

REVUE DE STATISTIQUE APPLIQUÉE

D. COLLOMBIER

W. TINSSON

Propriétés caractéristiques de plans d'expérience en blocs à facteurs quantitatifs

Revue de statistique appliquée, tome 45, n° 1 (1997), p. 75-96

http://www.numdam.org/item?id=RSA_1997__45_1_75_0

© Société française de statistique, 1997, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « *Revue de statistique appliquée* » (<http://www.sfds.asso.fr/publicat/rsa.htm>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

PROPRIÉTÉS CARACTÉRISTIQUES DE PLANS D'EXPÉRIENCE EN BLOCS À FACTEURS QUANTITATIFS

D. Collombier, W. Tinsson

*Université de Pau et des Pays de l'Adour, Laboratoire de Mathématiques Appliquées,
avenue de l'Université – 64000 Pau, CNRS-URA 1204*

RÉSUMÉ

Cet article est consacré à l'étude des propriétés des plans en blocs utilisés pour l'ajustement des surfaces de réponse lorsque les effets de blocs sont supposés aléatoires. Nous nous intéressons ici à l'existence d'estimateurs linéaires sans biais uniformément optimaux pour les paramètres de l'espérance du vecteur aléatoire des réponses. Nous en déduisons des propriétés caractéristiques pour les plans bloqués orthogonalement, puis pour les plans usuels pour les modèles d'ordre 2.

Mots-clés : modèle linéaire mixte, estimateurs linéaires uniformément optimaux, plans bloqués orthogonalement, plans usuels.

ABSTRACT

This paper deals with properties of blocked designs used to fit response surfaces on the assumption of random block effects. We study existence of uniformly optimal unbiased linear estimators for parameters of the expected mean responses. We show characteristic properties for orthogonally blocked designs and then for usual designs associated with models of order 2.

Keywords : mixed linear model, uniformly optimal linear estimator, orthogonally blocked designs, usual designs.

1. Introduction

Les plans à facteurs quantitatifs pour l'ajustement de «surfaces de réponse» sont d'usage courant. De nombreux ouvrages et publications leurs sont consacrés, voir par exemple Box et Draper [2] ou Khuri et Cornell [5]. En maintes occasions les unités de ces plans sont réparties en blocs. Dans ce cas on suppose généralement que les blocs n'ont que des effets fixes, c'est-à-dire qu'ils n'agissent que sur l'espérance du vecteur des aléas observés, EY .

Cependant, le recours aux modèles à effets fixes pour l'analyse de ce type de plans en blocs est souvent critiquable, dans bien des applications il est clair que les blocs ont des effets aléatoires sur Y . Par ailleurs, même lorsque les blocs sont supposés à effets fixes, la prise en compte de la randomisation dans l'expression de

la distribution de Y conduit à supposer que les blocs agissent non sur EY mais sur $\text{Cov}Y$, l'opérateur de covariance de Y .

C'est à l'emploi de modèles à effets de blocs aléatoires pour l'ajustement des surfaces de réponse qu'est consacré cet article. Nous complétons ici l'unique publication parue à ce jour sur ce sujet, due à Khuri [6]. Plus précisément nous montrons que les plans en blocs les plus utilisés actuellement ont des propriétés caractéristiques lorsqu'on suppose que les blocs ont des effets aléatoires. Ces propriétés concernent l'existence d'estimateurs linéaires sans biais uniformément optimaux.

Le paragraphe 2 est consacré à l'introduction des modèles et à la présentation du théorème de Zmysłony [9] qui nous sert ici à caractériser les plans en blocs. Nous nous intéressons tout d'abord dans le paragraphe 3 aux plans bloqués orthogonalement, puis dans le paragraphe 4 à la classe plus large dite ici des plans en blocs usuels pour les modèles d'ordre 2.

2. Modèle linéaire mixte

2.1 Modèles

Supposons que nous cherchions à modéliser un phénomène dont on peut contrôler expérimentalement m **facteurs quantitatifs**. Considérons pour cela un ensemble \mathcal{U} de n unités expérimentales réparties selon un **plan d'expérience** \mathcal{D} . Nous allons supposer alors que $Y_{u,x}$, l'aléa observé lorsque le traitement $x = {}^t(x_1 \dots x_m)$ est appliqué à l'unité expérimentale u , est un réel de la forme :

$$Y_{u,x} = f(x) + \varepsilon_{u,x}$$

avec : $\begin{cases} f(x) \text{ loi de réponse en } x \text{ (valeur réelle de la réponse en ce point)} \\ \varepsilon \text{ résidu lié aux erreurs expérimentales et au modèle} \end{cases}$

Pour obtenir concrètement une approximation de la loi de réponse, nous allons supposer que f est assez régulière pour admettre un développement limité à l'ordre q dans le domaine expérimental $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^m$ autour de $0 \in \mathcal{E}$. En pratique, nous allons travailler généralement sur des développements limités polynomiaux d'ordre $q = 2$, nous supposons donc :

$$u = 1 \dots n \text{ et } \forall x \in \mathcal{E}, Y_{u,x} = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i x_i + \sum_{i=1}^m \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon_{u,x}.$$

On appelle **matrice du plan** considéré la matrice $n \times m$ ayant pour ligne u les m coordonnées du u -ième point du plan \mathcal{D} . Désignons dans la suite par $L_j (1 \leq j \leq m)$ la j -ème colonne de cette matrice et notons \odot l'opérateur du produit d'Hadamard (appelé encore produit terme à terme puisque par définition si $u, v \in \mathbb{R}^n$ alors $u \odot v \in \mathbb{R}^n$ est tel que : $\forall i = 1 \dots n, (u \odot v)_i = u_i v_i$). En posant maintenant

$Q_j = L_j \odot L_j (1 \leq j \leq m)$ et $Q_{jk} = L_j \odot L_k (1 \leq j < k \leq m)$ nous pouvons remarquer que la **matrice du modèle** s'écrit pour un développement polynômial d'ordre 2 :

$$X = [1_n \mid L_1 \dots L_m \mid Q_1 \dots Q_m \mid Q_{12} \dots Q_{(m-1)m}]$$

A partir de ceci, la matrice :

$$M = \frac{1}{n} {}^t X X$$

a pour éléments tous les moments jusqu'à l'ordre 4 de la distribution de points que forme le plan, M est donc appelée **matrice des moments** du plan \mathcal{D} .

Supposons maintenant que l'on veuille tenir compte d'éventuels effets d'hétérogénéité entre unités expérimentales. Pour cela, on peut regrouper en **blocs** les observations associées aux unités expérimentales homogènes et tenir compte au sein du modèle utilisé de cet effet de blocs supplémentaire. Matriciellement, nous désignons par B la matrice $n \times b$ des indicatrices des blocs et par γ le vecteur des effets de blocs scalaires qui lui est associé.

Définition 1

On appelle **modèle linéaire mixte** le modèle à effets de blocs aléatoires donné par la relation matricielle :

$$Y = X\beta + B\gamma + \varepsilon$$

où : $E\varepsilon = E\gamma = 0$ et $\text{Cov } \varepsilon = \sigma^2 I_n$, $\text{Cov } \gamma = \sigma_b^2 I_b$
 ε_i et γ_j sont indépendants $\forall i = 1 \dots n$ et $\forall j = 1 \dots b$.

En d'autres termes, nous avons donc :

$$\begin{cases} EY = X\beta \\ \text{Cov}Y = \sigma^2 I_n + \sigma_b^2 B^t B \end{cases}$$

Nous supposons dans la suite que la matrice $\text{Cov}Y$ est **régulière** et nous notons :

$$\text{Cov}Y = \sigma^2 V \text{ avec } V = I_n + \eta B^t B \text{ où } \eta = \frac{\sigma_b^2}{\sigma^2}$$

On a alors les résultats classiques suivants (se référer à Christensen [3]).

L'**équation normale** du modèle linéaire mixte est donnée par :

$$({}^t X V^{-1} X) \hat{\beta}(\eta) = {}^t X V^{-1} Y$$

En désignant par A^- une inverse généralisée de toute matrice A (c'est-à-dire telle que $AA^-A = A$) nous pouvons dire que si $K\beta$ est une application linéaire estimable alors :

$$\boxed{\text{Cov}K\hat{\beta}(\eta) = \sigma^2 K({}^t X V^{-1} X)^- {}^t K} .$$

Ces deux résultats sont liés à la valeur du paramètre η . Ceci nous amène alors naturellement à distinguer les deux cas limite suivants.

Définition 2

On appelle **modèle linéaire usuel** le modèle linéaire mixte particulier obtenu lorsque $\eta = 0$. Nous avons alors :

$$Y = X\beta + \varepsilon$$

c'est-à-dire que :

$$\boxed{\begin{cases} EY = X\beta \\ \text{Cov}Y = \sigma^2 I_n \end{cases}}$$

Lemme 3

L'équation normale du modèle linéaire usuel est donnée par :

$$\boxed{({}^t X X)\hat{\beta}(0) = {}^t X Y} .$$

Lorsque $\eta = +\infty$, on vérifie, par identification des équations normales, que le modèle linéaire mixte **est équivalent** au modèle suivant où les effets de blocs sont supposés fixes (se référer à l'analyse de Henderson *et al.* [4]).

Définition 4

On appelle **modèle intrablocs** le modèle linéaire donné par :

$$Y = X\beta + B\gamma + \varepsilon$$

avec cette fois :

$$\boxed{\begin{cases} EY = X\beta + B\gamma \\ \text{Cov}Y = \sigma^2 I_n \end{cases}}$$

Lemme 5

P désignant le projecteur orthogonal sur $\text{Im}B$, l'équation normale réduite du modèle intrablocs par élimination de $\hat{\gamma}$ est :

$$\boxed{[{}^tX(I - P)X]\hat{\beta}(\infty) = {}^tX(I - P)Y} .$$

Remarque. Nous venons de voir que le modèle linéaire mixte s'applique à tous les cas où les effets de blocs sont supposés aléatoires mais il s'applique aussi aux cas des effets de blocs fixes sous hypothèse de randomisation. En effet, la prise en compte dans le modèle de la randomisation pour des plans à blocs égaux conduit à une matrice de dispersion diagonale par blocs à blocs identiques et complètement symétriques, c'est-à-dire identifiable à la matrice de dispersion du modèle linéaire mixte (sous réserve que le terme général extradiagonal soit positif et inférieur au terme général diagonal).

2.2. Estimateurs uniformément optimaux

Considérons d'une manière générale un modèle linéaire où le vecteur aléatoire des réponses Y , à valeurs dans \mathbb{R}^n , vérifie :

$$EY = X\beta \text{ et } \text{Cov}Y \in C$$

avec : X application linéaire fixée de \mathbb{R}^p dans \mathbb{R}^n .

β vecteur paramétrique de \mathbb{R}^p .

C cône convexe engendré par q endomorphismes symétriques définis positifs de \mathbb{R}^n notés $V_1 \dots V_q$.

Définition 6

On dit qu'une fonction paramétrique linéaire estimable $K\beta$ admet un estimateur linéaire AY sans biais **uniformément optimal** si et seulement si :

$$\forall V \in C, AY \text{ est l'estimateur de Gauss-Markov de } K\beta \\ \text{relativement au modèle linéaire tel que :} \\ EY = X\beta \text{ et } \text{Cov}Y = V.$$

Afin de rechercher dans la suite les conditions d'obtention d'un tel estimateur relativement au modèle linéaire mixte, nous allons utiliser le théorème de Zmyślony [9] suivant.

Définition 7

Un endomorphisme symétrique défini positif V_0 est appelé **élément maximal** du cône C si et seulement si :

$$\boxed{V_0 \in C \text{ et } \forall V \in C, \text{Im}V \subseteq \text{Im}V_0} .$$

Remarque. Il est clair que si l'identité est un des générateurs de C alors $V_0 = I_n$ est le seul élément maximal.

Théorème 8 (Zmysłony)

Désignons par V_0 un élément maximal du cône C et posons alors :

- 1) $\overline{W} = V_0$ si $\text{Im}X \subseteq \text{Im}V_0$ et $\overline{W} = V_0 + X^t X$ si $\text{Im}X \not\subseteq \text{Im}V_0$.
- 2)

$$U = {}^t X \overline{W}^{-1} \left[\sum_{i=1}^q V_i (I - P) V_i \right] \overline{W}^{-1} X$$

avec P projecteur orthogonal de \mathbb{R}^n sur $\text{Im}X$ et \overline{W}^{-1} g -inverse de \overline{W} .

- 3) Z projecteur de \mathbb{R}^n d'image $\text{Ker}U$ (c'est-à-dire que $Z = I - U^{-1}U$).

Une fonction paramétrique estimable $K\beta$ admet alors un estimateur linéaire sans biais **uniformément optimal** si et seulement si :

$$\text{Im } {}^t K \subseteq \text{Im}({}^t X \overline{W}^{-1} X Z).$$

Remarque. La démonstration du théorème de Zmysłony se simplifie grandement lorsque $\overline{W} = V_0 = I$. Or cette condition est vérifiée ici. Nous donnons donc en annexe une démonstration de ce théorème dans ce cas particulier.

3. Plans bloqués orthogonalement

3.1. Définition

Revenons au modèle intrabloc et supposons que $X = [1_n | W]$ avec $\text{Im}W \cap \text{Im}B = \{0\}$. Il vient alors :

$$EY = \beta_0 1_n + W\tau + B\gamma \text{ et } \tau \text{ est estimable.}$$

L'équation normale réduite obtenue par élimination de $\hat{\gamma}$ (donc aussi de $\hat{\beta}_0(\infty)$) puisque $1_n = B1_b$) s'écrit avec P projecteur orthogonal sur $\text{Im}B$:

$${}^t W (I - P) W \hat{\tau}(\infty) = {}^t W (I - P) Y.$$

Comme $1_n \in \text{Im}B$ la projection $(I - P)Y$ peut s'obtenir en deux étapes :

- 1) projection de Y sur 1_n^\perp : $\left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) Y$ avec $J_n = 1_n {}^t 1_n$.
- 2) projection de $\left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) Y$ sur $\text{Im}B^\perp$.

La deuxième étape est inutile si et seulement si :

$${}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B = 0 \text{ ou encore } {}^tX \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B = 0.$$

Dans ce cas l'équation normale réduite se ramène à :

$${}^tW \left(I - \frac{1}{n} J_n \right) W\hat{\tau}(\infty) = {}^tW \left(I - \frac{1}{n} J_n \right) Y.$$

Définition 9

Un plan est dit **bloqué orthogonalement** si et seulement si

$${}^tX \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B = 0.$$

Exemples de plans bloqués orthogonalement :

Considérons un plan composite centré de Box et Wilson (c'est-à-dire dont la partie factorielle est une fraction régulière 2_V^{m-p} des sommets de l'hypercube $[-1, 1]^m$). Désignons par α la distance commune des points axiaux au centre du domaine et supposons les unités expérimentales réparties en deux blocs,

$$\begin{cases} \text{Bloc 1 : partie factorielle} + n_{01} \text{ points centraux} \\ \text{Bloc 2 : partie axiale} + n_{02} \text{ points centraux} \end{cases}.$$

On vérifie qu'alors ce plan est bloqué orthogonalement si et seulement si

$$\alpha = \left[\frac{2^{m-p}(2m + n_{02})}{2(2^{m-p} + n_{01})} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Le plan de Box et Behnken à 4 facteurs décomposé de la manière suivante est de même bloqué orthogonalement :

$$\begin{cases} \text{Bloc 1 : } (\pm 1, \pm 1, 0, 0) \cup (0, 0, \pm 1, \pm 1) + n_0 \text{ points centraux} \\ \text{Bloc 2 : } (\pm 1, 0, 0, \pm 1) \cup (0, \pm 1, \pm 1, 0) + n_0 \text{ points centraux} \\ \text{Bloc 3 : } (\pm 1, 0, \pm 1, 0) \cup (0, \pm 1, 0, \pm 1) + n_0 \text{ points centraux} \end{cases}$$

3.2. Propriété caractéristique

Nous allons prouver ici que tout plan bloqué orthogonalement possède une propriété caractéristique lorsqu'on suppose les effets de blocs aléatoires. Khuri [6] a démontré le résultat suivant :

Proposition 10

Tout plan **bloqué orthogonalement** vérifie :

$$\hat{\tau}(\eta) = \hat{\tau}(\infty) = \hat{\tau}(0)$$

Nous allons montrer ici que cette condition est en fait nécessaire et suffisante. Commençons par énoncer un lemme de calcul matriciel qui va nous servir par la suite.

Lemme 11

Soit A une matrice carrée d'ordre n symétrique régulière de la forme

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & A_{12} \\ {}^t A_{12} & A_{22} \end{bmatrix} \text{ avec } a_{11} \in \mathbb{R}^* \text{ et } A_{22} \text{ inversible}$$

Si l'on note ${}^s a_{11}$ et ${}^s A_{22}$ les **compléments de Schur** respectifs de a_{11} et A_{22} (c'est-à-dire que ${}^s a_{11} = a_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}{}^t A_{12}$ et ${}^s A_{22} = A_{22} - (a_{11}^{-1}){}^t A_{12}A_{12}$, il vient alors :

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} ({}^s a_{11})^{-1} & -(a_{11})^{-1}A_{12}({}^s A_{22})^{-1} \\ -(a_{11})^{-1}({}^s A_{22})^{-1}{}^t A_{12} & ({}^s A_{22})^{-1} \end{bmatrix}$$

Proposition 12

Considérons le modèle linéaire mixte :

$$Y = \beta_0 1_n + W\tau + B\gamma + \varepsilon \Leftrightarrow \begin{cases} EY = \beta_0 1_n + W\tau \\ \text{Cov}Y = \sigma^2 I_n + \sigma_b^2 B {}^t B \end{cases}$$

avec B matrice des indicatrices des blocs (de rang b) et $X = [1_n \mid W]$ matrice du modèle, d'ordre $n \times p$, de rang p , vérifiant $\text{Im}X \cap \text{Im}B = [1_n]$.

Les fonctions paramétriques linéaires dépendant de τ admettent alors un estimateur linéaire sans biais **uniformément optimal** si et seulement si :

$${}^t W \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B = 0$$

c'est-à-dire si et seulement si le plan est bloqué orthogonalement.

Démonstration. Appliquons le théorème de Zmysłony au modèle mixte de la définition. Remarquons tout d'abord que l'identité est ici un des générateurs du cône C , donc :

$$V_0 = I_n \Rightarrow \text{Im}X \subseteq \text{Im}V_0 \Rightarrow \overline{W} = I_n.$$

Nous avons de plus :

$$P = X({}^tXX)^{-1} {}^tX \text{ et}$$

$$U = {}^tX[(I - P) + B {}^tB(I - P)B {}^tB]X = {}^tXB {}^tB(I - P)B {}^tBX$$

puisque $\text{Ker}(I - P) = \text{Im}X \Rightarrow (I - P)X = 0$.

D'après le théorème 8, nous savons que les fonctions paramétriques linéaires dépendant seulement de τ admettent alors un estimateur linéaire sans biais uniformément optimal si et seulement si :

$$\text{Im} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{p-1} \end{bmatrix} \subseteq \text{Im}({}^tX\overline{W}^{-1}XZ) \Leftrightarrow \text{Im}({}^tXX)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{p-1} \end{bmatrix} \subseteq \text{Im}U^\perp \quad (3.1)$$

car $\overline{W} = I_n, {}^tXX$ est régulière et $\text{Im}Z = \text{Ker}U \Rightarrow \text{Im}Z = \text{Im}U^\perp$ puisque U est symétrique.

Or, nous pouvons dire que :

1) D'après le lemme 11, il vient :

$$X = [1_n \mid W] \Rightarrow {}^tXX = \begin{bmatrix} n & {}^t1_nW \\ {}^tW1_n & {}^tWW \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow ({}^tXX)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{p-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-1}{n} {}^t1_nW \left({}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right)^{-1} \\ \left({}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right)^{-1} \end{bmatrix}$$

2) En ce qui concerne $\text{Im}U$, remarquons que si l'on note $F = (I - P)B$ et $G = {}^tBX$, il vient alors par idempotence de $(I - P)$ et propriétés des images :

$$\text{Im}U = \text{Im} {}^t(FG)(FG) \subseteq \text{Im} {}^t(FG)F \subseteq \text{Im} {}^t(FG).$$

Or, $\text{Im} {}^t(FG) = \text{Im} {}^t(FG)(FG)$ donc :

$$\Rightarrow \text{Im}U = \text{Im} {}^t(FG)F = \text{Im} {}^tXB {}^tB(I - P)B = \text{Im} \begin{bmatrix} {}^t1_nB {}^tB(I - P)B \\ {}^tWB {}^tB(I - P)B \end{bmatrix}$$

Nous déduisons alors de 1 et 2 que :

$$(3.1) \Leftrightarrow \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B {}^tB(I - P)B = 0 \quad (3.1)$$

$$\Leftrightarrow {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B {}^tB(I - P)B = 0.$$

Remarquons que ${}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B J_b = {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) 1_n {}^t1_b = 0$,
donc :

$$(3.1) \Leftrightarrow {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B [{}^tB(I - P)B + J_b] = 0.$$

Or, nous savons que :

$$\begin{cases} {}^tB(I - P)B 1_b = {}^tB(I - P)1_n = 0 \text{ puisque } 1_n \in \text{Im}X \\ \text{rg } {}^tB(I - P)B = b - 1 \text{ puisque } \text{rg}B = b \text{ et } \text{Im}X \cap \text{Im}B = [1_n] \end{cases}$$

$$\Rightarrow \text{Ker } {}^tB(I - P)B = [1_b]$$

Comme $\text{Im}J_b = [1_b]$, on en déduit alors que :

$$[{}^tB(I - P)B + J_b] \text{ est régulière donc } (3.1) \Leftrightarrow {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) B = 0 \quad \square$$

Corollaire 13

Dans le cas où le plan est bloqué orthogonalement avec des blocs qui ne sont pas tous de même taille, les **seules** fonctions paramétriques qui admettent un estimateur linéaire sans biais uniformément optimal sont les fonctions paramétriques dépendant de τ . Par contre, **toutes les fonctions paramétriques** admettent un estimateur linéaire sans biais uniformément optimal si le plan est à **blocs égaux**.

Démonstration. Remarquons que sur tout plan bloqué orthogonalement on peut détailler l'expression de U utilisé dans la démonstration de la proposition 12 puisque :

$$\begin{aligned} {}^tX B &= \frac{1}{n} {}^tX J_n B \Rightarrow U = \frac{1}{n^2} {}^tX J_n B {}^tB(I - P)B {}^tB J_n X \\ &\Rightarrow U = \underbrace{\frac{{}^t1_n B {}^tB(I - P)B {}^tB 1_n}{n^2}}_{\in R} {}^tX J_n X. \end{aligned}$$

Il vient alors immédiatement :

$$\text{rg}U = \begin{cases} 1 \text{ si } {}^t1_n B {}^tB(I - P)B {}^tB 1_n \neq 0 \\ 0 \text{ si } {}^t1_n B {}^tB(I - P)B {}^tB 1_n = 0 \end{cases}.$$

Or :

$$\begin{cases} \text{Ker } {}^tB(I - P)B = [1_b] \Rightarrow \text{Im } {}^tB(I - P)B = [1_b]^\perp \\ {}^t1_n B = [k_1 \dots k_b] \end{cases}$$

donc : ${}^t 1_n B {}^t B (I - P) B {}^t B 1_n = 0 \Leftrightarrow \forall i = 1 \dots b, k_i = k$, c'est-à-dire le plan est à blocs égaux.

Distinguons maintenant deux cas.

1) Si les blocs ne sont pas tous de même taille alors :

$$\text{rg}U = 1 \text{ donc (3.1)} \Leftrightarrow \text{Im}({}^t X X)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{p-1} \end{bmatrix} = \text{Im}U^\perp.$$

Ceci nous prouve qu'il est bien impossible d'estimer de façon uniformément optimale toutes les fonctions paramétriques.

2) Si les blocs sont égaux, alors :

$$\text{rg}U = 0 \Rightarrow \text{Im}U^\perp = \mathbb{R}^p$$

d'où la deuxième partie de ce corollaire \square

Remarque. On retombe sur la deuxième partie de ce corollaire en explicitant des conditions usuelles d'égalité entre l'estimateur des moindres carrés ordinaires de β et l'estimateur de Gauss-Markov $\hat{\beta}(\eta)$. En effet, nous pouvons par exemple considérer le résultat de Zyskind [10] (cf article de synthèse de Puntanen et Styan [8]) qui nous dit qu'il y a égalité si et seulement si :

$$PV = VP \text{ avec } P = X({}^t X X)^{-1} {}^t X.$$

On montre alors que cette condition est vérifiée si et seulement si notre plan d'expérience est bloqué orthogonalement en blocs égaux.

3.3. Estimation des paramètres

Cherchons maintenant à expliciter l'estimateur de Gauss-Markov $\hat{\beta}(\eta)$ pour tout plan bloqué orthogonalement. Nous savons que l'équation normale du modèle linéaire mixte s'écrit :

$$({}^t X V^{-1} X) \hat{\beta}(\eta) = {}^t X V^{-1} Y$$

avec V^{-1} donnée dans le cas général où l'on a b blocs de tailles $k_1 \dots k_b$ par :

$$V^{-1} = I_n - B D {}^t B \text{ où } D = \text{diag} \left(\frac{\eta}{1 + k_i \eta}, i = 1 \dots b \right) \text{ et } \eta = \frac{\sigma_b^2}{\sigma^2}.$$

L'équation normale est donc :

$$({}^t X X - {}^t X B D {}^t B X) \hat{\beta}(\eta) = {}^t X Y - {}^t X B D {}^t B Y.$$

Or, comme le plan est bloqué orthogonalement, il vient :

$${}^tXBD{}^tBX = \frac{1}{n^2}({}^tXJ_nBD{}^tBJ_nX) = \frac{1}{n^2}[{}^tX1_n({}^t1_nBD{}^tB1_n){}^t1_nX].$$

Remarquons ici que :

$${}^t1_nBD{}^tB1_n = \sum_{i=1}^b k_i^2 \frac{\eta}{1 + k_i \eta} = \xi \text{ par notation.}$$

D'où l'expression :

$${}^tXBD{}^tBX = \frac{\xi}{n^2}({}^tXJ_nX) = \xi \left(\frac{1}{n} {}^tX1_n \right) \left(\frac{1}{n} {}^t1_nX \right).$$

De même :

$${}^tXBD{}^tBY = \frac{1}{n}({}^tXJ_nBD{}^tBY) = \frac{1}{n} {}^tX1_n({}^t1_nBD{}^tBY) = Z \left(\frac{1}{n} {}^tX1_n \right)$$

en posant $Z = {}^t1_nBD{}^tBY$.

Ceci nous conduit à une nouvelle écriture de l'équation normale :

$$\begin{aligned} & \left(\begin{bmatrix} n & {}^t1_nW \\ {}^tW1_n & {}^tWW \end{bmatrix} - \xi \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{n} {}^t1_nW \\ \frac{1}{n} {}^tW1_n & \frac{1}{n^2} {}^tWJ_nW \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} \widehat{\beta}_0(\eta) \\ \widehat{\tau}(\eta) \end{bmatrix} = \\ & \qquad \qquad \qquad \begin{bmatrix} {}^t1_nY \\ {}^tWY \end{bmatrix} - Z \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{n} {}^tW1_n \end{bmatrix} \\ \Leftrightarrow & \begin{cases} (n - \xi)\widehat{\beta}_0(\eta) + \left(1 - \frac{\xi}{n}\right) {}^t1_nW\widehat{\tau}(\eta) = {}^t1_nY - Z \\ \left(1 - \frac{\xi}{n}\right) {}^tW1_n\widehat{\beta}_0(\eta) + {}^tW \left(I_n - \frac{\xi}{n^2} J_n \right) W\widehat{\tau}(\eta) = {}^tWY - \frac{Z}{n} {}^tW1_n \end{cases} \end{aligned}$$

La multiplication de la première ligne par $\frac{1}{n}({}^tW1_n)$ nous permet alors d'obtenir $\widehat{\tau}(\eta)$ par élimination de $\widehat{\beta}_0(\eta)$, via la résolution de l'équation normale réduite :

$${}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W\widehat{\tau}(\eta) = {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) Y.$$

Remarque. Nous trouvons bien que $\widehat{\tau}(\eta)$ est indépendant de η comme le prédisait la proposition 12. Remarquons de plus que le raisonnement ci-dessus nous prouve seulement que le fait d'avoir un plan bloqué orthogonalement est une condition

suffisante pour que $\hat{\tau}(\eta)$ soit indépendant de η . Ce raisonnement est équivalent à celui utilisé par Khuri [6] pour aboutir à la proposition 10.

Quand à l'estimateur de β_0 , il s'écrit :

$$\hat{\beta}_0(\eta) = \frac{1}{n - \xi} {}^t 1_n (I_n - BD {}^t B) Y - \frac{1}{n} {}^t 1_n W \hat{\tau}(\eta).$$

On peut donc aussi écrire :

$$\boxed{\hat{\beta}_0(\eta) = \frac{1}{n} {}^t 1_n (Y - W \hat{\tau}(\eta)) + \frac{1}{n - \xi} {}^t 1_n \left(\frac{\xi}{n} I_n - BD {}^t B \right) Y}.$$

Or, pour un plan à blocs égaux, on a :

$$\begin{aligned} {}^t 1_n \left(\frac{\xi}{n} I_n - BD {}^t B \right) &= \frac{\eta}{1 + k\eta} {}^t 1_n \left(\frac{bk^2}{n} I_n - B {}^t B \right) = \\ &= \frac{\eta}{1 + k\eta} (k {}^t 1_n - {}^t 1_n B {}^t B) = 0 \end{aligned}$$

puisque $({}^t 1_n B) {}^t B = k {}^t 1_b {}^t B = k {}^t 1_n$. On en déduit que pour tout plan bloqué orthogonalement en blocs égaux :

$$\hat{\beta}_0(\eta) = \frac{1}{n} {}^t 1_n (Y - W \hat{\tau}(\eta))$$

Ce résultat est donc bien en accord avec la deuxième partie du corollaire 13.

3.4. Dispersion des paramètres estimés

Calculons maintenant la matrice des covariances de $\hat{\beta}(\eta)$ pour tout plan bloqué orthogonalement. Nous savons que cette matrice s'écrit :

$$\text{Cov} \hat{\beta}(\eta) = \sigma^2 ({}^t X V^{-1} X)^{-1}$$

dans le cas du modèle linéaire mixte. D'après la forme de ${}^t X V^{-1} X$ vue au paragraphe 3.3 et le lemme 11, il vient alors immédiatement :

$$\boxed{\text{Cov} \hat{\beta}(\eta) = \sigma^2 \begin{bmatrix} \sigma^{-2} \text{Var} (\hat{\beta}_0(\eta)) & -\frac{1}{n} {}^t 1_n W \left[{}^t W \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} \\ -\frac{1}{n} \left[{}^t W \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} {}^t W 1_n & \left[{}^t W \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} \end{bmatrix}}$$

La valeur obtenue pour $\text{Var}(\widehat{\beta}_0(\eta))$ par utilisation du lemme 11 est une expression relativement complexe qu'il n'est pas aisé de simplifier. C'est pourquoi nous allons calculer directement cette quantité en utilisant le résultat suivant du paragraphe 3.3 :

$$\begin{aligned}\widehat{\beta}_0(\eta) &= \frac{1}{n-\xi} {}^t\mathbf{1}_n(I_n - BD {}^tB)Y - \frac{1}{n} {}^t\mathbf{1}_nW\widehat{\tau}(\eta) \\ \Rightarrow \text{Var} \widehat{\beta}_0(\eta) &= \frac{1}{(n-\xi)^2} {}^t\mathbf{1}_n(I_n - BD {}^tB)\text{Cov}Y(I_n - BD {}^tB)\mathbf{1}_n \\ &\quad + \frac{1}{n^2} {}^t\mathbf{1}_nW(\text{Cov}\widehat{\tau}(\eta)) {}^tW\mathbf{1}_n \\ &\quad - \frac{2}{n(n-\xi)}\text{Cov}({}^t\mathbf{1}_n(I_n - BD {}^tB)Y, {}^t\mathbf{1}_nW\widehat{\tau}(\eta))\end{aligned}$$

Désignons respectivement par T_1, T_2 et T_3 les trois composantes de cette somme (au réel prémultipliant près), il vient :

$$\begin{aligned}\text{Cov}Y &= \sigma^2(I_n + \eta B {}^tB) = \sigma^2(I_n - BD {}^tB)^{-1} \text{ donc :} \\ \Rightarrow T_1 &= \sigma^2 {}^t\mathbf{1}_n(I_n - BD {}^tB)\mathbf{1}_n = \sigma^2 \left(n - \sum_{i=1}^b \frac{k_i^2 \eta}{1 + k_i \eta} \right) = \sigma^2(n - \xi) \\ \text{Cov}\widehat{\tau}(\eta) &= \sigma^2 \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} \\ \Rightarrow T_2 &= \sigma^2 {}^t\mathbf{1}_nW \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} {}^tW\mathbf{1}_n \\ \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right] \widehat{\tau}(\eta) &= {}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) Y \text{ donc :} \\ T_3 &= \sigma^2 {}^t\mathbf{1}_n(I_n - BD {}^tB)(I_n + \eta B {}^tB) \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) \\ &\quad W \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} {}^tW\mathbf{1}_n \\ &= \sigma^2 {}^t\mathbf{1}_n \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} {}^tW\mathbf{1}_n\end{aligned}$$

puisque $(I_n - BD {}^tB) = (I_n + \eta B {}^tB)^{-1}$. Or, ${}^t\mathbf{1}_n \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) = 0$ d'où : $T_3 = 0$

En conclusion :

$$\boxed{\text{Var} \widehat{\beta}_0(\eta) = \frac{\sigma^2}{n-\xi} + \frac{\sigma^2}{n^2} {}^t\mathbf{1}_nW \left[{}^tW \left(I_n - \frac{1}{n} J_n \right) W \right]^{-1} {}^tW\mathbf{1}_n}.$$

Ainsi, de tous les termes de la matrice $\text{Cov}\widehat{\beta}(\eta)$ seul le premier élément diagonal, $\text{Var}\widehat{\beta}_0(\eta)$, dépend de η . Remarquons que ce résultat est toujours vrai, y compris lorsque les blocs sont égaux. En effet, nous savons dans ce cas que $\widehat{\beta}_0(\eta)$ est indépendant de η mais ceci n'est plus vrai pour sa variance puisque :

$$\xi = bk^2 \frac{\eta}{1+k\eta} = n \frac{k\eta}{1+k\eta} \Rightarrow n - \xi = \frac{n}{1+k\eta}.$$

4. Plans usuels pour modèles d'ordre 2

4.1. Définitions

Sortons maintenant de la classe des plans bloqués orthogonalement et essayons non plus d'obtenir une optimalité uniforme pour toute fonction paramétrique dépendant de β mais seulement pour certains éléments particuliers du vecteur β . Ces éléments vont correspondre ici à la partition :

$$\beta = {}^t(\beta_0 \mid {}^t\beta_L \mid {}^t\beta_Q \mid {}^t\beta_I)$$

avec β_0 effet moyen général, β_L effets linéaires, β_Q effets quadratiques et β_I effets d'interaction. Une première classe de plans dans laquelle nous allons travailler va être celle, très utilisée en pratique, des plans à matrice des moments canonique, c'est-à-dire que :

Définition 14

Un plan d'expérience est dit à matrice des moments **canonique** pour un modèle d'ordre 2 si et seulement si :

$$\frac{1}{n} {}^tXX = \begin{bmatrix} 1 & \cdot & \lambda_2 {}^t1_m & \cdot \\ \cdot & \lambda_2 I_m & \cdot & \cdot \\ \lambda_2 {}^t1_m & \cdot & (c-1)\lambda_4 I_m + \lambda_4 J_m & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \lambda_4 I_{\frac{m(m-1)}{2}} \end{bmatrix}$$

en désignant donc ici les seuls moments non nuls du plan jusqu'à l'ordre quatre par :

$$\forall i, j = 1 \dots m \text{ avec } i \neq j, [i^2] = \lambda_2, [i^2 j^2] = \lambda_4, [i^4] = c\lambda_4.$$

Remarquons que tout plan globalement invariant par l'ensemble des transformations suivantes est toujours à matrice des moments canonique :

- { symétries relatives aux hyperplans de coordonnées,
- { permutations des m coordonnées de ses points.

Afin de prendre en compte l'organisation en blocs de notre plan d'expérience nous allons maintenant introduire naturellement la notion de **moment par bloc** en posant :

$$\forall l = 1 \dots b, [1^{\delta_1} 2^{\delta_2} \dots m^{\delta_m}] = \frac{1}{k_l} \sum_{\mathcal{U}(l)} x_{u_1}^{\delta_1} x_{u_2}^{\delta_2} \dots x_{u_m}^{\delta_m}$$

$\mathcal{U}(l)$ désignant l'ensemble des unités du bloc l , k_l la taille de ce bloc et $t(x_{u_1}, x_{u_2} \dots x_{u_m})$ le traitement appliqué à l'unité expérimentale u .

Les plans en blocs utilisés actuellement vérifient très souvent les conditions suivantes.

Définition 15

On appelle **plan en blocs usuel** pour un modèle d'ordre 2 tout plan à matrice des moments canonique et tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall i = 1 \dots m, \forall l = 1 \dots b, [i]_l = 0 \\ \forall i, j = 1 \dots m \text{ avec } i \neq j, \forall l = 1 \dots b, [ij]_l = 0 \\ \forall l = 1 \dots b, [1^2]_l = [2^2]_l = \dots = [m^2]_l \end{array} \right. .$$

Exemple de plan usuel :

Considérons le plan composite centré suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Bloc 1 : fraction régulière telle que } ABCD = 1 + 4 \text{ points centraux} \\ \text{Bloc 2 : fraction régulière telle que } ABCD = -1 \\ \text{Bloc 3 : partie axiale située à la distance } \alpha = \sqrt{2} \text{ du centre} \end{array} \right.$$

Bien que ce plan ne soit pas bloqué orthogonalement il entre bien dans la classe des plans usuels.

4.2. Propriété caractéristique

L'application du théorème de Zmyslony [9] aux effets linéaires, quadratiques et d'interaction du vecteur β nous conduit au résultat suivant :

Proposition 16

Soit un plan d'expérience pour un modèle d'ordre deux, à matrice des moments canonique et composé de b blocs. Considérons le modèle linéaire mixte introduit dans la définition 1 :

$$Y = X\beta + B\gamma + \varepsilon$$

avec B matrice des indicatrices des blocs (de rang b) et X matrice du modèle, d'ordre $n \times p$, de rang p , vérifiant $\text{Im}X \cap \text{Im}B = [1_n]$. On a alors les propriétés suivantes :

i) Les fonctions linéaires dépendant de β_L admettent un estimateur linéaire sans biais **uniformément optimal** si et seulement si :

$$\forall i = 1 \dots m, \forall l = 1 \dots b, [i]_l = 0.$$

ii) Les fonctions linéaires dépendant de β_I admettent un estimateur linéaire sans biais **uniformément optimal** si et seulement si :

$$\forall i, j = 1 \dots m \text{ avec } i \neq j, \forall l = 1 \dots b, [ij]_l = 0.$$

iii) Tout contraste sur les effets quadratiques admet un estimateur linéaire sans biais **uniformément optimal** si et seulement si :

$$\forall l = 1 \dots b, [1^2]_l = [2^2]_l = \dots = [m^2]_l.$$

Démonstration. En ce qui concerne i), le théorème de Zmyslony et la démonstration de la proposition 12 nous disent que les fonctions linéaires dépendant de β_L admettent un estimateur linéaire sans biais uniformément optimal si et seulement si :

$$\text{Im} \begin{bmatrix} 0 \\ I_m \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \subseteq \text{Im}({}^t X \bar{W}^{-1} X Z) \iff \text{Im}({}^t X X)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ I_m \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \subseteq \text{Im} U^\perp. \quad (4.1)$$

D'après la structure canonique de ${}^t X X$ il vient en notant $X = [1_n | D_L | D_Q | D_I]$

$$({}^t X X)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ I_m \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ (1/n\lambda_2)I_m \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ et } \text{Im} U = \text{Im} \begin{bmatrix} {}^t 1_n B^t B (I - P) B \\ {}^t D_L B^t B (I - P) B \\ {}^t D_Q B^t B (I - P) B \\ {}^t D_I B^t B (I - P) B \end{bmatrix}.$$

D'où :

$$(4.1) \iff \frac{1}{n\lambda_2} {}^t D_L B^t B (I - P) B = 0$$

$$(4.1) \iff [{}^t B (I - P) B] {}^t B D_L = 0 \iff \text{Im}({}^t B D_L) \subseteq \text{Ker}({}^t B (I - P) B).$$

Nous avons vu de plus dans la démonstration de la proposition 12 que :

$$\text{Ker}({}^t B (I - P) B) = [1_b] \text{ donc } (4.1) \iff \text{Im}({}^t B D_L) \subseteq [1_b].$$

Mais :

$${}^t B D_L = \begin{bmatrix} k_1[1]_1 & \dots & k_1[m]_1 \\ \vdots & & \vdots \\ k_b[1]_b & \dots & k_b[m]_b \end{bmatrix}$$

ce qui implique que :

$$(4.1) \iff \forall i = 1 \dots m, k_1[i]_1 = k_2[i]_2 = \dots = k_b[i]_b.$$

Or, notre plan est, par hypothèse, à matrice des moments canonique, donc :

$$\forall i = 1 \dots m, \forall l = 1 \dots b$$

$$[i] = \frac{1}{k_1 + \dots + k_b} \sum_{j=1}^b k_j [i]_j = \frac{bk_l}{k_1 + \dots + k_b} [i]_l = 0 \iff [i]_l = 0.$$

On effectue une démonstration identique pour ii).

Vérifions maintenant la propriété iii) en montrant qu'elle est vraie relativement à une base de l'espace des contrastes sur les $\beta_{ii} (i = 1 \dots m)$. Nous pouvons donc chercher sous quelle condition $K\beta_Q$ admet un estimateur uniformément optimal avec K d'ordre $(m-1) \times m$ telle que :

$$K = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & -1 \end{bmatrix}$$

Nous savons qu'alors nous aurons une optimalité uniforme si et seulement si :

$$\text{Im}({}^tXX)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ {}^tK \\ 0 \end{bmatrix} \subseteq \text{Im}U^\perp. \quad (4.2)$$

Par hypothèse, $({}^tXX)^{-1}$ a une structure canonique et $J_m {}^tK = 0$ donc :

$$(4.2) \iff K {}^tD_Q B {}^tB(I-P)B = 0$$

$$(4.2) \iff [{}^tB(I-P)B] {}^tBD_Q {}^tK = 0 \iff \text{Im}({}^tBD_Q {}^tK) \subseteq [1_b].$$

Mais :

$${}^tBD_Q {}^tK = \begin{bmatrix} k_1([1^2]_1 - [2^2]_1) & \dots & k_1([1^2]_1 - [m^2]_1) \\ \vdots & & \vdots \\ k_b([1^2]_b - [2^2]_b) & \dots & k_b([1^2]_b - [m^2]_b) \end{bmatrix}$$

donc nous pouvons dire que :

$$(4.2) \iff \forall i = 2 \dots m, k_1([1^2]_1 - [i^2]_1) = \dots = k_b([1^2]_b - [i^2]_b).$$

Notre plan est, par hypothèse, à matrice des moments canonique donc :

$$\forall i = 2 \dots m, [1^2] - [i^2] = 0 \iff \sum_{j=1}^b k_j ([1^2]_j - [i^2]_j) = 0.$$

Or, d'après (4.2) il vient :

$$\begin{aligned} \forall i = 2 \dots m, \forall l = 1 \dots b \\ [1^2] - [i^2] = 0 \iff b k_l ([1^2]_l - [i^2]_l) = 0 \iff [1^2]_l = [i^2]_l. \end{aligned}$$

D'où le résultat \square

Corollaire 17

Les fonctions linéaires dépendant de β_L ou de β_I ainsi que tout contraste sur les effets quadratiques admettent un estimateur linéaire sans biais **uniformément optimal** si et seulement si \mathcal{D} est un plan usuel.

4.3. Dispersion des paramètres estimés

Tout comme au paragraphe 3.4 nous pouvons expliciter la structure de la matrice des covariances de $\widehat{\beta}(\eta)$ pour tout plan usuel. En effet, il vient alors :

$$\begin{aligned} {}^t X V^{-1} X &= {}^t X (I_n - B D {}^t B) X = {}^t X X - {}^t X B D {}^t B X \\ \implies {}^t X V^{-1} X &= \begin{bmatrix} \delta_1 & \cdot & \delta_2 {}^t 1_m & \cdot \\ \cdot & n \lambda_2 I_m & \cdot & \cdot \\ \delta_2 {}^t 1_m & \cdot & \delta_3 I_m + \delta_4 J_m & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & n \lambda_4 I_{\frac{m(m-1)}{2}} \end{bmatrix} \\ \text{avec : } &\begin{cases} \delta_1 = n - \sum_{i=1}^b \frac{k_i^2 \eta}{1 + k_i \eta}, \delta_2 = n \lambda_2 - \sum_{i=1}^b \frac{k_i^2 \eta}{1 + k_i \eta} [1^2]_i \\ \delta_3 = n \lambda_4 (c - 1), \delta_4 = n \lambda_4 - \sum_{i=1}^b \frac{k_i^2 \eta}{1 + k_i \eta} [1^2]_i^2 \end{cases} \end{aligned}$$

Les deux blocs diagonaux de cette matrice nous donnent immédiatement :

$$\text{Cov} \widehat{\beta}_L(\eta) = \frac{\sigma^2}{n \lambda_2} I_m \text{ et } \text{Cov} \widehat{\beta}_I(\eta) = \frac{\sigma^2}{n \lambda_4} I_{\frac{m(m-1)}{2}}$$

Nous pouvons remarquer que ces dispersions ne dépendent pas du paramètre η .

En ce qui concerne les composantes $\widehat{\beta}_0$ et $\widehat{\beta}_Q$ nous avons :

$$\text{Cov} \begin{pmatrix} \widehat{\beta}_0(\eta) \\ \widehat{\beta}_Q(\eta) \end{pmatrix} = \sigma^2 \begin{bmatrix} \delta_1 & \delta_2 {}^t 1_m \\ \delta_2 {}^t 1_m & \delta_3 I_m + \delta_4 J_m \end{bmatrix}^{-1}$$

ce qui nous conduit d'après le lemme 11 à :

$$\begin{aligned}\text{Cov}\widehat{\beta}_0(\eta) &= \sigma^2 \left(\frac{\delta_3 + m\delta_4}{v} \right) \\ \text{Cov}\widehat{\beta}_Q(\eta) &= \frac{\sigma^2}{\delta_3} \left(I_m + \frac{\delta_2^2 - \delta_1\delta_4}{v} J_m \right) \\ \text{Cov}(\widehat{\beta}_0(\eta), \widehat{\beta}_Q(\eta)) &= -\sigma^2 \frac{\delta_2}{v} 1_m\end{aligned}$$

en notant : $v = \delta_1(\delta_3 + m\delta_4) - m\delta_2^2$.

Remarquons là aussi que la variance de tout contraste sur les effets quadratiques est indépendante du paramètre η . En effet, l étant un contraste de \mathbb{R}^m nous avons :

$$\text{Var}({}^t l \widehat{\beta}_Q(\eta)) = \frac{\sigma^2}{\delta_3} {}^t l \left(I_m + \frac{\delta_2^2 - \delta_1\delta_4}{v} J_m \right) l$$

Or, tout contraste est vecteur propre de la matrice complètement symétrique $\text{Cov}\widehat{\beta}_Q$ associé à la valeur propre $1/\delta_3$ donc :

$$\Rightarrow \text{Var}({}^t l \widehat{\beta}_Q(\eta)) = \sigma^2 \frac{1}{\delta_3} {}^t l l = \frac{\sigma^2}{n\lambda_4(c-1)} \|l\|^2.$$

Annexe

Démonstration du Théorème 8 dans le cas particulier où le cône C a I pour élément maximal.

Considérons un modèle linéaire tel que :

$$\begin{cases} Y = X\beta \\ \text{Cov}Y = V \in C \text{ cône convexe engendré par } V_1 \dots V_q \end{cases}$$

Supposons que $V_0 = I$ est un élément maximal du cône C .

Il suffit de prouver le théorème dans le cas où $K\beta$ est à valeurs dans R , c'est-à-dire lorsque K est un vecteur ligne.

D'après un lemme de Lehmann et Scheffé [7] on sait que AY , avec A vecteur ligne, est un estimateur linéaire uniformément optimal de $E(AY)$ si et seulement si :

$$\forall V \in C, V {}^t A \in \text{Im}X$$

(voir également Zyskind [10]).

Or le cône C est ici engendré par $V_1 \dots V_q$ et $V_0 = I \in C$. Donc AY est un estimateur uniformément optimal de son espérance si et seulement si

$$\begin{aligned} & {}^t A = X B \text{ et } V_i {}^t A \in \text{Im} X \text{ pour } i = 1, \dots, q, \\ & \iff V_i X B \in \text{Im} X \text{ pour } i = 1, \dots, q, \\ \iff (I - P)V_i X B = 0, i = 1 \dots, q \text{ où } P \text{ est le projecteur orthogonal sur } \text{Im} X, \\ & \iff {}^t X V_i (I - P)V_i X B = 0 \text{ pour } i = 1, \dots, q. \end{aligned}$$

Or, si M et M' sont des matrices symétriques définies non-négatives, on a

$$\text{Ker}(M + M') = \text{Ker} M \cap \text{Ker} M'.$$

Donc

$${}^t X V_i (I - P)V_i X B = 0, i = 1, \dots, q \iff U B = 0,$$

où

$$U = {}^t X \left(\sum_{i=1}^q V_i (I - P)V_i \right) X = 0.$$

Mais comme ${}^t A = X B$, AY est un estimateur sans biais uniformément optimal de son espérance si et seulement si ${}^t A \in \text{Im} X Z$, où Z est un projecteur d'image $\text{Ker} U$.

Soit maintenant $K\beta$, avec K vecteur ligne, une fonction paramétrique linéaire estimable. Alors il existe AY tel que $EAY = K\beta \forall \beta \iff K = AX$, et, d'après ce qui précède, AY est un estimateur sans biais uniformément optimal de $K\beta$ si et seulement si

$${}^t K \in \text{Im}({}^t X X Z) \quad \square$$

Références bibliographiques

- [1] Bose R.C. (1975), Combined Intra and Inter-Block Estimation of Treatment Effects in Incomplete Block Designs. *A Survey of Statistical Design and Linear Models* (Srivastava J.N. editor), North Holland, 31-51.
- [2] Box G. et Draper N. (1987), *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, John Wiley, New-York.
- [3] Christensen R. (1987), *Plane Answers to Complex Questions*, Springer Texts in Statistics, Springer-Verlag.
- [4] Henderson C.R., Kempthorne O., Searle S.R. et Krosigk C.M. (1959), The Estimation of Environmental and Genetic Trends from Records Subject to Culling, *Biometrics*, Vol. 15, 192-218.

- [5] Khuri A. et Cornell J. (1987), *Response Surfaces : Designs and Analyses*, Marcel Dekker, New-York.
- [6] Khuri A.I. (1992), Response Surface Models with Random Block Effects, *Technometrics*, Vol. 34, No. 1, 26-37.
- [7] Lehmann E.L. et Scheffe H. (1950), Completeness, Similar Regions and Unbiased Estimation – Part 1. *Sankhya*, 10(4), 305-340.
- [8] Puntanen S. et Styan G.P.H. (1989), The Equality of the Ordinary Least Squares Estimator and the Best Linear Unbiased Estimator, *The American Statistician*, Vol. 43, No. 3, 153-161.
- [9] Zmyślony R. (1980), A Characterization of Best Linear Unbiased Estimators in the General Linear Model, *Mathematical Statistics and Probability Theory*, Proceedings 1978 (Klonecki W., Kozek A., Rosiński J. eds), Springer Verlag (Lecture Notes in Statistics, Vol 2), 365-373.
- [10] Zyskind G. (1967), On Canonical Forms, Nonnegative Covariance Matrices and Best and Simple Least Squares Estimators in Linear Models, *Ann. Math. Statist.*, 38, 1092-1109.