Chapitre IV : Plans pour Surfaces de Réponse (PSR)

Response Surface Methodology (RSM)

Introduction

Les plans étudiés précédemment n'avaient que deux niveaux d'étude par facteur et les modèles mathématiques utilisés étaient du premier degré (avec ou sans interactions) par rapport à chaque facteur. Ces plans sont les plus employés car ils permettent le criblage des facteurs et conduisent parfois à des modélisations simples mais suffisantes. Pourtant, il existe de nombreux cas où il est nécessaire d'avoir une bonne modélisation des phénomènes étudiés et où il faut passer à des modèles mathématiques du second degré. On fait alors appel aux plans pour surfaces de réponse. Ces plans utilisent des modèles polynomiaux du second degré. Nous étudierons les trois plus importants plans de ce type : les plans composites, les plans de Box-Behnken et les plans de Doehlert.

Le modèle mathématique postulé utilisé avec les plans pour surfaces de réponse est un modèle du second degré avec interactions d'ordre 2 :

– pour deux facteurs :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_{12}x_1x_2 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + e$$

– pour trois facteurs :

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + a_{23}x_2x_3 + a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + e$$

Présentation des plans composites

Les plans composites se prêtent bien au déroulement séquentiel d'une étude. La première partie de l'étude est un plan factoriel complet ou fractionnaire complété par des points au centre pour vérifier la validité du modèle (termes du premier degré et termes d'interactions). Si les tests de validation sont positifs (la réponse mesurée au centre du domaine est statistiquement égale à la réponse calculée au même point), l'étude s'achève le plus souvent, mais s'ils sont négatifs, on entreprend des essais supplémentaires pour établir un modèle du second degré. Les essais supplémentaires sont représentés par des points d'expériences situés sur les axes de coordonnées et par de nouveaux points centraux. Les points situés sur les axes de coordonnées sont appelés les *points en étoile*. Les plans composites présentent donc trois parties :

– Le plan factoriel (2k ou 2^{k-q}) : c'est un plan factoriel complet ou fractionnaire à deux niveaux par facteurs. Les points expérimentaux sont aux sommets du domaine d'étude.

– Le plan en étoile (2*k) : les points du plan en étoile sont sur les axes et ils sont, en général, tous situés à la même distance du centre du domaine d'étude.

– Les points au centre du domaine d'étude. On prévoit toujours des points expérimentaux situés au centre du domaine d'étude, et cela aussi bien pour les plans factoriels que pour les plans en étoile.

Le nombre total *n* d'essais à réaliser est la somme des essais du plan factoriel (*n*f), des essais du plan en étoile (*n*α) et des essais au centre (*n*0). Le nombre *n* des essais d'un plan composite est donné par la relation :

$n = n_f + n_\alpha + n_0$

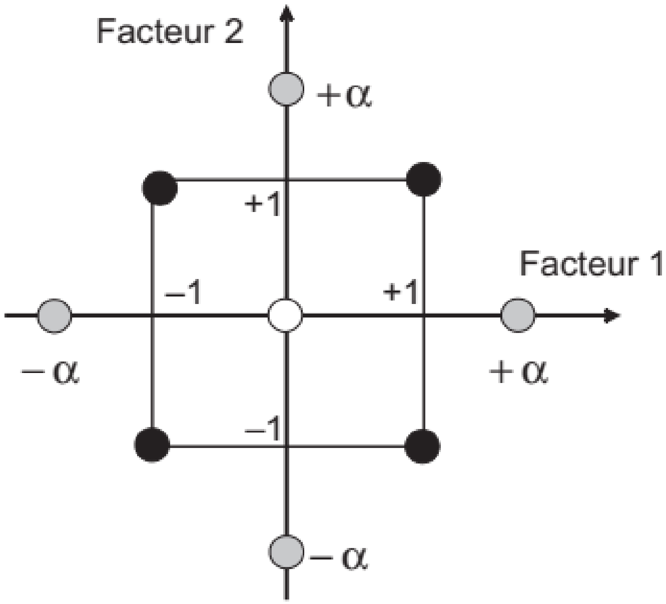

Figure 1 : Plan composite pour l'étude de deux facteurs. Les points factoriels sont en noirs, les points en étoile sont en gris clair, les points centraux sont en blanc.

Le nombre de niveaux est 5 pour chacun des facteurs et seulement 3 lorsque l'on a un plan composite à faces centrées.

Position des points en étoile

On peut vouloir que l'erreur de prédiction soit la même pour des distances également éloignées du centre du domaine. Dans ce cas, on choisit le critère d'isovariance par rotation. La valeur de α est égale à :

$$\alpha = n_f^{1/4}$$

Si l'on veut que le plan composite satisfasse le critère d'isovariance par rotation il faut placer les points en étoile à une distance à égale à la racine quatrième du nombre de points du plan factoriel.

On peut vouloir que les coefficients répondent au critère de *presque-orthogonalité,* il faut alors choisir α tel que :

$$\alpha = \left(\frac{n_f \left(\sqrt{n_0 + n_f + n_\alpha} - \sqrt{n_f} \right)^2}{4} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Tableau 1 : Valeur de α en fonction du nombre de points factoriels (n_f), en étoile (n_α) et centraux (n_0) pour le critère de presque-orthogonalité.

Nombre de facteurs	2	3	4	5	5	6	6
Plan	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}	2^5	2^{6-1}	2^6
n_f	4	8	16	16	32	32	64
n_α	4	6	8	10	10	12	12
$n_0 = 1$	1	1,215	1,414	1,547	1,596	1,724	1,761
$n_0 = 2$	1,078	1,287	1,483	1,607	1,662	1,784	1,824
$n_0 = 3$	1,147	1,353	1,547	1,664	1,724	1,841	1,885
$n_0 = 4$	1,210	1,414	1,607	1,719	1,784	1,896	1,943

Tableau 2 : Matrice d'expériences du plan composite centré avec k=3.

	N	X_1	X_2	X_3
Plan Factoriel Complet 2^k	1	-1	-1	-1
	2	+1	-1	-1
	3	-1	+1	-1
	4	+1	+1	-1
	5	-1	-1	+1
	6	+1	-1	+1
	7	-1	+1	+1
	8	+1	+1	+1
Plan en étoile 2*k	9	-α	0	0
	10	+α	0	0
	11	0	-α	0
	12	0	+α	+1
	13	0	0	-α
	14	0	0	+α
Points centraux	15	0	0	0
	16	0	0	0

Présentation des plans de Box-Behnken

Box et Behnken ont proposé en 1960 ces plans qui permettent d'établir directement des modèles du second degré. Tous les facteurs ont trois niveaux : –1, 0 et +1. Ces plans sont faciles à mettre en œuvre et possèdent la propriété de séquentialité. On peut entreprendre l'étude des *k* premiers facteurs en se réservant la possibilité d'en ajouter de nouveaux sans perdre les résultats des essais déjà effectués. Le plan de Box-Behnken pour trois facteurs est construit sur un cube. Pour quatre facteurs ce plan est construit sur un hypercube à quatre dimensions. On place les points expérimentaux non pas aux sommets du cube ou de l'hypercube, mais au milieu des arêtes ou au centre des faces (carrés) ou au centre des cubes. Cette disposition a pour conséquence de répartir tous les points expérimentaux à égale distance du centre du domaine d'étude, donc sur une sphère ou sur une hypersphère suivant le nombre de dimensions. On ajoute des points au centre du domaine d'étude.

Le nombre de points d'expériences est donné comme suit : $\mathbf{N= 2k(k-1) + n_0}$ avec $k\geq3$.

Le plan de Box-Behnken pour trois facteurs est illustré par la figure 2. Le cube possède 12 arêtes. On a l'habitude d'ajouter des points d'expériences au centre du domaine d'étude, en général trois. Le plan de Box-Behnken pour 3 facteurs possède donc 12 + 3 essais, soit 15 essais. On pourra remarquer qu'avec 4 points au centre au lieu de 3, on obtient un plan qui répond au critère de presque orthogonalité.

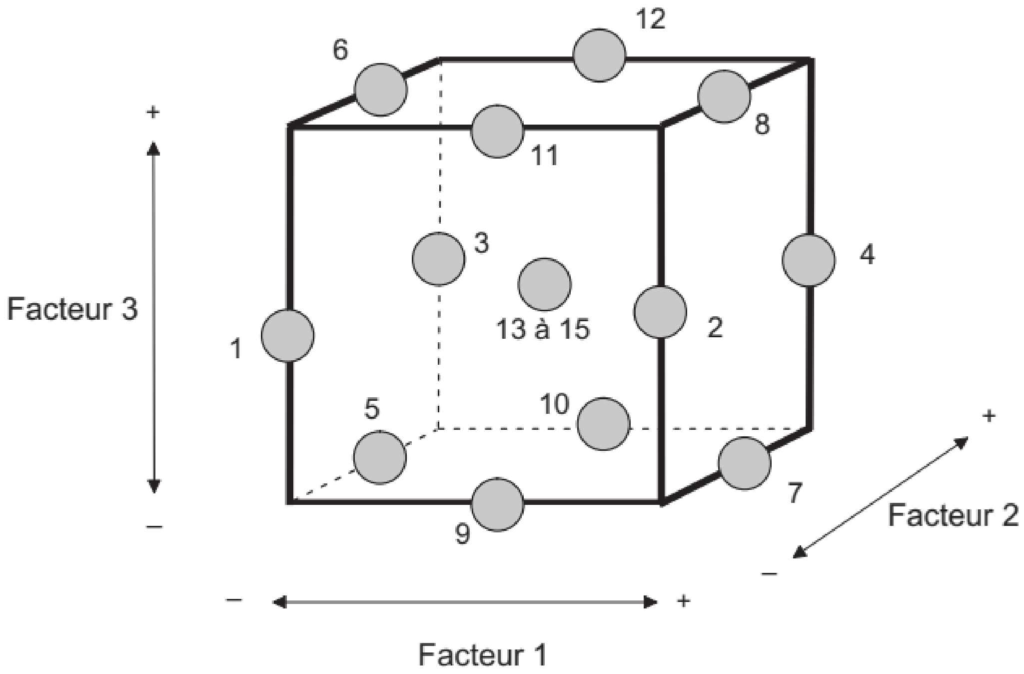

Figure 2 : Illustration du plan de Box-Behnken pour trois facteurs. Il y a douze points d'expériences au milieu des arêtes du cube et trois points au centre.

Tableau 3 : Matrice d'expériences du plan de Box-Behnken avec k=3.

	X_1	X_2	X_3
1	-1	-1	0
2	+1	-1	0
3	-1	+1	0
4	+1	+1	0
5	-1	0	-1
6	-1	0	+1
7	+1	0	-1
8	+1	0	+1
9	0	-1	-1
10	0	+1	-1
11	0	-1	+1
12	0	+1	+1
13	0	0	0
14	0	0	0
15	0	0	0

Présentation des plans de Doehlert

Les points d'expériences des plans proposés par David H. Doehlert en 1970 remplissent de manière uniforme l'espace expérimental. Pour deux facteurs les points expérimentaux sont situés aux sommets d'un hexagone régulier et il y a un point au centre. Ayant sept points expérimentaux, ce plan permet de calculer au moins sept inconnues, donc sept coefficients. Comme les points expérimentaux sont régulièrement répartis dans l'espace expérimental, il sera facile d'étendre le plan vers n'importe quelle direction de l'espace en ajoutant des points qui seront, eux aussi, régulièrement répartis.

Ces plans permettent également l'introduction facile de nouveaux facteurs. Les nouvelles expériences viendront compléter les premières et aucune expérience ne sera perdue. La seule précaution à prendre est de maintenir les facteurs non étudiés à une valeur constante (niveau 0) pendant l'étude des facteurs actifs. Le tableau 4 est la traduction, sous forme de matrice d'expériences, de la figure 3. La disposition des points selon la figure 3 conduit à cinq niveaux pour le facteur 1 et trois niveaux pour le facteur 2. Avant d'attribuer les numéros aux facteurs, on vérifiera qu'ils sont compatibles avec ces nombres de niveaux.

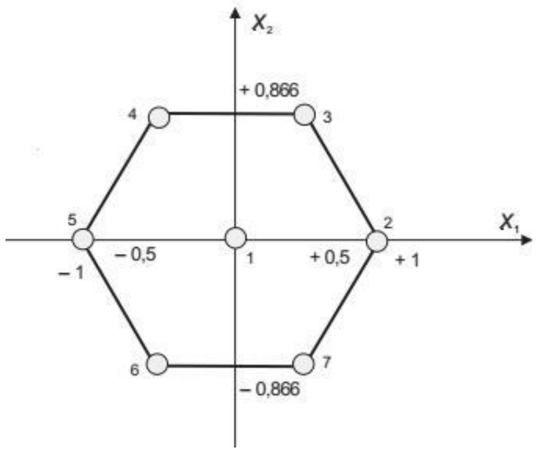

Figure 3 : Plan de Doehlert pour l'étude de deux facteurs.

Les points sont régulièrement disposés sur un hexagone et il y a un point central.

Tableau 4 : Plan de Doehlert pour deux facteurs.

Essai n°	Facteur 1	Facteur 2	
1	0	0	
2	+ 1	0	
3	+ 0,5	+ 0,866	
4	− 0,5	+ 0,866	$0{,}866 = \frac{\sqrt{3}}{2}$
5	− 1	0	
6	− 0,5	− 0,866	
7	+ 0,5	− 0,866	

Si l'on éprouve quelques difficultés, on peut toujours adopter un autre plan de Doehlert en faisant tourner l'hexagone. La figure suivante illustre une autre disposition du même plan après une rotation de 90°. C'est maintenant le facteur 1 qui a 3 niveaux et le facteur 2 qui en a 5.

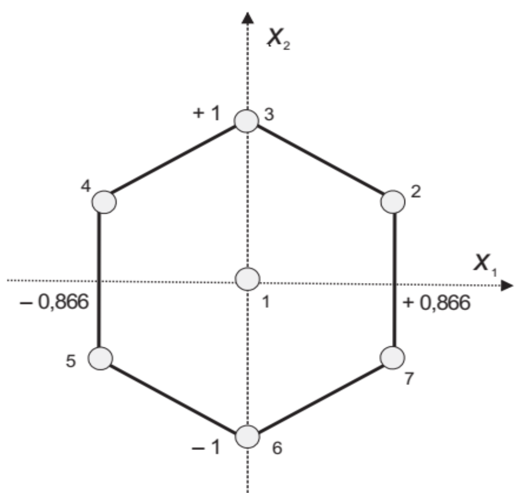

Figure 4 : Autre disposition possible des points d'un plan de Doehlert pour l'étude de deux facteurs. Les points sont toujours régulièrement disposés dans l'espace expérimental.

Tous les points du plan de Doehlert sont sur un cercle de rayon unité (en grandeurs centrées réduites). Le domaine défini par les plans de Doehlert est un domaine sphérique, un cercle dans un espace à deux dimensions, une sphère dans un espace à trois dimensions, une hypersphère dans un espace à plus de trois dimensions. Si les résultats cherchés ne sont pas dans le domaine d'étude, on peut étendre ce domaine dans la direction où l'on a le plus de chances de trouver la solution souhaitée. Il suffit d'ajouter trois points d'expériences (Tableau 5) et l'on retrouve un nouveau plan de Doehlert (Figure suivante). En effet, les points n° 2, 1, 7, 8, 9, 10 et 3 forment un nouvel hexagone. On peut étendre le plan d'expériences dans les autres directions.

Tableau 5 : Points d'extension du plan de Doehlert pour deux facteurs.

Essai n°	Facteur 1	Facteur 2
8	+1,5	–0,866
9	+2	0
10	+1,5	+0,866

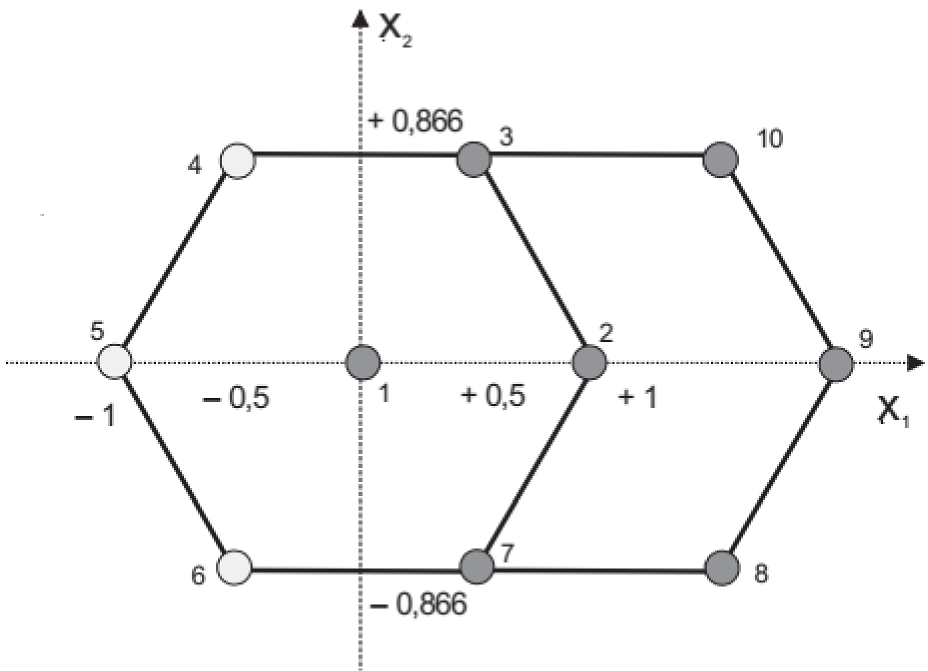

Figure 5 : Extension d'un plan de Doehlert à deux facteurs. Trois points suffisent pour retrouver un nouveau plan de Doehlert.

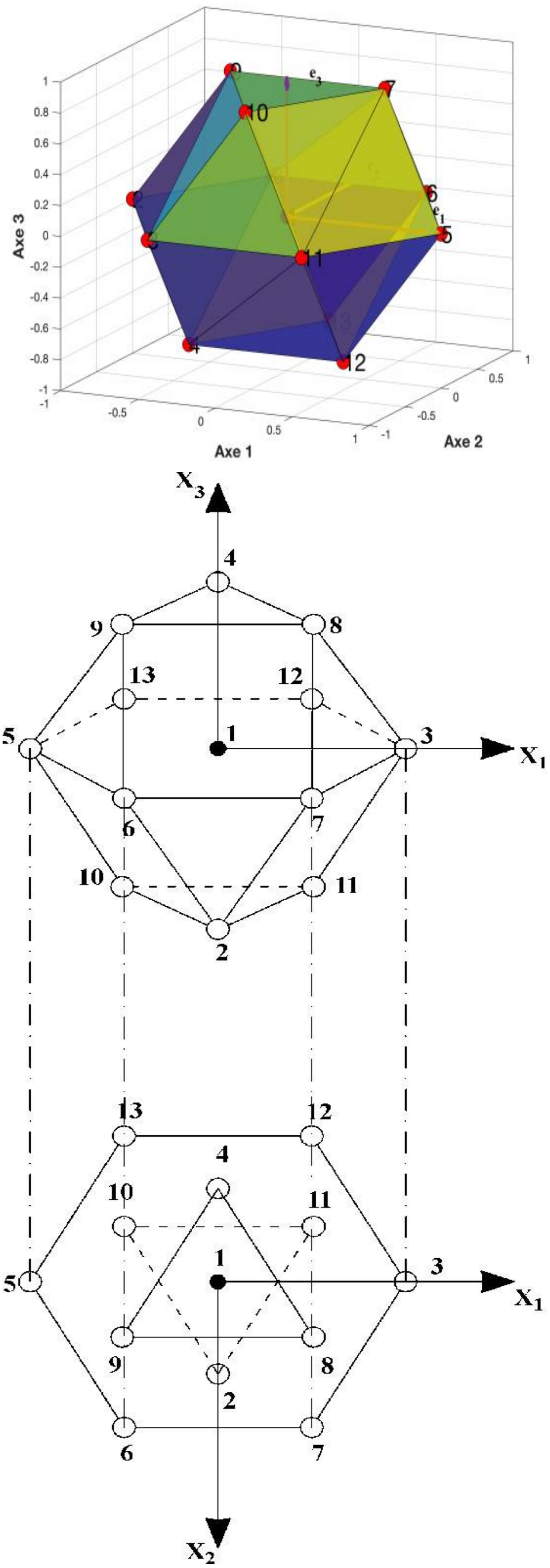

Figure 6 : Plan de Doehlert pour l'étude de trois facteurs.