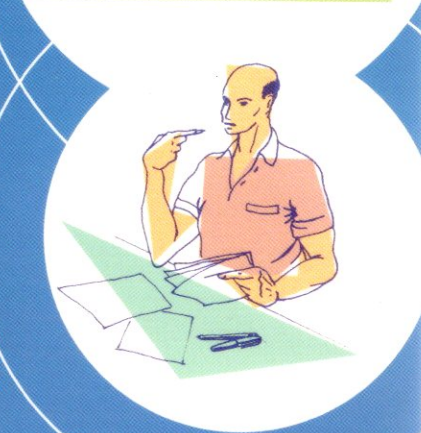
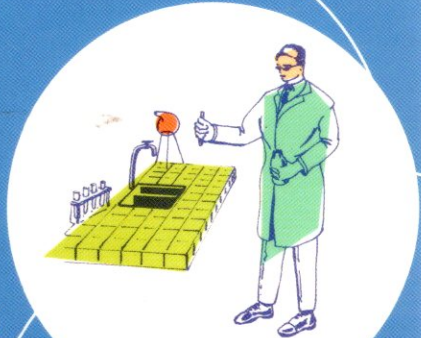


MÉTHODOLOGIE EXPÉRIMENTALE

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 39

 3.1.4. Exemple d'application 40

 3.1.5. Limite de la méthode de Rayleigh 40

 3.2. Théorème Π de Vaschy-Buckingham 40

 3.2.1. Principe général 41

 3.2.2. Méthode de recherche des nombres sans dimension 41

 3.2.3. Choix des grandeurs primaires 42

 3.2.4. Exemple d'application de la méthode 44

4. Quelques nombres sans dimension 44

5. Similitude et changement d'échelle 44

 5.1. Cas spécifique de la similitude géométrique 48

 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

- La photocopie non autorisée est un délit -

Chapitre 3
Les outils statistiques descriptifs d'analyse des données

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 73

 3.3. Pour aller un peu plus loin : les paramètres de forme et de concentration 75

 3.3.1. Les paramètres de forme 75

 3.3.2. Les paramètres de concentration 76

 3.4. Applications diverses commentées 76

 3.4.1. Consommation d'énergie de bâtiments publics 76

 3.4.2. Pyramide des âges de la population de Loire-Atlantique 80

4. Statistiques descriptives multidimensionnelles 81

 4.1. Généralités 81

 4.1.1. Introduction 81

 4.1.2. Contexte d'utilisation des différentes méthodes d'analyse des données multidimensionnelles 83

 4.1.3. Représentations graphiques 84

 4.2. Introduction à la classification automatique 85

 4.2.1. Notion de classification 85

 4.2.2. Exemple d'algorithme de classification automatique 86

 4.2.3. Représentation graphique de la classification : le dendrogramme 87

 4.2.4. Mise en œuvre de la classification automatique hiérarchique 88

 4.3. L'analyse en composantes principales (ACP) 93

 4.3.1. Généralités et principe de la méthode 94

 4.3.2. Fondements et mise en œuvre de l'ACP 94

 4.3.3. Représentations graphiques 100

 4.3.4. Interprétation des résultats 100

 4.3.5. Exemples de mise en œuvre de l'ACP 104

 4.3.6. Outils informatiques d'ACP 112

 4.4. Pour aller un peu plus loin : l'analyse des correspondances simples (ACS) 113

 4.4.1. Tableau de contingence 113

 4.4.2. Principe et mise en œuvre de l'ACS 114

 4.4.3. Représentations graphiques 120

 4.4.4. Interprétation des résultats 121

 4.4.5. Exemple de mise en œuvre 121

 4.4.6. Outils informatiques d'ACS 126

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.	Equation 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.	Equation d'analyse de la variance et coefficient de	

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

2.3. Exemple de plan factoriel complet 2^k	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^{3-1}	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