T. D. n° 4
Calculs d'optimalité et d'isovariance

Exercice 1. Calculs de critères d'optimalité

Considérons le plan de Koshal en dimension 3, noté ζ^*, suivant :

$$\mathbf{D}_{SCD4} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Le domaine expérimental est le cube $[-1;1]^3$. Le modèle utilisé avec ce plan est le suivant :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}} &= \beta_0 + \tau_1\, x_1 + \tau_2\, x_2 + \tau_3\, x_3 + \tau_{12}\, x_1x_2 + \tau_{13}\, x_1x_3 + \tau_{23}\, x_2x_3, \\ Var\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}} &= \sigma^2,\ \forall u, \boldsymbol{x},\ Cov(\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}, \mathbf{Y}_{u',\boldsymbol{x'}}) = 0,\ \forall u \neq u'. \end{aligned}$$

1. Calculer la valeur du critère de D optimalité puis la D efficacité du plan ζ^*. Rappel, la D efficacité est donnée par la formule suivante :

$$D_{eff} = \left(\frac{\det(M(\zeta^*))}{\max_\zeta \det(M(\zeta))} \right)^{1/k},$$

où ζ est un plan approché sur $[-1;1]^3$ et $M(\zeta)$ sa matrice des moments pour le modèle défini ci-dessus. Vous pourrez utiliser le fait que pour un modèle polynomial d'ordre 1 ou un modèle polynomial d'ordre 1 avec interactions sur le cube :

$$\max_\zeta \det(M(\zeta)) = 1.$$

2. Calculer la valeur du critère de A optimalité puis la A efficacité du plan ζ^*. Rappel, le critère A est proportionnel à la somme des variances des estimateurs des paramètres du modèle et est défini par :

$$A(\zeta^*) = \mathrm{tr}\left(M(\zeta^*)^{-1}\right).$$

La A efficacité est, quant à elle, donnée par la formule suivante :

$$A_{eff} = \frac{\min_\zeta \mathrm{tr}\left(M(\zeta)^{-1}\right)}{\mathrm{tr}\left(M(\zeta^*)^{-1}\right)},$$

où ζ est un plan approché sur $[-1;1]^3$ et $M(\zeta)$ sa matrice des moments pour le modèle défini ci-dessus. Vous pourrez utiliser le fait que pour le domaine et le modèle considéré :

$$\min_{\zeta} \operatorname{tr}\left(M(\zeta)^{-1}\right) = k,$$

où p est le nombre de termes dans le modèle.

3. Calculer les valeurs des critères D et A pour les plans SCD2, HEX, SCD4 et CCD définis à l'exercice **A**.

Exercice 2. Isovariance

Partie 1

Nous souhaitons comparer les propriétés de deux plans en dimension 2, celui basé sur un hexagone (HEX), centré en l'origine du repère et dont l'un des sommets appartient à l'axe des abscisses, complété par deux essais au centre du domaine et un petit plan composite (SCD2) [1]. Voici $\mathbf{D}_{SCD2}$ la matrice des essais du petit plan composite et $\mathbf{D}_{HEX}$ la matrice des essais du plan à support hexagonal :

$$\mathbf{D}_{SCD2} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \\ -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D}_{HEX} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{3/2} \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{3/2} \\ -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2}/2 & -\sqrt{3/2} \\ \sqrt{2}/2 & -\sqrt{3/2} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ces plans sont utilisés avec un modèle polynomial complet de degré deux. Le domaine expérimental considéré est un disque de rayon $\sqrt{2}$ centré en l'origine. Soit N l'effectif total commun de chacun des plans et $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)$.
Soient $\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}^{SCD2}$ (resp. $\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}^{HEX}$) la réponse observable de l'unité expérimentale $u \in \mathfrak{U}$ quand elle est soumise au traitement $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathfrak{E}$, $\mathbf{Y}^{SCD2} = {}^t(\mathbf{Y}_u^{SCD2} = \mathbf{Y}_{u,d^{SCD2}(u)}\ u \in \mathfrak{U})$ (resp. $\mathbf{Y}^{HEX} = {}^t(\mathbf{Y}_u^{HEX} = \mathbf{Y}_{u,d^{HEX}(u)}\ u \in \mathfrak{U})$) le vecteur aléatoire observé quand on utilise le plan SCD2 (resp. HEX) et $y^{SCD2} \in \mathbb{R}^n$ (resp. $y^{HEX} \in \mathbb{R}^n$) l'observation faite de $\mathbf{Y}^{SCD2}$ (resp. $\mathbf{Y}^{HEX}$).

Supposons tout d'abord que le comportement de ces variables aléatoires soit décrit au moyen d'un modèle d'ordre 2

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}} &= \beta_0 + \sum_j \tau_j\, x_j + \sum_{k \geq j} \tau_{jk}\, x_j x_k, \\ Var\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}} &= \sigma^2,\ \forall u, \boldsymbol{x},\ Cov(\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}, \mathbf{Y}_{u',\boldsymbol{x}'}) = 0,\ \forall u \neq u'. \end{aligned}$$

1. Un petit plan composite est construit de manière similaire à un plan composite centré sauf que pour la partie factorielle du plan, une fraction régulière, de résolution au moins III, du plan factoriel complet est utilisée.

1. Vérifier que les essais de ces deux plans, qui ne sont pas réalisés au centre du domaine, sont tous à une même distance α de l'origine à préciser.
2. Pour les deux plans HEX et SCD2, calculer les quantités $NVar(\hat{\beta}_0)/\sigma^2$, $NVar(\hat{\tau}_{11})/\sigma^2$, $NVar(\hat{\tau}_{22})/\sigma^2$, $NVar(\hat{\tau}_1)/\sigma^2$, $NVar(\hat{\tau}_2)/\sigma^2$ et $NVar(\hat{\tau}_{12})/\sigma^2$. Commenter les résultats.
3. Calculer $NVar\hat{Y}(x)$ au centre du domaine et pour tous les points support du plan pour les deux plans HEX et SCD2. Commenter les résultats.
4. Montrer que le plan HEX est isovariant. Illustrer cette propriété avec les résultats de la question **3.** puis en calculant $NVar\hat{Y}(x)$ en tout point du domaine expérimental.
5. Le plan SCD2 est-il isovariant ? Vous pourrez utiliser les résultats de la question **3.** ou vous intéresser aux moments impairs du plan.

Partie 2

Pour $\alpha = 2$, soient le petit plan composite (SCD4) et le plan composite centré (CCD), tous les deux complétés par 4 essais au centre, suivants :

$$\mathbf{D}_{SCD4} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ -\alpha & 0 & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{D}_{CCD} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ -\alpha & 0 & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ces plans sont utilisés avec un modèle polynomial complet de degré deux. Le domaine expérimental considéré est une boule de rayon 2 centrée en l'origine. Soient N_{SCD4} et N_{CCD} les effectifs de chacun des plans et $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)$.
Soient $\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}^{SCD4}$ (resp. $\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}^{CCD}$) la réponse observable de l'unité expérimentale $u \in \mathfrak{U}$ quand elle est soumise au traitement $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2) \in \mathfrak{E}$, $\mathbf{Y}^{SCD4} = {}^t(\mathbf{Y}_u^{SCD4} = \mathbf{Y}_{u,d^{SCD4}(u)}\ u \in \mathfrak{U})$ (resp. $\mathbf{Y}^{CCD} = {}^t(\mathbf{Y}_u^{CCD} = \mathbf{Y}_{u,d^{CCD}(u)}\ u \in \mathfrak{U})$) le vecteur aléatoire observé quand on utilise le plan SCD4 (resp. CCD) et $y^{SCD4} \in \mathbb{R}^n$ (resp. $y^{CCD} \in \mathbb{R}^n$) l'observation faite de $\mathbf{Y}^{SCD4}$ (resp. $\mathbf{Y}^{CCD}$).

Supposons tout d'abord que le comportement de ces variables aléatoires soit décrit au moyen d'un modèle d'ordre 2

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}} &= \beta_0 + \sum_j \tau_j\, x_j + \sum_{k\geq j} \tau_{jk}\, x_j x_k,\\ Var\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}} &= \sigma^2,\ \forall u, \boldsymbol{x},\ Cov(\mathbf{Y}_{u,\boldsymbol{x}}, \mathbf{Y}_{u',\boldsymbol{x}'}) = 0,\ \forall u \neq u'.\end{aligned}$$

1. Vérifier que les essais de ces deux plans, qui ne sont pas réalisés au centre du domaine, sont tous à une même distance ρ de l'origine à préciser.

2. Pour $1 \leqslant i \leqslant 4$ les couples (i, j) tels que $1 \leqslant i < j \leqslant 4$ et les deux plans CCD et SCD4, calculer les quantités $N_\bullet Var(\hat{\beta}_0)/\sigma^2$, $N_\bullet Var(\hat{\tau}_{ii})/\sigma^2$, $N_\bullet Var(\hat{\tau}_i)/\sigma^2$ et $N_\bullet Var(\hat{\tau}_{ij})/\sigma^2$. Commenter les résultats.

3. Calculer $N_\bullet Var\hat{Y}(x)$ au centre du domaine et pour tous les points support du plan pour les deux plans CCD et SCD4. Commenter les résultats.

4. Montrer que le plan CCD est isovariant. Illustrer cette propriété avec les résultats de la question **3.**

5. Le plan SCD4 est-il isovariant ? Vous pourrez utiliser les résultats de la question **3.** ou vous intéresser aux moments impairs du plan.