Plans d'Expériences et de Simulations: Applications aux microtechnologies

François de Crécy

francois.decrecy@cea.fr

Plan de l'exposé

- Pourquoi des plans d'expériences ou de simulations ?
- Les plans d'expériences
- Les plans de simulations
- Recommandations et conclusions

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

Leti

Pourquoi ?

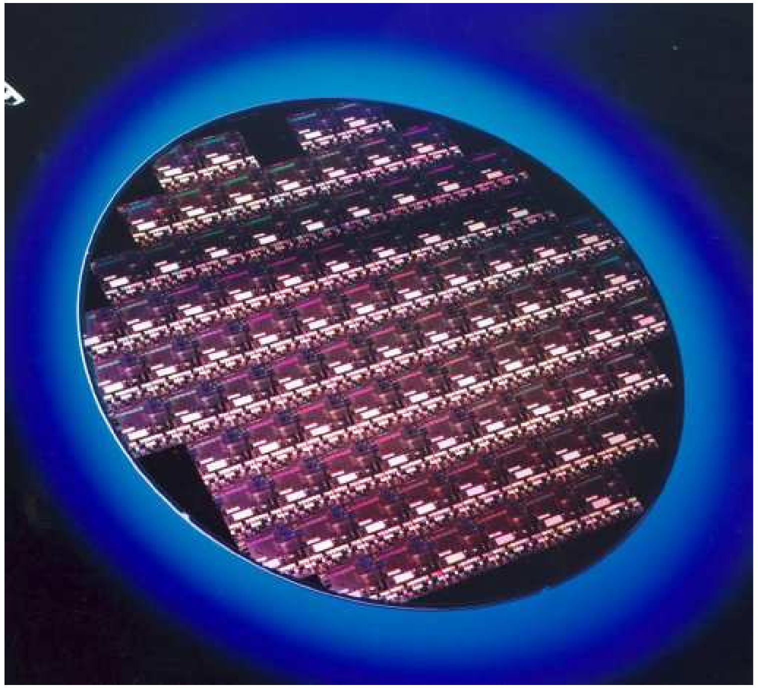
Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

Plan de l'exposé

- Pourquoi des plans d'expériences ou de simulations ?
  - Objectifs
  - Domaine d'application



© Artechnique

- Les plans d'expériences

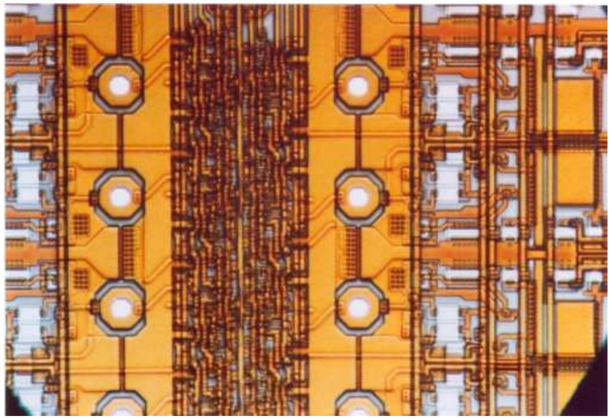
- Les plans de simulations

- Recommandations et conclusions

Pourquoi des plans d'expériences ou de simulations ?

- Objectif : Planifier, puis analyser, une série d'expériences ou de simulations dans le but de :
  - **Maximiser la qualité et la quantité d'informations extraites d'un nombre minimal d'essais ou de calculs**
  - Approximer les réponses par des métamodèles* dont la fiabilité est quantifiée
  - Aider à comprendre
  - Visualiser
  - Optimiser
  - Statistiques …

© Artechnique



En tenant compte de ce que l'on sait déjà (points déjà existants, modèles physiques simplifiés, acquis antérieurs, …)

**Métamodèle: fonction analytique, sans prétentions physiques, rapide à calculer par ordinateur, approximant une réponse en fonction de d facteurs (variables "explicatives"), valable dans un certain domaine de R^d ("modèle empirique").*

Domaine d'application des plans d'éxpériences ou de simulations

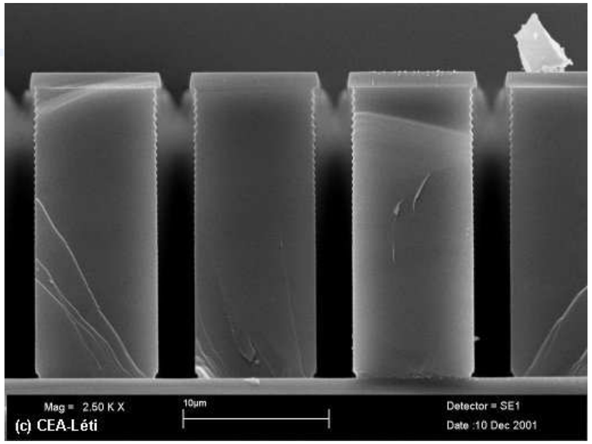
Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

© CEA-Léti

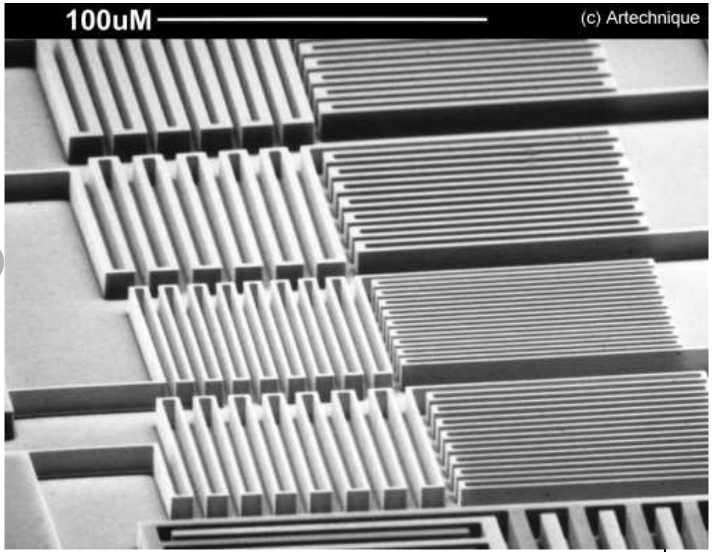


- Réponses scalaires:
  - autant de réponses que souhaité.
- de 1 à 10 (exp) ou de 3 à 20 (simuls) facteurs:
  - facteurs **continus**, **discrets** ou catégoriels.
- Le nombre d'expériences ou de simulations à faire dépend du nombre de facteurs et de l'objectif de l'étude.
- Choix des réponses et des facteurs tel que le phénomène soit espéré continu et lisse.
- Expériences: Prise en compte de la variabilité du process et des mesures.

Facteur = "variable explicative" = entrée *Réponse = "variable à expliquer" = sortie*

Plan de l'exposé

- Pourquoi des plans d'expériences ou de simulations ?
- Les plans d'expériences
  - Le modèle statistique et métamodèle
  - Les plans classiques
  - Evaluation et analyse du plan
  - Spécificités pour les microtechnologies et logiciels
- Les plans de simulations
- Recommandations et conclusio



© Artechnique

Pourquoi ?
Plans d'expériences
métamodèle
Plans classiques
évaluation
Spécificités logiciels
Plans de simulations
Conclusions

Les plans d'expériences : le modèle statistique

La réponse expérimentale est supposée être la somme d'une réponse certaine (non aléatoire) mais inconnue et d'une fonction aléatoire :

$$Y_{exp} = G(x_1, x_2, \ldots, x_d) + \varepsilon$$

Réponse expérimentale

Fonction inconnue qu'on va chercher à approximer par F

Facteurs supposés parfaitement mesurables (sans incertitude)

Fonction aléatoire représentant l'incertitude de mesure, l'effet des facteurs non pris en compte, la variabilité "naturelle" du phénomène,…

Objectif : approximer la fonction G inconnue par un métamodèle *F* *dans un certain domaine d'intérêt dans R^d.*

Le plus souvent, *F* est une fonction polynomiale de degré total 1 ou 2
Parfois, *F* est une fonction "physique" dépendant de coefficients ajustables.
Parfois, *F* est une fonction spline.

On veut aussi connaître et optimiser la qualité de l'approximation de G par *F*

- Trouver la meilleure approximation possible de G par *F*
- Connaître l'écart probable entre *F* et G

Le métamodèle sous-jacent

On fait presque systématiquement l'hypothèse qu'il existe un modèle analytique dont la forme est connue a priori et dont les coefficients sont inconnus.

$x_1, x_2, \ldots, x_d$: d **facteurs** supposés parfaitement contrôlables

Très souvent :

$$Y = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \underbrace{f_k(x_1, x_2, \ldots, x_d)} + \varepsilon$$

Réponse expérimentale

m **coefficients** inconnus, à déterminer

m fonctions "candidates" dont la forme est donnée a priori = **« effets »**

Variable aléatoire représentant le "bruit", l'incertitude de mesure

Un tel modèle est linéaire par rapport aux coefficients λ_k .

Toutes les fonctions linéaires, multilinéaires, avec interactions ou polynomiales en x_1, x_2, … , x_d peuvent se mettre sous cette forme.

Le métamodèle sous-jacent

Pourquoi ?

Plans d'expériences

métamodèle

Plans classiques

évaluation

Spécificités logiciels

Plans de simulations

Conclusions

N expériences: N réalisations de la réponse

Fonction F : métamodèle

$$\overbrace{Y_i = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \overbrace{f_k(x_{i,1}, x_{i,2}, \ldots, x_{i,d})}^{\text{effet}}}^{\text{Fonction F : métamodèle}} + \varepsilon_i$$

Pour i=1 à N , N >= m

Hypothèses sur le bruit :

- ✓ Hyp. 1 : indépendance des expériences $cov(\varepsilon_i,\varepsilon_j)=0$
- ✓ Hyp. 2 : pas d'autres erreurs systématiques $E(\varepsilon_i)= 0$
- ✓ Hyp. 3 : isovariance, amplitude constante du "bruit" $var(\varepsilon_i)=\sigma^2$

σ, l'amplitude du bruit, est inconnu a priori.

Souvent, on fait aussi l'hypothèse de la <u>normalité</u> du bruit, ce qui justifie les approches "aux moindres carrés" par le maximum de vraisemblance.

Il y a aussi moyen de s'en sortir si Hyp. 3 n'est pas vérifiée …

Le métamodèle polynomial

$$Y_i = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \underbrace{f_k(x_{i,1}, x_{i,2}, \ldots, x_{i,d})}_{\textit{effet } k} + \varepsilon_i$$

Pour i=1 à N , N >= m

Pourquoi ?

Plans d'expériences

métamodèle

Plans classiques

évaluation

Spécificités logiciels

Plans de simulations

Conclusions

Ce métamodèle n'est pas un modèle physique !

Il faut mettre le maximum de la physique connue par ailleurs dans le choix de la ou des réponses, des facteurs contrôlés, des effets f_k , …

Si on ne connaît a priori rien à la physique du phénomène : polynômes

$$Y_i = \lambda_0 + \sum_{k=1}^{d} \lambda_k x_{i,k} + \varepsilon_i$$

Modèle multilinéaire par rapport aux facteurs x_k
Criblage = Screening

$$Y_i = \lambda_0 + \sum_{k=1}^{d} \lambda_k x_{i,k} + \sum_{k<j} \lambda_{kj} x_{i,k} x_{i,j} + \varepsilon_i$$

Modèle linéaire avec interactions

$$Y_i = \lambda_0 + \sum_{k=1}^{d} \lambda_k x_{i,k} + \sum_{k<j} \lambda_{kj} x_{i,k} x_{i,j} + \sum_{k=1}^{d} \lambda_{kk} x_{i,k}^2 + \varepsilon_i$$

Modèle quadratique avec interactions
Surfaces de réponses

On utilise parfois des polynômes de degré supérieur

Ces modèles polynomiaux peuvent être vus comme des développements de Taylor d'ordre 1 ou 2

Le métamodèle polynomial

La forme du modèle étant choisie a priori, l'objectif de la phase de conception du plan est de:

- Obtenir les meilleures estimations possibles des coefficients λ avec le nombre minimum d'essais,
- Avoir une estimation de l'incertitude (écart-type) des coefficients λ et de leurs coefficients de corrélation
- Faibles écart-types et faibles coefficients de corrélation
- Identifier les coefficients λ vraiment utiles, c'est-à-dire significativement différents de 0 pour simplifier au maximum le modèle

- Avoir une estimation de σ, l'incertitude résiduelle (amplitude du "bruit")

La théorie statistique montre que ces objectifs conduisent à mettre la grosse majorité des points sur la frontière du domaine

leti

Pourquoi ?

Plans d'expériences

métamodèle

Plans classiques

évaluation

Spécificités logiciels

Plans de simulations

Conclusions

Le métamodèle polynomial: incertitudes sur les coefficients

Les coefficients du modèle peuvent être considérés comme des variables aléatoires dont on cherche la moyenne et la matrice de variance-covariance.

La théorie statistique permet d'obtenir des estimations des coefficients λ mais aussi des estimations des écart-types et des coefficients de corrélation autour de ces estimations

$$\mathbf{Var(\lambda) = \sigma^2 (X^tX)^{-1}}$$

La matrice X ne dépend que du type de modèle et des effets choisis pour les N essais.

Elle a m colonnes (m effets) et N lignes (N essais)

matrice de variance-covariance de λ

*La matrice X^tX est une matrice m*m, nommée matrice d'information.*

Plan "orthogonal" : les matrices X^tX et $(X^tX)^{-1}$ sont diagonales.

Cette matrice de covariance $Var(\lambda)$ dépend principalement des facteurs (matrice X) et très peu des réponses (uniquement par l'intermédiaire du terme proportionnel σ^2).
Les coefficients de corrélation ne dépendent pas du tout des réponses. Un plan d'expérience bien conçu cherche aussi à minimiser la valeur absolue de ces coefficients de corrélation.

La variance de l'estimateur F(**x**) , relatif à l'écart probable entre F(**x**) et G(**x**), au point **x** (vecteur des m effets), vaut:

$$\mathbf{Var(F(x)) = \sigma^2 \underbrace{x^t (X^tX)^{-1} x}_{\textit{Standard Error of Design}}}$$

cea

Pourquoi ?

Plans d'expériences

métamodèle

Plans classiques

évaluation

Spécificités logiciels

Plans de simulations

Conclusions

Influence du choix des essais

Exemple d'un modèle multilinéaire à 3 facteurs :

- Plan "une variable à la fois" → $Var(\lambda) = 2\sigma^2$
- Meilleur plan (factoriel fractionnaire en 2^{3-1}) → $Var(\lambda) = \sigma^2/4$

Gain d'un facteur 8 sur la variance pour le même nombre d'essais !

Importance d'avoir des "répétés" pour une meilleure estimation du σ^2

Distinguer le "manque d'ajustement" de "l'erreur pure"

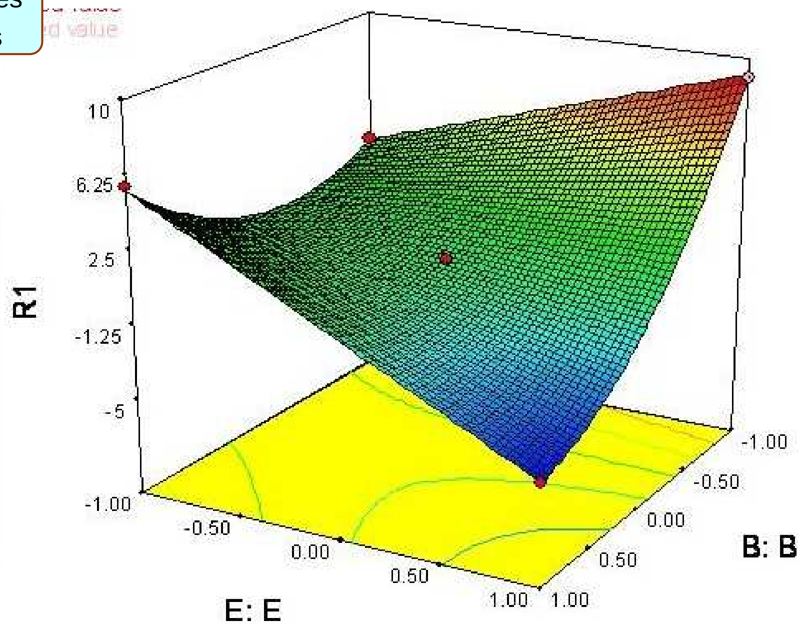
Des plans classiques

- **Criblage** : modèle multi-linéaire par rapport aux facteurs x_k, nombreux facteurs en peu d'essais

  Taguchi, $2^{(k-p)}$ de résolution III , Plackett-Burman

- Modèle linéaire avec interactions → $2^{(k-p)}$ de résolution V

- **Surface de réponse** : modèle quadratique avec interactions
  - Box_Behnken, Composite Centré, Doehlert, …



Recherche d'un optimum : plans en surface de réponse fortement conseillés !
Sinon, l'optimum sera forcément en frontière du domaine.

Pourquoi ?
Plans d'expériences
métamodèle
Plans classiques
évaluation
Spécificités logiciels
Plans de simulations
Conclusions

Leti

Pourquoi ?

Plans d'expériences

métamodèle

Plans classiques

évaluation

Spécificités logiciels

Plans de simulations

Conclusions

Criblage → Surface de réponse

Exemple : 10 à 30 facteurs potentiellement actifs

Beaucoup trop pour faire un plan en surface de réponse et prendre en compte les interactions !

1ère étape : Plan de **criblage (screening)** : seulement d+1 coeff à déterminer.
Uniquement les **effets linéaires** sont recherchés.

Réalisation des essais

2ème étape : Sélection des facteurs les plus **significatifs** (5 à 6 maxi)
On fait l'hypothèse (osée ?!) que les interactions ou les effets quadratiques n'apparaîtront que pour les facteurs où les effets linéaires sont significatifs.

3ème étape : Construction d'un plan en **surface de réponse** pour avoir une bonne description du phénomène en utilisant les expériences déjà faites pour le plan de criblage..

Réalisation des essais

4ème étape : Construction de la **surface de réponse**

Pourquoi ?
Plans d'expériences
métamodèle
Plans classiques
évaluation
Spécificités logiciels
Plans de simulations
Conclusions

Les plans D-optimaux

Technique puissante dans un grand nombre de cas:

- On a déjà un certain nombre de points expérimentaux, et on veut les compléter

et/ou

- On sait a priori que le modèle recherché n'est pas un modèle classique: certains effets sont exclus a priori

et/ou

- Il y a des contraintes sur le domaine expérimental: certaines zones sont impossibles

et/ou

- Les points expérimentaux ne peuvent être choisis que dans un certain ensemble de points candidats

et/ou

- Le nombre maximal d'essais est inférieur à celui nécessaire pour les plans classiques

Principe: minimiser $\det((X^t X)^{-1})$ ou X est la matrice des effets

X : N lignes (essais) et m colonnes (effets)

Inconvénients: plans non orthogonaux, fort leverage de certains points, comportement différents des divers effets.

Plans non orthogonaux : les coefficients λ ne sont pas indépendants.

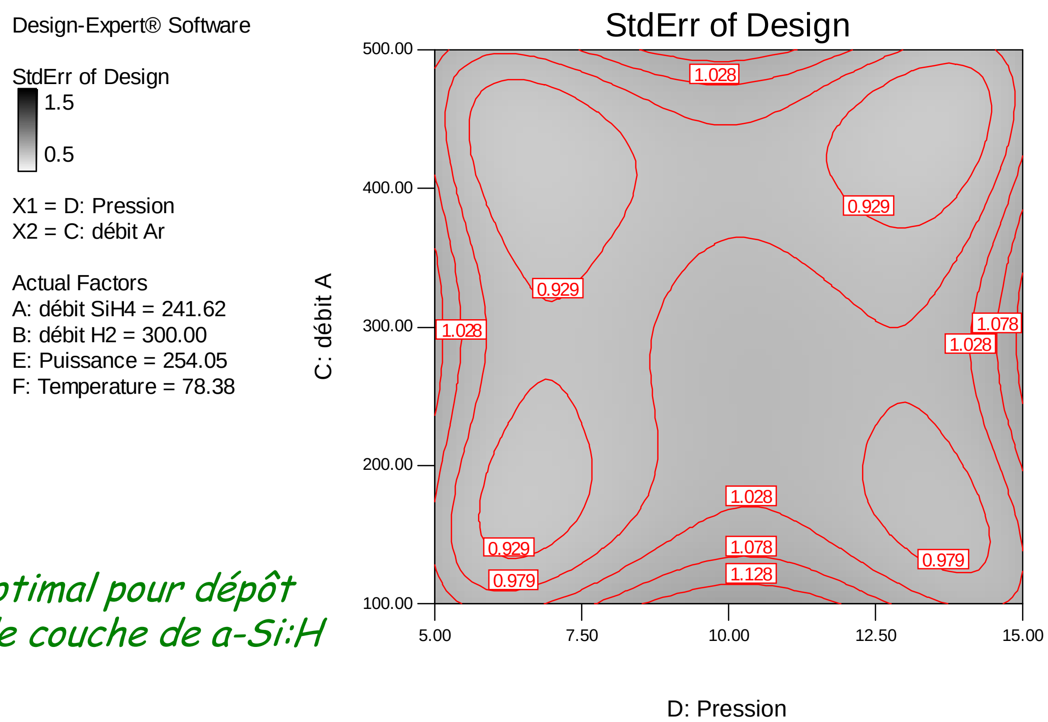
Comment évaluer un plan d'expériences ?

Pourquoi ?
Plans d'expériences
métamodèle
Plans classiques
évaluation
Spécificités logiciels
Plans de simulations
Conclusions

Avant la réalisation des essais: quantifier la pertinence des essais à réaliser

- Alias : peut-on bien distinguer tous les effets ?
- Ecart-types et coefficients de corrélations des coefficients λ_k
- Leverage: effet de levier : quantifie l'influence de chaque essai sur le modèle global
- Std Error of design, ….

Courbes de niveaux montrant la Std Error of Design fonction de deux facteurs, les autres facteurs étant fixés



Plan D-optimal pour dépôt PECVD de couche de a-Si:H

Comment analyser un plan d'expériences ?

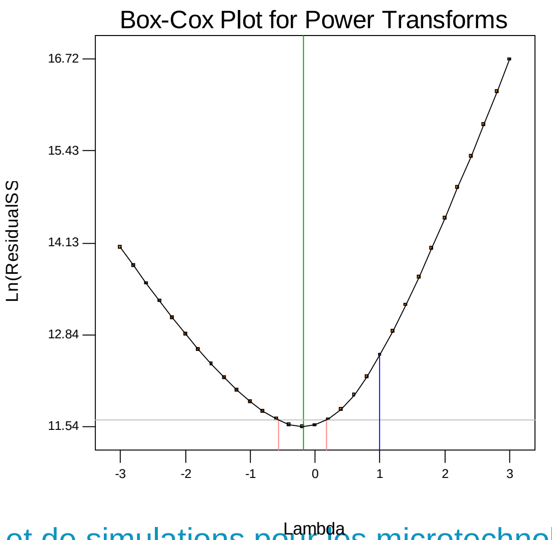
Après la réalisation des essais: évaluer la qualité du métamodèle

- Régression aux moindres carrés pour avoir les λ_k et Var(λ)
- Sélectionner les effets significativement différents de 0.0
  - Backward or stepwise regression, Analyse de la variance, F test.
- σ, R^2, $R^2_{ajusté}$, $R^2_{prédit}$, *quantifie l'aptitude du métamodèle à la prédiction de nouveaux points*
- Identifier et vérifier les outliers *(points aberrants ??)*
- Normalité des résidus: droite de Henry ou autres tests
- Tester des transformations de la réponse : Box-Cox plot

Design-Expert® Software
Rmax/Rmin

Lambda
Current = 1
Best = -0.18
Low C.I. = -0.57
High C.I. = 0.18

Recommend transform:
Log
(Lambda = 0)



Transformation de la réponse en R^λ : influence de λ sur la variance résiduelle

$R^2_{prédit} = 1 - (V_{CV}/V_{totale})$
V_{totale} = variance totale
V_{CV} = variance de validation croisée
Variance de validation croisée: somme des carrés des écarts entre la réponse expérimentale du point i et la réponse prévue en ce point i par le même type de métamodèle bâti sur les N-1 autres points.

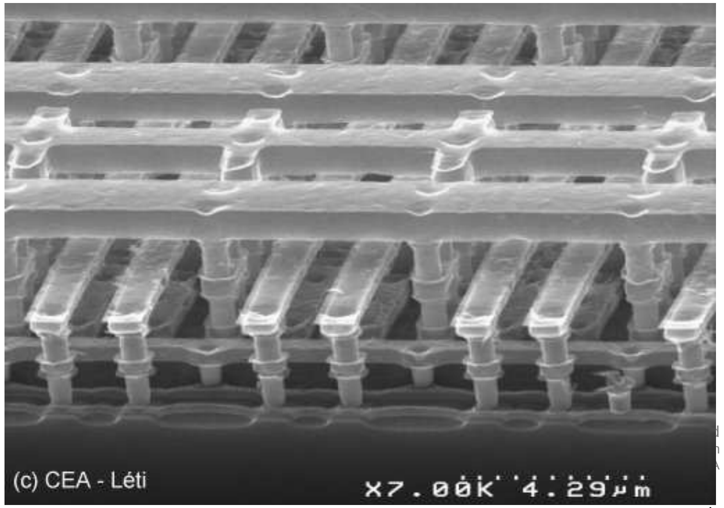
Pourquoi ?
Plans d'expériences
métamodèle
Plans classiques
évaluation
Spécificités logiciels
Plans de simulations
Conclusions

Spécificités pour les microtechnologies

- Souvent par lot de 25 plaques
- Souvent des connaissances antérieures

} Plans D-optimaux fréquents

- Certains facteurs (exemple: dopage) varient sur une large gamme → Transformation LOG
- Certaines réponses sont souvent fortement bruitées (exemple: homogénéité de dépôt ou de gravure) → Une transformation LOG améliore souvent le modèle
- Très généralement plusieurs réponses → Optimisation simultanée multiréponse



Pourquoi ?

Plans d'expériences

métamodèle

Plans classiques

évaluation

Spécificités logiciels

Plans de simulations

Conclusions

Logiciels de plans d'expériences

- Il existe de nombreux logiciels de plans d'expériences, commerciaux, en freeware ou intégrés à des logiciels généralistes de statistiques

Design Expert, Moddé, Lumière, Echip, JMP, …

Statistica, Statgraphics,…

Etapes classiques

1. Conception du plan
2. Evaluation des propriétés statistiques

   Leverage, matrices de corrélation, incertitudes, FDS,
3. Réalisation des essais
4. Analyse, construction du métamodèle, stepwise regression,

   R^2 prédit, transformation des réponses, …
5. Visualisation, optimisation, …

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Interpolation métomodèle

Remplissage d'espace

Krigeage

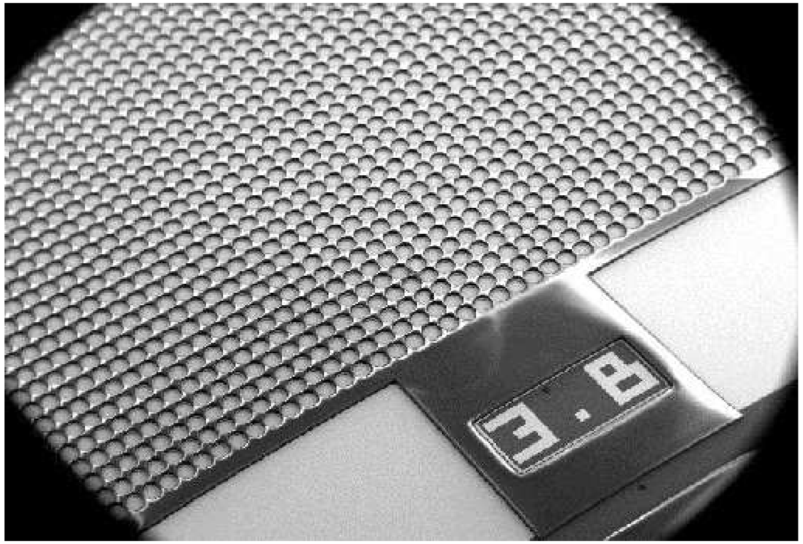
Splines

Sobol

Conclusions

Plan de l'exposé

- Pourquoi des plans d'expériences ou de simulations ?
- Les plans d'expériences
- Les plans de simulations
  - Métamodèle d'interpolation
  - Type de plan et remplissage d'espace
  - Krigeage
  - Splines
  - Indices et fonctions de Sobol
- Recommandations et conclus



Différences par rapport aux expériences

Logiciel déterministe: parfaite reproductibilité

→ Le métamodèle devrait passer par tous les points

→ **Interpolation**

- Souvent, il y a de nombreux paramètres à faire varier.
  - 10 à 20 paramètres sont fréquents.
  - Certains paramètres sont beaucoup plus influents que d'autres, mais on ne sait pas a priori lesquels.
- Le nombre de simulations réalisables est très variable
  - Tout dépend du temps CPU de chaque simulation.

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Interpolation métomodèle

Remplissage d'espace

Krigeage

Splines

Sobol

Conclusions

Quel type de plan choisir ?

- D'abord déterminer le nombre maximal raisonnable **N** de simulations faisables et identifier les **d** facteurs (paramètres) à faire varier et les gammes de variation.

- Si **N < (d+1)*(d+2)/2** ou du même ordre de grandeur: Utiliser les techniques classiques de construction de plans de vraies expériences.

- Si **N >> (d+1)*(d+2)/2** : Utiliser des techniques mixtes de **remplissage de l'espace** ("space filling design") + quelques points sur les frontières du domaine
  - Le principe est de faire en sorte qu'aucun point du domaine exploré dans R^d ne soit trop éloigné d'un point de simulation.
  - + un plan factoriel fractionnaire en 2^{k-p} (si possible de résolution au moins IV) ou un plan de Box-Behnken pour 8% à 20% des points

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Interpolation métomodèle

Remplissage d'espace

Krigeage

Splines

Sobol

Conclusions

Pourquoi du remplissage d'espace ?

- Aucun points du domaine à explorer (généralement un pavé dans R^d) ne doit être trop éloigné d'un point du plan de simulation.
- L'expérience montre que très souvent seulement un nombre restreint de paramètres ont de forts effets non-linéaires.
  - La projection des points sur l'axe, le plan ou l'hyper-plan associés aux paramètres qui ont les plus forts effets non-linéaires est densément répartie, **sans projection multiple sur un même point.**
  - Le remplissage d'espace permet de bien appréhender ces effets non-linéaires

Pou
d'ex
Plans de simulations
Interpolation métomodèle
Remplissage d'espace
Krigeage
Splines
Sobol
Conclusions

Remplissage de l'espace

- Points aléatoirement répartis
  - Technique très simple, mais déconseillée.
  - Il y a généralement des points proches les uns des autres et des grandes zones sans points.

- Hyper-cubes Latins "**MaxiMin**" ou "MiniMax"

  MaxiMin : maximisation de la distance minimale entre les points du plan.

- Suites à faible discrépances
  - Suite à d dimensions à comportement pseudo aléatoire.
  - **Halton**, Faure, Sobol, …
  - Faciles et rapides à générer.
  - Pas de points très proches et moins de grandes zones vides.

Plan à 100 points aléatoires uniformes

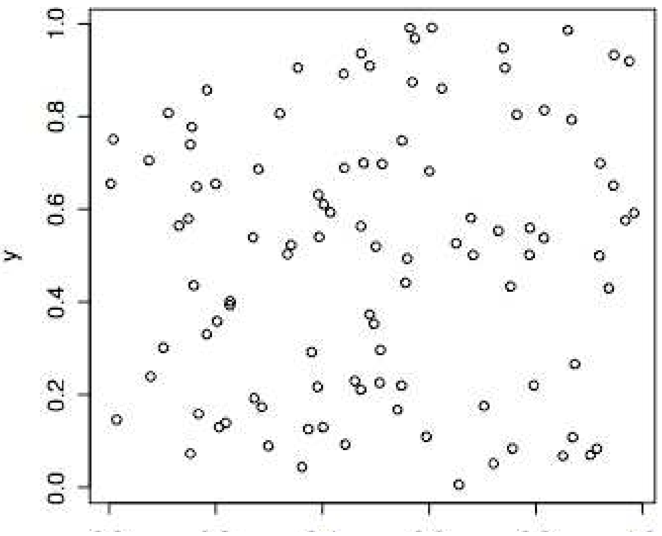


figure O. Roustant, EMSE

100 premiers points d'une suite de Halton en bases 2 et 3

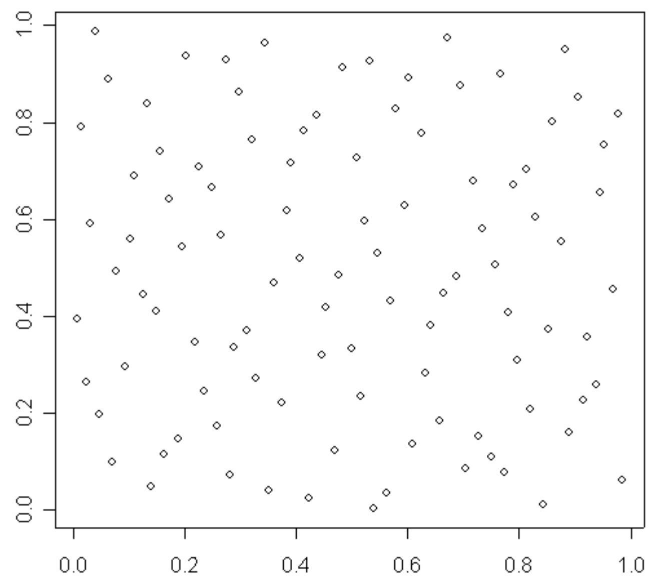


figure O. Roustant, EMSE

Quel type de métamodèle d'interpolation ?

- Polynômes déconseillés
- Mes recommandations : krigeage ou splines
- Krigeage (ordinaire, universel, …):
  - Approche statistique
  - Classique, largement utilisée dans la littérature
  - Principal avantage : fournit un intervalle de confiance en tous points de l'espace
- Splines:
  - Approche énergétique
  - Plus simple d'emploi.
  - Plus précis, plus rapide à calculer, plus stable numériquement.

Principe du krigeage

- Une fonction de base très simple (les termes de tendance)
- Un bruit "figé" est ajouté dessus: amplitude constante, fonction de corrélation entre deux points qui ne dépend que d'une certaine distance entre ces points.

Krigeage (1/3)

- Basé sur une fonction de corrélation $r(x, x_i)$ entre le point courant x et x_i, le i[ème] point d'apprentissage
  - $r(x,x_i)$ doit valoir 1.00 quand $x = x_i$, décroître quand x s'éloigne de x_i, tendre vers 0 quand $x - x_i$ → ◎ et ne jamais être négatif.
  - Souvent : $r(x,x_i) = \exp\left[-\sum_{k=1}^{d}\left(\frac{x^{(k)} - x_i^{(k)}}{\theta_k}\right)^2\right]$ d : dimension de x
  - Les "portées" θ_k seront à optimiser, ce qui est consommateur en CPU

- Le métamodèle est : $$f(x) = \underbrace{\sum_{j=1}^{p}\beta_j\, g_j(x)}_{\text{termes de tendance}} + \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\, r(x,x_i)$$

Les p fonctions $g_j(x)$ sont choisies a priori par l'utilisateur.

Krigeage (2/3)

$$f(x) = \sum_{j=1}^{p} \beta_j \, g_j(x) + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \, r(x, x_i)$$

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Interpolation métomodèle

Remplissage d'espace

Krigeage

Splines

Sobol

Conclusions

Les paramètres β_j et λ_i sont donnés par la résolution d'un système linéaire de taille n

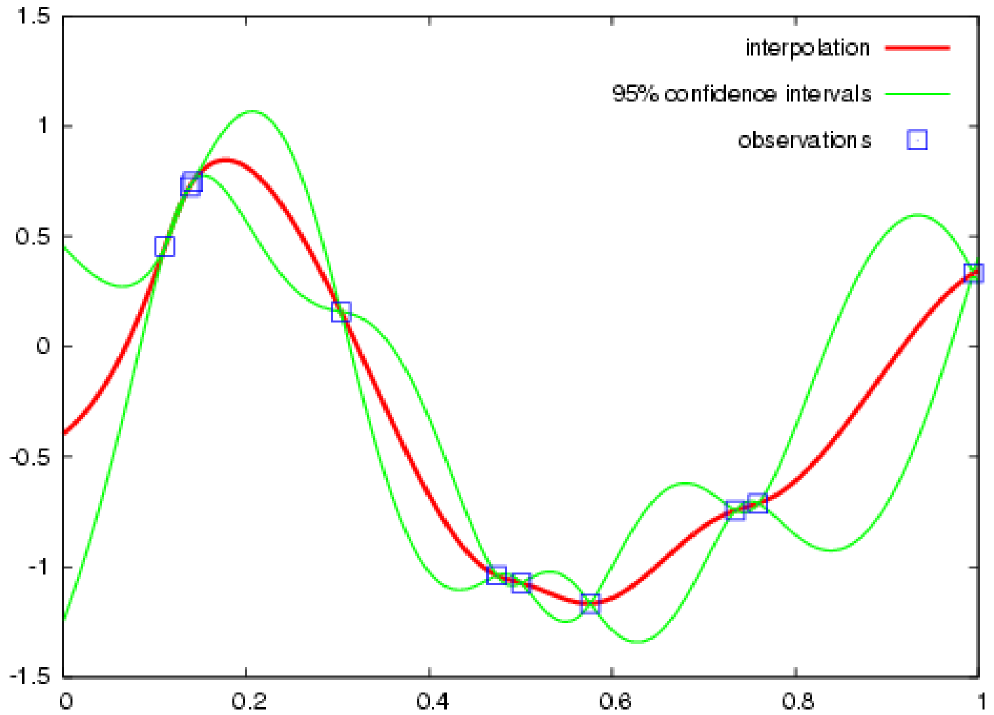
Les d portées θ_k sont optimisées par un processus itératif de maximisation de la vraisemblance, par validation croisée ou par BootStrap.

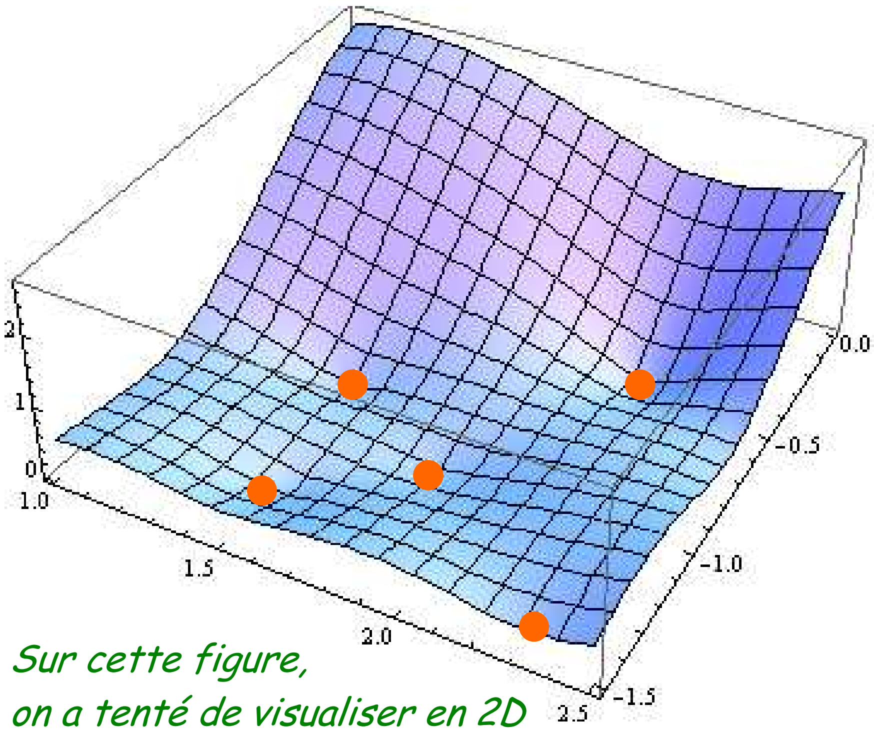
Chaque étape de ce processus itératif nécessite la résolution d'un système linéaire n*n avec p+2 seconds membres et quelques multiplications de matrices …

Krigeage (3/3) et intervalles de confiance

Pourquoi ?

Le gros avantage du krigeage est de pouvoir fournir en chaque point interpolé ou extrapolé un écart-type autour du métamodèle (valeur best-estimate).





Sur cette figure,
on a tenté de visualiser en 2D
l'évolution de l'écart-type autour du modèle
au voisinage des points de simulation

Conclusions

Inconvénient: chaque estimation d'intervalle de confiance nécessite la multiplication de matrices n*n et n*p, après une première inversion de matrice.

Quel type de splines ?

- Spline multidimensionnelle d'interpolation pseudo-cubique type "Plaque mince"

- C'est **la** fonction mathématique d'interpolation qui minimise une certaine énergie de courbure:

$$E_c = \iiint_{R^d} \sum_{k=1}^{d} \sum_{l=1}^{d} \left[F\left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial t^{(k)} \partial t^{(l)}} \right\}(u) \right]^2 \|u\|^{d-1} du_1 du_2 \ldots du_d$$

- *C'est le cas limite d'une spline de lissage quand la variance résiduelle tend vers zéro.*

- Caractérisée par:

$$f(X) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \|X - X_i\|^3 + \sum_{k=1}^{d} \alpha_k x^{(k)} + \alpha_o$$

$$\|X - X_i\|^2 = \sum_{k=1}^{d} dil_k^2 \left(\frac{x^{(k)} - x_i^{(k)}}{\sigma_k} \right)^2$$

dilatations d'échelle

écart type du $k^{\text{ème}}$ paramètre

Pourquoi ?
Plans d'expériences
Plans de simulations
Interpolation métomodèle
Remplissage d'espace
Krigeage
Splines
Sobol
Conclusions

Comment déterminer la spline ?

- Pour des dilatations d'échelles données, les coefficients λ_i et α_j sont solution d'un système linéaire symétrique (n+d+1). Le premier membre de ce système ne dépend que de la position des points, pas de la valeur de la réponse.

- Ce système est généralement bien conditionné numériquement, sauf dans les cas où il y a des points confondus ou extrêmement proches les uns des autres.

- Loin des simulations, la spline tend localement vers un hyperplan.

Dilatations d'échelles des splines ?

$$\prod_{k=1}^{d} dil_k = 1$$

Les dilatations d'échelles dil_k mesurent l'importance des effets non linéaires. Elles sont obtenues de manière itérative.

- par validation croisée généralisée
- par BootStrap (ou JackKnife):
  - *on partitionne l'ensemble des n simulations en B parties.*
  - *on supprime provisoirement les points de 1ère partie et on calcule la spline sans ces points.*
  - *on utilise cette spline que pour calculer la somme des carrés des écarts entre la spline et les points provisoirement supprimés.*
  - *on réintègre les points de cette partie et on fait de même avec les parties suivantes.*
- On itère sur ces dilatations d'échelle pour minimiser la somme de tous ces carrés

→ ***Variance de BootStrap***

$$R^2_{BootStrap} = 1 - (Variance_{BootStrap} / Variance_{totale})$$

R^2 BootStrap sert à quantifier l'aptitude de la spline à prédire de nouveaux points

Une méthode a été développée au Léti pour optimiser plus facilement ces dilatations d'échelles.

Splines vs Krigeage

- **Avantages du Krigeage:**
  - **Possibilité d'avoir une estimation de l'incertitude ou un intervalle de confiance en chaque point.**
  - Classique et bien connu.
  - Théorie basée sur des considérations **statistiques**.
  - Applicable jusqu'à environ 1000 simulations.
  - Loin des simulations, tend vers les seuls termes de tendance.

- **Avantages des splines**
  - Souvent **plus précis** sur des cas tests.
  - **Plus stable numériquement**.
  - Théorie basée sur des considérations **énergétiques**.
  - Applicable jusqu'à environ 5000 simulations.
  - Plus économe en temps CPU.
  - Loin des simulations, tend localement vers un hyperplan

Indices et fonctions de Sobol

Pourquoi ?
Plans d'expériences
Plans de Remplissage d'espace
Krigeage
Splines
Sobol
Conclusions

Krigeage ou spline fournissent un métamodèle dans un espace à 10 à 20 dimensions.

Comment identifier les facteurs, les interactions réellement influents ?
Comment les visualiser ?

→ **Indices et fonctions de Sobol**

Toute fonction intégrable de d variables peut se mettre sous la forme :

$$f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_d) = \underbrace{f_0}_{\text{moyenne}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{d} f_i(x_i)}_{\text{Ordre 1}} + \underbrace{\sum_{i<j} f_{i,j}(x_i, x_j)}_{\text{Ordre 2}} + \underbrace{\sum_{i<j<k} f_{i,j,k}(x_i, x_j, x_k)}_{\text{Ordre 3}} + \dots + \underbrace{f_{1,2,3,\dots\dots,d}(x_1, x_2, x_3, \dots\dots, x_d)}_{\text{Ordre d}}$$

Les diverses fonctions de Sobol sont de moyennes nulles et orthogonales entre elles :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{i_1,\dots,i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) \cdot p_{i_k}(x_{i_k}) \cdot dx_{i_k} = 0$$

Fonctions de pondération ou loi de densité de probabilité

$$\int f_{i_1,\dots,i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) \cdot f_{j_1,\dots,j_m}(x_{j_1}, \dots, x_{j_m}) \cdot \prod p_i(x_i) \cdot dX = 0$$

si au moins un des indices $i_1, \dots, i_s, j_1, \dots, j_m$ n'est pas répété

•[SOBOL 93]: SOBOL I.M. "Sensitivity analysis for non-linear mathematical models" - Mathematical Modeling & Computational Experiment, 1993

Indices et fonctions de Sobol

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Interpolation métomodèle

Remplissage d'espace

Krigeage

Splines

Sobol

Conclusions

La variance totale est :

$$V_{total} = \int_{R^d} \left(f(x_1, ..., x_d) - f_0 \right)^2 \cdot p(x_1) \cdot \dots \cdot p(x_d) \cdot dx_1 \cdot \dots \cdot dx_d$$

La variance expliquée par une fonction de Sobol particulière est :

$$V_{i_1, ..., i_s} = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(f_{i_1, ..., i_s}(x_{i_1}, ..., x_{i_s}) \right)^2 \cdot p(x_{i_1}) \cdots p(x_{i_s}) \cdot dx_{i_1} \cdot \dots \cdot dx_{i_s}$$

La variance totale est la somme des variances expliquées par chaque fonction de Sobol:

$$V_{total} = \sum_{i=1}^{d} V_i + \sum_{1 \le i < j \le d} V_{i,j} + \sum_{1 \le i < j < k \le d} V_{i,j,k} + \quad .... \quad + V_{1,2,....,d}$$

L'indice de Sobol est le ratio de la variance expliquée par la fonction sur la variance totale:

$$S_{i_1, ..., i_s} = \frac{V_{i_1, ..., i_s}}{V_{total}}$$

La somme de tous les indices de Sobol vaut donc 1.00

Les indices de sensibilité globaux : Somme de tous les indices faisant intervenir le facteur i :

$$T_i = S_i + \sum_{i<j} S_{i,j} + \sum_{j<i} S_{j,i} + \cdots + S_{1,2,....,d}$$

Indices et fonctions de Sobol

Dans le cas général, le calcul analytique des fonctions de Sobol n'est pas tractable.
Des méthodes de Monte-Carlo permettent d'en avoir des approximations.

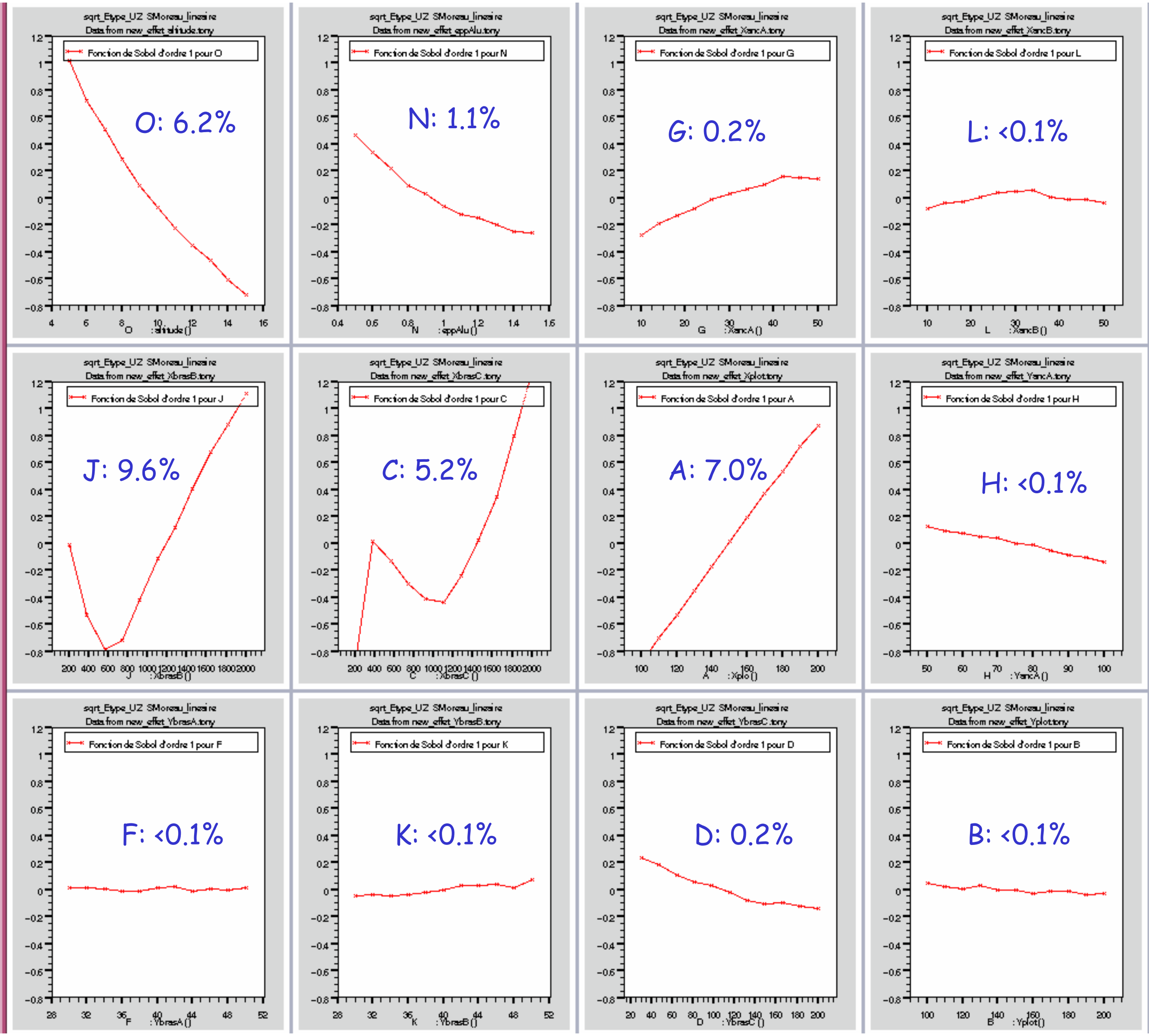
Analyse de sensibilité globale par indices de Sobol														
==														
Valeur moyenne de la spline sur le domaine étudié :	4,83					Nombre de tirages Monte-Carlo réalisés :				100000				
Variance de la spline sur le domaine étudié :	3,63													
ce qui correspond à un écart type de :	1,91													
Caractere associé à la variable :	A	B	C	D	E	F	G	H	J	K	L	M	N	O
Type de loi de probabilité associé à la variable :	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme	Uniforme
Moyenne de la variable :	150	150	1100	115	1100	40	30	75	1100	40	30	20	1	10
Ecart-type (N) ou demi-étendue (U) de la variable :	50	50	900	85	900	10	20	25	900	10	20	10	0,5	5
% de la variance expliquée par cette variable seule	7,0	-0,2	5,2	0,2	2,0	-0,2	0,2	-0,1	9,6	-0,2	-0,2	-0,2	1,1	6,2
Dilatation d'échelle associée à cette variable	0,449	0,189	9,430	0,825	7,807	0,254	1,134	0,363	6,260	0,276	0,968	0,471	1,286	1,832
	Xplot	Yplot	XbrasC	YbrasC	XbrasA	YbrasA	XancA	YancA	XbrasB	YbrasB	XancB	YancB	eppAlu	altitude
Indices de Sobol de 2ème ordre :														
===============================														
variance expliquée par l'interaction de 2 variables														
Caractere associé à la variable :	A	B	C	D	E	F	G	H	J	K	L	M	N	O
% de la variance expliquée par l'interaction avec A:	0,0	0,2	0,2	0,2	0,5	0,2	0,3	0,2	0,9	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec B:	0,2	0,0	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,3	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec C:	0,2	0,2	0,0	0,3	17,1	0,2	0,3	0,3	18,0	0,2	0,3	0,2	0,4	0,8
% de la variance expliquée par l'interaction avec D:	0,2	0,2	0,3	0,0	0,4	0,2	0,3	0,2	0,4	0,2	0,2	0,2	0,3	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec E:	0,5	0,2	17,1	0,4	0,0	0,2	1,0	0,3	2,6	0,2	0,2	0,2	0,7	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec F:	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0	0,2	0,2	0,3	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec G:	0,3	0,2	0,3	0,3	1,0	0,2	0,0	0,2	0,3	0,2	0,2	0,2	0,2	0,3
% de la variance expliquée par l'interaction avec H:	0,2	0,2	0,3	0,2	0,3	0,2	0,2	0,0	0,4	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec J:	0,9	0,3	18,0	0,4	2,6	0,3	0,3	0,4	0,0	0,2	0,2	0,2	1,2	0,7
% de la variance expliquée par l'interaction avec K:	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0	0,2	0,2	0,2	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec L:	0,2	0,2	0,3	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0	0,2	0,3	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec M:	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0	0,2	0,2
% de la variance expliquée par l'interaction avec N:	0,2	0,2	0,4	0,3	0,7	0,2	0,2	0,2	1,2	0,2	0,3	0,2	0,0	0,3
% de la variance expliquée par l'interaction avec O:	0,2	0,2	0,8	0,2	0,2	0,2	0,3	0,2	0,7	0,2	0,2	0,2	0,3	0,0
Caractere associé à la variable :	A	B	C	D	E	F	G	H	J	K	L	M	N	O
% de la variance expliquée par cette variable et par toutes ses interactions :	8,5	-0,2	61,3	3,5	44,3	-0,2	3,2	0,3	52,8	-0,1	0,5	-0,1	5,5	13,0
% Variance totale expliquée par tous effets ordre 1	30,4													
% Variance totale expliquée par tous effets ordre 2	63,7													
% Var totale expliquée par tous effets ordre 3 à 14	5,9													

Simulation mécanique du comportement d'un MEMS : 14 facteurs

Pourquoi ?
Plans d'expériences
Plans de simulations
Interpolation métomodèle
Remplissage d'espace
Krigeage
Splines
Sobol
Conclusions

Indices et fonctions de Sobol

Les fonctions de Sobol permettent de visualiser l'effet moyen des facteurs:



On peut aussi visualiser les fonctions de Sobol d'ordre 2

Leti

Pourquoi ?

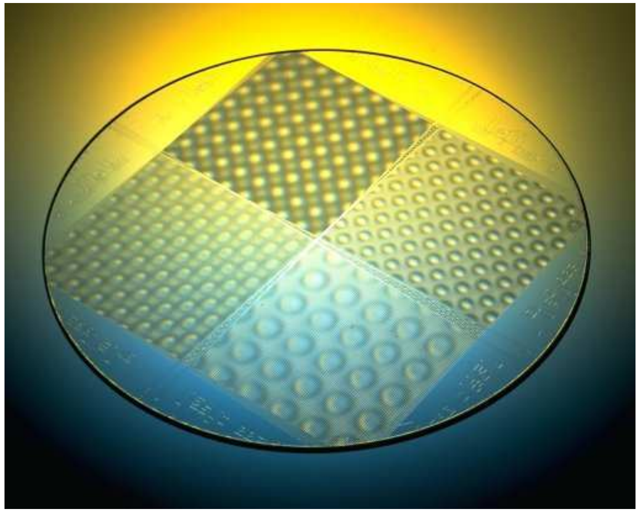
Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

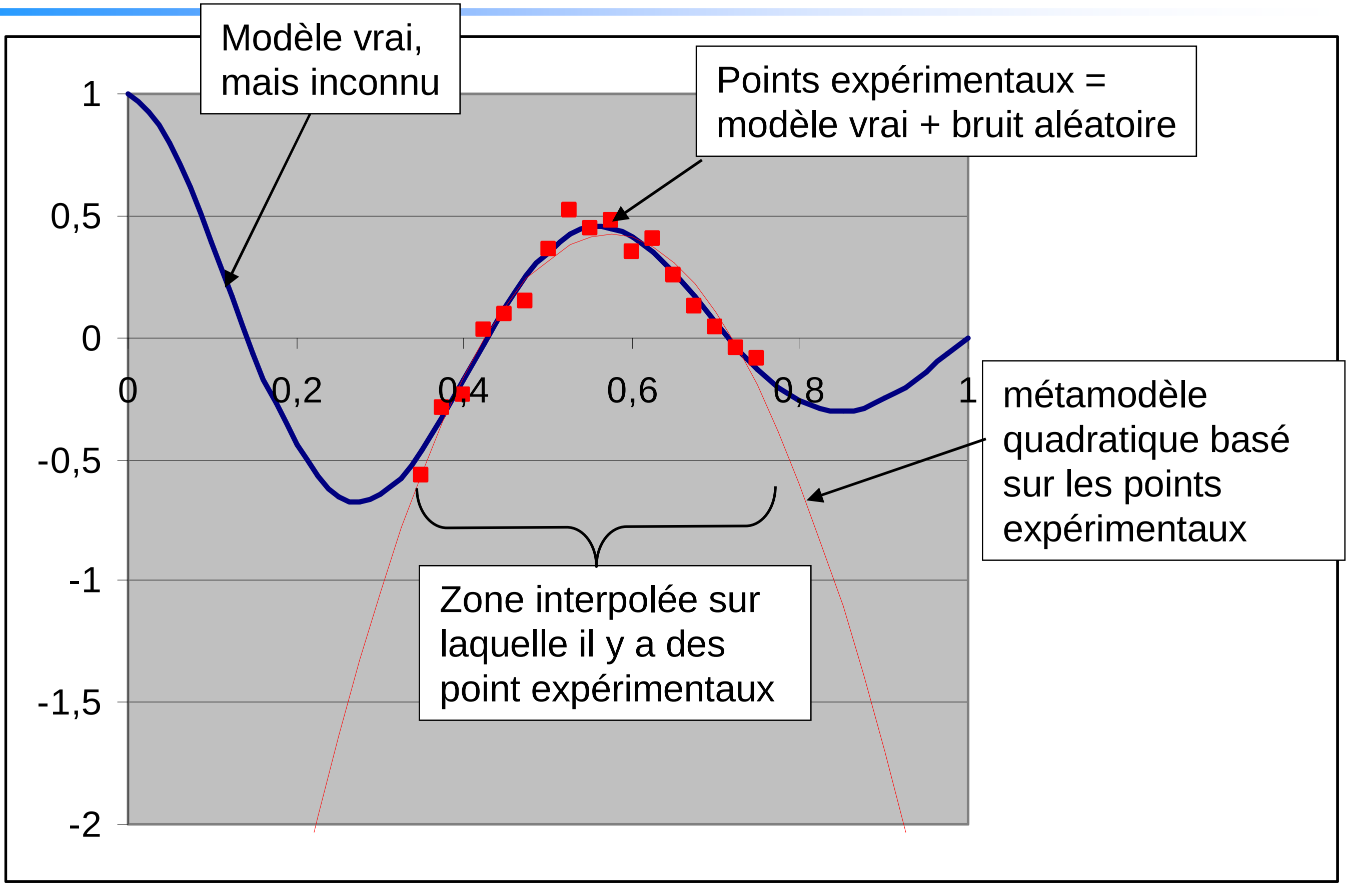
Plan de l'exposé

- Pourquoi des plans d'expériences ou de simulations ?
- Les plans d'expériences
- Les plans de simulations



- Recommandations et conclusions
  - Attention aux extrapolations
  - Phénomène continu et lisse
  - Analyse de la variance
  - Optimisation multi-réponse: désirabilité
  - Conclusions et bibliographie

Attention aux extrapolations !



Attention ! Un métamodèle n'est utilisable qu'en interpolation et pas en extrapolation *(sauf cas particulier, avec un soin très attentif et beaucoup de prudence).*

Tant pour les plans d'expériences que de simulations !

Phénomènes continus et lisses

Le choix des variables explicatives (facteurs) et des réponses est très important:

Les phénomènes étudiés doivent être les plus continus et lisses possible !

La transformation des réponses est facile a posteriori, celle des facteurs dégrade les qualités statistiques du plan.

Tant pour les plans d'expériences que de simulations !

Analyse de la variance

Pourquoi ?

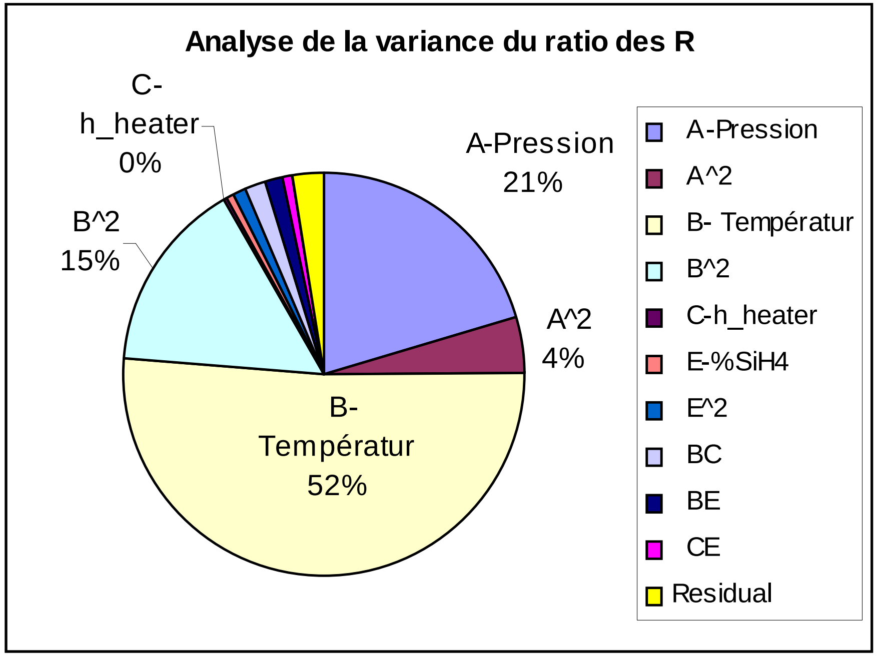
Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

L'analyse de la variance, ou les indices de Sobol, permettent d'identifier les facteurs ou interactions les plus influents

Tant pour les plans d'expériences que de simulations !



Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

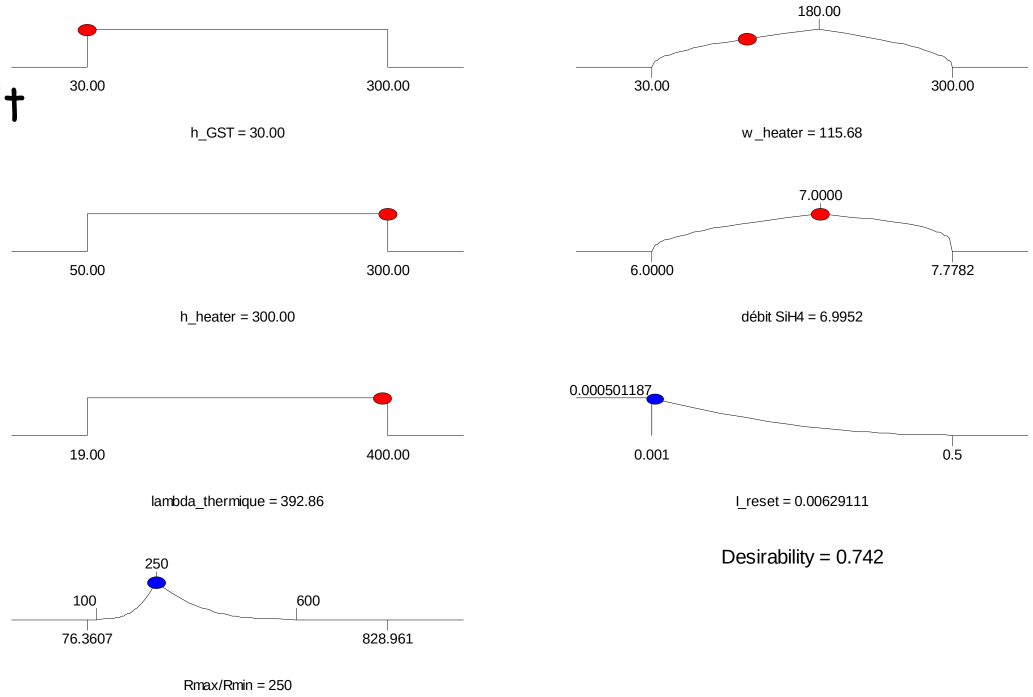
Optimisation multi-réponses: désirabilité

Il y a généralement plusieurs réponses à optimiser, des contraintes sur le domaine expérimental, des zones de valeurs des facteurs qui sont préférables à d'autres.

Chacune de ces informations est codée par une fonction toujours comprise entre 0 et 1 et :

- Qui vaut 0 quand la zone est interdite
- Qui vaut 1 quand la zone est optimale
- Qui est d'autant plus grande que la zone est favorable

La désirabilité est le produit de toutes ces fonctions. C'est ce qu'on cherche à maximiser.



Tant pour les plans d'expériences que de simulations !

Conclusions

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

- Des méthodes puissantes pour extraire le maximum d'informations d'un minimum d'essais ou de simulations.
- A adapter à chaque cas particulier.
- Plans d'expériences : des méthodes classiques, des logiciels commerciaux de qualité,
  - Polynômes de degré 1 , 2 ou parfois 3
  - Plans classiques ou D-optimaux, minimisation de $\det((X^{t}X)^{-1})$
- Plans de simulations : des méthodes modernes, des logiciels "universitaires" ou des boîtes à outils Matlab,
  - Remplissage de l'espace + 10 à 20% des points aux bords
  - Krigeage ou splines
- Nombreuses applications pour les microtechnologies !

Pourquoi ?

Plans d'expériences

Plans de simulations

Conclusions

Bibliographie

- Sur les plans d'expériences

  - **G. E.P. Box, N. R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surfaces", Willey series in probability and mathematical statistics, 1987**
  - G. Sado, M.C. Sado, "Les plans d'expériences, de l'expérimentation à l'assurance qualité", AFNOR technique, 1991
  - J. Alexis, P. Alexis, "Pratique industrielle des plans d'expériences, La qualité à moindre coût, l'approche Taguchi", AFNOR, 1999
  - J. Goupy, "Plans d'expériences pour surface de réponse", Dunod, 1999

- Sur les plans de simulations

  - **T. J. Santner, B. J. Williams, W. I. Notz, "The Design and Analysis of Computer Experiments", Springer Series in Statistics, 2003**
  - J. P.C. Kleijnen, "Design and Analysis of Simulation Experiments", Springer, 2008
  - I.M. Sobol, "Sensitivity analysis fon non linear mathematical models", Math. Model. Comput. Exp., 1993, vol **1**, pp407-414

Contact: francois.decrecy@cea.fr 04 38 78 32 18

micro and nanoelectronics microsystems ambient intelligence biology and health image chain

Innovation for industry

Loyalty
Entrepreneurship
Team work
Innovation

leti MINATEC INSTITUT CARNOT CEA LETI

cea