Available online at www.sciencedirect.com
ScienceDirect
C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008) 1289–1293
COMPTES RENDUS MATHEMATIQUE
http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/

Statistique/Probabilités

Problèmes de construction de type polynomial II – Quelques résultats d'existence de plans sphériques isovariants exacts

Frédéric Bertrand

Institut de recherche mathématique avancée, Université Louis-Pasteur, 7, rue René-Descartes, 67084 Strasbourg cedex, France

Reçu le 12 mai 2008 ; accepté le 4 septembre 2008

Disponible sur Internet le 17 octobre 2008

Présenté par Paul Deheuvels

Résumé

En utilisant l'algèbre computationnelle, plus particulièrement les bases de Gröbner, nous résolvons des problèmes de construction de type polynomial et en déduisons un théorème d'existence de plans isovariants sphériques dont les coordonnées des points support sont connues exactement dans $\mathbb{R}^3$ ce qui permet l'utilisation de la statistique algébrique pour obtenir une détermination complète de leurs confusions d'effets. L'intérêt de ces plans est multiple : ils sont utilisables, par exemple, pour l'étude des surfaces de réponse et des formes tri-dimensionnelles. ***Pour citer cet article : F. Bertrand, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008).***

Abstract

Polynomial designs II – Some existence results of exact rotatable spherical designs. Using computational commutative algebra, especially Gröbner bases, we first find out several polynomial designs and then state existence results in $\mathbb{R}^3$ for spherical rotatable designs whose coordinates of their support points are known exactly, thus enabling us to derive the ideal of confounding polynomials thanks to tools defined in the framework of algebraic statistics. These designs can be of use in various settings such as response surface methodology or tridimensional shape analysis. ***To cite this article: F. Bertrand, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008).***

Abridged English version

In this Note, we consider an experimental domain χ which is a closed ball whose center is the origin of an Euclidean vector space of dimension $v = 3$. We set, in Section 2, the classical statistical framework of full polynomial regression models of degree d over the experimental domain χ as defined by Eqs. (1) and (2).

In a previous article, [2], we showed that the search for spherical rotatable designs, [4], can be stated in the general framework of the construction of polynomial designs. We successfully derived designs in $\mathbb{R}^3$ using the methodology highlighted in [2] and a preliminary study of Hardin and Sloane, [9], which leads to Theorems 3.1 and 3.2.

The first one of the two main benefits of this achievement is that the coordinates of the support points of all these designs are known exactly, thus enabling us to use the tools arising in algebraic statistics, [15], and for example finding

Adresse e-mail : fbertran@math.u-strasbg.fr.

1631-073X/$ – see front matter
doi:10.1016/j.crma.2008.09.029

out all the confoundings or performing lack of fit tests. As a consequence we provide designs of many different sizes all featuring not only a praised property, rotatability, but also, for the first time, state of the art ways to analyse them.

The second one is that not only the designs for which we exactly computed the coordinates of the points supporting the design but also all the designs in the list given by Hardin and Sloane in [9] are of major interest in three-dimensional shape analysis. Indeed, the Theorem 4.2 states that they are, when one uses a model defined as a free finite family of spherical harmonics, orthogonal up to a known degree. They are also optimal for any of the Kiefer's Φ_p criteria, [11], according to a result of Dette, Melas and Pepelyshev, [5], for a full model of spherical harmonics of the same degree, see Table 1 for more details. We lay the stress on fact that three-dimensional shape analysis is of use in many different domains such as medicine, chemistry, architecture, agriculture and biology.

Such a work is to be carried out in dimension 4, as soon as the preliminary study of Sloane, Hardin and Cara, [16], will be completed.

1. Motivation

Dans cette Note nous nous intéressons à une série de dispositifs qui ont été construits ou étudiés par Hardin et Sloane dans leur article [9]. Hardin et Sloane ont mis en libre disposition les coordonnées approchées des points support de ces plans sphériques combinatoires. Toutefois, comme les coordonnées des points support du plan ne sont pas connues exactement, ces informations ne permettent pas d'utiliser les techniques de statistique algébrique développées par Pistone, Riccomagno et Wynn, [15], dont il est particulièrement judicieux de pouvoir se servir pour déterminer complètement les nombreuses confusions d'effets qui apparaissent naturellement puisque le support de ces plans sphériques combinatoires est inclus dans la sphère unité. En ajoutant un essai au centre du domaine expérimental, nous obtenons des dispositifs qui sont d'un intérêt particulier en planification expérimentale, en méthodologie des surfaces de réponse par exemple, puisqu'ils permettent non seulement de construire des plans $\mathcal{G}$-faiblement invariants, pour $\mathcal{G}$ un groupe de matrices compact quelconque, [1], mais sont également exacts, admissibles et isovariants pour des modèles polynomiaux de degré 2 sur un domaine expérimental pris égal à la boule unité de $\mathbb{R}^3$. Réciproquement, le support de tout plan admissible et $\{I_3, -I_3\}$-faiblement invariant est nécessairement l'union d'un point au centre du domaine expérimental et d'un ensemble de points appartenant à la sphère unité, [6]. Si nous considérons un plan dont le support se décompose ainsi, et pour un nombre total d'essai fixé, la D-efficacité, [4,10] et [14], et la I-efficacité, [7] et [8], du plan est maximisée s'il est possible d'organiser la partie sphérique du plan comme un plan sphérique combinatoire de force 4. Il est donc primordial de mettre à la disposition des expérimenteurs des constructions pour le plus de cardinaux différents possibles.

Dette, Melas et Pepelyshev, [5], font l'étude des plans optimaux pour l'analyse de formes tri-dimensionnelles à l'aide d'harmoniques sphériques. Les domaines d'application de l'acquisition et de l'analyse de formes tri-dimensionnelles sont nombreux et variés : la médecine, la chimie, l'architecture, l'agriculture et la biologie. Il s'agit de parvenir à décrire la valeur de la distance entre l'origine du repère et celle l'extrémité de l'objet dans une direction donnée. Les modèles de régression basés sur des harmoniques sphériques permettent généralement de décrire de manière satisfaisante les formes de ces objets à l'aide d'un nombre relativement réduit de termes. Nous nous plaçons dans le cas où l'expérimentateur est à même de fixer les directions pour lesquelles il effectue un relevé de la distance entre l'origine du repère et celle l'extrémité de l'objet. Il est alors d'un intérêt primordial de déterminer de bons plans expérimentaux dont le support est inclus dans la sphère unité de $\mathbb{R}^3$. Dette, Melas et Pepelyshev ont montré que la distribution uniforme sur la sphère est optimale pour tous les critères d'optimalité Φ_p proposés par Kiefer en 1974, [11]. Cette distribution n'étant pas un plan expérimental, les auteurs proposent des plans dont le support est inclus dans la sphère unité de $\mathbb{R}^3$. La méthodologie de construction que nous avons proposée dans [2] permet d'obtenir des plans de cardinaux beaucoup plus variés puisqu'un dispositif isovariant pour un modèle polynomial complet de degré d est orthogonal lorsqu' il est analysé à l'aide d'un modèle de régression dont les termes sont des harmoniques sphériques de degré inférieur ou égal à d.

Les plans obtenus dans cette Note sont donc d'un intérêt triple. Premièrement, ce sont des plans isovariants admissibles et de D-efficacité et I-efficacité maximale parmi des plans dont le support est l'union d'un point au centre du domaine expérimental et d'une partie sphérique. Deuxièmement, ils permettent de construire des plans $\mathcal{G}$-faiblement invariants, pour $\mathcal{G}$ un groupe de matrices compact quelconque, [1]. Troisièmement ils peuvent être utilisés avec profit lors de la reconnaissance de formes tri-dimensionnelles puisqu'ils sont optimaux pour tous les critères d'optimalité Φ_p. Enfin les coordonnées des points support du plan sont connues exactement, ce qui permet, pour la première fois, d'utiliser les outils de la statistique algébrique pour analyser finement leurs propriétés.

Pour obtenir des constructions explicites, nous introduisons des problèmes de construction de type polynomial, définis dans [2], et les bases de Gröbner, [12] et [13], pour les résoudre, voir [3] pour les preuves.

2. Notations et définitions

Nous nous intéressons à des modèles de régression linéaire soumis aux hypothèses statistiques usuelles. Nous considérons une variable explicative $\boldsymbol{x}$, dont les différentes valeurs possibles appartiennent à un domaine expérimental $\boldsymbol{\chi}$, qui est une partie compacte d'un espace vectoriel de dimension finie $\mathbb{R}^v$, $v \in \mathbb{N}$ muni de sa structure euclidienne canonique, dont nous étudions l'influence sur une réponse y à valeurs réelles. Soient d un entier naturel et A_d le sous-ensemble fini de $\mathbb{N}^v$ défini par $A_d = \{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}^v, |\boldsymbol{\alpha}| \leqslant d\}$, où $|\boldsymbol{\alpha}|$ désigne la somme des composantes du vecteur $\boldsymbol{\alpha}$. Les éléments de A_d sont notés $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_v)$. Nous posons $k = \mathrm{Card}(A_d) = C_{d+v-1}^{v-1}$ et, pour $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^v$, $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}})_{\boldsymbol{\alpha} \in A_d}$ avec $\boldsymbol{x}^{(\alpha_1,\ldots,\alpha_v)} = x_1^{\alpha_1} \times \cdots \times x_v^{\alpha_v}$. Un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré d, noté A_d, sur un domaine expérimental $\boldsymbol{\chi} \in \mathbb{R}^v$ est alors défini par :

$$y(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\theta}' \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_1,\ldots,\alpha_v) \in A_d} \theta_{\boldsymbol{\alpha}} \prod_{i=1}^{v} x_i^{\alpha_i}, \quad \forall \boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_v)' \in \boldsymbol{\chi}, \tag{1}$$

où $\boldsymbol{\theta}' = (\theta_{\boldsymbol{\alpha}})_{\boldsymbol{\alpha} \in A_d} \in \mathbb{R}^k$, est un vecteur de paramètres inconnus. Il s'agit de la part déterministe d'un modèle stochastique défini de la manière suivante : l'observation des valeurs de la réponse y aux points $\boldsymbol{x_1}, \ldots, \boldsymbol{x_n} \in \boldsymbol{\chi}$ est représentée par des variables aléatoires à valeurs réelles $Y_1, \ldots, Y_n$ telles que

$$i = 1, \ldots, n, \quad \mathbb{E}[Y_i] = y(\boldsymbol{x_i}), \quad \mathbb{V}\mathrm{ar}[Y_i] = \sigma^2, \qquad i, j = 1, \ldots, n, i \neq j, \quad \mathbb{C}\mathrm{ov}[Y_i, Y_j] = 0. \tag{2}$$

La variance constante $\sigma^2 \in]0, +\infty[$ est inconnue et est de ce fait un paramètre additionnel du modèle.

Nous supposons que les valeurs pour lesquelles les observations sont effectuées sont connues exactement et contrôlées par l'expérimentateur : il s'agit du contexte usuel de la planification expérimentale.

Définition 2.1. Un plan $\boldsymbol{\xi}$ approché pour le modèle défini par les équations (1) et (2) est une mesure de probabilité de support fini sur $\boldsymbol{\chi}$, c'est-à-dire un couple $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{w}(\boldsymbol{X}))$ où $\boldsymbol{X}$ est un ensemble fini de r points $\{\boldsymbol{x_1}, \ldots, \boldsymbol{x_r}\} \subset \boldsymbol{\chi}$, le support du plan, $\boldsymbol{w} = (w_1(\boldsymbol{x_1}), \ldots, w_r(\boldsymbol{x_r}))$ sont les poids des points support du plan. Soit n le nombre total d'essais que nous souhaitons effectuer. Un plan approché $\boldsymbol{\xi}$, ne peut être réalisé dans la pratique que s'il existe r entiers strictement positifs $n_1, \ldots, n_r$ de somme n tels que $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{x_i}) = n_i/n$ pour $i = 1, \ldots, r$. Un tel plan est appelé plan exact de taille n et nous le notons alors $\boldsymbol{\xi_n}$.

Tous les plans proprosés dans la suite sont exacts puisque les poids sont tous égaux. La propriété d'amissibilité ne dépendant pas des poids du plan, leur support permet d'obtenir des plans admissibles pour les configurations de poids possibles.

3. Plans isovariants dans $\mathbb{R}^3$

La construction des dispositifs exacts détaillée dans [3] a comme première conséquence les théorèmes suivants sur l'existence de plans isovariants dont les coordonnées des points support sont connues de manière exacte pour un modèle de degré 2.

Théorème 3.1. *Il existe pour $N \in \{13, 15\} \cup [|17, +\infty[|$ des plans de cardinal N qui, analysés avec un modèle polynomial complet de degré 2, sont isovariants. Le support de chacun des plans est l'union d'un plan sphérique et d'un point au centre du domaine expérimental. Dans tous les cas, ils peuvent ne comporter aucune répétition dans leur partie sphérique et en fonction du cardinal du plan recherché un nombre partiel ou total de répétitions.*

Pour chacune des valeurs de N suivantes 13, 15, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 31, 33, 37, 39, 49, 55, 57, 61, 73, 81, *les coordonnées exactes de ces plans sont connues et ces plans ne sont pas construits comme l'union de deux plans de cardinal inférieur.*

Tableau 1
Plans sphériques orthogonaux exacts et optimaux pour un modèle formé par toutes les des harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 1 pour tous les critères d'optimalité Φ_p.

Degré	Cardinal du plan N
1	4, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 60, 72, 80
2	12, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 59, 72, 80
3	24, 26, 27, 28, 30, 32, 36, 38, 48, 54, 56, 59, 72, 80
4	36, 48, 54, 56, 59, 72, 80
5	60, 72, 80

Théorème 3.2. *Pour $N \in [|13, +\infty[|$, il existe des plans de cardinal N, dont les coordonnées des points support du plan sont connues exactement, et qui sont isovariants s'il sont analysés avec un modèle polynomial de degré* 2.

Précisons la nature de chacun de ces dispositifs :

- *Le support de chacun d'entre eux est l'union d'un plan sphérique et d'au moins un point au centre. Il est possible de spécifier le nombre total d'essais N et le nombre $k \geqslant 1$ de répétitions au centre du domaine arbitrairement dès que $N \geqslant k+16$, $N = k+14$ ou $N = k+12$. Les valeurs de N et de k pour lesquelles nous avons $N = k+15$ ou $N = k+13$ ne sont pas accessibles, il suffit de prendre à la place de la valeur k la valeur $k' = k+1$ ou la valeur $k'' = k-1$.*
- *Pour toutes les valeurs de N possibles, il est possible de construire des dispositifs ne comportant aucune répétition hormis à l'origine du repère.*
- *En fonction de la valeur de N, il est possible de construire des dispositifs possédant un nombre partiel ou total de répétitions dans la partie sphérique du dispositif.*

4. Plans optimaux pour la reconnaissance de formes tri-dimensionnelles

Nous commençons pour cela par introduire les fonctions polynomiales définies sur la sphère unité.

Proposition 4.1. *Les fonctions polynomiales définies sur la sphère unité sont isomorphes à l'anneau quotient $M_{\mathcal{S}} = \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]/(X^2+Y^2+Z^2-1)$, nous notons $M_{\mathcal{S},k} = \mathbb{R}_k[\boldsymbol{x}]/(X^2+Y^2+Z^2-1)$. Une base de $M_{\mathcal{S},k}$ est constituée par la somme directe orthogonale de $k+1$ sous-espaces vectoriels chacun engendré par une base orthonormale de polynômes harmoniques de degré l, pour $0 \leqslant l \leqslant k$.*

La caractérisation des plans sphériques à l'aide des polynômes harmoniques, [17], et l'un des résultats de Dette, Melas et Pepelyshev, [5], conduit au Théorème 4.2 suivant qui concerne dans un premier temps tous les dispositifs mentionnés dans [9], puis, dans le Tableau 1, ceux pour lesquels nous avons obtenu les coordonnées exactes des points support du plan. Ces plans ont des cardinaux plus variés que ceux initialement proposés par Dette, Melas et Pepelyshev, ce qui les rend donc d'un intérêt pratique direct.

Théorème 4.2. *Les dispositifs de cardinal $N = 4$, 6 à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsqu'ils sont analysés une famille libre de $M_{\mathcal{S},1}$. Ils sont optimaux pour un modèle formé par une base de $M_{\mathcal{S},1}$ pour tous les critères d'optimalité Φ_p.*

Les dispositifs de cardinal $N = 12, 14, 16$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsqu'ils sont analysés avec une famille libre de $M_{\mathcal{S},2}$. Ils sont optimaux pour un modèle formé par une base de $M_{\mathcal{S},2}$ pour tous les critères d'optimalité Φ_p.

Les dispositifs de cardinal $N = 24, 26, 28$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsqu'ils sont analysés avec une famille libre de $M_{\mathcal{S},3}$. Ils sont optimaux pour un modèle formé par une base de $M_{\mathcal{S},3}$ pour tous les critères d'optimalité Φ_p.

Les dispositifs de cardinal $N = 36, 40, 42, 44$ à 100 sont des dispositifs orthogonaux lorsqu'ils sont analysés avec une famille libre de $M_{\mathcal{S},4}$. Ils sont optimaux pour un modèle formé par une base de $M_{\mathcal{S},4}$ pour tous les critères d'optimalité Φ_p.

Les dispositifs de cardinal $N = 60, 62, 64$ *à* 100 *sont des dispositifs orthogonaux lorsqu'ils sont analysés avec une famille libre de* $M_{\mathcal{S},5}$*. Ils sont optimaux pour un modèle formé par une base de* $M_{\mathcal{S},5}$ *pour tous les critères d'optimalité* Φ_p*.*

Les dispositifs de cardinal $N = 84, 86$ *à* 100 *sont des dispositifs orthogonaux lorsqu'ils sont analysés avec une famille libre de* $M_{\mathcal{S},6}$*. Ils sont optimaux pour un modèle formé par une base de* $M_{\mathcal{S},6}$ *pour tous les critères d'optimalité* Φ_p*.*

Le Tableau 1 *indique les plans dont les coordonnées exactes sont connues ainsi que le degré jusqu'auquel les propriétés d'orthogonalité et de* Φ_p*-optimalité sont vérifiées.*

5. Conclusion et perspectives

Cette étude d'un cas particulier de problèmes de construction de type polynomial a montré que la méthodologie de résolution, basée sur l'utilisation des groupes de Coxeter et d'algorithmes mettant en jeu les bases de Gröbner et introduite dans l'article [2], permet d'aboutir à la construction de plans expérimentaux dont les coordonnées sont connues de manière exacte. Nous avons alors montré l'existence et indiqué comment obtenir de tels dispositifs pour tous les cardinaux pour lesquels il existe des plans isovariants pour des modèles polynomiaux complets de degré 2 en dimension 3. Nous en avons également tiré l'existence de dispositifs orthogonaux et Φ_p-optimaux pour des problèmes de régression sphérique dont le modèle est spécifié en termes d'harmoniques sphériques d'ordre inférieur ou égal à 1, 2, 3, 4, 5 ou 6 dans le cas de la dimension 3. Ces dispositifs ont une application particulièrement intéressante dans les problèmes de reconnaissance de formes tri-dimensionnelles qui sont communs à de nombreux domaines d'application de la planification.

Un prochain article s'intéressera au cas de la dimension 4, dès que l'étude préliminaire en cours de réalisation par Sloane, Hardin et Cara, [16], sera achevée.

Références

[1] F. Bertrand, $\mathcal{G}$-invariance faible et isovariance en planification expérimentale, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris, Série I (2008), doi:10.1016/j.crma.2008.09.027.

[2] F. Bertrand, Problèmes de construction de type polynomial I – Caractérisations polynomiales des propriétés usuelles d'un plan, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris, Série I 346 (2008) 1181–1186.

[3] F. Bertrand, Problèmes de construction de type polynomial II – Quelques résultats d'existence de plans sphériques isovariants exacts, Prépublication de l'IRMA http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00278267/fr/, 2008.

[4] G.E.P. Box, J.S. Hunter, Multi-factor experimental designs for exploring response surfaces, Annals of Mathematical Statistics 28 (1957) 195–241.

[5] H. Dette, V.B. Melas, A. Pepelyshev, Optimal designs for three-dimensional shape analysis with spherical harmonic descriptors, Annals of Statistics 33 (2005) 2758–2788.

[6] N. Gaffke, B. Heiligers, Approximate designs for polynomial regression: Invariance, admissibility and optimality, in: S. Ghosh, C.R. Rao (Eds.), Handbook of Statistics, vol. 13, Elsevier Science B.V., 1996, pp. 1149–1199 (ch. 30).

[7] R.H. Hardin, N.J.A. Sloane, New spherical 4-designs, Discrete Mathematics 106/107 (1992) 255–264.

[8] R.H. Hardin, N.J.A. Sloane, McLaren's codes (spherical) and (designs) experiments, in: Proceedings of Symposia in Applied Mathematics, vol. 50, American Mathematical Society, 1995, pp. 179–206.

[9] R.H. Hardin, N.J.A. Sloane, McLaren's improved snub cube and other new spherical designs in three dimensions, Discrete Computational Geometry 15 (1996) 429–441.

[10] J. Kiefer, Optimum experimental designs V, with applications to systematic and rotatable designs, in: Proc. 4th Berkeley Sympos. Math. Statist. and Probability, vol. 1, Univ. California Press, 1960, pp. 381–405.

[11] J. Kiefer, General equivalence theory for optimum designs (approximate theory), Annals of Statistics 2 (1974) 849–879.

[12] M. Kreuzer, L. Robiano, Computational Commutative Algebra 1, Springer, Berlin–Heidelberg, 2000.

[13] M. Kreuzer, L. Robiano, Computational Commutative Algebra 2, Springer, Berlin–Heidelberg, 2006.

[14] A. Neumaier, J.J. Seidel, Measures of strength $2e$, and optimal designs of degree e, Sankhyā 54 (1992) 299–309.

[15] G. Pistone, E. Riccomagno, H.P. Wynn, Algebraic Statistics: Computational Commutative Algebra in Statistics, Monographs on Statistics and Applied Probability, vol. 89, Chapman & Hall/CRC, 2000.

[16] N.J.A. Sloane, R.H. Hardin, P. Cara, Spherical designs in four dimensions, in: Information Theory Workshop, 2003. Proceedings, IEEE, Paris, 2003, pp. 253–258.

[17] B. Venkov, Réseaux et designs sphériques, in : Réseaux euclidiens, designs sphériques et formes modulaires : Autour des travaux de Boris Venkov, in : J. Martinet (Ed.), Monographies de L'Enseignement Mathématique, vol. 37, L'Enseignement Mathématique, Genève, 2001.