

PLANIFICATION D'EXPERIENCES NUMERIQUES

Astrid Jourdan
Département de Mathématiques
E.I.S.T.I.
26, avenue des Lilas
64062 Pau cedex 9
jourdanastrid@yahoo.fr

Résumé

Malgré les progrès des outils informatiques, l'étude numérique de certains phénomènes physiques complexes reste très coûteuse en temps de calcul. Il est donc nécessaire de faire appel à des méthodes de planification d'expériences.

Cet article présente et analyse les deux approches des expériences numériques les plus utilisées : la méthode classique des plans d'expériences et une méthode par krigeage. L'objectif est donner un aperçu de ce qui se fait dans le domaine et de guider le lecteur vers une bibliographie détaillée.

Mots clefs : plan d'expériences, surface de réponse, krigeage, hypercube latin

Abstract

Physical phenomena are now investigated by computer models which are often computationally expensive to run. Scientists have been in the forefront of developing designs and analysis of computer experiments.

This paper gives an overview of two usual approaches : the standard response surface methodology and the Kriging method. The goal is to provide a general idea of this problem and guide towards a detailed bibliography.

Key words : experimental designs, response surface, kriging, latin hypercube

1. INTRODUCTION

Pour des raisons de coût, de nombreux phénomènes scientifiques sont étudiés, non plus *via* l'expérimentation physique, mais à l'aide de modèles numériques. En effet, les progrès de ces dernières années concernant la modélisation mathématique de ces phénomènes ainsi que leur traitement numérique, permettent une étude extrêmement réaliste des phénomènes en question. A titre d'exemples, nous pouvons citer l'étude de la production de pétrole brut en industrie pétrolière (Dejean et Blanc 1999, Jourdan et Zabalza 2004), ou de la performance de circuits intégrés (Welch *et al.* 1988), ou encore la propagation d'un feu en milieu fermé (Santner *et al.* 2003).

De façon schématique, un modèle numérique peut être considéré comme un programme. Le simulateur prend des variables en entrée et donne une ou plusieurs réponses en sortie. Une expérience numérique consiste alors à fixer un vecteur x de valeurs pour les variables d'entrée du simulateur puis à récolter la ou les réponses de celui-ci. On étudie ensuite le comportement de cette réponse en fonction des variations des variables d'entrée.

Cependant, malgré les progrès des outils informatiques, le temps de calcul pour une expérience numérique reste très long. L'objectif est donc de remplacer la réponse du

simulateur par un modèle statistique simple représentant au mieux cette réponse. Nous sommes alors confrontés à deux questions :

- Comment choisir les valeurs des variables d'entrée, x_1, \dots, x_n , de façon à récolter un maximum d'informations sur le comportement de la réponse en un minimum de simulations?
- Quel modèle statistique est approprié aux réponses du simulateur $y(x_1), \dots, y(x_n)$?

Le modèle statistique est ensuite utilisé pour répondre à différentes questions telles :

- prédire la réponse du simulateur en des points non testés par des simulations,
- déterminer une valeur d'une variable d'entrée optimisant le phénomène étudié,
- ajuster un modèle numérique à des données expérimentales,
- sélectionner les variables d'entrée influant réellement sur la réponse (« screening »),
- etc.

Ces problématiques sont proches de celles rencontrées en expérimentation physique mais certaines particularités des expériences numériques doivent être prises en compte pour le traitement. En effet :

- les expériences sont déterministes, c'est-à-dire que deux simulations avec deux jeux de variables d'entrée identiques donnent la même réponse,
- les variables d'entrée sont très nombreuses. En effet, aux variables liées au phénomène physique, viennent s'ajouter des variables dues au modèle numérique (par exemple une taille de maillage). De plus aucune contrainte expérimentale ne permet de réduire la plage de variation des variables qui peut être alors très grande. C'est pourquoi une phase initiale de « screening » pour trier les variables influant réellement sur la réponse est primordiale.
- la réponse du simulateur est souvent irrégulière du fait de la complexité des modèles mathématiques et cette irrégularité n'est pas masquée par une erreur expérimentale.

Dans cet article nous allons présenter et commenter les deux approches des expériences numériques les plus couramment utilisées. La méthode classique des plans d'expériences et une approche plus actuelle par krigeage. Chacune est articulée autour des deux questions précédentes, à savoir le choix d'un modèle statistique et les plans d'expériences adaptés à ce modèle. L'objectif est de donner un aperçu de ce qui se fait dans le domaine et de guider le lecteur vers une bibliographie détaillée.

2. APPROCHE CLASSIQUE DES PLANS D'EXPERIENCES

2.1. Rappels sur le modèle polynomial

Les surfaces de réponse sont couramment utilisées pour les expériences numériques, nous pouvons par exemple citer Iman et Helton (1988) ou Dejean et Blanc (1999). Cette technique bien connue consiste à utiliser un plan d'expérience classique tel qu'un plan Box-Behnken ou composite (voir par exemple Box et Draper (1987)) pour sélectionner les valeurs des variables d'entrée. Les réponses du simulateur en ces points permettent d'ajuster le modèle polynomial d'ordre deux,

$$y = \beta_0 + \sum_i \beta_i x_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_i \beta_i x_i^2 + \varepsilon, \quad (1)$$

où $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ est un terme d'erreur. Le modèle (1) inclut certaines interactions $x_i x_j$ et termes quadratiques x_i^2 selon les choix spécifiés par l'utilisateur.

La principale différence entre expériences physique et numérique est la réponse déterministe du simulateur. Le terme d'erreur, ε , prend alors en compte un biais dû au modèle et non plus une erreur expérimentale. On peut cependant considérer ε comme une erreur de mesure. En effet, l'objet de l'étude n'est pas la réponse du simulateur mais le phénomène simulé qui peut être considéré comme la réponse du simulateur plus une erreur aléatoire due aux simplifications du modèle mathématique ou aux erreurs systématiques du schéma numérique.

Considérons un plan d'expériences $D=\{x_1, \dots, x_n\}$. Les réponses du simulateur aux points du plan, $Y^T=[y(x_1), \dots, y(x_n)]$, sont utilisées pour estimer les paramètres inconnus du modèle (1),

$$\hat{y}(x) = X(x)\hat{\beta}, \quad (2)$$

où $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ est l'estimateur des moindres carrés de β et $X=[X(x_1), \dots, X(x_n)]^T$ est la matrice du modèle.

Les outils statistiques traditionnels (étude des résidus, sélection de variables, ...) sont utilisés pour déterminer le meilleur modèle statistique.

REMARQUE : Les outils statistiques tels que la validation croisée ne semblent pas adaptés aux plans d'expériences classiques. En effet, supprimer un point à un plan, par exemple factoriel, peut détruire sa structure, et il n'a alors plus les propriétés requises pour donner une bonne estimation des paramètres du modèle polynomial. On préférera valider le modèle par des expériences supplémentaires.

Les résultats, la méthodologie ainsi que les propriétés des plans d'expériences classiques sont exposés dans de multiples ouvrages tels que Benoist *et al.* (1995) ou Dreesbeke *et al.* (1997).

2.2. Quelques éléments sur les plans d'expériences usuels

Pour ajuster le modèle (1) on utilise, soit des plans classiques tabulés tels que les plans composites, Box-Behnken, soit des plans optimaux construits numériquement. Il est cependant nécessaire de prendre quelques précautions dues au caractère déterministe des expériences :

- pas de répétition d'expériences puisque celles-ci donnent la même réponse,
- pas de randomisation des expériences car les conditions expérimentales n'influent pas sur la réponse.

On peut envisager des plans en blocs si certaines des variables d'entrée discrètes prennent en compte un contexte ou différents scénarios (Jourdan et Zabalza 2004).

Quel que soit le plan utilisé, il peut présenter des inconvénients importants pour les expériences numériques (Fig 3a) :

- le nombre de niveaux testés pour chaque variable d'entrée est en général faible,
- les points se situent souvent sur les bords du domaine expérimental.

Cette répartition des points, qui est optimale pour ajuster un modèle polynomial, ne permet pas de capter des éventuelles irrégularités à l'intérieur du domaine expérimental. Or la complexité des modèles mathématiques laisse supposer que la réponse du simulateur sera irrégulière et que le modèle polynomial ne sera pas adapté à cette réponse.

REMARQUE : Nous pouvons noter que dans un cas particulier, Carraro *et al.* (2005) ont établi un critère d'optimalité sélectionnant des points à l'intérieur du domaine expérimental (cas où les variables d'entrée sont incertaines mais connues avec une loi de probabilité) .

2.3. Pourquoi utilise-t-on encore des plans d'expériences classiques en simulation?

Les plans d'expériences classiques ne sont pas remis en cause. Si on les utilise dans le domaine où ils sont applicables, ils sont de très bonne qualité. Mais si les hypothèses initiales ne sont pas vérifiées, comme cela semble être souvent le cas en simulation, leur utilisation n'est pas appropriée. Cependant, malgré la complexité des modèles numériques, un simple modèle polynomial peut être suffisant pour approcher la réponse du simulateur et ce pour diverses raisons.

- La réponse du simulateur peut-être lisse même si le modèle mathématique décrivant le phénomène simulé est très complexe. Par exemple l'industrie pétrolière utilise des simulateurs d'écoulement pour prédire des productions cumulées d'huile. On constate que ce type de réponse est suffisamment régulière pour être résumée par une surface de réponse polynomiale (Dejean et Blanc 1999).
- Dans de nombreuses applications, le domaine d'étude peut être plus petit que le domaine de variation des variables d'entrée. Sur un domaine restreint il est alors possible de représenter la réponse du simulateur par un simple modèle polynomial même si globalement la réponse a un comportement plus complexe. Dans l'exemple précédent, les variables d'entrée du simulateur sont connues avec une plage d'incertitude due aux erreurs de mesure de ces variables lors de la phase de caractérisation du réservoir sur le terrain. Le domaine expérimental représente alors ces incertitudes sur les variables d'entrée, il est donc suffisamment petit pour justifier l'utilisation d'un modèle polynomial même pour des réponses complexes telles que la production de gaz ou d'eau (Jourdan et Zabalza 2004).
- Le modèle polynomial peut être très utile pour faire une analyse de sensibilité. Iman et Helton (1988) ont montré au travers de nombreux exemples que, même si la surface de réponse n'est pas de qualité, elle permet tout de même de trier par ordre de contribution les variables d'entrée influant sur la réponse.

Enfin une dernière raison pour laquelle la méthode des plans d'expériences classique est souvent utilisée vient du fait qu'elle est bien connue des ingénieurs et l'interprétation physique du modèle polynomial est simple, de plus elle est disponible en logiciel. Cependant « l'automatisation » de cette méthode amène quelquefois à une mauvaise utilisation, le logiciel étant alors utilisé en boîte noire sans s'assurer que l'approche est bien adaptée au problème à traiter.

2.4. Avantages et inconvénients

Les deux principaux avantages de cette méthode sont sa simplicité et le faible coût de simulation. En effet, si une surface de réponse polynomiale est adaptée à la réponse étudiée, alors cette approche est celle qui nécessite le moins de simulations. Cependant, il se peut que ce modèle statistique soit trop simple au regard de la complexité de la réponse du simulateur. Dans de nombreux cas il est nécessaire de faire appel à des modèles statistiques plus sophistiqués tels que le krigeage. De plus, comme nous l'avons signalé précédemment, les points des plans classiques sont positionnés sur les bords du domaine expérimental. Ils ne sont donc pas adaptés pour détecter les irrégularités à l'intérieur du domaine (Fig. 3a), ni d'ailleurs pour ajuster un modèle statistique autre que polynomial. D'autres types de plans sont alors envisagés.

3. APPROCHE PAR KRIGEAGE

Des travaux plus récents (Sacks *et al.* 1989, Bates *et al.* 1996, Koehler et Owen 1996) suggèrent que les modèles polynomiaux ne sont pas adaptés aux expériences numériques. Par exemple une surface de réponse d'ordre deux n'est pas assez flexible pour modéliser une surface admettant plusieurs extrema. C'est pourquoi, un modèle spatial a été adapté du modèle de krigeage habituellement utilisé en géostatistiques.

3.1. Description du modèle

Dans cette approche, la réponse déterministe du simulateur est considérée comme la réalisation de la fonction aléatoire suivante

$$Y(x) = X(x)\beta + \Gamma(x), \quad (3)$$

où $x=(x_1, \dots, x_d)$ représente les variables d'entrée, $X(x)$ est le vecteur des fonctions de base de la régression, β est le vecteur des paramètres inconnus du modèle et Γ est un processus gaussien d'espérance nulle et de fonction de covariance donnée par

$$\text{cov}(\Gamma(x), \Gamma(w)) = \sigma^2 R(x, w),$$

où σ^2 est la variance et $R(x, w)$ est la fonction de corrélation,

$$R(x, w) = \exp\left(-\theta \sum_{i=1}^d (x_i - w_i)^2\right), \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad \forall w \in \mathbb{R}^d,$$

avec θ le paramètre inconnu de corrélation du modèle.

On remarque que la corrélation entre observations (réponses du simulateur) dépend

- du paramètre de corrélation θ : la corrélation augmente quand θ diminue,
- de la distance entre les observations : la corrélation diminue quand la distance augmente.

On considère qu'au delà d'une certaine distance, deux observations ne sont plus corrélées. Le paramètre θ permet de déterminer cette distance de corrélation.

REMARQUE : Différentes fonctions de corrélations autre que la gaussienne peuvent être considérées suivant la régularité de la réponse étudiée (exponentielle, sphérique, Matérn,...). Christensen (1990) ou Koehler et Owen (1996) présentent un descriptif de ces fonctions. Le paramètre θ peut aussi se présenter sous la forme d'un vecteur de façon à prendre en compte différentes distances de corrélation suivant les axes. Ces solutions peuvent sembler plus adaptées qu'un simple processus gaussien. Il est cependant à noter qu'une structure de covariance complexe nécessite plus de simulations pour estimer ses paramètres.

Soit $D=\{x_1, \dots, x_n\}$ un plan d'expériences. Les réponses du simulateur aux points du plan, $Y^T=[y(x_1), \dots, y(x_n)]$, sont utilisées pour estimer les paramètres inconnus β , σ^2 et θ du modèle (3). Supposons dans un premier temps que θ est connu et introduisons les notations suivantes : $X=[X(x_1), \dots, X(x_n)]^T$ est la matrice du plan, $R=(R(x_i, x_j))_{i,j=1, \dots, n}$, est la matrice des corrélations entre les points du plan et $r(x)=[R(x_1, x), \dots, R(x_n, x)]^T$ est le vecteur des corrélations entre x et les points du plan. Le meilleur prédicteur linéaire sans biais (BLUP) est donné par (Sacks *et al.* 1989, Christensen 1990, Koehler et Owen 1996)

$$\hat{Y}(x) = X(x)\hat{\beta} + r(x)^T R^{-1}[Y - X\hat{\beta}], \quad (4)$$

où $\hat{\beta} = (X^T R^{-1} X)^{-1} X^T R^{-1} Y$ est l'estimateur des moindres carrés généralisé de β . Le prédicteur (4) minimise l'erreur quadratique moyenne

$$\text{MSE}(x) = E[Y(x) - \hat{Y}(x)]^2 = \sigma^2 \left(1 - r(x)^T R^{-1} r(x) + K(x)^T (X^T R^{-1} X)^{-1} K(x)\right), \quad (5)$$

où $K(x) = [X(x) - r(x)^T R^{-1} X]^T$. La variance σ^2 est estimée par

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (Y - X\hat{\beta})^T R^{-1} (Y - X\hat{\beta}). \quad (6)$$

Dans les expressions précédentes (4), (5) et (6), le paramètre θ doit être spécifié. Sous des hypothèses gaussiennes, θ peut être estimé par maximum de vraisemblance (Mardia et Marshall 1984). Cependant l'optimisation numérique du critère de vraisemblance est très coûteuse en temps de calcul et aboutit bien souvent à un maximum local (Warnes et Ripley 1987). C'est pourquoi dans cet article, nous sélectionnons le paramètre θ qui minimise l'erreur quadratique moyenne intégrée empirique,

$$\text{IMSE} = \frac{1}{G} \sum_{k=1}^G \text{MSE}(x_k) / \sigma^2, \quad (7)$$

où $x_k, k=1, \dots, G$ sont les points d'une grille G du domaine expérimental et $\text{MSE}(x_k)$ est donné par (5). La grille G peut être fine puisque l'IMSE (7) ne nécessite pas la réponse du simulateur aux points x_k . De plus, pour une grille suffisamment grande, on observe que le θ optimal est indépendant de la taille de la grille. Cette technique présente l'avantage de ne pas faire appel aux hypothèses gaussiennes.

3.2. Modèle d'interpolation

Les réponses du simulateur sont observées sans erreur de mesure. Le processus gaussien Γ représente alors l'écart entre la régression linéaire présumée et la réponse du simulateur. Il permet ainsi d'interpoler les simulations, $\hat{Y}(x_i) = Y(x_i)$. Les deux termes dans l'expression du prédicteur (4) sont non corrélés. On remarque que le second terme, $r(x)^T R^{-1} [Y - X\hat{\beta}]$, permet de combler l'écart entre la régression linéaire prédite, $X(x)\hat{\beta}$, et les réponses du simulateur aux points du plan (Fig. 1).

Cette particularité du modèle est intéressante dans le cadre des expériences numériques puisque les réponses sont déterministes. De plus, l'interpolation permet d'appréhender d'éventuelles irrégularités de la surface de réponse.

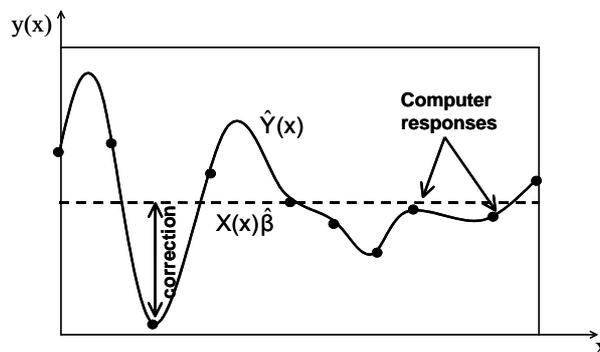


FIGURE 1. Comportement de la surface de réponse issue d'un krigeage dans le cas d'une régression linéaire constante.

REMARQUE : Sacks *et al.* (1989) et Jourdan (2002) suggèrent d'ajouter dans le modèle (3) un terme d'erreur appelé effet pépite en géostatistiques. Ce terme permet de s'affranchir de la contrainte d'interpolation et ainsi lisser la surface obtenue. Cet effet pépite peut prendre en compte une erreur de mesure dans le cas d'expériences physiques.

3.3. Choix du modèle de régression

En pratique la régression est bien souvent choisie constante (Welch *et al.* 1992). Elle représente alors la réponse moyenne des simulations (Fig. 1). Ce choix peut se justifier

par le fait que dans l'expression du prédicteur (4) le terme de correction, $r(x)^T R^{-1}[Y - X\hat{\beta}]$, permet d'interpoler les réponses quelle que soit la régression fixée. Cependant, on remarque que dans ce terme intervient essentiellement la structure de covariance du modèle au travers les quantités R et $r(x)$. Dans le cas d'une régression constante les prédictions obtenues par le prédicteur (4) sont donc déterminées par :

- la fonction de corrélation choisie *a priori* par l'utilisateur
- l'estimation du paramètre θ qui, comme nous l'avons vu précédemment, n'est pas précise.

La Figure 2 illustre le fait qu'une régression constante ne permet pas d'obtenir une surface de réponse robuste aux variations du paramètre θ . Il est donc nécessaire de choisir une régression plus consistante telle qu'une régression polynomiale (Sacks *et al.* 1989) ou une régression trigonométrique (Bates *et al.* 1996, Jourdan 2002). En effet, plus l'ajustement en moyenne sera précis est moins le terme de correction, $r(x)^T R^{-1}[Y - X\hat{\beta}]$, et au travers lui la structure de covariance, interviendra dans la prédiction.

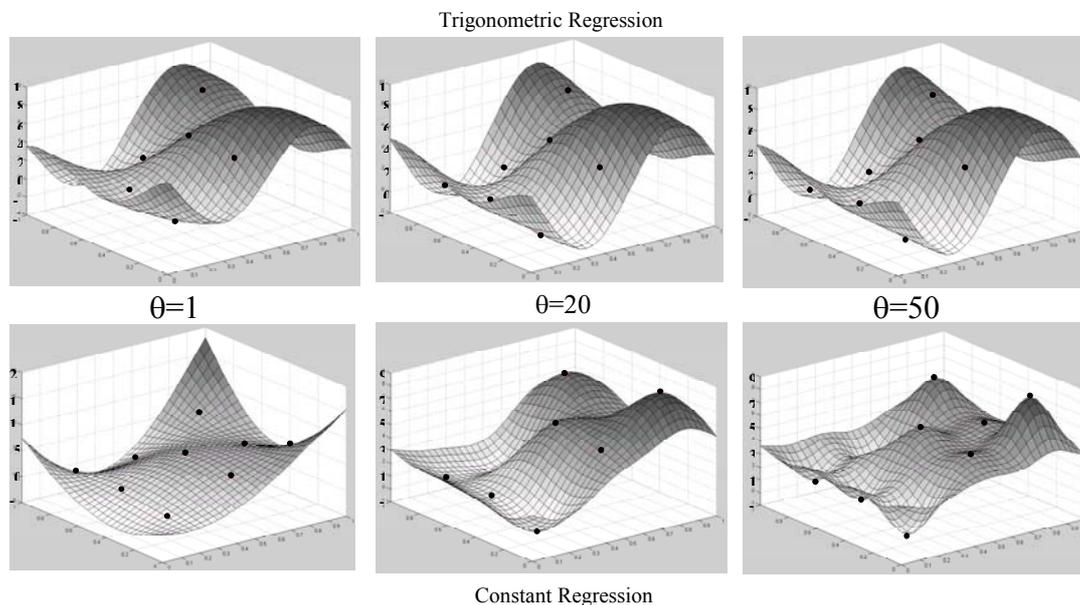


FIGURE 2. Variations de la surface de réponse krigée en fonction de différentes valeurs de θ pour une régression constante (en bas) et une régression trigonométrique (en haut)

3.4. Plans d'expériences pour krigeage

Les plans d'expériences classiques (factoriels, composite, Box-Benkhken,...) ne sont pas adaptés au krigeage. Dans ces plans, associés à des modèles polynomiaux du premier ou second degré, les points sont placés aux bords du domaine expérimental (Fig. 3a) ce qui ne permet pas :

- de détecter les possibles irrégularités de la réponse du simulateur à l'intérieur du domaine expérimental
- d'obtenir une bonne estimation du paramètre de corrélation θ puisque seules les grandes distances sont testées par le plan.

Initialement les plans développés pour le krigeage étaient des plans optimaux pour certains critères statistiques tels que :

- l'erreur quadratique moyenne intégrée, IMSE, (Sacks *et al.* 1989) qui va sélectionner le plan qui minimise l'écart entre la réponse du simulateur et sa prédiction,

$$\min_D \frac{1}{\sigma^2} \int_{[0,1]^d} E[Y(x) - \hat{Y}(x)]^2 dx.$$

- le critère d'entropie (Schwery et Wynn 1987, Currin *et al.* 1991) qui permet de mesurer la quantité d'information fournie par la simulation,

$$\max_D \det(R).$$

On constate cependant que ce type de plans présente deux inconvénients majeurs. D'une part leur construction numérique coûte très cher puisqu'elle nécessite l'optimisation numérique d'une fonction à $n \times d$ paramètres (Sacks *et al.* 1989). D'autre part, les plans ne sont optimaux que pour une structure de covariance donnée et notamment pour un paramètre de corrélation θ fixé *a priori*. De plus, Koehler et Owen (1996) ont remarqué que les critères ci-dessus ont tendance à repousser les points du plan sur les bords du domaine.

REMARQUE : Les critères statistiques sont détaillés par exemple dans les articles de Bates *et al.* (1996) et Koehler et Owen (1996).

Par la suite, les plans développés pour le krigeage ont été construits de façon à ce que leurs points représentent au mieux le domaine expérimental, d'où leur nom de « space filling designs ». On trouve essentiellement deux types de ces plans dans la bibliographie :

- Les plans à marges uniformes tels que les hypercubes latins (Fig 3b) ou les tableaux orthogonaux (Mc Kay *et al.* 1979, Stein 1987, Owen 1992). En projection sur un axe ou une face du domaine la répartition des points est uniforme.
- Les suites de faible discrédance telles que les *lattices* (réseaux) à un générateur (Niederreiter 1992, Fang et Wang 1994). La distribution empirique des points doit être proche de la distribution uniforme.

Ces plans sont construits indépendamment du modèle notamment de la structure de covariance choisie. Ils ne répondent pas nécessairement aux critères statistiques cités ci-dessus.

Les plans qui sont donc actuellement utilisés en krigeage sont ceux qui, à l'intérieur d'une classe de « space filling designs », optimisent un critère statistique. Cette technique permet ainsi :

- de s'assurer une bonne répartition spatiale des points du plan,
- d'avoir un plan optimal pour le modèle,
- de diminuer le temps de calcul de l'optimisation puisque le champ d'investigation est réduit à la classe de plans.

En pratique les plans les plus utilisés sont les hypercubes latins. Chaque arête du domaine expérimental est divisé en n segments de même longueur de façon à obtenir un maillage du domaine. Un hypercube latin sélectionne alors n points parmi les n^d points de la grille de façon à ce que les n niveaux des variables d'entrée soient testés une fois par les simulations (Fig. 3b). Les hypercubes latins présentent beaucoup d'avantages.

- Ils sont simples à construire. En effet, chaque colonne d'un hypercube est une permutation de $\{1, \dots, n\}$ ou de n symboles quelconques.
- Les points sont uniformément distribués sur chaque axe du domaine.

La distribution uniforme sur chaque axe n'assure pas l'uniformité sur le domaine expérimental. Cependant, pour n fixé, ils existent $(n!)^d$ hypercubes latins possibles. Il est donc possible de sélectionner le plan optimisant un critère d'uniformité (discrédance,...) ou bien un critère statistique (IMSE, entropie,...). Park (1994) propose un algorithme d'échange pour déterminer un hypercube optimal (localement) pour un critère donné. Collombier et Jourdan (2001) ont montré qu'un hypercube optimal est

robuste aux variations du paramètre de corrélation θ qui, rapellons-le, n'est pas connu lors de la construction du plan.

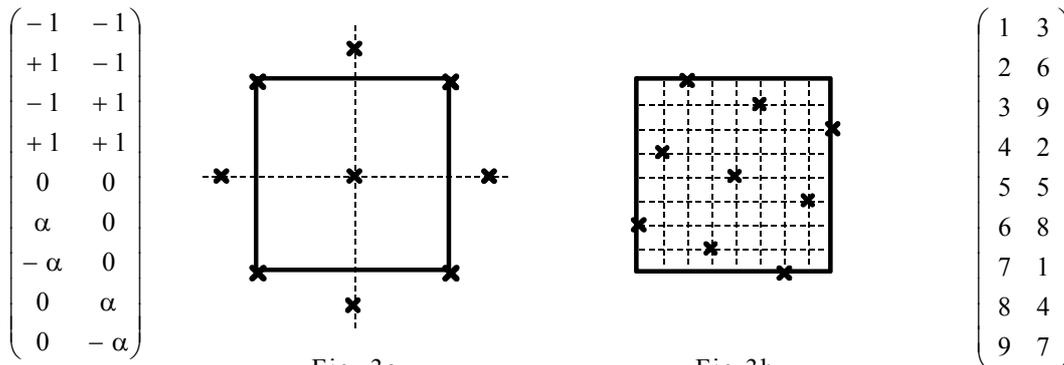


FIGURE 3. Deux plans à 2 facteurs de taille 9 : (a) Plan composite standard (b) Hypercube latin

3.5. Avantages et inconvénients

L'approche par krigeage semble plus appropriée aux expériences numériques car elle permet d'appréhender des surfaces de réponse complexes. Cependant, le modèle statistique étant plus sophistiqué, il demande plus de simulations pour estimer ses paramètres, notamment pour obtenir une estimation précise de θ . La méthode statistique choisie dépendra donc de l'objectif recherché, par exemple pour une première étape de screening, il sera préférable d'utiliser des plans d'expériences classiques. Notons aussi que la taille d'un hypercube latin est très flexible et en pratique il n'est pas aisé de la déterminer *a priori*.

Une approche séquentielle a été proposée par Jourdan (2003) afin de diminuer le coût du krigeage. L'idée est d'ajuster un modèle polynomial à l'aide d'un hypercube latin présentant des propriétés d'orthogonalité puis d'ajouter des simulations uniquement si la surface de réponse polynomiale demande à être corrigée par un krigeage.

4. CONCLUSION

La méthode par krigeage semble être l'alternative aux plans d'expériences la plus communément utilisée, notamment parce qu'elle propose un modèle statistique plus flexible. Elle n'est cependant pas la seule et d'autres types de modélisation peuvent être envisagés. Par exemple, les réseaux de neurones sont connus pour leur capacité à modéliser des surfaces irrégulières. La construction de plans d'expériences optimaux adaptés à ce type de modèle a fait l'objet des articles de S. Issanchou et J.P. Gauchi (2005) et Haines (1998).

Le but de cet article n'est pas de préférer une méthode à une autre, chacune présentant les avantages et les inconvénients cités précédemment. L'objectif est de guider le lecteur afin qu'il choisisse la méthode la plus adaptée au problème à traiter.

BIBLIOGRAPHIE

- Bates R.A., Buck R.J., Riccomagno E., Wynn H.P. (1996). Experimental Design and Observation for large Systems. *J. R. Statist. Soc. B*, **58**, p. 77-94.
- Benoist D., Tourbier Y., Germain-Tourbier S. (1995). *Plans d'expériences : construction et analyse*. Tec et Doc, Paris.

- Box G.E.P., Draper N.R. (1987). *Empirical Model Building and Responses Surfaces*. Wiley. New York.
- Carraro L., Corre B., Helbert C., Roustant O. (2005). Construction d'un critère d'optimalité pour la quantification d'incertitudes d'une sortie de simulateur. A paraître dans la *Revue de Statistique Appliquée*.
- Christensen R. (1990). *Linear Models for Multivariate, time series, and spatial Data*, Springer-Verlag.
- Collombier D., Jourdan A. (2001). Régression trigonométrique et plans d'expériences pour expériences simulées. *Revue de Statistique Appliquée*, **49** (2), 5-26.
- Currin C.T., Mitchell M., Morris M., Ylvisaker D. (1991). Bayesian prediction of deterministic functions, with applications to the design and the analysis of computer experiments. *J. Amer. Statist. Assoc.* **86**, 953-963.
- Dejean J.-P., Blanc G. (1999). Managing Uncertainties on Production Prediction Using Integrated Statistical Methods. Paper SPE 56696 presented at the 1999 SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Houston, U.S.A., October 3-6.
- Droesbeke J.-J., Fine J., Saporta G. (1997) (Editeurs scientifiques). *Plans d'expériences, application à l'entreprise*. Technip, Paris.
- Fang K.T., Wang Y. (1993). *Number-theoretic methods in statistics*. Chapman and Hall, London.
- Haines L. M. (1998). Optimal Design for Neural Networks. New Developments and Applications in Experimental Design. Editors: N. Flournoy, W.F. Rosenberger and W.K. Wong, Institute of Mathematical Statistics, Hayward, CA., 152-162.
- Iman R., Helton J.C. (1988). An Investigation of Uncertainty and Sensitivity Analysis Techniques for Computer Models. *Risk Analysis*, **8**, 71-90.
- Issanchou S., Gauchi J.-P. (2005). Computer-aided Optimal Designs for improving the neural network generalization. Soumis à *Technometrics*.
- Johnson M.E., Moore L.M., Ylvisaker D. (1990). Minimax and maximin distance designs. *J. of Statist. Planning and Inference* **26**, 131-148.
- Jourdan A. (2002). Approches statistiques des expériences simulées. *Revue de Statistique Appliquée*, **50** (1), 49-64.
- Jourdan A. (2003). *Approche séquentielle du krigeage*. Présentation séminaire « plans d'expériences numériques ». Ecole Nationale des Mines - Saint Etienne
- Jourdan A., Zabalza-Mezghani I. (2004). Response surface designs for scenario management and uncertainty quantification in reservoir production. *Mathematical Geology* **36** (8), 965-985.
- Koehler J.R., Owen A.B. (1996) Computer Experiments. In Ghosh, S., Rao, C.R., (Eds.), *Handbook of Statistics, 13 : Designs and Analysis of Experiments*, North- Holland, Amsterdam, p. 261-308.
- Mardia K.V., Marshall R.J. (1984). Maximum Likelihood Estimation of Models for Residual Covariance in Spatial Regression. *Biometrika*, **71**, 135-146.
- McKay M.D., Beckman R.J., Conover W.J. (1979). Comparison of three methods for selecting values input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, **21**, 239-245.
- Niederreiter H. (1992). *Random number generation and quasi-Monte Carlo methods*. CBMS-NSF, SIAM, Philadelphia. Technical Report n°4, Illinois, Dept. of Statistics.
- Owen A.B. (1992). Orthogonal arrays for computer experiments, integration and visualization. *Statist. Sinica* **2**, 439-452.

- Park J.S. (1994). Optimal Latin hypercube designs for computer experiments. *J. of Statist. Planning and Inference* **39**, 95-111.
- Sacks J., Welch W.J., Mitchell T.J., Wynn H.P. (1989) Design and analysis of Computer Experiments. *Statistical Science*, **4**, p. 409-435.
- Sacks J., Schiller S.B., Welch W.J. (1989). Designs for Computer Experiments. *Technometrics*, **31**, 41-47.
- Santner T.J., Williams B.J., Notz W. I. (2003) *The Design and Analysis of Computer Experiments*, Springer Series in Statistics, Springer-Verlag New York.
- Schwery M.C., Wynn H.P. (1987). Maximum entropy sampling. *J. of Appl. Statist.* **14**, 165-170.
- Stein M. (1987). Large sample properties of simulations using latin hypercube sampling. *Technometrics*, **29**, p. 143-151
- Warnes J.J., Ripley B.D. (1987). Problem with Likelihood Estimation of Covariance Functions of Spatial Gaussian Processes. *Biometrika*, **74**, 640-642.
- Welch W.J., Yu T.K., Kang S.M., Sacks J. (1988). Computer experiments for quality control by parameter design. Rapport technique 4, université de l'Illinois, dept. de statistics.