

Chapitre 1

Le but et les conditions de l'expérience

Sommaire

1.1 Définition du but de l'expérience

1.1.1 Expérience à objectif unique

1.1.2 Expérience à objectifs multiples

1.2 Définition des conditions de l'expérience

1.2.1 Expériences plus ou moins importantes

1.2.2 Stratégie ou programme expérimental

1.2.3 Conditions réglementaires

1.1 Définition du but de l'expérience

1.1.1 Expérience à objectif unique

1° Principe

La définition claire et précise du but de l'expérience est toujours un élément essentiel du protocole expérimental. Dans certains cas, quand l'objectif à atteindre est à première vue unique et évident, cette définition peut paraître très simple. Mais en réalité, il en est rarement ainsi.

2° Domaine agronomique

Considérons par exemple, dans le domaine agronomique, le problème apparemment élémentaire de la comparaison des rendements de différentes variétés (races, provenances, origines ou descendances) d'une même espèce végétale ou animale. Ce problème peut en fait recouvrir des situations aussi différentes que :

- la comparaison de toutes les variétés, considérées sur pied d'égalité, en vue d'identifier la ou les « meilleures » d'entre elles dans des conditions données ;
- la comparaison d'une ou plusieurs nouvelles variétés avec une ou plusieurs variétés de référence, bien connues, en vue d'assurer le cas échéant la diffusion de la ou des nouvelles variétés qui seraient « supérieures » à la ou aux anciennes variétés ;
- la comparaison de toutes les variétés ou, plus vraisemblablement, de toutes les descendances, en vue d'estimer certains coefficients d'héritabilité.

Encore faudrait-il préciser clairement, dans chaque cas, ce qu'on entend par « meilleur » ou « supérieur ».

3° Domaine médical

D'une manière fort semblable, dans le domaine médical, on peut faire la distinction entre, d'une part, les expériences de supériorité, destinés à comparer par exemple une nouvelle substance ou molécule à un témoin ou placebo (§ 2.2.2.4°), en vue d'établir la *supériorité*¹ ou l'*efficacité*² éventuelle de la nouvelle substance, et d'autre part, les expériences d'équivalence et de non-infériorité, qui ont pour but d'étudier soit l'*équivalence* ou la *bioéquivalence*³, soit la *non-infériorité*⁴ d'un nouveau traitement par rapport à un traitement de référence.

4° Connaissances préalables

Il n'est sans doute pas inutile de dire ou de rappeler ici que la définition d'un objectif précis nécessite un minimum de connaissances préalables des phénomènes

¹ En anglais : *superiority*.

² En anglais : *efficacy*.

³ En anglais : *equivalence, bioequivalence*.

⁴ En anglais : *non-inferiority*.

étudiés. Ces connaissances peuvent être acquises en général par une étude bibliographique et critique, ne conduisant pas seulement à une énumération de références, mais bien à une synthèse et à des conclusions, exprimées par exemple sous la forme d'hypothèses à vérifier ou de questions auxquelles des réponses doivent être apportées. Ces connaissances préalables peuvent également être élargies par des expériences ou des observations préliminaires.

L'expérimentateur averti ne ménage pas ses efforts à ce stade de la recherche, car il sait que tout enrichissement de ses connaissances de départ doit lui permettre de mieux organiser son expérience ou son programme d'expériences et, vraisemblablement, d'en tirer un bien meilleur profit. Cette remarque est particulièrement importante pour les expériences ou les programmes d'expériences coûteux ou de longue durée, très fréquents dans les principaux domaines considérés (agronomie, médecine, industrie, etc.).

En matière agronomique, on peut citer par exemple les programmes de sélection, même lorsqu'ils concernent des cultures annuelles, les expériences relatives aux rotations des cultures, aux cultures pérennes et aux grands animaux et, surtout, certaines expériences forestières.

1.1.2 Expérience à objectifs multiples

1° Principe

Le plus souvent, cependant, les expériences poursuivent simultanément plusieurs objectifs. On peut notamment avoir pour but d'étudier deux ou plusieurs variables différentes relatives à une même série d'individus (rendement en racines, richesse saccharine et production de sucre de différentes variétés de betterave sucrière, par exemple). Mais on peut également se proposer d'effectuer, en plus des mesures de base (de croissance ou de rendement, par exemple), des observations complémentaires relatives au déroulement de l'expérience (précocité de la croissance ou développement de certaines maladies, par exemple).

Il importe, dans de tels cas, de bien identifier les différents objectifs considérés, en spécifiant leur ordre de priorité, de manière à accorder, au moment de la planification, toute l'attention nécessaire à l'objectif ou aux objectifs les plus importants. C'est en effet essentiellement en fonction de ce ou ces objectifs que doivent être définis divers éléments fondamentaux du protocole expérimental, dont la structure des traitements, le nombre de répétitions à réaliser, etc.

2° Vulgarisation

Dans certaines situations aussi, la diversité des objectifs provient du fait qu'outre son but principal de recherche, l'expérience doit servir d'outil didactique, de vulgarisation ou de démonstration, à l'intention des praticiens (agriculteurs ou éleveurs, par exemple). Dans ce cas également, il importe de bien préciser les priorités et de ne pas se laisser distraire des objectifs principaux.

1.2 Définition des conditions de l'expérience

1.2.1 Expériences plus ou moins importantes

1° Importance ou ampleur de l'expérience

D'une manière très générale, un même objectif ou au moins des objectifs fort semblables peuvent être poursuivis dans le cadre d'expériences réalisées dans des conditions très différentes, qui doivent être précisées dès le départ. Ces conditions peuvent être liées notamment à l'importance ou à l'ampleur qui est donnée aux expériences.

2° Domaine agronomique

En matière agronomique, on peut faire, à ce propos, la distinction entre expériences « en station » et expériences « hors station ».

Par expérience *en station*⁵, on entend une expérience qui est organisée de façon très stricte, au sein d'une station de recherche, d'un laboratoire ou, d'une manière générale, de tout milieu qui peut être étroitement surveillé (chambres de culture ou serres, par exemple). Par expérience *hors station*⁶, on entend au contraire une expérience qui est organisée dans un cadre moins bien contrôlé et généralement plus proche de la pratique (chez des agriculteurs ou en forêt, par exemple).

La distinction entre les deux situations n'est pas toujours très nette, mais elle peut conduire à des différences importantes quant à la planification de l'expérience.

L'expérience « en station » est souvent plus artificielle et elle peut porter sur un matériel végétal ou animal plus homogène. De plus, les conditions de travail permettent dans de nombreux cas l'utilisation d'équipements ou de locaux spéciaux, conduisant à la définition d'unités expérimentales (parcelles notamment) plus petites.

Par contre, les expériences « hors station » portent le plus souvent sur un matériel plus hétérogène et sont généralement soumises à plus d'aléas. Il en résulte, entre autres choses, qu'elles sont fréquemment caractérisées par l'emploi d'unités expérimentales plus grandes et, malgré cela, par une plus grande variabilité des résultats obtenus.

3° Domaine médical

De même, dans le domaine médical, des expériences peuvent être organisées exclusivement en milieu hospitalier ou au contraire sur des patients ambulants, appelés à se soumettre régulièrement à certains examens. Il peut s'ensuivre des dif-

⁵ En anglais : *on-station experiment*.

⁶ En anglais : *off-station experiment, on-farm experiment*.

férences importantes, en ce qui concerne notamment le *respect des prescriptions*⁷ médicales et la proportion des *défections*⁸ en cours d'expérience.

4° Domaine industriel

De même aussi, dans le secteur industriel, des expériences peuvent être mises sur pied à une petite échelle, en laboratoire, ou à une plus grande échelle, semi-industrielle par exemple, dans des installations spécialement conçues à cet effet, ou encore au cours d'une production industrielle tout à fait normale. Les sources de variabilité et les risques d'incidents ne sont évidemment pas les mêmes dans tous les cas.

1.2.2 Stratégie ou programme expérimental

1° Principe

D'une manière générale encore, une expérience est rarement organisée de façon isolée, mais s'intègre au contraire le plus souvent dans une *stratégie* ou un *programme expérimental*⁹, constitué de plusieurs expériences simultanées ou successives. Ce principe peut être illustré dans les différents domaines que nous venons d'envisager.

2° Domaine agronomique

En recherche agronomique notamment, une distinction doit être faite très fréquemment entre expériences préliminaires ou exploratoires ou d'orientation, expériences essentielles ou principales, et expériences de confirmation.

Les *expériences préliminaires* ou *exploratoires*¹⁰ servent à dégrossir un problème nouveau, et leur organisation est parfois très sommaire, notamment en raison du fait que le matériel expérimental dont on dispose à ce stade de la recherche est souvent peu abondant (petits lots de semences par exemple). Les *expériences principales*¹¹ constituent le nœud du travail de recherche et doivent retenir toute l'attention du chercheur, qui doit éviter, à ce niveau, toute concession abusive à la facilité ou aux contingences matérielles. Les *expériences de confirmation*¹², enfin, ont pour objectif de vérifier, dans des conditions aussi proches que possible de la pratique, la validité des conclusions obtenues aux stades antérieurs.

Il est évident que la distinction introduite ici n'est pas indépendante de celle qui a été mentionnée au cours du paragraphe 1.2.1.2°, les expériences préliminaires

⁷ En anglais : *compliance*.

⁸ En anglais : *drop-out*.

⁹ En anglais : *experimental strategy, experimental program*.

¹⁰ En anglais : *preliminary experiment, exploratory experiment*.

¹¹ En anglais : *main experiment*.

¹² En anglais : *confirmatory experiment*.

et principales étant souvent des expériences « en station » et les expériences de confirmation étant normalement des expériences « hors station ».

À titre d'illustration, on peut citer le cas d'un programme de sélection qui porterait successivement des expériences de triage, des expériences comparatives et des expériences « multilocales ». Comme leur nom l'indique, les expériences de triage devraient permettre d'effectuer un premier choix parmi un grand nombre de variétés (provenances, origines, etc.) peut-être très disparates. Les expériences comparatives seraient destinées à comparer, toujours en station et dans des conditions très strictes, les variétés qui auraient été retenues au premier stade. Et les expériences « multilocales » auraient pour but de vérifier hors station le comportement des quelques variétés finalement sélectionnées, et cela dans toute la région de diffusion potentielle de ces variétés et au cours de plusieurs années successives.

3° Domaine médical

Dans le domaine médical, les expériences cliniques, qui sont réalisées sur des patients et parfois des volontaires sains, font suite habituellement à des expériences préliminaires ou précliniques qui peuvent avoir mis en cause des animaux. Les expériences cliniques sont elles-mêmes organisées selon un processus bien défini, normalement constitué de quatre phases successives [MEINERT, 1998].

Très schématiquement, la première phase a pour but d'obtenir des informations générales relatives à la toxicité et à l'action éventuelle du nouvel élément chimique ou biologique qui est pris en considération. La deuxième phase tend à préciser l'efficacité du produit étudié, en fonction des doses administrées. La troisième phase a pour objectif principal de définir les modalités de prescription du nouveau médicament (doses, fréquences d'utilisation, etc.). Et la quatrième phase est une phase de suivi, qui a notamment pour but d'identifier les éventuels effets secondaires rares ou qui pourraient apparaître à long terme.

Il est évident que l'ampleur donnée aux expériences est en relation étroite avec les différentes phases envisagées. Les expériences de phase I peuvent porter sur quelques patients ou quelques dizaines de personnes seulement, et cela souvent dans un seul centre hospitalier. Les expériences des phases II et III peuvent impliquer plusieurs centaines de patients et éventuellement de volontaires sains, qui sont suivis dans différents hôpitaux. Et la phase IV peut consister en une étude statistique des dossiers médicaux de milliers ou dizaines de milliers de personnes, qui sont observées dans la vie courante.

4° Domaine industriel

Des principes semblables s'appliquent également au domaine industriel. Il y est souvent question d'identifier tout d'abord le ou les facteurs les plus influents ou actifs, dans tel ou tel processus de fabrication ou de transformation, et cela éventuellement dans des conditions de laboratoire, d'étudier ensuite de façon plus précise l'effet des facteurs les plus influents et autant que possible leurs interactions,

en laboratoire ou à une échelle semi-industrielle, et de définir enfin les conditions optimales de fabrication ou de transformation, à une échelle aussi proche que possible de la réalité industrielle¹³.

1.2.3 Conditions réglementaires

Dans le domaine médical, l'organisation des expériences ou essais cliniques est réglementée de manière très stricte. Des règles de *bonnes pratiques cliniques*¹⁴ existent tant au niveau national, dans certains pays, qu'au niveau international, notamment dans le cadre d'accords entre l'Union européenne, les États-Unis d'Amérique et le Japon [Anonyme, 1999 ; BROWN *et al.*, 2008 ; ROCKHOLD, 2002].

De même, certaines contraintes réglementaires, de *bonnes pratiques d'expérimentation*¹⁵, ont été promulguées dans le domaine agronomique, en particulier en ce qui concerne les expériences relatives aux produits phytosanitaires [Anonyme, 2004 ; LEUCHOVIVUS, 1997]. Et d'autres réglementations s'appliquent également aux secteurs agro-alimentaire et vétérinaire.

¹³ Le mot anglais *screening* (ou en français *criblage*) est utilisé pour désigner aussi bien la recherche du ou des facteurs les plus influents que, dans l'exemple agronomique envisagé plus haut, le premier tri d'un certain nombre de variétés ou de provenances.

¹⁴ En anglais : *good clinical practices*.

¹⁵ En anglais : *good experimental practices*.

Chapitre 2

Les facteurs et les traitements ou objets

Sommaire

2.1 Concepts de base

- 2.1.1 La notion de facteur
- 2.1.2 La notion de traitement ou objet

2.2 Les expériences à un facteur

- 2.2.1 Le choix des modalités
- 2.2.2 Les témoins ou objets de référence

2.3 Les expériences factorielles et factorielles fractionnaires

- 2.3.1 Principes généraux
- 2.3.2 Les expériences factorielles complètes
- ⊖ 2.3.3 Les expériences factorielles fractionnaires

2.4 Les autres expériences à deux ou plusieurs facteurs

- ⊖ 2.4.1 L'étude des surfaces de réponse
- ⊖ 2.4.2 L'étude des mélanges
- ⊖ 2.4.3 Les plans optimaux
- ⊖ 2.4.4 Les expériences organisées en deux ou plusieurs phases
- ⊖ 2.4.5 Les expériences numériques

2.1 Concepts de base

2.1.1 La notion de facteur

1° Facteur, facteurs qualitatifs et quantitatifs

En matière d'expérimentation, on appelle *facteur*¹ toute série d'éléments de même nature qui peuvent être comparés au cours d'une expérience, tels qu'une série de variétés, un ensemble de produits phytosanitaires, différentes doses d'un même engrais, différentes températures, différentes pressions, etc.

D'une manière générale, les facteurs peuvent être divisés en *facteurs qualitatifs*², dont les différents éléments ne peuvent pas être classés a priori (variétés, produits phytosanitaires, etc.), et en *facteurs quantitatifs*³, dont les éléments se classent au contraire de façon logique a priori (différentes doses d'un même engrais, différentes températures, différentes pressions, etc.). Dans le cas des facteurs quantitatifs, chacun des facteurs s'identifie aussi à la variable sous-jacente considérée (dose, température, pression, etc.).

2° Variantes, niveaux, modalités

Les différents éléments individuels qui sont associés à chacun des facteurs sont appelés *variantes*, *niveaux* ou *modalités*⁴. Le terme « variante » convient mieux dans le cas des facteurs qualitatifs (différentes variétés par exemple), et le terme « niveau » dans le cas des facteurs quantitatifs (différentes températures par exemple), tandis que le vocable « modalités » s'adapte bien aux deux situations.

⌈ Quand les modalités sont au nombre de trois au moins, on fait parfois la distinction entre les facteurs qualitatifs proprement dits, au sens où nous les avons définis ci-dessus, et les *facteurs qualitatifs ordonnés*⁵. Les modalités de ces derniers sont telles qu'elles peuvent être ordonnées, mais ne correspondent cependant pas exactement, comme pour les facteurs quantitatifs, aux valeurs numériques d'une variable sous-jacente [COX, 1958]⁶.

Tel est le cas si on désire comparer, par exemple, la croissance d'un certain nombre d'individus (plantes ou animaux notamment) atteints par une même maladie à des degrés différents, qui ne sont pas définis sur une base numérique stricte.

⌋ Cette distinction est comparable à celle qui peut être faite entre données qualitatives nominales et données qualitatives ordinales [STAT1, § 2.4.1].

¹ En anglais : *factor*.

² En anglais : *qualitative factor*.

³ En anglais : *quantitative factor*.

⁴ En anglais : *level*.

⁵ En anglais : *ranked qualitative factor*.

⁶ Nous rappelons que les alinéas marqués en marge des symboles ⌈ et ⌋, de même que les paragraphes dont le titre est précédé du symbole ⊖, peuvent être négligés au cours d'une première lecture.

3° Facteurs contrôlés et non contrôlés, facteurs constants

Les facteurs qui sont effectivement étudiés au cours d'une expérience sont aussi appelés *facteurs contrôlés* ou *maîtrisés*⁷. Ils s'opposent aux *facteurs non contrôlés* ou *non maîtrisés*⁸, sur lesquels il n'est pas ou il est difficilement possible d'agir et qui sont la source de variations résiduelles, fréquemment considérées comme aléatoires. On peut citer comme exemples possibles de facteurs non maîtrisés les conditions météorologiques, la température ambiante du local dans lequel est organisée l'expérience, le degré d'humidité de certaines matières premières, etc.

Très souvent, certains facteurs qui pourraient être facilement maîtrisés sont maintenus constants, dans le but de ne pas augmenter de façon excessive le nombre de sources de variation prises en considération simultanément. Ces facteurs sont dits *constants*⁹.

4° Facteurs essentiels et accessoires

Comme nous le verrons ultérieurement (à partir du chapitre 6), les variations résiduelles dues aux facteurs non contrôlés peuvent malgré tout être maîtrisées dans une certaine mesure par la définition de blocs, de dispositifs expérimentaux constitués de lignes et de colonnes, etc.

Dans cette optique, on parle fréquemment de *facteurs essentiels* ou *principaux* à propos des facteurs qui constituent la raison d'être de l'expérience, et de *facteurs accessoires* ou *auxiliaires* à propos de ceux qui sont introduits en vue de maîtriser les variations résiduelles (facteur blocs par exemple).

[Les différentes catégories de facteurs auxquelles nous avons fait allusion, de même que leur caractère fixe ou aléatoire (§ 2.2.1.1°), sont discutés notamment [par PREECE [2001].

⊖ 5° Terminologie

La multiplicité des domaines d'application des plans d'expériences a induit une diversité de la terminologie, à laquelle nous avons déjà fait allusion dans l'introduction générale à propos de la signification même du mot « expérience ».

En ce qui concerne le sujet abordé ici, nous ajoutons que, surtout dans le cas des facteurs quantitatifs, les facteurs contrôlés sont parfois appelés aussi *paramètres* ou *paramètres expérimentaux* ou *paramètres d'entrée*, ou encore *variables entrantes* ou *variables explicatives*, comme en régression.

En outre, on utilise également les termes *signal*¹⁰ et *bruit* ou *bruit de fond*¹¹ en vue de distinguer ce qui relève d'une part des facteurs contrôlés, et d'autre part des facteurs non contrôlés.

⁷ En anglais : *controlled factor*.

⁸ En anglais : *uncontrolled factor*.

⁹ En anglais : *constant factor*.

¹⁰ En anglais : *signal*.

¹¹ En anglais : *noise*.

2.1.2 La notion de traitement ou objet

1° Traitement ou objet

On appelle communément traitement toute modalité d'un facteur unique, de même que toute combinaison de modalités de deux ou plusieurs facteurs. On peut citer à titre d'exemples de traitement, dans le cas d'un seul facteur, un type donné de labour ou une fumure donnée et, dans le cas de deux facteurs, l'association d'une variété donnée à un herbicide donné, la combinaison d'une température et d'une pression données, etc.

Dans la mesure où il ne s'agit pas toujours de traitement au sens strict du terme (différentes variétés d'une même céréale ou différentes races de bétail bovin, par exemple), nous préférons remplacer le mot « traitement » par le terme plus large *objet*.

2° Plan ou structure des objets et autres conditions expérimentales

Comme nous l'avons précisé dans l'introduction générale, l'ensemble des objets ou des traitements qui doivent être expérimentés constitue le plan ou la structure des objets (*treatment design*).

Les différents objets et leur structure doivent évidemment être clairement définis dans le protocole expérimental. Mais en outre, toutes les autres conditions de l'expérience, qui en constituent les facteurs constants, doivent également être bien précisées dans le protocole (en productions végétales, par exemple les modalités de travail du sol, la fumure de base, la date, la densité et la profondeur du semis, etc., et en productions animales, les conditions d'élevage, l'alimentation de base, etc.).

3° Choix des objets

Dans l'ensemble, le problème du choix des objets se présente sous des formes très différentes d'une discipline à l'autre.

En matière agronomique, certaines expériences ne font intervenir qu'un seul facteur contrôlé, mais parfois avec un grand nombre de modalités. D'autres expériences, plus nombreuses, prennent en considération deux ou plusieurs facteurs, le plus souvent selon des arrangements factoriels (§ 2.3.2).

Dans le domaine médical par contre, la plupart des expériences ne concernent qu'un seul facteur et portent sur un petit nombre d'objets seulement. Il s'agit très fréquemment de comparer une ou un nombre très limité de substances nouvelles avec un témoin ou placebo (§ 2.2.2.4°), ou de comparer entre elles deux ou un très petit nombre de thérapies.

Dans le domaine industriel enfin, des situations beaucoup plus complexes, dans lesquelles intervient un plus grand nombre de facteurs, sont souvent envisagées, et font appel aux notions de surfaces de réponse (§ 2.4.1 et 2.4.2), de plans optimaux (§ 2.4.3), etc.

2.2 Les expériences à un facteur

2.2.1 Le choix des modalités

1° Cas d'un facteur qualitatif

Dans le cas d'un facteur qualitatif unique, le problème du choix des différentes modalités ou variantes ne se pose généralement pas, celles-ci étant définies en même temps que le but de l'expérience (comparaison de quelques variétés données de blé par exemple).

Il peut arriver cependant, notamment dans certaines études de sélection ou de génétique, qu'un choix doive être fait au départ parmi un grand nombre de variantes possibles (comparaison d'un nombre nécessairement limité de descendances, à choisir parmi un grand nombre de descendances disponibles, par exemple). Quand on ne possède pas d'autre critère et qu'on désire obtenir des informations relatives à l'ensemble de toutes les variantes considérées initialement, ce choix est généralement réalisé par tirage au sort ou échantillonnage, en conservant toujours le plus grand nombre possible de variantes.

On notera que, dans les éventuelles analyses de la variance relatives aux résultats de telles expériences, le critère de classification qui concerne un facteur dont les modalités ont été choisies de cette manière est un critère aléatoire [STAT2, § 9.3.1].

2° Cas d'un facteur quantitatif

Dans le cas d'un facteur quantitatif par contre, le problème du choix des modalités ou niveaux reste entier. Le plus souvent, les niveaux sont choisis, dans l'ensemble du domaine de variation qu'on désire étudier, selon une progression arithmétique (par exemple : 100, 200 et 300 kg d'azote par hectare) ou selon une progression géométrique au moins approximative (par exemple : 1, 2, 4 et 8 g, ou 1, 2, 5 et 10 g d'une matière active ou d'une substance de croissance donnée par plante).

D'une façon générale également, le nombre de niveaux choisis doit toujours être aussi élevé que possible, même si, en conséquence, le nombre de répétitions pour chacun des niveaux doit être considérablement réduit. En particulier, on observera que, si deux niveaux peuvent suffire pour mettre en évidence l'influence d'un facteur et, éventuellement, pour établir une relation linéaire entre ce facteur et les résultats de l'expérience, il faut disposer d'au moins trois niveaux pour pouvoir vérifier l'hypothèse de linéarité d'une telle relation et pour localiser un éventuel optimum.

2.2.2 Les témoins ou objets de référence

1° Notion de témoin

Lors de toute planification d'une expérience, on doit examiner l'opportunité d'introduire ou non, dans l'expérience, un ou plusieurs *témoins* ou *objets de référence*¹². En matière agronomique, ceux-ci peuvent être, par exemple, une ou quelques variétés largement utilisées dans la région considérée, un ensemble de parcelles qui ne sont soumises à aucun des traitements étudiés (parcelles sans engrais), un ensemble de parcelles qui sont soumises à un traitement classique, considéré comme point de comparaison (parcelles traitées avec un herbicide bien connu), etc.

Il faut cependant éviter d'inclure d'office un témoin dans une expérience quand celui-ci n'est pas essentiel pour atteindre l'objectif fixé au départ, et notamment quand on sait a priori que les différences par rapport au témoin sont considérables. Dans de telles conditions, la prise en considération d'un ou plusieurs témoins peut en effet être une source importante d'hétérogénéité et, parfois aussi, d'erreurs d'interprétation des résultats.

Dans une expérience de comparaison de fumures organisée sur des sols très pauvres, par exemple, on peut s'abstenir de prévoir l'existence de parcelles sans engrais. Le cas échéant, on introduira plutôt une fumure de référence couramment utilisée dans la région considérée, pour autant qu'une telle fumure existe. Et s'il s'impose, pour des raisons de vulgarisation ou de démonstration, de disposer de parcelles non traitées, on prévoira l'existence de telles parcelles en marge ou en bordure de l'expérience proprement dite, sans y consacrer nécessairement toute la place qui revient à chacun des autres objets envisagés.

L'exemple du paragraphe 6.5 et la photo 6 [DAGNELIE, 2009] illustrent bien une situation où la présence de parcelles témoins au sein même de l'expérience n'est pas indispensable.

2° Nombre de témoins

Si le témoin ou l'objet de référence constitue un des éléments essentiels de l'expérience, il peut être utile de lui consacrer plus d'importance qu'à chacun des autres objets. Quand on considère uniquement comme but de l'expérience la comparaison d'une série de p objets (p nouvelles variétés par exemple) avec un objet de référence (une ancienne variété par exemple), on peut démontrer que la précision des comparaisons est maximum lorsque le nombre de répétitions n_0 de l'objet de référence et le nombre de répétitions n de chacun des p autres objets sont liés par la relation :

$$n_0 = n \sqrt{p}.$$

¹² En anglais : *control, check, check treatment*.

Cette propriété conduit à adopter deux fois plus de répétitions pour l'objet de référence que pour chacun des autres objets quand ceux-ci sont au nombre de quatre ou cinq, trois fois plus de répétitions quand ils sont au nombre d'une dizaine, etc. Dans ce dernier cas, le gain de précision obtenu de cette façon peut atteindre 20 % environ.

⌈ Pour 10 objets en effet, y compris l'objet de référence, si on dispose par exemple de 60 unités expérimentales (60 parcelles ou 60 animaux), si on consacre six unités à chacun des 10 objets, et si la variance des unités expérimentales est égale à σ^2 , la variance de la différence entre la moyenne \bar{x}_i de l'un ou l'autre objet et la moyenne \bar{x}_0 de l'objet de référence est [STAT1, § 5.8.3 et 8.3.1] :

$$(1/6 + 1/6) \sigma^2 = \sigma^2/3.$$

Si par contre, dans les mêmes conditions, on consacre cinq unités expérimentales à chacun des neuf objets, à l'exclusion de l'objet de référence, et 15 unités à ce dernier, la variance de la différence de moyennes est :

$$(1/5 + 1/15) \sigma^2 = 4\sigma^2/15.$$

Cette valeur est inférieure de 20 % à $\sigma^2/3$.

⌋ D'autres solutions relatives à ce problème ont été envisagées par BECHHOFFER et TAMHANE [1983] et HORN [1979].

3° Témoins systématiques

Dans les différentes situations évoquées ci-dessus, le ou les témoins sont toujours considérés de la même façon que chacun des autres objets, notamment en ce qui concerne la répartition au hasard au sein du dispositif expérimental qui est choisi.

Il peut arriver cependant, surtout dans des champs d'expérience très hétérogènes, qu'il soit utile de répartir des parcelles témoins de façon systématique (par exemple, un témoin toutes les cinq ou six parcelles), voire même de telle sorte qu'au moins une parcelle témoin soit accolée à chaque parcelle qui n'est pas affectée au témoin (un témoin toutes les deux ou trois parcelles). Dans ce cas, il y a lieu de tenir compte du caractère systématique de la répartition des parcelles témoins au moment de l'analyse des résultats (§ 12.3.2).

4° Placebo et double aveugle

La question du ou des témoins, que nous avons envisagée jusqu'ici essentiellement dans le domaine agronomique, se présente d'une manière toute particulière dans le domaine médical.

En effet, déjà dans le cas le plus simple de la comparaison d'un groupe de patients recevant un médicament nouveau avec un groupe de patients témoins, ces derniers reçoivent en général un *placebo*¹³, c'est-à-dire une substance en principe

¹³ En anglais : *placebo*.

inactive présentée sous une forme identique à celle du médicament étudié. Le but poursuivi en adoptant une telle procédure est d'éliminer au maximum toute interférence d'origine psychologique notamment.

Mais en outre, le plus souvent, l'organisation est telle que, non seulement les patients, mais aussi le personnel médical et soignant et les responsables de la collecte et du traitement des informations issues de l'expérience ignorent quels sont les patients qui reçoivent effectivement le médicament étudié et quels sont ceux qui se voient attribuer le placebo. La répartition réelle des objets n'est alors connue que des personnes qui organisent l'expérience et qui doivent effectuer l'analyse finale des résultats et en tirer les conclusions. Une telle procédure est dite en *double aveugle*¹⁴.

5° Éthique

L'attribution d'un placebo à certains patients, ce qui peut impliquer une certaine absence de soins, soulève évidemment de sérieux problèmes éthiques [FREEDMAN et SHAPIRO, 1994; PALMER, 2002; SENN, 2002a].

Des considérations éthiques interviennent également dans le domaine de l'agro-alimentaire et en expérimentation animale [ELSNER *et al.*, 2001; LAROCHE et ROUSSELET, 1990; VEISSIER, 1999].

2.3 Les expériences factorielles et fractionnaires

2.3.1 Principes généraux

1° Nombres de facteurs et de modalités

Dans le cas des expériences qui font intervenir deux ou plusieurs facteurs, se posent non seulement le problème du choix des modalités de chacun des facteurs, y compris éventuellement un ou plusieurs témoins, mais aussi la question du choix du nombre de facteurs et du mode d'agencement des différentes modalités de chacun des facteurs avec les différentes modalités des autres facteurs.

Sur un plan théorique, on pourrait affirmer tout d'abord qu'il y a toujours intérêt à augmenter au maximum le nombre de facteurs, au même titre que le nombre de modalités de chacun des facteurs. Mais l'application de ce principe conduit très rapidement à prendre en considération un nombre considérable d'objets, alors que les moyens disponibles pour réaliser quelque expérience que se soit sont toujours limités.

Le plus souvent, le problème est en fait un problème d'équilibre entre les objectifs que l'expérimentateur souhaiterait atteindre et les moyens dont il dispose,

¹⁴ En anglais : *double-blind experiment*.

en temps, en personnel, etc., la réflexion englobant inévitablement des aspects économiques ou financiers.

2° Un facteur à la fois

En ce qui concerne la manière de combiner entre elles les diverses modalités des différents facteurs, une solution très simple consiste à faire évoluer chacun des facteurs *un à la fois*¹⁵, les autres facteurs étant maintenus constants dans chaque cas.

La figure 2.3.1 présente deux possibilités relatives au cas de deux facteurs à trois modalités chacun, avec un total de cinq objets. Dans cette figure, les symboles A_1 , A_2 et A_3 désignent les trois modalités du premier facteur, et B_1 , B_2 et B_3 les trois modalités du deuxième facteur.

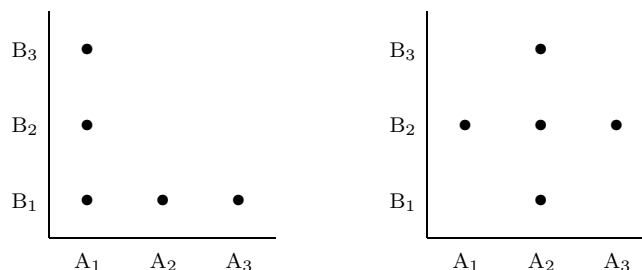


Figure 2.3.1. Représentation schématique de deux possibilités d'expériences à deux facteurs du type « un facteur à la fois ».

La première possibilité suppose que l'effet du premier facteur est étudié pour la première modalité (B_1) du deuxième facteur, et que l'effet du deuxième facteur est étudié pour la première modalité (A_1) du premier facteur. Elle s'applique indifféremment au cas des facteurs qualitatifs et quantitatifs¹⁶.

La deuxième possibilité, dite *en étoile* ou *radiale*¹⁷, concerne par contre plus particulièrement les facteurs quantitatifs, pour lesquels les modalités A_2 et B_2 sont effectivement intermédiaires entre A_1 et A_3 d'une part, et entre B_1 et B_3 d'autre part. Cette possibilité implique que chacun des deux facteurs est étudié au niveau intermédiaire de l'autre facteur.

Quelle que soit la procédure adoptée, l'approche « un facteur à la fois » présente l'inconvénient majeur de ne donner aucune information quant aux interactions qui peuvent éventuellement exister entre les facteurs et, à ce titre, n'est en général pas à conseiller.

¹⁵ En anglais : *one-factor-at-a-time*.

¹⁶ Dans le cas où deux modalités seulement sont considérées pour chacun des facteurs, supposés quantitatifs, cette structure est parfois appelée *plan de KOSHAL* (KOSHAL's design).

¹⁷ En anglais : *star design, radial design*.

[Des informations complémentaires peuvent être trouvées notamment dans un article de CZITROM [1999].

3° Expériences factorielles et non factorielles

Une deuxième solution a pour principe d'associer chacune des modalités d'un facteur à chacune des modalités de l'autre ou des autres facteurs. L'ensemble des objets constitue alors, dans le cas le plus simple de deux facteurs, un maillage carré ou rectangulaire complet. Les expériences organisées de cette manière sont dites *factorielles* ou, de façon plus précise, *factorielles complètes*¹⁸ (§ 2.3.2).

Ces expériences ont l'avantage de conduire, par l'analyse de la variance, à des décompositions et à des interprétations simples, en termes d'effets principaux et d'interactions [STAT2, § 10.2 et 11.2]. Elles ont cependant l'inconvénient d'introduire rapidement, pour plus de deux facteurs, des nombres très élevés d'objets.

Une solution intermédiaire entre l'approche « un facteur à la fois » et les expériences factorielles complètes consiste à ne prendre en considération qu'un sous-ensemble, judicieusement choisi, de toutes les combinaisons des différentes modalités des facteurs étudiés. De telles expériences sont qualifiées de *factorielles incomplètes* ou *factorielles fractionnaires*¹⁹ (§ 2.3.3).

D'autres solutions, non factorielles, peuvent être envisagées, en vue notamment d'atteindre d'autres objectifs que l'étude des effets principaux et des interactions. Tel est le cas pour les plans relatifs à l'étude des surfaces de réponse (§ 2.4.1), y compris le cas particulier des mélanges (§ 2.4.2), les plans optimaux (§ 2.4.3), les plans séquentiels (§ 2.4.4), etc.

Nous consacrerons quelques pages seulement à chacun de ces différents types d'expériences, qui pourraient justifier de bien plus longs développements.

2.3.2 Les expériences factorielles complètes

1° Exemple : facteurs et modalités

En vue de concrétiser les choses, en ce qui concerne les expériences factorielles complètes, considérons tout d'abord un exemple relativement simple. Il s'agit d'un cas que nous avons déjà envisagé antérieurement [STAT2, ex. 16.2.3 et 16.3.1], qui a trait à la pénétration de la soude dans le bois d'une essence forestière (*Autranella congolensis* (DE WILD.) A. CHEV.) et qui fait intervenir deux facteurs.

Les facteurs sont la température du bain de soude dans lequel des éprouvettes de bois sont plongées et la durée d'immersion des éprouvettes dans ce bain. Les modalités ou les niveaux de ces deux facteurs sont respectivement 20, 56 et 97 degrés centigrades, et 1 heure, 2 heures et 4 heures. Les neuf combinaisons température-durée sont toutes étudiées et constituent neuf objets.

¹⁸ En anglais : *factorial design*, *complete factorial design*.

¹⁹ En anglais : *incomplete factorial design*, *fractional factorial design*.

Ces neuf combinaisons peuvent être représentées dans un plan, par neuf points appelés *points expérimentaux*²⁰, comme l'indique la partie gauche de la figure 2.3.2. Ces points définissent un maillage complet, qui est ici rectangulaire et irrégulier. Les points extrêmes, de coordonnées (20, 1), (20, 4), (97, 1) et (97, 4), délimitent le *domaine expérimental* qui est étudié.

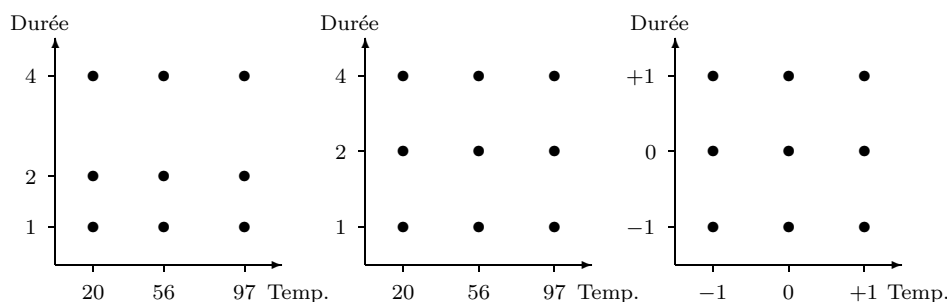


Figure 2.3.2. Pénétration de la soude dans le bois d'*Autranella congolensis* : différentes représentations graphiques des points expérimentaux.

2° Exemple : choix et codage des modalités

Dans l'exemple considéré, le choix des différentes modalités des deux facteurs est justifié par des considérations théoriques, qui portent à croire que la profondeur de pénétration de la soude dans le bois peut être exprimée en fonction des deux variables étudiées par une relation de la forme [GERKENS, 1963] :

$$y = c x_1^{b_1} x_2^{b_2},$$

c'est-à-dire aussi :

$$\log(y) = b_0 + b_1 \log(x_1) + b_2 \log(x_2),$$

x_1 étant la température absolue, x_2 la durée du traitement, et y la profondeur de pénétration.

Les valeurs 20, 56 et 97 d'une part, 1, 2 et 4 d'autre part ont en fait été choisies au départ de telle sorte que les points soient équidistants en termes de logarithmes. C'est ce qui apparaît dans le diagramme à échelles logarithmiques qui constitue la partie centrale de la figure 2.3.2, dont le maillage est strictement carré²¹.

Enfin, très souvent, dans le cas des facteurs quantitatifs à trois niveaux, les coordonnées des points expérimentaux équidistants sont conventionnellement codées en -1 , 0 et $+1$, comme le montre la partie droite de la figure 2.3.2.

²⁰ En anglais : *experimental point*.

²¹ On notera qu'en abscisses, la différence entre les deux premiers diagrammes de la figure 2.3.2 est peu marquée, en raison du fait que la transformation logarithmique porte sur les températures absolues, c'est-à-dire sur les températures centigrades majorées de 273°.

3° Structure des objets

D'une façon générale, la structure de l'ensemble des objets qui interviennent dans une expérience factorielle complète peut être représentée par une expression du type :

$$p^k p'^{k'} \dots ,$$

dans laquelle p, p', \dots désignent les nombres de modalités des différents facteurs, qualitatifs ou quantitatifs, et k, k', \dots les nombres de facteurs correspondants. Dans ces conditions, la somme :

$$k + k' + \dots ,$$

est le nombre total de facteurs, et le produit :

$$p^k p'^{k'} \dots ,$$

est le nombre total d'objets.

Selon ces principes, l'exemple que nous avons présenté et qui est relatif à deux facteurs comportant chacun trois modalités, et donc neuf objets, correspond à une expérience de type 3^2 . De même, on parle d'une expérience factorielle complète 2^4 quand quatre facteurs sont tous présents avec deux modalités, le nombre total d'objets étant égal à 16, et d'une expérience $2^2 3^2$ quand deux facteurs possèdent chacun deux modalités et, simultanément, deux autres facteurs possèdent chacun trois modalités, le nombre total d'objets étant égal à 36.

On peut noter à ce propos que, dans les expériences à plus de deux facteurs, le nombre de modalités de chacun des facteurs dépasse rarement la valeur 3, le nombre d'objets devenant sinon très rapidement considérable.

4° Maillage, domaine expérimental, points expérimentaux

D'une manière générale aussi, le maillage et le domaine expérimental d'une structure factorielle sont toujours rectangulaires ou carrés pour une expérience à deux facteurs, parallélépipédiques ou cubiques pour une expérience à trois facteurs, etc. La figure 2.3.3 présente, à titre d'exemples, les maillages cubiques d'expériences 2^3 et 3^3 .

Comme dans cette figure, les différentes modalités de chacun des facteurs sont très souvent codées en -1 et $+1$ dans le cas de deux modalités, quelle que soit la nature des facteurs, et en $-1, 0$ et $+1$ dans le cas de trois modalités équidistantes relatives à des facteurs quantitatifs.

Les trois premières colonnes de chacune des deux parties du tableau 2.3.1 mentionnent les coordonnées des différents points expérimentaux des deux schémas de la figure 2.3.3. La partie droite de ce tableau est toutefois limitée à 9 des 27 points de l'expérience 3^3 , les coordonnées des 18 autres points pouvant être obtenues en

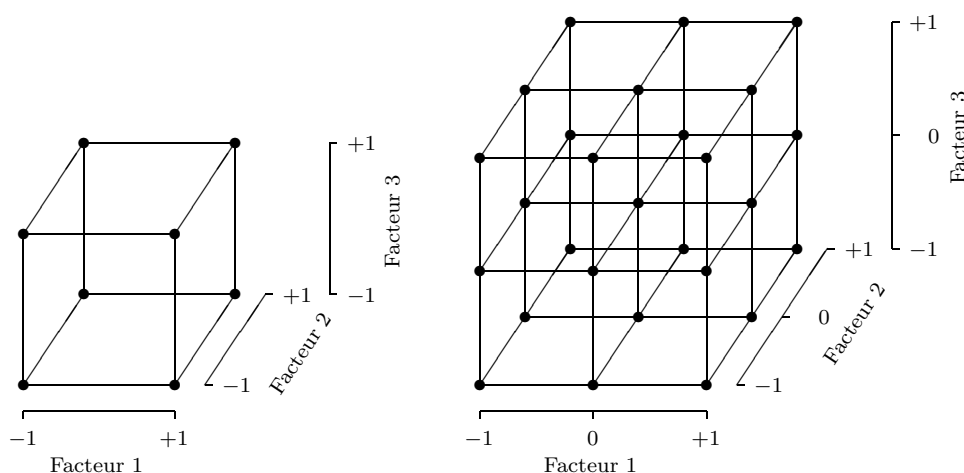


Figure 2.3.3. Représentation graphique des 8 et des 27 objets d'expériences factorielles complètes 2^3 et 3^3 .

Tableau 2.3.1. Définition des objets des expériences factorielles complètes 2^3 et 3^3 , et notations correspondantes.

Facteurs			Notations	Facteurs			Notations
1	2	3		1	2	3	
-1	-1	-1	111 (1)	-1	-1	-1	111
-1	-1	+1	112 c	-1	-1	0	112
-1	+1	-1	121 b	-1	-1	+1	113
-1	+1	+1	122 bc	-1	0	-1	121
+1	-1	-1	211 a	-1	0	0	122
+1	-1	+1	212 ac	-1	0	+1	123
+1	+1	-1	221 ab	-1	+1	-1	131
+1	+1	+1	222 abc	-1	+1	0	132
				-1	+1	+1	133
				⋮	⋮	⋮	⋮

remplaçant les valeurs -1 de la première colonne tout d'abord par 0 , puis par $+1$, sans modifier les deux autres colonnes.

5° Notations numériques

Indépendamment des valeurs -1 et $+1$ (et éventuellement 0), que nous venons de citer, différents systèmes de notations sont utilisés pour représenter individuellement les objets. Le système le plus simple est sans doute celui qui affecte les chiffres

1, 2, 3, ... aux différentes modalités de chacun des facteurs et qui juxtapose ces différents chiffres.

Selon ce principe, les neuf objets du cas 3^2 que nous avons envisagé en premier lieu à titre d'exemple seraient :

11, 12, 13, 21, 22, 23, 31, 32, 33.

Les premiers chiffres 1, 2 et 3 sont relatifs aux trois températures, et les deuxièmes chiffres 1, 2 et 3 aux trois durées d'immersion.

De même, le tableau 2.3.1 présente les notations qui concernent le cas 2^3 (111, 112, 121, ...) et, partiellement, le cas 3^3 (111, 112, 113, 121, ...).

6° Notations alphabétiques

Un deuxième système de notations, qui fait intervenir des lettres, est utilisé assez couramment pour les expériences 2^k . Son emploi se justifie surtout quand les facteurs étudiés sont du type « absence ou présence » de différentes substances ou de différents traitements, ainsi que dans l'optique des expériences factorielles fractionnaires (§ 2.3.3).

Si on considère par exemple trois facteurs consistant en l'adjonction ou non de trois additifs (peut-être trois acides aminés) à une même ration alimentaire de base, et si on note la présence des différents additifs respectivement par les lettres a, b et c, la seule lettre a désignerait l'objet correspondant à la ration de base plus le premier additif, la notation ab correspondrait à la ration de base plus le premier et le deuxième additif, etc. Conventionnellement aussi, le symbole (1) serait alors utilisé pour désigner l'absence de tout additif.

Les différents symboles relatifs au cas 2^3 et leurs correspondances avec les notations numériques sont mentionnés dans la partie gauche du tableau 2.3.1.

En dehors de tels cas de type « absence-présence », les lettres a, b, c, ... sont généralement affectées indifféremment à l'une ou l'autre modalité des facteurs qualitatifs et au niveau supérieur des facteurs quantitatifs.

7° Autres notations

D'autres systèmes particuliers sont également utilisés dans certains cas. Ainsi, dans une expérience 3^3 de fumure azotée, phosphorique et potassique, où les niveaux de chacun des trois facteurs sont un témoin (0) et deux doses différentes d'engrais (1 et 2), les 27 objets peuvent être désignés par les expressions :

$N_0P_0K_0, N_0P_0K_1, N_0P_0K_2, N_0P_1K_0, N_0P_1K_1, N_0P_1K_2, N_0P_2K_0, N_0P_2K_1, N_0P_2K_2,$
 $N_1P_0K_0, N_1P_0K_1, N_1P_0K_2, N_1P_1K_0, N_1P_1K_1, N_1P_1K_2, N_1P_2K_0, N_1P_2K_1, N_1P_2K_2,$
 $N_2P_0K_0, N_2P_0K_1, N_2P_0K_2, N_2P_1K_0, N_2P_1K_1, N_2P_1K_2, N_2P_2K_0, N_2P_2K_1, N_2P_2K_2.$

⊖ 8° Répétition unique

Les expériences factorielles complètes peuvent être réalisées avec plusieurs répétitions ou avec *une seule répétition* de chacun des objets, à laquelle correspond aussi l'appellation *répétition simple* ou *unique*^{22 23}. Dans ce dernier cas, les expériences factorielles ne permettent pas d'obtenir des estimations simples de la variance résiduelle, qui sont cependant nécessaires à l'exécution d'éventuels tests d'hypothèses et à la détermination de limites de confiance.

Dans le cas 2^k , on tente parfois de remédier à cette situation en introduisant un point expérimental supplémentaire, situé au centre du réseau factoriel et faisant l'objet d'un petit nombre de répétitions. Pour la partie gauche de la figure 2.3.3, il pourrait s'agir d'un point $(0, 0, 0)$ situé au centre du cube et répété trois ou quatre fois.

Il faut être conscient du fait qu'on n'affecte ainsi qu'un très petit nombre de degrés de liberté à l'estimation de la variance résiduelle, ce qui limite considérablement la puissance des tests d'hypothèses et la qualité des déterminations de limites de confiance [DAGNELIE, 2000].

⊖ 9° Matrice d'expérience

Les ensembles de valeurs -1 et $+1$, ou $-1, 0$ et $+1$ qui apparaissent dans le tableau 2.3.1 sont souvent considérés comme constituant des matrices et sont alors appelés *matrices d'expérience*²⁴. Ces matrices sont fréquemment désignées par le symbole Ξ (ksi majuscule).

L'ensemble suivant est un autre exemple de matrice d'expérience :

$$\Xi = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 0 \\ -1 & +1 \\ 0 & -1 \\ +1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Cette matrice correspond à la partie gauche de la figure 2.3.1 (cas « un facteur à la fois »), les niveaux des deux facteurs étant codés en $-1, 0$ et $+1$.

⊖ 10° Orthogonalité

Un ensemble d'objets est dit *orthogonal* et une expérience est dite *orthogonale*²⁵ quand les sommes des produits des termes de tous les couples de colonnes de la matrice sont nulles.

²² En anglais : *single replication*.

²³ L'utilisation du mot « répétition » pour une « répétition unique » est évidemment impropre, mais est cependant assez courante.

²⁴ En anglais : *experiment matrix*.

²⁵ En anglais : *orthogonal design*.

On peut vérifier que tel est bien le cas pour les deux exemples du tableau 2.3.1, mais que, par contre, il n'en est pas ainsi en ce qui concerne la matrice que nous venons de présenter, la somme des produits étant égale à -1 . D'une manière plus générale d'ailleurs, on peut facilement montrer que les structures factorielles complètes sont toutes orthogonales.

La condition d'*orthogonalité*²⁶ d'un ensemble d'objets ou d'une expérience implique notamment que le produit $\Xi' \Xi$ est une matrice diagonale, Ξ' étant la transposée de Ξ . De ce fait, cette condition simplifie considérablement l'analyse des résultats, dans la mesure où elle permet d'identifier sans problème les contributions des différents facteurs et éventuellement leurs différentes interactions, par analyse de la variance ou par régression multiple.

⊖ 2.3.3 Les expériences factorielles fractionnaires

1° Principe

Comme nous l'avons signalé au paragraphe 2.3.1.3°, les expériences factorielles fractionnaires ou incomplètes sont en quelque sorte un intermédiaire entre les expériences de type « un facteur à la fois » (§ 2.3.1.2°) et les expériences factorielles complètes (§ 2.3.2). Elles ont pour principe de recourir à des sous-ensembles d'objets (ou de points expérimentaux) des expériences factorielles complètes, choisis en général de telle façon qu'il soit possible d'estimer l'effet individuel de chacun des facteurs et, éventuellement, leurs interactions d'ordre inférieur (interactions des facteurs deux à deux par exemple).

Les sous-ensembles ou les fractions qui sont étudiés sont parfois appelés également *répétitions fractionnaires* ou *incomplètes* ou *partielles*²⁷.

Ce type d'expérience est utilisé principalement dans le domaine industriel, où de nombreux facteurs sont souvent considérés simultanément.

2° Cas 2³

Envisageons pour commencer le cas d'une expérience à trois facteurs de type 2³, pour laquelle on ne disposerait que de quatre observations, relatives aux objets a, b, c et abc, les objets qui ne sont pas pris en considération étant (1), ab, ac et bc (selon les notations du paragraphe 2.3.2.6°). La figure 2.3.4 montre que les objets étudiés se trouvent, les uns par rapport aux autres, en diagonale sur les différentes faces du cube délimitant le domaine expérimental.

On peut démontrer qu'il n'est pas possible dans ce cas d'identifier exactement, d'une manière générale, les différents facteurs, ni leurs interactions. Le facteur A est en effet confondu avec l'interaction BC, les deux éléments ne pouvant pas être

²⁶ En anglais : *orthogonality*.

²⁷ En anglais : *fractional replication*.

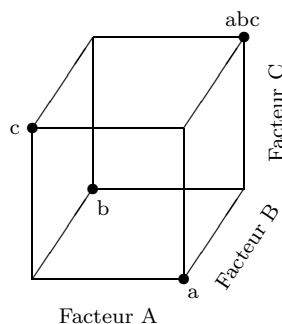


Figure 2.3.4. Représentation graphique des objets pris en considération dans une expérience factorielle fractionnaire 2^3 .

dissociés, et il en est de même pour le facteur B et l'interaction AC, et pour le facteur C et l'interaction AB.

On dira que l'interaction BC est un *alias*²⁸ du facteur A, ou que A et BC sont deux alias, ou sont *aliasés*²⁹. De même, l'interaction AC est un alias du facteur B, et l'interaction AB un alias du facteur C.

3° Démonstration

La démonstration de ces propriétés peut être faite en partant du modèle d'analyse de la variance à trois critères de classification [STAT2, § 11.2.3] :

$$X_{ijkl} = m_{...} + a_i + b_j + c_k + (ab)_{ij} + (ac)_{ik} + (bc)_{jk} + (abc)_{ijk} + D_{ijkl},$$

dans lequel X_{ijkl} désigne les variables aléatoires associées aux différentes valeurs observées x_{ijkl} , $m_{...}$ est une moyenne théorique générale, a_i , b_j et c_k sont les effets principaux des trois facteurs, $(ab)_{ij}$, $(ac)_{ik}$ et $(bc)_{jk}$ sont les termes d'interaction de deux facteurs, $(abc)_{ijk}$ est l'interaction des trois facteurs, et D_{ijkl} désigne les variables aléatoires résiduelles relatives aux différentes observations.

Dans cette optique, nous considérons plus particulièrement la différence :

$$(x_a + x_{abc})/2 - (x_b + x_c)/2,$$

c'est-à-dire la différence entre la moyenne des observations relatives aux deux objets qui concernent la deuxième modalité du facteur A (objets a et abc : partie droite de la figure 2.3.4) et la moyenne des observations relatives aux deux objets qui concernent la première modalité du facteur A (objets b et c : partie gauche de la figure 2.3.4).

²⁸ En anglais : *alias*.

²⁹ En anglais : *aliased*.

Intuitivement, on peut penser que cette différence, qui s'apparente à la différence de moyennes :

$$\bar{x}_{2\dots} - \bar{x}_{1\dots},$$

au sens de l'analyse de la variance [STAT2, § 11.2.2], est une mesure de l'influence du seul facteur A. Mais en fait, il n'en est pas ainsi.

En appliquant le modèle d'analyse de la variance, on peut noter que les observations x_a , x_b , x_c et x_{abc} correspondent respectivement aux expressions :

$$m_{\dots} + a_2 + b_1 + c_1 + (ab)_{21} + (ac)_{21} + (bc)_{11} + (abc)_{211} + D_{211},$$

$$m_{\dots} + a_1 + b_2 + c_1 + (ab)_{12} + (ac)_{11} + (bc)_{21} + (abc)_{121} + D_{121},$$

$$m_{\dots} + a_1 + b_1 + c_2 + (ab)_{11} + (ac)_{12} + (bc)_{12} + (abc)_{112} + D_{112},$$

et $m_{\dots} + a_2 + b_2 + c_2 + (ab)_{22} + (ac)_{22} + (bc)_{22} + (abc)_{222} + D_{222},$

le quatrième indice des termes D_{ijkl} étant supprimé, puisqu'on ne dispose que d'une observation pour chacun des quatre objets.

On peut tenir compte en outre du fait que les sommes suivantes, relatives aux effets principaux et aux termes d'interaction des différents facteurs, sont toutes nulles par définition [STAT2, § 10.3.2] :

$$a_1 + a_2 = b_1 + b_2 = c_1 + c_2 = 0,$$

$$(ab)_{11} + (ab)_{12} = (ab)_{11} + (ab)_{21} = (ab)_{12} + (ab)_{22} = (ab)_{21} + (ab)_{22} = 0,$$

$$(abc)_{111} + (abc)_{112} = (abc)_{111} + (abc)_{121} = (abc)_{111} + (abc)_{211} = \dots = 0,$$

la deuxième ligne, relative à l'interaction AB, pouvant être transposée aussi aux cas des interactions AC et BC.

En négligeant enfin les termes aléatoires D_{ijk} , qui sont de moyennes nulles, on obtient le résultat :

$$(x_a + x_{abc})/2 - (x_b + x_c)/2 = 2a_2 + 2(bc)_{22}.$$

Il apparaît donc bien que l'effet principal a_2 du premier facteur et l'effet d'interaction $(bc)_{22}$ des deux autres facteurs sont indissociables.

On peut évidemment établir de la même manière des résultats équivalents pour b_2 et $(ac)_{22}$, et pour c_2 et $(ab)_{22}$. Les trois effets principaux a_2 , b_2 et c_2 ne peuvent donc être estimés valablement que si les trois interactions de deux facteurs sont nulles, ce qui correspond à l'idée d'un modèle additif [STAT2, § 11.2.4] ou, individuellement pour chacun des facteurs, si dans chaque cas, l'interaction alias du facteur envisagé est nulle. On obtient alors :

$$\hat{a}_2 = (x_a - x_b - x_c + x_{abc})/4, \quad \hat{b}_2 = (-x_a + x_b - x_c + x_{abc})/4,$$

et $\hat{c}_2 = (-x_a - x_b + x_c + x_{abc})/4.$

On notera aussi que des résultats strictement identiques peuvent être obtenus en partant des objets (1), ab, ac et ad, au lieu de a, b, c et abc.

Quant à l'interaction des trois facteurs, elle n'apparaît nulle part et nécessiterait, pour pouvoir être estimée, de disposer de l'ensemble des huit objets, c'est-à-dire de l'expérience factorielle complète.

4° Cas 2^4

Des résultats tout à fait comparables peuvent être établis pour les autres expériences de la série 2^k .

Pour quatre facteurs, on peut prendre en considération soit les huit objets suivants :

$$a, b, c, d, abc, abd, acd, bcd,$$

soit l'ensemble complémentaire :

$$(1), ab, ac, ad, bc, bd, cd, abcd.$$

Dans un cas comme dans l'autre, on peut démontrer que les effets principaux des quatre facteurs se confondent avec les interactions de trois facteurs, et que les interactions de deux facteurs se confondent entre elles deux à deux. Plus concrètement, si on lie les alias par le symbole \leftrightarrow , on a :

$$A \leftrightarrow BCD, \quad B \leftrightarrow ACD, \quad C \leftrightarrow ABD, \quad D \leftrightarrow ABC,$$

et

$$AB \leftrightarrow CD, \quad AC \leftrightarrow BD, \quad AD \leftrightarrow BC.$$

Les effets principaux peuvent donc être estimés si on suppose que les interactions de trois facteurs sont nulles, et les interactions de deux facteurs (interactions simples) ne peuvent pas être estimées individuellement.

5° Cas 2^5

De la même manière, pour cinq facteurs, on peut prendre en considération les 16 objets :

$$a, b, c, d, e, abc, abd, abe, acd, ace, ade, bcd, bce, bde, cde, abcde,$$

ou l'ensemble complémentaire :

$$(1), ab, ac, ad, ae, bc, bd, be, cd, ce, de, abcd, abce, abde, acde, bcde.$$

Dans les deux cas, les effets principaux des cinq facteurs sont confondus avec les interactions de quatre facteurs, et les dix interactions de deux facteurs sont

confondues avec les interactions de trois facteurs :

$$\begin{aligned} & A \leftrightarrow BCDE, \quad B \leftrightarrow ACDE, \quad C \leftrightarrow ABDE, \quad D \leftrightarrow ABCE, \quad E \leftrightarrow ABCD, \\ \text{et} \quad & AB \leftrightarrow CDE, \quad AC \leftrightarrow BDE, \quad AD \leftrightarrow BCE, \quad AE \leftrightarrow BCD, \quad BC \leftrightarrow ADE, \\ & BD \leftrightarrow ACE, \quad BE \leftrightarrow ACD, \quad CD \leftrightarrow ABE, \quad CE \leftrightarrow ABD, \quad DE \leftrightarrow ABC. \end{aligned}$$

On peut donc estimer les effets principaux en supposant que les interactions de quatre facteurs sont nulles, et les interactions de deux facteurs en supposant que les interactions de trois facteurs sont nulles.

On remarquera en outre que, dans les différents exemples envisagés, les objets qui constituent les différents sous-ensembles sont toujours tous définis soit par un nombre impair de lettres, soit par un nombre pair de lettres, y compris l'objet (1).

6° Autres cas : 2^k et 3^k

Les sous-ensembles d'objets que nous avons examinés jusqu'à présent sont tous des *moitiés* ou des *demi-répétitions*³⁰ d'expériences factorielles complètes. Mais on peut aussi envisager des quarts, des huitièmes, . . . de répétitions. Les huit objets suivants constituent par exemple le quart d'une expérience factorielle complète 2^5 :

$$a, b, ce, de, acd, bcd, abce, abde.$$

D'une façon générale, on parle d'un ensemble 2^{k-h} à propos de la fraction $1/2^h$ d'une expérience factorielle complète 2^k . Les quatre exemples que nous avons considérés jusqu'à présent sont respectivement des expériences 2^{3-1} (4 objets), 2^{4-1} (8 objets), 2^{5-1} (16 objets) et 2^{5-2} (8 objets).

D'autre part, on peut appliquer les mêmes principes aux expériences factorielles de la série 3^k , en considérant des tiers, des neuvièmes, . . . d'expériences complètes, et aussi aux expériences factorielles mixtes du type $2^k 3^{k'}$ notamment. Les neuf objets suivants constituent par exemple le tiers d'une expérience factorielle 3^3 , c'est-à-dire une expérience 3^{3-1} , les notations utilisées étant celles du paragraphe 2.3.2.5° :

$$111, 122, 133, 213, 221, 232, 312, 323, 331.$$

La figure 2.3.5 illustre cette possibilité, en montrant que trois points expérimentaux sont ainsi choisis selon des dispositions différentes dans chacun des neuf plans horizontaux et verticaux. Horizontalement, il s'agit d'une diagonale dans le plan inférieur et de deux triangles isocèles orientés différemment dans les deux autres plans. Et il en est de même verticalement, de gauche à droite avec une diagonale dans le plan latéral gauche, et d'avant en arrière avec une diagonale dans le plan arrière.

³⁰ En anglais : *half fraction*, *half replication*.

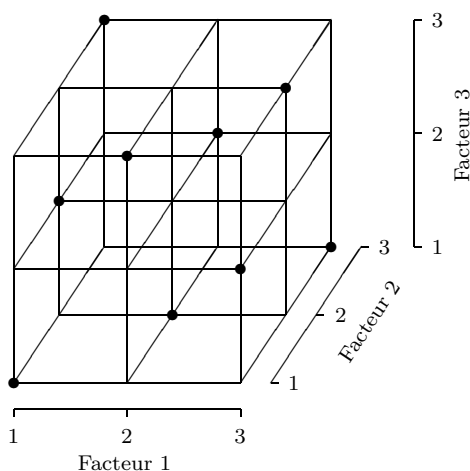


Figure 2.3.5. Représentation graphique des objets pris en considération dans une expérience factorielle fractionnaire 3^{3-1} .

Dans les deux cas qui viennent d'être considérés (expérience 2^{5-2} en huit objets et expérience 3^{3-1} en neuf objets), les différents facteurs principaux peuvent être estimés quand toutes les interactions sont nulles.

7° Résolution

Les expériences factorielles fractionnaires peuvent être utilement caractérisées par leur niveau de *résolution*³¹, qui est déterminé en fonction du mode de construction adopté, dont nous parlerons au paragraphe 10.1.5, et qui permet de savoir quels sont les éléments qui peuvent être estimés. En pratique, les niveaux de résolution les plus importants sont les niveaux III, IV et V.

Les expériences de résolution III permettent d'estimer tous les effets principaux, moyennant l'hypothèse que toutes les interactions sont nulles. Tel est le cas pour l'expérience 2^{3-1} que nous avons examinée en détail ci-dessus, et aussi pour les expériences 2^{5-2} et 3^{3-1} que nous venons d'évoquer.

Les expériences de résolution IV permettent d'estimer tous les effets principaux, moyennant l'hypothèse, moins restrictive, que toutes les interactions de trois facteurs ou plus sont nulles. Les interactions de deux facteurs ne peuvent pas être estimées individuellement, mais elles ne sont pas supposées nulles. L'expérience 2^{4-1} que nous avons introduite en deuxième lieu en est un exemple.

Enfin, les expériences de résolution V permettent d'estimer tous les effets principaux et toutes les interactions de deux facteurs, moyennant l'hypothèse que toutes

³¹ En anglais : *resolution*.

les interactions de trois facteurs ou plus sont nulles. Tel est le cas de l'expérience 2^{5-1} que nous avons également présentée.

Un principe général très simple consiste à considérer que, si on désigne par I les effets principaux, par II les interactions de deux facteurs, par III les interactions de trois facteurs, etc., les expériences de résolution III confondent les effets I et II ($\text{III} = \text{I} + \text{II}$), les expériences de résolution IV confondent les effets I et III d'une part et les effets II entre eux d'autre part ($\text{IV} = \text{I} + \text{III}$ et $\text{IV} = \text{II} + \text{II}$), etc.

À titre d'indication, le tableau 2.3.2 donne les nombres minimums d'objets qui doivent être pris en considération dans les expériences 2^k , en vue d'obtenir des résolutions III, IV et V, pour des nombres de facteurs allant de 3 à 10, selon RAGHAVARAO [1971].

Tableau 2.3.2. Nombres totaux d'objets et nombres minimums d'objets à prendre en considération en vue d'obtenir des résolutions III, IV et V dans les expériences 2^k , pour différents nombres de facteurs (k).

Nb. de facteurs	Nb. tot. d'objets	Nb. min. pour		
		III	IV	V
3	8	4	8	8
4	16	8	8	16
5	32	8	16	16
6	64	8	16	32
7	128	8	16	64
8	256	16	16	64
9	512	16	32	128
10	1.024	16	32	128

8° Plans saturés et sursaturés, plans de PLACKETT et BURMAN

Le premier plan d'expérience factorielle fractionnaire que nous avons envisagé (fraction $1/2$ d'une expérience 2^3) peut être qualifié de *saturé*³², en raison du fait que le nombre d'éléments qu'il permet d'estimer correspond exactement au nombre de degrés de liberté qui lui est associé. Avec quatre objets, et donc quatre observations, et aussi trois degrés de liberté, ce plan permet en effet d'estimer trois éléments, à savoir les effets principaux des trois facteurs.

D'une manière plus générale, il en est de même pour une série d'autres plans de résolution III qui permettent d'estimer les effets principaux de k facteurs à partir de $k + 1$ objets, quand $k + 1$ est un multiple de 4 (effets de sept facteurs estimés à partir de huit objets et donc huit observations, effets de 11 facteurs estimés à partir de 12 objets et donc 12 observations, etc.). Ces schémas d'expériences sont

³² En anglais : *saturated design*.

connus sous le nom de *plans de PLACKETT et BURMAN*³³ [1946]. La notion de *matrice d'HADAMARD*³⁴ leur est souvent associée.

Il faut noter toutefois que ces plans présentent le double inconvénient de ne fournir aucune information, d'une part, quant aux interactions qui peuvent exister entre les facteurs, et d'autre part, quant à l'ordre de grandeur des variations résiduelles.

On peut remarquer que le plan 2^{5-1} présenté ci-dessus et de résolution V est aussi saturé, puisqu'avec 16 objets et donc 15 degrés de liberté, il permet d'estimer les cinq facteurs et les dix interactions de deux facteurs.

En outre, des plans dits *sursaturés*³⁵ ont été proposés en vue d'étudier des nombres de facteurs supérieurs aux nombres d'objets (ou aux nombres d'objets diminués d'une unité). Des facteurs doivent alors être aliasés entre eux.

Ces divers plans correspondent à l'objectif de criblage ou de « *screening* » dont il a été question au paragraphe 1.2.2.4°.

9° Compléments

Nous donnerons ultérieurement un exemple concret d'expérience factorielle fractionnaire (§ 5.5.5), ainsi que quelques indications quant aux principes de construction des ensembles factoriels fractionnaires, en relation avec la notion de confusion d'effets (§ 10.1.5).

D'autres informations peuvent être trouvées dans certains des ouvrages qui ont été cités dans l'introduction générale [KUEHL, 2000; MONTGOMERY, 2008], dans certains livres spécialisés [COLLOMBIER, 1996; DEY et MUKERJEE, 1999; MCLEAN et ANDERSON, 1984], dans divers articles relativement généraux [CHEN *et al.*, 1993; PRVAN et STREET, 2002], et dans des articles plus particuliers tels que ceux d'EDWARDS et MEE [2011], KOUKOUVINOS *et al.* [2011], et WANG [2007]³⁶.

Nous ajoutons encore que des sous-ensembles d'objets d'expériences factorielles sont parfois pris en considération sans qu'ils constituent des ensembles fractionnaires au sens où nous les avons définis ci-dessus et sans qu'ils possèdent les propriétés de tels ensembles. Il en est ainsi par exemple, en matière agronomique, pour les expériences de comparaison de fumures qui sont qualifiées de *soustractives*.

Ces expériences sont généralement constituées d'un témoin, d'une fumure complète et d'une série de fumures dont seul un élément est chaque fois exclu. Pour l'azote, le phosphore et le potassium, par exemple, les objets considérés sont un

³³ En anglais : PLACKETT-BURMAN's design.

³⁴ En anglais : HADAMARD's matrix.

³⁵ En anglais : supersaturated design.

³⁶ Sans vouloir en aucune façon présenter une bibliographie exhaustive des différents sujets abordés, nous ajoutons fréquemment, aux références générales, quelques références relatives à certains points particuliers.

témoin et les quatre fumures NP, NK, PK et NPK, ou encore, en utilisant les notations des paragraphes 2.3.2.5° et 2.3.2.6°, les objets :

$$111, 221, 212, 122, 222 \quad \text{ou} \quad (1), np, nk, pk, npk.$$

10° Approche TAGUCHI

Les *plans de TAGUCHI*³⁷ se situent en marge des schémas factoriels fractionnaires classiques, dont ils sont largement inspirés. Ces plans ont connu un essor important à la fin du vingtième siècle, mais ils ont aussi été l'objet de nombreuses controverses [BISGAARD, 1996; NAIR, 1992; TAGUCHI, 1987; VINING et MYERS, 1990].

Ces plans ont été conçus et appliqués essentiellement en relation avec les problèmes de contrôle ou de maîtrise de la qualité, et sont entourés de diverses considérations qui conduisent à parler souvent d'une *approche* ou d'une *méthode* de TAGUCHI, plutôt que des *plans* de TAGUCHI [ALEXIS et ALEXIS, 2000; MATHIEU et PHAN-TAN-LUU, 1997b; PILLET, 1997].

2.4 Les autres expériences à deux ou plusieurs facteurs

⊖ 2.4.1 L'étude des surfaces de réponse

1° Principe

Pour k facteurs quantitatifs, susceptibles d'être considérés comme k variables explicatives x_1, x_2, \dots, x_k , on appelle *surface de réponse*³⁸ la surface qui correspond à l'équation :

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_k),$$

mettant en relation la réponse observée à l'issue de l'expérience y (rendement par exemple) et les variables explicatives x_1, x_2, \dots, x_k (doses d'engrais par exemple).

De telles surfaces peuvent être des plans ou des hyperplans, dans le cas d'équations du premier degré, du type :

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k,$$

ou des surfaces quadratiques (paraboloïdes, etc.), dans le cas d'équations du deuxième degré, telles que, pour deux facteurs :

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_1^2 + b_4 x_2^2 + b_5 x_1 x_2.$$

³⁷ En anglais : TAGUCHI's design.

³⁸ En anglais : response surface.

D'autres types d'équations, qui font intervenir par exemple les variables x_1, \dots, x_k et leurs racines carrées $\sqrt{x_1}, \dots, \sqrt{x_k}$, ou qui sont exprimées en termes de logarithmes, sont aussi utilisés dans certains cas.

2° Expériences factorielles

Les expériences factorielles complètes et fractionnaires de la série 2^k , dont nous avons parlé au cours des paragraphes 2.3.2 et 2.3.3, permettent d'estimer facilement des surfaces de réponse du premier degré, par un processus de régression multiple [STAT2, § 16.2 et 16.3; DAGNELIE, 1986, chap. 4]. De même, les expériences factorielles complètes ou fractionnaires de la série 3^k permettent d'estimer des surfaces de réponse du deuxième degré.

Dans le cas 2^k , l'adjonction d'observations supplémentaires situées au centre du schéma factoriel, à laquelle nous avons fait allusion au paragraphe 2.3.2.8°, offre aussi la possibilité de vérifier l'éventuelle linéarité ou non-linéarité de la relation entre les facteurs et la variable observée. Le paragraphe 5.5.2 en donne un exemple.

3° Plans composites centrés : deux et trois facteurs

D'autres structures plus particulières ont été proposées en vue d'estimer avec un maximum de précision des surfaces de réponse quadratiques et, par leur intermédiaire, des conditions optimales de production ou de transformation par exemple.

Les *plans composites centrés*³⁹ de BOX et WILSON [1951] ont pour principe d'associer chaque fois un schéma de type « un facteur à la fois », dans sa version en étoile ou radiale (§ 2.3.1.2°), et un schéma factoriel de la série 2^k (§ 2.3.2.3°). La figure 2.4.1 en donne une représentation graphique dans le cas de deux et de trois facteurs, pour des valeurs des variables x_1, x_2 et x_3 codées en -1 et $+1$ en ce qui concerne la partie factorielle du dispositif.

Pour deux facteurs, autour du point central $(0, 0)$, les coordonnées des quatre points factoriels sont :

$$(-1, -1), (-1, +1), (+1, -1), (+1, +1);$$

et les coordonnées des quatre points radiaux sont :

$$(-\sqrt{2}, 0), (+\sqrt{2}, 0), (0, -\sqrt{2}), (0, +\sqrt{2}).$$

Les huit points périphériques sont tous équidistants du point central et sont les sommets d'un octogone régulier de rayon $\sqrt{2}$.

Dans le cas de trois facteurs, autour du point central $(0, 0, 0)$, les coordonnées des huit points factoriels sont :

$$\begin{aligned} &(-1, -1, -1), (-1, -1, +1), (-1, +1, -1), (-1, +1, +1), \\ &(+1, -1, -1), (+1, -1, +1), (+1, +1, -1), (+1, +1, +1); \end{aligned}$$

³⁹ En anglais : *central composite design*.

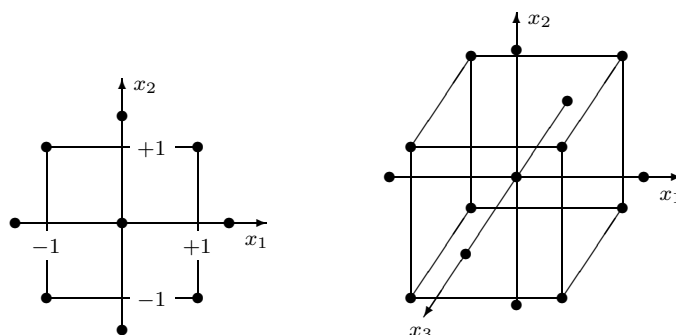


Figure 2.4.1. Représentation graphique des points expérimentaux des plans composites centrés relatifs à deux et à trois facteurs.

et les coordonnées des six points radiaux sont :

$$\begin{aligned} &(-1,682, 0, 0), (0, -1,682, 0), (0, 0, -1,682), \\ &(+1,682, 0, 0), (0, +1,682, 0), (0, 0, +1,682). \end{aligned}$$

Les 14 points périphériques, qui ne sont pas strictement équidistants du point central, sont les sommets d'un polyèdre constitué de 24 faces triangulaires.

4° Plans composites centrés : k facteurs, isovariance

D'une manière générale, pour k facteurs, les plans composites centrés sont constitués d'un point central situé à l'origine, de $2k$ points radiaux situés à une même distance Δx de l'origine, et de 2^k points factoriels situés à une distance \sqrt{k} de l'origine, soit un total de $1 + 2k + 2^k$ points expérimentaux.

La distance Δx est généralement fixée à $\sqrt[4]{2^k}$, ce qui donne $\sqrt{2}$ dans le cas de deux facteurs et $\sqrt[4]{8}$ ou 1,682 dans le cas de trois facteurs. Le choix de cette valeur a pour but d'assurer la propriété dite d'*isovariance par rotation* ou de *rotatabilité*⁴⁰. Cette propriété consiste à avoir une même précision dans l'estimation de la variable dépendante y , à l'aide de l'équation de la surface de réponse, en tous les points situés à une même distance de l'origine, quelle que soit la direction.

Le plus souvent, le point central $(0, 0, \dots, 0)$ est répété un certain nombre de fois, dans le but notamment de disposer d'une estimation de la variation résiduelle, alors que les autres points expérimentaux ne sont pas l'objet de répétitions. En outre, pour des nombres importants de facteurs, on peut envisager de remplacer la partie factorielle complète des plans composites par des ensembles factoriels fractionnaires. La distance Δx doit éventuellement être adaptée en conséquence, en vue de maintenir la propriété d'isovariance.

⁴⁰ En anglais : *rotatability*.

Par comparaison avec les expériences factorielles complètes 3^k , les plans composites ont l'avantage de nécessiter moins de points expérimentaux (par exemple 15 points au lieu de 27, dans le cas de trois facteurs). Mais il faut noter qu'ils présentent cependant l'inconvénient de toujours exiger cinq niveaux différents pour chacun des facteurs ($-\Delta x$, -1 , 0 , $+1$ et $+\Delta x$), au lieu de trois dans le cas des expériences factorielles (-1 , 0 et $+1$), ce qui peut parfois constituer un sérieux handicap.

5° Plans de BOX et BEHNKEN

Les *plans de BOX et BEHNKEN*⁴¹ [1960] permettent de remédier à l'inconvénient qui vient d'être signalé, en revenant à trois niveaux pour chacun des facteurs. La figure 2.4.2 présente le cas de trois facteurs.

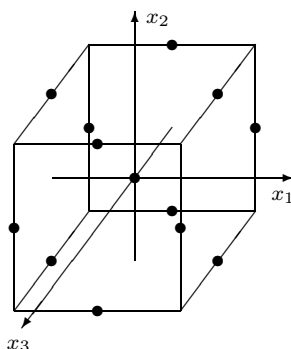


Figure 2.4.2. Représentation graphique des points expérimentaux du plan de BOX et BEHNKEN à trois facteurs.

On constate qu'outre le point central de coordonnées $(0, 0, 0)$, le dispositif de BOX et BEHNKEN est constitué dans ce cas de 12 points, qui se situent au milieu des 12 arêtes du cube délimitant le domaine expérimental. On peut aussi remarquer que ces 12 points forment en fait trois ensembles factoriels 2^2 , relatifs aux trois couples de facteurs, chaque fois au niveau intermédiaire du facteur qui n'intervient pas dans l'ensemble factoriel 2^2 considéré. Il s'agit des groupes de points suivants, respectivement pour x_1 et x_2 , pour x_1 et x_3 , et pour x_2 et x_3 :

$$\begin{aligned} &(-1, -1, 0), \quad (-1, +1, 0), \quad (+1, -1, 0), \quad (+1, +1, 0), \\ &(-1, 0, -1), \quad (-1, 0, +1), \quad (+1, 0, -1), \quad (+1, 0, +1), \\ \text{et} \quad &(0, -1, -1), \quad (0, -1, +1), \quad (0, +1, -1), \quad (0, +1, +1). \end{aligned}$$

⁴¹ En anglais : BOX-BEHNKENS's design.

Tous les points extérieurs se trouvent ici à une même distance $\sqrt{2}$ du point central et constituent un polyèdre à 14 faces (huit faces triangulaires et six faces carrées), parfois appelé cuboctaèdre. En outre, comme dans le cas des plans composites, le point central est en général l'objet de plusieurs répétitions.

Ce type de plan peut être généralisé à un nombre quelconque de facteurs. Pour quatre facteurs par exemple, il s'agit de 25 points expérimentaux dont les coordonnées sont toutes, en dehors du point central, constituées de deux valeurs nulles et deux valeurs égales à -1 ou $+1$:

$$(-1, -1, 0, 0), \quad (-1, +1, 0, 0), \quad (+1, -1, 0, 0), \quad (+1, +1, 0, 0), \quad \dots$$

6° Plans de DOEHLERT

Les plans de DOEHLERT ⁴² [1970] sont basés sur un maillage triangulaire, et non plus carré ou rectangulaire. La figure 2.4.3 en donne deux illustrations, relatives aux cas de deux et de trois facteurs.

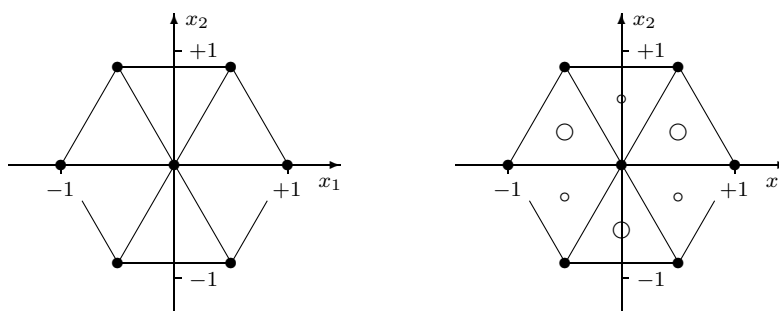


Figure 2.4.3. Représentation graphique des points expérimentaux des plans de DOEHLERT à deux et à trois facteurs (vue en plan).

Pour deux facteurs, il s'agit d'un point central, éventuellement répété, et des six sommets d'un hexagone régulier de rayon 1. Cette disposition implique la prise en considération de cinq niveaux pour le premier facteur et de trois niveaux seulement pour le deuxième facteur, les différents niveaux étant équidistants dans un cas comme dans l'autre.

Quant au cas de trois facteurs, nous n'en donnons qu'une vue en plan. Les sept points noirs, disposés de la même manière que pour deux facteurs, se trouvent dans le plan (x_1, x_2) , c'est-à-dire au niveau $x_3 = 0$. Les trois petits points blancs sont situés en dessous (ou en arrière) du plan (x_1, x_2) , à un niveau $x_3 = -0,816$ et au centre de trois des six triangles du plan (x_1, x_2) . Enfin, les trois grands

⁴² En anglais : DOEHLERT's design.

points blancs sont situés au-dessus (ou en avant) du plan (x_1, x_2) , à un niveau $x_3 = +0,816$ et au centre des trois autres triangles du plan (x_1, x_2) .

La disposition de ces différents points peut être visualisée très simplement dans l'espace, en considérant que les sept points initiaux sont les centres de sept billes contiguës de diamètre unitaire, que les trois grands points blancs sont les centres de trois billes de même diamètre posées sur les sept premières, et que les trois petits points blancs sont les centres de trois billes disposées de la même façon en dessous des sept premières.

Les coordonnées des sept points expérimentaux relatifs à deux facteurs sont présentées dans la partie supérieure gauche du tableau 2.4.1, et les coordonnées des 13 points relatifs à trois facteurs constituent l'ensemble de ce tableau. Le contenu de ce tableau, comme la figure 2.4.3 et la présentation sous la forme de billes de même diamètre, montre bien que tous les points voisins se trouvent à une distance unitaire les uns des autres, pour deux comme pour trois facteurs.

Tableau 2.4.1. Coordonnées des points expérimentaux des plans de DOEHLERT à deux et à trois facteurs⁴³.

x_1	x_2	x_3
0	0	0
-1	0	0
-0,5	-0,866	0
-0,5	0,866	0
0,5	-0,866	0
0,5	0,866	0
1	0	0
-0,5	-0,289	-0,816
0	0,577	-0,816
0,5	-0,289	-0,816
-0,5	0,289	0,816
0	-0,577	0,816
0,5	0,289	0,816

Le tableau 2.4.1, de même que la présentation faite ci-dessus, montre aussi que le dispositif de DOEHLERT à trois facteurs nécessite cinq niveaux pour le premier facteur, sept niveaux pour le deuxième facteur et trois niveaux pour le troisième facteur.

En outre, un examen attentif de la figure 2.4.3 permet d'établir que les plans de BOX et BEHNKEN et de DOEHLERT à trois facteurs sont très semblables l'un à l'autre. Ils constituent dans les deux cas un polyèdre à 14 faces (huit faces triangulaires et six faces carrées) et ils ne diffèrent que par leurs orientations

⁴³ Les différentes coordonnées autres que 0, $\pm 0,5$ et ± 1 correspondent aux valeurs suivantes : $0,289 = \sqrt{3}/6$, $0,577 = \sqrt{3}/3$ ou $\sqrt{12}/6$, $0,816 = \sqrt{2}/3$ ou $\sqrt{24}/6$, et $0,866 = \sqrt{3}/2$ ou $\sqrt{27}/6$.

et leurs dimensions. On peut passer du plan de BOX et BEHNKEN au plan de DOEHLERT par une simple rotation, suivie d'une réduction de dimensions, les arêtes du polyèdre de BOX et BEHNKEN étant de longueur $\sqrt{2}$ et les arêtes du polyèdre de DOEHLERT de longueur 1. On peut considérer aussi que le cuboctaèdre de BOX et BEHNKEN est en quelque sorte posé sur une de ses faces carrées, tandis que le cuboctaèdre de DOEHLERT est posé sur une de ses faces triangulaires.

7° Compléments

La documentation relative à l'étude des surfaces de réponse est particulièrement abondante. Elle comprend notamment divers livres spécialisés, dont ceux de BOX et DRAPER [2007], GOUPY [1999], et MYERS *et al.* [2009], et des articles généraux, dont ceux d'ANDERSON-COOK *et al.* [2009], MEAD et PIKE [1975], et MYERS [1999].

On y trouvera des informations complémentaires relatives non seulement aux plans que nous avons présentés, mais aussi à d'autres dispositifs tels que les *plans de HOKE*⁴⁴ [1974] et les *plans de ROQUEMORE*⁴⁵ [1976].

On peut mentionner en outre des références plus particulières telles que, par exemple, NGUYEN et BORKOWSKI [2008], et PARK et PARK [2010].

⊖ 2.4.2 L'étude des mélanges

1° Principe

L'étude des surfaces de réponse se présente de manière particulière dans le cas des *mélanges*⁴⁶ de différentes substances ou composantes, dont les quantités sont exprimées en termes de proportions, de somme constante.

Si on désigne les différentes proportions, qui constituent les variables ou les facteurs étudiés, par x_1, x_2, \dots, x_k , et si on les exprime en pourcentages du total, la relation qui les lie est :

$$x_1 + x_2 + \dots + x_k = 100.$$

On peut aussi aboutir à un total unitaire en considérant des proportions comprises entre 0 et 1.

2° Deux facteurs

Le cas de deux substances ou deux facteurs est présenté dans la figure 2.4.4. En fonction de la relation qui caractérise les deux variables, les points expérimentaux admissibles forment le segment de la droite d'équation :

$$x_1 + x_2 = 100,$$

⁴⁴ En anglais : HOKE's design.

⁴⁵ En anglais : ROQUEMORE's design.

⁴⁶ En anglais : mixture.

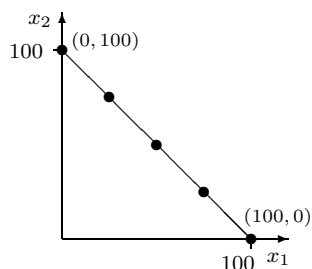


Figure 2.4.4. Exemple de points expérimentaux dans le cas d'un mélange de deux substances.

compris entre les points de coordonnées $(0, 100)$ et $(100, 0)$, c'est-à-dire pour les valeurs non négatives de x_1 et x_2 .

Comme le montre aussi la figure 2.4.4, on peut choisir par exemple cinq points équidistants sur le segment de droite en question. Ces points correspondent aux cinq mélanges ou objets suivants :

$$(0, 100), \quad (25, 75), \quad (50, 50), \quad (75, 25), \quad (100, 0).$$

Dans le cas particulier de deux substances, le problème est en fait unidimensionnel et conduit à l'obtention d'une courbe de réponse, et non pas d'une surface de réponse.

3° Trois facteurs

La figure 2.4.5 donne deux représentations graphiques différentes du cas de trois substances ou trois facteurs.

À trois dimensions, dans la partie gauche de cette figure, l'ensemble des points expérimentaux admissibles forme la partie du plan d'équation :

$$x_1 + x_2 + x_3 = 100,$$

qui est telle que les valeurs des trois variables sont non négatives. Il s'agit du triangle équilatéral de sommets :

$$(0, 0, 100), \quad (0, 100, 0), \quad (100, 0, 0).$$

Ce triangle peut également être représenté dans un espace à deux dimensions, comme le montre la partie droite de la même figure. Les axes de coordonnées se confondent alors avec les trois médiatrices du triangle, deux axes étant en fait suffisants pour localiser n'importe quel point.

Dans de tels diagrammes triangulaires, les coordonnées des points sont obtenues en projetant ceux-ci perpendiculairement sur les axes ou en mesurant les

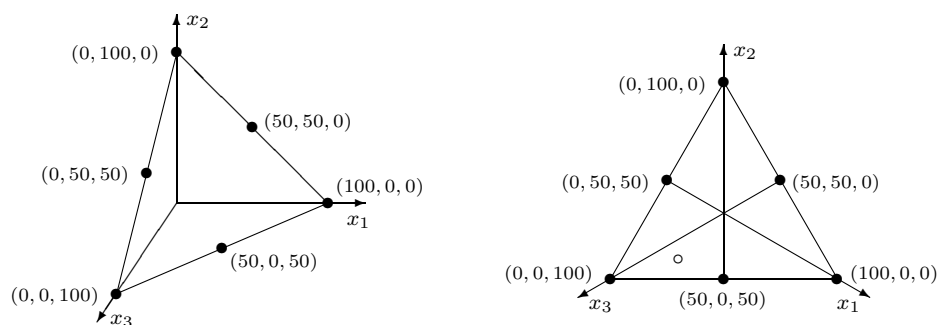


Figure 2.4.5. Exemple de points expérimentaux dans le cas d'un mélange de trois substances (six objets).

distances qui séparent les points considérés des côtés du triangle. Ainsi, le point blanc qui apparaît dans la partie droite de la figure 2.4.5 est le point de coordonnées $(25, 10, 65)$. Projeté perpendiculairement sur l'axe x_1 , il se situe à une distance 25 de l'origine de cet axe, la hauteur du triangle étant considérée comme égale à 100, et il s'agit bien aussi de la distance du point en question au côté gauche du triangle. Il en est de même pour l'axe x_2 et le côté inférieur (la base) du triangle, avec une distance égale à 10, ainsi que pour l'axe x_3 et le côté droit du triangle, avec une distance égale à 65, la somme des trois distances étant nécessairement égale à 100 en tout point.

Dans les deux parties de la figure 2.4.5, nous avons envisagé le cas de six points expérimentaux (points noirs), correspondant d'une part aux sommets du triangle et d'autre part aux milieux de ses trois côtés, c'est-à-dire aux points de coordonnées :

$$\begin{aligned} &(0, 0, 100), \quad (0, 100, 0), \quad (100, 0, 0), \\ &(0, 50, 50), \quad (50, 0, 50), \quad (50, 50, 0). \end{aligned}$$

La partie gauche de la figure 2.4.6 présente un autre ensemble d'objets, toujours relatif au cas d'un mélange de trois substances. Il s'agit ici de 10 points expérimentaux, dont les coordonnées sont, de haut en bas et de gauche à droite :

$$\begin{aligned} &(0, 100, 0), \\ &(0, 67, 33), \quad (33, 67, 0), \\ &(0, 33, 67), \quad (33, 33, 33), \quad (67, 33, 0), \\ &(0, 0, 100), \quad (33, 0, 67), \quad (67, 0, 33), \quad (100, 0, 0), \end{aligned}$$

les valeurs 33 et 67 correspondant en fait à $1/3$ et $2/3$ de 100.

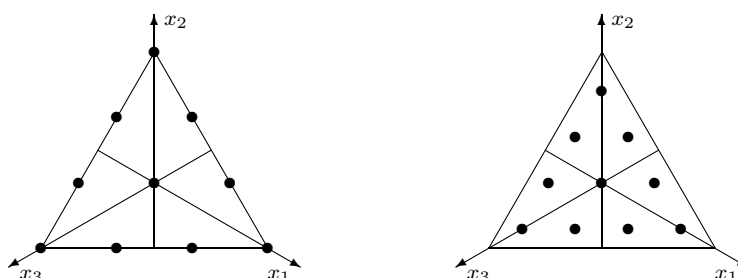


Figure 2.4.6. Exemples de points expérimentaux dans le cas d'un mélange de trois substances (10 objets).

4° Simplexes

De tels ensembles de points expérimentaux sont parfois appelés *simplexes* ou *réseaux simplexes*⁴⁷. D'une manière générale, ces ensembles sont caractérisés, d'une part, par le nombre de substances ou de composantes prises en considération, et d'autre part, par le nombre de subdivisions de la somme égale à 100, ou graphiquement, dans les cas que nous avons envisagés, par le nombre de subdivisions des côtés du triangle.

La figure 2.4.5 représente ainsi le simplexe $\{3, 2\}$, car il s'agit de trois substances et d'une subdivision du total 100 en deux parties, seules les valeurs 0, 50 et 100 intervenant dans les coordonnées des points expérimentaux. De même, la partie gauche de la figure 2.4.6 représente le simplexe $\{3, 3\}$, car toujours pour trois substances, le total 100 est divisé en trois tiers, les valeurs qui interviennent dans les coordonnées des points expérimentaux étant 0, 33, 67 et 100.

5° Contraintes

On remarquera que, dans les deux exemples dont il vient d'être question, les points expérimentaux correspondent essentiellement à des substances pures (points situés aux sommets des triangles, pour lesquels deux coordonnées sont toujours nulles) ou des mélanges de deux substances seulement (points situés sur les côtés des triangles, en dehors des sommets, pour lesquels une coordonnée est toujours nulle). Seul le point (33, 33, 33) du deuxième exemple est en fait un réel mélange des trois substances considérées.

On peut remédier à cette situation en imposant des proportions minimales, pour une ou pour plusieurs substances, ces proportions minimales pouvant éventuellement être différentes d'une substance à l'autre.

La partie droite de la figure 2.4.6 correspond par exemple à une même proportion minimale de 10 % pour chacune des trois substances. Les coordonnées des

⁴⁷ En anglais : *simplex*, *simplex-lattice*.

points expérimentaux sont alors, dans le même ordre que ci-dessus :

$$\begin{aligned} & (10, 80, 10), \\ & (10, 57, 33), \quad (33, 57, 10), \\ & (10, 33, 57), \quad (33, 33, 33), \quad (57, 33, 10), \\ & (10, 10, 80), \quad (33, 10, 57), \quad (57, 10, 33), \quad (80, 10, 10). \end{aligned}$$

Il peut arriver aussi que des proportions maximales doivent être imposées, ce qui peut avoir pour conséquence de supprimer le caractère triangulaire du domaine expérimental étudié. Nous envisagerons l'existence de telles contraintes au paragraphe 2.4.3.10°.

6° Quatre facteurs

La figure 2.4.7 présente les réseaux $\{4, 2\}$ et $\{4, 3\}$, relatifs l'un et l'autre à quatre substances. Les ensembles d'objets forment ici des tétraèdres réguliers, ce qui constitue une extension des triangles équilatéraux des exemples précédents. Quatre axes pourraient être dessinés dans ces tétraèdres, chacun partant du centre d'une face et passant par le sommet opposé.

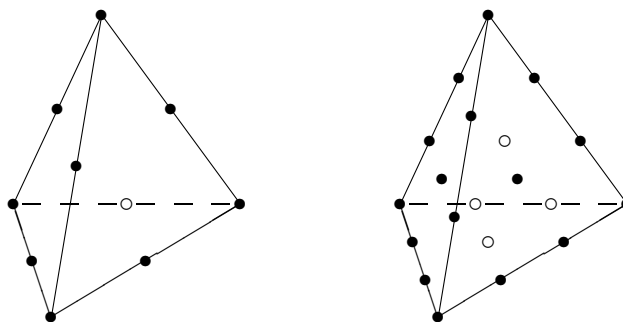


Figure 2.4.7. Exemples de points expérimentaux dans le cas d'un mélange de quatre substances.

Le cas $\{4, 2\}$ comprend 10 points expérimentaux, situés aux quatre sommets et aux milieux des six arêtes du tétraèdre⁴⁸. Les coordonnées des différents points sont, pour les sommets :

$$(0, 0, 0, 100), \quad (0, 0, 100, 0), \quad (0, 100, 0, 0), \quad (100, 0, 0, 0),$$

⁴⁸ En vue de faciliter la visualisation de la figure, nous avons représenté l'arête arrière du tétraèdre par une ligne discontinue et le point expérimental situé sur cette arête par un point blanc, ces deux éléments étant invisibles dans le cas d'un volume plein.

et pour les arêtes :

$$(0, 0, 50, 50), \quad (0, 50, 0, 50), \quad (0, 50, 50, 0), \\ (50, 0, 0, 50), \quad (50, 0, 50, 0), \quad (50, 50, 0, 0).$$

Le cas $\{4, 3\}$ comprend 20 points expérimentaux, situés aux quatre sommets, aux tiers et aux deux tiers des six arêtes, et aux centres des quatre faces du tétraèdre⁴⁹. Les coordonnées des quatre sommets sont les mêmes que ci-dessus. Les coordonnées des points des six arêtes sont toutes formées de deux 0, d'un 33 et d'un 67. Et les coordonnées des points des quatre faces sont toutes formées d'un 0 et de trois 33.

7° Compléments

Les notions que nous avons présentées peuvent évidemment être généralisées, et d'autres solutions ont aussi été proposées. On trouvera des informations complémentaires dans certains des ouvrages que nous avons cités dans l'introduction générale et au paragraphe 2.4.1.7°, ainsi que dans divers documents particuliers, dont ceux de CORNELL [2002], GOUPY [2000], et MATHIEU et PHAN-TAN-LUU [1997a]. On peut y ajouter des articles tels que ceux de CORNELL et GORMAN [2003], MCCONKEY *et al.* [2000], et PRESCOTT [2008].

On notera aussi que, dans le domaine agronomique, la question de la détermination d'une fumure ou d'une alimentation minérale équilibrée a été abordée comme un problème de mélange dans le cadre de la méthode des *variantes systématiques* [HOMÈS et HOMÈS-VAN SCHOOR, 1975; HOMÈS et VAN SCHOOR, 1969]. La base de cette méthode est notamment de remplacer l'étude globale de six éléments chimiques par la recherche séparée, d'une part d'un équilibre entre trois anions, d'autre part d'un équilibre entre trois cations, et enfin d'un équilibre anions-cations.

⊖ 2.4.3 Les plans optimaux

1° Principe

Comme les plans relatifs aux surfaces de réponse et en particulier aux mélanges (§ 2.4.1 et 2.4.2), les *plans optimaux*⁵⁰ concernent essentiellement les facteurs quantitatifs. Leur principe est de rechercher, dans un domaine expérimental donné et pour un nombre préalablement fixé d'observations, la combinaison d'objets (ou de points expérimentaux) qui permet d'obtenir la plus grande précision, en ce qui concerne soit l'estimation de la variable dépendante, soit l'estimation des paramètres du modèle sous-jacent.

⁴⁹ L'arête arrière est également représentée par une ligne discontinue et quatre points expérimentaux sont représentés par des points blancs, comme s'ils étaient invisibles. Il s'agit des deux points de l'arête arrière et des points de la face inférieure et de la face arrière du tétraèdre.

⁵⁰ En anglais : *optimal design*.

Nous introduisons ici les principaux concepts d'optimalité à partir de quelques exemples simples.

2° Un facteur : modèle et estimations

Si on se limite tout d'abord au cas d'un seul facteur, le modèle à prendre en considération est celui de la régression linéaire simple.

Le modèle théorique correspondant peut s'écrire [STAT2, § 14.1] :

$$Y_i = \alpha + \beta x_i + D_i \quad \text{ou} \quad Y_i = m_Y + \beta(x_i - \bar{x}) + D_i,$$

x étant la variable explicative, c'est-à-dire le facteur considéré, Y la variable à expliquer, c'est-à-dire celle au sujet de laquelle des observations sont réalisées, D les écarts ou les résidus aléatoires par rapport à la droite de régression, α l'ordonnée à l'origine, β le coefficient de régression, \bar{x} et m_Y les moyennes de x et de Y , l'indice i étant relatif aux différentes observations.

Dans les conditions habituelles d'indépendance, de normalité, de nullité de la moyenne et de constance de la variance des résidus, on obtient les différents résultats suivants [STAT2, § 14.2.3]. Le coefficient de régression théorique β est estimé par le coefficient de régression observé b :

$$\hat{\beta} = b = \text{SPE}/\text{SCE}_x;$$

la variance de cette estimation est :

$$\sigma_{\hat{\beta}}^2 = \sigma^2/\text{SCE}_x;$$

la valeur estimée de la variable dépendante est, pour toute valeur x_0 de la variable explicative :

$$\hat{y}_0 = \bar{y} + b(x_0 - \bar{x});$$

et la variance d'une telle estimation est :

$$\sigma_{\hat{y}_0}^2 = \sigma^2/n + \sigma^2(x_0 - \bar{x})^2/\text{SCE}_x,$$

SPE étant la somme des produits des écarts des x_i et y_i , SCE_x la somme des carrés des écarts des x_i , σ^2 la variance résiduelle, c'est-à-dire la variance des résidus D_i , \bar{y} la moyenne observée des y_i , et n le nombre d'observations⁵¹.

En outre, sous l'hypothèse de distribution normale des résidus, et en faisant intervenir les distributions t de STUDENT, des limites de confiance peuvent être calculées très facilement, tant pour le coefficient de régression que pour les valeurs estimées de la variable dépendante [STAT2, § 14.3.2 et 14.4.2].

⁵¹ En vue d'alléger les notations, nous utilisons ici le symbole simple σ^2 , au lieu de $\sigma_{Y,x}^2$ [STAT2, § 14.1], pour désigner la variance résiduelle.

On peut noter aussi que la variance des valeurs estimées de la variable dépendante est parfois appelée, plus simplement, *variance de prédiction*⁵².

3° Un facteur et deux observations

Dans ces conditions, le principe des plans optimaux est de rechercher la combinaison de valeurs x_i de la variable explicative qui assure le minimum de σ_{β}^2 et/ou le minimum de $\sigma_{\hat{y}_0}^2$, pour l'ensemble du domaine expérimental et pour un nombre donné d'observations.

Comme précédemment, nous considérons que le domaine expérimental s'étend de -1 à $+1$ et, en vue de comparer aisément différentes situations, nous supposons aussi que la variance σ^2 est égale à 1.

Si deux observations seulement doivent être réalisées, il semble logique de choisir des valeurs x_i égales à -1 et $+1$. La somme des carrés des écarts SCE_x est alors égale à 2, la variance du coefficient de régression est égale à 0,5, et la variance des valeurs estimées de la variable dépendante est donnée par la relation :

$$\sigma_{\hat{y}_0}^2 = 1/2 + x_0^2/2.$$

Pour tout autre couple de valeurs x_i , la somme des carrés des écarts est moins élevée et les deux variances considérées sont plus élevées (sauf, en ce qui concerne le point $x_0 = 0$, pour lequel la variance de la valeur estimée de y est toujours égale à 0,5). La combinaison $(-1, +1)$ conduit donc aux variances les plus petites et peut en conséquence être considérée comme optimale.

4° Un facteur et trois observations

Pour trois observations, on peut être tenté a priori de prendre en considération les points expérimentaux $x_i = -1, 0$ et $+1$. La somme des carrés des écarts est toujours égale à 2, la variance du coefficient de régression est égale à 0,5, et la variance des valeurs estimées de la variable dépendante est :

$$\sigma_{\hat{y}_0}^2 = 1/3 + x_0^2/2.$$

Il faut cependant remarquer que cette solution ne conduit pas au maximum de la somme des carrés des écarts. Ce maximum est en effet atteint quand les x_i sont égaux à $-1, -1$ et $+1$ (ce qui correspond à deux répétitions de la valeur -1 et une répétition de la valeur $+1$), ou quand les x_i sont égaux à $-1, +1$ et $+1$ (une répétition de la valeur -1 et deux répétitions de la valeur $+1$). Ce maximum est égal à $8/3$ et la variance du coefficient de régression est en conséquence égale à 0,375, au lieu de 0,5. La valeur 0,375 est la plus petite possible pour trois observations, de telle sorte que les solutions $(-1, -1, +1)$ et $(-1, +1, +1)$ sont toutes deux optimales en vue d'estimer le coefficient de régression.

⁵² En anglais : *prediction variance*.

En outre, pour ces deux séries de valeurs x_i , la variance des valeurs estimées de y est :

$$\sigma_{\hat{y}_0}^2 = 1/3 + 3(x_0 + 1/3)^2/8 \quad \text{ou} \quad 1/3 + 3(x_0 - 1/3)^2/8.$$

La figure 2.4.8 montre l'évolution de cette variance pour les trois combinaisons de valeurs x_i que nous avons envisagées.

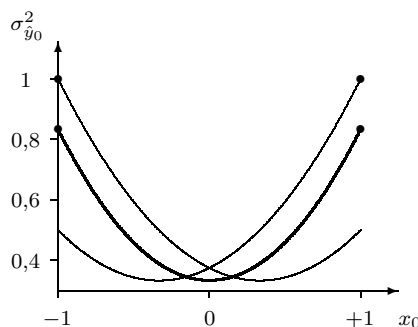


Figure 2.4.8. Évolution de la variance des valeurs estimées de la variable dépendante dans le cas de trois observations : solution $(-1, 0, +1)$ en gros trait et solutions $(-1, -1, +1)$ et $(-1, +1, +1)$ en traits fins.

En présence de telles courbes, on compare les différents résultats sur base des valeurs maximums observées dans l'ensemble du domaine expérimental. Ces maximums correspondent aux points noirs de la figure 2.4.8, soit $5/6$ ou $0,833$ pour la solution $(-1, 0, +1)$, et 1 pour les solutions $(-1, -1, +1)$ et $(-1, +1, +1)$. La première solution envisagée s'avère donc être la meilleure des trois en ce qui concerne l'estimation de la variable dépendante et on peut montrer qu'aucune autre solution ne lui est préférable. Il s'agit de la solution optimale pour cet aspect du problème.

On constate ainsi que les deux critères envisagés (minimum de la variance du coefficient de régression et minimum de la variance des valeurs estimées de y) ne conduisent pas toujours à la même solution optimale.

5° Un facteur et quatre observations

Pour quatre observations, la solution intuitive qui consisterait en quatre valeurs équidistantes $-1, -1/3, +1/3$ et $+1$ conduit aux résultats suivants :

$$SCE_x = 20/9 \text{ ou } 2,222, \quad \sigma_{\hat{\beta}}^2 = 0,45 \quad \text{et} \quad \max(\sigma_{\hat{y}_0}^2) = 0,7.$$

Mais la solution $x_i = -1, -1, +1$ et $+1$, c'est-à-dire deux observations de y en $x = -1$ et deux observations de y en $x = +1$, donne :

$$SCE_x = 4, \quad \sigma_{\hat{\beta}}^2 = 0,25 \quad \text{et} \quad \max(\sigma_{\hat{y}_0}^2) = 0,5.$$

On peut montrer en outre que cette deuxième solution est la meilleure de toutes, tant en ce qui concerne l'estimation du coefficient de régression que l'estimation de la variable dépendante. Il faut toutefois noter que, si cette solution est optimale à ce double titre, elle présente cependant l'inconvénient majeur de ne permettre en aucune façon de vérifier la linéarité de la régression.

On peut noter enfin que, dans tous les cas, pour un nombre donné d'observations, la comparaison des différentes solutions peut se faire en considérant uniquement les valeurs $1/\text{SCE}_x$ en ce qui concerne les coefficients de régression et $(x_0 - \bar{x})^2/\text{SCE}_x$ en ce qui concerne les valeurs estimées de la variable dépendante.

6° Deux ou plusieurs facteurs

Pour deux ou plusieurs facteurs, la régression simple cède la place à la régression multiple et il y a intérêt à utiliser des notations matricielles.

En négligeant les indices i relatifs aux variables x et Y et aux résidus D , le modèle théorique est alors [STAT2, § 16.1 et 16.3.2] :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + D \quad \text{ou} \quad Y = \beta_0 + \mathbf{x}\boldsymbol{\beta} + D,$$

ou encore :

$$Y = m_Y + \beta_1 (x_1 - \bar{x}_1) + \dots + \beta_k (x_k - \bar{x}_k) + D \quad \text{ou} \quad Y = m_Y + (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})\boldsymbol{\beta} + D,$$

les différents symboles ayant la même signification que précédemment, à ceci près qu'on se trouve en présence de k variables explicatives x_1, \dots, x_k , constituant le vecteur-ligne \mathbf{x} , de k moyennes $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_k$, constituant le vecteur-ligne $\bar{\mathbf{x}}$, et de k coefficients de régression β_1, \dots, β_k , constituant le vecteur-colonne $\boldsymbol{\beta}$, le terme indépendant étant désigné ici par β_0 , au lieu de α .

Dans des conditions semblables à celles qui ont été rappelées ci-dessus, on obtient les résultats suivants [STAT2, § 16.3.2] :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{b} = \mathbf{A}_{xx}^{-1} \mathbf{a}_{xy} \quad \text{et} \quad \sigma_{\hat{\beta}_j}^2 = \sigma^2 a^{jj},$$

$$\hat{y}_0 = \bar{y} + (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})\mathbf{b} \quad \text{et} \quad \sigma_{\hat{y}_0}^2 = \sigma^2/n + \sigma^2 (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})' \mathbf{A}_{xx}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}}),$$

\mathbf{A}_{xx} étant la matrice des sommes des carrés et des produits des écarts des variables x_1, \dots, x_k , \mathbf{a}_{xy} le vecteur-colonne des sommes des produits des écarts de ces variables avec la variable y , et a^{jj} le $j^{\text{ème}}$ élément diagonal de la matrice inverse \mathbf{A}_{xx}^{-1} .

À l'aide des distributions t de STUDENT, on peut aussi déterminer des intervalles de confiance pour chacun des coefficients de régression considéré individuellement, de même que pour les valeurs estimées de la variable dépendante [DAGNELIE, 1986, § 4.4.2 et 4.4.4]. Mais en se référant aux distributions F de FISHER-SNEDECOR, il est également possible de définir des régions de confiance, globalement pour l'ensemble des coefficients de régression. Ces régions de confiance

sont de forme elliptique dans le cas de deux coefficients de régression et de forme ellipsoïdale ou hyperellipsoïdale pour plus de deux coefficients de régression.

7° Critères d'optimalité

Les différentes notations et relations que nous venons de présenter permettent de définir plusieurs critères d'optimalité.

En ce qui concerne l'estimation des coefficients de régression, la somme des termes diagonaux a^{jj} , c'est-à-dire aussi la trace de la matrice inverse \mathbf{A}_{xx}^{-1} , se substitue au seul terme $1/\text{SCE}_x$, le meilleur ensemble d'objets étant celui qui assure le minimum de cette somme. On parle dans ce cas de plans *A-optimaux*⁵³ et de *A-optimalité*⁵⁴.

En ce qui concerne par contre l'estimation des valeurs de la variable dépendante, l'expression $(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})' \mathbf{A}_{xx}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})$ généralise la quantité $(x_0 - \bar{x})^2/\text{SCE}_x$ introduite ci-dessus pour une seule variable. La solution considérée comme optimale dans cette optique est caractérisée par le plus petit maximum de cette expression, dans tout le domaine des valeurs admissibles de \mathbf{x} . Les ensembles d'objets qui correspondent à de telles solutions sont dits *G-optimaux*⁵⁵ et le critère envisagé est appelé critère de *G-optimalité*⁵⁶.

Un troisième critère, qui est très fréquemment utilisé, consiste à assurer le maximum du déterminant $|\mathbf{A}_{xx}|$ de la matrice des sommes des carrés et des produits des écarts ou, ce qui est strictement équivalent, le minimum du déterminant $|\mathbf{A}_{xx}^{-1}|$ de l'inverse de cette matrice. Ce critère caractérise la *D-optimalité*⁵⁷ et les plans définis de cette manière sont dits *D-optimaux*⁵⁸. On peut montrer que le maximum de $|\mathbf{A}_{xx}|$, ou le minimum de $|\mathbf{A}_{xx}^{-1}|$, correspond au minimum du volume de la région de confiance relative à l'ensemble des coefficients de régression.

D'autres critères encore ont été introduits, tels que, par exemple, le minimum de la plus grande valeur propre de la matrice inverse \mathbf{A}_{xx}^{-1} . Ce critère définit la *E-optimalité*⁵⁹ et les plans *E-optimaux*⁶⁰. Il correspond à la recherche de la longueur minimum du plus grand axe des ellipses, ellipsoïdes ou hyperellipsoïdes de confiance⁶¹.

⁵³ En anglais : *A-optimal design*.

⁵⁴ En anglais : *A-optimality*.

⁵⁵ En anglais : *G-optimal design*.

⁵⁶ En anglais : *G-optimality*.

⁵⁷ En anglais : *D-optimality*.

⁵⁸ En anglais : *D-optimal design*.

⁵⁹ En anglais : *E-optimality*.

⁶⁰ En anglais : *E-optimal design*.

⁶¹ Dans les dénominations des critères d'optimalité, la lettre A est liée à la notion d'*average optimality* (optimalité « moyenne », en ce qui concerne l'estimation des différents coefficients de régression), la lettre D à l'emploi de déterminants, la lettre E à l'étude des valeurs propres (*eigenvalues*), et la lettre G à la notion de *general variance* (variance maximum « générale », pour l'ensemble des valeurs admissibles des variables explicatives).

Ces différents critères ne sont pas équivalents d'une manière générale, mais des relations d'équivalence existent cependant entre certains d'entre eux, dans des conditions bien définies.

La recherche de combinaisons optimales d'objets, qui répondent à un ou plusieurs de ces critères, peut être réalisée de manière analytique dans certains cas simples. Cette recherche nécessite par contre l'utilisation de logiciels spéciaux dans des situations plus complexes. Le plus souvent, les solutions obtenues ne sont alors qu'approchées⁶².

De plus, dans certains cas, on donne la préférence à des solutions dites *suboptimales*⁶³, qui sont proches des solutions optimales. Il peut en être ainsi notamment en vue de réduire le nombre de niveaux du ou des facteurs qui sont considérés. Le degré d'optimalité peut alors être exprimé en valeur relative, par comparaison avec le plan qui serait réellement optimal.

8° Matrices du modèle, d'information et de dispersion

La présentation que nous avons adoptée n'est pas la plus classique, ni la plus directe, mais elle permet de partir des notions de base de la régression linéaire simple.

La présentation classique des critères d'optimalité fait appel au concept de *matrice du modèle*⁶⁴, qui étend celui de matrice d'expérience, défini au paragraphe 2.3.2.9°. D'une manière générale, la matrice du modèle \mathbf{X} est constituée d'autant de lignes qu'il y a d'observations et d'autant de colonnes qu'il y a de coefficients de régression ou de paramètres à estimer dans le modèle.

Ainsi, dans le cas d'une expérience factorielle 2^3 qui ne ferait intervenir qu'une seule répétition et dans l'optique d'une analyse par régression quadratique, la matrice de l'expérience serait une matrice de dimensions 9×2 (neuf observations et deux facteurs). La matrice du modèle serait par contre de dimensions 9×5 ou 9×6 , les cinq colonnes correspondant aux cinq termes de l'équation de régression (x_1 , x_2 , x_1^2 , x_2^2 et $x_1 x_2$), une colonne supplémentaire pouvant être introduite en vue de tenir compte également du terme indépendant.

À partir de la matrice du modèle, on peut déterminer le produit matriciel $\mathbf{X}'\mathbf{X}$ et, éventuellement, son inverse $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$. Ces éléments sont appelés respectivement *matrice d'information*⁶⁵ et *matrice de dispersion*⁶⁶. En matière de plans optimaux, ces éléments jouent des rôles tout à fait comparables à ceux de \mathbf{A}_{xx} et \mathbf{A}_{xx}^{-1} dans la présentation que nous avons adoptée au départ.

⁶² Nous rappelons que nous avons donné quelques indications relatives aux logiciels dans l'introduction générale.

⁶³ En anglais : *suboptimal design*.

⁶⁴ En anglais : *model matrix*.

⁶⁵ En anglais : *information matrix*.

⁶⁶ En anglais : *dispersion matrix*.

On trouvera des informations complémentaires à ce sujet notamment dans les livres spécialisés d'ATKINSON *et al.* [2007], PUKELSHEIM [1993] et SILVEY [1980], et dans des articles tels que ceux de GAUCHI [2005] et RADY *et al.* [2009].

9° Exemple et différents problèmes particuliers

Nous pouvons illustrer l'utilisation des principaux critères que nous avons introduits en considérant le cas relativement simple de la recherche d'une parabole, à partir de quatre observations. Cette recherche peut en effet être considérée comme un problème de régression linéaire à deux variables, la première variable explicative étant la variable étudiée au départ et la deuxième variable explicative étant le carré de cette variable :

$$x_1 = x \quad \text{et} \quad x_2 = x^2.$$

Comme ci-dessus dans le cas d'une droite, nous supposons tout d'abord que les points expérimentaux sont équidistants dans le domaine $[-1, +1]$, ce qui revient à adopter les valeurs $-1, -1/3, +1/3$ et $+1$ pour la première variable, et les valeurs $+1, +1/9, +1/9$ et $+1$ pour la deuxième variable.

La matrice des sommes des carrés et des produits des écarts est alors :

$$\mathbf{A}_{xx} = \begin{bmatrix} 2,222222 & 0 \\ 0 & 0,790123 \end{bmatrix},$$

et on en déduit :

$$|\mathbf{A}_{xx}| = 1,7558, \quad |\mathbf{A}_{xx}^{-1}| = 0,5695, \quad \text{trace}(\mathbf{A}_{xx}^{-1}) = 1,7156,$$

et
$$\max[(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})' \mathbf{A}_{xx}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})] = 0,7,$$

le maximum correspondant aux valeurs extrêmes -1 et $+1$.

Cette solution n'est cependant pas optimale. En remplaçant les deux abscisses intermédiaires $-1/3$ et $+1/3$ par 0 , on obtient en effet :

$$|\mathbf{A}_{xx}| = 2, \quad |\mathbf{A}_{xx}^{-1}| = 0,5, \quad \text{trace}(\mathbf{A}_{xx}^{-1}) = 1,5,$$

et
$$\max[(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})' \mathbf{A}_{xx}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})] = 0,75,$$

le maximum correspondant toujours aux deux valeurs extrêmes.

On peut montrer que la valeur 2 est le maximum possible en ce qui concerne le critère $|\mathbf{A}_{xx}|$ et, corrélativement, que la valeur $0,5$ est le minimum possible pour $|\mathbf{A}_{xx}^{-1}|$. De même, la valeur $1,5$ est le maximum possible pour la trace de la matrice inverse. La solution $-1, 0, 0, +1$ est donc à la fois D-optimale et A-optimale.

Aucune des deux solutions que nous avons examinées jusqu'à présent n'est par contre G-optimale, car les valeurs $0,7$ et $0,75$ ne sont pas les plus petites

possible pour le critère $\max[(\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})' \mathbf{A}_{xx}^{-1} (\mathbf{x}_0 - \bar{\mathbf{x}})]$. Par résolution analytique ou par approximations successives, on peut établir que le minimum de ce critère est atteint pour la solution $-1, -0,4859, +0,4859, +1$, qui est donc G-optimale. Le minimum de ce critère est égal à 0,6545 et correspond à la fois, pour x , aux deux valeurs extrêmes -1 et $+1$ et à la valeur 0.

On en conclut notamment que, dans le cas envisagé, pour estimer les coefficients de régression avec un maximum de précision, il est préférable d'utiliser les abscisses $-1, 0, 0$ et $+1$ (A-optimalité), tandis que pour estimer les valeurs de la variable dépendante avec un maximum de précision, dans l'ensemble du domaine de variation considéré, la préférence doit être donnée aux abscisses $-1, -0,4859, +0,4859$ et $+1$, ou approximativement $-1, -0,5, +0,5$ et $+1$ (G-optimalité).

Des exemples plus complets sont présentés notamment par IBRAHIMY [1994] et MONOD *et al.* [2002]. Et différents problèmes particuliers, tels que la recherche de doses optimales pour des mélanges, et l'utilisation de la fonction logistique et du modèle de MICHAELIS et MENTEN [STAT2, § 15.2.3.2° et ex. 15.2.2], sont abordés par LI et MAJUMDAR [2008], MATTHEWS et ALLCOCK [2004], et PRESCOTT et DRAPER [2008].

10° Mélanges sous contraintes

La recherche de plans optimaux intervient très fréquemment dans l'étude de mélanges soumis à des contraintes autres que de simples conditions de minimum.

Nous avons vu au paragraphe 2.4.2.5°, et en particulier dans la partie droite de la figure 2.4.6, que des conditions de minimum peuvent se présenter dans les études de mélanges sans modifier le caractère triangulaire du domaine expérimental. Mais il n'en est pas de même pour les conditions de maximum, ni pour les contraintes qui seraient relatives simultanément à deux ou plusieurs éléments du mélange (total de deux ou plusieurs éléments inférieur ou supérieur à une certaine limite).

Nous pouvons illustrer cette affirmation en considérant le cas d'un mélange de trois substances, dans lequel il serait exclu a priori, pour des raisons de toxicité ou d'équilibre entre les différents constituants par exemple, que la proportion de la première substance dépasse 80 %, que la proportion de la deuxième substance dépasse 60 %, et que la proportion de la troisième substance dépasse 70 %, les contraintes étant donc :

$$x_1 \leq 80, \quad x_2 \leq 60 \quad \text{et} \quad x_3 \leq 70.$$

Comme le montre la partie gauche de la figure 2.4.9, le domaine de variation défini de cette manière est un hexagone irrégulier, et non plus un triangle.

Dans un tel cas, la recherche d'une combinaison optimale de points expérimentaux peut se faire à l'aide de divers algorithmes, comme ceux de FEDOROV [1972] et MITCHELL [1974], dont le principe peut être esquissé comme suit.

On définit tout d'abord le nombre n de points expérimentaux dont on souhaite disposer, ainsi qu'un nombre plus élevé N de points possibles ou « candidats ».

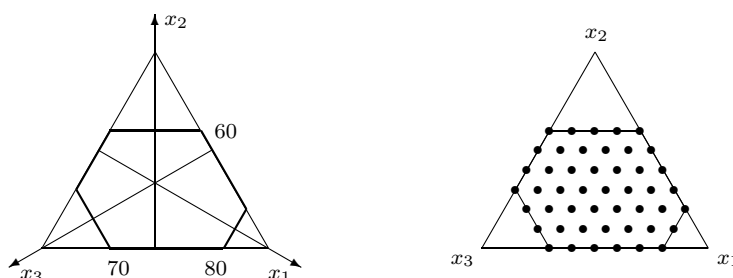


Figure 2.4.9. Exemple de problème de mélange sous contraintes.

Ces derniers pourraient être ici l'ensemble ou une partie des points du domaine considéré, dont les coordonnées sont constituées de 0, de 10 et de multiples de 10 (ou de 0, de 5 et de multiples de 5). De tels points sont représentés dans la partie droite de la figure 2.4.9 et ont comme coordonnées, de haut en bas et de gauche à droite :

$$\begin{aligned}
 &(0, 60, 40), \quad (10, 60, 30), \quad (20, 60, 20), \quad \dots, \quad (40, 60, 0), \\
 &(0, 50, 50), \quad (10, 50, 40), \quad (20, 50, 30), \quad \dots, \quad (50, 50, 0), \\
 &(0, 40, 60), \quad (10, 40, 50), \quad (20, 40, 40), \quad \dots, \quad (60, 40, 0), \\
 &\text{etc.}
 \end{aligned}$$

L'algorithme choisit ensuite au hasard n de ces N points candidats, il calcule pour ceux-ci le critère d'optimalité qui a été adopté, il remplace au hasard un des n points qui ont été choisis par un des $N - n$ points qui n'ont pas été choisis, il recalcule le critère d'optimalité, et il continue de la sorte jusqu'au moment où un minimum (ou un maximum, selon le critère adopté) est atteint. Éventuellement, on peut recommencer l'ensemble des calculs un certain nombre de fois, afin d'éviter de s'arrêter à un minimum (ou un maximum) local inadéquat.

On se souviendra, comme nous l'avons déjà signalé, que cette procédure est en général approchée, car elle ne conduit pas nécessairement à l'optimum absolu.

11° Expériences factorielles sous contraintes

Des problèmes semblables peuvent se présenter également dans d'autres situations que les études de mélanges, et notamment dans le cas des expériences factorielles (§ 2.3.2).

Certaines combinaisons extrêmes des différentes modalités des facteurs considérés doivent en effet être parfois évitées, toujours pour des raisons de toxicité par exemple. Un ensemble factoriel, qui doit normalement se présenter sous la forme d'un carré, d'un rectangle, d'un cube ou d'un parallélépipède peut alors être réduit à un polygone ou un polyèdre irrégulier, au même titre qu'un triangle peut

être réduit à un hexagone irrégulier, dans le cas des mélanges. Des procédures semblables à celle qui vient d'être esquissée doivent alors être adoptées.

⊖ 2.4.4 Les expériences organisées en deux ou plusieurs phases

1° Principe

Dans l'introduction générale, nous avons signalé, à propos de la signification même du mot « expérience », que les différents éléments comparés, c'est-à-dire les objets ou les points expérimentaux, peuvent être étudiés soit simultanément (en particulier dans le domaine agronomique), soit à la suite les uns des autres (principalement dans le domaine industriel). Mais, quelle que soit la solution adoptée, nous avons toujours supposé jusqu'à présent que le choix des objets était réalisé globalement, en une fois, avant d'entreprendre l'expérience proprement dite.

On peut envisager également d'adapter, de modifier ou de compléter le choix des objets en cours d'expérience, à une ou plusieurs reprises, en fonction des résultats déjà obtenus. On peut ainsi concevoir des expériences qui sont planifiées *en deux ou plusieurs phases* ou *étapes*⁶⁷, et qui sont parfois dites aussi *adaptatives* ou *séquentielles*⁶⁸.

Tel est le cas notamment si, pour un seul facteur, on envisage dans un premier temps un très petit nombre de modalités, en considérant ensuite, en une ou plusieurs fois, différentes modalités supplémentaires, intermédiaires ou non (doses progressivement de plus en plus élevées, par exemple).

Le recours à de telles procédures ne peut se justifier cependant que quand les différentes phases successives de l'expérience peuvent être réalisées dans des conditions parfaitement identiques, à moins qu'il ne soit possible de tenir compte, au cours de l'analyse des résultats, des différences de conditions de réalisation qui existeraient éventuellement entre les diverses phases.

2° Expériences factorielles

Dans le cas des expériences factorielles complètes ou fractionnaires (§ 2.3.2 et 2.3.3), on peut ainsi compléter une expérience initiale relativement limitée, en fonction des premiers résultats obtenus.

On peut par exemple ajouter une troisième modalité à certains facteurs qui n'en comportaient initialement que deux, en vue de passer d'un modèle de régression linéaire à un modèle de régression quadratique. On peut aussi ajouter un ou plusieurs facteurs supplémentaires à une expérience déjà réalisée, ou encore s'efforcer d'étudier l'importance des interactions ou de certaines d'entre elles, après avoir considéré uniquement les effets principaux des facteurs.

⁶⁷ En anglais : *two-step experiment, multi-step experiment.*

⁶⁸ En anglais : *adaptive experiment, sequential experiment.*

Il faut toutefois noter qu'il est hautement souhaitable de toujours envisager les différentes possibilités d'extensions ultérieures dès le départ, au moment de la planification de la première phase de l'expérience.

3° Surfaces de réponse et plans optimaux

De même, dans le cas de l'étude des surfaces de réponse (§ 2.4.1), on peut traiter les plans composites centrés en deux temps, en effectuant tout d'abord la partie factorielle de l'expérience, et en complétant ensuite l'étude par la partie radiale, pour l'ensemble ou uniquement pour une partie des facteurs pris en considération au cours de l'expérience initiale. Différentes autres possibilités ont été suggérées, notamment par MOZZO [1990].

De même aussi, les plans de BOX et BEHNKEN et de DOEHLERT (§ 2.4.1) peuvent être appliqués en deux ou plusieurs fois. Le tableau 2.4.1 montre par exemple que, dans le cas des plans de DOEHLERT, il est possible de réaliser tout d'abord une expérience relative à deux facteurs, comportant sept objets (partie supérieure gauche du tableau), et d'introduire ensuite un troisième facteur, en considérant six objets supplémentaires (partie inférieure du tableau).

Ce tableau souligne également la nécessité de prévoir au départ, le cas échéant, les éventuelles extensions ultérieures possibles. Le passage de deux à trois facteurs ne peut en effet intervenir que si on a pris la précaution d'organiser l'expérience à deux facteurs au niveau intermédiaire du troisième facteur (valeurs 0 présentes dans la partie supérieure droite du tableau).

Enfin, les algorithmes utilisés en ce qui concerne les plans optimaux (§ 2.4.3) permettent d'ajouter progressivement des points expérimentaux supplémentaires à de tels plans, en vue par exemple d'améliorer la qualité des estimations obtenues.

4° Autres possibilités

Toujours moyennant les mêmes restrictions quant à la stabilité des conditions expérimentales, certaines procédures particulières permettent de réaliser des expériences de manière strictement séquentielle, les différents points expérimentaux étant déterminés de proche en proche en fonction des résultats obtenus chaque fois pour les points antérieurs.

La méthode EVOP (*EVolutionary OPeration*) a par exemple pour principe, dans le cas de deux facteurs, de partir de trois points expérimentaux constituant un triangle équilatéral, semblable à une partie d'un plan de DOEHLERT (figure 2.4.3), d'en déduire la direction dans laquelle se trouve vraisemblablement le maximum (ou le minimum) recherché, d'ajouter un quatrième point expérimental dans cette direction, de déterminer à nouveau la direction dans laquelle se trouve vraisemblablement l'objectif recherché, d'ajouter un cinquième point, etc., jusqu'au moment où le maximum (ou le minimum) est atteint [EVANS, 1979 ; LOWE, 1974].

Des processus semblables peuvent aussi être appliqués en partant d'expériences factorielles ou autres, et en recherchant ensuite progressivement le maximum (ou

le minimum) de la variable dépendante, notamment en fonction de la direction de *pen­te maximum* ou de *plus grande pente*⁶⁹ donnée par la régression [FAN et HUANG, 2011 ; FREY et WANG, 2006].

On notera enfin que le caractère séquentiel d’une expérience peut être lié, non pas au choix des objets, mais au nombre d’observations. On peut en effet envisager d’organiser une expérience de manière séquentielle, en considérant dans un premier temps un certain nombre d’unités expérimentales, et en augmentant ensuite éventuellement le nombre d’unités, en fonction des résultats déjà obtenus, et cela toujours pour les mêmes objets, et à une seule ou à plusieurs reprises.

Tel est le cas en particulier dans le domaine médical, où on parle notamment d’*expériences séquentielles par groupes*⁷⁰ [VANDEMEULEBROECKE, 2008].

⊖ 2.4.5 Les expériences numériques

1° Principe

Certaines expériences, notamment quand elles sont très difficiles, voire impossibles à organiser de manière réelle, peuvent être simulées sur ordinateur. Un modèle mathématique est alors conçu en vue de représenter le phénomène qu’on souhaite étudier, puis traduit en un programme de calcul. Et ce programme permet ensuite d’observer et de quantifier l’effet des différents facteurs considérés sur une ou plusieurs variables résultantes.

De telles expériences sont qualifiées d’*expériences numériques* ou *par ordinateur*⁷¹. Elles concernent en premier lieu les phénomènes physiques et chimiques (hydrologie et cinétique chimique, par exemple), mais elles peuvent intervenir également en biologie, en médecine, etc.

2° Quelques caractéristiques

Une première caractéristique de ce type d’expériences est le fait que les résultats obtenus ne sont pas entachés de fluctuations aléatoires, sauf bien sûr si de telles fluctuations sont volontairement introduites dans le modèle sous-jacent.

Une deuxième propriété de ce type d’expériences est liée au fait qu’en l’absence de fluctuations des conditions expérimentales au cours du temps, les simulations peuvent être réalisées dans n’importe quel ordre et, en principe, avec un nombre de répétitions quasi illimité.

Toutefois, vu le nombre de facteurs pris en considération, qui est parfois très élevé, et en raison de la complexité des modèles adoptés, les temps de calcul peuvent être très importants, et constituent souvent le principal facteur limitant. Il

⁶⁹ En anglais : *steepest ascent*.

⁷⁰ En anglais : *group sequential design*.

⁷¹ En anglais : *numerical experiment, computer experiment*.

importe donc d'effectuer malgré tout dans ce domaine une planification rigoureuse des expériences.

Les différentes possibilités que nous avons présentées antérieurement (expériences factorielles, expériences factorielles fractionnaires, etc.) restent d'application ici, mais d'autres schémas ont également été introduits. On peut citer en particulier les hypercubes latins, dont il est brièvement question au paragraphe 8.4.2°, et les *plans uniformes*⁷² et de *remplissage*⁷³ du domaine expérimental.

Des informations complémentaires peuvent être trouvées notamment dans les livres de FANG *et al.* [2006] et SANTNER *et al.* [2003], et les articles de BORKOWSKI et PIEPEL [2009], BURTON *et al.* [2006], FANG *et al.* [2000], et JOURDAN [2005].

⁷² En anglais : *uniform design*.

⁷³ En anglais : *space-filling design*.