Université Mohammed V Agdal
Faculté des sciences
Département de chimie
Rabat

Chimiométrie et ses applications

Cours de Master

Pr R. BCHITOU

Chapitre I
Rappels statistiques

INTRODUCTION A LA PRATIQUE DES PLANS D'EXPERIENCES

I/ Matrices d´expériences et méthodologie

Les objectifs :

- Le criblage des facteurs : classement hiérarchisé des facteurs;
- Les études quantitatives des facteurs : quantification des influences principales et des synergies éventuelles;
- Les études quantitatives des réponses : modélisation prévisionnelle du phénomène étudié;
- L'optimisation : déterminer un ou plusieurs points de fonctionnement optimaux .

Les Modèles : polynômes

Soit X un facteur quantitatif. Il peut être représenté par un polynôme dans les modèles :

Premier degré

$$Y\ (\text{réponse}) = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2$$

Effet principal

Synergique

$$Y\ (\text{réponse}) = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_1 X_2$$

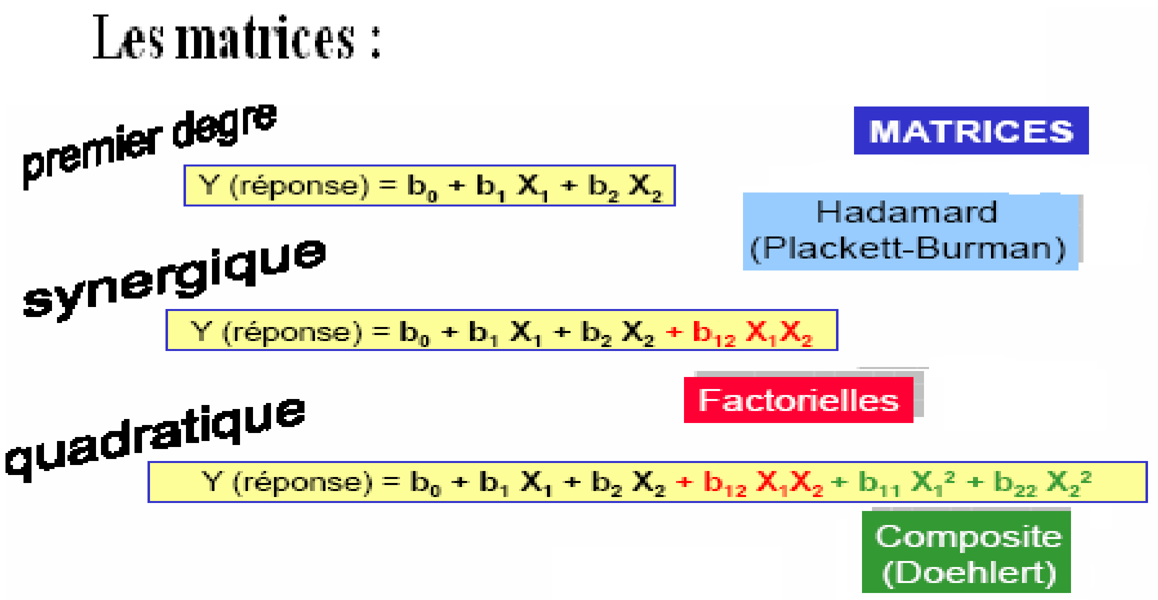
Effet d'interaction

Quadratique

$$Y\ (\text{réponse}) = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_1 X_2 + b_{11} X_1^2 + b_{22} X_2^2$$

Surface de réponse

« Courbure »



II/ Rappel de quelques définitions concernant le plan d'expériences

●***Réponse**:* Le résultat mesuré d'une étude. A chaque point du domaine d'étude correspond une réponse. L'ensemble des réponses forme la surface de réponse.

●***Variables explicatives et notion d'interaction*** : Les variables explicatives d'une étude sont les paramètres susceptibles de modifier les réponses de cette étude. Si l'effet d'une variable explicative dépend du niveau d'une autre variable explicative, on dit qu'il y a interaction entre ces deux variables explicatives.

●***Niveaux d'une variable explicative* :** Les différents états que peut prendre cette variable explicative

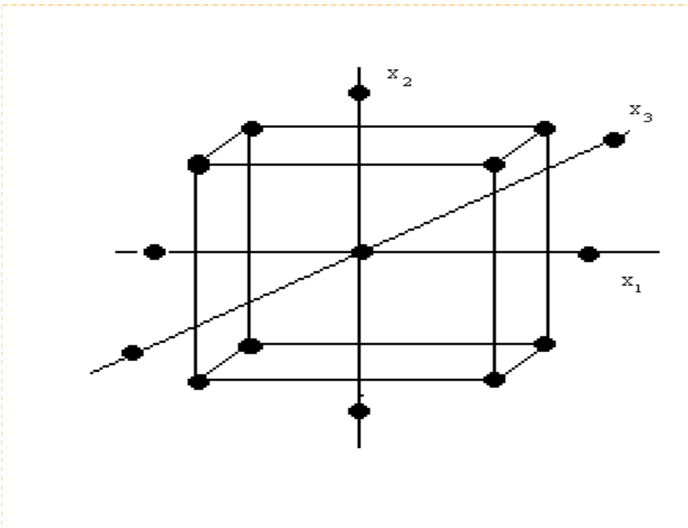
●***Notion d'effet significatif :*** L'effet d'une variable explicative sur la réponse y s'obtient en comparant les deux résultats de mesure y1 et y2 de réponse, mesurée lorsque la variable explicative passe d'un niveau (0) à un niveau (+). Si l'écart entre y1 et y2 est important on dit que le facteur est influent ou significatif.

●***Variables codées et variables naturelles :*** Les variables naturelles xi sont les valeurs qui correspondent à chaque niveau d'une variable explicative. Pour comparer les effets des variables naturelles sur la réponse, il est nécessaire de les remplacer par les variables codées Xi qui sont sans unité.

●***Matrice d'expériences : Matrice*** d'expérience est un tableau de n lignes et k colonnes, regroupant les conditions expérimentales d'un plan d'expériences. n et k correspondent respectivement au nombre d'expériences et au nombre des variables codées.

●***Courbes d'isoréponses :*** Après la détermination du modèle et la vérification de sa validité, les courbes d'isoréponses peuvent être tracé à l'intérieur du domaine expérimental. Ces courbes représentent des plans pour surfaces de réponse c'est à dire la représentation graphique des résultats (modèle estimé) pour pouvoir en tirer des optimums.

La représentation dans 3^3 de ce plan est donnée dans la figure suivante :



Représentation d'un plan composite centré en 3 dimensions

I-1/ Définition de la régression

La régression est une méthode très utilisée en estimation.
A partir d'un ensemble de valeurs expérimentales représentées par des points sur un graphique , on cherche à calculer la courbe qui reproduit le mieux les variations de la grandeur à étudier, c'est-à-dire celle qui passe par tous les points ou le plus proche possible.

Quand on trace la courbe d'étalonnage d'une méthode d'analyse à partir d'étalons choisis par l'expérimentateur,

la concentration X de l'analyte n'est pas considérée comme variable aléatoire puisqu'elle est connue avec précision.

En revanche, la réponse Y obtenue est une variable aléatoire dans la mesure où elle dépend non seulement de X,

mais aussi de l'aléa de l'erreur expérimentale.

I-2/ Régression linéaire

Si X représente une teneur connue en analyte

Y représente le résultat observé,

On peut disposer de n couples $[x_i, y_i]$ pour deux variables X et Y que l'on suppose liées : à chaque valeur de X est associée une valeur de Y avec la relation :

$$(Y = \beta_1 X + \beta_0)$$

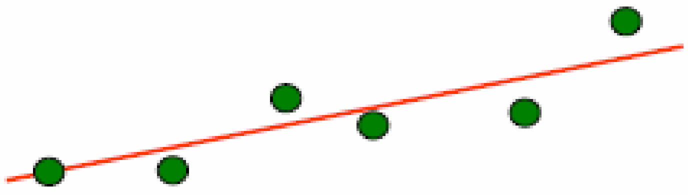
Mais, expérimentalement, à chaque valeur x_i de X, on obtient une valeur y_i entachée de l'erreur expérimentale ε_i. On a en réalité :

$$y_i = \beta_1 x_i + \beta_0 + \varepsilon_i$$

A cause de cette erreur ε_i associée à chaque couple $[x_i, y_i]$, si on représente graphiquement y_i en fonction de x_i,

on ne va pas obtenir des points "idéalement alignés",

mais un «nuage» de points plus ou moins écartés de cette droite idéale.



I- 3/ Analyse quantitative et Étalonnage

Les données sont toujours en nombre limité

elles ne représentent donc qu'un échantillon de la population de toutes les mesures de la teneur en analyse de l'étalon que l'on pourrait effectuer.

X représente une teneur connue en analyse

Y représente le résultat observé,

la relation linéaire postulée devient : $Y = b_1X + b_0$

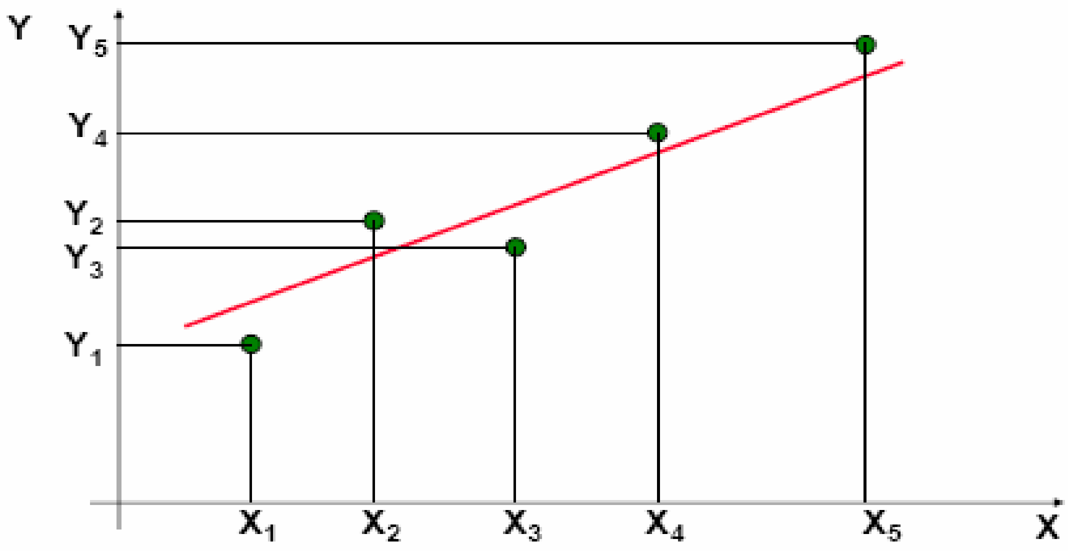
Avec uniquement une « estimation » des coefficients b_0 et b_1 du modèle postulé.

$$Y = \beta_1 X + \beta_0$$

Modèle linéaire

Avec une seule variable X le modèle s 'écrit :

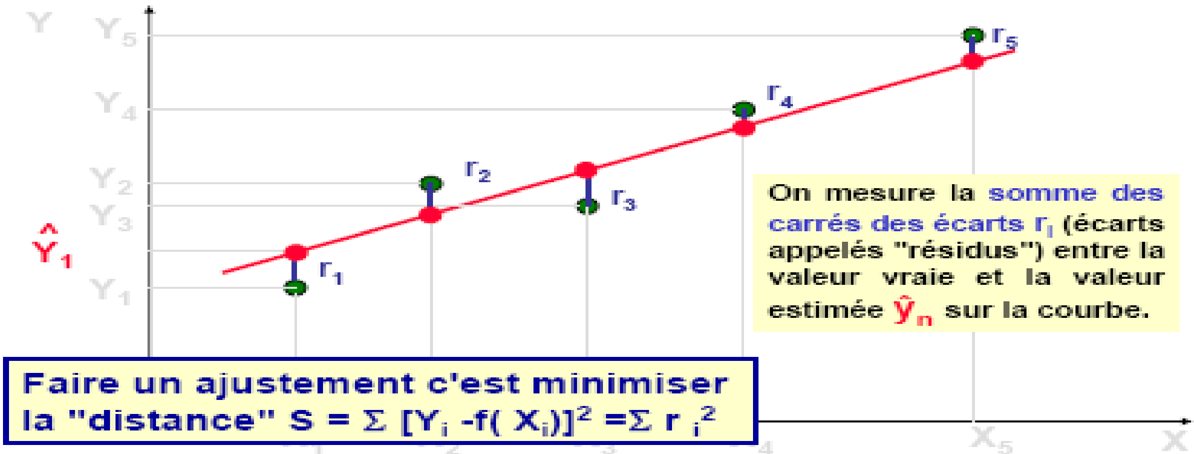
$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + r$$



Ajustement linéaire

Avec **une seule variable** X le modèle s 'écrit :

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + r$$



On mesure la **somme des carrés des écarts r_i** (écarts appelés "résidus") entre la valeur vraie et la valeur estimée $\hat{y}_n$ sur la courbe.

Faire un ajustement c'est minimiser la "distance" $S = \Sigma\, [Y_i - f(X_i)]^2 = \Sigma\, r_i^{\,2}$

Estimation des coefficients

Dans ce système les β_i sont les inconnues que nous devons estimer : (bi est l '*estimation* calculée de βi).

1. Au sens des moindres carrés (résolution algébrique) :

$$\hat{\beta}_1 = b_1 = \frac{\Sigma(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\Sigma\,(x_i - \bar{x})^2} \quad \text{et} \quad \hat{\beta}_0 = b_0 = \bar{y} - b_1\,\bar{X}$$

2. Au sens des moindres carrés (résolution matricielle) :

Expression matricielle de la régression

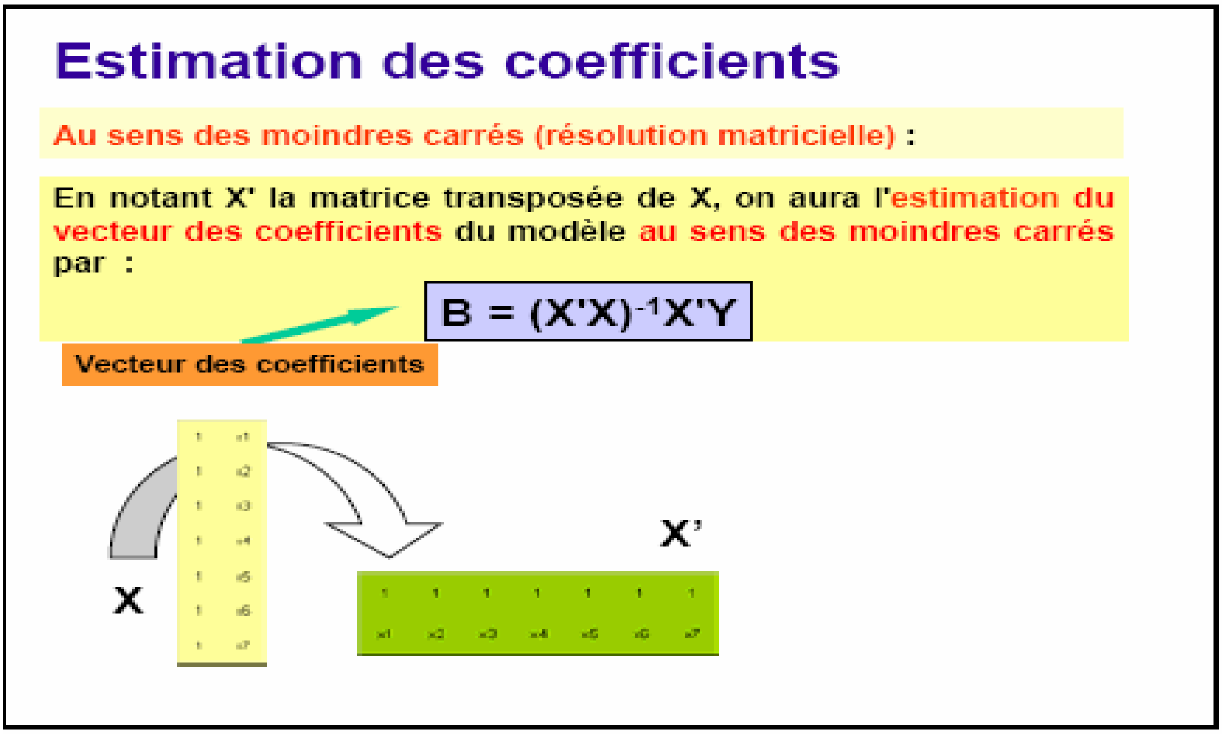
$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \\ \cdots & \cdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ \cdots \\ r_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ \cdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \hat{y}_3 \\ \hat{y}_4 \\ \cdots \\ \hat{y}_n \end{pmatrix}$$

Vecteur des résidus : **r**

Vecteur de la réponse expérimentale

$$X\,B + r = Y$$



Analyse de la régression linéaire

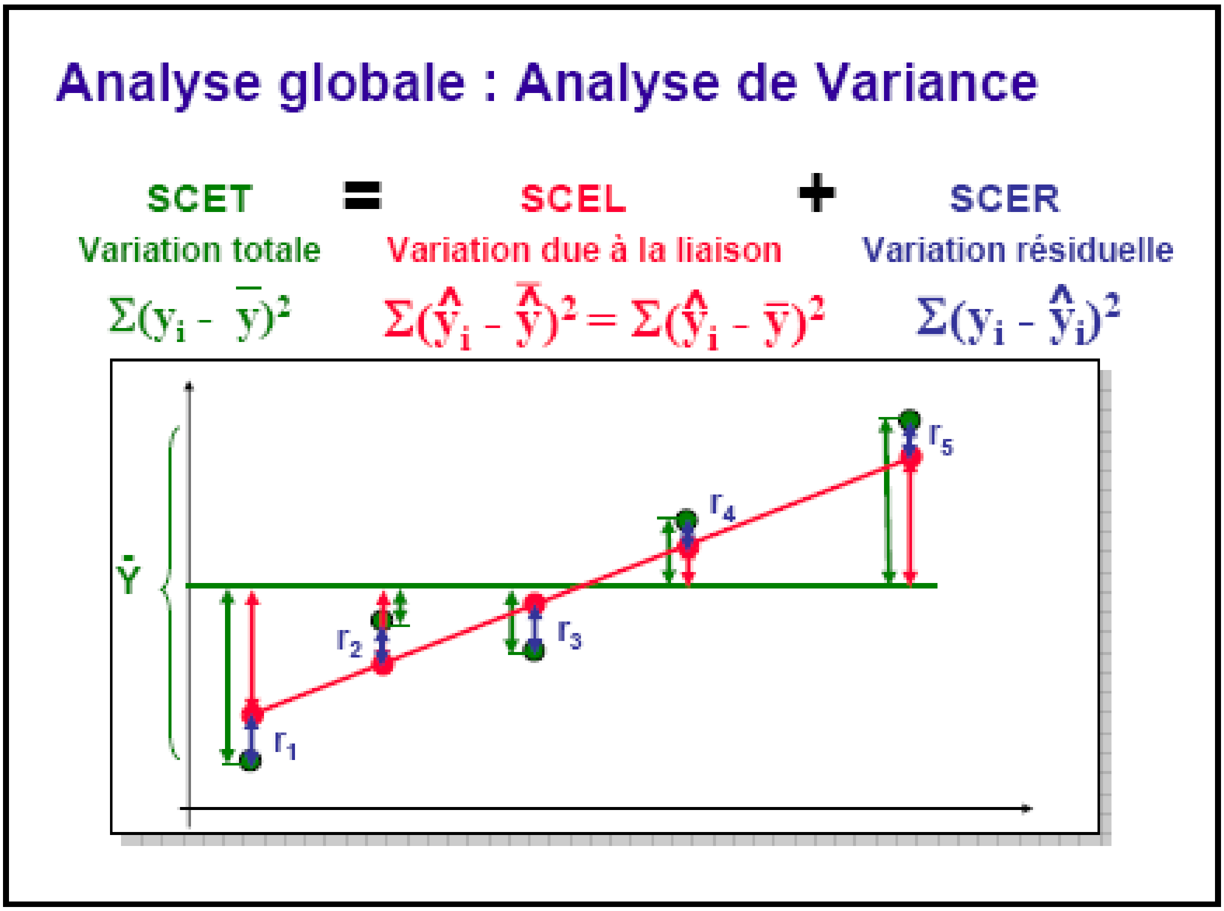
Les variations observées pour Y sont- elle dues globalement aux variations de X ? Quelle confiance peut en avoir ?

D’une part globalement pour la régression :

- **Analyse de variance/ coefficients**
- **Examen des résidus**
- **Manque d’ajustement (Lack of fit)**

D’autre part individuellement pour les estimateurs :

- **Simplification du modèle**
- **Pertinence quadratique global**



Toute dispersion d'une série de données étant exprimée par la somme des carrés des écarts à la moyenne, on démontre la relation suivante sur laquelle est basée l'analyse de variance :

$$SCE_T = SCE_L + SCE_R$$

Variation totale

$$\Sigma(y_i - \bar{y})^2$$

Variation due à la liaison

$$\Sigma(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2 = \Sigma(\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

Variation résiduelle

$$\Sigma(y_i - \hat{y}_i)^2$$

Si le modèle expliquait "idéalement" les résultats expérimentaux, nous aurions $SCE_T = SCE_L$

Pour un modèle parfait : $SCE_R = 0$
(il n'y a pas de différence entre valeurs expérimentales et valeurs calculées).

ou sous une autre forme $SCE_L/SCE_T = 1$

Coefficient de détermination : R^2

$R^2 = SCE_L / SCE_T$

$SCE_L = SCE_T - SCE_R$

$R^2 = (SCE_T - SCE_R)/ SCE_T$

$$R^2 = 1 - \frac{SCE_R}{SCE_T}$$

R^2 est la part de la dispersion expliquée par le modèle.

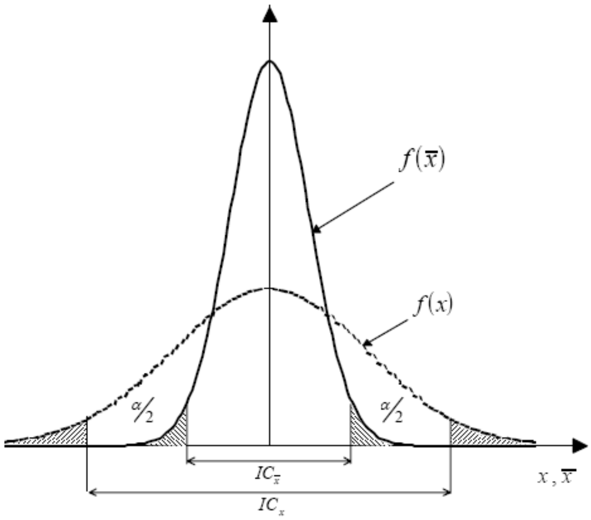
Propriétés de la loi normale

- Moyenne :

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

- Variance :

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \overline{x}\right)^2$$

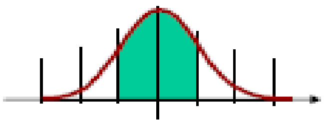


Le graphe de la Loi Normale est caractérisé par :

- Une courbe en cloche asymptotique à l'axe des x, dont le maximum est pour $x = \overline{x}$,
- Une symétrie par rapport à l'axe $x = \overline{x}$,
- Deux points d'inflexion à une distance de $\overline{x}$ égale à σ.

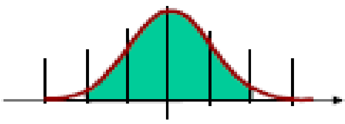
Propriétés de la loi Normale

0,6827



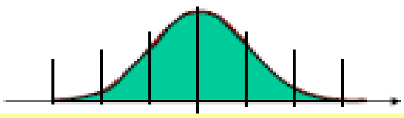
Probabilité = 68,27% pour que x soit compris dans l'intervalle $\overline{x} \pm 1\,\sigma$

0,9545



Probabilité = 95,45% pour que x soit compris dans l'intervalle $\overline{x} \pm 2\,\sigma$

0,9973



Probabilité = 99,73% pour que x soit compris dans l'intervalle $\overline{x} \pm 3\,\sigma$

Caractéristiques de l'erreur expérimentale r_i

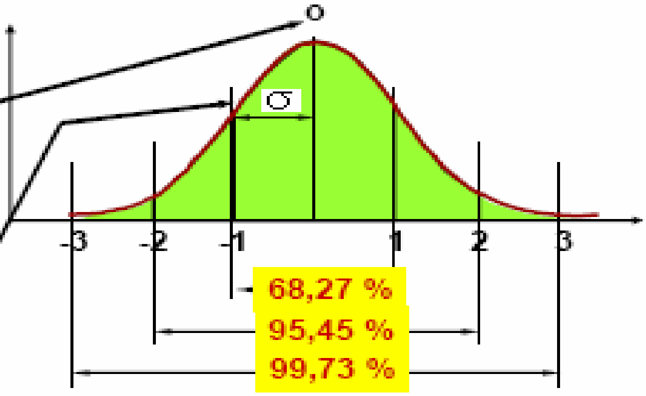
Distribution de Gauss centrée sur zéro
(échelle des abscisses en unités d'écart-type)

En moyenne,
l'erreur est nulle :

l'espérance mathématique $E(r_i) = 0$.

La dispersion de « r_i" est mesurée par sa variance : $var(r_i) = \sigma^2$

ou par l'écart-type σ.



Significativité des coefficients

b_1 estimation de β_1 de moyenne $\beta 1$ et de variance var(b1)

b_0 estimation de β_0 de moyenne $\beta 0$ et de variance var(b0)

Comme la variable Y qui intervient dans ces calculs est une variable aléatoire de variance $\sigma^2_{exp.}$

cette dispersion va se répercuter sur les variances de b_0 et b_1.

$$\mathrm{Var}(b_1) = \frac{\sigma^2_{exp.}}{\Sigma(x_i - \bar{x})^2}$$

$$\mathrm{Var}(b_0) = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\Sigma(x_i - \bar{x})^2}\right]$$

Significativité des coefficients

la différence b_i - β_i^0 suit une statistique de Student à v = (n-2) degrés de liberté avec :

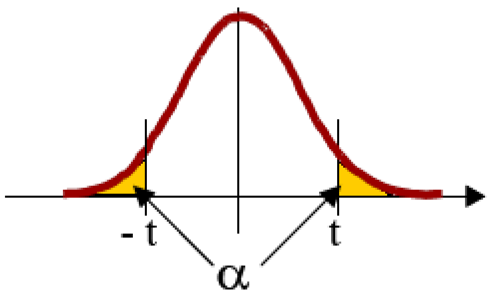
$$t = \frac{b_i - \beta^0_i}{\text{é.type}(b_i)}$$

La significativité va être déterminée en prenant $\beta_i^0 = 0$ d'où :

$$t = \frac{b_i}{\text{é.type}(b_i)}$$

Ceci va être vérifie par la Loi de student (Voir Tableau)

Loi de STUDENT (unilatéral)



degré de liberté									
ν	**0.2**	**0.1**	**0.05**	**0.025**	**0.01**	**0.005**	**0.001**	**0.0005**	**0.0001**
1	1.3764	3.0777	6.3137	12.7062	31.8210	63.6559	318.2888	636.5776	3185.2722
2	1.0607	1.8856	2.9200	4.3027	6.9645	9.9250	22.3285	31.5998	70.7060
3	0.9785	1.6377	2.3534	3.1824	4.5407	5.8408	10.2143	12.9244	22.2027
4	0.9410	1.5332	2.1318	2.7765	3.7469	4.6041	7.1729	8.6101	13.0385
5	0.9195	1.4759	2.0150	2.5706	3.3649	4.0321	5.8935	6.8685	9.6764
6	0.9057	1.4398	1.9432	2.4469	3.1427	3.7074	5.2075	5.9587	8.0233
7	0.8960	1.4149	1.8946	2.3646	2.9979	3.4995	4.7853	5.4081	7.0641
8	0.8889	1.3968	1.8595	2.3060	2.8965	3.3554	4.5008	5.0414	6.4424
9	0.8834	1.3830	1.8331	2.2622	2.8214	3.2498	4.2969	4.7809	6.0094
10	0.8791	1.3722	1.8125	2.2281	2.7638	3.1693	4.1437	4.5868	5.6939
11	0.8755	1.3634	1.7959	2.2010	2.7181	3.1058	4.0248	4.4369	5.4529

12	0.8726	1.3562	1.7823	2.1788	2.6810	3.0545	3.9296	4.3178	5.2631
13	0.8702	1.3502	1.7709	2.1604	2.6503	3.0123	3.8520	4.2209	5.1106
14	0.8681	1.3450	1.7613	2.1448	2.6245	2.9768	3.7874	4.1403	4.9849
15	0.8662	1.3406	1.7531	2.1315	2.6025	2.9467	3.7329	4.0728	4.8801
16	0.8647	1.3368	1.7459	2.1199	2.5835	2.9208	3.6861	4.0149	4.7905
17	0.8633	1.3334	1.7396	2.1098	2.5669	2.8982	3.6458	3.9651	4.7148
18	0.8620	1.3304	1.7341	2.1009	2.5524	2.8784	3.6105	3.9217	4.6485
19	0.8610	1.3277	1.7291	2.0930	2.5395	2.8609	3.5793	3.8833	4.5903
20	0.8600	1.3253	1.7247	2.0860	2.5280	2.8453	3.5518	3.8496	4.5390
21	0.8591	1.3232	1.7207	2.0796	2.5176	2.8314	3.5271	3.8193	4.4925
22	0.8583	1.3212	1.7171	2.0739	2.5083	2.8188	3.5050	3.7922	4.4517
23	0.8575	1.3195	1.7139	2.0687	2.4999	2.8073	3.4850	3.7676	4.4156
24	0.8569	1.3178	1.7109	2.0639	2.4922	2.7970	3.4668	3.7454	4.3819
25	0.8562	1.3163	1.7081	2.0595	2.4851	2.7874	3.4502	3.7251	4.3516
26	0.8557	1.3150	1.7056	2.0555	2.4786	2.7787	3.4350	3.7067	4.3237
27	0.8551	1.3137	1.7033	2.0518	2.4727	2.7707	3.4210	3.6895	4.2992
28	0.8546	1.3125	1.7011	2.0484	2.4671	2.7633	3.4082	3.6739	4.2759
29	0.8542	1.3114	1.6991	2.0452	2.4620	2.7564	3.3963	3.6595	4.2538
30	0.8538	1.3104	1.6973	2.0423	2.4573	2.7500	3.3852	3.6460	4.2340
40	0.8507	1.3031	1.6839	2.0211	2.4233	2.7045	3.3069	3.5510	4.0943
50	0.8489	1.2987	1.6759	2.0086	2.4033	2.6778	3.2614	3.4960	4.0140
60	0.8477	1.2958	1.6706	2.0003	2.3901	2.6603	3.2317	3.4602	3.9622
120	0.8446	1.2886	1.6576	1.9799	2.3578	2.6174	3.1595	3.3734	3.8370

Variance-covariance

$$\hat{\sigma}_x^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$$ Variance de **x**

$$\hat{\sigma}_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2$$ Variance de **y**

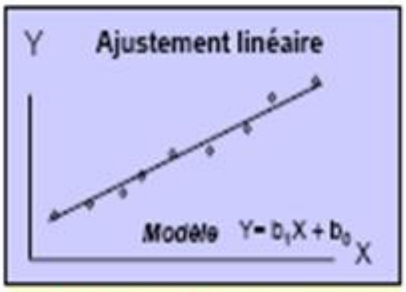
$$\hat{\sigma}_{x,y}^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})$$ Covariance xy

II/ Régression multiple

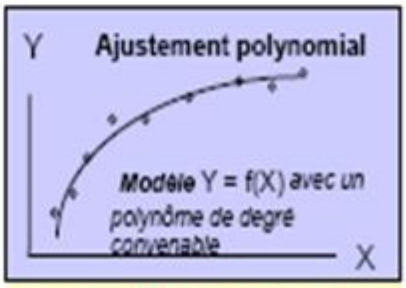
Modélisation

Modéliser : utiliser des données expérimentales pour prévoir une information quantitative inconnue Y à partir de mesures de X via une certaine « fonction mathématique » :

Le modèle mathématique postulé peut être :



Une droite si Y varie linéairement avec X.



Sinon un polynôme de degré convenable.

Exemple : Etude de la stabilité d´une suspension

Facteurs expérimentaux	Variables	Domaine Expérimental	
		Minimum	Maximum
Tensio-actif : Mouillant 1	M_1	20 g/l	40 g/l
Tensio-actif : Mouillant 2	M_2	5 "	15 "
Epaississant : Structurant 1	S_1	5 "	20 "
Epaississant : Structurant 2	S_2	0 "	10 "

Réponse étudiée :
Y= % de séparation de la suspension en deux phases

Tableau des résultats :

	Plan d'expérimentation				Réponse
Essais	M_1	M_2	S_1	S_2	Y
1	40	15	20	0	10
2	40	15	5	10	16
3	40	5	20	0	15
4	20	15	5	0	38,7
5	40	5	5	10	30,5
6	20	5	20	10	18
7	20	15	20	10	13
8	20	5	5	0	32

Modèle postulé

$$Y = a_0 + a_1 M_1 + a_2 M_2 + a_3 S_1 + a_4 S_2$$

Codage des variables :
U : variables naturelles (interprétation difficile)
X : variables codées (interprétation facile)

Régression avec des variables codées :

Matrice d'expériences

Essais	X_1	X_2	X_3	X_4
1	+1	+1	+1	-1
2	+1	+1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1
4	-1	+1	-1	-1
5	+1	-1	-1	+1
6	-1	-1	+1	+1
7	-1	+1	+1	+1
8	-1	-1	-1	-1

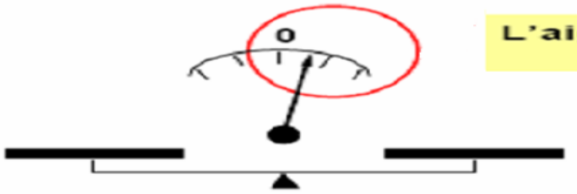
Modèle postulé $Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_4 X_4$

Chapitre II
Plans de pesée

Les Plans d 'Expériences : POURQUOI?

Expérience

Balance



L'aiguille n'est pas sur le zéro

Nous convenons d'appeler "expérience" le fait de lire la position de l'aiguille sur le cadran.

Comme pour toute expérience, il existe une erreur expérimentale :

erreur de parallaxe, épaisseurs relatives de la pointe de l'aiguille et des traits de graduation etc.

Efficacité

Etre efficace c'est rendre minimum :

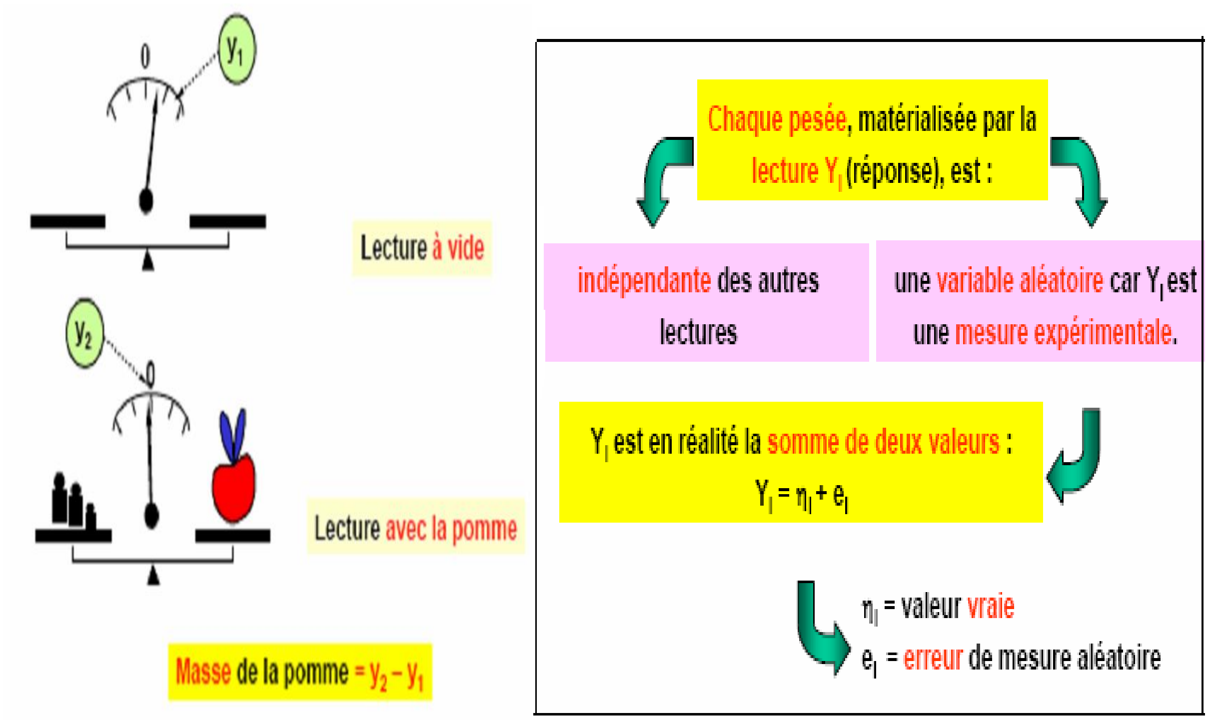
non pas l'erreur de lecture

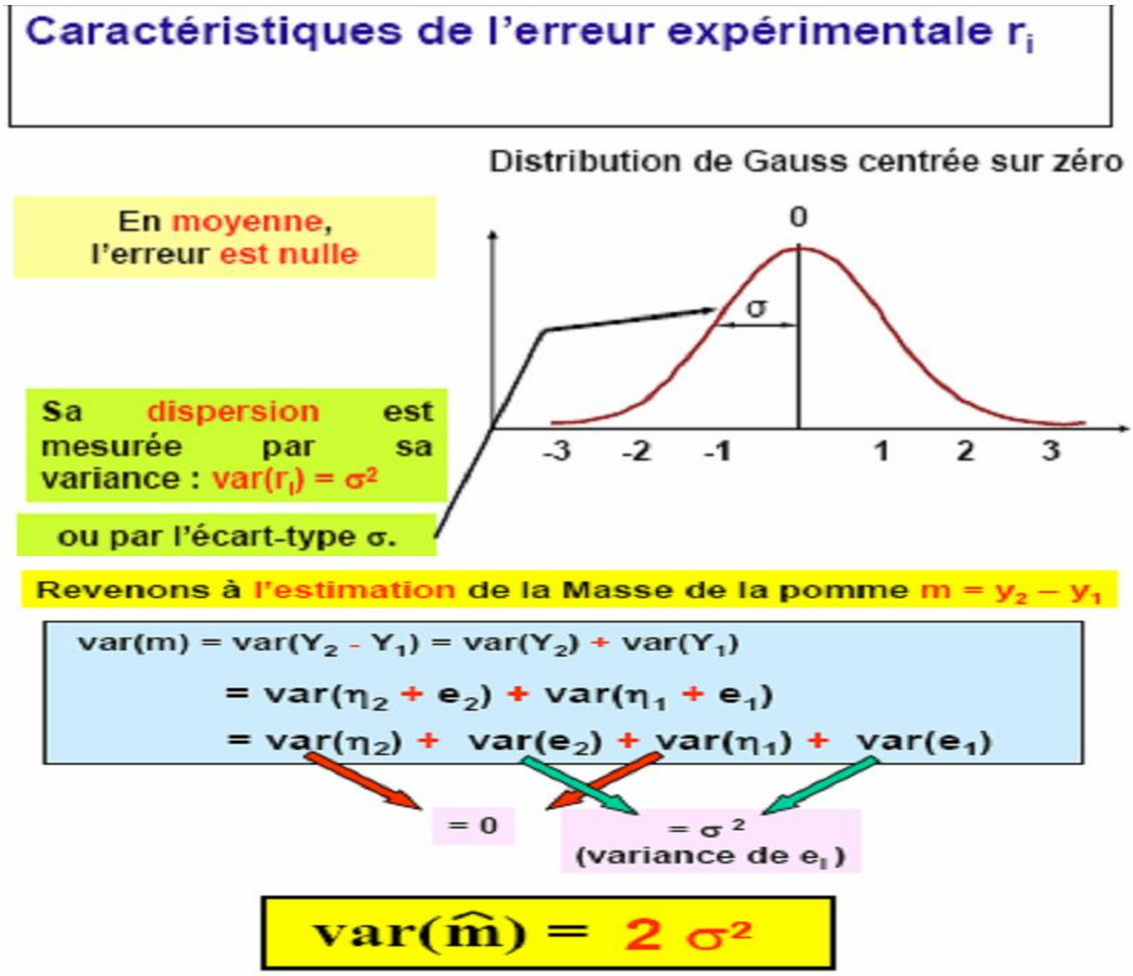
MAIS

sa répercussion sur l'estimation des masses,

nous admettrons que l'expérimentateur prend toutes les précautions utiles pour la rendre minimale

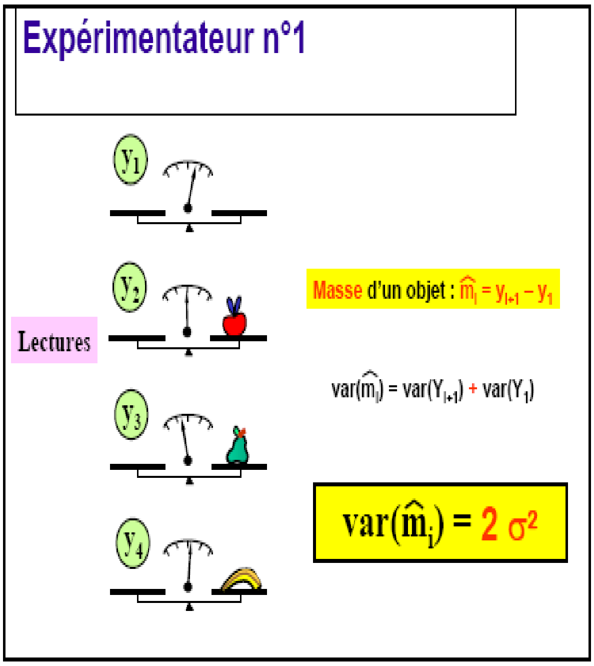
(sur le calcul). En d'autres termes c'est cerner au plus près la masse vraie des objets à peser.

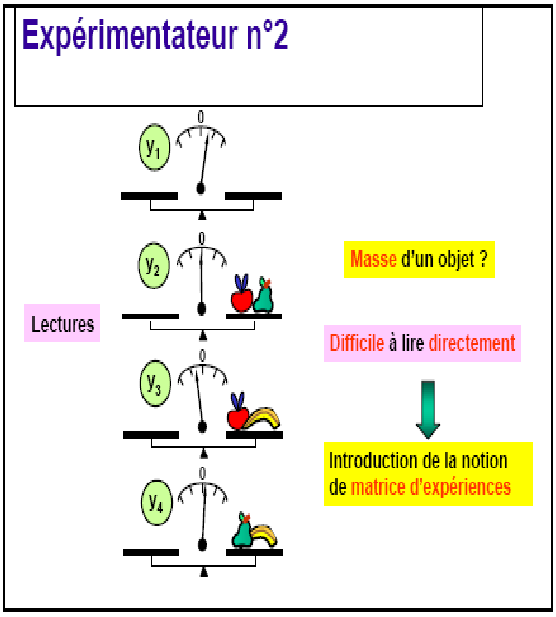




Pesée de plusieurs objets

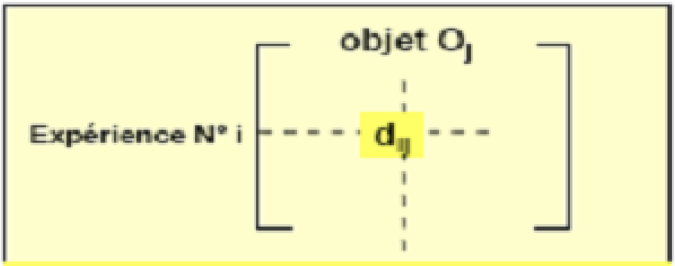
- **Si nous avons trois objets, comment les peser ?**
- **Quel est le prix minimum de l'expérimentation?**





Matrice d 'expériences

Une matrice d'expériences est un tableau permettant de décrire une expérimentation en donnant, pour chaque expérience, les valeurs des facteurs expérimentaux.



d_{ij} caractérise l'état de l'objet j au cours de l'expérience i

Expérimentateurs n°1 & n°2

Codage des objets : objet absent : état 0
objet présent : état 1

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	0	0	0
2	1	0	0
3	0	1	0
4	0	0	1

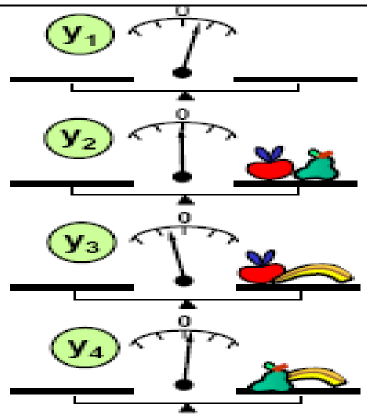
Plan N°1 (D_1)

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	0	0	0
2	1	1	0
3	1	0	1
4	0	1	1

Plan N°2 (D_2)

Expérimentateur n° 2

Lectures



Système d'équations

$$y_1 = \eta_0 + e_1 = \widehat{m}_0$$
$$y_2 = \eta_1 + \eta_2 + e_2 = \widehat{m}_0 + \widehat{m}_1 + \widehat{m}_2$$
$$y_3 = \eta_1 + \eta_3 + e_3 = \widehat{m}_0 + \widehat{m}_1 + \widehat{m}_3$$
$$y_4 = \eta_2 + \eta_3 + e_4 = \widehat{m}_0 + \widehat{m}_2 + \widehat{m}_3$$

Matrice d 'expériences et système d 'équations

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	0	0	0
2	1	1	0
3	1	0	1
4	0	1	1

$$y_1 = \widehat{m}_0 + 0\,\widehat{m}_1 + 0\,\widehat{m}_2 + 0\,\widehat{m}_3$$
$$y_2 = \widehat{m}_0 + 1\,\widehat{m}_1 + 1\,\widehat{m}_2 + 0\,\widehat{m}_3$$
$$y_3 = \widehat{m}_0 + 1\,\widehat{m}_1 + 0\,\widehat{m}_2 + 1\,\widehat{m}_3$$
$$y_4 = \widehat{m}_0 + 0\,\widehat{m}_1 + 1\,\widehat{m}_3 + 1\,\widehat{m}_3$$

Le codage utilisé pour écrire la matrice d'expériences permet de faire correspondre

les éléments de la matrice aux coefficients des inconnues du système d'équations

Inconnues = masses à estimer

Matrice du modèle et système d 'équations

$$Y = m_0 + m_1 X_1 + m_2 X_2 + m_3 X_3$$

Avec la notation matricielle, on peut écrire de manière compacte le système de 4 équations linéaires qui lient les réponses observées aux états des objets :

$$Y = Xm$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix}$$

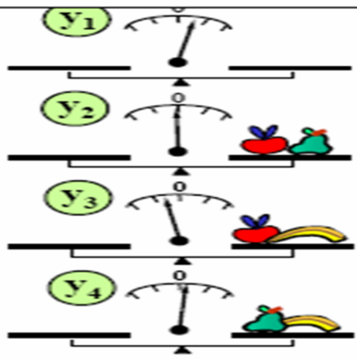
Vecteur réponse

Matrice du modèle

Vecteur des coefficients

Expérimentateur n°2

Lectures



Résolution

$\widehat{m}_0 = y_1$

$\widehat{m}_1 = (- y_1 + y_2 + y_3 - y_4) / 2$

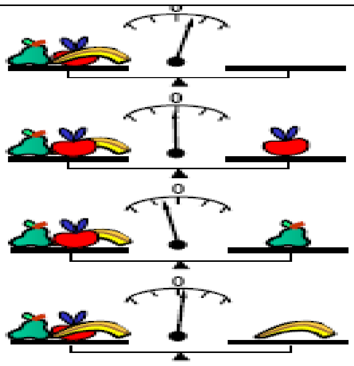
$\widehat{m}_2 = (- y_1 + y_2 - y_3 + y_4) / 2$

$\widehat{m}_3 = (- y_1 - y_2 + y_3 + y_4) / 2$

$$\mathrm{var}(\widehat{m}_i) = \mathrm{var}[1/2(\Sigma_{\text{algèbr.}} \text{ de } 4\ Y_i)]$$
$$= 1/4\ [\mathrm{var}(\Sigma_{\text{algèbr.}} \text{ de } 4\ Y_i)]$$

$$\boxed{\mathrm{var}(\widehat{m}_i) = \sigma^2}$$

Expérimentateur n°3



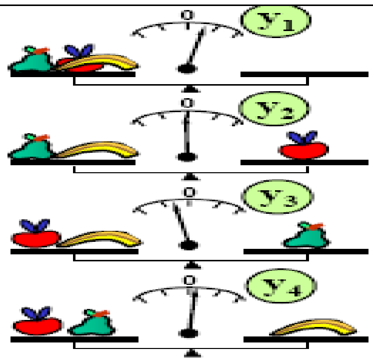
Codage des objets :
objet absent : état 0
objet présent à droite : état 1
objet présent à gauche : état -1

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	−1	−1	−1
2	1	−1	−1
3	−1	1	−1
4	−1	−1	1

Plan N°3 (D_3)

Expérimentateur n°3

Lectures



Système d'équations

$y_1 = \widehat{m}_0 - \widehat{m}_1 - \widehat{m}_2 - \widehat{m}_3$

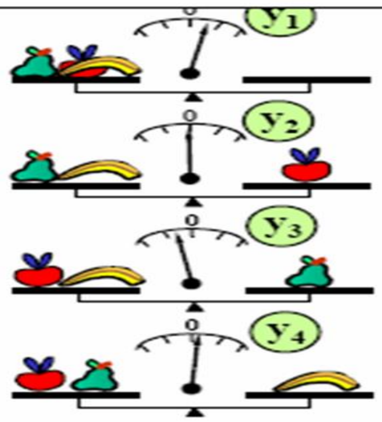
$y_2 = \widehat{m}_0 + \widehat{m}_1 - \widehat{m}_2 - \widehat{m}_3$

$y_3 = \widehat{m}_0 - \widehat{m}_1 + \widehat{m}_2 - \widehat{m}_3$

$y_4 = \widehat{m}_0 - \widehat{m}_1 - \widehat{m}_2 + \widehat{m}_3$

Expérimentateur n°3

Lectures



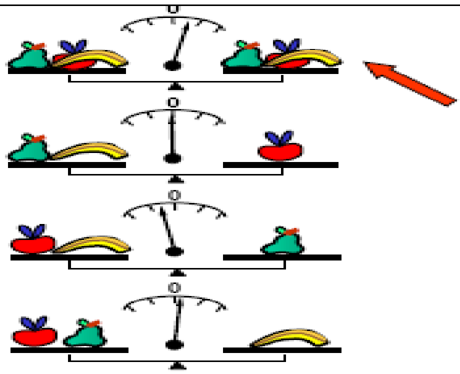
Résolution

$$\hat{m}_0 = (-y_1 + y_2 + y_3 + y_4)/2$$
$$\hat{m}_1 = (y_2 - y_1)/2$$
$$\hat{m}_2 = (y_3 - y_1)/2$$
$$\hat{m}_3 = (y_4 - y_1)/2$$

$$\mathrm{var}(\hat{m}_i) = \mathrm{var}[1/2(\Sigma_{\text{algèbr.}} \text{ de } 2\ Y_i)]$$
$$= 1/4\ [\mathrm{var}(\Sigma_{\text{algèbr.}} \text{ de } 2\ Y_i)]$$

$$\boxed{\mathrm{var}(\hat{m}_i) = \sigma^2/2}$$

Expérimentateur n°4



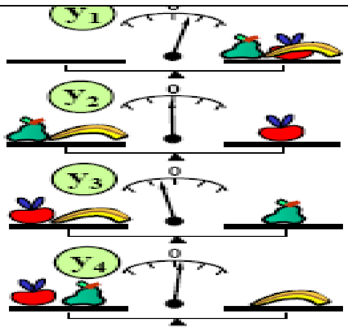
Seule l'expérience 1 change

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	1	1	1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	-1	-1	1

Plan N°4 (D_4)

Expérimentateur n°4

Lectures

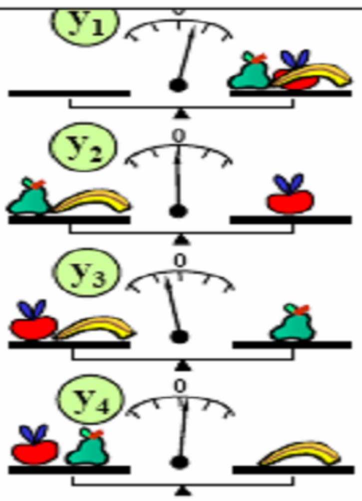


Système d'équations

$$y_1 = \hat{m}_0 + \hat{m}_1 + \hat{m}_2 + \hat{m}_3$$
$$y_2 = \hat{m}_0 + \hat{m}_1 - \hat{m}_2 - \hat{m}_3$$
$$y_3 = \hat{m}_0 - \hat{m}_1 + \hat{m}_2 - \hat{m}_3$$
$$y_4 = \hat{m}_0 - \hat{m}_1 - \hat{m}_2 + \hat{m}_3$$

Expérimentateur n°4

Lectures



Résolution

$$\widehat{m}_0 = (+\, y_1 + y_2 + y_3 + y_4)\,/\,4$$
$$\widehat{m}_1 = (+\, y_1 + y_2 - y_3 - y_4)\,/\,4$$
$$\widehat{m}_2 = (+\, y_1 - y_2 + y_3 - y_4)\,/\,4$$
$$\widehat{m}_3 = (+\, y_1 - y_2 - y_3 + y_4)\,/\,4$$

$$\mathrm{var}(\widehat{m}_i) = \mathrm{var}[1/4(\Sigma_{\text{algèbr.}} \text{ de } 4\ Y_i)]$$
$$= 1/16\ [\mathrm{var}(\Sigma_{\text{algèbr.}} \text{ de } 4\ Y_i)]$$

$$\boxed{\mathrm{var}(\widehat{m}_i) = \sigma^2/4}$$

THÉORÈME

Si on fait N pesées, la variance sur les coefficients est $\geq \sigma^2/N$

Comment obtenir une matrice optimale pour minimiser la variance sur les masses estimées?

Modélisation

La relation entre la mesure Y (la lecture du cadran) et les différentes masses dont on cherche à déterminer la valeur est une relation linéaire qui s'écrit :

$$y_j = m_0 + m_1 X_{1j} + m_2 X_{2j} + m_3 X_{3j} + e_j$$

masses des objets

m_0, m_1, m_2 et m_3

état des masses dans l'expérience j (la pesée)

X_1, X_2 et X_3 présence ou absence sur les plateaux (-1, 1 ou 0).

erreur

Matrices d 'Expériences

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	0	0	0
2	1	0	0
3	0	1	0
4	0	0	1

Plan N°1 (D_1)

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	0	0	0
2	1	1	0
3	1	0	1
4	0	1	1

Plan N°2 (D_2)

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	-1	-1	1

Plan N°3 (D_3)

Exp.	O_1	O_2	O_3
1	1	1	1
2	1	-1	-1
3	-1	1	-1
4	-1	-1	1

Plan N°4 (D_4)

Expression matricielle de la régression

$$Y = m_0 + m_1 X_1 + m_2 X_2 + m_3 X_3 + e$$

Avec la notation matricielle, on peut écrire de manière compacte le système de 4 équations linéaires qui lient les réponses observées aux états des objets :

$$Y = Xm + e$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \end{bmatrix}$$

Vecteur réponse

Vecteur des erreurs

Matrice du modèle

Vecteur des coefficients

Expression matricielle de la régression

La matrice X représente la matrice des coefficients des inconnues m_i du système d'équations.

Calcul du vecteur des coefficients

X' étant la matrice transposée de X, si X'X n'est pas singulière (c'est à dire s'il est possible de calculer la matrice inverse correspondante) :

on aura l'estimation du vecteur des coefficients du modèle au sens des moindres carrés par :

$$m = (X'X)^{-1}X'Y$$

Qualité des Matrices d 'Expériences

$$\begin{array}{c|ccc} \text{Exp.} & O_1 & O_2 & O_3 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

Matrice D

$$\begin{array}{c|cccc} \text{Exp.} & O_0 & O_1 & O_2 & O_3 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

Matrice X du modèle :

$$Y = m_0 + \Sigma\, m_i X_i$$

masse de l'objet i

état de l'objet i
dans la pesée considérée

Matrice de variance-covariance : $(X'X)^{-1}$

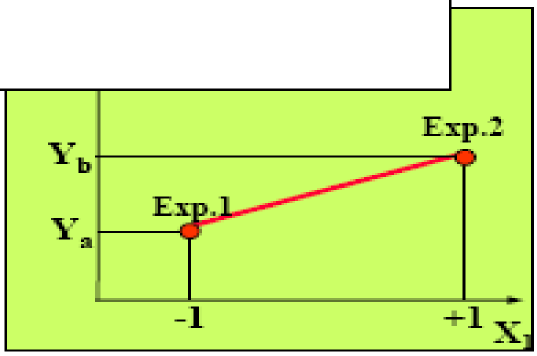
Chapitre III

Matrice d'Hadamard
Criblage des facteurs : classement hiérarchisé des facteurs

Poids des Facteurs

Poids d'un facteur (poids)

Exp.N°	X_i
1	-1
2	1



Modèle : $Y = b_0 + b_1 X_1$

$$b_1 = \frac{Y_b - Y_a}{2}$$

« poids du facteur X_1" $b_1 = \dfrac{E_1}{2}$

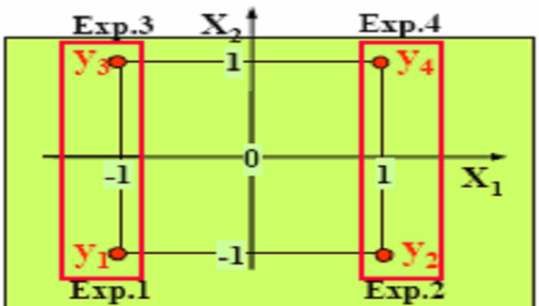
$$b_0 = \frac{Y_b + Y_a}{2}$$

« valeur moyenne" "réponse théorique " au centre du domaine

Effets des Facteurs

Cas de deux facteurs

Exp.N°	X_1	X_2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1



Pour X_1

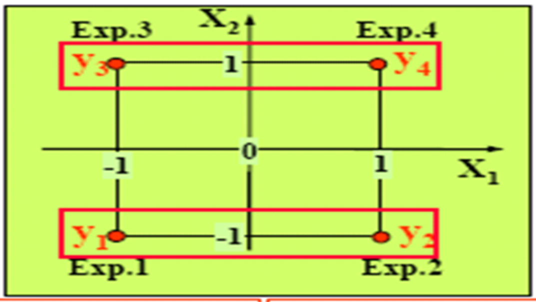
$E_1/2 =$ Poids du facteur X_1 : $[(y_2+y_4)/2]-[(y_1+y_3)/2]$

Réponse moyenne pour $X_1 = -1$: $(y_1+y_3)/2$

Réponse moyenne pour $X_1 = 1$: $(y_2+y_4)/2$

poids de X_1 : $\quad E_1/2 = \dfrac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{2}$

Pour le cas de X_2



$E_2/2$ = Poids du facteur X_2: $[(y_3+y_4)/2]-[(y_1+y_2)/2]$

Réponse moyenne pour $X_2 = -1$
$(y_1+y_2)/2$

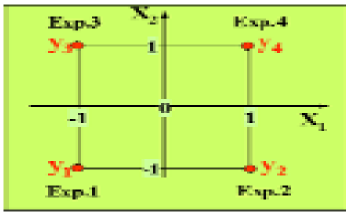
Réponse moyenne pour $X_2 = 1$
$(y_3+y_4)/2$

poids de X_2 : $E_2/2 = \dfrac{-y_1 - y_2 + y_3 + y_4}{2}$

Poids des Facteurs

Poids pour deux facteurs

Exp.N°	X_1	X_2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1



Modèle : $Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2$

Poids de X_1 $\quad b_1 = \dfrac{E_1}{2} = \dfrac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{4}$

Poids de X_2 $\quad b_2 = \dfrac{E_2}{2} = \dfrac{-y_1 - y_2 + y_3 + y_4}{4}$

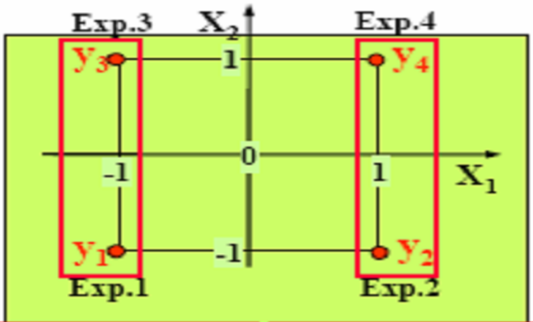
Valeur moyenne $\quad b_0 = \dfrac{+y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4}$

Poids = Pente = Coefficient

Effets des Facteurs

Cas de deux facteurs

Exp.N°	X_1	X_2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1



Pour X_1

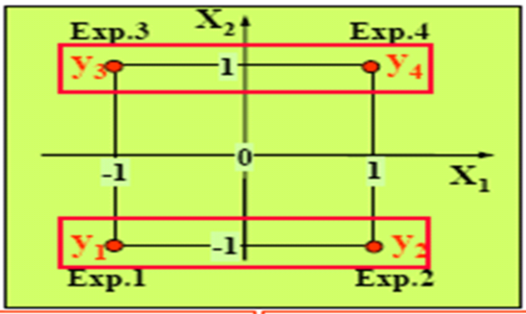
$E_1/2$ = Poids du facteur X_1 : $[(y_2+y_4)/2]-[(y_1+y_3)/2]$

Réponse moyenne pour $X_1 = -1$
$(y_1+y_3)/2$

Réponse moyenne pour $X_1 = 1$
$(y_2+y_4)/2$

poids de X_1 : $E_1/2 = \dfrac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{2}$

Pour le cas de X_2



$E_2/2$ = Poids du facteur X_2: $[(y_3+y_4)/2]-[(y_1+y_2)/2]$

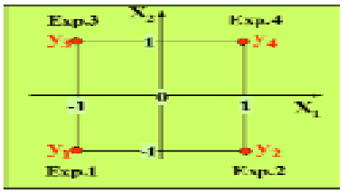
Réponse moyenne pour $X_2 = -1$: $(y_1+y_2)/2$

Réponse moyenne pour $X_2 = 1$: $(y_3+y_4)/2$

poids de X_2 : $E_2/2 = \dfrac{-y_1 - y_2 + y_3 + y_4}{2}$

Poids des Facteurs

Exp.N°	X_1	X_2
1	-1	-1
2	1	-1
3	-1	1
4	1	1



Modèle : $Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2$

Poids de X_1	$b_1 = \dfrac{E_1}{2}$	$= \dfrac{-y_1 + y_2 - y_3 + y_4}{4}$
Poids de X_2	$b_2 = \dfrac{E_2}{2}$	$= \dfrac{-y_1 - y_2 + y_3 + y_4}{4}$
Valeur moyenne	$b_0 = \dfrac{+y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4}$	

Poids = Pente = Coefficient

Modèle pour k facteurs :

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + \dots + b_kX_k$$

Rappel du théorème des plans de pesée :

Si on fait N pesées, la variance sur les coefficients est $\geq \sigma^2/N$

Pour avoir la variance des estimations minimale σ^2/N, la condition nécessaire et suffisante est que l'on ait :

$$\boxed{X'X = N\, I_N}$$

Plans de Pesées et Matrices d 'Hadamard

Cette propriété est obtenue avec les matrices d'Hadamard, qui ne contiennent que des valeurs -1 ou +1 .

Elles n'existent que pour N multiple de 4 :
4, 8, 12, 16, 20 ...

Jacques Salomon HADAMARD (1865 - 1963)

Construction de Plackett et Burman

$k \leq 3$ (N=4) : + + -
$k \leq 7$ (N=8) : + + + - + - -
$k \leq 11$ (N=12) : + + - + + + - - - + -
$k \leq 15$ (N=16) : + + + + - + - + + - - + - - -
$k \leq 19$ (N=20) : + + - - + + + + - + - + - - - - + + -
$k \leq 23$ (N=24) : + + + + + - + - + + - - + + - - + - + - - - -

Exemple N = 4

après N-2 permutations

+	+	-
+	-	+
-	+	+
-	-	-

Matrice D

+	+	+	-
+	+	-	+
+	-	+	+
+	-	-	-

Matrice X

Matrice d'expérience

$k \leq 7$ (N=8) : + + + - + - - Décalage droite

N° Exp	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7
1	1	1	1	-1	1	-1	-1
2		1	1	1	-1	1	-1
3							
4							
5							
6							
7							
8							

-1

Matrice d'expérience

$k \leq 7$ (N=8) : + + + - + - -

N° Exp	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7
1	1	1	1	-1	1	-1	-1
2	-1	1	1	1	-1	1	-1
3	-1	-1	1	1	1	-1	1
4	1	-1	-1	1	1	1	-1
5	-1	1	-1	-1	1	1	1
6	1	-1	1	-1	-1	1	1
7	1	1	-1	1	-1	-1	1
8	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1

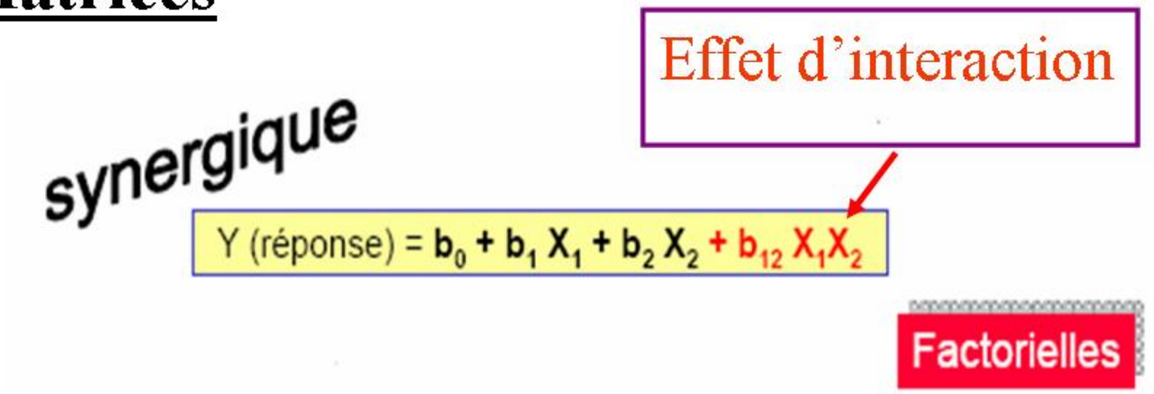
Dernière ligne : - - - - - - - -

Matrice complète

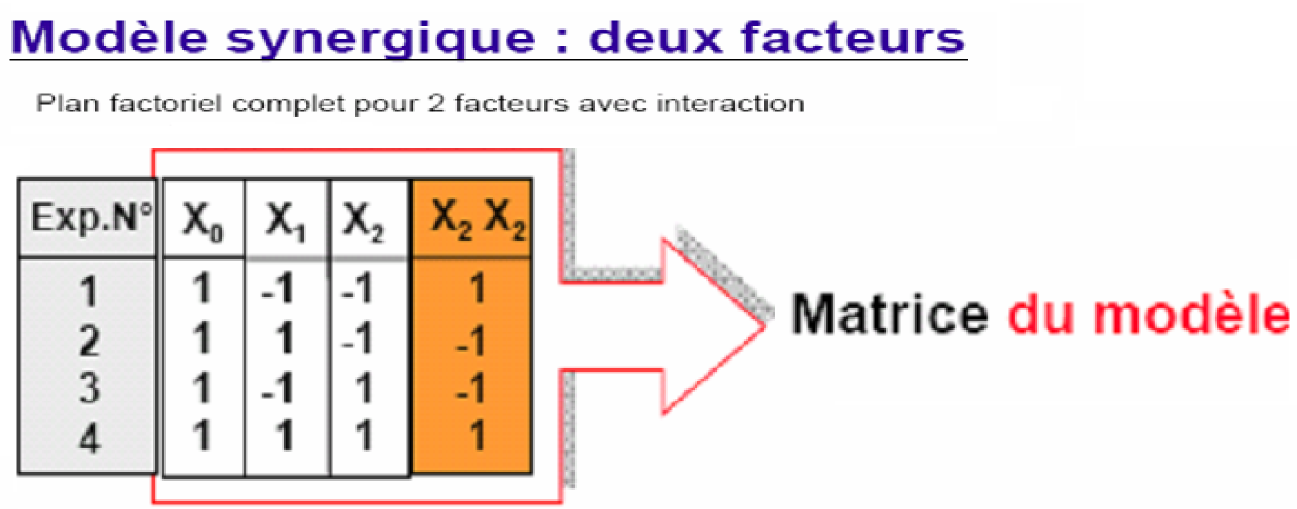
Chapitre IV
Plans factoriels complets
FFD

Les plans factoriels complets sont caractérisés par :

Matrices



Pour k = 2, on obtient une matrice d'expériences 2^2 soit N= 4 lignes et 2 colonnes.
La matrice du modèle X : N= 4 lignes et 4 colonnes.



Exp.N°	X_0	X_1	X_2	$X_2 X_2$
1	1	-1	-1	1
2	1	1	-1	-1
3	1	-1	1	-1
4	1	1	1	1

Modèle synergique : 3 facteurs

$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_{12}X_1X_2 + b_{13}X_1X_3 + b_{23}X_2X_3 + b_{123}X_1X_2X_3$$

1 terme constant

3 effets principaux b_i

1 effet d'interaction du second ordre b_{ijk}

3 effets d'interaction du premier ordre b_{ij}

Pour k = 3, on obtient une matrice d'expériences 2^3 soit N= 8 lignes et 3 colonnes.

Matrice du modèle X : 8 lignes et 8 colonnes

N°exp.	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1X_2X_3$
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
4	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1
5	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
6	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1
8	1	1	1	1	1	1	1	1

Exemple d'utilisation dune matrice factorielle complète :
Etude quantitative des facteurs

La réaction enzymatique est réalisée par la culture de la souche microbienne sélectionnée, dans un milieu nutritif contenant le substrat à déshydrogéner : c'est le développement de la souche qui libère le système enzymatique dans le milieu nutritif et qui "métabolise" le substrat.

Facteurs	Bornes (-1)	Bornes (1)
U_1 : Quantité de liqueur de maïs en g/l	10	20
U_2 : Durée de réaction en heures	24	48
U_3 : Quantité de glucose en g/l	5	10

RÉPONSE Y étudiée :

Quantité de substrat (mg) déshydrogénée enzymatiquement.

Exp.N°	Matrice d'expériences X_1	X_2	X_3	Y	Plan d'expérimentation U_1 Quantité liq.maïs	U_2 Durée réaction	U_3 Qté glucose	mg subst transf.
1	-1	-1	-1	230	10	24	5	230
2	1	-1	-1	205	20	24	5	205
3	-1	1	-1	110	10	48	5	110
4	1	1	-1	70	20	48	5	70
5	-1	-1	1	270	10	24	10	270
6	1	-1	1	220	20	24	10	220
7	-1	1	1	110	10	48	10	110
8	1	1	1	70	20	48	10	70

Matrice du modèle

Exp.N°	X_0	X_1	X_2	X_3	X_1X_2	X_1X_3	X_2X_3	$X_1X_2X_3$	Y
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	230
2	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	205
3	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	110
4	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	70
5	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	270
6	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	220
7	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	110
8	1	1	1	1	1	1	1	1	70
	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7	I_8	

Exploitation des résultats :

- **a/ Calcul des coefficients**

$b_0 = \Sigma (I_1 . Y_i) / 8$

$b_1 = \Sigma (I_2 . Y_i) / 8$ ...

Nom	Coefficients
b_0	160,6
b_1	-19,4
b_2	-70,6
b_3	6,9
b_{12}	-0,6
b_{13}	-3,1
b_{23}	-6,9
b_{123}	3,1

La durée de la réaction (facteur X_2) a le plus d'influence : en moyenne le rendement diminue de 140 g/l quand on passe de 24 à 48 h.

Cela signifie que le produit de déshydrogénation est à son tour métabolisé, il ne faut pas laisser la culture trop se développer.

La quantité de liqueur de maïs (facteur X_1) doit également être choisi à son niveau minimum (10 g/l).

La quantité de glucose (facteur X_3) n'a proportionnellement que peu d'effet.

b/ Analyse Statistique des résultats

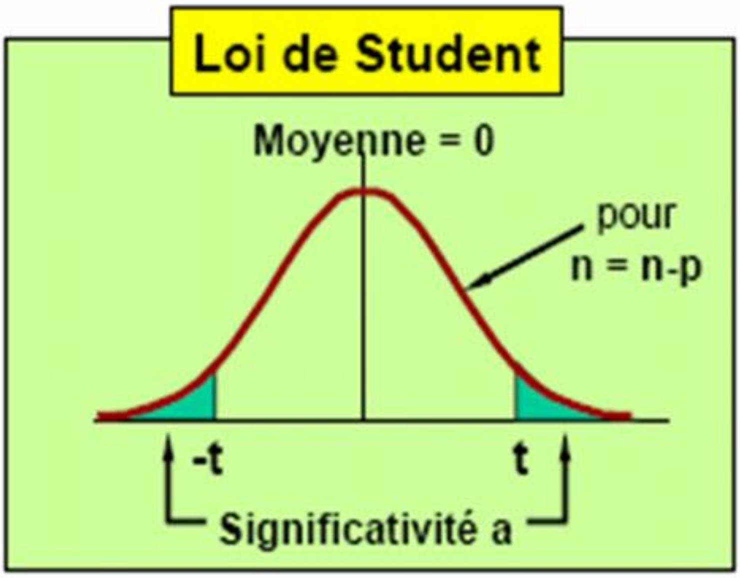
Analyse des coefficients

Le coefficient b_i est distribué selon une distribution de Student de moyenne b_i, d'écart-type $e.t.(b_i)$ et (n-p) degrés de liberté.

Si X = matrice d'Hadamard : $\rightarrow$ $é.t.(b_i) = \frac{s}{\sqrt{n}}$

Intervalle de confiance pour b_i : $\rightarrow$ $b_i \pm t \; e.t.(b_i)$

c/ Significativité des coefficients



$$t = \frac{b_i - b_i^0}{é.t.(b_i)}$$

$$t = \frac{b_i}{é.t.(b_i)}$$

Exploitation des résultats

Réexamen «statistique» en négligeant b_{123} comme coefficient :

sa valeur est alors considérée comme une estimation de $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$

Nom	Coefficient	Ecart-type	t.exp.	Signif. %
b_0	160,6	3.1	51.40	*
b_1	-19,4	3.1	-6.20	10.6
b_2	-70,6	3.1	-22.60	*
b_3	6,9	3.1	2.20	27.9
b_{12}	-0,6	3.1	-0.20	86.8
b_{13}	-3,1	3.1	-1.00	50.0
b_{23}	-6,9	3.1	-2.20	27.9

Chapitre V
Surface de réponse
Plans composites PCCD

I/ MATRICES D'EXPERIENCES et METHODOLOGIE

Objectifs :

- Études quantitatives des réponses : modélisation prévisionnelle du phénomène étudié,
- Optimisation : SURFACES de REPONSES

Le modèle quadratique par rapport aux variables explicatives xi; établi à l'aide d'un PCC :

$$Y = b_0 + \sum_i b_i X_i + \sum_{i,j} b_{ij} X_i X_j + \sum_i b_{ii} X_i^2$$

On aura à estimer des termes appartenant à 4 familles :

- b_0 : terme constant
- b_i :terme de premier degré
- b_{ii} : terme carré (du deuxième degré)
- b_{ij} : terme rectangle (entre X_i et X_j)

I .1/ Construction des plans composites centrés

I-1.1/ Démarche séquentielle

Les plans PCC permettent une modélisation du second degré. La démarche séquentielle est constituée de trois parties : plan factoriel; plan en étoile; points (plan) au centre.

A/ Plan factoriel

Le plan factoriel combine des facteurs à 2 niveaux notés +1 et -1.Il permet :
*l'analyse des interactions;
*de déterminer le modèle
Le nombre d'essais du plan factoriel :

$$\boxed{N_F = 2^k}$$

(k : facteurs, 2: niveaux (-1 et +1))

B/ Plan en étoile

le plan en étoile représente deux essais par facteur. Chaque facteur prend au total 5 niveaux différents dans le plan.
Le nombre d'essais du plan en étoile :

$$\boxed{Na = 2.k}$$

C/ Points au centre

Ces points peuvent être la solution courante que l'on cherche à améliorer
Ils ont plusieurs rôles :

- Tester la validité du modèle du premier degré;

- S'assurer qu'il n'y a pas de glissement entre deux séries d'essais;
- Obtenir une estimation de l'erreur expérimentale;
- Diminuer l'erreur de prédiction près du point central.

Le nombre d'essais au centre : N_0

Le nombre total d'essais à réaliser dans le PCC :

$$\boxed{\mathbf{N = N_F + N_a + N_0}}$$

Les points au centre du domaine expérimental (N_0) sont répétés plusieurs fois (?) (Voir ultérieurement).

I-2/ Exemple de plan PCC avec deux facteurs :

La matrice du plan d'expériences pour k = 2 :

- 5 niveaux : $-\alpha$, -1, 0, +1, $+\alpha$ (α à déterminer)
- 3 niveaux : -1, 0, +1 si $\alpha = 1$

Le nombre total d'essais à réaliser pour le PCC :
$N = 2k + 2.k + N_0$
K = 2 ; $N = 2.2 + 2.2 + N_0 = 8 + N_0$
Si $N_0 = 1$; le modèle quadratique au degré 2 aura
$(k+1)(k+2)/2$ variables explicatives (facteurs).

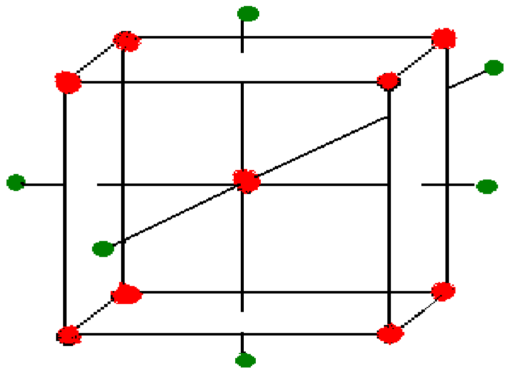
Matrice du plan d'expériences s'écrit :

Essais	x_1	x_2	
1	-1	-1	**Plan factoriel ($N_F = 2^2 = 4$)**
2	+1	-1	
3	-1	+1	
4	+1	+1	
5	$-\alpha$	0	**Plan en étoile (axial) ($N_a = 2.2 = 4$)**
6	$+\alpha$	0	
7	0	$-\alpha$	
8	0	$+\alpha$	
9	0	0	**Points au centre (N_0)**
.	.	.	
N	0	0	

- Pour K variables : $N_F = 2^K$ termes linéaires en Xi et aux interactions Xi Xj.
- Les coordonnées des points ont toutes la valeur 1 en valeur absolue. Et chaque point représente un essai à exécuter .
- Les points représentatifs sont situés aux sommets d'un cube centré sur l'origine (0, 0, …,0) et dont les faces sont parallèles aux plans de coordonnées à la distance ± 1 (points en rouge)
- Na = 2.K les points expérimentaux sont sur les axes situés à la même distance du centre du domaine (points axiaux en vert).
- Les points axiaux sont situés à la même distance $\pm \alpha$

(α calculé à partir du critère de l'orthogonalité).

- Les points au centre **(N_0)** : → **Précision uniforme** ; → **Isovariance par rotation**

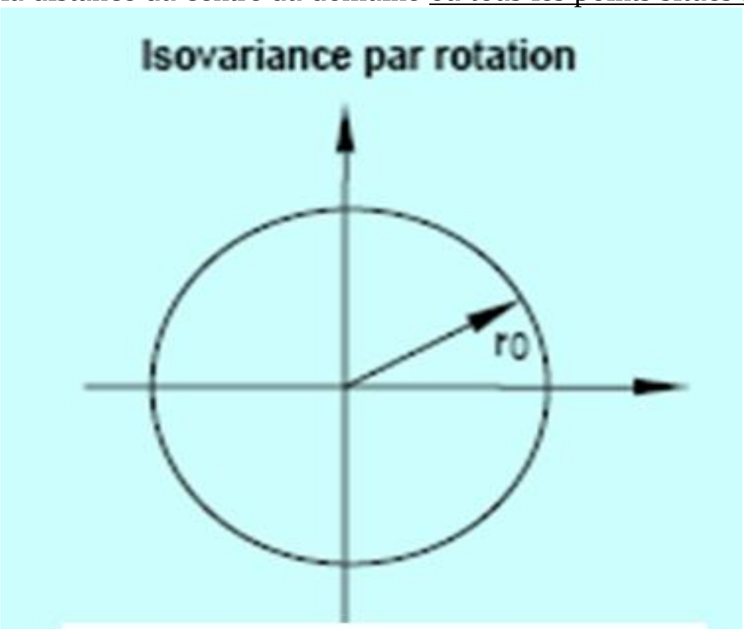


I - 3/Critères d'optimalité :

Dans le cas où tous les points axiaux sont situés à la même distance du centre du domaine d'étude, la valeur de a ne sera pas la même (suivant les critères d'optimalité).

a/ Isovariance par rotation

La valeur de a est choisie pour que la variance de la réponse prévue par le modèle ne dépend que de la distance du centre du domaine où tous les points situés sur un même cercle ont même variance.



Dans ce cas, les éléments de la matrice (X'X) doivent satisfaire la relation : $\alpha = (N_F)^{1/4}$
Donc il faut placer les points en étoiles à une distance :
$\boldsymbol{\alpha = (N_F)^{1/4}}$
Exemple : Pour le cas d'un PCC à 2 facteurs :
α = **1,414** du centre.

- La valeur de $\boldsymbol{\alpha}$ est donc fonction du nombre de points au centre $\mathbf{N_0}$

b/ Précision uniforme

La valeur de **a** est choisie pour que la variance de la réponse prévue par le modèle ne dépend que de la distance du centre du domaine où tous les points situés sur un même cercle et á l'intérieur ont même variance,

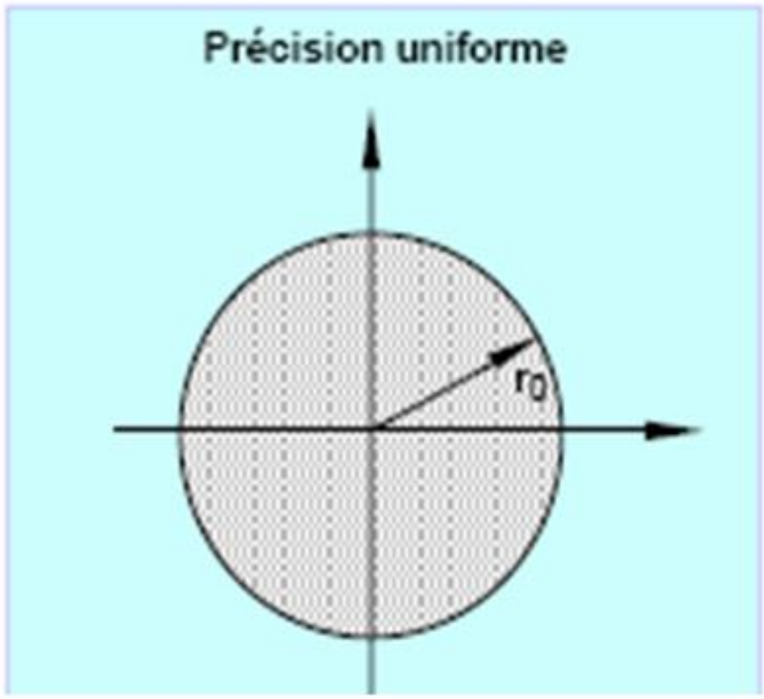


Tableau : Valeur de α en fonction du nombre de points centraux

Nb k de facteurs	2	3	4	5	5	6	6
Matrice factorielle	22	23	24	251	25	26 1	26
Isovariance par rotation $\alpha = (N_F)^{1/4}$	1,414	1,682	2	2	2,378	2,378	2,826
Points factoriels N_F	4	8	16	16	32	32	64
Points axiaux N_a	4	6	8	10	10	12	12
Points au centre N_o pour : ▪ **Orthogonalité** ▪ **Précision uniforme**	8 5	9 6	12 7	10 6	17 10	15 9	24 15
N total d´expériences	16 13	23 20	36 31	36 32	59 52	59 53	100 91

I-4/ Détermination des paramètres du plan

Modèle du second degré

La réponse Y est estimée à l'aide d'un
polynôme de degré 2,

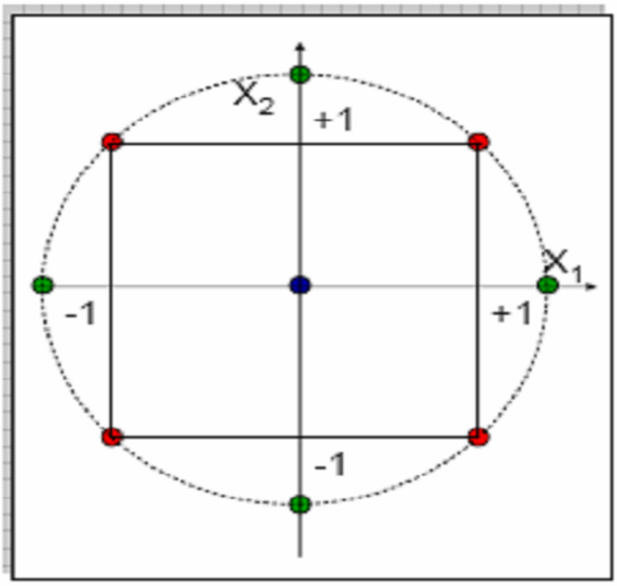
par exemple
dans le cas de 2 facteurs il faut estimer 6 coefficients :

$$\boxed{Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{11} X_1^2 + b_{22} X_2^2 + b_{12} X_1 X_2}$$

pour 3 facteurs, 10 coefficients :

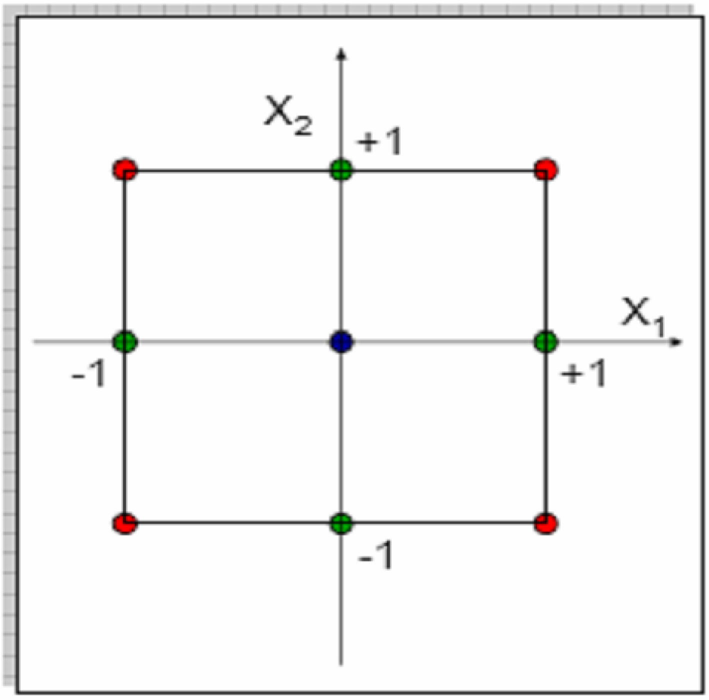
$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_{11} X_1^2 + b_{22} X_2^2 + b_{33} X_3^2 + b_{12} X_1 X_2 + b_{13} X_1 X_3 + b_{23} X_2 X_3$$

Matrice Composite équiradiale



	X1	X2
	-1	-1
	+1	-1
	-1	+1
	+1	+1
	-1.414	0
	+1.414	0
	0	-1.414
	0	+1.414
	0	0
	0	0
	0	0
	0	0
	0	0

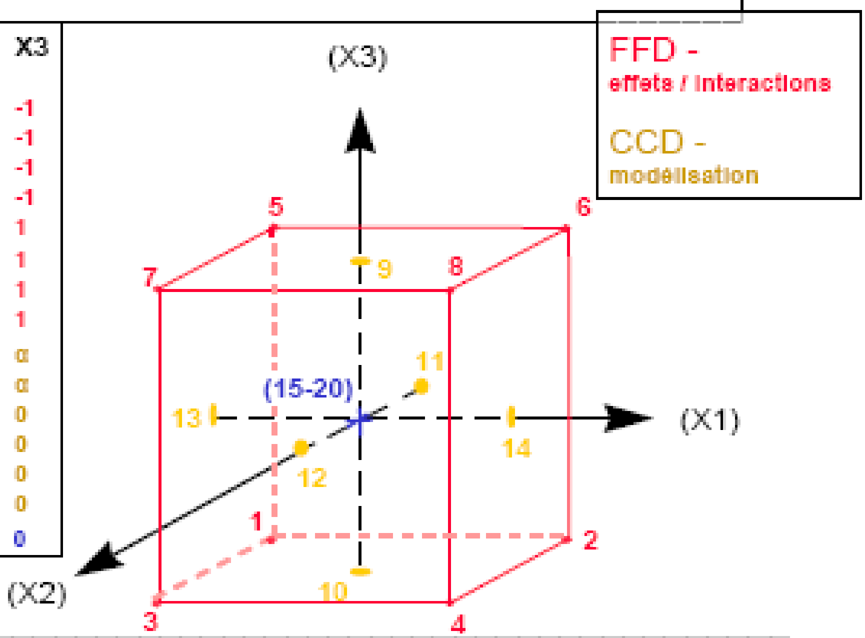
Matrice Composite Face-centrée



	X1	X2
●	-1	-1
●	+1	-1
●	-1	+1
●	+1	+1
●	-1	0
●	+1	0
●	0	-1
●	0	+1
●	0	0
●	0	0
●	0	0
●	0	0
●	0	0

Plan central composite

Essai	X1	X2	X3
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
9	0	0	α
10	0	0	α
11	0	α	0
12	0	α	0
13	α	0	0
14	α	0	0
15 -20	0	0	0



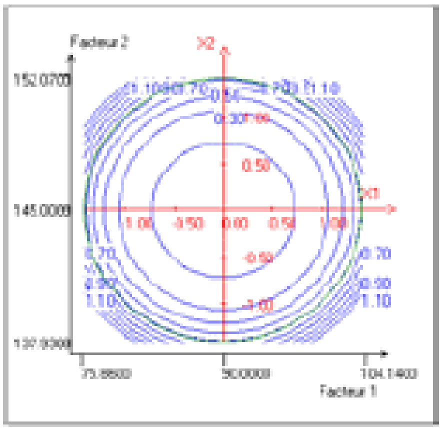
Composite équiradiale : α = 1.682 Composite centrée : α = 1

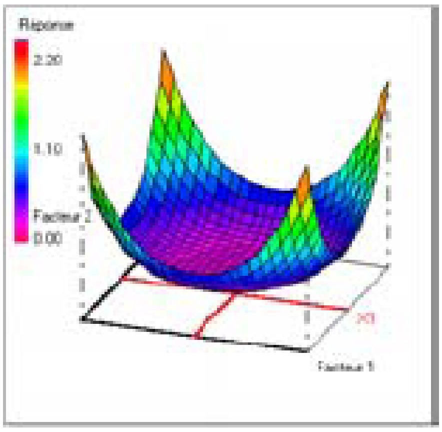
Surfaces de réponse :

Modèle du second degré

Critères statistiques

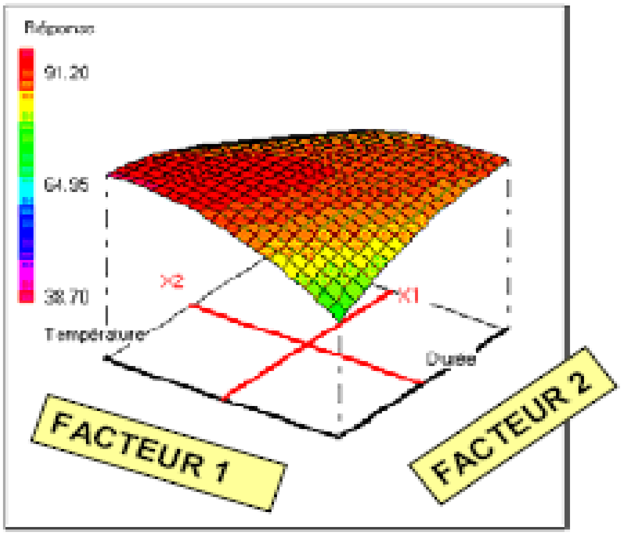
Isovariance par rotation

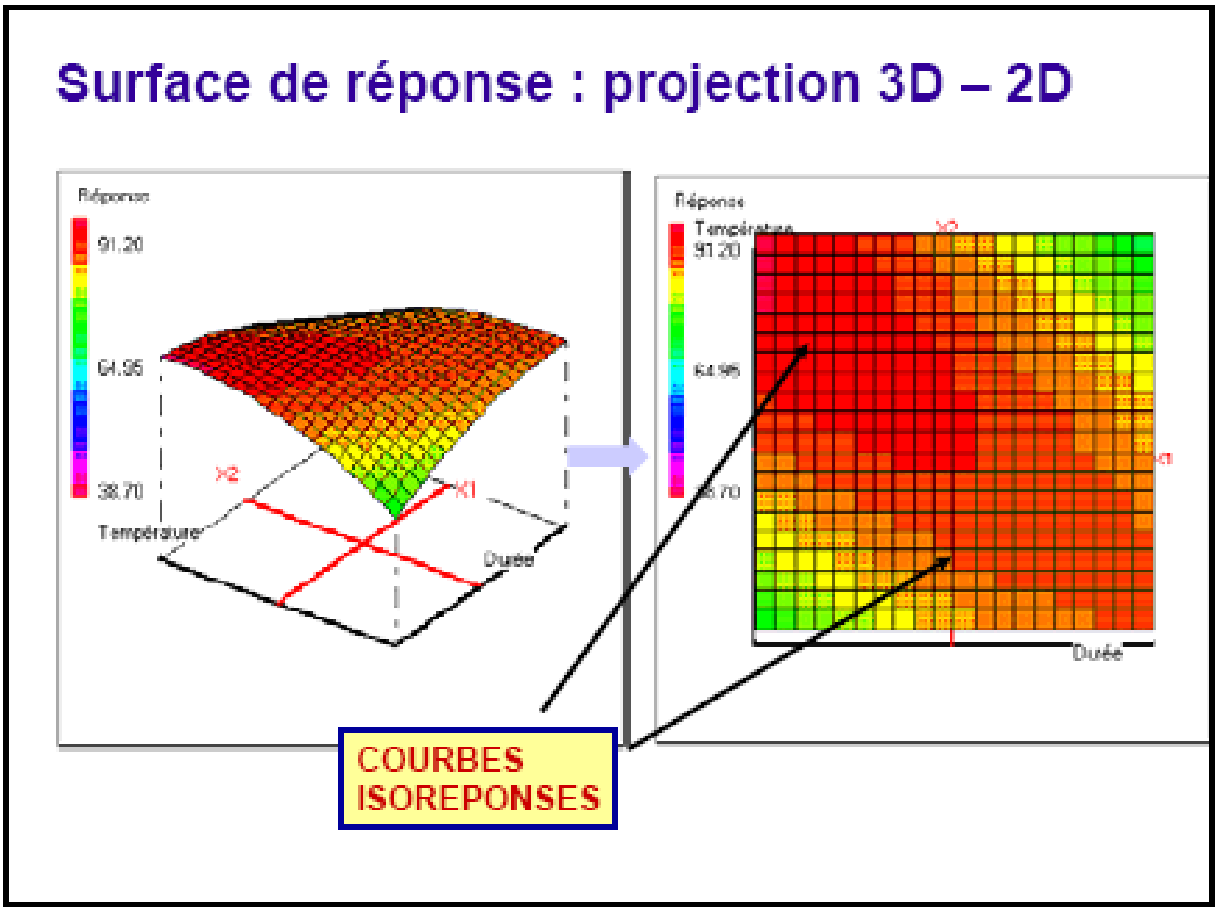


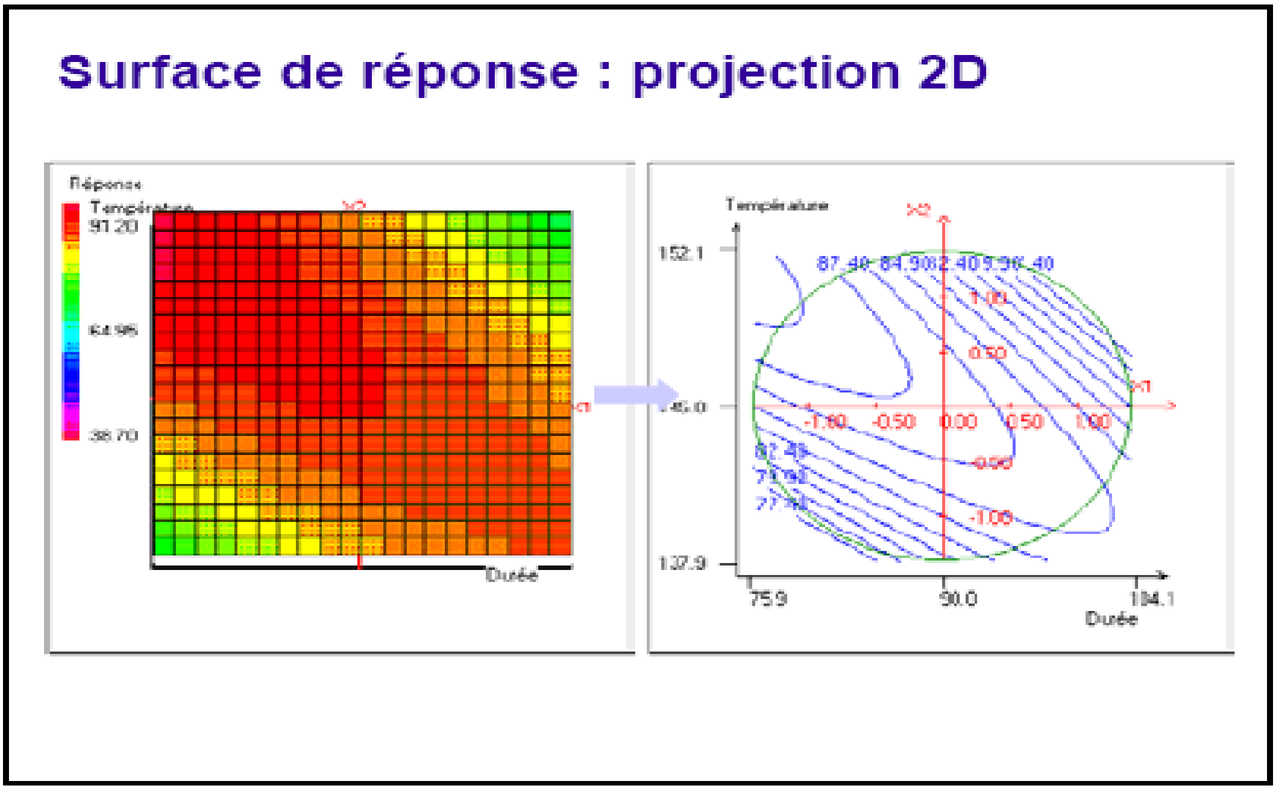


Surface de réponse 3D

R
E
P
O
N
S
E




Surface de réponse : projection 3D – 2D
Réponse
91.20
64.95
38.70
Température
X2
X1
Durée
COURBES
ISOREPONSES


Surface de réponse : projection 2D
Réponse
Température
91.20
64.95
38.70
Durée
152.1
137.9
75.9
90.0
104.1
-1.00
-0.50
0.00
0.50
1.00