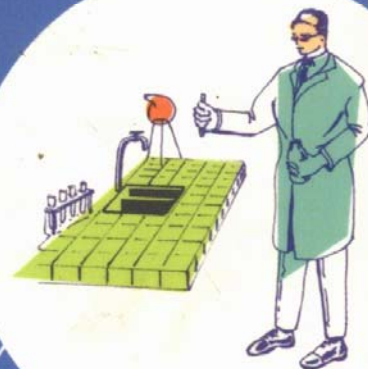


MÉTHODOLOGIE EXPÉRIMENTALE

Méthodes
et outils
pour les
expérimentations
scientifiques

J.-N. Baléo
B. Bourges
Ph. Courcoux
C. Faur-Brasquet
P. Le Cloirec



ECOLE DES MINES DE NANTES

Editions
TEC
& **DOC**

Table des matières

— Chapitre 1 —

Introduction à la méthodologie expérimentale (Pierre Le Cloirec et Bernard Bourges)

1. ■ Introduction : deux exemples	1
1.1. Un premier exemple : le capteur solaire	1
1.2. Un deuxième exemple : un procédé de traitement d'eau par adsorption	4
1.3. Modèle et expérience : une problématique très générale	6
2. ■ Les modèles et leur classification	7
2.1. La notion de modèle	8
2.2. Les modèles scientifiques	9
2.3. Les types de modèles	11
2.3.1. Modèles de connaissance ou physiques	11
2.3.2. Modèles de comportement ou empiriques	11
2.4. Les formes mathématiques de modèles	12
2.4.1. Modèles statiques et modèles dynamiques	12
2.4.2. Paramètres finis ou distribués	13
2.4.3. Modèles linéaires et non linéaires	14
3. ■ L'expérience	14
4. ■ Analyse séquentielle d'une expérience	17
5. ■ La préparation des protocoles expérimentaux	19
5.1. L'analyse dimensionnelle	20
5.2. Les plans d'expériences	20
6. ■ L'utilisation des données expérimentales	21
Références bibliographiques	23

Chapitre 2

L'analyse dimensionnelle

(Pierre Le Cloirec)

Nomenclature	25
Introduction	28
1. ■ Un peu d'histoire	29
2. ■ La notion de dimension	30
2.1. Quelques rappels sur les unités	30
2.2. Dimensions d'une grandeur	32
3. ■ Les méthodes de l'analyse dimensionnelle	36
3.1. La méthode de Rayleigh	37
3.1.1. Principe général.....	37
3.1.2. Principe d'homogénéité.....	37
3.1.3. Exposé de la méthode.....	37
3.1.4. Exemple d'application.....	39
3.1.5. Limite de la méthode de Rayleigh	40
3.2. Théorème Π de Vaschy-Buckingham.....	40
3.2.1. Principe général.....	40
3.2.2. Méthode de recherche des nombres sans dimension	41
3.2.3. Choix des grandeurs primaires	41
3.2.4. Exemple d'application de la méthode	42
4. ■ Quelques nombres sans dimension	44
5. ■ Similitude et changement d'échelle.....	44
5.1. Cas spécifique de la similitude géométrique	44
5.2. Conditions générales de similitude	48
5.2.1. Principe	48
5.2.2. Exemple d'application.....	48
5.2.3. Utilisations pratiques de la similitude en mécanique des fluides.....	50
5.2.4. Quelques limites de la similitude	50
5.3. Relations empiriques entre nombres adimensionnels	51
5.3.1. Obtention de relations empiriques.....	51
5.3.2. Usage de relations empiriques	53
6. ■ Exercices d'application avec solution	53
6.1. Approche générale – lois physiques	53
6.2. Mécanique des fluides	55
6.3. Transfert de matière.....	57
6.4. Transfert de chaleur	57
Références bibliographiques	59

Chapitre 3

Les outils statistiques descriptifs d'analyse des données

(Jean-Noël Baléo)

1. ■ Preamble.....	61
2. ■ Généralités.....	62

2.1. Définitions et notations	62
2.2. Présentation et traitement des données	63
2.2.1. Principe	63
2.2.2. Recodage de variables	64
2.2.3. Regroupement.....	66
3. ■ Statistiques descriptives simples	67
3.1. Représentations graphiques	67
3.1.1. Variables quantitatives.....	70
3.1.2. Séries chronologiques	71
3.2. Valeurs caractéristiques.....	71
3.2.1. Paramètres caractéristiques de tendance centrale.....	73
3.2.2. Paramètres caractéristiques de dispersion.....	75
3.3. Pour aller un peu plus loin : les paramètres de forme et de concentration.....	75
3.3.1. Les paramètres de forme	76
3.3.2. Les paramètres de concentration	76
3.4. Applications diverses commentées.....	76
3.4.1. Consommation d'énergie de bâtiments publics.....	80
3.4.2. Pyramide des âges de la population de Loire-Atlantique....	81
4. ■ Statistiques descriptives multidimensionnelles	81
4.1. Généralités	81
4.1.1. Introduction.....	83
4.1.2. Contexte d'utilisation des différentes méthodes d'analyse des données multidimensionnelles	84
4.1.3. Représentations graphiques.....	85
4.2. Introduction à la classification automatique.....	85
4.2.1. Notion de classification.....	86
4.2.2. Exemple d'algorithme de classification automatique.....	87
4.2.3. Représentation graphique de la classification : le dendrogramme.....	88
4.2.4. Mise en œuvre de la classification automatique hiérarchique.....	93
4.2.5. Outils informatiques de classification automatique	94
4.3. L'analyse en composantes principales (ACP)	94
4.3.1. Généralités et principe de la méthode	94
4.3.2. Fondements et mise en œuvre de l'ACP	100
4.3.3. Représentations graphiques.....	100
4.3.4. Interprétation des résultats	104
4.3.5. Exemples de mise en œuvre de l'ACP	112
4.3.6. Outils informatiques d'ACP	113
4.4. Pour aller un peu plus loin : l'analyse des correspondances simples (ACS).....	113
4.4.1. Tableau de contingence.....	114
4.4.2. Principe et mise en œuvre de l'ACS.....	120
4.4.3. Représentations graphiques.....	121
4.4.4. Interprétation des résultats	121
4.4.5. Exemple de mise en œuvre.....	126
4.4.6. Outils informatiques d'ACS.....	127
Références bibliographiques	127

Chapitre 4

Modélisation statistique des données (Bernard Bourges et Catherine Faur-Brasquet)

1. ■	Modélisation des distributions statistiques	130
1.1.	Caractéristiques des variables aléatoires	130
1.2.	Quelques exemples de lois classiques	132
1.2.1.	Loi uniforme sur l'intervalle $[a, b]$	132
1.2.2.	Loi normale	133
1.2.3.	Loi exponentielle	134
1.3.	Variable statistique et variable aléatoire : parallèle et comparaison	134
1.4.	Estimation des paramètres d'une loi théorique	135
1.5.	Tests d'ajustement	138
1.6.	Deux exemples : vitesses dans un fluide en écoulement ; temps de séjour dans un réacteur	139
2. ■	Liaison entre deux variables	142
2.1.	Analyse descriptive et graphique : les moindres carrés	143
2.1.1.	Analyse graphique : les principales situations	143
2.1.2.	La méthode des moindres carrés	144
2.1.3.	Calcul des coefficients du modèle	145
2.1.4.	Équation d'analyse de la variance et coefficient de corrélation	146
2.2.	Le modèle de régression linéaire simple (RLS) : la théorie	147
2.2.1.	Hypothèses et signification du modèle	147
2.2.2.	Identification des paramètres inconnus du modèle	148
2.2.3.	Application du modèle à la prévision	149
2.2.4.	Le cas gaussien	150
2.3.	Le modèle de régression linéaire simple et son application	151
2.3.1.	Un exemple : relation entre besoins de chauffage et température extérieure	151
2.3.2.	Résultats de la régression linéaire simple	153
2.3.3.	Contrôle des hypothèses du modèle	155
2.4.	Pour aller plus loin : liaisons curvilignes et non linéaires	157
2.4.1.	Quelques situations problématiques	157
2.4.2.	Quelques cas simples linéarisables	159
2.4.3.	Un exemple : isothermes d'adsorption sur tissu de carbone activé	159
2.4.4.	Modèle avec variance d'erreur hétérogène : le lissage pondéré	165
2.4.5.	Cas où la variable explicative est sujette à erreur	166
3. ■	Régression linéaire multiple	167
3.1.	Approche géométrique : la généralisation des moindres carrés ...	167
3.1.1.	Réflexions préliminaires à partir d'un exemple	167
3.1.2.	La méthode des moindres carrés	170
3.1.3.	Calcul des coefficients du modèle	171
3.1.4.	Équation d'analyse de la variance et coefficient de détermination	171
3.2.	Le modèle de régression linéaire multiple : la théorie	172
3.2.1.	Les hypothèses et la signification du modèle	172

3.2.2.	La formulation matricielle du modèle	173
3.2.3.	L'identification des paramètres inconnus du modèle	174
3.2.4.	L'application du modèle à la prévision	174
3.2.5.	Le cas gaussien	175
3.3.	L'application de la régression linéaire multiple.....	177
3.3.1.	Un exemple : les performances du chauffe-eau solaire....	177
3.3.2.	Contrôle des hypothèses du modèle.....	179
3.3.3.	Le lien avec les plans d'expériences	181
3.4.	Pour aller plus loin	182
3.4.1.	L'analyse des résidus.....	182
3.4.2.	Le choix de la meilleure régression	183
4.	■ Analyse de la variance.....	189
4.1.	Introduction	189
4.2.	Analyse de la variance à un facteur.....	190
4.2.1.	Le modèle Anova à un facteur	190
4.2.2.	Le test d'hypothèse Anova	193
4.2.3.	Les contrastes et les effets	195
4.2.4.	Exemple d'application.....	197
4.3.	Analyse de la variance à 2 facteurs avec répétition	200
4.3.1.	Les avantages de l'Anova à 2 facteurs	200
4.3.2.	Le modèle Anova à 2 facteurs avec répétition	201
4.3.3.	Le test d'hypothèse	204
4.3.4.	Les effets.....	205
4.4.	Application commentée.....	206
4.5.	Pour aller un peu plus loin.....	210
4.5.1.	Démonstration 1 : CM_R estimation sans biais de σ^2	210
4.5.2.	Démonstration 2 : Si A sans effet, CM_A est un estimateur sans biais de σ^2	210
4.5.3.	Démonstration 3 : Si le facteur A est sans effet, F_A suit une loi de Fischer-Snedecor	211
4.5.4.	Le lien entre l'Anova et la régression multiple	212
	Références bibliographiques	213

Chapitre 5

Les plans d'expériences (Philippe Courcoux)

1.	■ Introduction à la planification expérimentale	215
1.1.	Objectifs	215
1.2.	Choix d'une stratégie expérimentale	217
1.2.1.	Le maillage du domaine expérimental	217
1.2.2.	La méthode du « un facteur à la fois »	217
1.3.	Démarche	218
2.	■ Les plans factoriels complets	220
2.1.	Construction	220
2.2.	Analyse et interprétation.....	221
2.2.1.	Moyenne générale	221
2.2.2.	Calcul des effets principaux	222
2.2.3.	Calcul des interactions	223
2.2.4.	Présentation générale des résultats	226

2.3. Exemple de plan factoriel complet 2^4	227
3. ■ Les plans factoriels fractionnaires	229
3.1. Objectifs et principes.....	229
3.2. Construction des plans fractionnaires.....	229
3.2.1. Exemple d'un plan 2^{3-1}	229
3.2.2. Les plans 2^{k-1}	231
3.2.3. Cas général des plans 2^{k-p}	232
3.2.4. Les plans de Plackett-Burman.....	233
3.2.5. Plans factoriels et facteurs blocs.....	234
3.3. Exemples d'utilisation de plans fractionnaires	234
3.3.1. Un plan fractionnaire 2^{5-1}	234
3.3.2. Blocking d'un plan 2^4	236
4. ■ La méthodologie de surfaces de réponses.....	237
4.1. Principes généraux	237
4.2. Des exemples d'études de surfaces de réponses	238
4.2.1. Optimisation de l'extraction de protéines d'algues.....	238
4.2.2. Optimisation de la couleur d'un produit alimentaire.....	241
4.3. Plans pour l'étude des surfaces de réponses	247
4.3.1. L'optimalité d'un plan	247
4.3.2. Quelques plans pour l'étude des modèles du second degré ..	249
5. ■ Les plans de mélange	251
5.1. Présentation générale.....	251
5.2. Domaines expérimentaux et modèles pour les mélanges	251
5.2.1. Cas général	251
5.2.2. Contraintes multiples sur les constituants	253
5.3. Des exemples de plans de mélange.....	255
5.3.1. Optimisation de la préférence d'un cocktail	255
5.3.2. Optimisation des propriétés moussantes d'un mélange de protéines de blanc d'œuf	256
Références bibliographiques	258

— Chapitre 6 —

Les erreurs de mesure (Bernard Bourges)

1. ■ Les processus de mesurage et leurs incertitudes	259
1.1. L'erreur de mesure, une réalité incontournable	259
1.2. Définitions préliminaires.....	261
1.3. Écriture des résultats	262
1.4. Traitement graphique des incertitudes	264
1.4.1. Comparaison de plusieurs mesures ou estimations d'une même grandeur	264
1.4.2. Étude des liaisons entre deux variables	264
1.5. Combinaison des incertitudes.....	267
1.5.1. Sommes, différences, multiplication par une constante.....	267
1.5.2. Produits et quotients	267
1.5.3. Fonctions puissances	267
2. ■ L'approche probabiliste des erreurs de mesure	268
2.1. Limites de l'approche déterministe	268

2.2. Le modèle aléatoire des erreurs de mesure	268
2.2.1. Hypothèses.....	268
2.2.2. La notion d'incertitude dans le modèle aléatoire.....	269
2.2.3. Combinaison des incertitudes dans un calcul	270
2.2.4. Estimation d'une grandeur à partir de plusieurs mesures indépendantes	271
2.3. Modèle déterministe ou aléatoire ?	272
3. ■ Les erreurs de mesure : définitions et concepts des méthodes normalisées	272
3.1. Définitions	273
3.2. Détermination de la fidélité d'une méthode de mesure	274
3.3. Étude de la justesse d'une méthode de mesure.....	275
4. ■ Propagation des erreurs.....	276
4.1. Un exemple	276
4.2. Cas simples : sommes, produits, quotients et fonctions simples....	277
4.3. Formule générale de propagation des erreurs	279
4.4. Quelques cas particuliers	280
4.4.1. Erreurs non indépendantes	281
4.4.2. Cas des incertitudes élevées.....	281
5. ■ Pour en savoir plus	282
5.1. Détection et analyse des données aberrantes.....	282
5.1.1. Loi de distribution de l'erreur parfaitement connue.....	283
5.1.2. Erreurs distribuées normalement et de variance inconnue..	283
5.1.3. Erreurs distribuées de manière quelconque	285
5.1.4. Précautions	286
5.2. La réhabilitation de données.....	286
5.2.1. Un peu de théorie	286
5.2.2. Un exemple.....	287
Références bibliographiques	289

— Chapitre 7 —

Les réseaux de neurones (Catherine Faur-Brasquet)

Nomenclature	291
1. ■ Introduction	292
2. ■ Généralités.....	292
2.1. Historique	292
2.2. Le neurone biologique.....	293
2.3. Conditions d'utilisation des réseaux neuronaux	294
3. ■ Théorie	295
3.1. Le neurone formel	295
3.2. Différents modèles de RN	296
3.3. La propriété d'approximation parcimonieuse.....	297
3.4. L'apprentissage supervisé.....	298
3.4.1. Principe	298
3.4.2. La rétropropagation du gradient.....	298
4. ■ Construction et utilisation pratique d'un réseau de neurones	299
4.1. Construction d'un réseau de neurones.....	299

4.1.1. Les variables d'entrée.....	300
4.1.2. Optimisation de l'architecture du réseau	302
4.1.3. Optimisation de la procédure d'apprentissage	308
4.2. Analyse statistique des résultats	311
4.3. Analyse de l'importance relative des neurones d'entrée sur la sortie	315
4.3.1. Étude de l'importance causale ou sensibilité	315
4.3.2. Étude de l'importance prédictive ou pertinence.....	317
4.4. Limites des réseaux de neurones	319
4.5. Synoptique des démarches de construction d'un réseau de neurones.....	319
5. ■ Pour aller un peu plus loin : la rétropropagation du gradient	321
6. ■ Quelques applications.....	323
6.1. Domaines d'application des réseaux de neurones.....	323
6.2. Application commentée : modélisation de l'écoulement d'un fluide au travers d'un nouveau matériau adsorbant, le tissu de carbone activé	323
6.2.1. Présentation de la problématique	327
6.2.2. La base de données.....	327
6.2.3. Optimisation de l'architecture du réseau de neurones	329
6.2.4. Performances de généralisation du réseau de neurones..	330
6.2.5. Analyse de l'influence des variables d'entrée	331
Références bibliographiques	333

Chapitre 8

La validation des modèles (Jean-Noël Baléo)

1. ■ Préambule.....	341
2. ■ Validation de modèles	342
2.1. Retour sur la notion de modèle physique	342
2.1.1. Modélisation et simulation.....	342
2.1.2. Typologie des modèles.....	342
2.1.3. Petit bestiaire des erreurs de modélisation	344
2.2. Notion de validation	345
2.2.1. Calibration et vérification d'un modèle.....	346
2.2.2. Validation d'un modèle	346
2.3. Méthodes de validation	347
2.3.1. Méthodologie générale.....	347
2.3.2. Méthodes de perturbation	348
2.3.3. Méthodes statistiques	348
3. ■ Exemples de mise en œuvre	352
3.1. Processus de validation d'un modèle de champ	352
3.2. Processus de comparaison et de validation subjective de modèles quantitatifs.....	355
3.3. Processus de validation d'un modèle qualitatif	356
3.4. Processus de validation d'un modèle de distribution statistique ..	358
3.5. Processus de validation d'un modèle quantitatif.....	359
Références bibliographiques	361

Ce livre traite de l'expérience, de l'expérimentation et de la démarche expérimentale. Il aborde les outils et les méthodes nécessaires à la conception d'une expérience, à sa réalisation et à son exploitation. Sont ainsi présentés successivement l'analyse dimensionnelle, les outils statistiques descriptifs et la modélisation statistique des données, les plans d'expériences, les erreurs de mesures, les réseaux de neurones et enfin la validation des modèles. Des cas concrets et diversifiés sont fournis tout au long de cet ouvrage afin de couvrir un vaste éventail de domaines d'applications.

À partir de l'expérimentation, le scientifique dans son laboratoire ou l'ingénieur dans son atelier ou son bureau d'étude se doivent de développer des modèles empiriques avec la connaissance de base des modèles physiques. Chacun d'entre eux trouvera rassemblés dans cet ouvrage les méthodes et les outils qui faciliteront cette démarche.

Jean-Noël Baléo, maître de conférences,
École des mines de Nantes

Bernard Bourges, Professeur, École des mines
de Nantes

Philippe Courcoux, Maître de conférences,
ÉNITIAA Nantes

Catherine Faur-Brasquet, Maître
de conférences, École des mines de Nantes

Pierre Le Cloirec, professeur, École des mines
de Nantes

2-7430-0595-5



9782743005955