



Construction et analyse de plans d'expérience sphériques isovariants à l'aide d'outils combinatoires et algébriques

Frédéric Bertrand

► To cite this version:

Frédéric Bertrand. Construction et analyse de plans d'expérience sphériques isovariants à l'aide d'outils combinatoires et algébriques. 39ème Journées de statistique de la SFdS, Jun 2007, Angers, France. pp.35. hal-00160171

HAL Id: hal-00160171

<https://hal.science/hal-00160171>

Submitted on 5 Jul 2007

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

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

CONSTRUCTION ET ANALYSE DE PLANS D'EXPÉRIENCE SPHÉRIQUES ISOVARIANTS À L'AIDE D'OUTILS COMBINATOIRES ET ALGÈBRIQUES.

Frédéric Bertrand

Institut de Recherche Mathématique Avancée, Université Louis Pasteur.

Email : `fbertran@math.u-strasbg.fr`

Résumé

Nous proposons diverses méthodes combinant plusieurs outils combinatoires, comme les t -plans sphériques, et algébriques, comme les bases de Gröbner et les groupes de Coxeter, pour construire et établir les propriétés fondamentales de plans sphériques, en particulier celles de plans isovariants. Nous commençons par établir des résultats d'existence exacts pour certains dispositifs expérimentaux dont les coordonnées n'étaient jusqu'alors connues que de manière approchée. Étant donnée une taille fixée, ces dispositifs sont tous de force maximale ou conjecturés comme l'étant suite à des recherches numériques intensives. Pour chacun de ces dispositifs sphériques, nous déterminons alors, pour un ordre total sur les polynômes fixé, quels sont les modèles polynomiaux dont tous les paramètres sont estimables et l'ensemble des confusions d'effets associé au dispositif expérimental utilisé. Lors de l'analyse des résultats expérimentaux, il est possible de considérer un autre ordre polynomial que celui utilisé lors de la phase de planification ce qui permet de faire jouer un rôle privilégié à certains des facteurs dont nous souhaitons, compte tenu des réalisations de la réponse qui ont été observées, étudier plus particulièrement l'influence. Si nous voulons ajouter un point au dispositif, par exemple si nous souhaitons réaliser un essai ou plusieurs essais supplémentaires, il est également possible de savoir quel sera l'ensemble des termes supplémentaires du modèle que nous pourrions alors estimer. Nous avons réalisé les divers calculs résultant des techniques exposées ci-dessus avec le logiciel Maple ce qui a donné lieu à l'implémentation de nombreux algorithmes. En effet la nature sphérique des dispositifs considérés ne permettait pas de se servir des outils existants.

Mots-clefs : Plans d'expérience, Plans sphériques, Isovariance, Statistique algébrique, Surfaces de réponse, Confusion d'effets, Bases de Gröbner, Groupes de Coxeter.

Abstract

Creating and analysing rotatable spherical designs using combinatorial and algebraic tools.

We propose several ways of constructing spherical designs and investigating their fundamental properties, especially those of rotatable designs. We combine the use of some combinatorial tools such as spherical t -designs and of some algebraic tools, such as Gröbner

bases and Coxeter groups in order to state exact existence results for many rotatable designs whose existence was, up to now, only conjectured thanks to numerical computations. These designs are all subsets of maximal strength among those of the same cardinality or thought to be so thanks to intensive numerical studies. For any of these spherical designs we provide, given any polynomial ordering, the set of the polynomial effects that are not aliased and the complete analysis of the way that some effects happen to be confounded. During the analysis of the experimental results, we can still choose another polynomial ordering which enables us to focus on the effects of the factors that are likely to be the more associated with the response. If ever we want to add one or more experimental runs, we can determine what is the whole set of additional terms of the model that we will be able to estimate. From a computational point of view, we coded all the algorithms using the Maple software, since experimental designs in a spherical domain could not be handled by any of the available softwares.

Keywords : Design of experiments, Spherical designs, Rotatability, Algebraic statistics, Confounding, Response surfaces, Gröbner bases, Coxeter groups, Computational statistics.

1 Motivations

Le travail réalisé porte sur l'utilisation combinée d'outils combinatoires et algébriques pour la construction et l'analyse de plans d'expérience. Les principaux avantages de cette approche sont sa grande généralité, son automatisation et l'obtention des coordonnées exactes des points du plan ainsi que la détermination complète des confusions d'effets. Toutefois, nous ne nous intéresserons ici qu'à la méthodologie des surfaces de réponse, à laquelle le lecteur trouvera une introduction dans Myers et Montgomery (2002), et plus particulièrement au cas des plans sphériques et à la propriété d'isovariance statistique, introduite par Box et Hunter (1957).

Actuellement la construction de plans d'expérience euclidiens repose généralement sur la recherche numérique des coordonnées des points du plan.

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

2 Problématique statistique

2.1 Isovariance

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

2.2 Confusions d'effets

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

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

3 Approche combinatoire

3.1 Questions de construction

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

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

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

Seymour et Zaslavsky (1984) ont donné une preuve non constructive de l'existence de t -plans sphériques combinatoires X : il existe des t -plans sphériques combinatoires pour toute valeur de $|X|$ sauf un nombre fini.

Pour une force donnée t_0 , la recherche des plans de cardinalité minimale permet d'obtenir

des dispositifs qui présentent un intérêt particulier pour le planificateur. Une recherche systématique des plans sphériques combinatoires de force t de cardinalité minimale a été réalisée par Hardin et Sloane en dimension trois (1996) et entreprise en dimension quatre. Leur démarche peut se résumer en deux étapes : l'utilisation de résultats d'existence algébrique puis rapidement d'un critère numérique, la discrédance, qui permet de conjecturer si un sous-ensemble de points de la sphère unité est un t -plan plan sphérique combinatoire ou non.

Or le statisticien a besoin d'avoir la connaissance exacte de la configuration de points qu'il utilise, ce qui contraste avec la situation dans laquelle les plans sphériques combinatoires servent pour l'intégration numérique. Hardin et Sloane (1996) n'ont communiqué que les coordonnées approchées des points des dispositifs qu'ils ont obtenus, l'approche algébrique proposée à la section 4 permet d'en obtenir les coordonnées exactes.

3.2 Plans sphériques combinatoires et isovariance statistique

Considérons un plan dont le support est inclus dans la sphère unité de $\mathbb{R}^n$ et analysé à l'aide d'un modèle polynomial d'ordre q . Collombier (2003) indique que si la matrice des moments des points du plan est invariante par toute transformation du groupe $\mathcal{O}_n$ alors le support de ce plan est un plan sphérique combinatoire de force $2q$.

Lorsque nous analysons un plan sphérique à l'aide d'un modèle polynomial d'ordre supérieur ou égal à 2, apparaissent nécessairement des confusions d'effets. Si cette situation peut être contournée lorsque le modèle utilisé est d'ordre 2 en rajoutant un essai au centre de la sphère, il n'en va pas de même lorsque le modèle utilisé est d'ordre supérieur ou égal à 3. L'approche algébrique proposée à la section 4 permet aussi de traiter cette difficulté.

4 Outils algébriques

4.1 Groupes de Coxeter

L'utilisation de groupes est à la base de la construction de nombreux dispositifs expérimentaux : plans fractionnaires, plans composites centrés, etc. Cette pratique est non seulement due à la simplification des calculs qui en découle mais également au caractère des dispositifs cherchés. Ainsi, par exemple, l'isovariance impose certaines symétries aux plans de cardinal minimal comme le montrent les résultats de Hardin et Sloane (1996) en dimension trois : leurs dispositifs sont en fait des unions d'orbites de points par des groupes de Coxeter. Nous renvoyons au livre de Coxeter et Moser (1980) pour plus de détails sur les groupes de Coxeter.

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

4.2 Bases de Gröbner

Les livres de Cox, Little et O’Shea (1997) et Kreuzer et Robbiano (2000) soulignent que l’intérêt majeur des bases de Gröbner est de permettre une résolution algorithmique de nombreux problèmes de géométrie algébrique et d’algèbre commutative. Si l’utilisation des bases de Gröbner dans le domaine de la planification expérimentale a déjà été théorisée par Pistone, Riccomagno et Wynn (2000), ces méthodes n’ont pas encore été appliquées à la recherche de dispositifs isovariants. De plus le logiciel CoCoA développé par les auteurs précédents, ne concerne que des plans à coordonnées rationnelles. Il est de ce fait inopérant si nous étudions des plans dont les coordonnées appartiennent à des variétés algébriques comme, dans le cas d’étude qui nous intéresse ici, la sphère.

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

En premier lieu, les bases de Gröbner servent à déterminer la variété des plans admissibles sous certaines contraintes, ici l’isovariance. Lorsque le plan est construit comme au paragraphe 4.1, nous calculons les coordonnées exactes des points paramétrant les orbites.

En second lieu, les bases de Gröbner permettent de résoudre non seulement le problème de l’analyse des confusions d’effets mais aussi de connaître les paramètres supplémentaires que l’on pourra estimer en ajoutant un ou plusieurs points précis au dispositif. Ce dernier point repose sur l’utilisation de l’algorithme de Marinari, Möller, Mora (1993) particulièrement adapté à la recherche de bases de Gröbner pour des variétés algébriques de dimension nulle.

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

5 Exemple d’application

L’étude approfondie de l’article de Hardin et Sloane (1996) a permis de valider la méthode proposée ci-dessus et le bon fonctionnement de l’implémentation pratique tout en obtenant des résultats supérieurs et supplémentaires à ceux obtenus originalement, en particulier en ce qui concerne la question de l’existence de dispositifs jusqu’alors conjecturée à l’aide de calculs numériques. Nous présentons ici un exemple type des résultats obtenus.

Nous cherchons un 5-plan sphérique combinatoire de cardinal 12 construit comme l’union des points $(0, 0, 1)$, $(0, 0, -1)$ et de l’ensemble des points obtenus comme orbite du point de coordonnées $(\alpha, 0, \beta)$, avec la condition $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, par le groupe de Coxeter $[3, 5]$, c’est-

à-dire le groupe des symétries de l'icosaèdre. L'analyse des défauts d'isovariance implique que : $5\alpha^2 - 10\beta^2 = 2$. Nous retrouvons le plan dont le support est l'icosaèdre.

Pour ce plan il n'y a pas de confusion d'effets entre les termes de chacun des deux modèles ci-dessous :

- • $\text{EstSet}_{tdeg} := \{1, z, y, x, z^2, yz, xz, y^2, yx, z^3, y^2z, xyz\}$, obtenu pour l'ordre du degré total associé à la condition $z > y > x$,
- • $\text{EstSet}_{plex} := \{1, z, z^2, z^3, y, yz, y^2, y^2z, y^3, y^3z, y^4, y^4z\}$, obtenu pour l'ordre lexicographique initialisé par la condition $z > y > x$.

Bibliographie

- [1] Box, G. E. P. and Hunter, J. S. (1957), Multifactor Experimental Designs for Exploring Response Surfaces, *The Annals of Mathematical Statistics*, 28, 195–241.
- [2] Collombier, D. (2003), *Cours de DEA*, Université Louis Pasteur, Strasbourg.
- [3] Cox, D., Little, J. and O'Shea, D. (1997), *Ideals, varieties and algorithms*, Springer, New York.
- [4] Coxeter, H. S. M., Moser, W. O. J. (1980), *Generators and Relations for Discrete Groups*, Springer-Verlag, Heidelberg.
- [5] Delsarte, P., Goethals, J.M. and Seidel, J.J. (1977), Spherical codes and designs, *Geometriae Dedicata*, 6, 363–388.
- [6] Hardin, R.H. and Sloane, N.J.A. (1996), McLaren's Improved Snub Cube and Other New Spherical Designs in Three Dimensions, *Discrete and Computational Geometry*, 15, 429–441.
- [7] Kreuzer, M. and Robbiano, L. (2000), *Computational Commutative Algebra 1*, Springer, New York.
- [8] Marinari, M. G., Möller, H. M. and Mora, T. (1993), Gröbner bases of ideals defined by functionals with an application to ideals of projective points. *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing* 4, 103–145.
- [9] Myers, R. H. and Montgomery D. C. (2002), *Response surface Methodology*, John Wiley & Sons, New York.
- [10] Pistone, G., Riccomagno, E. and Wynn, H. P. (2001), *Algebraic Statistics*, Chapman & Hall.
- [11] Seymour, P. D. and Zaslavsky, T. (1984), Averaging sets : a generalization of mean values and spherical designs, *Advances in Mathematics*, 52, 213–240.