

REVUE DE STATISTIQUE APPLIQUÉE

S. GUILAIN

D. BENOIST

**Description d'un logiciel d'analyse de variance
d'un modèle linéaire. Validation numérique à
l'aide de la bibliothèque CADNA**

Revue de statistique appliquée, tome 46, n° 2 (1998), p. 33-57

http://www.numdam.org/item?id=RSA_1998__46_2_33_0

© Société française de statistique, 1998, 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/>

DESCRIPTION D'UN LOGICIEL D'ANALYSE DE VARIANCE D'UN MODÈLE LINÉAIRE VALIDATION NUMÉRIQUE À L'AIDE DE LA BIBLIOTHÈQUE CADNA

S. Guilain*, D. Benoist**

* *Enseignant-Chercheur, École du Pétrole et des Moteurs, 228, avenue N. Bonaparte,
92582 Rueil-Malmaison Cedex.*

** *Professeur associé à l'E.N.S.P.M., 93, rue de Paris, 94340 Joinville le Pont.*

RÉSUMÉ

Les plans d'expériences sont de plus en plus utilisés pour étudier des phénomènes physiques complexes mettant en jeu de nombreuses variables. Nous décrivons, dans cet article, le logiciel VANED (Variance ANalysis of Experimental Designs) qui permet d'analyser tout type de plans d'expériences orthogonaux ou non. Il réalise l'analyse de variance d'un modèle linéaire général, c'est-à-dire qui met en jeu à la fois des facteurs (variables discrètes ayant plusieurs niveaux), des covariables (variables continues) et leurs interactions.

Comme ces calculs sont réalisés sur un ordinateur qui utilise une arithmétique approchée, dite à virgule flottante, nous montrons l'intérêt d'une validation numérique des algorithmes. En effet, compte tenu de la propagation des erreurs d'arrondi dues à cette arithmétique, les résultats fournis peuvent être erronés. L'implantation de la bibliothèque CADNA (Control of Accuracy and Debugging of Numerical Applications) a permis l'étude, d'une part, de la sensibilité des résultats aux arrondis de calcul et, d'autre part, de l'influence des arrondis de mesures sur la précision des résultats fournis.

Mots-clés : Plans d'expériences, analyse de variance, validation numérique, propagation des arrondis de calcul.

ABSTRACT

Experimental designs are more and more used in order to study complex physical phenomena that can involve many variables. In this paper, the software VANED (Variance ANalysis of Experimental Designs) is described. VANED is able to analyse any type of experimental design (orthogonal or not) and implements a variance analysis of the general linear model attached to the experimental design. In this way, factors (discrete variables), cofactors (continuous variables) and their interactions can be taken into account.

As this variance analysis is performed on a computer, results may be influenced by round-off error propagation. In order to validate results furnished by VANED, the CADNA library

(Control of Accuracy and Debugging for Numerical Applications) has been implemented. Firstly, the influence of round-off error propagation on the accuracy of results has been studied. Secondly, the effects of the way of rounding-off data are shown.

Keywords : *experimental design, variance analysis, numerical validation, round-off error propagation.*

Introduction

Les plans d'expériences sont de plus en plus utilisés pour étudier des phénomènes physiques complexes mettant en jeu de nombreuses variables. En effet, après un nombre limité d'expériences, l'analyse de la variance résiduelle permet de déterminer si telle variable ou telle interaction entre variables a une influence significative sur le phénomène physique étudié et de quantifier cet effet.

C'est dans ce but que le logiciel VANED (Variance ANalysis of Experimental Design) a été développé. Il présente l'originalité de permettre l'analyse de tout type de plans d'expériences. Les plans peuvent être orthogonaux ou non et peuvent faire intervenir :

- des facteurs (variables discrètes ayant différents niveaux),
- des covariables (variables continues),
- des interactions entre facteurs,
- des interactions entre une covariable et des facteurs.

Dans la première partie de cet article, nous résumons les bases statistiques de l'analyse de variance d'un modèle linéaire général. Après avoir construit le modèle complet, puis parcouru de manière exhaustive le treillis de sous-modèles, nous déterminons le modèle de variance minimale ainsi que le meilleur parcours du treillis pour atteindre ce modèle. Nous dressons alors le tableau d'analyse de variance et déterminons le modèle optimal, c'est-à-dire le meilleur modèle admissible du point de vue statistique.

Comme nous le montrerons dans la dernière partie, une telle analyse est délicate car la détermination du modèle optimal repose sur le calcul des valeurs des variances résiduelles. Le choix du meilleur modèle se fait alors par rapport aux valeurs des différences entre ces variances. Or, ces dernières sont calculées par l'ordinateur qui utilise, non pas une arithmétique exacte, mais une arithmétique approchée dite à virgule flottante. Ainsi, à chaque opération arithmétique, le résultat est entaché d'une erreur d'arrondi qui, comme nous le verrons, peut nous conduire à des résultats faux (variance négative!) et les conclusions qui en découlent sont erronées. Afin d'étudier l'influence de la propagation des arrondis de calcul, nous avons implanté la bibliothèque CADNA [4, 2, 8] dans le logiciel VANED. Dans la seconde partie de l'article, nous présentons brièvement cette bibliothèque CADNA, ses fondements et sa mise en œuvre. Cette bibliothèque implante la méthode CESTAC [5, 7, 9]. Elle permet ainsi de vérifier le bon déroulement des calculs et de connaître la précision des résultats compte tenu, d'une part, de la propagation des arrondis de calcul et, d'autre part, des arrondis des données mesurées. Cette dernière possibilité est très importante pour l'analyse de la variance car les données expérimentales (comme

les mesures des réponses et des covariables) sont toujours considérées comme des valeurs exactes alors que, en pratique, elles sont recueillies et utilisées avec un nombre limité de chiffres. Or ces arrondis de mesure peuvent aussi conduire à des conclusions erronées.

La troisième partie montre un exemple d'utilisation du logiciel VANED et illustre l'intérêt d'implanter la bibliothèque CADNA dans ce type d'analyse. En particulier, nous comparerons les résultats obtenus et leur précision associée lorsque, d'une part, seule la propagation des arrondis de calcul est prise en compte et, d'autre part, lorsque nous considérons les arrondis des mesures.

1. L'analyse de variance d'un modèle linéaire général

Un exemple simple et aisément généralisable suffit à illustrer les principes sur lesquels est fondée l'analyse de variance réalisée par le logiciel VANED.

Soit un phénomène physique Y sur lequel les facteurs A , B et la covariable Z_1 sont supposés intervenir. La réponse d'une expérience doit alors pouvoir s'écrire comme :

$$y_{ijr} = m + a_i + b_j + c_{ij} + (d + e_i)z_{ijr} + \varepsilon_{ijr} \quad (1.1)$$

où i est le i^e niveau du facteur A , j , le j^e niveau du facteur B et r , le r^e essai.

Ceci définit un modèle qui peut être représenté symboliquement, en omettant le terme d'erreur ε_{ijr} par :

$$Y = Z_0(1 + A + B + AB) + Z_1(1 + A) \quad (1.2)$$

Ce modèle est considéré comme le *modèle complet*.

Il contient les actions suivantes :

- d'ordre 0 : $Z_0 \equiv 1$ (considérée comme covariable) et la covariable Z_1 ,
- d'ordre 1 : $Z_0A \equiv A$, $Z_0B \equiv B$ (les facteurs A et B) et Z_1A (l'interaction entre Z_1 et A),
- $Z_0AB \equiv AB$ (l'interaction entre les facteurs A et B).

Le but de l'analyse est de déterminer, parmi les sous-modèles du modèle complet (1.2), le sous-modèle le plus simple qui permet une <<bonne>> estimation des réponses y_{ijr} . Les sous-modèles considérés par VANED sont ceux obtenus en supprimant toutes les actions présentes jusqu'à l'obtention du sous-modèle vide $y_{ijr} = \varepsilon_{ijr}$, représenté symboliquement par $Y \equiv 0$. On obtient ainsi, dans l'ensemble des sous-modèles du modèle complet, une relation d'ordre qui lui donne une structure de treillis. Le treillis attaché au modèle complet (1.2) est représenté par la figure 1. Pour construire ce treillis, on applique la règle suivante (dite «règle de hiérarchie entre les actions») : une action d'ordre n impliquant une covariable n'est présente dans un sous-modèle que si toutes les actions d'ordre inférieur à n qui la composent et qui impliquent la même covariable y sont elles aussi présentes. Ainsi, $Y = Z_1A$ et $Y = Z_0(1 + A + AB)$ sont des exemples de sous-modèles non admissibles.

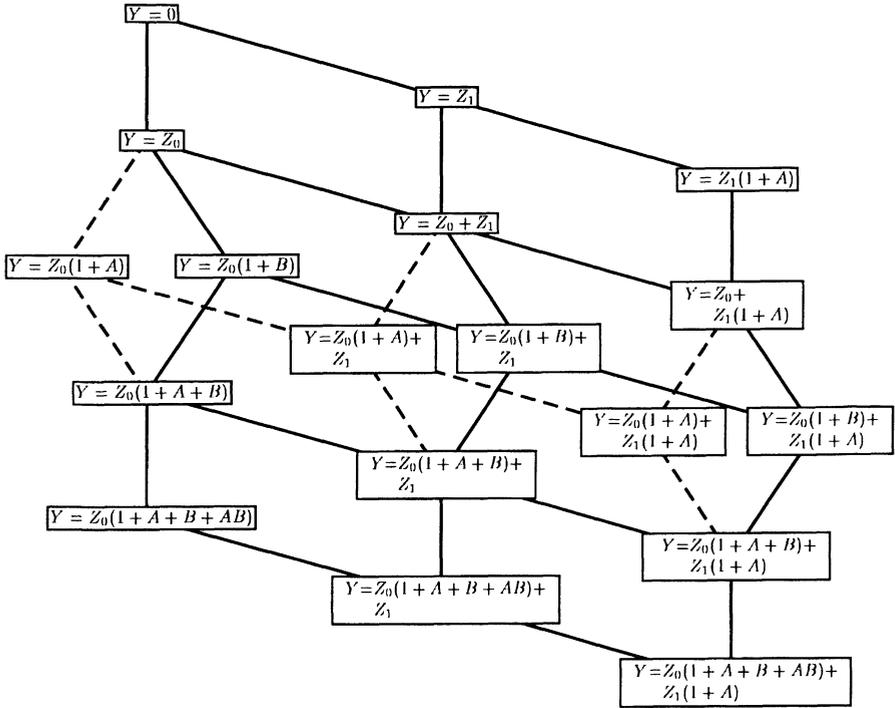


FIGURE 1
Schéma du treillis de sous-modèles

Chaque sous-modèle i du treillis (i , numéro attribué à chaque sous-modèle admissible) peut être écrit sous une forme matricielle :

$$Y = X_c^{(i)} A_c^{(i)} + E^{(i)} \tag{1.3}$$

– $X_c^{(i)}$ est la matrice des actions (facteurs, covariables et interactions) codées en disjonctif complet (pour les facteurs et les interactions) attachée au sous-modèle i dont le nombre de lignes doit être strictement supérieur à son rang.

– $A_c^{(i)}$ est la matrice colonne des coefficients inconnus,

– $E^{(i)}$ est la matrice colonne des termes d'erreur soumis aux hypothèses de Gauss-Markov (normalité, $\text{Esp}(E^{(i)}) = 0$, $\text{Var}(E^{(i)}) = \sigma^2 I$ où σ^2 est la variance d'erreur et I , la matrice identité).

Si M_{i_1} est sous-modèle de M_{i_2} , $X_c^{(i_1)}$ attachée au sous-modèle M_{i_1} est une sous-matrice de $X_c^{(i_2)}$ attachée à M_{i_2} .

Le problème est que, en général, $X_c^{(i)}$ n'est pas de rang maximal. Cet état de fait est dû à deux causes possibles :

1) une confusion d'actions. Il faut alors déterminer et éliminer les actions redondantes pour pouvoir faire l'analyse.

2) une présence de facteurs. On introduit des relations de centrage entre les éléments des facteurs de $A_c^{(i)}$ pour rendre la matrice $X^{(i)}$ de rang maximal.

Ces relations de centrage conduisent à un modèle équivalent :

$$Y = X^{(i)} A^{(i)} + E^{(i)} \quad (1.4)$$

où, maintenant,

– $X^{(i)}$ est la matrice de rang maximal des actions codées en disjonctif *réduit* (les covariables sont gardées telles quelles),

– $A^{(i)}$ est la matrice colonne des coefficients *réduits* inconnus.

Compte tenu des hypothèses de Gauss-Markov, l'application du principe de maximum de vraisemblance conduit à la méthode des moindres carrés :

– l'estimation des coefficients est donnée par :

$$\widehat{A}^{(i)} = ({}^t X^{(i)} X^{(i)})^{-1} {}^t X^{(i)} Y.$$

En utilisant les relations de centrage, on peut aisément calculer $\widehat{A}_c^{(i)}$.

– l'estimation des réponses est obtenue par :

$$\widehat{Y}^{(i)} = X^{(i)} \widehat{A}^{(i)} = X^{(i)} ({}^t X^{(i)} X^{(i)})^{-1} {}^t X^{(i)} Y.$$

– les termes d'erreur sont évalués par :

$$E^{(i)*} = Y - \widehat{Y}^{(i)} = \left\{ I - X^{(i)} ({}^t X^{(i)} X^{(i)})^{-1} {}^t X^{(i)} \right\} Y.$$

– la somme des carrés des erreurs (somme résiduelle des carrés), $R^{(i)}$, peut être évaluée par :

$$R^{(i)} = {}^t E^{(i)*} E^{(i)*} = {}^t Y \left\{ I - X^{(i)} ({}^t X^{(i)} X^{(i)})^{-1} {}^t X^{(i)} \right\} Y$$

(d'autres expressions équivalentes sont données en annexe A)

Les formules précédentes s'appliquent à chaque sous-modèle du treillis. Pour déterminer le modèle le « meilleur », nous allons rechercher le modèle de variance minimale. Pour cela, on calcule les $R^{(i)}$, sommes résiduelles des carrés correspondant au i^e sous-modèle. Connaissant le nombre N d'essais, le nombre $\nu_E^{(i)}$ de colonne de $X^{(i)}$ ($\nu_E^{(i)}$ est le nombre de degrés de liberté (ddl) expliqués du modèle i), $N - \nu_E^{(i)} = \nu_R^{(i)}$ est alors le nombre de ddl résiduels du sous-modèle i . La variance résiduelle du i^e sous-modèle est alors $V^{(i)} = \frac{R^{(i)}}{\nu_R^{(i)}}$. On détermine alors le sous-modèle

M_R possédant la variance résiduelle minimale $V^{(M_R)} = \frac{R^{(M_R)}}{\nu_R^{(M_R)}}$.

Ce modèle de variance minimale n'est pas toujours le modèle «optimal». Il peut introduire des facteurs ou des interactions qui ont une probabilité faible d'intervenir dans le processus physique étudié. Aussi on va chercher à établir un classement entre les actions. Pour cela, on détermine le meilleur chemin dans le treillis pour aller du sous-modèle vide $M^{(0)}$ au sous-modèle M_R . Le sous-modèle vide $M^{(0)}$ est tel que le nombre de ddl résiduels est $\nu_R^{(0)} = N$ et la somme résiduelle des carrés est $R^{(0)} = {}^t Y Y$. Sur ce chemin, choisissons les sous-modèles $M^{(k)}$ numérotés de 0 à m dans l'ordre où on les rencontre. Au sous-modèle $M^{(k)}$, correspondent une somme résiduelle des carrés $R^{(k)}$ et un nombre de ddl résiduels $\nu_R^{(k)}$.

Posons : $\Delta R_{kl} = R^{(k)} - R^{(l)}$ et $\Delta \nu_{kl} = \nu_R^{(k)} - \nu_R^{(l)}$ ($k \neq l$).

Si $k < l$, c'est-à-dire $M^{(k)}$ est un sous-modèle contenu dans $M^{(l)}$, on a : $\Delta R_{kl} \geq 0$ et $\Delta \nu_{kl} > 0$.

On a alors :

$$\nu_R^{(0)} = \Delta \nu_{01} + \Delta \nu_{12} + \cdots + \Delta \nu_{(m-1)m} + \nu_R^{(M_R)} \text{ et}$$

$$R^{(0)} = \Delta R_{01} + \Delta R_{12} + \cdots + \Delta R_{(m-1)m} + R^{(M_R)}.$$

Cette décomposition de la somme des carrés est indépendante des relations de centrage adoptées.

Il résulte alors du théorème de Cochran et des hypothèses de Gauss-Markov que :

– les ΔR_{kl} et $R^{(M_R)}$ sont stochastiquement indépendants,

– ΔR_{kl} est distribué suivant une loi de $\sigma^2 \chi^2(\Delta \nu_{kl}, \delta_{kl})$. Le paramètre de décentrement δ_{kl} est nul si et seulement si les coefficients présents dans $M^{(l)}$ et absents dans $M^{(k)}$ sont tous nuls.

Si on fait l'hypothèse que la loi $\sigma^2 \chi^2(\nu_R^{(M_R)}, \delta^{(M_R)})$ selon laquelle $R^{(M_R)}$ est distribué est telle que $\delta^{(M_R)} = 0$, alors $\phi_{kl} = \frac{\Delta R_{kl} \nu_R^{(M_R)}}{R^{(M_R)} \Delta \nu_{kl}}$ est distribué selon

une loi de Fischer-Snedecor non centré $\mathcal{F}(\Delta \nu_{kl}, \nu_R^{(M_R)}, \delta_{kl})$. Cette loi constitue une fonction discriminante pour tester l'hypothèse de la nullité de δ_{kl} , c'est-à-dire la nullité des coefficients présents dans $M^{(l)}$ et absents dans $M^{(k)}$. En général, il existe plusieurs chemins possibles dans le treillis pour aller du sous-modèle $M^{(0)}$ au sous-modèle M_R . Or la décomposition de la somme des carrés dépend du chemin choisi (sauf dans le cas particulier des plans orthogonaux).

Pour adopter le «meilleur» chemin, VANED procède comme suit :

– dans le sous-treillis défini par $M^{(0)}$ et M_R , nous cherchons le sous-modèle M_1 tel que, \mathcal{F} étant une loi de Fisher-Snedecor centrée avec $\nu_R^{(M_0)} - \nu_R^{(M_1)}$ ddl au numérateur et $\nu_R^{(M_R)}$ ddl au dénominateur et $\phi_1 = \frac{R^{(M_0)} - R^{(M_1)}}{\nu_R^{(M_0)} - \nu_R^{(M_1)}} \frac{\nu_R^{(M_R)}}{R^{(M_R)}}$, la probabilité $P(\mathcal{F} < \phi_1)$ soit maximale (ou dans le cas où les probabilités sont égales, tel que ϕ_1 ait la valeur maximale),

– dans les 2 sous-treillis définis par $M^{(0)}$ et M_1 , puis M_1 et M_R , nous déterminons les sous-modèles M_2 et M_3 respectivement tels que $\phi_2 = \frac{R^{(M_1)} - R^{(M_2)}}{\nu_R^{(M_1)} - \nu_R^{(M_2)}} \frac{\nu_R^{(M_R)}}{R^{(M_R)}}$ et $\phi_3 = \frac{R^{(M_3)} - R^{(M_R)}}{\nu_R^{(M_3)} - \nu_R^{(M_R)}} \frac{\nu_R^{(M_R)}}{R^{(M_R)}}$ aient chacun la probabilité maximale.

– et ainsi de suite jusqu'à obtention du chemin choisi.

Ayant établi un classement entre les actions, on peut dresser un tableau d'analyse de variance du modèle de variance minimale M_R . Les différentes actions apparaissent dans l'ordre du chemin précédemment trouvé qui va des actions les plus probables aux moins probables. Alors, en remontant le chemin depuis M_R , on adopte le modèle définitif, appelé modèle «optimal» : celui pour lequel toutes les contributions des actions ont une probabilité acceptable pour \mathcal{F} compte tenu du classement des actions.

Pour le modèle «optimal», VANED établit le tableau d'analyse de variance correspondant, calcule l'estimation \widehat{A}_c des coefficients non réduits (les estimations de ces coefficients sont liées par les relations de centrage), l'estimation \widehat{Y} des réponses, l'évaluation $E^* = Y - \widehat{Y}$ des termes d'erreur, l'estimation de la variance de l'erreur et la matrice des variances-covariances des éléments de \widehat{A}_c .

Remarque

On peut noter qu'il peut exister des sous-modèles plus complets que M_R , compris dans le treillis de sous-modèles entre M_R et le modèle complet.

Soit Ω , un de ces sous-modèles. En comparant M_R à Ω , on a :

$$\phi = \frac{R^{(M_R)} - R^{(\Omega)}}{\nu_R^{(M_R)} - \nu_R^{(\Omega)}} \frac{\nu_R^{(\Omega)}}{R^{(\Omega)}} < 1.$$

L'adoption, pour les calculs, du modèle de variance minimale revient donc à «pooler» avec le résidu tous les effets qui correspondent chacun à \mathcal{F} inférieur à 1.

2. La bibliothèque CADNA : fondement et mise en œuvre

Pour faire l'analyse de la variance avec VANED, comme lors de l'exécution de tout code scientifique, nous utilisons un ordinateur qui travaille avec une arithmétique approchée, appelée arithmétique à virgule flottante. En effet, comme la représentation des nombres en machine se fait avec un nombre fini de bits, tout résultat d'opération arithmétique $f \in \mathbb{R}$ ne peut généralement pas être représenté exactement par l'ordinateur. Le résultat informatique, $F \in \mathbb{F}$ (\mathbb{F} , ensemble fini des réels représentables en machine) est un arrondi de f , arrondi obtenu arbitrairement suivant le mode d'arrondi choisi (au plus près, vers zéro, vers $+\infty$ ou vers $-\infty$). Du fait de cet arrondi, l'arithmétique à virgule flottante n'est qu'une approximation de l'arithmétique exacte.

Si, maintenant, $f \in \mathbb{R}$ est le résultat exact obtenu au bout de n opérations arithmétiques exacte, l'ordinateur fournit un résultat $F \in \mathbb{F}$ entaché d'erreurs d'arrondi. Il a été montré [3] que tout résultat informatique F peut se modéliser au premier ordre en 2^{-p} par :

$$F \approx f + \sum_{i=1}^n g_i(d).2^{-p}.\alpha_i \quad (2.1)$$

p étant le nombre de bits avec lequel la mantisse du nombre réel est codée (24 en simple précision, 53 en double précision), $g_i(d)$ étant des coefficients ne dépendant que des données du calcul et de l'algorithme de calcul et α_i étant les quantités perdues lors des arrondis. Cette relation est établie en supposant que les exposants et signes des résultats intermédiaires étaient indépendants des α_i , ce qui est vérifié dans la pratique.

Ainsi, lorsqu'un programme de calcul est exécuté par un ordinateur, tout résultat fourni par la machine est toujours irrémédiablement entaché d'une erreur dite «erreur de calcul» résultant de la propagation des erreurs d'arrondi tout au long des calculs effectués. Cette erreur peut être telle que le résultat fourni soit faux.

La bibliothèque CADNA (*Control of Accuracy and Debugging for Numerical Applications*) [4, 2, 8] est une bibliothèque au sens informatique du terme, c'est-à-dire un ensemble de fonctions et de sous-programmes qui peuvent «équiper» des programmes informatiques. Avec un minimum de modifications du code, cette bibliothèque a pour but principal de répondre à la question suivante :

Quelle est l'erreur de calcul commise par l'arithmétique à virgule flottante sur les résultats fournis par un programme quelconque exécuté sur ordinateur ?

Pour cela, CADNA implante de manière synchrone la méthode CESTAC (Contrôle et Estimation Stochastique des Arrondis de Calculs) définie par M. La Porte et J. Vignes en 1974, puis généralisée par ce dernier [5, 7, 9]. Il s'agit d'une approche probabiliste du problème de l'estimation de la propagation des arrondis de calcul.

On peut résumer très simplement l'idée majeure sur laquelle repose la méthode CESTAC. Elle consiste à exécuter plusieurs fois en parallèle le même programme de calcul en propageant différemment les erreurs d'arrondi à l'aide d'une arithmétique aléatoire. On obtient ainsi, pour un même calcul, des résultats différents. La partie commune à tous les résultats représente la partie fiable, l'autre étant la partie non significative.

L'arithmétique aléatoire consiste à retenir aléatoirement pour tout résultat F , l'un des deux arrondis possibles F^- ou F^+ (arrondis par défaut ou par excès) avec la même probabilité 0,5. C'est le **mode d'arrondi aléatoire**.

Avec ce mode d'arrondi, on génère $\alpha_i \in]-1, +1[$. Comme ce nouveau mode d'arrondi nécessite un générateur aléatoire, un même programme supposé fournir un résultat unique, exécuté N fois, fournira N valeurs différentes du résultat unique.

On obtient donc un échantillon de taille N de la variable aléatoire F modélisée par (2.1) où les α_i sont des variables aléatoires indépendantes équidistribuées. La distribution des α_i est uniforme sur $] - 1, +1[$ donc centrée.

Les deux conséquences majeures sont :

1) l'espérance mathématique de la variable F est le résultat mathématique exact f ,

2) la distribution de F est quasi-gaussienne.

L'estimation de la précision de F consiste à estimer la variance d'une variable aléatoire gaussienne. À partir d'un échantillon d'une variable gaussienne, le test de Student fournit un intervalle de confiance pour l'espérance de cette variable avec un seuil de probabilité donné β .

Appliqué à notre problème, on sait donc que :

$$\forall \beta \in [0, 1], \exists \tau_\beta(N-1) \in \mathbb{R} \quad \text{tel que :}$$

$$P \left(|\bar{F} - f| \leq \frac{\tau_\beta(N-1) \cdot s}{\sqrt{N}} \right) = \beta \quad (2.2)$$

avec

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N F_i \quad \text{et} \quad s^2 = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{i=1}^N (F_i - \bar{F})^2 \quad (2.3)$$

$\tau(N-1)$ est une variable de Student à $(N-1)$ ddl et $\tau_\beta(N-1)$ le quantile d'ordre β associé, qu'on notera aussi τ_β .

Sous une probabilité β , le nombre de chiffres significatifs exacts de \bar{F} , c'est-à-dire le nombre de chiffres décimaux significatifs communs à \bar{F} et à f , est majoré par :

$$C_{\bar{F}} = \log_{10} \left(\frac{\sqrt{N} \cdot |\bar{F}|}{s \cdot \tau_\beta} \right). \quad (2.4)$$

En pratique, ceci est fait automatiquement par CADNA avec $N = 2$ et $\beta = 0,95$.

Pour $N = 2$, $\tau_\beta(1) = 12,706$. Le choix de $N = 2$ correspond à un compromis entre le temps de calcul et la précision des tests.

Le but de l'arithmétique aléatoire n'est pas d'améliorer la précision du résultat mais seulement de faire propager différemment les erreurs d'arrondi pour ensuite, à partir de N valeurs du résultat, pouvoir estimer son nombre de chiffres « significatifs » exacts.

L'implantation de CADNA consiste en fait à remplacer l'arithmétique déterministe de la machine par une arithmétique aléatoire et de faire effectuer chaque opération arithmétique N fois ($N = 2$) avant d'effectuer la suivante.

Ainsi tout se passe comme si N programmes identiques se déroulaient en simultanéité sur N ordinateurs synchronisés, utilisant chacun une arithmétique aléatoire. Aussi a-t-on, pour tout résultat d'opération arithmétique, N représentants à partir desquels on calcule la moyenne et l'écart-type. En utilisant l'équation (2.4),

on peut estimer le nombre de chiffres décimaux significatifs de tout résultat de toute opération arithmétique et l'on peut alors analyser, pas à pas, la propagation des erreurs d'arrondi.

Cet outil d'implantation automatique de la méthode CESTAC permet à un utilisateur de faire exécuter son programme de calcul scientifique en arithmétique aléatoire sans avoir à réécrire, ni même à modifier notablement son programme initial. Un tel outil a pu être créé grâce au langage Fortran 90. Le Fortran 90 permet notamment de créer des *types* nouveaux qui peuvent être manipulés à l'aide d'opérateurs que l'on crée également. De plus, le symbole représentant l'opérateur créé, peut être pris parmi les symboles des opérateurs du langage. En d'autres termes, ce langage permet de faire, ce que l'on appelle la surcharge des opérateurs existants. Grâce à ces propriétés nouvelles du langage, la bibliothèque CADNA a pu être développée et est actuellement utilisable pour les programmes écrits en Fortran¹.

Ainsi un nouveau type, *le nombre stochastique*, a été créé : il n'est rien d'autre qu'un N -uplet ($N = 2$) d'éléments en virgule flottante perturbés. Tous les opérateurs arithmétiques (+, -, *, /) ont été surchargés de telle sorte que, lorsqu'un tel opérateur est exécuté, les opérandes sont des N -uplets et le résultat rendu est un N -uplet aléatoirement perturbé. Les opérateurs dits de relation (>, ≥, <, ≤, =) ont été surchargés également. Toutes les fonctions utilisables dans des programmes écrits en Fortran 77 (SIN, COS, EXP, ...) ont été également surchargées. De même, les instructions d'entrée-sortie ont été modifiées, notamment l'instruction d'impression qui fournit comme résultat la moyenne du N -uplet écrite avec uniquement son nombre de chiffres décimaux significatifs.

Par ailleurs, CADNA permet d'évaluer l'influence des erreurs de données sur les résultats de programme de calcul scientifique. En effet, les données mises en jeu dans les programmes proviennent de mesures expérimentales et, par conséquent, sont entachées d'erreurs. Dans la pratique, nous pouvons distinguer deux types d'erreurs expérimentales :

- 1) «les incertitudes de mesures» : ces incertitudes sont liées aux méthodes et aux appareils de mesure et sont dues à des perturbations extérieures non maîtrisées,
- 2) «les erreurs d'arrondi de mesure» : lors du relevé des mesures, l'expérimentateur est souvent amené à arrondir le résultat si bien qu'il ne mentionne sur la feuille d'essai qu'un nombre limité de chiffres. Ce procédé engendre une perte d'information que nous appelons «erreurs d'arrondi de mesure». De même, lorsque la mesure est automatisée, suivant le type de convertisseur analogique-numérique (16, 32 bits, ...) et suivant le format d'écriture de la mesure sur les fichiers, une erreur similaire est faite.

Ces deux types d'erreurs peuvent généralement être considérées comme des variables aléatoires centrées sur une valeur nulle.

Dans le cas général, il convient de tenir compte des deux types d'erreurs pour étudier leurs effets sur les résultats et leur précision associée. Dans le cas particulier de l'analyse de variance, le calcul des sommes résiduelles des carrés $R^{(i)}$ nous permet d'estimer la variance de ces erreurs. En spécifiant les erreurs d'arrondi de mesure qui sont connues de l'expérimentateur, nous pouvons étudier l'influence de ce type

¹ Une version écrite en ADA existe aussi. La version en C++ est en cours de développement.

d'erreur sur les résultats et leur précision. Si ces erreurs sont suffisamment faibles, nous pourrions estimer la variance de l'incertitude de mesure.

Pour pouvoir estimer l'influence des incertitudes des données sur les résultats fournis par les programmes de calcul, il a été montré que l'approche stochastique est utilisable. Nous résumons ici brièvement les principaux résultats énoncés dans [2].

L'erreur ρ_i sur une donnée est considérée comme l'écart-type de l'arrondi de mesure (dans le cas général, ρ_i est l'écart-type de l'erreur globale de mesure). Il est démontré qu'un résultat informatique F d'une suite finie et ordonnée de n opérations arithmétiques à partir de d données entachées d'erreurs de mesure ρ_i et d'une stimulation aléatoire de cette erreur, v_i , exécutée avec l'arithmétique aléatoire, est formalisé au 1^{er} ordre par :

$$F = f + \sum_{i=1}^d \eta_i(d) 2^{-p} (\rho_i + v_i) + \sum_{i=1}^n g_i(d) 2^{-p} \alpha_i \quad (2.5)$$

$\eta_i(d)$ est une fonction qui ne dépend que des données.

La première quantité sous le signe somme représente l'erreur due à l'imprécision des données, la seconde représente l'erreur due à la propagation des erreurs d'arrondi de calcul.

Dans la pratique, deux cas peuvent se rencontrer :

– on possède, pour chacune des d données, plusieurs valeurs différemment entachées d'erreur de mesure. Dans ce cas, les N ($N = 2$) exécutions du programme avec l'arithmétique aléatoire se font en prenant N valeurs différentes pour chacune des données;

– on ne possède qu'un seul jeu de données. CADNA définit la fonction `data_st` pour perturber chacune des données d (donnée issue de l'expérience) d'une erreur relative de mesure ρ connue. Dans ce cas, chacune des exécutions du programme se fait avec des données D définies par :

$$D = d(1 + \theta\rho) \quad (2.6)$$

θ étant une variable aléatoire uniformément répartie sur l'intervalle $[-1, +1]$.

Ainsi, en implantant CADNA dans un programme, on peut estimer, avec la formule (2.4), la précision de tout résultat informatique, compte tenu, d'une part, de la propagation des erreurs d'arrondi et, d'autre part, de l'influence des incertitudes des données. Dans le cas où un résultat est non significatif (aucun chiffre commun entre le résultat informatique F et le résultat mathématique f), le résultat est appelé «zéro informatique» [6] et est fourni comme @.0.

De plus, CADNA permet, en cours d'exécution d'un programme de contrôler le bon déroulement du calcul. En effet, dès qu'une anomalie numérique – multiplication ou division de nombres non significatifs ou test de relation d'ordre avec une variable

qui est un «zéro informatique» – se produit, un message est écrit dans un fichier particulier `cadna_stability_f90.lst`. À la fin de l'exécution du programme, l'utilisateur doit consulter ce fichier. S'il est vide, cela veut dire que le programme s'est déroulé sans problème. Il est ainsi validé d'un point de vue numérique et les résultats sont fournis avec leur précision associée. S'il contient des messages, l'utilisateur, avec l'aide du débogueur associé au compilateur, retrouvera les instructions qui sont la cause de ces anomalies numériques et devra réfléchir afin, éventuellement, de les corriger. L'implantation synchrone de la méthode CESTAC réalisée par la bibliothèque CADNA permet donc de valider en cours d'exécution tout programme de calcul scientifique.

Remarque :

Le temps d'exécution, ainsi que la place mémoire d'un programme utilisant la bibliothèque CADNA sont respectivement multipliés par un facteur 3 et 2, ce qui est tout à fait acceptable compte tenu de l'intérêt majeur qu'est la validation des résultats des programmes. C'est la seule bibliothèque existante capable de telles performances.

3. Exemple d'utilisation de VANED

En nous basant sur un exemple, nous allons décrire :

- les fonctionnalités de VANED,
- les apports de la bibliothèque CADNA pour l'analyse des plans d'expériences.

L'exemple concerne un plan d'expériences factoriel faisant intervenir :

- le facteur F1 à 4 niveaux (0,1,2,3),
- le facteur F2 à 3 niveaux (0,1,2),
- le facteur F3 à 3 niveaux (0,1,2).

Par ailleurs, une covariable C1 est mesurée.

En faisant 6 répétitions, nous obtenons un plan de 216 essais.

Afin de simuler les réponses, nous les avons calculées ainsi :

$$R1 = 13.2 + \begin{pmatrix} 5. \\ 0. \\ 0.3 \\ -5.3 \end{pmatrix} F1 + \begin{pmatrix} 1.10^{-6} \\ 0. \\ -1.10^{-6} \end{pmatrix} F3 + 3 \cdot 10^{-3} C1 + \varepsilon \quad (3.1)$$

où la covariable C1 est calculée comme $C1 = 1000 + 100 \cdot \Theta$, le terme d'erreur $\varepsilon = 10^{-7} \cdot \Theta$ et Θ est la loi normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$.

3.1. Les fichiers de données

Le logiciel VANED demande deux fichiers de données :

donres.dat : fichier d'essais. Ce fichier texte fournit les niveaux des facteurs, puis les résultats de mesure des covariables et les réponses.

dongen.dat : fichier contenant :

– le nombre de facteurs présents dans le fichier donres.dat, le nom de différents libellés et le nom éventuel d'un fichier contenant la matrice de codage du facteur. En effet, dans le cas où les nombres d'occurrences des niveaux du facteur ne sont pas égaux, la matrice de codage par défaut ne permet pas d'adopter les relations de centrage les meilleures. Celles-ci peuvent être fixées librement par l'utilisateur.

– le nombre de covariables fournies par le fichier d'essai, leurs libellés et la précision relative de l'erreur d'arrondi qui s'y rapporte,

– le nombre de réponses fournies dans le fichier d'essai, leurs libellés et leur précision relative de l'erreur d'arrondi de mesure,

– le modèle complet que l'on veut étudier,

– le mode de calcul de la somme résiduelle des carrés $R^{(i)}$ et la probabilité minimale acceptable pour le modèle optimal,

– 5 options d'impression :

1) écriture sur fichier ou à l'écran,

2) détail des calculs nécessaires au choix du modèle de variance minimale,

3) détail de la recherche du meilleur chemin pour aller du modèle vide au modèle de variance minimale,

4) comparaison des réponses estimées et mesurées,

5) matrice de variances-covariances des coefficients estimés.

Un extrait du fichier donres.dat correspondant à notre exemple est fourni dans le tableau 1, le fichier dongen.dat, dans le tableau 2. Ainsi, nous voulons tester le modèle complet suivant, écrit sous forme symbolique :

$$R1 = 1 + F1 + F2 + F3 + F1F2 + F1F3 + F2F3 + C1 \cdot (1 + F1 + F2 + F3)$$

TABLEAU 1
Extrait du fichier donres.dat

Facteurs	C1	R1
0 0 0	1.04782594506320675e+03	2.13434878540304247e+01
0 0 1	1.17746693493007638e+03	2.17324008332641476e+01
0 0 2	9.52945075486151381e+02	2.10588250735012465e+01
0 1 0	9.07472452613332848e+02	2.09224271208162804e+01
0 1 1	1.00015466055242609e+03	2.12004637784501710e+01
0 1 2	1.06372992822301467e+03	2.13911799066939885e+01
0 2 0	8.43105172615442825e+02	2.07293254813678054e+01
0 2 1	1.07001812113904543e+03	2.14100543001409278e+01
0 2 2	1.09737546332768170e+03	2.14921163677276397e+01

TABLEAU 2
Exemple de fichier dongen.dat

```

FACT
3
F1
F2
F3
COVA
1
C1 0
RESU
1
R1 0
MODE
1+F1*F2+F1*F3+F2*F3 &
C1*(1+F1+F2+F3)
CALC
0 0.95
IMPR
2 0 0 0 1
STOP

```

Dans cet exemple, les données sont considérées comme exactes. Nous fournissons 15 chiffres significatifs pour les mesures de la covariable C1 et de la réponse R1 et la précision des erreurs d'arrondis de mesures sont mises à zéro. Seule une perturbation au dernier bit de ces données est effectuée. Ainsi nous étudions uniquement l'influence des arrondis de calcul.

3.2. Déroulement du calcul

Après avoir lu les fichiers de données :

1) VANED établit la liste complète des facteurs, des covariables et des interactions à prendre en compte. Dans l'exemple présenté, il ajoute les facteurs F1, F2 et F3 qui apparaissent dans des interactions sans avoir été envisagés de manière isolée («règle de hiérarchie entre les actions»).

2) si un nom de fichier est spécifié pour un facteur, VANED lit la matrice de codage dans ce fichier. Par défaut, la matrice choisie correspond à des relations de centrage équipondérées.

3) VANED calcule les matrices de codage des interactions à partir d'un produit de Kronecker des matrices de facteurs ou des interactions.

4) en utilisant les matrices de codage précédemment déterminées, il calcule la matrice d'essai X codée en disjonctif réduit du modèle complet.

5) il vérifie que le plan peut être analysé en calculant $({}^tXX)^{-1}$. Si la matrice est rendue singulière, par une confusion d'actions par exemple, les relations entre les divers facteurs sont fournies.

6) il établit la liste exhaustive des sous-modèles inférieurs au modèle complet en respectant la «règle de hiérarchie entre les actions». Dans notre exemple, 171 sous-modèles forment le treillis de sous-modèles.

7) il calcule la somme résiduelle des carrés $R^{(i)}$ pour chacun de ces sous-modèles suivant le mode de calcul choisi. Trois modes sont disponibles :

- par pivotage successif des actions depuis le modèle vide,
- par pivotage, puis amélioration systématique de la précision du calcul en évaluant la matrice des résidus des facteurs non considérés par le sous-modèle,
- par pivotage, puis amélioration de la précision du calcul lorsque le résidu évalué par le pivotage est un «zéro informatique».

Ces modes de calcul sont détaillés en annexe A.

Remarque :

Nous avons implanté, dans un premier temps, la méthode classique de «pivotage-dépivotage» [1] pour calculer les sommes résiduelles des carrés $R^{(i)}$. Or CADNA nous a montré que, dans de nombreux cas, comme nous déduisons la valeur $R^{(i)}$ d'un sous-modèle à partir des calculs effectués auparavant, nous avons une propagation des arrondis de calcul. Cela conduit à ce que, après le calcul d'un certain nombre de résidus, beaucoup de résidus n'ont plus de chiffres décimaux significatifs («zéros informatiques»). En ne faisant que des pivotages depuis le modèle vide, nous limitons la propagation des erreurs d'arrondis.

8) à partir des valeurs $R^{(i)}$, VANED détermine le modèle de variance minimale. Dans le cas où des résidus sont des «zéros informatiques», cela veut dire que, compte tenu de la précision des calculs et des mesures, le résidu ne peut être calculé de manière fiable. En assimilant ce «zéro informatique» à un zéro mathématique, nous considérons que le résidu calculé est nul. Alors, pour déterminer le sous-modèle de variance minimale, VANED choisit le sous-modèle M_R le plus simple parmi les sous-modèles ayant un résidu nul. Si l'option d'impression correspondante est mise à 1, VANED fournit pour chaque sous-modèle du treillis la somme résiduelle des carrés, le nombre de ddl expliqué et la variance résiduelle résultante.

9) il détermine alors le meilleur parcours du sous-treillis de sous-modèles pour aller de M_0 à M_R . Si l'option d'impression correspondante est mise à 1, VANED indique à l'utilisateur comment ce chemin a été établi suivant les tests de \mathcal{F} .

10) il dresse le tableau d'analyse de variance du sous-modèle de variance minimale,

11) il déduit de ce tableau d'analyse de variance le modèle «optimal» compte tenu du seuil de probabilité et fournit le tableau d'analyse de variance correspondant.

12) pour le modèle «optimal», il fournit l'estimation des coefficients \widehat{A}_c .

13) suivant les options d'impression correspondantes,

– il fournit les valeurs des réponses mesurées, Y , et calculées par le modèle optimal \hat{Y} , ainsi que la différence entre la réponse et son estimation, c'est-à-dire une évaluation de l'erreur E^* . Il donne la liste des expériences pour lesquelles cette différence est supérieure à deux fois l'estimation de l'écart-type du résidu.

– il dresse le tableau des variances-covariances des coefficients du modèle optimal.

3.3. Influence de la propagation des arrondis de calcul

Pour étudier l'influence de la propagation des arrondis de calcul, nous avons utilisé plusieurs versions de VANED qui implantent CADNA ou qui utilisent l'arithmétique à virgule flottante usuelle et qui effectuent les calculs soit en simple précision, soit en double précision. En spécifiant que l'erreur d'arrondi de mesure est nulle pour les covariables et les réponses, la précision fournie des résultats ne dépend que de la propagation des arrondis de calcul. Nous présentons dans les tableaux 3, 4, 5 et 6, les résultats de l'analyse avec les diverses versions de VANED.

Il apparaît que :

– les résultats calculés en double précision avec CADNA (tableau 3) permettent de retrouver le modèle initial. Comme le résidu est faible, il ne peut être évalué. Il s'agit donc d'un «zéro informatique». Les valeurs de \mathcal{F} et des probabilités associées ne peuvent donc plus être calculées. La précision des coefficients du modèle est très bonne (15 chiffres significatifs). On peut néanmoins observer une précision moins bonne pour les coefficients de F3 et pour le second coefficient de F1 (8 chiffres significatifs).

– lorsque les calculs sont effectués avec l'arithmétique usuelle de l'ordinateur (arithmétique à virgule flottante, arrondie au plus près) (tableau 4), le modèle optimal trouvé est le bon modèle. Cependant, on peut remarquer que la somme résiduelle des carrés est négative. Le bon choix du modèle vient du fait que nous avons traité $R^{(i)} < 0$ comme un «zéro informatique». Donc, au lieu de chercher le modèle de variance minimale, nous prenons le sous-modèle le plus simple parmi les modèles ayant $R^{(i)} < 0$. En utilisant l'arithmétique usuelle, nous n'avons pas d'information quant à la précision des résultats.

– les calculs en simple précision avec CADNA (tableau 5) ne permettent pas de montrer que F3 a un effet significatif. Cet effet est si faible (10^{-6}) que la précision des calculs ne permet pas de le distinguer des arrondis de calcul : le modèle optimal trouvé a un résidu non significatif. La précision de résultat est de 5-6 chiffres significatifs. Le second coefficient de F1 est trouvé comme un «zéro informatique», correspondant au zéro mathématique des réponses simulées.

– lorsque les calculs sont effectués avec l'arithmétique usuelle en simple précision (tableau 6), le facteur F3 n'est toujours pas trouvé comme intervenant dans le processus. Les résultats sont fournis sans leur précision associée.

Dans tous ces cas, le modèle de variance minimale est aussi le modèle optimal.

Cet exemple illustre les difficultés que l'analyse de variance rencontre lorsque, soit le terme d'erreur est faible ou soit lorsqu'un effet d'une action est faible en comparaison avec les autres. Dans le cas d'un plan d'expériences plus important,

c'est-à-dire ayant un plus grand nombre de ddl expliqués, ces conclusions seraient encore plus nettes.

Remarque :

En implantant CADNA dans VANED, nous avons pu montrer que la somme résiduelle des carrés pouvait ne plus être significative, voire être négative compte tenu de la propagation des arrondis de calcul. Cela nous a conduit, d'une part, à modifier les versions de VANED utilisant l'arithmétique à virgule flottante : lorsque des résidus $R^{(i)}$ sont négatifs, nous les considérons comme non significatifs et, donc, nous choisissons comme modèle de variance minimale le modèle le plus simple dont le résidu est négatif. Sur l'exemple considéré, cette modification permet d'obtenir le bon modèle. Cependant, cette modification n'est pas une solution sûre dans la mesure où des valeurs positives calculées en arithmétique usuelle peuvent aussi être, en fait, non significatives. D'autre part, ces résidus non significatifs ont conduit à proposer une autre manière de les calculer de façon à augmenter leur précision. Cette amélioration est décrite en annexe A.

3.4. Influence des arrondis de mesure

Examinons maintenant le cas où les mesures des covariables et des réponses ont été arrondies : seuls les 5 premiers chiffres sont conservés. Le tableau 7 présente un extrait du fichier donres.dat. En utilisant l'arithmétique usuelle, l'ordinateur lit 21.343 dans le fichier, mais, s'il effectue son calcul en double précision, par exemple, il va affecter à la mesure la valeur 21.343000000000. Le fait de compléter par des zéros la fin du codage est arbitraire. La valeur 21.343458927084 est aussi légitime.

TABLEAU 3
Résultats obtenus en double précision en utilisant CADNA

ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE OPTIMAL					
=====					
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)	
1	0.569227031121041E+005	1	0.100000000000000E+055	0.100000000000000E+001	
F1	0.287897207156284E+004	3	0.100000000000000E+055	0.100000000000000E+001	
C1	0.20066134668211E+002	1	0.100000000000000E+055	0.100000000000000E+001	
F3	0.1439853E-007	2	0.100000000000000E+055	0.100000000000000E+001	
Residu	0.0	209			
=====					
ECRITURE DU MODELE					
=====					
R1=					
1 *	0.13199999918106E+002				
F1*	0.500000000526360E+001	-0.15016272E-007	0.300000020201657E+000	-0.530000001044898E+001	
C1*	0.30000000817839E-002				
F3*	0.1000418354E-004	0.11998196E-007	-0.1001618174E-004		
temps ecoule : 11.0000000 s					

TABLEAU 4
Résultats obtenus en double précision sans utiliser CADNA

ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE OPTIMAL					
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)	
1	0.569227031121043D+05	1	0.100000000000000D+55	0.100000000000000D+01	
F1	0.287897207156285D+04	3	0.100000000000000D+55	0.100000000000000D+01	
C1	0.200651346681886D+02	1	0.100000000000000D+55	0.100000000000000D+01	
F3	0.143985410261394D-07	2	0.100000000000000D+55	0.100000000000000D+01	
Residu	-0.618882722847047D-11	209			

ECRITURE DU MODELE

R1=

1 * 0.13199999918108227D+02

F1* 0.50000000052636020D+01 - .15016282661761693D-07 0.30000002020166194D+00 - .53000000104489811D+01

C1* 0.30000000817826025D-02

F3* 0.10004183538291425D-04 0.11998198717541597D-07 - .10016181737008967D-04

temps ecoule : 4.0000000 s

TABLEAU 5
Résultats obtenus en simple précision en utilisant CADNA

ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE OPTIMAL					
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)	
1	0.5692269E+05	1	0.1000001E+36	0.1000000E+01	
F1	0.2878971E+04	3	0.1000001E+36	0.1000000E+01	
C1	0.2006E+02	1	0.1000001E+36	0.1000000E+01	
Residu	0.0	211			

ECRITURE DU MODELE

R1=

1 * 0.131997E+02

F1* 0.4999999E+01 0.0 0.299998E+00 -0.5299998E+01

C1* 0.30002E-02

temps ecoule : 10.0000000 s

En perturbant les données mesurées en fonction de l'incertitude relative de l'arrondi de mesure (10^{-5}) avec la fonction `data.st`, CADNA permet de tenir compte de l'influence de cet arrondi.

Les résultats présentés dans les tableaux 8 et 9 montrent que :

– l'arrondi des mesures à 5 chiffres ne permet plus à VANED de déterminer l'effet de F3 : cet effet est inférieur à l'influence des arrondis de mesure,

– suite à l'arrondi des mesures, la variance du résidu n'est plus un «zéro informatique», mais est positive et significative,

TABLEAU 6
Résultats obtenus en simple précision sans utiliser CADNA

ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE OPTIMAL				
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)
1	0.5692269E+05	1	0.1883092E+10	0.1000000E+01
F1	0.2878973E+04	3	0.3174698E+08	0.1000000E+01
C1	0.2006320E+02	1	0.6637222E+06	0.1000000E+01
Residu	0.6378174E-02	211		

ECRITURE DU MODELE				
R1=				
1 *	0.1320008E+02			
F1*	0.5000001E+01	0.7152557E-06	0.3000005E+00	-0.5300002E+01
C1*	0.2999916E-02			
temps ecoule :	3.0000000 s			

TABLEAU 7
Extrait du fichier donres.dat après arrondi des mesures

0 0 0 1047.8 21.343
0 0 1 1177.5 21.732
0 0 2 952.9 21.059
0 1 0 907.5 20.922
0 1 1 1000.2 21.200
0 1 2 1063.7 21.391
0 2 0 843.1 20.729
0 2 1 1070.0 21.410
0 2 2 1097.4 21.492

– le modèle de variance minimale n'est pas le modèle optimal : les tests de \mathcal{F} ont permis ensuite d'éliminer les actions qui n'étaient pas probables.

– les résultats fournis ont une très bonne précision si l'on ne tient pas compte des arrondis de mesure alors que, si on en tient compte, les contributions des actions sont connues avec 1 ou 5 chiffres significatifs suivant les actions et les coefficients des actions du modèle optimal sont connus avec 5 chiffres significatifs (sauf le second de F1, qui n'a qu'un chiffre).

Conclusion

Cet article présente le logiciel VANED qui :

- analyse tout type de plan d'expériences orthogonaux ou non,
- tient compte de facteurs, de covariables et de leurs interactions éventuelles,

TABLEAU 8
*Résultats obtenus en double précision en utilisant CADNA,
les données étant arrondies, mais ces arrondis de mesure
n'étant pas considérés*

ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE DE VARIANCE MINIMALE					
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)	
1	0.569225729511295E+005	1	0.650465E+012	0.100000000000000E+001	
F1	0.287896108157406E+004	3	0.109661E+011	0.100000000000000E+001	
C1	0.200652062096E+002	1	0.229289E+009	0.100000000000000E+001	
F3	0.48773565E-006	2	0.278672E+001	0.934627E+000	
F2	0.13741211E-006	2	0.785118E+000	0.540016E+000	
F2*C1	0.411116877E-006	2	0.234895E+001	0.900111E+000	
F2*F3	0.396071715E-006	4	0.113149E+001	0.655774E+000	
F1*F2	0.5897579844E-006	6	0.112321E+001	0.648573E+000	
Residu	0.170645E-004	195			
ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE OPTIMAL					
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)	
1	0.569225729511295E+005	1	0.629270E+012	0.100000000000000E+001	
F1	0.287896108157406E+004	3	0.106088E+011	0.100000000000000E+001	
C1	0.200652062096E+002	1	0.221817E+009	0.100000000000000E+001	
Residu	0.190866E-004	211			
ECRITURE DU MODELE					
R1=					
1 *	0.1320005183587E+002				
F1*	0.499999270635939E+001	-0.1498991004E-004	0.30001319693862E+000	-0.529999091338797E+001	
C1*	0.299993042573E-002				
temps ecoule : 12.000000 s					

– vérifie, avant l'analyse de la variance, qu'il n'existe pas de confusion entre les actions,

– à partir d'une analyse exhaustive de l'ensemble des sous-modèles inférieurs au modèle complet fourni par l'utilisateur, détermine le modèle de variance minimale et en déduit le modèle optimal,

– fournit les coefficients du modèle optimal, ainsi que la matrice des variances-covariances entre ces coefficients,

– permet la comparaison des réponses mesurées et résultantes du modèle optimal.

En implantant la bibliothèque CADNA dans le logiciel VANED, nous avons pu mettre en évidence que la méthode classique de «pivotage-dépivotage» peut conduire à une perte progressive et rapide de la précision des sommes résiduelles des carrés sur lesquelles sont basées nos analyses. Aussi, compte tenu de ces conclusions, nous

TABLEAU 9
*Résultats obtenus en double précision en utilisant CADNA,
 les données étant arrondies et les arrondis de mesure
 étant pris en compte*

ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE DE VARIANCE MINIMALE				
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)
1	0.56922E+005	1	0.64E+012	0.100000000000000E+001
F1	0.28789E+004	3	0.10E+011	0.100000000000000E+001
C1	0.20065E+002	1	0.22E+009	0.100000000000000E+001
F3*C1	0.3E-006	2	0.2E+001	0.87E+000
F2	0.1E-006	2	0.7E+000	0.5E+000
F2*C1	0.6E-006	2	0.3E+001	0.95E+000
F1*C1	0.3E-006	3	0.1E+001	0.7E+000
Residu	0.17E-004	202		
ANALYSE DE LA VARIANCE DU MODELE OPTIMAL				
FACTEUR	Contributions	ddl	F	P(F)
1	0.56922E+005	1	0.619E+012	0.100000000000000E+001
F1	0.28789E+004	3	0.104E+011	0.100000000000000E+001
C1	0.20065E+002	1	0.218E+009	0.100000000000000E+001
Residu	0.193E-004	211		
ECRITURE DU MODELE				
R1=				
1 *	0.13200E+002			
F1*	0.50000E+001	-0.1E-004	0.30000E+000	-0.52999E+001
C1*	0.299993E-002			
temps ecoule : 12.000000 s				

avons cherché d'autres méthodes de calcul des sommes résiduelles des carrés $R^{(i)}$. Ainsi VANED propose trois méthodes :

- le simple pivotage qui est un bon compromis entre précision et rapidité de calcul,
- une méthode d'amélioration systématique de la précision qui est très coûteuse en temps calcul, mais qui permet d'améliorer dans certains cas la précision,
- une méthode conditionnelle d'amélioration de la précision qui est intermédiaire entre les deux premières méthodes.

Ainsi, les versions du logiciel VANED qui implantent la bibliothèque CADNA fournissent les résultats en tenant compte, d'une part, de la propagation des arrondis de calcul et, d'autre part, des arrondis des mesures des covariables et des réponses. Les résultats sont fournis avec leur précision associée. Sur l'exemple présenté, nous avons mis en évidence que, lorsque les effets de certaines actions sont faibles par rapport aux autres, ces actions peuvent apparaître comme n'existant pas suivant la

précision des calculs choisie (simple ou double précision). De même, nous avons montré l'importance des arrondis des mesures sur les résultats de l'analyse de variance tant au niveau de la précision des résultats que sur la capacité de VANED à trouver le modèle optimal. L'ensemble de ces résultats montre l'intérêt d'implanter CADNA dans les logiciels d'analyse de variance afin de qualifier les méthodes numériques utilisées ainsi que de valider les résultats obtenus.

Références bibliographiques

- [1] BENOIST D., TOURBIER Y., GERMAIN-TOURBIER S., (1994), *Plans d'expériences : construction et analyse*, Editions Lavoisier.
- [2] CHESNEAUX J.-M., (1988), *Étude théorique et implémentation en ADA de la méthode CESTAC*, université P.M. Curie.
- [3] CHESNEAUX J.-M., (1990), Study of the computing accuracy by using probabilistic approach, *Contribution to Computer Arithmetic and Self-Validating Numerical Methods*, C. Ulrich (J.C. Baltzer), 19-30.
- [4] CHESNEAUX J.-M., (1995), *L'Arithmétique Stochastique et le Logiciel CADNA*, Habilitation à diriger des recherches, Université Pierre et Marie Curie, Novembre.
- [5] PICHAT M., VIGNES J., (1993), *Ingénierie du contrôle de la précision des calculs sur ordinateur*, Editions Technip.
- [6] VIGNES J., (1987), Zéro mathématique et zéro informatique, *La vie des Sciences, C.R. Acad. Sci.*, Paris, 4, vol. 1, janvier, 1-13.
- [7] VIGNES J., (1988), Review on stochastic approach to round-off error analysis and its applications, *Math. Comp. Simul.*, 30, 481-491.
- [8] VIGNES J., (1993), A stochastic arithmetic for reliable scientific computation, *Math. Comp. Simul.*, 35, 233-261.
- [9] VIGNES J., LA PORTE M., (1974), Error analysis in computing, *Information Processing*, 74, North-Holland.

Appendice

Modes de calcul des sommes résiduelles des carrés

Pour calculer les diverses sommes résiduelles des carrés $R^{(i)}$, nous utilisons une matrice W constituée de la manière suivante :

$$W = {}^t \|XY\| \times \|XY\| = \begin{vmatrix} {}^t XX & {}^t XY \\ {}^t YX & {}^t YY \end{vmatrix}$$

dans laquelle la matrice X est la matrice des actions du modèle complet codées en disjonctif réduit et Y , la matrice colonne des réponses.

La méthode classique de calcul consiste à «pivoter et dépivoter» les colonnes de cette matrice. L'introduction d'une action revient à «pivoter» les colonnes correspondantes dans la matrice W , l'élimination d'une action, à «dépivoter» ses colonnes.

Les formules de «pivotage-dépivotage» d'une colonne k sont les suivantes :

$$1) \text{ pour } i \neq k \text{ et } j \neq k \quad W(i, j) = W(i, j) - W(i, k) \frac{W(k, j)}{W(k, k)}$$

$$2) \text{ pour } i = k \text{ et } j = k \quad W(k, k) = -\frac{1}{W(k, k)}$$

$$3) \text{ pour tout } i \neq k \text{ ou } j \neq k \quad W(i, k) = \omega \frac{W(i, k)}{W(k, k)}$$

$$W(k, j) = \omega \frac{W(k, j)}{W(k, k)}$$

$\omega = +1$, quand la colonne est pivotée,

$\omega = -1$, quand la colonne est dépivotée.

Lorsque une action est confondue avec une autre, le terme $W(k, k)$ devient nul. En vérifiant au préalable que W est inversible, nous vérifions que ce cas ne peut pas se produire.

Posons $X = \|X_1 X_2\|$, X_1 et X_2 étant deux sous-matrices de X . Alors :

$$W = \begin{vmatrix} {}^t X_1 X_1 & {}^t X_1 X_2 & {}^t X_1 Y \\ {}^t X_2 X_1 & {}^t X_2 X_2 & {}^t X_2 Y \\ {}^t Y X_1 & {}^t Y X_2 & {}^t Y Y \end{vmatrix}$$

On voit que, dans la matrice W , X_2 joue vis-à-vis de X_1 le même rôle que Y . Lorsque l'on effectue les pivotages autour des termes diagonaux de ${}^t X_1 X_1$, on peut considérer les colonnes de X_2 comme des matrices colonnes de réponses et, alors, en posant $Y^* = \|X_2 Y\|$, on a :

$$W = \begin{vmatrix} {}^t X_1 X_1 & {}^t X_1 Y^* \\ {}^t Y^* X_1 & {}^t Y^* Y^* \end{vmatrix}$$

Les colonnes de X_1 sont dites «colonnes exogènes», celles de Y^* , «colonnes endogènes».

Quand on a pivoté autour des termes diagonaux de ${}^t X_1 X_1$, on obtient la matrice suivante :

$$\begin{aligned} W^* &= \left\| \begin{array}{cc} -({}^t X_1 X_1)^{-1} & ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^* \\ Y^* X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} & {}^t Y^* Y - Y^* X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^* \end{array} \right\| \\ &= \left\| \begin{array}{cc} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{array} \right\| \end{aligned} \quad (A.1)$$

L'estimation des coefficients relatifs à chaque colonne de Y^* est donnée par : $\widehat{A}^* = ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^*$, c'est-à-dire dans la partie supérieure droite, S_{12} de la matrice A.1.

$$\text{On en déduit } \widehat{Y}^* = X_1 \widehat{A}^* = X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^*$$

La «somme des carrés expliquée» est donnée par :

$$\begin{aligned} {}^t \widehat{Y}^* \widehat{Y}^* &= {}^t Y^* X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^* \\ &= {}^t Y^* X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^* \end{aligned}$$

On a alors :

$$\begin{aligned} {}^t (Y^* - \widehat{Y}^*) (Y^* - \widehat{Y}^*) &= {}^t Y^* Y^* - {}^t \widehat{Y}^* \widehat{Y}^* \\ &= {}^t Y^* Y^* - {}^t Y^* X_1 ({}^t X_1 X_1)^{-1} {}^t X_1 Y^* \end{aligned} \quad (A.2)$$

Cette matrice dont les termes diagonaux sont les sommes résiduelles des carrés pour les colonnes de Y^* est donnée dans la partie inférieure droite, S_{22} , de la matrice A.1. La détermination de S_{22} par les formules de pivotage – dépivotage revient à calculer :

$$S_{22} = {}^t Y^* Y^* - {}^t \widehat{Y}^* \widehat{Y}^* \quad (A.3)$$

Pour obtenir les composantes de S_{22} , on effectue la différence entre le produit scalaire de 2 colonnes de Y^* et le produit scalaire des colonnes correspondantes de \widehat{Y}^* . Ces produits scalaires peuvent avoir des valeurs absolues très élevées de sorte que les composantes de S_{22} sont obtenues par différence entre deux produits scalaires possiblement très élevés. L'erreur relative – due aux arrondis inévitables de calcul – sur les composantes de S_{22} peut alors être très importante et conduire à des sommes de carrés non significatives (voire négatives!)

On peut déterminer S_{22} d'une autre manière puisque :

$$S_{22} = {}^t (Y^* - \widehat{Y}^*) (Y^* - \widehat{Y}^*) \quad (A.4)$$

Cette façon de calculer S_{22} constitue le second mode de calcul de VANED et est appelée «amélioration systématique de la précision». Pour cela, on calcule systématiquement après le pivotage d'une colonne de tX_1X_1 , $\widehat{Y}^* = X_1({}^tX_1X_1)^{-1}{}^tX_1Y^* = X_1S_{12}$. Les composantes de S_{22} sont obtenues en effectuant le produit ${}^t(Y^* - \widehat{Y}^*)(Y^* - \widehat{Y}^*)$, les éléments des colonnes $Y^* - \widehat{Y}^*$ étant généralement assez petits. L'erreur relative sur les composantes de S_{22} est donc moindre par rapport à celle du mode de calcul classique. Cette conclusion suppose cependant que les erreurs relatives d'arrondi sur \widehat{Y}^* sont elles-même faibles. Ce second mode de calcul doit être mis en œuvre progressivement pour chacun des pivots diagonaux de tX_1X_1 . Il nécessite évidemment, à la fois, plus de temps de calcul (multiplié par 10 pour l'exemple proposé) et plus de place mémoire (stockage de \widehat{Y}^*).

Le troisième mode de calcul, appelé «amélioration conditionnelle de la précision» constitue un mode intermédiaire entre les deux modes décrits précédemment. Dans la mesure où l'«amélioration systématique» est très coûteuse en temps de calcul, nous allons la faire à partir du moment où la somme résiduelle des carrés calculée par la méthode de pivotage-dépivotage est un zéro informatique.