



Statistique/Probabilités

Problèmes de construction de type polynomial I – Caractérisations polynomiales des propriétés usuelles d’un plan

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

Un plan expérimental est solution d’un problème de construction de type polynomial si les coordonnées des points support du plan sont les solutions d’un système d’équations et d’inéquations polynomiales, système qui peut toujours être résolu à l’aide de la programmation semi-définie positive ou des bases de Gröbner. De nombreuses propriétés recherchées, comme l’optimalité alphabétique ou le blocage orthogonal, se formulent naturellement ainsi. Nous obtenons le même résultat pour la recherche de dispositifs \mathcal{G} -faiblement invariants, pour \mathcal{G} un groupe de matrices compact quelconque. *Pour citer cet article : F. Bertrand, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008).*

© 2008 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Polynomial designs I – Polynomial characterizations of praised properties of a design. A design is said to be a polynomial design if the coordinates of the points of the design are the solutions of a system of polynomial equations or inequalities; such a system can always be solved using semidefinite programming or Gröbner bases. Many praised properties of designs, such as alphabetic optimality and orthogonal blocking, can be easily stated in the framework of polynomial designs. The same holds true for \mathcal{G} -weakly invariant designs, \mathcal{G} being any compact group of matrices. *To cite this article: F. Bertrand, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 346 (2008).*

© 2008 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

In this Note, we consider \mathcal{G} a compact group of matrices and an experimental domain χ which is a compact subset, whose interior is not empty, of an Euclidean vector space of dimension v . 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). Then we recall the definitions of a design ξ . As to the definitions of the $(\mathcal{G}, \mathcal{Q})$ -equivariant property of a statistical model and the \mathcal{G} -weak invariance property we follow those of Gaffke and Heiligers, [6].

We then deal with the set of invariant polynomials, denoted by $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$, for the natural action of a compact group \mathcal{G} on the algebra of polynomials $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$. It is a subalgebra of $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, see Theorem 2.3, which

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

enables us to use computational commutative algebra, and especially Gröbner bases, [10] and [11], to assess whether a given polynomial is \mathcal{G} -invariant. Theorem 2.4 states that a design ξ is a \mathcal{G} -weakly invariant design if and only if the E -generating moment function, [1], belongs to $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{G}}$, i.e. the coordinates of the points of the design are the solutions of a system of polynomial equations.

Searching the coordinates of the points of the design as the solution of a system of polynomial equations and inequalities, is the general setting we define in 3.1 as the problem of finding polynomial designs. We show in Proposition 3.2 that using such a setting one can formulate many of the most wanted properties of a design. For instance, one can search for the weak-invariance property, orthogonal blocking and alphabetic optimality, [9], the design belonging to an experimental domain χ of various shape, such as a ball, a cube or a simplex, either for finding new designs or for augmenting smartly existing ones. In Section 4, we provide a methodology to derive polynomial designs or to prove that such designs do not exist using either Gröbner bases or semidefinite programming, [13], and real algebraic geometry, [17]. In order to reduce the amount of time required for computing the solutions of the system of polynomial equations and inequalities, one can use designs built as the union of orbits of points by Coxeter groups, [8].

Additionally, the exact coordinates of the points of the design can be computed, which was done in [3] for many rotatable designs, [4], in \mathbb{R}^3 , allowing for the use of the tools provided by algebraic statistics, [14]. Among these tools, one can find the way to gain full knowledge of the confoundings, to build lack of fit tests and to derive saturated models. Rotatable designs in \mathbb{R}^3 share praised properties both in response surface methodology, [15], and in three-dimensional shape analysis, [5]. Another interesting application of these setting and methodology that will be soon investigated by the author is to state results of non-existence for some designs beginning with a conjecture of Hardin and Sloane, [7].

1. Motivation

Dans cette Note, nous nous intéressons à la construction de plans d'expériences satisfaisant à des propriétés fondamentales pour l'expérimentateur comme par exemple l'invariance faible, le blocage orthogonal et l'optimalité alphabétique. Nous définissons pour cela un cadre particulier de construction que nous appelons problème de construction de type polynomial. Celui-ci est équivalent à la formulation obtenue par Stengle en 1974, [17], du théorème des zéros réels. Sa résolution peut alors être obtenue algorithmiquement en utilisant des outils récents d'algèbre computationnelle, [10] et [11], et de programmation semi-définie positive, [13]. Lorsque la résolution algorithmique du problème est bien guidée, il est de surcroît possible d'obtenir les coordonnées exactes des points support du plan, permettant ainsi d'avoir recours aux outils de la statistique algébrique, [14].

La réduction de la dimension d'un problème de construction de type polynomial est une étape cruciale dans la résolution de celui-ci. Afin de proposer une stratégie permettant de réaliser celle-ci, nous nous appuyons sur des résultats qui ont été obtenus empiriquement par Hardin et Sloane, [7], dans le cas particulier de l'isovariance. Pour un cardinal donné, parmi tous les plans sphériques isovariants certains forment des configurations régulières. Ce sont une union d'orbites d'un point par un sous-groupe d'un groupe de Coxeter, [8]. Cette propriété ramène le problème de construction de dispositifs isovariants à celui du choix des points dont nous allons prendre l'orbite ainsi que du sous-groupe du groupe de réflexions à utiliser pour construire ces orbites. En utilisant cette approche, nous avons obtenu, dans [3], de nombreux exemples de résolution exacte de problèmes de construction de type polynomiale pour le cas particulier de l'isovariance. Nous proposons également de généraliser cette idée au cas d'un problème de construction de type polynomial quelconque.

Pour la preuve des résultats exposés ci-après, nous renvoyons à [2].

2. Notations, définitions et résultats préliminaires

Nous nous intéressons à des modèles de régression linéaire soumis aux hypothèses statistiques usuelles. Nous considérons une variable explicative \mathbf{x} , dont les différentes valeurs possibles appartiennent à un domaine expérimental χ , 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 $A_d = \{\alpha \in \mathbb{N}^v, |\alpha| \leq d\}$, où $|\alpha|$ désigne la somme des composantes du vecteur α . Les éléments de A_d sont notés $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_v)$. Nous posons $k = \text{Card}(A_d) = C_{d+v-1}^{v-1}$ et, pour $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^v$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}^\alpha)_{\alpha \in A_d}$

avec $\mathbf{x}^{(\alpha_1, \dots, \alpha_v)} = x_1^{\alpha_1} \times \dots \times x_v^{\alpha_v}$. Un modèle de régression multiple polynomiale complet de degré d , noté A_d , sur un domaine expérimental $\chi \in \mathbb{R}^v$ est alors défini par :

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

où $\theta' = (\theta_\alpha)_{\alpha \in A_d} \in \mathbb{R}^k$, 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 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \chi$ est représentée par des variables aléatoires à valeurs réelles Y_1, \dots, Y_n telles que

$$i = 1, \dots, n, \quad \mathbb{E}[Y_i] = y(\mathbf{x}_i), \quad \text{Var}[Y_i] = \sigma^2, \quad i, j = 1, \dots, n, i \neq j, \quad \text{Cov}[Y_i, Y_j] = 0. \tag{2}$$

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 approché ξ pour le modèle défini par les équations (1) et (2) est une mesure de probabilité de support fini sur χ , c'est-à-dire un couple $(X, \mathbf{w}(X))$ où $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_r\} \subset \chi$ est le support du plan et $\mathbf{w}(X) = (w_1(\mathbf{x}_1), \dots, w_r(\mathbf{x}_r))$ sont les poids des points support du plan.

Nous continuons par un rappel sur les polynômes invariants par l'action d'un groupe de matrices :

Définition 2.2. Soit \mathcal{G} un sous-groupe de $\mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$. La \mathbb{R} -sous-algèbre de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$ constituée des polynômes \mathcal{G} -invariants, notée $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^\mathcal{G}$, est :

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^\mathcal{G} = \{P \in \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v] \mid P(g(\mathbf{x})) = P(\mathbf{x}), \forall g \in \mathcal{G}\}. \tag{3}$$

Théorème 2.3. Soit $\mathcal{G} \subset \mathcal{GL}_v(\mathbb{R})$ un groupe de matrices compact. Il existe un nombre fini de polynômes homogènes f_1, \dots, f_k de $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$, tous de degré ≥ 1 , tels que :

$$\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^\mathcal{G} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]. \quad \text{En particulier} \quad \mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^{\mathcal{O}_v} = \mathbb{R}[x_1^2 + \dots + x_v^2]. \tag{4}$$

Remarque 1. Dans le cas d'un groupe fini \mathcal{G} , le théorème de Shephard–Todd–Chevalley, voir par exemple [8], prouve l'équivalence entre l'existence d'un isomorphisme de \mathbb{R} -algèbres entre $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]^\mathcal{G}$ et $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ et le fait que le groupe \mathcal{G} est un groupe de pseudo-réflexions. Nous serons donc dans cette situation dès que nous chercherons des invariances pour l'action d'un groupe de Coxeter sur $\mathbb{R}[x_1, \dots, x_v]$.

Remarque 2. La décision de l'appartenance d'un polynôme P donné à la sous-algèbre $\mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$ se traite de manière algorithmique à l'aide des bases de Gröbner.

Nous indiquons une caractérisation polynomiale de l'invariance faible à l'aide de la fonction E -génératrice des moments, [1], valable dès que le domaine expérimental χ est d'intérieur non vide ou que les fonctions polynomiales appartenant au modèle forment un famille libre sur le domaine expérimental χ .

Théorème 2.4. Considérons un domaine expérimental χ inclus dans \mathbb{R}^v et d'intérieur non vide. Soit un modèle polynomial complet de degré d (\mathcal{G}, \mathcal{Q})-équivariant pour un groupe \mathcal{G} qui agit linéairement sur χ . Supposons que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$, associé à l'action linéaire de \mathcal{G} sur χ , est compact. Soit A l'une des matrices inversibles telle que le groupe $\{U_g, g \in \mathcal{G}\}$ est conjugué à un sous-groupe de \mathcal{O}_v , pour l'existence de A voir [12]. La matrice $E = (AA')^{-1}$ est une matrice E définie positive telle que \mathcal{G} est un sous-groupe compact de $\mathcal{O}_v(E)$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) Le plan ξ est \mathcal{G} -faiblement invariant ;
- (ii) La fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, est \mathcal{G} -invariante ;

- (iii) La fonction E -génératrice des moments, $\text{MGF}_E^{A_d}(\xi)$, appartient à $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{G}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1 ;
- (iv) La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}_{I_v}^{A_d}(\xi^{A^{-1}})$, est \mathcal{K} -invariante ;
- (v) La fonction génératrice des moments, $\text{MGF}_v^{A_d}(\xi^{A^{-1}})$, appartient à $\mathbb{R}[t_1, \dots, t_v]^{\mathcal{K}} = \mathbb{R}[f_1, \dots, f_k]$, où les f_i , pour $i = 1, \dots, k$, sont des polynômes homogènes tous de degré supérieur ou égal à 1.

Proposition 2.5. Les critères ϕ_p , pour p entier positif, [9], donc le critère de D -optimalité, et le critère de I -optimalité sont des critères d'optimalité polynomiaux en les coordonnées des points support du plan.

3. Problèmes de construction de type polynomial

Nous commençons par définir un problème de construction de type polynomial d'un plan expérimental :

Définition 3.1. Un problème de construction de type polynomial d'un plan expérimental ξ de support X , un sous-ensemble de \mathbb{R}^v de cardinal r , est défini de la manière suivante :

- (i) Une liste *Obj* d'objectifs à remplir. Ces objectifs peuvent être de trois types et de priorité variable :
 - (a) Inclusion de X dans un domaine expérimental $\chi = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^v \mid g_i(\mathbf{x}) \leq 0, 1 \leq i \leq u\}$;
 - (b) Inclusion de X dans une variété algébrique $\mathbf{V}(I)$ réelle fixée ;
 - (c) Minimisation de critères polynomiaux h_1, \dots, h_t en les coordonnées éléments de X .
- (ii) Un ensemble de r_0 points supports du plan X_0 , fixés par l'expérimentateur et dont les coordonnées sont connues de manière exacte, qui doivent nécessairement appartenir au support X du plan ξ .
- (iii) Un nombre, égal à $r - r_0$, de points de X dont nous souhaitons déterminer les coordonnées de manière exacte de telle sorte que le plan expérimental remplisse les objectifs *Obj*.

La Proposition 3.2 suivante montre qu'un problème de construction polynomial, tel qu'il a été introduit dans la Définition 3.1, permet de considérer la majorité des problématiques auxquelles l'expérimentateur est confronté :

Proposition 3.2. L'objectif (i)(a) recouvre le cas d'un domaine expérimental χ égal à une boule, un cube ou un simplexe.

L'objectif (i)(b) permet non seulement de s'assurer que le support du plan est inclus dans une variété algébrique $\mathbf{V}(I)$ réelle fixée comme la sphère mais aussi, grâce au Théorème 2.4, d'imposer une propriété de \mathcal{G} -invariance faible totale ou partielle au plan ou encore une propriété de blocage orthogonal.

L'objectif (i)(c) concerne la recherche de plan alphabétiquement optimaux, voir la Proposition 2.5.

Nous pouvons donc combiner la recherche de plans isovariants à celle de la minimisation d'un critère d'optimalité qui puisse s'exprimer sous forme polynomiale en les coordonnées des points du plan comme le critère de D -optimalité ou de I -optimalité, [6]. Son intérêt est particulièrement prononcé lorsque nous cherchons à trouver des plans isovariants pour des modèles polynomiaux d'un degré d donné. Nous pouvons alors ajouter des termes polynomiaux à ce modèle et déterminer les modèles optimaux pour cet ajout qui conservent la propriété d'isovariance pour ce degré d donné.

4. Méthodologie de résolution

Des techniques liées aux bases de Gröbner, [10] et [11], ou à la programmation semi-définie positive, [13], permettent de résoudre de tels problèmes de construction qui sont associés au théorème des zéros réels tel que Stengle l'a formulé en 1974, [17]. Par résolution nous entendons soit l'obtention des coordonnées exactes des points support du plan soit la preuve qu'il n'existe pas de dispositif satisfaisant aux objectifs spécifiés. Cette preuve est une identité polynomiale appelée réfutation et qu'il est possible de déterminer algorithmiquement, [13]. Chercher des plans qui sont une union d'ensembles de points obtenus comme orbite par des groupes de Coxeter, [8], diminue le nombre d'inconnues intervenant dans le problème de construction que nous considérerons et augmente de ce fait grandement nos

chances d’obtenir une résolution algorithmique de ce problème en un temps acceptable. En effet, les bases de Gröbner, [10,11], qui sont des outils adaptés pour résoudre ces systèmes d’équations polynomiales ont un coût doublement exponentiel.

Ainsi par exemple, pour obtenir un plan isovariant, il suffit de déterminer quelles sont les coordonnées des points dont nous devons prendre l’orbite par un groupe fini. C’est cette stratégie, guidée par des résultats de Hardin et Sloane, [7], dont nous nous sommes servis efficacement pour résoudre les problèmes de construction de type polynomial dans [3]. Néanmoins, lorsque nous nous servons de la théorie de l’élimination et des bases de Gröbner, nous trouvons les solutions complexes du problème de construction. Or, nous ne nous sommes intéressés que par les solutions réelles puisque seules celles-ci seront utilisées comme coordonnées des points dont il faudra prendre l’orbite pour construire le support d’un plan solution. Une seconde manière de résoudre ce problème passe par la combinaison de la théorie des bases de Gröbner et de la théorie de la programmation semi-définie positive. Cette approche permet non seulement de déterminer si une solution existe mais aussi de sélectionner parmi toutes les solutions possibles celle qui minimise un critère de type polynomial. Ainsi nous pourrions, par exemple, combiner la résolution des équations d’isovariance à la recherche d’un plan optimal pour un critère d’optimalité qui puisse s’écrire de manière polynomiale.

5. Conclusion et perspectives

Nous avons proposé un cadre algébrique permettant de décider de l’existence d’un plan expérimental satisfaisant à certaines contraintes d’un intérêt majeur pour l’expérimentateur. Celles-ci peuvent porter sur la localisation des points support du plan, sur une propriété d’invariance faible qui doit être vérifiée par le plan ou sur une condition de blocage orthogonal. Parmi tous les plans solutions il est également possible de déterminer celui qui minimise un critère polynomial en les coordonnées des points support du plan et donc de sélectionner des plans qui sont de surcroît alphabétiquement optimaux. L’introduction de ce cadre algébrique permet d’avoir recours à une résolution algorithmique du problème de construction ce qui permet généralement de déterminer les coordonnées des points support du plan de manière exacte. Il est alors possible d’utiliser les techniques relevant de la statistique algébrique, [14], pour analyser ces dispositifs. La détermination exacte des confusions d’effets, l’obtention d’un modèle saturé ou les tests de défaut d’ajustement font partie des outils supplémentaires alors à la disposition de l’expérimentateur.

Cette méthodologie a été appliquée à la construction de plans sphériques isovariants dans \mathbb{R}^3 , [3], et a servi à démontrer plusieurs résultats d’existence de plans sphériques isovariants dont les coordonnées des points support du plan sont connues de manière exacte. Le cas de la dimension 4 est en cours d’étude, s’appuyant cette fois-ci sur l’étude numérique préalable débutée dans [16].

Le calcul de réfutations permettant de démontrer une conjecture de Hardin et Sloane, [7], fera l’objet d’un prochain article.

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, Prépublication de l’IRMA, <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00277192/fr/>, 2008.
- [3] F. Bertrand, Problèmes de construction de type polynomial II – Quelques résultats d’existence de plans sphériques isovariants exacts, Comptes Rendus de l’Académie des Sciences Paris, Série I (2008), doi:10.1016/j.crma.2008.09.029.
- [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 (Chapter 30).
- [7] 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.
- [8] R.M. Kane, *Reflection Groups and Invariant Theory*, CMS Books in Mathematics, vol. 5, Springer-Verlag, New York, 2001.
- [9] J. Kiefer, General equivalence theory for optimum designs (approximate theory), *Annals of Statistics* 2 (1974) 849–879.
- [10] M. Kreuzer, L. Robiano, *Computational Commutative Algebra 1*, Springer, Berlin–Heidelberg, 2000.
- [11] M. Kreuzer, L. Robiano, *Computational Commutative Algebra 2*, Springer, Berlin–Heidelberg, 2005.
- [12] M. Mneimé, F. Testard, *Introduction à la théorie des groupes de Lie classiques*, Hermann, Paris, 1986.

- [13] P.A. Parrilo, Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems, *Mathematical Programming Ser. B* 96 (2003) 293–320.
- [14] 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.
- [15] F. Pukelsheim, *Optimal Design of Experiments*, Wiley, New York, 1993.
- [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] G. Stengle, A Nullstellensatz and a Positivstellensatz in semialgebraic geometry, *Mathematische Annalen* 207 (1974) 87–97.