations polynomiales :

$$\begin{cases} x_{11}(x_{11} - 0.5)(x_{11} - 1) = 0 \\ x_{12}(x_{12} - 0.5)(x_{12} - 1) = 0 \\ x_{21}(x_{21} - 0.5)(x_{21} - 1) = 0 \\ x_{22}(x_{22} - 0.5)(x_{22} - 1) = 0 \\ x_{11} + x_{12} - 1 = 0 \\ x_{21} + x_{22} - 1 = 0 \end{cases} \quad (1.25)$$

Les monômes retenus (logiciel Maple 11) sont :

$$\boxed{1, x_{11}, x_{22}, x_{11}x_{22}, x_{11}^2, x_{22}^2, x_{11}^2x_{22}, x_{11}x_{22}^2, x_{11}^2x_{22}^2}$$

Sur cet exemple on remarque que le modèle obtenu est le modèle multiplicatif reparamétré en remplaçant les contraintes de sous-mélange.

De manière générale, le réseau de Scheffé $\xi = \{q_1, m_1\} \times \dots \times \{q_p, m_p\}$ pour un système MoM de type A peut être défini comme la solution du système polynomial :

$$\forall i = 1, \dots, p \text{ et } j = 1, \dots, q_i$$

$$\prod_{k=0}^{m_i} \left(x_{ij} - \frac{k}{m_i} \right) = 0$$

$$1 - \sum_{j=1}^{q_i} x_{ij} = 0$$

Nous avons utilisé ce type de plan afin d'illustrer la méthode. Mais un tel plan ne revêt pas un grand intérêt pratique car les réseaux complets sont des plans de grande taille. Nous cherchons plutôt à construire l'idéal de certains sous-ensembles d'un plan complet ou d'un plan donné quelconque de petite taille. Le problème est donc ainsi posé : est-il possible de trouver un système d'équations polynomiales qui ait comme solution le plan donné ? C'est la difficulté de cette méthode, ce thème appartient au domaine de l'élimination et intersection d'idéaux traité dans le livre de Cox, Little et O'Shea (1992) consacré à ce sujet.

Malgré la limitation associée à la représentation algébrique d'un plan quelconque, cette méthode semble utile pour des situations pratiques où le chercheur s'intéresse à un ensemble spécifique d'expériences, c'est pourquoi nous avons considéré ce travail de Pistone comme un recours pour des cas atypiques des mélanges à deux niveaux.

Exemple 2. Maintenant nous essayons de trouver l'idéal pour deux plans, ξ_1 et ξ_2 , issus du réseau ξ donné dans l'exemple précédent. Soient ξ_1 et ξ_2 les plans dont les matrices sont les suivantes :

$$D_{\xi_1} = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{array} \right], \quad D_{\xi_2} = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Alors, l'idéal correspondant à la variété ξ_1 est le même que celui du plan ξ avec le polynôme supplémentaire $x_{11}x_{21}$, car les expériences de ξ_1 sont celles retenues par l'équation $x_{11}x_{21} = 0$.

Pour le plan ξ_2 , il est possible de rajouter les équations $x_{11}x_{12} = 0$ et $x_{21}x_{22} = 0$ au système (1.25). Mais on remarque que ξ_2 est le réseau de Scheffé $\{2, 1\} \times \{2, 1\}$, donc on peut lui associer l'idéal :

$$I(\xi_2) = \{x_{11}(x_{11} - 1), x_{12}(x_{12} - 1), x_{21}(x_{21} - 1), x_{22}(x_{22} - 1), x_{11} + x_{12} - 1, x_{21} + x_{22} - 1\}$$

Exemple 3. Considérons maintenant un système MoM de type A avec 2 CP tels que $q_1 = 3$ et $q_2 = 2$ CS. Pour le sous-mélange 1 (3 CS) on a des contraintes supplémentaires sur les proportions :

$$x_{11} + x_{12} + x_{13} = 1$$

$$0 \leq x_{11} \leq 0.5$$

$$0.1 \leq x_{12} \leq 0.6$$

$$0.3 \leq x_{13} \leq 0.6$$

Ce sous-mélange correspond au polyèdre \mathcal{P} de la figure 1.4, les sommets numérotés sur \mathcal{P} sont :

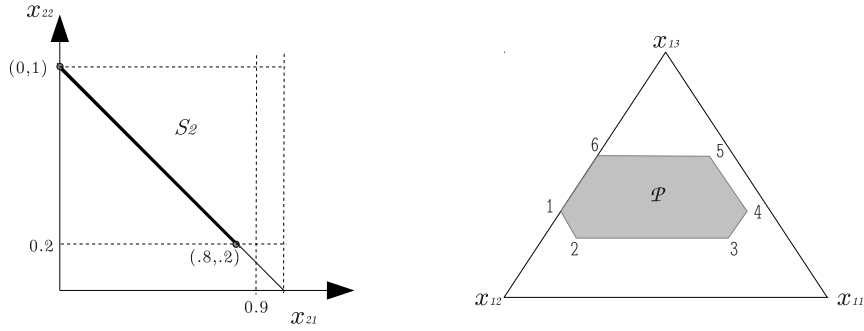


FIG. 1.4: *Domaine expérimental pour les deux sous-mélange du systèmes MoM de type A dans l'exemple 3.*

- (1) (0.0, 0.6, 0.4)
- (2) (0.1, 0.6, 0.3)
- (3) (0.5, 0.2, 0.3)
- (4) (0.5, 0.1, 0.4)
- (5) (0.4, 0.1, 0.6)
- (6) (0.0, 0.4, 0.6)

Pour le sous-mélange 2 il y aussi des contraintes supplémentaires :

$$x_{21} + x_{22} = 1$$

$$0 \leq x_{21} \leq 0.9$$

$$0.2 \leq x_{22} \leq 1$$

Ici les sous-mélanges extrêmes sont (0, 1) et (0.8, 0.2) indiqués sur le simplexe S_2 de la figure 1.4.

Pour les mélanges où $x_{11} \neq 0$, la matrice du plan est la suivante :

$$D = \left[\begin{array}{ccc|cc} 0.1 & 0.6 & 0.3 & 0 & 1 \\ 0.5 & 0.2 & 0.3 & 0 & 1 \\ 0.5 & 0.1 & 0.4 & 0 & 1 \\ 0.4 & 0.1 & 0.6 & 0 & 1 \\ 0.1 & 0.6 & 0.3 & 0.8 & 0.2 \\ 0.5 & 0.2 & 0.3 & 0.8 & 0.2 \\ 0.5 & 0.1 & 0.4 & 0.8 & 0.2 \\ 0.4 & 0.1 & 0.6 & 0.8 & 0.2 \end{array} \right]$$

Le système polynomial associé est donc :

$$\begin{aligned}
(x_{11} - 0.1)(x_{11} - 0.4)(x_{11} - 0.5) &= 0 \\
(x_{12} - 0.1)(x_{12} - 0.2)(x_{12} - 0.6) &= 0 \\
(x_{13} - 0.3)(x_{13} - 0.4)(x_{13} - 0.6) &= 0 \\
x_{21}(x_{21} - 0.8) &= 0 \\
(x_{22} - 0.2)(x_{22} - 1) &= 0 \\
x_{11} + x_{12} + x_{13} - 1 &= 0 \\
x_{21} + x_{22} - 1 &= 0
\end{aligned}$$

La base de Gröbner obtenue est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l}
x_{22}^2 - 12x_{22} + 20 \\
x_{21} + x_{22} - 10 \\
x_{13}^2 - 7x_{13} + 12 \\
42 - 23x_{12} - 10x_{13} + 5x_{12}x_{13} + x_{12}^2 \\
x_{11} + x_{12} + x_{13} - 10
\end{array} \right.$$

Les 8 monômes non-divisibles par les termes dominants de la base sont :

$$1, x_{22}, x_{13}, x_{22}x_{13}, x_{12}, x_{12}x_{22}, x_{13}x_{12}, x_{13}x_{12}x_{22}$$

Alors, le modèle polynomial composé des 8 monômes est bien identifiable pour le plan donné :

$$\eta = \beta_0 + \beta_1x_{22} + \beta_2x_{13} + \beta_3x_{22}x_{13} + \beta_4x_{12} + \beta_5x_{12}x_{22} + \beta_6x_{13}x_{12} + \beta_7x_{13}x_{12}x_{22}$$

Exemple 4.

Pour cet exemple on sort du domaine des mélanges. Considérons la fraction régulière $\mathbb{II} = 12$ de résolution de \mathbb{II} dont la matrice est :

$$\begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & -1 \\
-1 & -1 & 1 \\
-1 & -1 & -1
\end{bmatrix}$$

Il n'est pas possible ici d'ajuster un modèle complet d'ordre un car la matrice du modèle n'est pas de plein rang pour ce plan.

Le système polynomial qui admet pour solution cette fraction est :

$$\left\{ \begin{array}{l}
x_1^2 - 1 = 0 \\
x_2^2 - 1 = 0 \\
x_3^2 - 1 = 0 \\
x_1x_2 - 1 = 0
\end{array} \right.$$

La base de Gröbner pour ce système obtenue par le logiciel est :

$$\left\{ \begin{array}{l}
x_1^2 - 1 \\
x_3^2 - 1 \\
x_1 - x_2
\end{array} \right.$$

On conserve dans cette base uniquement les termes dominants :

$$x_1^2, x_2, x_1^3$$

Il en découle que les seuls monômes non-divisibles par les 3 éléments retenus sont :

$$1, x_1, x_3, x_1x_3$$

En pratique les monômes non-divisibles sont obtenus par le logiciel, il y a une commande en Maple qui permet de les obtenir. En fait on utilise deux commandes, celle qui donne la base de Gröbner et celle qui à partir de la base renvoie l'ensemble de monôme pour engendrer le modèle identifiable.

Voici un extrait des commandes utilisées :

```
with(Groebner) :
```

```
F := [P1, ..., Pk]
```

```
G := Basis(F, plex(x1, ..., xn)) % Renvoie la base de Gröbner
```

```
ns,rv := NormalSet(G, plex(x1, ..., xn)) % Renvoie l'ensemble de monômes
```

Chapitre 2

Modèle et plan pour système MoM de type A

Dans le premier chapitre nous avons remarqué que le modèle multiplicatif, proposé par Lambrakis (1968) comme généralisation des modèles classiques pour mélanges, pose un problème de taille lorsque le nombre de composants est élevé.

Dans ce chapitre nous proposons un modèle alternatif à celui de Lambrakis pour des systèmes MoM de type A. Il s'agit d'un modèle polynomial de degré un, dit modèle additif, qui est notamment plus petit. Ce modèle n'est pas identifiable en raison des contraintes liant les proportions, il est donc nécessaire d'imposer des restrictions sur les paramètres du modèle afin d'estimer les effets des composants secondaires. Ce modèle additif peut ainsi être considéré comme une adaptation du modèle de Cox aux systèmes à sous-mélanges multiples.

En ce qui concerne les plans, nous introduisons d'abord des fractions régulières construites à partir du réseaux multiples de Scheffé de premier ordre, ce sont des expériences correspondant aux sous-mélanges purs. Ce type de plan est analogue à ceux utilisés pour des facteurs qualitatifs car les composants secondaires n'apparaissent qu'en proportions 0 et 1. On peut donc utiliser des méthodes classiques sur ce domaine afin d'obtenir des fractions de bonne taille en gardant les propriétés du réseau complet, telles que l'orthogonalité.

L'orthogonalité dans un sens strict conditionne inutilement les expériences à être issues de sous-mélanges purs. Une propriété plus faible est adoptée ici afin d'inclure dans ce type de plan des sous-mélanges contenant au moins deux ingrédients à proportions positives. Cette propriété moins forte garantit aussi des estimateurs non corrélés pour les paramètres du modèle additif sous contraintes paramétriques.

Un deuxième type de plan est envisagé de façon à obtenir sa taille égale au nombre de composants secondaires. À la différence du réseau multiple d'ordre un, ici, chaque expérience est composée des sous-mélanges équilibrés et d'un unique sous-mélange pur. La construction de tel plan, appelé *plan centroïde* est très simple et toujours possible. De plus, il garde les propriétés d'orthogonalité faible et d'équilibre que nous

allons décrire au début du chapitre.

Pour une estimation d'effets croisés entre CS appartenant au même CP, nous utilisons un polynôme d'ordre deux estimé sur un *plan centroïde étendu*. Ce modèle est identifiable sous les mêmes contraintes paramétriques que celles du modèle additif, il n'est donc pas nécessaire de rajouter des contraintes sur les paramètres associés aux termes croisés.

Les plans et les modèles proposés dans ce chapitre sont conçus pour rendre viable l'expérimentation avec un nombre élevé de composants, c'est pourquoi on n'a considéré que des polynômes d'ordre un et deux ainsi que des plans de petite taille.

2.1 Modèle additifs

Soit le système MoM de type A avec p composants principaux et $q = q_1 + \dots + q_p$ composants secondaires, où q_i est le nombre de CS associés au i -ème CP pour tout $i = 1, \dots, p$. La loi de réponse que nous considérons afin d'estimer les effets individuels des CS est le polynôme usuel d'ordre un :

$$\eta = \alpha_o + \sum_{j=1}^{q_1} \alpha_{1j} x_{1j} + \dots + \sum_{j=1}^{q_p} \alpha_{pj} x_{pj} \quad (2.1)$$

Si $D = [D_1|D_2|\dots|D_p]$ est la matrice d'un plan de taille n dans le domaine expérimental du système MoM de type A et Y le vecteur des observations associées à ce plan, le modèle (2.1), appelé *modèle additif*, est représenté matriciellement par :

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbf{1}_n \alpha_o + D_1 \boldsymbol{\alpha}_1 + \dots + D_p \boldsymbol{\alpha}_p \quad (2.2)$$

où $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{iq_i})'$ et les lignes du bloc $D_i \in \mathbb{R}^{n \times q_i}$ correspondent à des sous-mélanges des CS associés au i -ème CP, pour tout $i = 1, \dots, p$.

Notations

Soient $k = 1, \dots, n$, $i = 1, 2, \dots, p$ et $j = 1, 2, \dots, q_i$.

Pour la sous-matrice $D_i = \left[x_{ij}^{(k)} \right]$, k indique la ligne et j la colonne de la composante $x_{ij}^{(k)}$. Autrement dit, $x_{ij}^{(k)}$ est la proportion du composant secondaire j , liée au i -ème CP, dans la k -ième expérience.

Pour $D_i = [d_{i1}|\dots|d_{iq_i}]$, d_{ij} est le j -ème vecteur colonne de la matrice D_i .

Pour les paramètres : $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_p)$ et $\beta = (\alpha_o, \boldsymbol{\alpha})$.

2.1.1 Identifiabilité du modèle additif

La matrice X du modèle additif comporte $(q+1)$ colonnes, elle a la forme suivante :

$$X = [\mathbf{1}_n|D_1|D_2|\dots|D_p]$$

À cause des contraintes de mélange (1.23), on a

$$\forall i = 1, \dots, p \text{ et } k = 1, \dots, n$$

$$x_{i1}^k + \dots + x_{iq_i}^k = 1 \Rightarrow D_i \mathbf{1}_{q_i} = \mathbf{1}_n \Rightarrow \text{Im} \mathbf{1}_n \subset \text{Im} D_j \quad (2.3)$$

par conséquent le rang de la matrice X est inférieur ou égal à $q + 1 - p$ et le modèle n'est pas identifiable.

Définition 2.1 *On appelle plan régulier, pour le modèle additif, tout plan de taille $n \geq q - p + 1$ dont la matrice D est de rang maximal, c'est-à-dire,*

$$\text{rg} D = q - p + 1 . \quad (2.4)$$

Remarque 2.1 *Un plan est régulier pour le modèle additif si et seulement si sa matrice satisfait simultanément les conditions :*

$$\forall i \neq j \text{ dans } \{1, \dots, p\}$$

$$\text{rg} D_i = q_i \quad (2.5)$$

$$\text{Im} D_i \cap \text{Im} D_j = \text{Im} \mathbf{1}_n \quad (2.6)$$

Remarque 2.2 *Les deux conditions de régularité, (2.5) et (2.6), sont équivalentes aux conditions :*

$$\forall i \neq j \text{ dans } \{1, \dots, p\}$$

$$D_i \mathbf{1}_{q_i} = \mathbf{1}_n$$

$$\text{rg} [D_i | D_j] = q_i + q_j - 1 \quad (2.7)$$

Ainsi un plan dans le domaine expérimental d'un système MoM de type A est régulier si et seulement si la condition (2.7) est satisfaite.

Exemple. Il est évident que la seule condition (2.5) ne garantit pas la régularité du plan. Si l'on considère un système où $q_i = r \geq 2$ et $D_i = A$ pour tout $i = 1, \dots, p$, avec $\text{rg} A = r$, on conclut que le plan n'est pas régulier car $\text{rg} D = r < pr - p + 1$ si $p \geq 2$.

La seule condition (2.6) ne garantit pas non plus la régularité. Soient $p = 4$, $q_1 = q_2 = q_3 = 2$ et $q_4 = 4$, pour le plan de taille $n = 8$ dont la matrice est la suivante :

$$[D_1 | D_2 | D_3 | D_4] = \left[\begin{array}{c|c|c|c} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{array} \middle| \begin{array}{c|c|c|c} 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{2} \end{array} \right]$$

On vérifie que $\text{Im}D_1 \cap \text{Im}D_2 = \text{Im}D_1 \cap \text{Im}D_3 = \text{Im}D_2 \cap \text{Im}D_3 = \text{Im}\mathbb{1}_8$ tout simplement parce que $\{d_{ij}, d_{lh}\}$ est libre $\forall i \neq l$ dans $\{1, 2, 3\}$ et $j, h \in \{1, 2\}$. Or, soit $\{v_1, v_2, v_3\}$ une base de $\text{Im}D_4$, avec $v_1 = \mathbb{1}_8$, $v_2 = (0, 2, 0, 2, 1, 2, 1, 2)'$ et $v_3 = (0, 0, -2, 2, 0, 1, 1, 0)'$, puisque $\{v_1, v_2, v_3, d_{ij}\}$ est libre $\forall i = 1, 2, 3$ et $j = 1, 2$, alors $\text{Im}D_4 \cap \text{Im}D_i = \text{Im}\mathbb{1}_8$, $\forall i = 1, 2, 3$. On constate donc que la condition (2.6) ne suffit pas car $\text{rg}D = 6 < 10 - 4 + 1$.

2.1.2 Contraintes d'identification

Dans le but de rendre le modèle additif identifiable, nous allons introduire des contraintes linéaires sur les paramètres.

Soit $[D_1 | \dots | D_p]$ la matrice d'un plan régulier. Ainsi $\text{rg}X = q - p + 1$ et par conséquent $N(X) = \dim(\ker X) = p$. Si $(v_o, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p) \in \ker X$ avec $\mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^{1 \times q_i}$, alors,

$$\mathbb{1}_n v_o + D_1 \mathbf{v}'_1 + \dots + D_p \mathbf{v}'_p = 0$$

d'où, après la restriction de sous-mélange (2.3), on obtient aisément p solutions du système homogène ci-dessus :

$$\forall k = 1, \dots, p$$

$$\begin{cases} v_o &= -1 \\ \mathbf{v}_k &= \mathbb{1}'_{q_k} \\ \mathbf{v}_i &= 0'_{q_i} \quad \forall i \neq k \end{cases}$$

Ces solutions sont rangées par colonnes dans la matrice A d'ordre $(q + 1) \times p$:

$$A = \left[\begin{array}{c} -\mathbb{1}'_p \\ \text{diag}(\mathbb{1}_{q_1}, \dots, \mathbb{1}_{q_p}) \end{array} \right] \quad (2.8)$$

Les colonnes de la matrice A forment une base du $\ker X$ car

$$A' A = \text{diag}(q_1, \dots, q_p) + J$$

et, après le lemme 1.7, la matrice $A' A$ est inversible, d'où

$$\text{rg}A = \text{rg} \left[A' A \right] = p.$$

Ainsi,

$$v \in \ker X \Leftrightarrow v = Az, \quad z \in \mathbb{R}^p$$

On cherche une matrice $\tilde{C} \in \mathbb{R}^{p \times (q+1)}$ telles que $\ker X \cap \ker \tilde{C} = \{0\}$, ce qui équivaut à l'affirmation suivante :

$$\tilde{C}v = \tilde{C}Az = 0 \Leftrightarrow z = 0$$

Cela implique que la matrice carrée $\tilde{C}A$ doit être inversible. On considère donc la matrice $\tilde{C} = [0_p | C]$ où $C = \text{diag}(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_p)$ avec $\mathbf{c}_i \in \mathbb{R}^{1 \times q_i}$ pour tout $i = 1, \dots, p$.

La matrice diagonale $\tilde{C}A = \text{diag}(\mathbf{c}_1 \mathbf{1}_{q_1}, \dots, \mathbf{c}_p \mathbf{1}_{q_p})$ est inversible si et seulement si

$$\mathbf{c}_i \mathbf{1}_{q_i} \neq 0 \quad \forall i = 1, \dots, p \quad (2.9)$$

On s'intéresse en particulier à des points \mathbf{c}_i correspondant aux sous-mélanges des CS du i -ème CP, c'est-à-dire $\mathbf{c}_i \in S_{q_i}$. Dans ce cas la condition (2.9) est satisfaite puisque $\mathbf{c}_i \mathbf{1}_{q_i} = 1$.

Pour une matrice \tilde{C} ainsi choisie et d'après la proposition 1.3 on a le résultat suivant :

Proposition 2.1 *Soit $D = [D_1 | \dots | D_p]$ la matrice d'un plan régulier pour le modèle additif du système MoM de type A et $\tilde{C} = [0 | \text{diag}(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_p)]$ une matrice de taille $p \times (q + 1)$ où $\mathbf{c}_i \in \mathbb{R}^{1 \times q_i}$ et $\mathbf{c}_i \in S_{q_i}$ pour tout $i = 1, \dots, p$. Alors, la matrice*

$$\begin{bmatrix} X \\ \tilde{C} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{1}_n & D \\ \hline 0_p & C \end{array} \right]$$

est de plein rang. Autrement dit, la matrice

$$\begin{bmatrix} X \\ \tilde{C} \end{bmatrix}' \begin{bmatrix} X \\ \tilde{C} \end{bmatrix} = X'X + \tilde{C}'\tilde{C} = \left[\begin{array}{c|c} n & \mathbf{1}_n' D \\ \hline D' \mathbf{1}_n & D' D + \text{diag}(c'_1 c_1, \dots, c'_p c_p) \end{array} \right]$$

est inversible.

Les contraintes $\tilde{C}\beta = 0$, où β est le vecteur de paramètres du modèle surparamétré (2.2), sont appelés **contraintes d'identification** pour ce modèle, dès lors que

$$\ker \tilde{C} \oplus \ker X = \mathbb{R}^{q+1}$$

Pour une matrice $C = \text{diag}(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_p)$, avec les sous-mélanges \mathbf{c}_i correspondant aux centroïdes des simplexes S_{q_i} , c'est-à-dire $\mathbf{c}_i = \frac{1}{q_i} \mathbf{1}'_{q_i}$, les contraintes d'identification $\tilde{C}\beta = 0$ sont équivalentes aux contraintes $\alpha_{i1} + \dots + \alpha_{iq_i} = 0$ pour tout $i = 1, \dots, p$. Outre l'identification du modèle (2.2), les contraintes du type $\mathbf{c}_i \boldsymbol{\alpha}_i = 0$, avec \mathbf{c}_i un sous-mélange, donne un sens à l'interprétation des paramètres que l'on explique maintenant.

2.1.3 Interprétation des paramètres

Pour un plan régulier nous appelons **contraintes d'identification classiques** celles liées aux centroïdes :

$$i = 1, 2, \dots, p$$

$$\sum_{j=1}^{q_i} \alpha_{ij} = 0 \quad (2.10)$$

Concernant les contraintes ci-dessus, il vient :

$$\mathbb{E}(Y_{\mathbf{x}}) = \eta(\mathbf{x}) = \begin{cases} \alpha_o & \text{si } \mathbf{x} = \left(\frac{1}{q_1} \mathbf{1}'_{q_1}, \dots, \frac{1}{q_p} \mathbf{1}'_{q_p} \right) \\ \alpha_o + \alpha_{11} & \text{si } \mathbf{x} = \left(e_1, \frac{1}{q_2} \mathbf{1}'_{q_2}, \dots, \frac{1}{q_p} \mathbf{1}'_{q_p} \right) \end{cases}$$

et le paramètre α_o peut avoir une interprétation similaire à celle du paragraphe 1.4.7, sur le modèle de Cox.

Si $\mathbf{c} = (\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_p)$, où $\mathbf{c}_i = \frac{1}{q_i} \mathbf{1}_{q_i}$, alors le mélange de mélanges $\frac{1}{p} \mathbf{c}$ est le centroïde de S_q et $\eta(\frac{1}{p} \mathbf{c}) = \alpha_o$ en raison des contraintes d'identification. On appelle \mathbf{c} *mélange neutre* dans le sens que là on obtient une réponse moyenne α_o .

On souligne qu'un mélange de S_q est neutre en fonction des contraintes d'identification

$$\text{diag}(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_p) \boldsymbol{\alpha} = 0$$

où \mathbf{c}_i est un sous-mélange pouvant être différent au centroïde de S_{q_i} .

Lorsqu'on se déplace du point \mathbf{c} au point $\mathbf{x} = (\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_{k-1}, \mathbf{v}, \mathbf{c}_{k+1}, \dots, \mathbf{c}_p)$, avec $\mathbf{v} \in S_{q_k}$, la surface de réponse sous contraintes paramétriques ne dépend que des CS liés au k -ème CP :

$$\eta(\mathbf{x}) = \alpha_o + (\alpha_{k1}, \dots, \alpha_{kq_k}) \mathbf{v}'$$

Si $\mathbf{v} = e_j$, avec $e_j \in \mathbb{B}_{q_k}$, la réponse dépend de l'unique CS impliqué dans le sous-mélange associé au k -ème CP :

$$\eta(\mathbf{x}) = \alpha_o + \alpha_{kj}$$

Sous-mélanges sur des points axiaux

Soit $\mathbf{x}(e_j)$ le point obtenu après avoir remplacé \mathbf{c}_k par e_j dans le mélange neutre et $\chi(t) \in \text{Conv}[\mathbf{c}, \mathbf{x}(e_j)]$. Si l'on remplace $\chi(t)$ dans la réponse, on obtient :

$$\eta(\chi(t)) = \alpha_o + t\alpha_{kj}$$

D'où on peut interpréter le paramètre α_{kj} comme le taux de variation pour des changement dans la proportion x_{kj} sur la direction $\text{Conv}[\mathbf{c}, \mathbf{x}(e_j)]$, avec $e_j \in \mathbb{B}_{q_k}$.

Remarque : Le sens pratique d'un mélange neutre consiste à supposer dès le départ que la propriété que l'on modélise a une réponse moyenne de valeur α_o en ce point. Ainsi, on détermine les contraintes d'identification pour le modèle linéaire en fonction de cette hypothèse là.

2.2 Plan orthogonal-équilibré (OE)

Notre premier objectif consiste à chercher des plans de façon à ce que la matrice d'information ait des bonnes propriétés pour le modèle additif sous les contraintes d'identification.

Définition 2.2 On dit qu'un plan pour le système MoM de type A est orthogonal-équilibré si sa matrice, $D = [D_1 | \cdots | D_p]$, satisfait :

$$\forall 1 \leq i < j \leq p$$

$$D'_i D_i = a_i I_{q_i} + b_i J_{q_i}, \quad a_i > 0 \quad (2.11)$$

$$D'_i D_j = c_{ij} J_{q_i, q_j} \quad (2.12)$$

La condition (2.11) est appelée orthogonalité et (2.12) équilibre.

On dit que les couples (a_i, b_i) sont les coefficients d'orthogonalité et les c_{ij} sont les coefficients d'équilibre.

Définition 2.3 On dit qu'un plan est strictement orthogonal si $b_i = 0$ pour tout $i = 1, \dots, p$ en (2.11).

La condition $a_i > 0$ fait partie de la définition d'un plan orthogonal-équilibré en (2.11) puisque si $a_i = 0$ alors $\text{rg} D_i = \text{rg} D'_i D_i = 1$ et évidemment le plan n'est pas régulier. Or, à priori la condition $a_i > 0$ ne suffirait pas pour assurer la régularité car il faut que $\text{Im} D_i \cap \text{Im} D_j = \text{Im} \mathbb{1}_n$ pour tout $i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$. Cependant, nous allons montrer que l'ensemble des conditions imposées dans la définition de plan orthogonal-équilibré sont suffisamment rigoureuses pour assurer la régularité du plan. Des valeurs négatives pour les coefficients (a_i, b_i) et c_{ij} ne sont pas possibles car les composantes de la matrice D sont des proportions de mélanges.

Proposition 2.2 Soit D_i une matrice de sous-mélanges, alors,

$$D'_i D_i = a I_{q_i} + b J_{q_i} \quad \Rightarrow \quad D'_i \mathbb{1}_n = (a + q_i b) \mathbb{1}_{q_i}$$

Démonstration.

Comme D_i est une matrice de sous-mélanges, alors $D_i \mathbb{1}_{q_i} = \mathbb{1}_n$ et le résultat est immédiat après les calculs suivants :

$$\begin{aligned} (D'_i D_i) \mathbb{1}_{q_i} &= D'_i (D_i \mathbb{1}_{q_i}) = D'_i \mathbb{1}_n \\ (D'_i D_i) \mathbb{1}_{q_i} &= (a I_{q_i} + b J_{q_i}) \mathbb{1}_{q_i} = a \mathbb{1}_{q_i} + b (q_i \mathbb{1}_{q_i}) = (a + q_i b) \mathbb{1}_{q_i} \end{aligned}$$

Ainsi, pour tout plan orthogonal la condition :

$$D'_i \mathbb{1}_n = (cste)_i \mathbb{1}_{q_i} \quad (2.13)$$

est satisfaite. \diamond

Remarque : Cette proposition est très utile car l'on peut aisément écarter un plan non orthogonal dès que la condition (2.13) n'est pas satisfaite pour un bloc quelconque de la matrice D .

Contre-exemples

1) L'équilibre n'implique pas nécessairement l'orthogonalité.

Soit D la matrice d'un plan régulier pour $p = 2$, $q_1 = 3$ et $q_2 = 2$:

$$D = [D_1 | D_2] = \left[\begin{array}{ccc|cc} 0.2 & 0.3 & 0.5 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0.5 & 0.1 & 0.4 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0.3 & 0.6 & 0.1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Ce plan est équilibré car $D'_1 D_2 = \frac{5}{6} J_{3,2}$ mais il n'est pas orthogonal puisque la matrice

$$D'_1 D_1 = \begin{bmatrix} 0.6022 & 0.5122 & 0.5522 \\ 0.5122 & 0.6822 & 0.4722 \\ 0.5522 & 0.4722 & 0.6422 \end{bmatrix}$$

n'a pas la forme $aI + bJ$.

2) La réciproque de la proposition 2.2 n'est pas vraie : (2.13) \nRightarrow (2.11).

Soit un plan régulier dont la matrice D contient le bloc D_1 donné ci-dessus. On a $\mathbb{1}'_5 D_1 = \frac{5}{3}(1, 1, 1)$, alors qu'il a été vérifié qu'un tel plan ne peut être orthogonal.

Maintenant nous montrons que l'orthogonalité et l'équilibre d'un plan entraînent sa régularité. Avant nous rappelons ce résultat connue d'algèbre matricielle (voir Laub 2005) :

Lemme 2.1 Soit $A \in \mathbb{R}^{r \times r}$ une matrice symétrique de valeurs propres $\lambda_1, \dots, \lambda_r$. Alors, les vecteurs propres de A , v_1, \dots, v_r , forment une base orthonormale de \mathbb{R}^r . De plus, si $T = [v_1 | \dots | v_r]$, on a :

$$T'AT = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r). \quad (2.14)$$

La factorisation de la matrice A , $A = T \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) T' = \sum_{i=1}^r \lambda_i v_i v_i'$, déduite de (2.14), est connue comme *décomposition spectrale*. Elle est importante par ses implications sur la trace et le déterminant d'une matrice symétrique (car $T' = T^{-1}$) :

$$|A| = \lambda_1 \cdots \lambda_r \quad \text{et} \quad \text{Trace}(A) = \lambda_1 + \cdots + \lambda_r$$

Un autre résultat important est celle lié au rang d'une matrice symétrique A , car par la décomposition spectrale de A on obtient le rang de A :

$$\text{rg}A = \text{rg} [T \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) T'] = \text{rg} [\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r)] \quad (2.15)$$

d'où $\text{rg}A$ est égal au nombre de valeurs propres non-nulles.

Théorème 2.1 Tout plan orthogonal-équilibré est régulier. De plus, les coefficients d'orthogonalité et d'équilibre ont la propriété suivante :

$$a_i + q_i b_i = \frac{n}{q_i} \quad (\text{Égalité de symétrie})$$

$$c_{ij} = \frac{n}{q_i q_j} \quad (\text{Égalité d'équilibre})$$

où n est la taille du plan et q_i est le nombre de CS du i -ème CP, pour tout $i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$.

Démonstration.

Tout d'abord on vérifie les deux égalités.

Soit $[D_1 | \dots | D_p]$ la matrice d'un plan orthogonal-équilibré avec coefficients (a_i, b_i) et c_{ij} , alors :

$$\begin{aligned} D'_i D_j &= c_{ij} J_{q_i, q_j} \\ (D'_i D_j) D'_j &= c_{ij} J_{q_i, q_j} D'_j = c_{ij} J_{q_i, n} \\ c_{ij}^2 q_j J_{q_i} &= (D'_i D_j) D'_j D_i = c_{ij} J_{q_i, n} D_i = c_{ij} \underbrace{(a_i + q_i b_i) J_{q_i}}_{\text{Prop. 2.2}} \end{aligned}$$

On obtient ainsi l'égalité liant les coefficients a_i, b_i et c_{ij} :

$$c_{ij} = \frac{1}{q_j} (a_i + q_i b_i) \quad (2.16)$$

De la même façon on obtient c_{ji} , mais $c_{ji} = c_{ij}$, par conséquent

$$\begin{aligned} \frac{1}{q_i} (a_j + q_j b_j) &= \frac{1}{q_j} (a_i + q_i b_i) \\ \frac{(a_j + q_j b_j) q_j}{q_i} &= a_i + q_i b_i \end{aligned}$$

Or,

$$(a_j + q_j b_j) q_j = (a_j + q_j b_j) \mathbb{1}'_{q_j} \mathbb{1}_{q_j} = (\mathbb{1}'_n D_j) \mathbb{1}_{q_j} = \mathbb{1}'_n (D_j \mathbb{1}_{q_j}) = \mathbb{1}'_n \mathbb{1}_n = n$$

d'où l'égalité de symétrie $\frac{n}{q_i} = a_i + q_i b_i$. On remplace $a_i + q_i b_i$ par $\frac{n}{q_i}$ dans (2.16) et l'on obtient l'égalité d'équilibre $c_{ij} = \frac{n}{q_i q_j}$.

Pour montrer la régularité du plan on vérifie la condition de la remarque 2.2, c'est-à-dire, pour $A = [D_i | D_j]$, on doit vérifier que $\text{rg} A = \text{rg} A' A = q_i + q_j - 1, \forall i \neq j$:

$$A' A = \begin{bmatrix} A_1 & B \\ B' & A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D'_i D_i & D'_i D_j \\ D'_j D_i & D'_j D_j \end{bmatrix}$$

En remplaçant les coefficients d'orthogonalité et d'équilibre selon les deux égalités obtenues, on a $B = \frac{n}{q_i q_j} J_{q_i, q_j}$ et $A_k = \left(\frac{n}{q_k} - q_k b_k \right) I_{q_k} + b_k J_{q_k}$, pour $k = 1, 2$. Après quelques opérations des lignes et des colonnes de la matrice $A' A$ on obtient la matrice symétrique E :

$$E = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_2 \end{bmatrix}, \quad \text{où} \quad \tilde{A}_2 = \left(\frac{n}{q_j} - q_j b_j \right) I_{q_j} + \left(b_j - \frac{n}{q_j^2} \right) J_{q_j} \quad (2.17)$$

Les opérations pour obtenir E sont les suivantes :

$f_l - \frac{1}{q_j} \sum_{i=1}^{q_i} f_r \mapsto f_l$ pour les lignes $l = 1 + q_i, \dots, q_i + q_j$

$$\frac{1}{q_j} \sum_{i=1}^{q_i} f_r = \frac{1}{q_j} \mathbf{1}'_{q_i} [A_1 | B] = \left[\frac{n}{q_i q_j} \mathbf{1}'_{q_i} \mid \frac{n}{q_j^2} \mathbf{1}'_{q_j} \right]$$

d'où l'on obtient la matrice symétrique \tilde{A}_2 :

$$\tilde{A}_2 = A_2 - \frac{n}{q_j^2} J_{q_j}$$

On a alors la matrice $\begin{bmatrix} A_1 & B \\ 0 & \tilde{A}_2 \end{bmatrix}$ à laquelle on applique les opérations de colonnes suivantes :

$g_l - \frac{1}{q_j} \sum_{i=1}^{q_i} g_r \mapsto g_l$ pour les colonnes $l = 1 + q_i, \dots, q_i + q_j$

Ces opérations ne modifient pas la matrice \tilde{A}_2 et l'on obtient la matrice symétrique E de (2.17).

On calcule maintenant les valeurs propres de la matrice E ,

$$|E - \lambda I_{q_i+q_j}| = |A_1 - \lambda I_{q_i}| |\tilde{A}_2 - \lambda I_{q_j}|$$

Cela équivaut à calculer les valeurs propres de A_1 et \tilde{A}_2 .

Voici les valeurs propres d'après le lemme 1.6 :

$$|A_1 - \lambda I_{q_i}| = \left| \left(\frac{n}{q_i} - q_i b_i - \lambda \right) I_{q_i} + b_i J_{q_i} \right| = \left(\frac{n}{q_i} - q_i b_i - \lambda \right)^{q_i-1} \left(\frac{n}{q_i} - \lambda \right) = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = \frac{n}{q_i} - q_i b_i = a_i > 0 & (\text{de multiplicité } q_i - 1) \\ \lambda_2 = \frac{n}{q_i} \neq 0 \end{cases}$$

$$|\tilde{A}_2 - \lambda I_{q_j}| = \left| \left(\frac{n}{q_j} - q_j b_j - \lambda \right) I_{q_j} + \left(b_j - \frac{n}{q_j^2} - \lambda \right) J_{q_j} \right| =$$

$$\left(\frac{n}{q_j} - q_j b_j - \lambda \right)^{q_j-1} \left[\frac{n}{q_j} - q_j b_j - \lambda + \left(b_j - \frac{n}{q_j^2} \right) q_j \right] = -\lambda \left(\frac{n}{q_j} - q_j b_j - \lambda \right)^{q_j-1} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \lambda_3 = \frac{n}{q_j} - q_j b_j = a_j > 0 & (\text{de multiplicité } q_j - 1) \\ \lambda_4 = 0 \end{cases}$$

La matrice E a donc une seule valeur propre égale à zéro, comme elle est symétrique on conclut d'après 2.15 que pour tout $i \neq j$

$$\text{rg}[D_i | D_j] = \text{rg} A' A = \text{rg} E = q_i + q_j - 1$$

et par conséquent tout plan orthogonal-équilibré est régulier. \diamond

2.3 Estimation des paramètres du modèle additif

Soit $D = [D_1 | \dots | D_p]$ la matrice d'un plan orthogonal-équilibré et $C\alpha = 0$ les contraintes d'identification classiques (2.10). On effectue dans ce paragraphe tous les calculs concernant l'estimation des moindres carrés des paramètres du modèle additif pour ce type plan.

2.3.1 Matrice d'information

Dans le chapitre 1 a été définie la matrice d'information comme la matrice des coefficients du système d'équations normales, $X'X$. Lorsqu'on a des contraintes d'identification en raison de la singularité de cette matrice, on appellera matrice d'information la matrice permettant d'estimer de façon unique les paramètres. D'après la proposition 1.3, cette matrice est la suivante :

$$X'X + \tilde{C}'\tilde{C}$$

où \tilde{C} est la matrice des contraintes d'identification.

Si $C = \text{diag}(\mathbf{1}'_{q_1}, \dots, \mathbf{1}'_{q_p})$ et $\tilde{C} = [0|C]$, on a :

$$\tilde{C}'\tilde{C} = \left[\begin{array}{c|c} 0 & 0'_q \\ \hline 0_q & \text{diag}(J_{q_1}, \dots, J_{q_p}) \end{array} \right] \quad (2.18)$$

Pour le calcul de $X'X$ on a :

$$X'X = \left[\begin{array}{c} \frac{\mathbf{1}'_n}{D'_1} \\ \vdots \\ D'_p \end{array} \right] [\mathbf{1}_n | D_1 | \dots | D_p]$$

$$X'X = \left[\begin{array}{c|c|c|c|c} n & \mathbf{1}'_n D_1 & \mathbf{1}'_n D_2 & \dots & \mathbf{1}'_n D_p \\ \hline & D'_1 D_1 & D'_1 D_2 & \dots & D'_1 D_p \\ \hline & & D'_2 D_2 & \dots & D'_2 D_p \\ \hline & Sym & & \ddots & \vdots \\ \hline & & & & D'_p D_p \end{array} \right]$$

Si $[D_1 | \dots | D_p]$ est la matrice d'un plan orthogonal-équilibré, la matrice d'information pour le modèle additif est la suivante :

$$X'X + \tilde{C}'\tilde{C} = \left[\begin{array}{c|c|c|c|c} n & (a_1 + q_1 b_1)\mathbf{1}'_{q_1} & (a_2 + q_2 b_2)\mathbf{1}'_{q_2} & \dots & (a_p + q_p b_p)\mathbf{1}'_{q_p} \\ \hline & a_1 I_{q_1} + (1 + b_1)J_{q_1} & c_{12} J_{q_1, q_2} & \dots & c_{1p} J_{q_1, q_p} \\ \hline & & a_2 I_{q_2} + (1 + b_2)J_{q_2} & \dots & c_{2p} J_{q_2, q_p} \\ \hline & Sym & & \ddots & \vdots \\ \hline & & & & a_p I_{q_p} + (1 + b_p)J_{q_p} \end{array} \right] \quad (2.19)$$

D'après la proposition 2.1 la matrice $X'X + \tilde{C}'\tilde{C}$ est inversible car le plan est régulier.

D'autre part la proposition 1.3 assure l'existence d'un unique estimateur des moindres carrés du modèle additif, donné par $\hat{\beta} = (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'Y$, qui peut être obtenu en pratique par la mise en place d'une factorisation de $(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}$ basée sur $\ker X$ et $\ker \tilde{C}$.

2.3.2 Factorisation de l'inverse de la matrice d'information

Afin de chercher une expression explicite de la matrice $(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}$, quelques calculs préalables sont effectués.

Lemme 2.2 *Pour a et b non nuls, on a le résultat suivant :*

$$M = \left[\begin{array}{c|c} b & -a\mathbf{1}'_{r-1} \\ \hline b\mathbf{1}_{r-1} & aI_{r-1} \end{array} \right] \iff M^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{rb} & \frac{1}{rb}\mathbf{1}'_{r-1} \\ \hline -\frac{1}{ra}\mathbf{1}_{r-1} & \frac{1}{a}I_{r-1} - \frac{1}{ra}J_{r-1} \end{array} \right]$$

De plus,

$$|M| = rba^{r-1}$$

Démonstration.

Soit $M = M_1M_2$ une factorisation comme celle de (1.2) dans la démonstration du lemme 1.5 :

$$M_1 = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_{r-1} \\ \hline \mathbf{1}_{r-1} & I_{r-1} \end{array} \right] \quad \text{et} \quad M_2 = \left[\begin{array}{c|c} b & -a\mathbf{1}'_{r-1} \\ \hline 0_{r-1} & aI_{r-1} + aJ_{r-1} \end{array} \right]$$

Comme $|M_1| = 1$ et $|M_2| = b|aI_{r-1} + aJ_{r-1}| = ba^{r-1}r \neq 0$ car $a \neq 0$ et $b \neq 0$, les matrices M_1 et M_2 sont inversibles donc la matrice M l'est aussi. Son déterminant est :

$$|M| = |M_1||M_2| = rba^{r-1}$$

La matrice M_1^{-1} est obtenue directement, on peut vérifier aisément que

$$M_1^{-1} \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_{r-1} \\ \hline -\mathbf{1}_{r-1} & I_{r-1} \end{array} \right]$$

Pour obtenir M_2^{-1} on résout le système $\left[\begin{array}{c|c} x & v' \\ \hline z & W \end{array} \right] M_2 = I_r$, avec $x \in \mathbb{R}$, $v, z \in \mathbb{R}^{r-1}$ et $W \in \mathbb{R}^{(r-1) \times (r-1)}$:

$$\begin{cases} bx = 1 \\ -ax\mathbf{1}'_{r-1} + v'(aI_{r-1} + aJ_{r-1}) = 0'_{r-1} \\ zb = 0_{r-1} \\ -az\mathbf{1}'_{r-1} + W(aI_{r-1} + aJ_{r-1}) = I_{r-1} \end{cases}$$

On déduit directement que $x = \frac{1}{b}$ et $z = 0$, d'où :

$$\begin{cases} (aI_{r-1} + aJ_{r-1})v = \frac{a}{b}\mathbf{1}_{r-1} \\ W(aI_{r-1} + aJ_{r-1}) = I_{r-1} \end{cases}$$

D'après le lemme 1.6, $W = (aI_{r-1} + aJ_{r-1})^{-1} = \frac{1}{a}I_{r-1} - \frac{1}{ra}J_{r-1}$, on obtient ainsi que $v = \frac{a}{b}W\mathbf{1}_{r-1}$, d'où :

$$M_2^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{b} & \frac{1}{br}\mathbf{1}'_{r-1} \\ \hline 0_{r-1} & \frac{1}{a}I_{r-1} - \frac{1}{ra}J_{r-1} \end{array} \right]$$

On a donc l'inverse de M , $M^{-1} = M_2^{-1}M_1^{-1}$, qui est indiquée dans l'énoncé. \diamond

Matrice des noyaux

Nous allons définir deux matrices, notées $B_{\tilde{C}}$ et B_X , de façon à ce que les colonnes de $B_{\tilde{C}}$ forment une base de $\ker \tilde{C}$ et les colonnes de B_X forment une base de $\ker X$. Alors, $\text{Im}B_{\tilde{C}} = \ker \tilde{C}$ et $\text{Im}B_X = \ker X$.

La matrice B_X a déjà été obtenue dans (2.8) :

$$B_X = \left[\begin{array}{c} -\mathbf{1}'_p \\ \hline \text{diag}(\mathbf{1}_{q_1}, \dots, \mathbf{1}_{q_p}) \end{array} \right]$$

Pour $\tilde{C}\beta = 0$ les contraintes d'identification classiques, on construit une base de $\ker \tilde{C}$:

$$B_{\tilde{C}} = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_{q-p} \\ \hline 0_q & \text{diag}(A_1, \dots, A_p) \end{array} \right]$$

avec $A_i \in \mathbb{R}^{q_i \times (q_i-1)}$ pour tout $i = 1, \dots, p$.

Comme $\mathbf{c}_i = \mathbf{1}'_{q_i}$ dans la matrice $\tilde{C} = [0_p | \text{diag}(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_p)]$, alors il faut chercher une sous-matrice A_i de façon à ce que le produit $\mathbf{1}'_{q_i}A_i$ soit nul afin d'assurer la condition $\tilde{C}B_{\tilde{C}} = 0$.

Une matrice vérifiant la propriété souhaitée est la suivante :

$$A_i = \left[\begin{array}{c} -\mathbf{1}'_{q_i-1} \\ \hline I_{q_i-1} \end{array} \right]$$

Pour que les $q-p+1$ colonnes de $B_{\tilde{C}}$ forment une base, il suffit de vérifier que $\text{rg}A_i = q_i - 1$ pour tout $i = 1, \dots, p$, mais évidemment $\text{rg} \left[\begin{array}{c} -\mathbf{1}'_{q_i-1} \\ \hline I_{q_i-1} \end{array} \right] = \text{rg}I_{q_i-1} = q_i - 1$

Définition 2.4 Soit X la matrice du modèle additif pour un plan régulier. On appelle matrice des noyaux du modèle sous les contraintes d'identification classiques $\tilde{C}\beta = 0$, la matrice d'ordre $(q+1) \times (q+1)$ donnée par $B = [B_{\tilde{C}} | B_X]$, où les colonnes de $B_{\tilde{C}} \in \mathbb{R}^{(q+1) \times (q-p+1)}$ forment une base de $\ker \tilde{C}$ et les colonnes de $B_X \in \mathbb{R}^{(q+1) \times p}$ forment une base de $\ker X$.

Pour les matrices $B_{\tilde{C}}$ et B_X construites précédemment, la matrice des noyaux est la suivante :

$$B = [B_{\tilde{C}} | B_X] = \left[\begin{array}{c|c|c} 1 & 0'_{q-p} & -\mathbf{1}'_p \\ \hline 0_q & \text{diag} \left(\left[\begin{array}{c} -\mathbf{1}'_{q_1-1} \\ \hline I_{q_1-1} \end{array} \right], \dots, \left[\begin{array}{c} -\mathbf{1}'_{q_p-1} \\ \hline I_{q_p-1} \end{array} \right] \right) & \text{diag}(\mathbf{1}_{q_1}, \dots, \mathbf{1}_{q_p}) \end{array} \right]$$

Cette matrice particulière est la matrice des noyaux que nous utilisons pour la factorisation de $(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}$ proposée dans l'énoncé suivant :

Théorème 2.2 *Soit $X \in \mathbb{R}^{n \times (q+1)}$ la matrice du modèle additif pour un plan orthogonal-équilibré avec coefficients d'orthogonalité (a_i, b_i) pour $i = 1 \dots, p$. Soit $\tilde{C} \in \mathbb{R}^{p \times (q+1)}$ la matrice des contraintes classiques d'identification. Alors, l'inverse de la matrice d'information est factorisable de la façon suivante :*

$$(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} = BPG^{-1}L$$

Avec,

B : matrice des noyaux,

P : matrice de permutation,

$$G = \text{diag}(n, M_1, \dots, M_p) \text{ où } M_i = \left[\begin{array}{c|c} q_i & -a_i \mathbf{1}'_{q_i-1} \\ \hline q_i \mathbf{1}_{q_i-1} & a_i I_{q_i-1} \end{array} \right], \quad \forall i = 1, \dots, p,$$

$$L = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_q \\ \hline v & I_q \end{array} \right] \text{ où } v' = - \left[\frac{1}{q_1} \mathbf{1}'_{q_1} \mid \dots \mid \frac{1}{q_p} \mathbf{1}'_{q_p} \right].$$

Démonstration.

Pour toute matrice A , $\ker A = \ker(A'A)$. Il vient donc que $X'XB_X = 0$ et $\tilde{C}'\tilde{C}B_{\tilde{C}} = 0$. Ainsi,

$$\begin{aligned} (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})B &= (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})[B_{\tilde{C}}|B_X] \\ &= [X'XB_{\tilde{C}}|0_{q+1,p}] + [0_{q+1,q-p+1}|\tilde{C}'\tilde{C}B_X] \\ &= [X'XB_{\tilde{C}}|\tilde{C}'\tilde{C}B_X] \end{aligned}$$

Dans (2.18) et (2.19) on a fait les calculs de la matrice d'information pour un plan orthogonal-équilibré, d'où :

$$(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})B = \left[\begin{array}{c|c|c} n & 0'_{q-p} & 0'_p \\ \hline (a_1 + q_1 b_1) \mathbf{1}_{q_1} & & \\ \vdots & \text{diag} \left(a_1 \left[\frac{-\mathbf{1}'_{q_1-1}}{I_{q_1-1}} \right], \dots, a_p \left[\frac{-\mathbf{1}'_{q_p-1}}{I_{q_p-1}} \right] \right) & \text{diag} (q_1 \mathbf{1}_{q_1}, \dots, q_p \mathbf{1}_{q_p}) \\ \hline (a_p + q_p b_p) \mathbf{1}_{q_p} & & \end{array} \right] \quad (2.20)$$

Tous les coefficients d'équilibre, c_{ij} , ont disparu de la matrice obtenue ci-dessus. On effectue q opérations élémentaires de lignes sur cette matrice là, à savoir :

$$f_m - \left(\frac{a_k + q_k b_k}{n} \right) f_1 \rightarrow f_m$$

pour $k = 1, \dots, p$ et $m = 1 + \sum_{i=1}^{k-1} q_i, \dots, \sum_{i=1}^k q_i$.

Soit L la matrice associée à ces opérations élémentaires, elle est ainsi d'après l'égalité de symétrie :

$$L = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_q \\ \hline -\left(\frac{a_1+q_1b_1}{n}\right) \mathbb{1}_{q_1} & I_q \\ \vdots & \\ -\left(\frac{a_p+q_p b_p}{n}\right) \mathbb{1}_{q_p} & \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_q \\ \hline -\left(\frac{1}{q_1}\right) \mathbb{1}_{q_1} & I_q \\ \vdots & \\ -\left(\frac{1}{q_p}\right) \mathbb{1}_{q_p} & \end{array} \right] \quad (2.21)$$

La différence entre les matrices $(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})B$ et $L(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})B$ se trouve sur les composantes de leur première colonne car on a effectué les opérations élémentaires de lignes pour n'avoir que des composantes nulles au dessous du pivot n . Ainsi,

$$L(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})B = \left[\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c} n & 0'_{q_1-1} & \cdots & 0'_{q_p-1} & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0_{q_1} & a_1 & \left[\frac{-\mathbb{1}'_{q_1-1}}{I_{q_1-1}}\right] & \cdots & 0_{q_1, q_p-1} & q_1 \mathbb{1}_{q_1} & \cdots & 0_{q_1} \\ \hline \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \hline 0_{q_p} & \cdots & \cdots & a_p \left[\frac{-\mathbb{1}'_{q_p-1}}{I_{q_p-1}}\right] & 0_{q_p} & \cdots & q_p \mathbb{1}_{q_p} \end{array} \right]$$

On a écrit la matrice $L(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})B$ en détail afin de montrer qu'il existe une permutation de ses colonnes conduisant à une matrice G diagonale par bloc. Si P est la matrice associée à cette permutation, alors,

$$L(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})BP = G$$

où

$$G = \text{diag}(n, M_1, \dots, M_p) \quad (2.22)$$

avec

$$M_i = \left[\begin{array}{c|c} q_i & -a_i \mathbb{1}'_{q_i-1} \\ \hline q_i \mathbb{1}_{q_i-1} & a_i I_{q_i-1} \end{array} \right]$$

pour tout $i = 1, \dots, p$.

Le lemme 2.2 permet d'obtenir M_i^{-1} , d'où

$$G^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{n}, M_1^{-1}, \dots, M_p^{-1}\right) \quad (2.23)$$

avec :

$$M_i^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{q_i^2} & \frac{1}{q_i^2} \mathbb{1}'_{q_i-1} \\ \hline -\frac{1}{a_i q_i} \mathbb{1}_{q_i-1} & \frac{1}{a_i} I_{q_i-1} - \frac{1}{a_i q_i} J_{q_i-1} \end{array} \right]$$

Or,

$$L(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})BPG^{-1} = I \Rightarrow (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})BPG^{-1} = L^{-1} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow BPG^{-1} = (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} L^{-1} \Rightarrow (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} = BPG^{-1}L$$

On a donc montré le résultat. \diamond

Cette factorisation permet d'obtenir aisément le déterminant de la matrice d'information ainsi que les estimateurs des moindres carré du modèle additif pour un plan orthogonal-équilibré.

Corollaire 2.1 *Soit X la matrice du modèle additif sous les contraintes d'identification classiques $\tilde{C}\beta = 0$ pour un plan orthogonal-équilibré. Soient (a_i, b_i) les couples de coefficients d'orthogonalité, n la taille du plan et q_i le nombre de composants secondaires du i -ème composant principal, pour $i = 1, \dots, p$. Alors,*

$$|X'X + \tilde{C}'\tilde{C}| = n \prod_{i=1}^p q_i a_i^{q_i-1}$$

Démonstration.

$$(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} = BPG^{-1}L \implies |X'X + \tilde{C}'\tilde{C}| = \frac{|G|}{|BP||L|}$$

Les matrice L et D , obtenues en (2.21) et (2.22) respectivement, satisfont

$$|L| = 1$$

$$|G| = n|M_1| \cdots |M_p|$$

où

$$|M_i| = q_i^2 a_i^{q_i-1} \quad \forall i = 1, \dots, p$$

d'après le lemme 2.2.

La matrice des noyaux, après la permutation des colonnes, est la suivante :

$$BP = \left[\begin{array}{c|c} 1 & -e_1 - e_{1+q_1} - \cdots - e_{1+q_1+\cdots+q_{p-1}} \\ \hline 0_q & \text{diag}(N_1, \dots, N_p) \end{array} \right] \quad (2.24)$$

Avec,

$$e_{1+k} \in \mathbb{B}_q \quad \forall k \in \{0, q_1, q_2, \dots, q - q_p\}, \text{ où } q = \sum_{i=1}^p q_i$$

et $\forall i = 1, \dots, p$

$$N_i = \left[\begin{array}{c|c} 1 & -\mathbf{1}'_{q_i-1} \\ \hline \mathbf{1}_{q_i-1} & I_{q_i-1} \end{array} \right] \xrightarrow{\text{Lemme 2.2}} |N_i| = q_i \implies |BP| = \prod_{i=1}^p q_i$$

Le résultat est ainsi obtenu :

$$|X'X + \tilde{C}'\tilde{C}| = \frac{n \prod_{i=1}^p q_i^2 a_i^{q_i-1}}{\prod_{i=1}^p q_i} = n \prod_{i=1}^p q_i a_i^{q_i-1}.$$

\diamond

On remarque de la matrice d'information ne dépend pas des coefficients c_{ij} , donc le déterminant non plus.

2.3.3 Estimateurs des moindres carrés

À l'aide de la factorisation $BPG^{-1}L$ les formules des estimateurs des moindres carrés pour le modèle additif sont obtenues, puis on détermine quels sont les plans où la variance de ces estimateurs est minimale.

Proposition 2.3 *Soit $D = [D_1 | \cdots | D_p]$ la matrice d'un plan orthogonal-équilibré de taille n , avec coefficients d'orthogonalité (a_i, b_i) pour tout $i = 1, \dots, p$. Les estimateurs des moindres carrés du modèle additif pour ce plan, sous contraintes d'identification classiques, sont donnés par :*

$$\hat{\alpha}_o = \frac{1}{n} \mathbf{1}'_n Y = \bar{Y}$$

$$\hat{\alpha}_i = \frac{1}{a_i} D'_i Y - \frac{n}{a_i q_i} \bar{Y} \mathbf{1}_{q_i}, \quad \forall i = 1, \dots, p.$$

Démonstration.

Si $\hat{\beta}' = (\hat{\alpha}_o, \hat{\alpha}'_1, \dots, \hat{\alpha}'_p)$ est l'estimateur des moindres carrés du paramètre β dans le modèle additif, alors :

$$\hat{\beta} = (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} X'Y \iff \hat{\beta} = BPG^{-1}L \begin{bmatrix} \mathbf{1}'_n \\ D'_1 \\ \vdots \\ D'_p \end{bmatrix} Y$$

Soit $B_\sigma = BP$. On effectue le produit matriciel $B_\sigma G^{-1}L$ où les matrices concernées sont celles de (2.21), (2.23) et (2.24) :

$$B_\sigma G^{-1}L = \left[\begin{array}{c|c} 1 & z' \\ \hline 0_q & \text{diag}(N_1, \dots, N_p) \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{n} & 0'_q \\ \hline 0_q & \text{diag}(M_1^{-1}, \dots, M_p^{-1}) \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0'_q \\ \hline v & I_q \end{array} \right]$$

$$\text{avec } z' = -\left(1, 0'_{q_1-1}, \dots, 1, 0'_{q_p-1}\right) \text{ et } v = -\frac{1}{n} \begin{bmatrix} (a_1 + b_1 q_1) \mathbf{1}_{q_1} \\ \vdots \\ (a_p + b_p q_p) \mathbf{1}_{q_p} \end{bmatrix}.$$

La matrice $B_\sigma G^{-1}L$ est symétrique puisqu'elle est l'inverse de $X'X + \tilde{C}'\tilde{C}$. Alors,

$$B_\sigma G^{-1}L = \left[\begin{array}{c|c} a & w' \\ \hline w & \text{diag}(N_1 M_1^{-1}, \dots, N_p M_p^{-1}) \end{array} \right] \quad (2.25)$$

Or,

$$N_i M_i^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} 1 & -\mathbf{1}'_{q_i-1} \\ \hline \mathbf{1}_{q_i-1} & I_{q_i-1} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} \frac{1}{q_i^2} & \frac{1}{q_i^2} \mathbf{1}'_{q_i-1} \\ \hline -\frac{1}{a_i q_i} \mathbf{1}_{q_i-1} & \frac{1}{a_i} I_{q_i-1} - \frac{1}{a_i q_i} J_{q_i-1} \end{array} \right] = \frac{1}{a_i} I_{q_i} + \left(\frac{1}{q_i^2} - \frac{1}{a_i q_i} \right) J_{q_i},$$

$$[-1|0'_{q_i-1}] M_i^{-1} = -\frac{1}{q_i^2} \mathbf{1}'_{q_i},$$

$$N_i M_i^{-1} \left[-\frac{1}{n} (a_i + b_i q_i) \mathbf{1}_{q_i} \right] = -\frac{1}{n} (a_i + b_i q_i) \left(\frac{1}{a_i} + \frac{q_i}{q_i^2} - \frac{q_i}{q_i a_i} \right) \mathbf{1}_{q_i} = -\left(\frac{a_i + b_i q_i}{n q_i} \right) \mathbf{1}_{q_i}.$$

D'où :

$$w' = z' \text{diag} (M_1^{-1}, \dots, M_p^{-1}) = - \left[\frac{1}{q_1^2} \mathbf{1}'_{q_1} \mid \dots \mid \frac{1}{q_p^2} \mathbf{1}'_{q_p} \right].$$

L'inverse de la matrice $X'X + \tilde{C}'\tilde{C}$ est donc :

$$BPG^{-1}L = \left[\begin{array}{c|c|c|c} a & -\frac{1}{q_1^2} \mathbf{1}'_{q_1} & \dots & -\frac{1}{q_p^2} \mathbf{1}'_{q_p} \\ \hline \vdots & \frac{1}{a_1} I_{q_1} + \left(\frac{1}{q_1^2} - \frac{1}{a_1 q_1} \right) J_{q_1} & 0_{q_1, q-q_1-q_p} & 0_{q_1, q_p} \\ \hline \vdots & \dots & \ddots & 0_{q-q_1-q_p, q_p} \\ \hline Sym & \dots & \dots & \frac{1}{a_p} I_{q_p} + \left(\frac{1}{q_p^2} - \frac{1}{a_p q_p} \right) J_{q_p} \end{array} \right]$$

Il reste à déterminer la valeur de a :

$$a = \left[\frac{1}{n} \mid w' \right] \left[\frac{1}{v} \right] = \frac{1}{n} + w'v = \frac{1}{n} + \frac{1}{n} \left[\frac{1}{q_1^2} \mathbf{1}'_{q_1} \mid \dots \mid \frac{1}{q_p^2} \mathbf{1}'_{q_p} \right] \begin{bmatrix} (a_1 + b_1 q_1) \mathbf{1}_{q_1} \\ \vdots \\ (a_p + b_p q_p) \mathbf{1}_{q_p} \end{bmatrix}$$

$$a = \frac{1}{n} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^p \frac{a_i + b_i q_i}{q_i}$$

$$a = \frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \frac{1}{q_i} \left(\frac{a_i + b_i q_i}{n} \right)$$

$$a = \frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \frac{1}{q_i^2} \quad (\text{Égalité de symétrie})$$

Soit l_1 la première ligne de la matrice $BPG^{-1}L$, on a donc que

$$l_1 X' = \left(\frac{1}{n} + \sum_{i=1}^p \frac{1}{q_i^2} \right) \mathbf{1}'_n - \sum_{i=1}^p \frac{1}{q_i^2} \mathbf{1}'_{q_i} D'_i$$

Comme les colonnes de D'_i sont des sous-mélanges, alors $\mathbf{1}'_{q_i} D'_i = \mathbf{1}'_n$ et $J_{q_i} D'_i = J_{q_i, n}$. Par conséquent :

$$l_1 X' = \frac{1}{n} \mathbf{1}'_n$$

Or,

$$BPG^{-1}LX' = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} \mathbf{1}'_n \\ \hline L_1 \\ \hline \vdots \\ \hline L_p \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Avec,

$$L_i = -\frac{1}{q_i^2} \mathbf{1}_{q_i} \mathbf{1}'_n + \left[\frac{1}{a_i} I_{q_i} + \left(\frac{1}{q_i^2} - \frac{1}{a_i q_i} \right) J_{q_i} \right] D'_i = \frac{1}{a_i} D'_i - \frac{1}{a_i q_i} J_{q_i, n}$$

Ainsi,

$$\hat{\alpha}_o = \frac{1}{n} \mathbf{1}'_n Y = \bar{Y}$$

et $\forall i = 1, \dots, p$,

$$\hat{\alpha}_i = \frac{1}{a_i} D'_i Y - \frac{1}{a_i q_i} J_{q_i, n} Y$$

Comme $J_{q_i, n} Y = (\mathbf{1}_n Y) \mathbf{1}_{q_i} = n \hat{\alpha}_o \mathbf{1}_{q_i}$ on arrive au résultat. \diamond

2.3.4 Espérance et dispersion des estimateurs

Sous les hypothèse du modèle de Gauss-Markov ($\mathbb{E}(Y) = X\beta$ et $\mathbb{V}(Y) = \sigma^2 I$), on obtient l'espérance et la matrice de dispersion de l'estimateur des moindres carrés du paramètre β .

Espérance

On vérifie en général que les estimateurs de moindres carrés sont sans biais.

D'une part,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\hat{\beta}) &= \mathbb{E} \left[\left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} X'Y \right] \\ &= \left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} X' \mathbb{E}(Y) \\ &= \left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} X'X\beta, \end{aligned}$$

d'autre part,

$$\tilde{C}\beta = 0 \implies \tilde{C}'\tilde{C}\beta = 0 \implies \left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right) \beta = X'X\beta,$$

alors $\mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta$.

Matrice de variance-covariance

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}) = \mathbb{V} \left[\left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} X'Y \right] = \left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} X'X \left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} \sigma^2 = A' A \sigma^2$$

La matrice A a été déjà calculée en (2.26) pour un plan orthogonal-équilibré :

$$A = X \left(X'X + \tilde{C}'\tilde{C} \right)^{-1} = \left[\frac{1}{n} \mathbf{1}_n | L'_1 | \dots | L'_p \right]$$

avec $L_i = \frac{1}{a_i} D'_i - \frac{1}{a_i q_i} J_{q_i, n}$.

Pour obtenir $A'A$ il faut déterminer les sous-matrices $L_i\mathbf{1}'_n$ et $L_iL'_k$ pour $1 \leq i \leq k \leq p$:

$$L_iL'_i = \frac{1}{a_i^2}D'_iD_i - \frac{2}{a_i^2q_i}D'_iJ_{n,q_i} + \frac{n}{a_i^2q_i^2}J_{q_i}$$

$$L_iL'_k = \frac{1}{a_ia_k}D'_iD_k - \frac{1}{a_ia_kq_k}D'_iJ_{n,q_k} - \frac{1}{a_ia_kq_i}J_{q_i,n}D_k + \frac{n}{a_ia_kq_iqu_k}J_{q_i,q_k}$$

D'après les égalités de symétrie et d'équilibre :

$$D'_iD_k = c_{ik}J_{q_i,q_k} = \frac{n}{q_iqu_k}J_{q_i,q_k}$$

$$D'_iJ_{n,q_i} = J_{q_i,n}D_i = (a_i + b_iqu_i)J_{q_i} = \frac{n}{q_i}J_{q_i}$$

on obtient que $L_iL'_i = \frac{1}{a_i}I_{q_i} - \frac{1}{a_iqu_i}J_{q_i}$ et $L_iL'_k = 0_{q_i,q_k}$.

D'ailleurs, $\frac{1}{n}L_i\mathbf{1}'_n = 0_{q_i}$ et $\frac{1}{n^2}\mathbf{1}'_n\mathbf{1}_n = \frac{1}{n}$, d'où la matrice $A'A$ est diagonale par bloc :

$$\mathbb{V}(\hat{\beta}) = \sigma^2 \text{diag} \left(\frac{1}{n}, \frac{1}{a_1} \left[I_{q_1} - \frac{1}{q_1} J_{q_1} \right], \dots, \frac{1}{a_p} \left[I_{q_p} - \frac{1}{q_p} J_{q_p} \right] \right). \quad (2.27)$$

On a ainsi le résultat suivant :

Proposition 2.4 *Soit $(\hat{\alpha}_o, \hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_p)$ le vecteur des estimateurs des paramètres du modèle additif sur un plan OE à coefficients d'orthogonalité (a_i, b_i) pour $i = 1, \dots, p$. Alors :*

$$\text{Var}(\hat{\alpha}_o) = \frac{\sigma^2}{n}$$

$$\mathbb{V}(\hat{\alpha}_i) = \left[\frac{1}{a_i}I_{q_i} - \frac{1}{a_iqu_i}J_{q_i} \right] \sigma^2$$

Remarque 2.3 *Dans le cas d'un modèle linéaire de Gauss-Markov non-surparamétré, si la matrice X du modèle est de plein rang, on a $\mathbb{V}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X'X)^{-1}$, c'est-à-dire, la matrice de variance-covariance est l'inverse de la matrice d'information multipliée par σ^2 . Dans le cas traité ici, où le modèle est toujours surparamétré, la matrice $\frac{1}{\sigma^2}\mathbb{V}(\hat{\beta})$ ne correspond pas à l'inverse de la matrice d'information car :*

$$(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} \neq (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'X(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} = \frac{1}{\sigma^2}\mathbb{V}(\hat{\beta})$$

En fait, le déterminant de la matrice de variance-covariance est égal à zéro.

Soit $\tilde{\mathbb{V}}(\hat{\beta}) = \frac{1}{\sigma^2}\mathbb{V}(\hat{\beta})$, comme $(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}$ est une inverse généralisé de $X'X$ on a :

$$X'X\tilde{\mathbb{V}}(\hat{\beta})X'X = \underbrace{[X'X(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'X]}_{X'X}(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'X = X'X$$

alors $\tilde{\mathbb{V}}(\hat{\beta})$ est une inverse généralisée de $X'X$.

On vérifie aussi aisément que $\tilde{\mathbb{V}}(\hat{\beta})X'X\tilde{\mathbb{V}}(\hat{\beta}) = \tilde{\mathbb{V}}(\hat{\beta})$, donc $X'X$ est une inverse généralisée de la matrice $\frac{1}{\sigma^2}\mathbb{V}(\hat{\beta})$.

Propriété 2.1 *La matrice d'information du modèle additif sous contraintes d'identification, $X'X + \tilde{C}'\tilde{C}$, est une inverse généralisée de $\tilde{V}(\hat{\beta})$.*

Démonstration.

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\hat{\beta})(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})\tilde{V}(\hat{\beta}) &= \\ [(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'X(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}](X'X + \tilde{C}'\tilde{C})[(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'X(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}] &= \\ (X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1} \underbrace{X'X(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}X'X(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}}_{X'X} &= \tilde{V}(\hat{\beta}). \diamond \end{aligned}$$

2.3.5 U-optimalité dans la classe de plans OE

Dans le chapitre 1 on a introduit des critères permettant d'évaluer la performance d'un plan pour l'estimation des paramètres du modèle adopté. Nous nous intéressons en particulier au critère d'optimalité uniforme pour caractériser parmi les plans OE ceux qui sont U-optimaux (c'est l'optimalité la plus forte car un plan U-optimal est aussi A, D et E-optimal).

Proposition 2.5 *Tout plan strictement OE de taille n est U-optimal dans la classe de plans OE de la même taille.*

Démonstration.

Soit ξ un plan quelconque dans la classe de plans OE de taille n . Par l'égalité de symétrie on exprime la matrice de dispersion en fonction des coefficients b_i :

$$\mathbb{V}_{\xi}(\hat{\beta}) = \sigma^2 \text{diag} \left(\frac{1}{n}, A_1, \dots, A_p \right)$$

avec

$$A_i = \left(\frac{q_i}{n - q_i^2 b_i} \right) \left(I_{q_i} - \frac{1}{q_i} J_{q_i} \right)$$

Si ξ^* est un plan strictement OE de taille n les coefficients b_i sont nuls $\forall i = 1, \dots, p$, donc :

$$\mathbb{V}_{\xi^*}(\hat{\beta}) = \sigma^2 \text{diag} \left(\frac{1}{n}, B_1, \dots, B_p \right)$$

avec

$$B_i = \frac{q_i}{n} \left(I_{q_i} - \frac{1}{q_i} J_{q_i} \right)$$

Il faut montrer alors que la matrice $\mathbb{V}_{\xi}(\hat{\beta}) - \mathbb{V}_{\xi^*}(\hat{\beta})$ est semi-définie positive. On calcule donc ses valeurs propres :

$$\mathbb{V}_{\xi}(\hat{\beta}) - \mathbb{V}_{\xi^*}(\hat{\beta}) = \sigma^2 \text{diag}(0, \Delta_1, \dots, \Delta_p)$$

avec

$$\Delta_i = \left(\frac{q_i}{n - q_i^2 b_i} - \frac{q_i}{n} \right) \left(I_{q_i} - \frac{1}{q_i} J_{q_i} \right)$$

D'après le lemme 1.6 on a :

$$|\Delta_i - \lambda I_{q_i}| = \lambda \left(\lambda - \frac{q_i}{n - q_i^2 b_i} + \frac{q_i}{n} \right)$$

Les valeurs propres sont alors :

$$\begin{cases} \lambda_{i_1} &= 0 \\ \lambda_{i_2} &= \frac{q_i}{n - q_i^2 b_i} - \frac{q_i}{n} \end{cases}$$

Or, $\lambda_{i_2} \geq 0$ puisque :

$$\frac{n - q_i^2 b_i}{q_i} = a_i > 0 \implies n - q_i^2 b_i > 0$$

et

$$b_i \geq 0 \implies n - q_i^2 b_i \leq n \implies \frac{1}{n - q_i^2 b_i} \geq \frac{1}{n} \implies \frac{q_i}{n - q_i^2 b_i} - \frac{q_i}{n} \geq 0$$

On a montré ainsi la U-optimalité du plan strictement OE. \diamond

L'optimalité uniforme implique la D-optimalité, cependant il est possible d'avoir un plan D-optimal non U-optimal dans une sous-classe des plans OE ne contenant pas les plans strictement OE.

Pour aborder la D-optimalité d'un plan nous utilisons la matrice $(X'X + \tilde{C}'\tilde{C})^{-1}$ car la matrice $\frac{1}{\sigma^2} \mathbb{V}(\hat{\beta})$ n'est pas régulière.

2.4 Plan strictement orthogonal-équilibré (SOE)

D'après les égalités d'orthogonalité et d'équilibre, un plan orthogonal-équilibré, dont la matrice est $[D_1 | \dots | D_p]$, se caractérise par :

$$D_i' D_i = \left(\frac{n}{q_i} - q_i b_i \right) I_{q_i} + b_i J_{q_i}$$

$$D_i' D_j = \frac{n}{q_i q_j} J_{q_i, q_j}$$

$$D_i' \mathbf{1}_{q_i} = \frac{n}{q_i} \mathbf{1}_{q_i}$$

Lorsque l'orthogonalité est stricte, c'est-à-dire $b_i = 0$, on a que $D_i' D_i = \frac{n}{q_i} I_{q_i}$ et les autres conditions restent invariantes pour tout $i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$.

Pour un système de mélange l'orthogonalité stricte conditionne fortement les proportions de composants, car, si $D_i = \begin{bmatrix} x_{ij}^{(k)} \end{bmatrix}$, on a pour tout $1 \leq j < l \leq q_i$:

$$\sum_{k=1}^n x_{ij}^{(k)} \cdot x_{il}^{(k)} = 0 \iff x_{ij}^{(k)} \cdot x_{il}^{(k)} = 0 \quad \forall k = 1, \dots, n$$

Alors chaque ligne $(x_{i_1}^k, \dots, x_{i_{q_i}}^k)$ de D_i est un sous-mélange avec une seule proportion positive, les lignes de D_i sont donc de corps purs.

Cela implique que les composantes de la matrice d'un plan SOE sont égales à 0 et 1, d'où nécessairement les coefficients d'orthogonalité et d'équilibre sont à valeurs entières, autrement dit $q_i q_j$ divise n pour tout $1 \leq i < j \leq p$. Donc :

Proposition 2.6 *Soit n la taille d'un plan SOE pour un système MoM de type A avec $q_1 + \dots + q_p$ composants secondaires, alors*

$$n \geq \text{PPCM}(q_i q_j / 1 \leq i < j \leq p).$$

Exemple 1. Soit le système MoM de type A avec $p = 2$, $q_1 = 2$ et $q_2 = 3$. Le plan SOE pour cette configuration avec toutes les combinaisons possibles de sous-mélanges sans réplication est donné par :

$$\xi = \{(1, 0), (0, 1)\} \times \{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$$

La matrice de ce plan est

$$D = [D_1 | D_2] = \left[\begin{array}{cc|ccc} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Les coefficients d'orthogonalité sont $a_1 = 3$ et $a_2 = 2$ et celui d'équilibre est $c_{12} = 1$. La taille de ce plan est égale à $n = 6$ et d'après la proposition 2.6 c'est le plan SOE de plus petite pour $q_1 = 2$ et $q_2 = 3$.

Exemple 2. Soit le système MoM de type A avec $p = 3$, $q_1 = q_2 = q_3 = 4$. Le plan \mathcal{D} composé de toutes les combinaisons de sous-mélanges est de taille $n = 64$ et il est donné par :

$$\mathcal{D} = \mathbb{B}_4 \times \mathbb{B}_4 \times \mathbb{B}_4$$

Soit $[D_1 | D_2 | D_3]$ la matrice de ce plan. Dans chaque colonne d_{ij} de D_i la proportion 1 apparait 16 fois car $\text{Card}(e_j \times \mathbb{B}_4 \times \mathbb{B}_4) = 16$, donc les coefficients d'orthogonalité sont $a_1 = a_2 = a_3 = 16$.

Les coefficients d'équilibre de \mathcal{D} sont $c_{12} = c_{13} = c_{23} = 4$ (justifié dans la suite).

Toujours dans la recherche de plans de petite taille, on se demande s'il y a des sous-ensembles du plan \mathcal{D} gardant les mêmes propriétés de celui-ci. On peut assurer tout simplement, d'après la proposition 2.6, qu'il n'existe pas de fraction SOE de taille distincte de 16 et 32.

Après ces deux exemples nous reprenons les réseaux multiples de Scheffé.

2.4.1 Réseaux multiples d'ordre un

Soit $\mathcal{D} = \{q_1, m_1\} \times \cdots \times \{q_p, m_p\}$ le réseau multiple de Scheffé introduit dans le premier chapitre pour l'ajustement du modèle multiplicatif. Il s'agit d'un plan composé du produit cartésien des réseaux individuels de Scheffé associés aux sous-mélanges de composants secondaires. On appelle réseau multiple d'ordre un le réseau où $m_i = 1$ pour tout $i = 1, \dots, p$. Chaque réseau individuel $\{q_i, 1\}$ correspond à la base canonique de \mathbb{R}^{q_i} d'où

$$\mathcal{D} = \mathbb{B}_{q_1} \times \cdots \times \mathbb{B}_{q_p}.$$

La taille du réseau multiple d'ordre un est égale à $n = q_1 \cdots q_p$ et on va montrer que effectivement \mathcal{D} est un plan de type SOE.

Proposition 2.7 *Le réseau multiple de Scheffé d'ordre un, $\{q_1, 1\} \times \cdots \times \{q_p, 1\}$, est un plan SOE de taille $n = q_1 \cdots q_p$.*

Démonstration.

Orthogonalité

Il suffit de vérifier que les colonnes de la sous-matrice contient le même nombre de composantes égales à 1. Cela vient du fait que :

$$\text{Card}(\mathbb{B}_{q_1} \times \cdots \times \mathbb{B}_{q_{k-1}} \times e_{J_k} \times \mathbb{B}_{q_{k+1}} \times \cdots \times \mathbb{B}_{q_p}) = q_1 \cdots q_{k-1} \cdot q_{k+1} \cdots q_p = \frac{n}{q_k}$$

pour tout $e_{J_k} \in \mathbb{B}_{q_k}$.

Équilibre

Soient D_i et D_k deux blocs de la matrice D avec $i \neq k$. On définit le sous-ensemble $W(J_i, J_k)$ du réseau multiple d'ordre un comme le produit cartésien suivant :

$$W(J_i, J_k) = \mathbb{B}_{q_1} \times \cdots \times \mathbb{B}_{q_{(i-1)}} \times e_{J_i} \times \mathbb{B}_{q_{(i+1)}} \times \cdots \times \mathbb{B}_{q_{(k-1)}} \times e_{J_k} \times \mathbb{B}_{q_{(k+1)}} \times \cdots \times \mathbb{B}_{q_p}$$

pour tout $e_{J_i} \in \mathbb{B}_{q_i}$ et $e_{J_k} \in \mathbb{B}_{q_k}$.

On a donc que

$$\text{Card}W(J_i, J_k) = \frac{n}{q_i q_k}$$

pour tout $(J_i, J_k) \in \{1, \dots, q_i\} \times \{1, \dots, q_k\}$.

Soient d_{ij} et d_{kh} deux colonnes quelconques de D_i et D_k respectivement. Alors,

$$d'_{ij} d_{kh} = \sum_{l=1}^n x_{ij}^{(l)} x_{kh}^{(l)}$$

et, pour tout $l = 1, \dots, n$,

$$x_{ij}^{(l)} x_{kh}^{(l)} = \begin{cases} 1 & \text{si } x_{ij}^{(l)} = x_{kh}^{(l)} = 1 \\ 0 & \text{si non} \end{cases}$$

Or, pour les blocs D_i et D_k la condition $x_{ij}^{(l)} = x_{kh}^{(l)} = 1$ est possible si et seulement si la ligne l de la matrice D appartient au sous ensemble $W(J_i, J_k)$, par conséquent

$$\sum_{l=1}^n x_{ij}^{(l)} x_{kh}^{(l)} = \frac{n}{q_i q_k}$$

D'où

$$D'_i D_k = \frac{n}{q_i q_k} J_{q_i, q_k}$$

pour tout $i \neq k$ dans $\{1, \dots, p\}$.

D'après le théorème 2.1 le réseau multiple d'ordre un est bien un plan SOE. \diamond

Notation. Dorénavant on introduit la notation $SOE(q_1, \dots, q_p)$ pour le réseau multiple $\{q_1, m_1\} \times \dots \times \{q_p, m_p\}$, si $q_1 = \dots = q_p = h$ on note $SOE(h^p)$. Pour un sous-ensemble de $SOE(q_1, \dots, q_p)$ de taille $r < q_1 \dots q_p$ on utilise la notation $SOE_r(q_1, \dots, q_p)$.

Construction d'un réseau multiple d'ordre un

La matrice D du réseau $SOE(q_1, \dots, q_p)$ peut être construite de façon structurée à l'aide des produits tensoriels $\mathbb{1}_s \otimes I_r$ et $I_r \otimes \mathbb{1}_s$.

Par exemple, pour I_3 et $\mathbb{1}_2$, on obtient les matrices de taille 6×3 :

$$I_3 \otimes \mathbb{1}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbb{1}_2 \otimes I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La procédure pour obtenir D est récurrente, on construit la suite de matrices

$$A_1, A_2, \dots, A_p$$

dont la dernière correspond à la matrice D .

Tout d'abord on définit $A_1 = I_{q_1}$, puis la deuxième matrice est obtenue par le calcul suivant :

$$A_2 = [\mathbb{1}_{q_2} \otimes A_1 | I_{q_2} \otimes \mathbb{1}_{q_1}]$$

La suite est ainsi définie par l'expression récurrente :

$$A_k = [\mathbb{1}_{q_k} \otimes A_{k-1} | I_{q_k} \otimes \mathbb{1}_{q_1 q_2 \dots q_{k-1}}]$$

$$\forall k = 2, \dots, p$$

D'où on obtient la matrice D du plan $[q_1 \dots q_p]$:

$$D = A_p$$

Le réseau $SOE(q_1, \dots, q_p)$ est un plan contenant tous les mélanges où n'intervient qu'un composant secondaire par sous-mélange, c'est pourquoi ce type de réseau est analogue aux plans utilisés pour les facteurs qualitatifs. Dans le paragraphe suivant nous introduisons ce sujet comme un moyen pour guider la recherche de fractions SOE de petite taille.

Exemple 3. Considérons le réseau $SOE(2, 2, 3)$, on suit la procédure ci-dessus pour construire la matrice du plan :

$$A_1 = I_2$$

$$A_2 = [\mathbf{1}_2 \otimes I_2 | I_2 \otimes \mathbf{1}_2] = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

$$D = A_3 = [\mathbf{1}_3 \otimes A_2 | I_3 \otimes \mathbf{1}_4] = \left[\begin{array}{cc|cc|ccc} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Les constantes d'orthogonalité sont $a_1 = a_2 = 6$ et $a_3 = 4$. Celles d'équilibre sont $c_{12} = 3$ et $c_{13} = c_{23} = 2$.

Pour chaque expérience du plan il n'y a que deux possibilités, chaque CS du sous-mélange est soit absent soit présent. C'est pourquoi les plans SOE et les plans pour facteurs qualitatifs sont identifiables. On peut associer un CP à un facteur et un CS de ce CP à une modalité de ce facteur. Donc la matrice D du plan $SOE(q_1, \dots, q_p)$ peut être identifiée à travers le tableau de codages ξ défini par :

$$\xi = [\mathbb{Z}/q_1\mathbb{Z}] \times \dots \times [\mathbb{Z}/q_p\mathbb{Z}]$$

Si $v_i = (0, 1, \dots, q_i - 1)'$ pour $i = 1, \dots, p$, la matrice de codages est obtenue ainsi :

$$D_C = [D_1 v_1 | \dots | D_p v_p]$$

On revient à l'exemple 3, l'expérience $[0\ 1|1\ 0|1\ 0\ 0]$ est identifiée par le codage $[1\ 0\ 0]$. Le tableau de codage associé à la matrice D est donc :

$$D_C = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Remarque 2.4 *Le réseau multiple de Scheffé d'ordre un est le plan SOE de plus grande taille sans réplication, c'est le plan utilisé pour estimer le modèle multiplicatif (obtenu par la multiplication de polynômes de Scheffé d'ordre un), en fait c'est un plan saturé pour ce modèle. Pour estimer le modèle additif nous cherchons des fractions de petite taille dans le réseau complet en gardant l'orthogonalité et l'équilibre. Sous la représentation codée du plan il est évident que l'on se retrouve face un sujet classique : celui de la construction de fractions orthogonales pour des plans d'expérience factoriels.*

Les plans et modèles pour facteurs qualitatifs sont présentés dans l'ouvrage de Tinson (2010). Les plans d'expérience factoriels, fractions régulières et fractions orthogonales de petite taille, sont traités dans le livre de Collombier (1996) avec une approche plutôt théorique et dans le livre de Benoist (1994) avec une approche plus algorithmique.

2.4.2 Rappel : plans factoriels et fractions orthogonales

L'utilisation de plans factoriels complets n'est pas toujours intéressante à cause de leur grande taille, surtout lorsque le nombre de facteurs est élevé. Cependant il est possible dans certains cas de trouver des sous-ensembles du plan complet gardant les mêmes propriétés.

On s'intéresse en particulier à des sous-ensembles orthogonaux et à des fractions régulières obtenues par des générateurs. On appelle générateurs d'une *fraction régulière* les contraintes imposées sur les expériences d'un plan complet qui engendrent cette fraction. Un concept important lié aux fractions régulières est celui de la résolution puisqu'il est associé à la régularité de la matrice de ce plan.

Pour les fractions de plans factoriels à deux niveaux, -1 et 1 , on utilise la notation classique multiplicative des générateurs.

Par exemple, la notation 123 indique le produit d'Hadamard des colonnes 1, 2 et 3 du plan complet. L'expression $123 = 1234 = \mathbf{1}$, donnant deux générateurs, est la condition sur les lignes du plan qui déterminent la fractions régulière. À partir de ces deux générateurs possibles on déduit :

$$\begin{cases} \mathbf{1} = 123 \\ \mathbf{1} = 1234 \end{cases} \implies \mathbf{1} = (123)(1234) = 4$$

Donc cette fraction régulière est définie aussi par la relation $4 = \mathbf{1}$. On peut obtenir alors l'ensemble de générateurs de cette fraction :

$$\mathcal{G} = \{\mathbf{1}, 123, 1234, 4\}$$

On appelle \mathcal{G} le groupe de définition de la fraction régulière, \mathcal{G} est en fait un groupe fini engendré par le nombre k de générateurs de la fraction et $|\mathcal{G}| = 2^k$ (pour cet exemple $k = 2$).

On appelle *résolution* d'une fraction régulière l'entier R égal à la longueur du plus petit des éléments de \mathcal{G} (pour cet exemple $R = 1$, on le note I en chiffres romains).

Cas général

Pour des facteurs qualitatifs à h modalités on code classiquement ces modalités par les éléments du $\mathbb{Z}/h\mathbb{Z}$ et on montre (voir Tinsson, 2010) que tout générateur se généralise sous la forme d'une contrainte additive telle que (par exemple) :

$$x_1 + x_2 + x_3 \equiv 0 [h]$$

On garde cependant toujours une expression multiplicative pour désigner ce générateur par $123 = \mathbf{1}$. La résolution reste inchangée, elle est égale à la plus petite taille des candidats générateurs de \mathcal{G} ($\mathbf{1}$ exclu).

Par exemple, le générateur $x_1 + 2x_2 + x_3 \equiv 0 [h]$ (sous forme multiplicative $12^23 = \mathbf{1}$) est de résolution égale à III.

Ici on va s'intéresser uniquement à des fractions ayant la résolution nécessaire pour assurer l'orthogonalité. On a le résultat suivant :

Proposition 2.8 *Soit un système MoM de type A avec $q_1 = \dots = q_p = h$, h nombre premier. Toute fraction régulière du réseau $SOE(h^p)$ de résolution égale à III (ou plus) est orthogonale (SOE).*

Démonstration.

Nous trouvons dans le livre de Tinsson (2010) les preuves des résultats pour les facteurs qualitatifs justifiant cette proposition ainsi que la méthode d'obtention de fractions régulières à l'aide de générateurs. \diamond

2.4.3 Exemples de fractions SOE de petites tailles

Lorsque le nombre de composants principaux et secondaires est grand, un plan complet n'est pas viable. Nous présentons des situations particulières où il est toujours possible de réduire la taille de manière significative.

Exemple 1 : *Plans de Plackett et Burman.*

Soit $p = 7$ et $q_i = 2$ pour $i = 1, \dots, p$. La taille du réseau complet $SOE(q_1, \dots, q_7)$, noté $SOE(2^7)$, est égale à 128, alors qu'il n'y a que 8 paramètres indépendants à estimer. Pour un telle situation on peut utiliser le plan réduit de taille 8 dont la matrice est la suivante :

$$D = [D_1 | \dots | D_7] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Cette fraction est SOE car $D_i' D_j = 2I_2, \forall i \neq j$, avec coefficient d'orthogonalité $a_i = 4, \forall i = 1, \dots, 7$. Ce plan est de fait saturé pour le modèle additif car $q - p + 1 = 8$.

La matrice de codage peut être obtenue de la façon suivante :

$$D_C = D[e_2' | e_4' | \dots | e_{14}'] , \quad e_{2k} \in \mathbb{B}_{14}$$

Cette façon d'obtenir D_C est particulière à un plan où $q_i = 2 \forall i = 1, \dots, p$ puisque la matrice de codages est formés des colonnes paire de la matrice D .

La fraction SOE ci-dessus a été construite à l'aide du plan de *Plackett-Burman* pour $p = 7$. Ce type de plan à deux niveaux est orthogonal et saturé pour un modèle d'ordre un avec un nombre p de facteurs tel que $p = 3 \pmod{4}$. Nous trouvons plus de détails sur les modèles et les propriétés de plans de *Plackett-Burman* dans le livre de Tinsson (2010).

On peut alors utiliser ces fractions SOE pour les systèmes MoM de type A ayant $p = 3 \pmod{4}$ composants principaux, chacun d'eux avec deux composants secondaires.

Exemple 2 : *Générateurs des fractions SOE pour $q_1 = \dots = q_p = h$ avec h nombre premier.*

Avec $q_1 = q_2 = q_3 = p = 3$

La taille du réseau $SOE(3^3)$ est égale à 27, il est possible d'après la proposition 2.8 de trouver une générateur conduisant à des fractions de résolution III. Soit D_C la matrice codée du plan. Une façon d'engendrer l'une des fractions est la suivante : on va garder les lignes de D_C satisfaisant la condition $t_1 + t_2 + t_3 \equiv 0 \pmod{3}$ et voici la

fraction codée,

$$D_C = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad D_C^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Pour des fractions dites symétriques avec h nombre premier la théorie assure l'existence de fractions SOE et donne le nombre de fractions qui peuvent être engendrées. Ce nombre est associé au nombre k de générateurs, pour cet exemple $k = 1$, et le nombre de fractions de taille 9 est égal à $h^k = 3$. Les deux autres fractions sont obtenues avec la condition $t_1 + t_2 + t_3 \equiv \lambda \pmod{3}$, pour $\lambda = 1, 2$.

Avec $p = 5$ et $q_i = 3, \forall i = 1, \dots, 5$

La taille du réseau $SOE(3^5)$ est égale à 243, il est possible de construire des fractions SOE de tailles 3^4 et 3^3 . Il n'existe pas de fraction SOE de taille 3^2 car $p(h-1) + 1 = 11 > 9$. Il faut deux générateurs pour construire une fraction de taille 27, par exemple, $t_1 + t_2 + t_3 \equiv 0 \pmod{3}$ et $t_3 + t_4 + t_5 \equiv 0 \pmod{3}$.

2.5 Plan centroïde pour le modèle additif

Nous présentons maintenant un type de plan orthogonal-équilibré appelé plan centroïde. À la différence du plan SOE où l'on place les expériences sur les points

extrêmes des simplexes, ici pour chaque expérience on ne place qu'un sous-mélange pendant que les autres restent sur le centroïde des simplexes. Ce type de plan est de petite taille et sa construction est toujours possible.

En reprenant la notation du paragraphe 2.1.3, où $\mathbf{c}_i = \frac{1}{q_i} \mathbf{1}_{q_i}$ est le centroïde du simplexe S_{q_i} , on va considérer les expériences de la forme :

$$(\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_{k-1}, e_{k_j}, \mathbf{c}_{k+1}, \dots, \mathbf{c}_p) \quad \forall e_{k_j} \in \mathbb{B}_{q_k} \text{ et } k = 1, \dots, p \quad (2.28)$$

Le nombre d'expériences distinctes obtenues de cette façon est égal à q , en fait c'est inférieur au nombre de paramètres du modèle additif et supérieur à $q - p + 1$.

Définition 2.5 On appelle plan centroïde le plan de taille $n = q_1 + \dots + q_p$ dont la matrice est la suivante :

$$D = [D_1 | \dots | D_p] = \left[\begin{array}{c|c|c|c} I_{q_1} & \frac{1}{q_2} J_{q_1, q_2} & \dots & \frac{1}{q_p} J_{q_1, q_p} \\ \frac{1}{q_1} J_{q_2, q_1} & I_{q_2} & \dots & \frac{1}{q_p} J_{q_2, q_p} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{q_1} J_{q_p, q_1} & \dots & & I_{q_p} \end{array} \right]$$

Les lignes de la matrice carrée D correspondent à l'ensemble des points définis en (2.28).

Propriété 2.2 Le plan centroïde est orthogonal-équilibré. De plus, pour les coefficients d'orthogonalité (a_i, b_i) on a $a_i = 1$ pour tout $i = 1, \dots, p$.

Démonstration.

Soit $D = [D_1 | \dots | D_p] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matrice d'un plan centroïde. Alors

$$n = q = q_1 + \dots + q_p$$

et

$$D'_k D_k = I_{q_k} + \frac{1}{q_k^2} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^p J_{q_k, q_i} J_{q_i, q_k} = I_{q_k} + \left(\frac{n - q_k}{q_k^2} \right) J_{q_k}$$

$$\begin{aligned} D'_k D_i &= \frac{1}{q_i} J'_{q_i, q_k} + \frac{1}{q_k} J_{q_k, q_i} + \frac{1}{q_k q_i} \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k, l \neq i}}^p J_{q_k, q_l} J_{q_l, q_i} \\ &= \left(\frac{1}{q_k} + \frac{1}{q_i} \right) J_{q_k, q_i} + \frac{1}{q_k q_i} (n - q_i - q_k) J_{q_k, q_i} \\ &= \frac{n}{q_k q_i} J_{q_k, q_i} \end{aligned}$$

d'où le plan centroïde est orthogonal-équilibré et par conséquent régulier. \diamond

Propriété 2.3 Soit X la matrice du modèle additif pour un plan centroïde et \tilde{C} la matrice des contraintes d'identification classiques, alors :

$$|X'X + \tilde{C}'\tilde{C}| = n \prod_{i=1}^p q_i$$

Démonstration.

D'après le corollaire 2.1 et la propriété précédente. \diamond

Soit ξ un plan centroïde. Il existe une bijection entre ξ et l'ensemble

$$\xi_c = \bigcup_{i=1}^p i \times \{1, \dots, q_i\} \subset \mathbb{R}^2$$

définie par :

$$(c_1, \dots, c_{k-1}, e_{k_j}, c_{k+1}, \dots, c_p) \longleftrightarrow (k, j)$$

L'ensemble ξ_c est de fait une représentation codée du plan ξ qui facilite la notation pour les observations liées à chaque expérience.

Propriété 2.4 Soit Y_{kj} l'observation du mélange codé $(k, j) \in \xi_c$. Les estimateurs des moindres carrés pour le plan centroïde sont donnés par :

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_o &= \frac{1}{n} \sum_{(i,j) \in \xi_c} Y_{ij} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{q_i} Y_{ij} = \bar{Y} \\ \hat{\alpha}_{kl} &= Y_{kl} + \frac{1}{q_k} \sum_{\substack{(i,j) \in \xi_c \\ i \neq k}} Y_{ij} - \frac{n}{q_k} \bar{Y} \end{aligned}$$

Démonstration.

Soit Y le vecteur des observations, $Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_p \end{bmatrix}$, avec $Y_i' = (Y_{i1}, \dots, Y_{iq_i}) \in \mathbb{R}^{q_i}$.

Or,

$$\begin{aligned} D_k' Y &= \left[\frac{1}{q_k} J_{q_k, q_1} \mid \dots \mid I_{q_k} \mid \dots \mid \frac{1}{q_k} J_{q_k, q_p} \right] Y \\ &= \frac{1}{q_k} J_{q_k, q_1} Y_1 + \dots + I_{q_k} Y_k + \dots + \frac{1}{q_k} J_{q_k, q_p} Y_p \\ &= Y_k + \left(\frac{1}{q_k} \sum_{i \neq k}^p \mathbf{1}_{q_i}' Y_i \right) \mathbf{1}_{q_k} \end{aligned}$$

On remplace $D_k' Y$ dans les expressions générales des estimateurs pour un plan orthogonal-équilibré quelconque (proposition 2.3) et comme $a_k = 1$ pour tout $k = 1, \dots, p$ on montre donc la propriété. \diamond

2.6 Modèle croisé

On appelle modèle croisé le modèle d'ordre deux donné par :

$$\eta = \alpha_o + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{q_i} \alpha_{ij} x_{ij} + \sum_{i=1}^p \left[\sum_{1 \leq j < l \leq q_i} \gamma_{ijl} x_{ij} x_{il} \right]$$

Il s'agit d'un polynôme où les termes d'ordre deux correspondent à la synergie entre couples de composants secondaires d'un même composant principal.

Le nombre de paramètres du modèle croisé est égal à :

$$1 + \sum_{i=1}^p q_i + \sum_{i=1}^p C_{q_i}^2 = 1 + \sum_{i=1}^p C_{1+q_i}^2$$

On impose des contraintes uniquement sur les paramètres α_{ij} , celles du modèle additif.

Pour estimer les paramètres du modèle croisé on propose la généralisation du plan centroïde en rajoutant tous les sous-mélanges binaires à chaque bloc D_i de la matrice du plan centroïde.

En fait, la réunion de mélanges purs et binaires correspond au réseau de Scheffé $\{q_k, 2\}$ et sa matrice est de la forme suivante :

$$M_k = \begin{bmatrix} I_{q_k} \\ \frac{1}{2} D_{2,q_k} \end{bmatrix}$$

avec D_{2,q_k} une matrice binaire $\forall k = 1, \dots, p$.

Ainsi, la matrice D du plan est la suivante :

$$D = [D_1 | \dots | D_p] = \begin{bmatrix} M_1 & H_{1,2} & \cdots & H_{1,p} \\ H_{2,1} & M_2 & \cdots & H_{2,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{p,1} & H_{p,2} & \cdots & M_p \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

où $H_{k,i} = \frac{1}{q_i} J_{C_{1+q_k}^2, q_i}$ pour tout $i \neq k$ dans $\{1, \dots, p\}$.

La taille n du plan est égale à la somme de la taille de chaque réseau $\{q_k, 2\}$:

$$n = \sum_{k=1}^p C_{1+q_k}^2$$

La matrice du modèle est donc :

$$X = [\mathbf{1}_n | D | E] = [\mathbf{1}_n | D_1 | \dots | D_p | E_1 | \dots | E_p]$$

où E_k est obtenue par le produit d'Hadamard de couples de colonnes de D_k . On utilise l'ordre lexicographique :

$$E_k = [d_{k1} \odot d_{k2} \cdots d_{k1} \odot d_{kq_k} | d_{k2} \odot d_{k3} \cdots d_{k2} \odot d_{kq_k} | \cdots | d_{k,q_k-1} \odot d_{kq_k}]$$

La sous-matrice E a la forme suivante :

$$E = [E_1 | \cdots | E_p] = \left[\begin{array}{c|c|c|c} Q_1 & H_{1,2}^* & \cdots & H_{1,p}^* \\ H_{2,1}^* & Q_2 & \cdots & H_{2,p}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{p,1}^* & H_{p,2}^* & \cdots & Q_p \end{array} \right]$$

La sous-matrice Q_k , d'après la proposition 1.1, est ainsi :

$$Q_k = \left[\begin{array}{c} 0_{q_k, C_{q_k}^2} \\ \frac{1}{4} I_{C_{q_k}^2} \end{array} \right]$$

pour tout $k = 1, \dots, p$.

Reparamétrisation

Afin de faciliter le calcul de la matrice d'information on reparamétrise ce modèle par rapport aux contraintes.

Soit $\text{Im}N_k$ le noyau de la contrainte $\alpha_{k1} + \cdots + \alpha_{kq_k} = 0$ pour $k = 1, \dots, p$.

On a construit la matrice N_k de façon à ce que ses colonnes forment une base de $\ker[\mathbf{1}'_{q_k}]$:

$$\alpha_k \in \ker[\mathbf{1}'_{q_k}] \Leftrightarrow \alpha_k = \begin{bmatrix} -\alpha_{k2} - \cdots - \alpha_{kq_k} \\ \alpha_{k2} \\ \vdots \\ \alpha_{kq_k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{1}'_{q_k-1} \\ I_{q_k-1} \end{bmatrix} \alpha_k^*$$

pour tout $\alpha_k^* \in \mathbb{R}^{q_k-1}$.

Alors,

$$N_k = \begin{bmatrix} -\mathbf{1}'_{q_k-1} \\ I_{q_k-1} \end{bmatrix}, \quad \forall k = 1, \dots, p.$$

Le modèle croisé reparamétré est donc :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y) &= \mathbf{1}_n \alpha_o + D_1 N_1 \alpha_1^* + \cdots + D_p N_p \alpha_p^* + E_1 \gamma_1 + \cdots + E_p \gamma_p \\ &= \mathbf{1}_n \alpha_o + \tilde{D}_1 \alpha_1^* + \cdots + \tilde{D}_p \alpha_p^* + E_1 \gamma_1 + \cdots + E_p \gamma_p \end{aligned}$$

Matrice d'information

Soit $\tilde{X} = [\mathbf{1}_n | \tilde{D}_1 | \cdots | \tilde{D}_p | E_1 | \cdots | E_p]$, pour obtenir la matrice $\tilde{X}'\tilde{X}$ on effectue les

calculs suivants :

1) $\mathbf{1}'_n \tilde{D}_k$:

$$\begin{aligned} \mathbf{1}'_{C_{q_k}^2} D_{2,q_k} &= (q_k - 1) \mathbf{1}'_{q_k} \\ \mathbf{1}'_{q_k} N_k &= 0 \\ \mathbf{1}'_n D_k &= \mathbf{1}'_{q_k} + (q_k - 1) \mathbf{1}'_{q_k} + c_k \mathbf{1}'_{q_k} = (Cste) \mathbf{1}'_{q_k} \\ \mathbf{1}'_n \tilde{D}_k &= \mathbf{1}'_n D_k N_k = 0'_{q_k-1} \end{aligned}$$

2) $\tilde{D}'_k \tilde{D}_k$:

$$\begin{aligned} N'_k N_k &= I_{q_k-1} + J_{q_k-1} \\ D'_{2,q_k} D_{2,q_k} &= (q_k - 2) I_{q_k} + J_{q_k} \quad (\text{Prop. 1.2}) \\ D'_k D_k &= M'_k M_k + \rho_k J_{q_k} \\ &= \left(\frac{1}{2} + \frac{q_k}{4}\right) I_{q_k} + \rho_k J_{q_k} \\ \tilde{D}'_k \tilde{D}_k &= N'_k D'_k D_k N_k \\ &= \left(\frac{1}{2} + \frac{q_k}{4}\right) [I_{q_k-1} + J_{q_k-1}] \end{aligned}$$

3) $\tilde{D}'_i \tilde{D}_k, i \neq k$:

$$\begin{aligned} D'_i D_k &= M'_i H_{i,k} + H'_{k,i} M_k + a_{ik} J_{q_i, q_k} \\ &= (Cste) J_{q_i, q_k} \\ \tilde{D}'_i \tilde{D}_k &= N'_i D'_i D_k N_k = 0_{q_i-1, q_k-1} \end{aligned}$$

4) $\mathbf{1}'_n E_k = \left(\frac{1}{4} + \frac{n}{q_k^2} - \frac{1}{q_k^2} C_{q_k+1}^2\right) \mathbf{1}'_{C_{q_k}^2}$

5) $\tilde{D}'_k E_k$:

$$N'_k D_{2,q_k} = [-\mathbf{1}_{q_k-1} | I_{q_k-1}] \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{1}'_{q_k-1} & 0_{C_{q_k-1}^2} \\ \hline I_{q_k-1} & D'_{2,q_k-1} \end{array} \right] = [I_{q_k-1} - J_{q_k-1} | D'_{2,q_k-1}]$$

$$D'_k E_k = M'_k Q_k + (Cste) J_{q_k, C_{q_k}^2} = \frac{1}{8} D'_{2,q_k} + (Cste) J_{q_k, C_{q_k}^2}$$

$$\tilde{D}'_k E_k = N'_k D'_k E_k = \frac{1}{8} [I_{q_k-1} - J_{q_k-1} | D'_{2,q_k-1}]$$

6) $\tilde{D}'_k E_i = N'_k D'_k E_i = 0_{q_k-1, C_{q_i}^2}$

7) $E'_k E_k$:

$$\begin{aligned} Q'_k Q_k &= \frac{1}{16} I_{C_{q_k}^2} \\ E'_k E_k &= \frac{1}{16} I_{C_{q_k}^2} + \frac{1}{q_k^4} (n - C_{q_k}^2) J_{C_{q_k}^2} \end{aligned}$$

8) $E'_k E_i = \left[\frac{1}{4q_k^2} + \frac{1}{4q_i^2} + \frac{1}{q_i^2 q_k^2} (n - C_{q_k}^2 - C_{q_i}^2) \right] J_{C_{q_k}^2, C_{q_i}^2}$

La matrice d'information a la forme suivante :

$$\tilde{X}'\tilde{X} = \left[\begin{array}{c|ccc|ccc} n & 0 & \cdots & 0 & \mathbf{1}'_n E_1 & \cdots & \mathbf{1}'_n E_p \\ \hline 0 & a_1[I_{q_1-1} + J_{q_1-1}] & \cdots & 0 & \tilde{D}'_1 E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_p[I_{q_p-1} + J_{q_p-1}] & 0 & \cdots & \tilde{D}'_p E_p \\ \hline E'_1 \mathbf{1}_n & & & & & & \\ \vdots & & & & & & \\ E'_p \mathbf{1}_n & & & & & & \end{array} \right]$$

On peut montrer que $|\tilde{X}'\tilde{X}| \neq 0$ par le complément de Schur de la matrice

$$\text{diag} (n, a_1[I_{q_1-1} + J_{q_1-1}], \cdots, a_p[I_{q_p-1} + J_{q_p-1}])$$

où $a_k = \frac{1}{2} + \frac{q_k}{4}$ pour tout $i = 1, \cdots, p$.

On a ainsi le résultat suivant :

Proposition 2.9 *Sous les mêmes contraintes paramétriques classiques du modèle additif, le modèle croisé est identifiable pour le plan donné dans la matrice (2.29).*

Chapitre 3

Modèle et plan pour système MoM de type B

On considère maintenant le cas où les proportions des composants principaux ne sont plus fixées. Ce système de mélange à deux niveaux, appelé système MoM de type B, a été considéré pour la première fois par Cornell & Ramsey (1998). Les auteurs analysent un cas de la micro-électronique à l'aide d'un modèle multiplicatif.

Toujours en se plaçant dans des situations avec de nombreux composants, nous avons choisi la modélisation à l'aide de surfaces de réponse polynomiales d'ordre un. Il s'agit d'une généralisation du modèle additif proposé pour le système MoM de type A. De même les contraintes des mélanges entraînent une dépendance entre les paramètres du modèle qui est résolue par imposition de restrictions paramétriques liées au centroïde du mélange principal ainsi qu'au centroïde de chaque sous-mélange.

La construction de plans pour le système de type B est basée sur la structure de plans de type OE définie dans le chapitre 2 pour le système de type A. De manière particulière les plans de type axial sont bien adaptés à des situations où les proportions des composants ne peuvent être nulles, c'est le cas des proportions des composants principaux. Nous proposons pour le système de type A un réseau de points axiaux similaire aux plans SOE qui sont utilisés pour la détermination de plans sur le domaine du système de type B.

3.1 Domaine expérimental

Considérons un système MoM de type B pour p composants principaux et q composants secondaires, avec

$$q = q_1 + q_2 + \dots + q_p$$

où q_i est le nombre de composants secondaires associés au i -ème composant principal, pour tout $i = 1, \dots, p$ et $j = 1, \dots, q_i$.

Soit \mathcal{S}_{CP} le domaine des mélanges pour les composants principaux, \mathcal{S}_{CP} est donc

défini par les contraintes suivantes :

$$w_1 + \cdots + w_p = 1$$

$$0 < w_i < 1$$

$\forall i = 1, \dots, p$ où w_i est la proportion du i -ème CP.

\mathcal{S}_{CP} correspond à la *p-face* du simplexe S_p , c'est en fait l'espace de tous les mélanges de proportions non nulles. Nous rappelons que dans ce travail il ne sera considéré que ce type de mélanges pour les composants principaux.

Contrairement au système MoM de type A nous n'utilisons pas ici les proportions relatives des CS car les w_i ne sont plus fixés. Si x_{ij} et u_{ij} sont les proportions relatives et réelles respectivement du j -ème CS dans le i -ème CP, alors le lien de proportionnalité est donné par :

$$u_{ij} = x_{ij}w_i$$

Soit \mathcal{S}_{CS} le domaine pour les sous-mélanges de composants secondaires pour chaque $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_p) \in \mathcal{S}_{CP}$, alors \mathcal{S}_{CS} est l'ensemble défini par les contraintes suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{11} + u_{12} + \cdots + u_{1q_1} = w_1 \\ \vdots \\ u_{p1} + u_{p2} + \cdots + u_{1q_p} = w_p \\ \\ 0 \leq u_{ij} \leq w_i \\ \forall i = 1, \dots, p \text{ et } j = 1, \dots, q_i \end{array} \right.$$

Notation

Le domaine expérimental du système MoM de type B est noté $\mathcal{S} = \mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{S}_{CS}(\mathbf{w})$. Tout mélange $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ est représenté par :

$$\mathbf{x} = (\mathbf{w}, \mathbf{u}) = (\mathbf{w}, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p) = (w_1, \dots, w_p, u_{11}, \dots, u_{1q_1}, \dots, u_{p1}, \dots, u_{pq_p})$$

avec $\mathbf{u} \in \mathcal{S}_{CS}(\mathbf{w})$ et \mathbf{u}_i le vecteur des proportions du sous-mélange des CS liés au i -ème CP, pour tout $i = 1, \dots, p$.

Rang de la matrice du plan

Soit $D = [D_{CP}|D_{CS}] = [D_{CP}|D_1|\cdots|D_p]$ la matrice d'un plan quelconque pour le système MoM de type B, avec $D_{CP} = [d_1|\cdots|d_p]$ où d_i est la i -ème colonne de la sous-matrice D_{CP} . Chaque ligne de D est donc un mélange de \mathcal{S} de la forme $(\mathbf{w}, \mathbf{u}) = (\mathbf{w}, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p)$. Évidemment la matrice D n'est pas de plein rang car $\mathbf{w}\mathbf{1}_p = \mathbf{u}\mathbf{1}_q = 1$ et cela implique que :

$$\text{Im}\mathbf{1}_n \subset \text{Im}D_{CP} \cap \text{Im}D_{CS}$$

où n est la taille du plan.

De plus, la contrainte $\mathbf{u}_i \mathbf{1}_{q_i} = w_i$ conduit à $\text{Im}D_i \subset \text{Im}D_{CS}$ et par conséquent :

$$\text{Im}D_{CP} \subset \text{Im}D_{CS}$$

On en déduit donc que :

$$\text{rg}D = \text{rg}[D_{CP}|D_{CS}] = \text{rg}D_{CS}$$

Ainsi le rang de D est maximal si et seulement si le rang de D_{CS} l'est aussi. Or, quel est le rang maximal de D_{CS} ? Le fait d'avoir des CP à proportions non-fixées permet de construire une matrice D_{CS} de rang plein pour $n \geq q$ (à la différence du système MoM de type A où forcément $\text{Im}D_i \cap \text{Im}D_j \neq \{0\}$ pour toute configuration de $\text{Im}D_{CS}$). Or, pour que D_{CS} soit de rang plein il faut et il suffit que $\text{rg}D_i = q_i$ et que $\text{Im}D_i \cap \text{Im}D_j = \{0\}$. On a donc la propriété suivante :

Propriété 3.1 *Soit $D = [D_{CP}|D_{CS}] = [D_{CP}|D_1|\dots|D_p]$ la matrice d'un plan pour le système MoM de type B, avec $D_{CS} \in \mathbb{R}^{n \times q}$ pour $n \geq q$. Alors $\text{rg}D \leq q$ et de plus :*

$$\text{rg}D = q \iff \text{rg}D_{CS} = q \iff \text{rg}D_i = q_i \text{ et } \text{Im}D_i \cap \text{Im}D_j = \{0\}$$

pour tout $i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$.

Définition 3.1 *On dit qu'un plan dans le domaine expérimental $\mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{S}_{CS}(\mathbf{w})$ est régulier si la matrice D_{CS} associée au plan est de plein rang.*

3.2 Modélisation

Pour le système MoM de type B nous proposons deux modèles. Le premier, appelé additif général, est en fait le cas général du modèle additif étudié pour les système MoM de type A. Le deuxième modèle, appelé CP-additif, est un modèle d'ordre deux obtenu à partir du polynôme de Scheffé d'ordre un pour les CP, ce modèle a la particularité d'être surparamétré pour deux CP.

3.2.1 Modèle additif général (AG)

La loi de réponse la plus simple que nous considérons pour estimer les effets individuels des CP et CS est le polynôme usuel d'ordre un en $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$:

$$\begin{aligned} \eta(\mathbf{x}) &= \alpha_o + \alpha_1 w_1 + \dots + \alpha_p w_p + \sum_{j=1}^{q_1} \alpha_{1j} u_{1j} + \dots + \sum_{j=1}^{q_p} \alpha_{pj} u_{pj} \\ &= \alpha_o + \mathbf{w} \boldsymbol{\alpha}_{CP} + \mathbf{u}_1 \boldsymbol{\alpha}_1 + \dots + \mathbf{u}_p \boldsymbol{\alpha}_p \end{aligned}$$

Ce modèle est appelé modèle additif général pour le système MoM de type B. Sa forme matricielle pour un plan de matrice $D = [D_{CP}|D_1|\cdots|D_p]$ est la suivante :

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbf{1}\alpha_o + D_{CP}\alpha_{CP} + D_1\alpha_1 + \cdots + D_p\alpha_p$$

D'après la propriété 3.1 le modèle est surparamétré. Le rang de la matrice du modèle, $X = [\mathbf{1}_n|D]$, est toujours égal au rang de la matrice $[D_1|\cdots|D_p]$. Un plan est régulier si et seulement si $\text{rg}D_i = q_i$ et $\text{Im}D_i \cap \text{Im}D_j = \{0\}$, $\forall i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$, auquel cas $\text{rg}X = q$.

Pour estimer de façon unique les paramètres du modèle il faut imposer $p+1$ contraintes d'identification dès lors que le plan est régulier. On généralise les contraintes d'identification classiques introduites pour le modèle additif du chapitre 2.

Proposition 3.1 *Pour tout plan régulier le modèle AG est identifiable sous les contraintes paramétriques*

$$\begin{cases} \mathbf{1}'_p \alpha_{CP} = 0 \\ \mathbf{1}'_{q_i} \alpha_i = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

pour tout $i = 1, \dots, p$.

Démonstration.

Soit $X = [\mathbf{1}_n|d_1|\cdots|d_p|D_1|\cdots|D_p]$ la matrice du modèle. Comme le plan est régulier la dimension de $\ker X$ est égale à $p+1$, on construit une base du $\ker X$ de la façon suivante :

$$(\lambda_o, \lambda_1, \dots, \lambda_p, v_1, \dots, v_p) \in \ker X \Leftrightarrow \mathbf{1}_n\lambda_o + d_1\lambda_1 + \cdots + d_p\lambda_p + D_1v_1 + \cdots + D_pv_p = 0$$

On obtient $p+1$ solutions :

$$\begin{cases} \lambda_o = -1 \\ \lambda_i = 1 \text{ et } v_i = 0, \quad i = 1, \dots, p \end{cases}$$

Pour $k = 1, \dots, p$:

$$\begin{cases} \lambda_k = -1 \\ v_k = \mathbf{1}_{q_k} \\ v_i = 0 \text{ et } \lambda_i = 0, \quad \forall i \neq k \end{cases}$$

Soit $A \in \mathbb{R}^{(q+p+1) \times (p+1)}$ la matrice dont les colonnes sont les $p+1$ solutions ci-dessus :

$$A = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}$$

avec

$$A_1 = \begin{bmatrix} -1 & 0'_p \\ \mathbf{1}_p & -I_p \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad A_2 = [0_q | \text{diag}(\mathbf{1}_{q_1}, \dots, \mathbf{1}_{q_p})]$$

Évidemment $\text{rg}A_1 = p+1$, puisque $|A_1| = (-1)^{p+1} \neq 0$, A est donc de plein rang et par conséquent ses colonnes forment une base du $\ker X$.

Soit C la matrice des contraintes paramétriques, $C = [0_p | \text{diag}(\mathbf{1}'_p, \mathbf{1}'_{q_1}, \dots, \mathbf{1}'_{q_p})]$. Si $z \in \ker X$ alors $z = At$, pour $t \in \mathbb{R}^{p+1}$. Pour montrer que $\ker X \cap \ker C = \{0\}$ il faut vérifier que si $Cz = 0$ nécessairement $z = 0$.

Or, le système $Cz = CA t = 0$ n'a que la solution triviale, $t = 0$, car la matrice

$$CA = \left[\begin{array}{c|c} p & -\mathbf{1}'_p \\ \hline 0_p & \text{diag}(q_1, \dots, q_p) \end{array} \right]$$

est régulière.

On a ainsi montré que $\ker X \cap \ker C = \{0\}$, d'où le modèle est identifiable d'après la proposition 1.3. \diamond

3.2.2 Modèle CP-additif

Considérons un polynôme de Scheffé d'ordre un pour modéliser la réponse en termes des composants principaux :

$$\eta_{CP} = \beta_1 w_1 + \dots + \beta_p w_p$$

On suppose que l'effet de chaque CP est dépendant de sa composition en termes des composants secondaires. On pourrait alors représenter cette dépendance avec le modèle suivant :

$$\eta(\mathbf{w}, \mathbf{u}) = \beta_1(\mathbf{u}_1) w_1 + \dots + \beta_p(\mathbf{u}_p) w_p$$

Pour la modélisation de la réponse nous considérons le cas le plus simple où $\beta_i(\mathbf{u}_i)$ est un polynôme classique d'ordre un pour tout $i = 1, \dots, p$:

$$\beta_i(\mathbf{u}_i) = \alpha_i + \alpha_{i1} u_{i1} + \dots + \alpha_{iq_i} u_{iq_i}$$

Nous n'avons pas considéré pour la fonction $\beta_i(\mathbf{u}_i)$ un polynôme de Scheffé car dans l'équation de sous-mélange $u_{i1} + \dots + u_{iq_i} = w_i$ la proportion w_i est variable donc il n'est pas raisonnable de reparamétriser le polynôme classique.

Après avoir remplacé les $\beta_i(\mathbf{u}_i)$ on obtient le **modèle CP-additif** :

$$\eta(\mathbf{w}, \mathbf{u}) = \alpha_1 w_1 + \dots + \alpha_p w_p + \sum_{j=1}^{q_1} \alpha_{1j} w_1 u_{1j} + \dots + \sum_{j=1}^{q_p} \alpha_{pj} w_p u_{pj}$$

Soit $[D_{CP} | D_1 | \dots | D_p]$ la matrice d'un plan pour le système de type B, soient d_1, \dots, d_p les colonnes de D_{CP} et d_{i1}, \dots, d_{iq_i} les colonnes de D_i . Voici le modèle CP-additif sous forme matricielle :

$$\mathbb{E}(Y) = D_{CP} \theta_o + A_1 \theta_1 + \dots + A_p \theta_p$$

avec

$$A_i = [d_i \odot d_{i1} | d_i \odot d_{i2} | \dots | d_i \odot d_{iq_i}]$$

et $\theta_o = (\alpha_1, \dots, \alpha_p)$ et $\theta_i = (\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{iq_i})$ pour $i = 1, \dots, p$.

Remarque 3.1 Pour l'identification du modèle CP-additif il est nécessaire que $\text{rg}D_{CP} = p$, mais cette condition n'est pas suffisante.

Proposition 3.2 Le modèle CP-additif n'est pas identifiable pour deux composants principaux.

Démonstration.

Soit $[D_{CP}|A_1|\cdots|A_p]$ la matrice du modèle. D'après la remarque 3.1 on suppose que $\text{rg}D_{CP} = p$, sinon le modèle n'est pas identifiable pour tout $p \geq 2$.

On multiplie l'équation $u_{i1} + \cdots + u_{iq_i} = w_i$ par $w_i > 0$ et on obtient :

$$w_i^2 = w_i \sum_{j=1}^{q_i} u_{ij}, \quad \forall i = 1, \dots, p$$

ou matriciellement :

$$A_i \mathbf{1}_{q_i} = d_i \odot d_i$$

On sait que $w_1 + \cdots + w_p = 1$ donc

$$\begin{aligned} w_1 - w_2 &= (w_1 - w_2)(w_1 + w_2 + \cdots + w_p) \\ &= (w_1 - w_2)(w_1 + w_2) + (w_1 - w_2)(w_3 + \cdots + w_p) \\ &= w_1^2 - w_2^2 + (w_1 - w_2)(w_3 + \cdots + w_p) \end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$d_1 - d_2 = d_1 \odot d_1 - d_2 \odot d_2 + (d_1 - d_2) \odot (d_3 + \cdots + d_p)$$

Or,

$$d_1 - d_2 = d_1 \odot d_1 - d_2 \odot d_2 \iff (d_1 - d_2) \odot (d_3 + \cdots + d_p) = 0$$

mais, d'une part $d_1 \neq d_2$ car $\text{rg}D_{CP} = p$ et, d'autre part $d_3 + \cdots + d_p \neq 0$ puisque $w_i > 0 \forall i = 1, \dots, p$. D'où

$$d_1 - d_2 = d_1 \odot d_1 - d_2 \odot d_2 \iff p = 2$$

auquel cas

$$d_1 - d_2 - A_1 \mathbf{1}_{q_1} + A_2 \mathbf{1}_{q_2} = 0,$$

donc

$$[1, -1, -\mathbf{1}'_{q_1}, \mathbf{1}'_{q_2}] \in \ker[D_{CP}|A_1|A_2]$$

On montre ainsi que le modèle CP-additif est surparamétré pour 2 composants principaux. \diamond

Dans la suite de ce chapitre nous n'utiliserons que le modèle AG.

3.3 Plan OE pour le système MoM de type B (OE_B)

Définition 3.2 Soit $D = [D_{cp} \mid D_1 \mid \cdots \mid D_p]$ la matrice d'un plan pour le système MoM de type B. On dit que le plan est OE de type B si les blocs de la matrice D satisfont les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \forall i \neq j \text{ dans } \{1, \dots, p\} \\ D'_{cp} D_{cp} &= a_o I_p + b_o J_p \\ D'_{cp} D_i &= c_{oi} J_{p, q_i} \\ D'_i D_i &= a_i I_{q_i} + b_i J_{q_i} \\ D'_i D_j &= c_{ij} J_{q_i, q_j} \end{aligned}$$

avec $a_i > 0 \forall i = 0, 1, \dots, p$ et $b_o > 0$ (car $w_i > 0$).

On dit que les couples (a_i, b_i) sont les coefficients d'orthogonalité et les c_{ik} les coefficients d'équilibre pour tout $k \neq i$ dans $\{0, 1, \dots, p\}$

Notation : Désormais on utilisera les symboles OE_A et OE_B pour se référer aux plans OE dans les systèmes MoM de type A et de type B respectivement.

Définition 3.3 Lorsque $b_i = 0$ pour tout $i = 1, \dots, p$ on dit que le plan est strictement OE_B et on note SOE_B.

Proposition 3.3 Soit $D = [D_{cp} \mid D_1 \mid \cdots \mid D_p]$ la matrice d'un plan OE_B. Alors :

- i) $D'_{cp} \mathbf{1}_n = (a_o + b_o p) \mathbf{1}_p$
- ii) $D'_i \mathbf{1}_n = p(a_i + b_i q_i) \mathbf{1}_{q_i}$

Démonstration.

Soit $D_{cp} = [d_1 \mid \cdots \mid d_p]$

i)

$$\begin{aligned} D'_{cp} D_{cp} &= a_o I_p + b_o J_p \\ D'_{cp} D_{cp} \mathbf{1}_p &= D'_{cp} (D_{cp} \mathbf{1}_p) = D'_{cp} \mathbf{1}_n \\ D'_{cp} D_{cp} \mathbf{1}_p &= (a_o I_p + b_o J_p) \mathbf{1}_p = a_o \mathbf{1}_p + b_o p \mathbf{1}_p = (a_o + p b_o) \mathbf{1}_p \end{aligned}$$

d'où $D'_{cp} \mathbf{1}_n = (a_o + b_o p) \mathbf{1}_p$.

ii) D'une part,

$$\left. \begin{aligned} D'_i D_i \mathbf{1}_{q_i} &= D'_i d_i = c_{oi} \mathbf{1}_{q_i} \\ D'_i D_i \mathbf{1}_{q_i} &= (a_i I_{q_i} + b_i J_{q_i}) \mathbf{1}_{q_i} = (a_i + b_i q_i) \mathbf{1}_{q_i} \end{aligned} \right\} \implies c_{oi} = a_i + b_i q_i$$

D'autre part,

$$\left. \begin{aligned} D'_i (D_{cp} \mathbf{1}_p) &= D'_i \mathbf{1}_n \\ (D'_i D_{cp}) \mathbf{1}_p &= (c_{oi} J_{q_i, p}) \mathbf{1}_p = c_{oi} p \mathbf{1}_{q_i} \end{aligned} \right\} \implies D'_i \mathbf{1}_n = c_{oi} p \mathbf{1}_{q_i}$$

d'où $D'_i \mathbf{1}_n = p(a_i + b_i q_i) \mathbf{1}_{q_i} \diamond$

Proposition 3.4 *Les coefficients d'un plan OE_B sont liés par :*

- 1) $a_o + b_o p = \frac{n}{p}$
- 2) $q_i c_{oi} = q_i(a_i + b_i q_i) = a_o + b_o$
- 3) $c_{ij} = \frac{b_o}{q_i q_j}$

pour tout $i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$.

Démonstration.

1) $n = \mathbb{1}'_n \mathbb{1}_n = (\mathbb{1}'_p D'_{cp})(D_{cp} \mathbb{1}_p) = \mathbb{1}'_p (D'_{cp} D_{cp}) \mathbb{1}_p = \mathbb{1}'_p (a_o I_p + b_o J_p) \mathbb{1}_p = p(a_o + b_o p)$
d'où le résultat.

2) On vérifie que $c_{oi} = a_i + b_i q_i$:

$$\begin{aligned} \mathbb{1}'_n (D_i \mathbb{1}_{q_i}) &= \mathbb{1}_n d_i = (\mathbb{1}'_p D'_{cp})(D_i \mathbb{1}_{q_i}) = \mathbb{1}'_p (c_{oi} J_{p, q_i}) \mathbb{1}_{q_i} = \mathbb{1}'_p (c_{oi} q_i) \mathbb{1}_p = p q_i c_{oi} \\ (\mathbb{1}'_n D_i) \mathbb{1}_{q_i} &= p(a_i + b_i q_i) q_i \quad (\text{Prop. 3.3}) \end{aligned}$$

d'où $q_i c_{oi} = (a_i + b_i q_i) q_i$.

On vérifie que $q_i c_{oi} = a_o + b_o$:

$$\begin{aligned} (d'_i D_i) \mathbb{1}_{q_i} &= (c_{oi} \mathbb{1}'_{q_i}) \mathbb{1}_{q_i} = c_{oi} q_i \\ d'_i (D_i \mathbb{1}_{q_i}) &= d'_i d_i = a_o + b_o \quad (\text{Car } D'_{cp} D_{cp} = a_o I_p + b_o J_p) \end{aligned}$$

d'où $q_i c_{oi} = a_o + b_o$.

3) $\forall i \neq j$:

$$\begin{aligned} \mathbb{1}'_{q_i} (D'_i D_i) \mathbb{1}_{q_j} &= \mathbb{1}'_{q_i} (c_{ij} J_{q_i, q_j}) \mathbb{1}_{q_j} = \mathbb{1}'_{q_i} (c_{ij} q_j) \mathbb{1}_{q_i} = c_{ij} q_j q_i \\ (\mathbb{1}'_{q_i} D'_i) (D_i \mathbb{1}_{q_j}) &= d'_i d_j = b_o \end{aligned}$$

d'où $c_{ij} = \frac{b_o}{q_i q_j}$. \diamond

À l'aide des égalités ci-dessus on montre que le plan OE_B est bien régulier.

Proposition 3.5 *Tout plan OE_B est régulier.*

Démonstration.

Soit $[D_{cp}|D_{cs}] = [D_{cp}|D_1|\dots|D_p]$ la matrice d'un plan OE_B . Le plan est régulier si et seulement si la matrice D_{cs} est de plein rang. Alors il faut montrer que $\text{rg} D_{cs} = q$ ou, de manière équivalente, vérifier que $\text{rg}[D_i|D_j] = q_i + q_j, \forall i \neq j$.

Soit $A = [D_i|D_j]$, on va montrer que $|A'A| \neq 0$:

$$A'A = \begin{bmatrix} A_1 & B \\ B' & A_2 \end{bmatrix}$$

où $B = c_{ij} J_{q_i, q_j}$ et $A_k = a_k I_{q_k} + b_k J_{q_k}$ pour $k = 1, 2$.

On applique les mêmes opérations de lignes que celles de la démonstration du théorème 2.1 pour réduire la matrice $A'A$ à la matrice symétrique suivante :

$$E = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_2 \end{bmatrix}$$

$$\text{où } \tilde{A}_2 = a_j I_{q_i} + b_j^* J_{q_i} = a_j I_{q_i} + \left(b_j - \frac{q_i^2 c_{ij}^2}{a_o + b_o} \right) J_{q_j}$$

La valeur de b_j^* est obtenue à travers l'égalité $a_j + q_j b_j = \frac{a_o + b_o}{q_i}$ dans la proposition 3.4.

Or, $|A_1| = a_i^{q_i-1} (b_i + q_i a_i) = a_i^{q_i-1} \left(\frac{a_o + b_o}{q_i} \right) > 0$ car les coefficients a_i , a_o et b_o sont positifs par définition de plan OE_B .

On procède par l'absurde :

$$\begin{aligned} |A'A| = 0 &\iff |E| = |A_1| |\tilde{A}_2| = 0 \iff |\tilde{A}_2| = 0 \\ |\tilde{A}_2| = a_j^{q_i-1} \left(a_j + q_j b_j - \frac{q_j q_i^2 c_{ij}^2}{a_o + b_o} \right) = 0 &\iff \frac{a_o + b_o}{q_j} = \frac{q_j q_i^2 c_{ij}^2}{a_o + b_o} \\ \iff (q_i c_{ij})^2 = \left(\frac{a_o + b_o}{q_j} \right)^2 &\iff \underbrace{q_i c_{ij} = \frac{a_o + b_o}{q_j}}_{c_{ij} = \frac{b_o}{q_i q_j}} \iff b_o = a_o + b_o \end{aligned}$$

d'où $a_o = 0$, ce qui n'est pas possible pour un plan OE_B . Ainsi $|A'A| \neq 0 \forall i \neq j$ et $\text{rg} D_{cs} = q$ pour tout plan OE_B . \diamond

3.4 Estimation des paramètres du modèle AG pour un plan OE_B

Soit $X = [\mathbf{1}_n | D_{cp} | D_1 | \dots | D_p]$ la matrice du modèle AG pour un plan OE_B . Tenant compte des contraintes d'identification (3.1) on effectue la reparamétrisation de ce modèle.

On utilise la même procédure que celle du paragraphe 2.6. Soient N_{cp} , N_1, \dots, N_p les matrices des noyaux, c'est-à-dire :

$$\text{Im} N_{cp} = \ker[\mathbf{1}'_p] , \quad N_{cp} \in \mathbb{R}^{p \times (p-1)}$$

et

$$\text{Im} N_i = \ker[\mathbf{1}'_{q_i}] , \quad N_i \in \mathbb{R}^{q_i \times (q_i-1)}$$

pour tout $i = 1, \dots, p$.

La matrice du modèle reparamétré est donc :

$$\tilde{X} = [\mathbf{1}_n | D_{cp} N_{cp} | D_1 N_1 | \dots | D_p N_p]$$

Avec

$$N_{cp} = \begin{bmatrix} I_{p-1}' \\ -\mathbf{1}_{p-1}' \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad N_i = \begin{bmatrix} I_{q_i-1}' \\ -\mathbf{1}_{q_i-1}' \end{bmatrix}, \quad \forall i = 1, \dots, p$$

Toute matrice de noyaux N ainsi définie vérifie toujours :

$$\mathbf{1}_r' N = 0 \quad \text{et} \quad N' N = I_r + J_r$$

On obtient les éléments de la matrice $\tilde{X}' \tilde{X}$ d'après les propriétés des plans OE_B :

$$\begin{aligned} \mathbf{1}_n' D_{cp} N_{cp} &= (a_o + b_o p) \mathbf{1}_p' N_{cp} = 0 \\ N_{cp}' D_{cp}' D_{cp} N_{cp} &= N_{cp}' (a_o I_p + b_o J_p) N_{cp} = a_o N_{cp}' N_{cp} \\ &= a_o (I_{p-1} + J_{p-1}) \\ N_{cp}' D_{cp}' D_i N_i &= 0 \\ N_i' D_i' D_i N_i &= a_i (I_{q_i-1} + J_{q_i-1}) \\ N_i' D_i' D_j N_j &= 0 \\ \mathbf{1}_n' D_i N_i &= 0 \end{aligned}$$

On en déduit que la matrice $\tilde{X}' \tilde{X}$ est diagonale par bloc :

$$\tilde{X}' \tilde{X} = \text{diag} [n, a_o (I_{p-1} + J_{p-1}), a_1 (I_{q_1-1} + J_{q_1-1}), \dots, a_p (I_{q_p-1} + J_{q_p-1})]$$

La matrice inverse est obtenue d'après la proposition 1.6 :

$$(\tilde{X}' \tilde{X})^{-1} = \text{diag} \left[\frac{1}{n}, \frac{1}{a_o} \left(I_{p-1} - \frac{1}{p} J_{p-1} \right), \dots, \frac{1}{a_p} \left(I_{q_p-1} - \frac{1}{q_p} J_{q_p-1} \right) \right]$$

D'où l'on déduit le résultat suivant (après avoir noté $\tilde{D}_i = D_i N_i$, $\tilde{D}_o = D_{cp} N_{cp}$ et $q_o = p$) :

Proposition 3.6 *Soit $\mathbb{E}(Y) = \mathbf{1}_n \alpha_o + \tilde{D}_o \theta_o + \tilde{D}_1 \theta_1 + \dots + \tilde{D}_p \theta_p$ le modèle AG reparamétré pour un plan OE_B . Alors les estimateurs des moindres carrés sont donnés par :*

$$\hat{\alpha}_o = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n' Y = \bar{Y}$$

$$\hat{\theta}_i = \frac{1}{a_i} \tilde{D}_i' Y - \frac{1}{a_i q_i} J_{q_i-1} \tilde{D}_i' Y$$

$$\forall i = 0, 1, \dots, p$$

Lemme 3.1 *Soit \tilde{X} la matrice du modèle AG reparamétré pour un plan OE_B de taille n . Alors*

$$|\tilde{X}' \tilde{X}| = n p a_o^{p-1} \prod_{i=1}^p q_i a_i^{q_i-1}.$$

Proposition 3.7 Soit $\Theta_{(a_o, b_o)}$ la classe des plans OE_B de taille n avec (a_o, b_o) fixé. Alors, dans la classe $\Theta_{(a_o, b_o)}$ tout plan SOE_B est D -optimal.

Démonstration.

Pour $a_o, n, p, q_1, \dots, q_p$ fixés, considérons la fonction

$$f(a_1, \dots, a_p) = |\tilde{X}' \tilde{X}|$$

présentée dans le lemme ci-dessus. Cette fonction atteint un maximum global si et seulement si a_i atteint une valeur maximale dans son domaine de définition $\forall i = 1, \dots, p$.

D'après la proposition 3.4 le domaine de a_i est déterminé par :

$$a_i = \frac{a_o + b_o}{q_i} - b_i q_i$$

Or, $b_i \geq 0$ puisque les coordonnées du bloc D_i sont toutes non-négatives. Alors a_i atteint sa valeur maximale si et seulement si $b_i = 0 \forall i = 1, \dots, p$.

Donc $|\tilde{X}' \tilde{X}|$ est maximal si et seulement si le plan de X est un plan SOE_B . \diamond

3.5 Plan partiellement OE_B (POE_B)

Nous avons montré que les 4 conditions d'un plan OE_B garantissent la structure diagonale par bloc de la matrice d'information du modèle AG reparamétré. Nous allons voir qu'en affaiblissant une des conditions des plans OE_B il est possible encore de garder la même structure diagonale.

On introduit alors la définition suivante :

Définition 3.4 On dit qu'un plan est partiellement OE_B , on note POE_B , si la matrice d'information associée au plan pour le modèle AG reparamétré a la structure diagonale par bloc d'un plan OE_B .

Afin de construire de manière explicite des plans POE_B on introduit d'abord une classe de plans OE pour le système MoM de type A, noté axial- OE_A .

Les plans de type axial pour les mélanges classiques ont été présentés au paragraphe 1.4.3 du chapitre 1, nous les adaptons ici aux systèmes de mélange à deux niveaux de type A et B. Nous remarquons que les points axiaux dans $\mathcal{S}_{CP} \subset S_p$ sont particulièrement convenables pour la configurations d'expériences où les proportions des composants principaux doivent être toutes non-nulles.

3.5.1 Plan axial- OE_A

Définition 3.5 Soit $A_{\lambda_i} \in \mathbb{R}^{q_i \times q_i}$ la matrice dont les lignes sont les points des axes du simplexe S_{q_i} donnée par :

$$A_{\lambda_i} = \left(\frac{\lambda_i q_i - 1}{q_i - 1} \right) I_{q_i} + \left(\frac{1 - \lambda_i}{q_i - 1} \right) J_{q_i} \quad (3.2)$$

avec $\lambda_i \in [0, 1]$ et $\lambda_i \neq \frac{1}{q_i}$ pour tout $i = 1, \dots, p$.

Soit ξ_{λ_i} l'ensemble de points dont les coordonnées sont les lignes de la matrice A_{λ_i} . On appelle plan axial multiple pour un système MoM de type A, noté *m*-axial, tout sous-ensemble de $\xi_{\lambda_1} \times \dots \times \xi_{\lambda_p}$. Lorsque un plan *m*-axial est de plus orthogonal-équilibré on l'appelle plan axial-OE_A.

Exemple 1

Considérons ici 3 CP avec $q_1 = q_2 = q_3 = 3$. Les 3 matrices des points axiaux sont de la forme :

$$A_{\lambda_i} = \left(\frac{3\lambda_i - 1}{2} \right) I_3 + \left(\frac{1 - \lambda_i}{2} \right) J_3 = \begin{bmatrix} \lambda_i & \Delta_i & \Delta_i \\ \Delta_i & \lambda_i & \Delta_i \\ \Delta_i & \Delta_i & \lambda_i \end{bmatrix}, \quad \Delta_i = \frac{1 - \lambda_i}{2}$$

pour $i = 1, 2, 3$.

Pour $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \frac{1}{2}$ et $\lambda_3 = 1$, les matrices sont :

$$A_0 = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La matrice $D \in \mathbb{R}^{27 \times 9}$ du plan $\xi_0 \times \xi_{\frac{1}{2}} \times \xi_1$ peut être construite à l'aide du produit tensoriel de la façon suivante (voir paragraphe 2.4.1) :

$$B = [A_{\frac{1}{2}} \otimes \mathbf{1}_3 | \mathbf{1}_3 \otimes A_1] \in \mathbb{R}^{9 \times 6}$$

puis,

$$D = [A_0 \otimes \mathbf{1}_9 | \mathbf{1}_9 \otimes B]$$

Nous reviendrons sur cette matrice D dans l'exemple suivant.

Remarque 3.2 Les plans de type *m*-axial sont des cas particuliers d'une structure construite comme pour la définition ci-dessus mais sans contrainte sur les valeurs de λ_i .

Par exemple, toute matrice de la forme $aI_r + bJ_r$ est similaire à la matrice A_{λ_i} des points axiaux car les sommes des coordonnées des lignes sont toutes égales à $a + rb$, mais pour ce cas général la valeur de $a + rb$ n'est pas restreinte (voir exemple 3 à la fin du paragraphe).

On s'intéresse maintenant à la construction de plans axial-OE pour le système MoM de type A.

Proposition 3.8 Soit ξ un plan *m*-axial de taille n pour un système à $q_1 + \dots + q_p$ CS. Alors, ξ est un plan axial-OE_A si et seulement s'il existe un plan SOE de taille n dans le réseau $SOE(q_1, \dots, q_p)$.

En d'autre terme, il existe une bijection entre les plans SOE de taille n du réseau $SOE(q_1, \dots, q_p)$ et les plans axiaux-OE_A de taille n de l'ensemble $\xi_{\lambda_1} \times \dots \times \xi_{\lambda_p}$.

Démonstration.

Soit $[D_1 | \dots | D_p]$ la matrice de ξ . D'après (3.2) chaque ligne de D_i contient une proportion égale à λ_i les autres sont égales à $\Delta_i = \frac{1 - \lambda_i}{q_i - 1}$.

Or, $\lambda_i - \Delta_i \neq 0 \iff \lambda_i \neq \frac{1}{q_i}$, on peut ainsi poser D_i telle que :

$$\frac{1}{\lambda_i - \Delta_i} (D_i - \Delta_i J_{n,q_i}) = D_i^* \iff D_i = (\lambda_i - \Delta_i) D_i^* + \Delta_i J_{n,q_i} \quad (3.3)$$

avec D_i^* ne contenant que des sous-mélanges purs.

Si $D^* = [D_1^* | \dots | D_p^*]$ est un plan SOE alors $D_i^{*'} D_i^* = a_i I_{q_i}$, $\mathbb{1}'_n D_i = a_i \mathbb{1}'_{q_i}$ et $D_i^{*'} D_j^* = c_{ij} J_{q_i, q_j}$, par conséquent :

$$\begin{aligned} D_i' D_i &= (\lambda_i - \Delta_i)^2 [a_i I_{q_i}] + 2\Delta_i (\lambda_i - \Delta_i) [a_i J_{q_i}] + \Delta_i^2 n J_{q_i} \\ D_i' D_j &= (\lambda_i - \Delta_i)(\lambda_j - \Delta_j) [c_{ij} J_{q_i, q_j}] + \Delta_j (\lambda_i - \Delta_i) [a_i J_{q_i, q_j}] \\ &\quad + \Delta_i (\lambda_j - \Delta_j) [a_j J_{q_i, q_j}] + \Delta_i \Delta_j J_{q_i, q_j} \end{aligned} \quad (3.4)$$

$\forall i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$, donc ξ est un plan axial-OE.

Si D^* n'est pas un plan SOE alors la condition d'équilibre, $D_i^{*'} D_j^* = c_{ij} J_{q_i, q_j}$, n'est pas satisfaite pour au moins un couple (i, j) avec $i \neq j$. On déduit donc, pour (3.4), que cette condition ne peut être non plus satisfaite pour $D_i' D_j$. \diamond

Le résultat ci-dessus apporte une méthode de construction des plans axiaux-OE pour le système MoM de type A. Il faut tout simplement identifier les fractions SOE du réseau complet associé à $\xi_{\lambda_1} \times \dots \times \xi_{\lambda_p}$ et remplacer la proportion égale à 1 par λ_i et la proportion nulle par Δ_i , pour $i = 1, \dots, p$.

Lemme 3.2 *Soit $\xi \subset \xi_{\lambda_1} \times \dots \times \xi_{\lambda_p}$ un plan axial-OE_A. D'après (3.4) et les égalités de symétrie et d'équilibre du théorème 2.1, les coefficients d'orthogonalité et d'équilibre de ξ sont les suivants :*

$$\begin{aligned} \tilde{a}_i &= \frac{n}{q_i} \left(\frac{\lambda_i q_i - 1}{q_i - 1} \right)^2 \\ \tilde{b}_i &= \frac{n}{q_i^2} \left[1 - \left(\frac{\lambda_i q_i - 1}{q_i - 1} \right)^2 \right] \\ \tilde{c}_{ij} &= \frac{n}{q_i q_j} \end{aligned}$$

pour tout $i \neq j$ dans $\{1, \dots, p\}$.

Exemple 2 (Suite de l'exemple 1)

On s'intéresse maintenant à trouver un sous-ensemble de $\xi = \xi_0 \times \xi_{\frac{1}{2}} \times \xi_1$ qui garde la propriété OE.

Dans l'exemple 2 du paragraphe 2.4.3 on présente des générateurs des fractions SOE du réseau $SOE(3^3)$. Considérons la fraction de résolution III engendrée par $t_1 + t_2 + t_3 \equiv 0$ [3] dont la matrice est la suivante :

$$D^* = \left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

D'après la proposition 3.8 il existe un plan $\mathcal{D} \subset \xi$ axial-OE de taille 9, on le construit à partir du tableau D^* :

$$D_{\mathcal{D}} = [D_1|D_2|D_3] = \left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Les coefficients d'orthogonalité sont donc obtenus du lemme 3.2 :

$$\begin{aligned} \lambda_1 = 0 &\implies \left(\tilde{a}_1, \tilde{b}_1 \right) = \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4} \right) \\ \lambda_2 = \frac{1}{2} &\implies \left(\tilde{a}_2, \tilde{b}_2 \right) = \left(\frac{3}{16}, \frac{15}{16} \right) \\ \lambda_3 = 1 &\implies \left(\tilde{a}_3, \tilde{b}_3 \right) = (3, 0) \end{aligned}$$

D'après l'égalité d'équilibre les coefficients d'équilibre ne dépendent pas des proportions des sous-mélanges donc ne dépendent pas non plus des λ_i , alors $c_{12} = c_{13} = c_{23} = 1$.

Remarque 3.3 *Le résultat de la proposition 3.8 est valable aussi pour les plans cités à la remarque 3.2.*

Exemple 3

Pour cet exemple on sort du domaine des systèmes MoM. Considérons le plan défini par $\xi_1 \times \xi_2 \times \xi_3$ où les points de ξ_i correspondent aux lignes de A_i pour $i = 1, 2, 3$:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_3 = \begin{bmatrix} x & y \\ y & x \end{bmatrix}$$

Alors on cherche les plans SOE de taille 4 du réseaux $SOE(2^3)$.

Soit D_c^* le tableau codé du réseau $SOE(2^3)$:

$$D_c^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

On prend la fraction engendrée par $t_1 + t_2 + t_3 \equiv 0$ [2]. Celle-ci correspond aux lignes 1, 4, 6 et 7 de la matrice D_c^* . Soit $\text{Frac}(D_c^*)$ la fraction codée et D^* la fraction SOE associée :

$$\text{Frac}(D_c^*) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad D^* = [D_1^* | D_2^* | D_3^*] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & | & 1 & 0 & | & 1 & 0 \\ 0 & 1 & | & 0 & 1 & | & 1 & 0 \\ 0 & 1 & | & 1 & 0 & | & 0 & 1 \\ 1 & 0 & | & 0 & 1 & | & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Les expériences de $\xi_1 \times \xi_2 \times \xi_3$ associées à D^* sont obtenues par la formule (3.3) :

$$\begin{aligned} D_1 &= 2D_1^* - J_{4,2} \\ D_2 &= -D_2^* + 2J_{4,2} \\ D_3 &= (x - y)D_3^* + yJ_{4,2} \end{aligned}$$

donc :

$$D = [D_1 | D_2 | D_3] = \begin{bmatrix} 1 & -1 & | & 1 & 2 & | & x & y \\ -1 & 1 & | & 2 & 1 & | & x & y \\ -1 & 1 & | & 1 & 2 & | & y & x \\ 1 & -1 & | & 2 & 1 & | & y & x \end{bmatrix}$$

Effectivement D satisfait la condition OE :

$$D'_1 D_1 = 8I - 4J, \quad D'_2 D_2 = 2I + 8J, \quad D'_3 D_3 = 2(x - y)^2 I + 4xyJ$$

$$D'_1 D_2 = D'_1 D_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad D'_2 D_3 = 3(x + y)J$$

On ne parle pas ici de plan axial-OE car les lignes de D_i ne correspondent pas à des sous-mélanges.

3.5.2 Plan POE_B construit à partir de plans axiaux- OE_A

Soit w_i la proportion du i -ème CP dans un système MoM de type B pour $i = 1, \dots, p$. La proportion u_{ij} du j -ème CS est exprimée en terme de sa proportion relative, x_{ij} , dans le i -ème sous-mélange :

$$u_{ij} = w_i x_{ij}$$

où $0 \leq x_{ij} \leq 1$ pour $j = 1, \dots, q_i$, avec $x_{i1} + \dots + x_{iq_i} = 1$.

On peut ainsi associer à chaque mélange $(\mathbf{w}, \mathbf{u}) \in \mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{S}_{CS}(\mathbf{w})$ le point (\mathbf{w}, \mathbf{x}) avec $\mathbf{x} \in S_{q_1} \times \dots \times S_{q_p}$. L'ensemble contenant les points de la forme (\mathbf{w}, \mathbf{x}) , noté $\mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{R}_{CS}$, est donc le produit cartésien :

$$\mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{R}_{CS} = \mathcal{S}_{CP} \times S_{q_1} \times \dots \times S_{q_p}$$

De fait \mathcal{R}_{CS} est le domaine expérimental du système MoM de type A pour les proportions relatives des CS.

Définition 3.6 Soit l'application bijective $f : \mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{R}_{CS} \longrightarrow \mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{S}_{CS}(\mathbf{w})$ définie par :

$$f(w_1, \dots, w_p, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p) = (w_1, \dots, w_p, w_1 \mathbf{x}_1, \dots, w_p \mathbf{x}_p).$$

On dit que $\tilde{\xi} = \{\tilde{t}_1, \dots, \tilde{t}_n\} \subset \mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{R}_{CS}$ est le support du plan $\xi = \{t_1, \dots, t_n\}$ si $t_i = f(\tilde{t}_i)$ pour tout $i = 1, \dots, n$. On dit aussi que la matrice $[D_{cp}|R_{cs}]_{\tilde{\xi}}$ est le support de la matrice $[D_{cp}|D_{cs}]_{\xi}$.

En pratique on s'intéresse à la construction de plans sur l'ensemble $\mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{R}_{CS}$ car les deux blocs de la matrice $[D_{cp}|R_{cs}]_{\tilde{\xi}}$ peuvent être obtenus de manière indépendante. La matrice R_{cs} est la matrice d'un plan dans le domaine du système MoM de type A, c'est pourquoi nous avons introduit préalablement les plans de type axial- OE_A .

Proposition 3.9 Soit A_λ la matrice des points axiaux dans \mathcal{S}_{CP} donnée par :

$$A_\lambda = \left(\frac{p\lambda - 1}{p - 1} \right) I_p + \left(\frac{1 - \lambda}{p - 1} \right) J_p$$

avec $\lambda \in]0, 1[$ et $\lambda \neq \frac{1}{q}$.

Pour $k = 1, \dots, p$, soient $[R_1^{[k]} | \dots | R_p^{[k]}]$ les matrices de p plans OE_A , avec $R_i^{[k]} \in \mathbb{R}^{r \times q_i}$, $i = 1, \dots, p$.

Soit $\tilde{\xi} \subset \mathcal{S}_{CP} \times \mathcal{R}_{CS}$ le support du plan ξ , dont la matrice est ainsi construite :

$$[D_{cp} || R_{cs}]_{\tilde{\xi}} = \left[\begin{array}{c|ccc} \mathbf{1}_r \otimes v_1 & R_1^{[1]} & \dots & R_p^{[1]} \\ \mathbf{1}_r \otimes v_2 & R_1^{[2]} & \dots & R_p^{[2]} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{1}_r \otimes v_p & R_1^{[p]} & \dots & R_p^{[p]} \end{array} \right]$$

avec v_i la i -ème ligne de la matrice A_λ .

Alors ξ est un plan POE_B de taille $n = rp$.

Démonstration.

Soit $\tilde{X} = [\mathbf{1}_n | \tilde{D}_{cp} | \tilde{D}_{cs}] = [\mathbf{1}_n | \tilde{D}_{cp} | \tilde{D}_1 | \cdots | \tilde{D}_p]$ la matrice du modèle AG reparamétré pour le plan proposé, où $\tilde{D}_{cp} = D_{cp}N_{cp}$ et $\tilde{D}_i = D_iN_i$, avec N_{cp} et N_i les matrices des noyaux associées aux contraintes d'identification, pour $i = 1, \dots, p$. On veut montrer que la matrice $\tilde{X}'\tilde{X}$ est de la forme :

$$\tilde{X}'\tilde{X} = \text{diag} [n, \rho_o(I_{p-1} + J_{p-1}), \dots, \rho_p(I_{q_{p-1}} + J_{q_{p-1}})]$$

La matrice $[D_{cp} | R_{cs}]_{\tilde{\xi}}$ est le support de $[D_{cp} | D_{cs}]_{\xi} = [D_{cp} | D_1 | \cdots | D_p]$, elle a la forme suivante :

$$[D_{cp} | D_1 | \cdots | D_p] = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{1}_r \otimes v_1 & \lambda R_1^{[1]} & \cdots & \Delta R_p^{[1]} \\ \mathbf{1}_r \otimes v_2 & \Delta R_1^{[2]} & \cdots & \Delta R_p^{[2]} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{1}_r \otimes v_p & \Delta R_1^{[p]} & \cdots & \lambda R_p^{[p]} \end{array} \right]$$

avec $\Delta = \frac{1-\lambda}{p-1}$ et $v_k = (\Delta \mathbf{1}'_{k-1}, \lambda, \Delta \mathbf{1}'_{p-k}), \forall k = 1 \dots, p$.

1) $\tilde{D}'_{cp}\tilde{D}_{cp}$:

$$D_{cp} = [\text{diag}(\mathbf{1}_r, \dots, \mathbf{1}_r)] A_\lambda$$

d'où

$$\begin{aligned} D'_{cp}D_{cp} &= A_\lambda [\text{diag}(\mathbf{1}_r, \dots, \mathbf{1}_r)]' [\text{diag}(\mathbf{1}_r, \dots, \mathbf{1}_r)] A_\lambda \\ &= r A_\lambda A_\lambda \\ &= r \left(\frac{p\lambda-1}{p-1} \right)^2 I_p + r \Delta \left[p\Delta + 2 \left(\frac{p\lambda-1}{p-1} \right) \right] J_p \end{aligned}$$

On en déduit :

$$\tilde{D}'_{cp}\tilde{D}_{cp} = N'_{cp}D'_{cp}D_{cp}N_{cp} = r \left(\frac{p\lambda-1}{p-1} \right)^2 [I_{p-1} + J_{p-1}]$$

2) $\tilde{D}'_i\tilde{D}_i$ et $\tilde{D}'_i\tilde{D}_j, i \neq j$: $[R_1^{[k]} | \cdots | R_p^{[k]}]$ est la matrice d'un plan OE_A pour $k = 1, \dots, p$, donc :

$$\left(R_i^{[k]} \right)' R_i^{[k]} = a_{ik} I_{q_i} + b_{ik} J_{q_i}$$

$$\left(R_i^{[k]} \right)' R_j^{[k]} = c_{ijk} J_{q_i}$$

Pour chaque bloc D_i on a :

$$D'_i D_i = \lambda^2 \left(R_i^{[i]} \right)' R_i^{[i]} + \Delta^2 \sum_{k \neq i}^p \left(R_i^{[k]} \right)' R_i^{[k]}$$

$$D'_i D_i = \left[\left(\lambda^2 a_{ii} + \Delta^2 \sum_{k \neq i}^p a_{ik} \right) I_{q_i} + \left(\lambda^2 b_{ii} + \Delta^2 \sum_{k \neq i}^p b_{ik} \right) J_{q_i} \right]$$

D'où :

$$\tilde{D}'_i \tilde{D}_i = N'_i D'_i D_i N_i = \left(\lambda^2 a_{ii} + \Delta^2 \sum_{k \neq i}^p a_{ik} \right) [I_{q_i-1} + J_{q_i-1}]$$

La matrice $D'_i D_j$ est de la forme $\rho_{ij} J_{q_i, q_j}$ donc on obtient :

$$\tilde{D}'_i \tilde{D}_j = N'_i D'_i D_j N_j = 0$$

3) $\mathbf{1}'_n \tilde{D}_{cp}$ et $\mathbf{1}'_n \tilde{D}_i$:

$$\begin{aligned} \mathbf{1}'_n D_{cp} &= \mathbf{1}'_n \text{diag}(\mathbf{1}_r, \dots, \mathbf{1}_r) A_\lambda \\ &= r \mathbf{1}'_p A_\lambda = r \mathbf{1}'_p \end{aligned}$$

on obtient : $\mathbf{1}'_n \tilde{D}_{cp} = \mathbf{1}'_n D_{cp} N_{cp} = 0$.

Pour la propriété de plan OE_A on a pour chaque $k = 1, \dots, p$:

$$\mathbf{1}'_r R_i^{[k]} = (a_{ik} + q_i b_{ik}) \mathbf{1}'_{q_i} \quad (3.5)$$

$$i = 1, \dots, p$$

d'où

$$\mathbf{1}'_r D_i = \mathbf{1}'_{q_i} \sum_{k=1}^p (a_{ik} + q_i b_{ik})$$

et on obtient : $\mathbf{1}'_n \tilde{D}_i = \mathbf{1}'_n D_i N_i = 0$.

4) $\tilde{D}'_{cp} \tilde{D}_i$:

On constate que $D'_{cp} D_i$ ne satisfait pas la condition de plan OE_B , pourtant on montre que $\tilde{D}'_{cp} \tilde{D}_i = 0$:

$$D'_{cp} D_i = \lambda (\mathbf{1}_r \otimes v_i)' R_i^{[i]} + \Delta \sum_{k \neq i}^p \lambda (\mathbf{1}_r \otimes v_k)' R_i^{[k]}$$

Or, d'après (3.5) on a :

$$\lambda (\mathbf{1}_r \otimes v_i)' R_i^{[i]} = [\Delta \lambda J_{r, i-1} | \lambda^2 \mathbf{1}_r | \Delta \lambda J_{r, p-i}]' R_i^{[i]} = \left[\frac{\Delta \lambda (a_{ii} + q_i b_{ii}) J_{i-1, q_i}}{\Delta^2 (a_{ii} + q_i b_{ii}) \mathbf{1}'_{q_i}} \right]$$

et

$$\Delta(\mathbf{1}_r \otimes v_k)' R_i^{[k]} = \left[\frac{\Delta^2(a_{ik} + q_i b_{ik}) J_{k-1, q_i}}{\Delta \lambda(a_{ik} + q_i b_{ik}) \mathbf{1}'_{q_i}} \right]$$

On en déduit que la matrice $D'_{cp} D_i$ est de la forme suivante :

$$D'_{cp} D_i = \left[\begin{array}{c} \frac{\delta_1 \mathbf{1}'_{q_i}}{\delta_2 \mathbf{1}'_{q_i}} \\ \vdots \\ \frac{\delta_p \mathbf{1}'_{q_i}}{\delta_p \mathbf{1}'_{q_i}} \end{array} \right]$$

Comme $\mathbf{1}'_{q_i} N_i = 0$ on obtient : $\tilde{D}'_{cp} \tilde{D}_i = N'_{cp} D'_{cp} D_i N_i = 0$.

On a ainsi montré que cette construction à partir d'un plan OE_A conduit à un plan POE_B dont la matrice d'information pour le modèle AG reparamétré est la suivante :

$$\tilde{X}' \tilde{X} = \text{diag} \left[rp, r \left(\frac{p\lambda - 1}{p - 1} \right)^2 [I_{p-1} + J_{p-1}], \Phi_1 [I_{q_1-1} + J_{q_1-1}], \dots, \Phi_p [I_{q_p-1} + J_{q_p-1}] \right] \quad (3.6)$$

avec

$$\Phi_i = \lambda^2 a_{ii} + \Delta^2 \sum_{k \neq i}^p a_{ik}$$

pour tout $i = 1, \dots, p$. \diamond

On s'intéresse maintenant à des plans POE_B construits selon le schéma de la proposition 3.9 mais spécifiquement à partir des plans de type axial- OE_A introduits dans le paragraphe précédent. Le résultat de la proposition 3.8 est donc crucial pour construire le tableaux R_{cs} sur la base de p plans de type SOE_A . Ainsi, en pratique, la construction d'un plan POE_B se réduit à la recherche de plans factoriels orthogonaux.

Coefficients de $\tilde{X}' \tilde{X}$ pour un plan axial- OE_A

On observe dans (3.6) que les composantes de la matrice $\tilde{X}' \tilde{X}$ sont dépendantes des coefficients d'orthogonalité $a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{pk}$ des p plans OE_A utilisés dans le support de $[D_{cp} || D_{cs}]_{\xi}$, pour chaque plan $k = 1, \dots, p$.

Lorsque les p plans sont de type axial- OE_A , d'après le lemme 3.2, on peut obtenir ces coefficients de manière explicite en fonction des proportions

$$\lambda_{1k}, \lambda_{2k}, \dots, \lambda_{pk}$$

qui caractérisent le k -ième plan axial- OE_A , pour $k = 1, \dots, p$.

Ainsi, les valeurs de Φ_i dans la matrice $\tilde{X}' \tilde{X}$ pour un plan axial- OE_A sont données par :

$$\Phi_i = \frac{r}{q_i(q_i - 1)^2} \left[\lambda^2 (\lambda_{ii} q_i - 1)^2 + \Delta^2 \sum_{k \neq i}^p (\lambda_{ik} q_i - 1)^2 \right] \quad (3.7)$$

Nous présentons à la suite un exemple pour illustrer le procédé qui commence par la recherche de plans SOE de petite taille et termine par la construction d'un plan POE_B.

3.6 Exemple

Considérons ici un système de mélange à deux niveaux pour 3 composants principaux, chacun d'eux ayant 3 composants secondaires. La modélisation d'une telle situation par la méthode proposée dans la littérature (modèle multiplicatif) requiert au moins 81 expériences si les 4 polynômes multipliés dans le modèle sont d'ordre un.

Le modèle AG pour la configuration proposée ($p = 3$ et $q_1 = q_2 = q_3 = 3$) requiert au moins $q = q_1 + q_2 + q_3 = 9$ expériences. On va estimer les paramètres du modèle AG sur un plan de type POE_B construit selon la proposition 3.9.

Pour construire le plan POE_B on suit donc la démarche suivante :

- 1) Chercher 3 plans factoriels orthogonaux de même taille, la plus petite possible. Les plans factoriels orthogonaux sont associés aux plans SOE_A (voir la remarque 2.4).
- 2) À l'aide de la proposition 3.8, définir les 3 plans de type axial-OE_A pour composer le bloc R_{cs} de la matrice support $[D_{cp}|R_{cs}]_{\tilde{\xi}}$.
- 3) Définir la matrice A_λ qui est utilisée pour composer le bloc D_{cp} de la matrice support.

Pour les 3 plans factoriels on peut choisir les fractions régulières du plan factoriel complet associé au réseau $SOE(3^3)$. Chaque fraction de résolution III engendrées par $t_1 + t_2 + t_3 \equiv (k - 1)[3]$, est associée à la sous-matrice $[R_1^{[k]}|R_2^{[k]}|R_3^{[k]}]$ dans le bloc R_{cs} , pour $k = 1, 2, 3$. On présente les 3 tableaux codés ci-dessous :

$$R_c^{[1]} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad R_c^{[2]} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad R_c^{[3]} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Pour la fraction codée $R_c^{[1]}$ associée à $[R_1^{[1]}|R_2^{[1]}|R_3^{[1]}]$ on a choisi le plan axial-OE_A caractérisé par les proportions $\lambda_{11} = \frac{1}{2}$, $\lambda_{21} = 1$ et $\lambda_{31} = 0$.

Pour la fraction codée $R_c^{[2]}$ associée à $[R_1^{[2]}|R_2^{[2]}|R_3^{[2]}]$ on a choisi le plan axial-OE_A caractérisé par les proportions $\lambda_{12} = \lambda_{32} = 1$ et $\lambda_{22} = \frac{1}{2}$.

Pour la fraction codée $R_c^{[3]}$ associée à $[R_1^{[3]}|R_2^{[3]}|R_3^{[3]}]$ on a choisi le plan axial- OE_A caractérisé par les proportions $\lambda_{13} = \lambda_{33} = 1$ et $\lambda_{23} = 0$.

Et finalement pour le bloc D_{cp} la proportion λ dans la matrice A_λ doit être choisie de façon à ce que toutes les proportions des CP soient strictement positives, donc $\lambda \in]0, 1[$ et pour assurer la régularité du plan ξ il faut que $\lambda \neq \frac{1}{q}$:

$$A_\lambda = \begin{bmatrix} \lambda & \Delta & \Delta \\ \Delta & \lambda & \Delta \\ \Delta & \Delta & \lambda \end{bmatrix}, \quad \Delta = \frac{1 - \lambda}{p - 1}$$

Alors, le support de la matrice $[D_{cp}|D_{cs}]_\xi$ du plan POE_B est la matrice suivante :

$$[D_{cp}||R_{cs}]_\xi = \left[\begin{array}{ccc|ccc|ccc|ccc} \lambda & \Delta & \Delta & 1/2 & 1/4 & 1/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 1/2 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/4 & 1/4 & 1/2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/4 & 1/2 & 1/4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/4 & 1/4 & 1/2 & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/4 & 1/2 & 1/4 & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/2 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 1 & 1/2 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/2 & 1/4 & 1/4 & 0 & 1 & 0 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/4 & 1/2 & 1/4 & 0 & 1 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 1/2 \\ \lambda & \Delta & \Delta & 1/4 & 1/4 & 1/2 & 0 & 0 & 1 & 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ \hline \Delta & \lambda & \Delta & 1 & 0 & 0 & 1/2 & 1/4 & 1/4 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 1 & 0 & 0 & 1/4 & 1/2 & 1/4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 0 & 1 & 0 & 1/2 & 1/4 & 1/4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 0 & 1 & 0 & 1/4 & 1/2 & 1/4 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 0 & 1 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 0 & 0 & 1 & 1/4 & 1/2 & 1/4 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 0 & 0 & 1 & 1/2 & 1/4 & 1/2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 0 & 0 & 1 & 1/2 & 1/4 & 1/4 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \Delta & \lambda & \Delta & 1 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \Delta & \Delta & \lambda & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \Delta & \Delta & \lambda & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

Les valeurs des Φ_1 , Φ_2 et Φ_3 dans la matrice d'information du modèle reparamétré

sont obtenues par la formule (3.7) :

$$\Phi_1 = \frac{27}{16}\lambda^2 - 3\lambda + \frac{3}{2}$$

$$\Phi_2 = \frac{9}{8}\lambda^2 - \frac{15}{8}\lambda + \frac{15}{16}$$

$$\Phi_3 = \frac{63}{16}\lambda^2 - \frac{15}{8}\lambda + \frac{15}{16}$$

La matrice d'information est donc ainsi :

$$\tilde{X}'\tilde{X} = \text{diag} \left(27, \frac{9}{2}(3\lambda - 1)^2 \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \Phi_1 \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \Phi_2 \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \Phi_3 \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \right)$$

Le déterminant de $\tilde{X}'\tilde{X}$ est ainsi une fonction de λ ,

$$\phi(\lambda) = |\tilde{X}'\tilde{X}|$$

mais on sait que la valeur de λ est conditionnée par le fait que toutes les proportions des CP sont strictement positives, donc la solution optimale ici, $\lambda = 1$, n'est pas valable.

Cependant on peut calculer de manière explicite la D-efficacité relative du plan (par rapport au plan théorique optimal) pour une valeur donnée de λ :

$$D_{eff} = \left(\frac{\phi(\lambda)}{\phi(1)} \right)^{\frac{1}{q}}$$

$\lambda \in]0, 1[$ et $\lambda \neq \frac{1}{q}$.

Chapitre 4

Mélanges à deux niveaux et facteurs externes

Dans ce chapitre nous proposons des modèles tenant compte de facteurs externes qui pourraient agir sur la propriété d'un mélange à deux niveaux. Dans la bibliographie le traitement conjoint de mélange et facteurs externes est uniquement présenté pour les mélanges classiques.

Parmi les facteurs externes il y a un type de facteur traité de manière particulière, il s'agit de la quantité (ou la masse) du mélange.

La première partie de ce chapitre est dédiée aux système MoM avec un seul facteur externe, celui de la quantité. Les modèles intégrant la masse proposés pour les mélanges classiques (Cornell, 2002) sont adaptés ici aux systèmes de mélange à deux niveaux. Nous allons voir que la relation entre les proportions de composants et la quantité du mélange conduit à un modèle sans contrainte qui peut être analysé à l'aide des méthodes classiques pour surface de réponse.

La seconde partie traite les systèmes MoM avec tout type de facteurs externes. Nous proposons un modèle d'ordre un et des plans construits à l'aide du résultat dans la proposition 3.8. L'idée consiste à rassembler les trois types de variables (proportion de CS, proportion de CP et facteurs externes) et construire un plan ayant des propriétés apparentées à celles des plans OE pour les systèmes de type A et B.

4.1 Mélange classique et facteur externe

Considérons le cas où la propriété que l'on cherche à modéliser est une fonction des proportions des composants ainsi que de la quantité du mélange. C'est le cas par exemple d'un médicament où sa performance dépend de la formulation ainsi que de la dose appliquée.

Nous avons trouvé dans la bibliographie (Cornell, 2002) deux formes de modélisation avec des mélanges classiques et quantité, nous les présentons ci-dessous.

Soit S_q le simplexe pour un système de mélange classique dont les proportions sont les coordonnées du vecteur $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_q) \in S_q$. Soit t la variable correspondant à la quantité de mélange, supposons que :

$$0 < a \leq t \leq b \quad (4.1)$$

1) Modèle *component-amount*.

Si z_i est la quantité du i -ème composant alors $z_i = tx_i$. Pour les nouvelles variables z_i , $i = 1, \dots, q$, il n'y a d'autre contraintes que celles des bornes. Ces bornes sont déterminées par rapport à (4.1). On peut donc ajuster un modèle polynomial usuel d'ordre quelconque sur les variables z_1, \dots, z_q . En général on utilise des polynômes d'ordre un et deux tels que :

$$\eta = \beta_o + \sum_{i=1}^q \beta_i z_i \quad (4.2)$$

$$\eta = \beta_o + \sum_{i=1}^q \beta_i z_i + \sum_{i=1}^q \beta_{ii} z_i^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} z_i z_j \quad (4.3)$$

Ici on n'a plus la difficulté de surparamétrisation car il n'y a aucune contrainte liant les variables du modèle. Alors il est possible d'estimer les paramètres avec la méthode classique de surface de réponse à l'aide des plans classiques.

2) Modèle *mixture-amount*.

Une autre forme pour modéliser la réponse consiste à manier séparément les proportions et la quantité. Les modèles les plus utilisés sont les surfaces de réponse de la forme :

$$(i) \eta = P(\mathbf{x}) + Q(t)$$

$$(ii) \eta = P(\mathbf{x})Q(t)$$

où $P(\mathbf{x})$ est un polynôme de Scheffé et $Q(t)$ est un polynôme usuel.

Par exemple, si le polynôme P est d'ordre deux et Q est d'ordre un alors les surfaces de réponse sont de la forme suivante :

$$\eta = Q(t) + P(\mathbf{x}) = \alpha + \beta t + \sum_{i=1}^q \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \beta_{ij} x_i x_j \quad (4.4)$$

$$\eta = P(\mathbf{x})Q(t) = \sum_{i=1}^q \gamma_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \gamma_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^q \alpha_i x_i t + \sum_{1 \leq i < j \leq q} \alpha_{ij} x_i x_j t \quad (4.5)$$

Remarque. La comparaison entre ces deux modèles, *component-amount* et *mixture-amount*, est basée sur les interprétations des paramètres. Dans certaines situations le modèle (4.3) est préférable au modèle (4.5). Par exemple, lorsqu'on veut mesurer l'effet placebo chez le patient la dose du médicament doit être nulle, donc $x_i = 0$ et $z_i = 0 \forall i = 1, \dots, p$, on obtient ainsi que la réponse prédite est nulle pour le

modèle (4.5). Ceci n'est pas adapté à la réalité et dans ce cas le modèle (4.3) est plus adéquat. Par contre le modèle (4.5) permet de séparer les propriétés des composants de l'effet dû aux changements de la quantité de mélange. C'est pourquoi la sélection d'un des deux modèles dépend du cas d'étude particulière. Dans l'article de Piepel & Cornell (1994) nous trouvons une discussion sur des résultats obtenus pour des données réelles analysées avec les deux modèles.

Cas général mélange classique et facteur externe

Dans la modélisation courante d'un problème de mélange classique et facteurs externes on utilise des surfaces comme celles de (i) et (ii) pour r facteurs externes :

$$\eta = P(\mathbf{x}) + Q(t_1, \dots, t_r) \quad \text{et} \quad \eta = P(\mathbf{x})Q(t_1, \dots, t_r)$$

Pour la modélisation d'un système de mélanges à deux niveaux avec le facteur "masse" nous adaptons l'approche du modèle *component-amount* présenté ci-dessus. Pour le cas plus général de r facteurs externes nous utilisons le modèle $\eta = P(\mathbf{x}) + Q(t_1, \dots, t_r)$. Dans les deux cas la modélisation est faite à l'aide de surface polynomiales d'ordre un.

4.2 Facteur masse et système MoM de type A

Nous allons voir qu'un modèle de type *component-amount* peut être aisément adapté au système MoM de type A.

Considérons le système de type A avec $q = q_1 + \dots + q_p$ composants secondaires à proportions réelles :

$$\forall i = 1, \dots, p \quad \text{et} \quad j = 1, \dots, q_i$$

$$u_{i1} + \dots + u_{iq_i} = w_i$$

$$0 \leq u_{ij} \leq w_i$$

avec (w_1, \dots, w_p) fixé dans le domaine \mathcal{S}_{CP} .

On a par conséquent la contrainte principale du mélange :

$$\sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{q_i} u_{ij} = w_1 + w_2 + \dots + w_p = 1$$

Si $t \in [a, b]$, $a > 0$, est la quantité (ou masse) du mélange alors $t_{ij} = tu_{ij}$ est la quantité du j -ème CS associé au i -ème CP. Les bornes de la variable t_{ij} sont donc :

$$0 \leq t_{ij} \leq tw_i \leq bw_i$$

On applique la transformation *canonique* pour obtenir des variables codées dans $[-1, 1]$:

$$z_{ij} = \frac{2t_{ij} - bw_i}{bw_i}$$

$$\forall i = 1, \dots, p \text{ et } j = 1, \dots, q_i$$

Alors, si $z_{ij} = -1$ la quantité du j -ème CS associé au i -ème CP est nulle.

Modèle I

Nous appelons modèle I le modèle de type *component-amount* adapté au système MoM de type A pour un polynôme d'ordre un sur les variables codées :

$$\eta = \beta_o + \sum_{j=1}^{q_1} \beta_{1j} z_{1j} + \dots + \sum_{j=1}^{q_p} \beta_{pj} z_{pj}$$

Il est possible d'estimer les paramètres de ce modèle avec les plans factoriels classiques. Mais on doit prendre en compte que les CP interviennent tous dans le mélange, c'est-à-dire, la proportion w_i est fixée à valeurs strictement positives pour tout $i = 1, \dots, p$. Pour qu'un plan soit donc *admissible* (voir la définition 4.1) il faut reposer cette condition là en termes de plans factoriels.

Notation : On note $\xi(2^q)$ le plan factoriel complet pour q facteurs, chacun d'eux dans l'ensemble $\{-1, 1\}$. Pour un sous-ensemble du plan complet de taille n on note $\xi(2^q, n)$. Si $n = 2^{q-r}$ on note tout simplement $\xi(2^{q-r})$. Lorsque le sous-ensemble est une fraction régulière on note $\xi(2_R^{q-r})$ où R est sa résolution. Pour expliciter les générateurs de la fraction on note $\xi(2_R^{q-r}, G)$.

Rappel. Les sous-ensembles orthogonaux des plans factoriels du type $\xi(2^q)$ correspondent aux fractions régulières dont la résolution est au moins égale à III (voir Tinsson, 2010).

Pour estimer les paramètres du Modèle I nous nous intéressons à des fractions régulières de résolution strictement supérieure à deux qui sont admissibles dans le sens suivant :

Définition 4.1 *On dit qu'un plan $\xi(2^{q_1+\dots+q_p}, n)$ est admissible pour le modèle I si pour chaque $(z_1, \dots, z_p) \in \xi(2^{q_1+\dots+q_p}, n)$ la condition $z_i \mathbf{1}_{q_i} > -q_i$ est satisfaite $\forall i = 1, \dots, p$. On dit aussi que le point (ou l'expérience) est admissible.*

La condition d'admissibilité laisse en dehors les expériences où $z_k = -\mathbf{1}_{q_k}$ pour au moins un indice $k \in \{1, \dots, p\}$. Un expérience de la forme $(z_1, \dots, -\mathbf{1}_{q_k}, \dots, z_p)$ correspond en fait à un mélange où le k -ième CP est absent puisque les proportions de tous ses CS sont nulles.

Si $A_i = \xi(2^{q_i}) - \{-\mathbf{1}'_{q_i}\}$ pour tout $i = 1, \dots, p$, alors l'ensemble défini par $A = A_1 \times \dots \times A_p$ est le sous-ensemble maximal de $\xi(2^{q_1+\dots+q_p})$ contenant les expériences admissibles. La taille de A est donc égale à $\prod_{i=1}^p (2^{q_i} - 1)$. En général A n'est pas un plan orthogonal mais nous cherchons dedans les fractions régulières de type $\xi(2_R^{q-r})$, avec une résolution R égale ou supérieure à III .

Remarque 4.1 *Pour tout $i = 1, \dots, p$, $2^{q_i-1} < 2^{q_i} - 1$, donc $\prod_{i=1}^p (2^{q_i} - 1) > 2^{q-1}$, mais la fraction régulière la plus grande possible est de taille 2^{q-1} par conséquent le plan A n'est jamais orthogonal.*

Dorénavant la notation employée pour les fractions régulières est celle de la multiplication d'Hadamard entre colonnes du tableau, elle va être introduite dans l'exemple suivant.

Voici un exemple où il n'est pas possible de trouver une fraction orthogonale admissible.

Exemple 1

Considérons le système MoM de type A de plus petite taille : $q_1 = q_2 = 2$.

Voici la matrice du plan factoriel complet $\xi(2^4)$ où les expériences admissibles sont indiquées par la flèche :

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & \\ 1 & 1 & -1 & -1 & \\ -1 & 1 & -1 & -1 & \\ 1 & -1 & -1 & -1 & \\ \hline -1 & -1 & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \leftarrow \\ -1 & 1 & 1 & 1 & \leftarrow \\ 1 & -1 & 1 & 1 & \leftarrow \\ \hline -1 & -1 & -1 & 1 & \\ 1 & 1 & -1 & 1 & \leftarrow \\ -1 & 1 & -1 & 1 & \leftarrow \\ 1 & -1 & -1 & 1 & \leftarrow \\ \hline -1 & -1 & 1 & -1 & \\ 1 & 1 & 1 & -1 & \leftarrow \\ -1 & 1 & 1 & -1 & \leftarrow \\ 1 & -1 & 1 & -1 & \leftarrow \end{bmatrix}$$

Notation : soit i la i -ème colonne du tableau associé au plan $\xi(2^4)$, on note ij le produit d'Hadamard $i \odot j$. Une fraction régulière est identifiée par une condition de la forme $12 \cdots r = \mathbf{1}$ (voir le chapitre 3 de Tinsson, 2010).

La fraction engendrée par $1234 = \mathbf{1}$ contient les lignes 1, 2, 5, 6, 11, 12, 15 et 16 de D . Les fractions engendrées par $123 = \mathbf{1}$, $124 = \mathbf{1}$, $134 = \mathbf{1}$ et $234 = \mathbf{1}$ contiennent aussi au moins deux lignes de chaque sous-matrice de D donc contiennent deux expériences non admissibles de la forme $(z_1, -\mathbf{1}'_2)$.

Pour cet exemple il n'est pas possible d'obtenir un plan orthogonal admissible. Cependant il y a des fractions régulières de résolution II admissibles comme celle du générateur $12 = 34 = -\mathbf{1}$. Aucune expérience de la forme $(-\mathbf{1}'_2, z_2)$ ni $(z_1, -\mathbf{1}'_2)$ satisfait la condition de ce générateur, on retient de la matrice D les lignes 11, 12,

15 et 16 :

$$D_{(12=34=-\mathbb{1})} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Il n'est pas possible d'estimer les paramètres du *modèle I* avec une fraction de résolution II car sa taille est inférieure au nombre de paramètres. Par contre le plan composé de toutes les expériences admissibles (les 9 lignes indiquées sur D) est régulier. La matrice d'information et son inverse sont données par :

$$X'X = \begin{bmatrix} 9 & 3 & 3 & 3 & 3 \\ 3 & 9 & -3 & 1 & 1 \\ 3 & -3 & 9 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 9 & -3 \\ 3 & 1 & 1 & -3 & 9 \end{bmatrix}, \quad (X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{2}{9} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} \\ -\frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{12} & \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{12} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} \\ -\frac{1}{12} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} \end{bmatrix}$$

Pour ce plan la covariance entre couples d'estimateurs liés à des sous-mélanges différents est nulle.

Remarque. La construction de fractions orthogonales en évitant certaines expériences n'est pas une problématique courante. Ici nous montrons que lorsque le nombre de composants secondaires par sous-mélange est strictement supérieur à deux, il est possible d'obtenir une fraction régulière admissible de résolution égale ou supérieure à III.

Proposition 4.1 *Soit $q_i \geq 3$ pour tout $i = 1, \dots, p$. Il existe au moins une fraction orthogonale admissible de $\xi(2^{q_1+\dots+q_p})$ de taille $2^{q_1+\dots+q_p-p}$.*

Démonstration.

Considérons le plan factoriel $\xi(2^{q_k})$, on peut obtenir deux fractions régulières de taille 2^{q_k-1} et de résolution q_k avec les générateurs :

$$12 \cdots q_k = \mathbb{1} \tag{4.6}$$

$$12 \cdots q_k = -\mathbb{1} \tag{4.7}$$

Comme $q_k \geq 3$ ces deux fractions sont bien orthogonales. Or, l'expérience $-\mathbb{1}'_{q_k}$, celle que l'on veut éviter, appartient à une des deux fractions. Si q_k est un entier pair on doit donc rejeter la fraction 4.7, si q_k est impair on rejette alors 4.6.

Soit T_k le plan de la fraction de résolution q_k choisie par la procédure ci-dessus, on sait que le point $-\mathbb{1}'_{q_k}$ a été exclu pour tout $k = 1, \dots, p$, alors le plan \mathcal{D} défini par :

$$\mathcal{D} = T_1 \times \cdots \times T_p$$

est une fraction orthogonale admissible de $\xi(2^{q_1+\dots+q_p})$, de taille $2^{q_1+\dots+q_p-p}$. \diamond

La démonstration de cette proposition est de fait un algorithme pour construire

une fraction orthogonale admissible sous la condition que $\min\{q_1, \dots, q_p\} \geq 3$. Si l'on veut utiliser des fractions orthogonales pour le cas $\min\{q_1, \dots, q_p\} = 2$, il faut imposer des conditions de borne inférieure non nulles sur un des deux CS des sous-mélanges où $q_i = 2$.

4.3 Système MoM de type A et facteurs externes

4.3.1 Modèle

Considérons maintenant une situation où la propriété à modéliser dépend de m facteurs externes ainsi que des proportions des composants secondaires dans un système MoM de type A.

Soient z_1, \dots, z_m les variables associées aux facteurs externes et x_{ij} les proportions relatives d'un système MoM de type A pour $i = 1, \dots, p$ et $j = 1, \dots, q_i$.

Nous proposons à nouveau un modèle additif pour les deux types de variables :

$$\eta = \alpha_o + \sum_{k=1}^m \beta_k z_k + \sum_{j=1}^{q_1} \alpha_{1j} x_{1j} + \dots + \sum_{j=1}^{q_p} \alpha_{pj} x_{pj} \quad (4.8)$$

Ce modèle est évidemment surparamétré à cause des contraintes des sous-mélanges. On va donc imposer les mêmes contraintes d'identifications que celles du modèle additif utilisé dans le chapitre 2 pour le système MoM de type A.

Pour ce modèle on suppose que les variables externes sont codées de façon à ce que $-1 \leq z_i \leq 1$ pour tout $i = 1, \dots, m$.

4.3.2 Plan

Nous utilisons ici les notions de plan orthogonal-équilibré introduites pour les systèmes de mélanges à deux niveaux, ainsi que la structure de tableau codé lié aux plans SOE_A .

Soit le modèle additif (4.8) sous la forme matricielle :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y) &= \mathbf{1}_n \alpha_o + E\boldsymbol{\beta} + D_1 \boldsymbol{\alpha}_1 + \dots + D_p \boldsymbol{\alpha}_p \\ &= \mathbf{1}_n \alpha_o + E\boldsymbol{\beta} + D\boldsymbol{\alpha} \end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)$, $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_p)$ et $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{iq_i})$, $i = 1, \dots, p$.

On cherche à construire des plans ayant les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{1}_n' E = 0 \\ E' E = \rho I_m \\ E' D_i = \tau_i J_{m, q_i} \\ D_i' D_i = a_i I_{q_i} + b_i J_{q_i} \\ D_i' D_j = c_{ij} J_{q_i, q_j} \end{cases} \quad (4.9)$$

Un plan ainsi défini va être appelé tout simplement plan OE avec facteurs externes. D'après les propriétés vues précédemment des plans OE_A et les propriétés des matrices $N_i = \begin{bmatrix} I_{q_i-1} \\ -\mathbb{1}_{q_i-1} \end{bmatrix}$ associées aux contraintes d'identification $\mathbb{1}'_{q_i} \alpha_i = 0$ pour tout $i = 1, \dots, p$, on déduit le résultat suivant :

Lemme 4.1 *Soit $[E|D]$ la matrice d'un plan OE avec facteurs externes. La matrice d'information du modèle additif (4.8) reparamétré par rapport aux contraintes $\mathbb{1}'_{q_i} \alpha_i = 0$, $i = 1, \dots, p$, est diagonale par bloc :*

$$\tilde{X}' \tilde{X} = \text{diag} (n, \rho I_m, a_1 [I_{q_1-1} + J_{q_1-1}], \dots, a_p [I_{q_p-1} + J_{q_p-1}])$$

où $\tilde{X} = [\mathbb{1}_n | E | D_1 N_1 | \dots | D_p N_p]$.

Les plans de type OE avec facteurs externes peuvent être construits à l'aide de la proposition suivante :

Proposition 4.2 *Soit le plan factoriel complet, noté $\xi_E \times \xi_{cs}$, défini par :*

$$\xi_E \times \xi_{cs} = \{-1, 1\}^m \times [\mathbb{Z}/q_1\mathbb{Z}] \times \dots \times [\mathbb{Z}/q_p\mathbb{Z}]$$

Pour tout plan $\xi \subset \xi_E \times \xi_{cs}$ orthogonal de taille n , il existe un plan OE avec facteur externe de type axial pour les proportions des composants secondaires.

Démonstration.

Soit $[E|D_c]$ le tableau du plan factoriel ξ et soit $D^* = [D_1^* | \dots | D_p^*]$ la matrice brute de D_c , c'est-à-dire la matrice de sous-mélanges purs issus du bloc D_c . Comme ξ est orthogonal alors D^* est la matrice d'un plan SOE et d'après la proposition 3.8 il existe un plan axial- OE_A de taille n , soit $D = [D_1 | \dots | D_p]$ la matrice de ce plan axial.

Comme les éléments de la sous-matrice E sont égaux à -1 et 1 , et le plan factoriel ξ est orthogonal, alors $E' E = \rho I_m$ et $\mathbb{1}'_n E = 0$.

On montre aussi que $E' D_i = 0$:

$$\begin{aligned} D_i &= (\lambda_i - \Delta_i) D_i^* + \Delta_i J_{n, q_i} \\ E' D_i &= (\lambda_i - \Delta_i) E' D_i^* + \underbrace{\Delta_i E' J_{n, q_i}}_0 \end{aligned}$$

Soit $E^* = [E_1^* | \dots | E_p^*]$ la matrice brute de E (E^* est la matrice d'un plan SOE), alors

$$E = [E_1^* v | \dots | E_m^* v] \quad \text{où } v' = (-1, 1)$$

Toujours par l'orthogonalité du plan ξ on a $[E_k^*]' D_i^* = \tau_{ki} J_{2, q_i}$ pour $k = 1, \dots, m$, d'où $v' [E_k^*]' D_i^* = 0$ et $E' D_i = 0$ pour $i = 1, \dots, p$. On a montré donc qu'à partir du plan factoriel ξ on peut obtenir un plan satisfaisant les conditions (4.9). \diamond

L'objectif consiste à trouver les plans orthogonaux de la taille la plus petite possible à partir du plan factoriel $\xi_E \times \xi_{cs}$.

Exemple 1

Considérons une situation de 3 facteurs externes et 4 sous-mélanges à deux CS chacun : $m = 3$, $p = 4$ et $q_i = 2 \forall i = 1, \dots, 4$.

Pour cette configuration le plan factoriel complet est de taille $2^{m+p} = 128$. Une fraction régulière orthogonale de taille optimale est obtenue par les générateurs $\{126, 134, 237, 245\}$. Cette fraction de résolution III correspond au plan de Plackett et Burman de l'exemple 1 du paragraphe 2.4.3. Voici la matrice codée du plan :

$$[E|D_c] = \left[\begin{array}{ccc|cccc} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{array} \right]$$

La matrice du plan est donc :

$$[E|D^*] = [E|D_1^*| \dots |D_4^*] = \left[\begin{array}{ccc|cccc|cccc|cccc} -1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

On choisi le plan de type axial associé au bloc D^* dont les proportions sont $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1$ et $\lambda_4 = \frac{1}{3}$:

$$[E|D] = [E|D_1| \dots |D_4] = \left[\begin{array}{ccc|cccc|cccc|cccc|cccc} -1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

La matrice d'information pour le modèle reparamétré est la suivante :

$$\tilde{X}'\tilde{X} = \text{diag} \left(8, 8, 8, 8, 4, 4, \frac{20}{9} \right)$$

Existence des plans factoriels orthogonaux de petite taille

Dans la plupart des exemples que nous avons présenté avec des plans factoriels nous avons utilisé des configurations symétriques (q_i tous égaux) à modalités égales à un nombre premier (par exemple $q_i = 2$ ou $q_i = 3$). Dans ce cas la théorie assure l'existence des fractions régulières de résolutions III, donc des plans orthogonaux de taille satisfaisante.

Cependant pour certaines configurations de plans factoriels asymétriques il est possible de trouver des plans orthogonaux de petite taille voire de taille minimale. Alors en pratique on peut résoudre quelques situations à l'aide des tableaux proposés dans la littérature (voir le chapitre 4 du livre de Collombier, 1996 et le chapitre 8 du livre de Benoist, 1994).

4.4 Système MoM de type B et facteurs externes

Le modèle additif tenant compte des facteurs externes est de la forme suivante :

$$\eta = \alpha_o + \sum_{k=1}^m \beta_k z_k + \sum_{i=1}^p \alpha_i w_i + \sum_{j=1}^{q_1} \alpha_{1j} u_{1j} + \cdots + \sum_{j=1}^{q_p} \alpha_{pj} u_{pj} \quad (4.10)$$

avec :

z_1, \dots, z_p : variables associées aux facteurs externes,

w_1, \dots, w_p : proportions des CP,

u_{i1}, \dots, u_{iq_i} : proportions réelles des CS du i -ème CP.

La représentation matricielle du modèle est :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Y) &= \mathbf{1}\alpha_o + E\boldsymbol{\beta} + D_{cp}\boldsymbol{\alpha}_{cp} + D_1\boldsymbol{\alpha}_1 + \cdots + D_p\boldsymbol{\alpha}_p \\ &= \mathbf{1}\alpha_o + E\boldsymbol{\beta} + D_{cp}\boldsymbol{\alpha}_{cp} + D_{cs}\boldsymbol{\alpha} \end{aligned}$$

avec $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)$, $\boldsymbol{\alpha}_{cp} = (\alpha_1, \dots, \alpha_p)$, $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_p)$ et $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{iq_i})$, $i = 1, \dots, p$.

Pour ce modèle on a toujours la surparamétrisation due au système MoM de type B, donc ici les contraintes d'identifications sont celles du modèle AG du chapitre 3.

On s'intéresse à des plan de façon à ce que la matrice d'information du modèle paramétré soit diagonale par bloc.

Considérons les plans orthogonaux issus du plan factoriel complet intégrant les trois types de variables du modèle (4.10). Le plan factoriel complet, noté $\xi_E \times \xi_{cp} \times \xi_{cs}$, est défini par :

$$\xi_E \times \xi_{cp} \times \xi_{cs} = \{-1, 1\}^m \times [\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}] \times [\mathbb{Z}/q_1\mathbb{Z}] \times \cdots \times [\mathbb{Z}/q_p\mathbb{Z}]$$

Soit $\xi \subset \xi_E \times \xi_{cp} \times \xi_{cs}$ un plan orthogonal dont la matrice codée est donnée par $D_\xi = [E|l|A]$. À la différence du modèle (4.8) pour le système de type A, ici il n'est

pas possible de construire un plan de manière directe sur la matrice $D = [E|L|B]$ à cause du lien entre les proportions des CS et de CP, où L et B sont les matrices brutes de l et A respectivement.

Par contre il est possible d'obtenir un plan de matrice $[E|D_{cp}|R_{cs}]$ où $[D_{cp}|R_{cs}]$ est une matrice de support (voir définition 3.6).

Soit $\lambda \in]0, 1[$ et $\lambda \neq \frac{1}{p}$, d'après la formule (3.3), on obtient le bloc D_{cp} :

$$D_{cp} = \left(\frac{\lambda p - 1}{p - 1} \right) L + \left(\frac{1 - \lambda}{p - 1} \right) J_{n,p}$$

Donc $E' D_{cp} = 0$ car $E' L = 0$ d'après l'orthogonalité de ξ .

Si $[D_{cp}|D_{cs}] = [D_{cp}|D_1|\dots|D_p]$ est la matrice dont le support est $[D_{cp}|R_{cs}]$ alors si R_{cs} est un plan SOE pour le système MoM de type A, le produit $D'_{cp} D_i$ est de la forme

$$D'_{cp} D_i = \begin{bmatrix} \frac{\delta_1 \mathbf{1}'_{q_i}}{\delta_2 \mathbf{1}'_{q_i}} \\ \vdots \\ \frac{\delta_p \mathbf{1}'_{q_i}}{\delta_p \mathbf{1}'_{q_i}} \end{bmatrix}$$

Or, toujours pour l'orthogonalité de ξ on a $E' D_{cp} = a_o J_{m,p}$ et $E' D_i = a_i J_{m,q_i}$. D'où l'on obtient pour le modèle reparamétré une matrice diagonale par bloc.

Exemples

1) Pour $m = 2$, $p = 3$, $q_1 = q_2 = q_3 = 2$, le plan factoriel complet

$$\{-1, 1\}^2 \times \{0, 1, 2\} \times \{-1, 1\}^2$$

est de taille égale à 48. On peut obtenir un plan orthogonal de taille 24.

2) Pour $m = 3$, $p = 3$, $q_1 = q_2 = q_3 = 3$, la taille du plan factoriel complet est égale à $2^3 \times 3^4 = 728$, on peut obtenir un plan orthogonal de taille $2^2 \times 3^3 = 108$.

Commentaire : La préférence pour les plans orthogonaux de type factoriel est justifiée en raison des bonnes propriétés de la matrice d'information. Cependant il n'est pas toujours possible d'obtenir des plans orthogonaux de taille satisfaisante. Une solution pour réduire la taille du plan est toujours possible à l'aide des algorithmes d'échange. Ce type d'algorithme construit un plan de taille désirée à partir d'un ensemble de points donnés sous un critère d'optimalité (la D-optimalité en général).

Conclusions

D'une part, ce travail s'oriente vers la recherche de modèles alternatifs au modèle multiplicatif proposé dans la bibliographie pour représenter les propriétés de mélanges à deux niveaux de type A et de type B (voir paragraphes 1.5 et 1.6). D'autre part, on prend en compte l'effet de facteurs externes sur les propriétés de ces deux systèmes de mélanges. Dans la littérature l'effet de facteurs externes n'a été modélisé que pour les mélanges classiques.

Lorsqu'on se place sur un scénario avec de nombreux composants principaux et secondaires la taille du plan requis pour estimer les paramètres du modèle multiplicatif peut être prohibitive au niveau pratique. C'est pourquoi on a privilégié la modélisation de mélanges au travers de surfaces de réponse polynomiales d'ordre un. Pour les mélanges de type A un modèle d'ordre deux est aussi proposé. L'ajustement de surfaces de réponse d'ordre un a été aussi utilisé pour la modélisation de mélanges à deux niveaux sous l'influence de facteurs externes. Ce type de modèle n'est pas identifiable en raison des contraintes de mélanges alors on impose des contraintes d'identification classiques sur les paramètres.

Bien que la problématique sur le nombre de paramètres ait été surmonté par la simplicité du modèle choisi, les modèles additifs proposés dans ce travail peuvent ne pas être adéquats pour représenter la réponse de certains phénomènes de nature plus complexe. Ces modèles ne répondent pas à tous les types de situations mais ils sont bien adaptés à l'expérimentation de type exploratoire (criblage).

Les paramètres du modèle additif dans tous les cas sont estimés pour des plans orthogonaux-équilibrés (OE) ou partiellement OE puisque ce type de plans se ramènent à une matrice d'information diagonale par blocs. L'identification établie entre les plans strictement OE et les plans orthogonaux de type factoriel a permis d'obtenir des plans de petite taille composés de sous-mélanges purs en utilisant des méthodes classiques pour la construction de fractions régulières de résolution III.

Cependant, dans de nombreux cas d'application réelles, les expériences avec des corps purs n'ont pas de sens pratique. Dans ce cas une solution est toujours possible d'après le résultat qui assure l'existence d'un plan axial OE pour chaque plan SOE. Ainsi, le lien entre fractions orthogonales et plans SOE peut conduire à des plans OE de type axial de taille adéquate. Or la taille de la fraction orthogonale est conditionnée par le nombre de composants principaux, le nombre de composants secondaires et

le nombre de facteurs externes. Donc certaines configurations de mélanges-facteurs n'aboutissent pas à de plans de taille restreinte comme a été déjà indiqué dans le commentaire à la fin du dernier chapitre.

Perspectives

- ▷ **Concernant les composants du mélange.** Les deux systèmes de mélanges traités dans ce travail ne considèrent que des composants principaux obtenus comme des sous-mélanges d'au moins deux composants secondaires. Il est cependant possible de généraliser les systèmes MoM en rajoutant des composants singuliers, c.a.d. des composants principaux contenant un unique composant secondaire.
- ▷ **Concernant la modélisation.** Dans l'objectif de réduire le nombre d'expériences nous sommes passés du modèle multiplicatif au modèle additif. Comme on l'a signalé dans les conclusion, les surfaces de réponse d'ordre un peuvent être insuffisantes pour étudier certains phénomènes. Il est donc nécessaire de proposer des modèles intermédiaires tels que les surfaces polynomiales d'ordre deux et trois.
- ▷ **Concernant le domaine expérimental.** Dans ce travail on n'a considéré que les restrictions naturelles sur les proportions des composants. Pour certains cas d'application il est nécessaire de restreindre les sous-mélanges à une partie du simplexe donc il faut imposer des contraintes supplémentaires sur ces proportions. Par exemple, il sont très courants les contraintes du type suivant :

$$\mathcal{D}_1 : \begin{cases} x_1 \geq 0.15 \\ x_2 \geq 0.2 \\ x_3 \geq 0.35 \end{cases} \quad \mathcal{D}_2 : \begin{cases} 0.18 \leq x_1 \leq 0.7 \\ 0.2 \leq x_2 \leq 0.6 \\ 0.1 \leq x_3 \leq 0.4 \end{cases} \quad \mathcal{D}_3 : \begin{cases} x_2 \geq x_1 \\ 2x_1 + x_3 \leq 0.8 \end{cases}$$

- ▷ **Mise en oeuvre d'un logiciel après approfondissement des trois points précédents.**

Bibliographie

- [1] Benoist D., Toubier Y. et Germain-Tourbier S. (1994), *Plans d'expérience : construction et analyse*. Lavoisier, Tec et Doc.
- [2] Box G., Draper N. (2006), *Réponse Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses*. Wiley-Interscience; 2 édition .
- [3] Boulanger D. (1999), *Plans d'expérience pour mélanges*. Thèse de doctorat. Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- [4] Brown L., Olkin I., Sacks J., Wynn H. (1985), *Jack Kiefer Collected Papers III Design of Experiments*. Springer-Verlag.
- [5] Carmona F. (2005), *Modelos lineales*. Publicacions i Edicions, Universidad de Barcelona.
- [6] Chick L., Piepel G. (1984), *Statistically designed optimization of a glass composition*. Journal of the American Ceramic Society, 67,763-768.
- [7] Comptet L. (1970), *Analyse combinatoire (tome premier)*. Presse Universitaires de France, Collection Sup.
- [8] Collombier D. (1996), *Plans d'expérience factoriels*. Mathématiques et Applications, volume 21, Springer.
- [9] Cornell J.(1971), *Process variables in the mixture problem for categorized components*. Journal of the American Statistical Association, 66,42-48.
- [10] Cornell J.(2002), *Experiments with mixtures :designs, models and the analysis of mixture data*. 3er ed., New York : Wiley.
- [11] Cornell J. and Good I.(1970), *The mixture problem for categorized components*. Journal of the American statistical Association, 65,339-355.
- [12] Cornell J. and Ramsey I.(1998), *A generalized mixture model for categorized-components problems with an application to a photoresist-coating experiment*. Technometrics, 40,48-61.
- [13] Cox D. R., (1971), *A note on polynomial response functions for mixture*. Biometrika, 58, 1, 155-159.
- [14] Cox D. A., Little J., O'Shea D. (2007), *Ideals, varieties and algorithms*. 3er ed., Springer.
- [15] Czitrom V. (1988), *Mixtures experiments with process variables : D-optimal orthogonal experimental designs*. Communications in Statistics, 17, 105-121.

- [16] Czitrom V. (1989), *Experiments design for four mixture components with process variables*. Communications in Statistics, 17, 105-121.
- [17] Dingstad G., Egelanddal B., Naes T. (2003), *Methods for crossed mixture experiments-a case study from sausage productions*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 66, 175-190.
- [18] Draper N., St. John (1977), *A mixtures model with inverse terms*. Technometrics, 19, 37-46.
- [19] Goos P. and Donev A. (2006), *The D-optimal design of blocked experiments with mixture components*. Journal of Quality Technology, 38, 319-331.
- [20] Kissell (1967), *Optimization of white layer cake formulations by a multiple-factor experimental design*. Cereal Chemistry, 44, 253-268.
- [21] Kowalski S., Cornell J. et Vining G. (2000), *A new model and class of design for mixture experiments with process variables*. Communications in Statistics, Theory and Methods, 29, 312-341.
- [22] Kumari R., Mittal S.(1986), *A note on two factor mixture experiments*. Jour. Ind. Soc. Ag. Statistics, 2, 141-147.
- [23] Lambrakis (1968), *Experiments with mixtures : A generalization of the simplex-lattice design*. Journal of the Royal Statistical Society, B,30 , 123-136.
- [24] Lambrakis (1969), *Experiments with mixtures : Estimated regression function of the multiple-lattice design*. Journal of the Royal Statistical Society, B,31 , 276-284.
- [25] Laub A.J.(2005), *Matrix Analysis for Scientists & Engineers*. Siam.
- [26] Murthy R., Murty J. (1989), *Restricted region designs for multifactor mixture experiments*. Communications in Statistics, 18, 1279-1295.
- [27] Myers R., Montgomery D.(2002), *Response Surface Methodology*. 2nd ed., New York : Wiley.
- [28] Nigam A. (1973), *Multifactor mixture experiments*. Journal of the Royal Statistical Society, B, 35, 51-66.
- [29] Piepel G. (1999), *Modeling methods for mixture-of-mixtures experiments Applied to a Tablet Formulation Problem*. Pharmaceutical Development and Technology, 4, 593-606.
- [30] Piepel G., Cornell J. (1999), *Mixture experiments approaches : examples, discussion, and recommendations*. Journal of Quality Technology, 26, 177-196.
- [31] Pistone G., Wynn H. (1996), *Generalised confounding with Gröbner bases*. Biometrika, 83, 653-666.
- [32] Prescott P. (2004), *Modelling in mixture experiments including interactions with process variables*. Quality Technology & Quantitative Management, 1, 1, 87-103.
- [33] Prescott P., Draper N. (1998), *Mixture desings for constrained components in orthogonal blocks*. Journal of Applied Statistics, 25, 5, 613-638.

- [34] Quenouille M. (1953), *The desing and analysis of experiments*. Charles Griffin and Company, London.
- [35] Scheffé H. (1958), *Experiments with mixtures*. Journal of the Royal Statistical Society, B, 20, 344-360.
- [36] Scheffé H. (1963), *The simplex-Centroid Desing for experiments with mixtures*. Journal of the Royal Statistical Society, B, 25, 235-263.
- [37] Snee R. (1981), *Developing blending models for gasoline and other mixtures*. Technometrics, 23, 119-130.
- [38] Tinsson W. (2010), *Plans d'expérience : constructions et analyses statistiques*. Collection Mathématiques et Applications. Vol. 67. Springer.