

MS/ 530 - 07 / 02

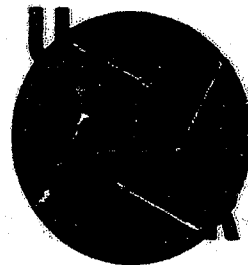
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE.
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE.

UNIVERSITE ABOU-BAKR BELKAID DE TLEMCCEN.

FACULTE DES SCIENCES

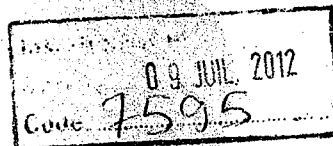


Département de physique



Laboratoire d'Etude et Prédiction des Matériaux
Unité de recherche Matériaux et Energies Renouvelables

MEMOIRE DE MASTER
EN



PHYSIQUE de la MATIERE CONDENSEE et des SEMI-CONDUCTEURS

Par :

Mme Mostefaoui Meriem



THEME

Etude des verres métalliques massifs à base de terre rare en utilisant l'approche du datamining

Soutenu le : 28 / 06/ 2012 devant le jury :

Mr A .SARI
Mr G. Merad
Mr B. RERBAL
M^{elle} F.SAIDI

M..A.A à l'Université de Tlemcen.
Professeur à l'Université de Tlemcen
M.A.A à l'Université de Tlemcen
Doctorant à l'Université de Tlemcen

Président
Encadreur.
Examineur.
Co-encadreur.

Année universitaire 2011/2012



REMERCIEMENTS

Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donner le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

Ce travail a été effectué dans le laboratoire de recherche d'Etudes et Prédiction des Matériaux (LEPM) affilié à l'Unité de Recherche des Matériaux et des Energies Renouvelables (URMER) de l'Université de Tlemcen.

Je voudrais d'abord remercier Monsieur Ghouti Merad, Professeur à l'université de Tlemcen pour m'avoir dirigé au cours de ce travail, Je lui présente toute ma gratitude pour l'attention et la rigueur qu'il a apportées à cette tache et pour m'avoir fait bénéficier de sa constante disponibilité.

J'exprime mes sincères remerciements à monsieur A. SARI, Maitre Assistant -A- à l'Université Abou-bekr Belkaïd Tlemcen, d'avoir accepter de présider le Jury de cette thèse.

Je remercie sincèrement monsieur A. RERBAL Maitre Assistant-A- à l'Université Abou Bekr Belkaïd-Tlemcen d'avoir accepter de faire partie du Jury.

Je tiens vivement à exprimer mes remerciements à M^{elle} SAIDI FATIHA pour l'aide précieuse qu'elle n'a cessé de m'apporter tout le long de ce travail à travers ses conseils et l'attention qu'elle a apporté à mon travail, j'y suis reconnaissante.

J'adresse mes reconnaissance les plus sincère à ma cousine Amina pour son aide précieuse et le temps quelle a bien voulu me consacré.

Je remercie en particulier mon mari qui a su me soutenir et m'a épolé durant toute la période de ce travail.

Enfin, j'adresse mes vives reconnaissances à tous les étudiants de Master 2011.

Dédicaces

Avec grande joie et cœur ouvert je dédie ce modeste travail :

Surtout à mes très chers parents

A mon petit cœur, mon fils Mohamed Hichem

A mon mari

A mon frère

A mes sœurs

A toute ma famille grands et petits

A tout mes amies sans exception

Meriem

Sommaire

Introduction générale	01
-----------------------------	----

Chapitre I : Généralité sur les verres métalliques

I.1. Introduction	05
I.2. L'état cristallin et l'état amorphe.....	06
I.3. Caractéristique macroscopique d'un solide amorphe :	07
I.4 Les verres métalliques.....	08
I.4.1 aspect général sur les verres métalliques.....	09
I.4.2 Les propriétés du verres métalliques.....	09
I.4.3 obtention des verres métalliques.....	10
I.4.4. Que peut-on faire avec des verres métalliques ?.....	10
I.4.5 les verres métalliques massifs a base de terre rare.....	11
I.4.6 l'aptitude à la vitrification (Glass Forming Ability).....	12
I.5. Références.....	13

CHAPITRE II : les techniques du Data mining

II.1 Datamining.....	16
II.1.1 Historique.....	16
II.1.2 Présentation générale.....	17
II.1.3 Les processus du Datamining.....	18
II.1.4 Les principales applications du Data Mining.....	18
II.2. L'Analyse en composantes principales.....	19
II.2.1 -Présentation générale.....	19
II.2.2. La methode ACP.....	21
II.2.3 -Tableau de données	21
II.2.4 Choix d'une distance.....	22
II.2.5 Choix de l'origine.....	23

II.2.6. Identification du modèle ACP.....	24
II.2.7 Interprétation des résultats de l'ACP.....	25
II.3.La regression PLS.....	26.
II.3.1 Introduction.....	26
II.3.2-Contexte historique.....	26
II.3.3- Le principe.....	27
II.3.4 la methode.....	29
II.3.5- Propriétés des composantes t_1, \dots, t_m	29
II.3.6-Les avantages de la régression PLS.....	30
II.5 les références.....	32

CHAPITRE III : Résultats et discussion

III.1 Introduction.....	34
III.2 La base de données.....	34
III.3 Les techniques de calculs.....	35
III.3.1 L'analyse en composantes principales.....	35
III.3.2 Le model PLS (la methode des moindre carrées pertiels.....	41
III.3.2.1Le cercle de corrélations.....	41
III.3.2.2 Les vecteurs du poids w et c	41
III.3.2.3 Mesures de l'importance de variables.....	42
III.3.2.4Les résidus et prédictions.....	44
III.4 Conclusion.....	49
Conclusion générale.....	50
Annexe	51
I. Introduction.....	51
II.Utilisation du logiciel.....	51
II.1 Faire une analyse en composantes principales (ACP) aec XLSTAT.....	52
II.2Faire une régression PLS avec XLSTAT.....	53

Liste des symboles

X : Matrice de données représentant le fonctionnement normal du système,

E : Terme d'erreur,

Σ : Matrice de covariance de X ,

N : Nombre d'échantillons mesurés,

M : Nombre de variables (dimension de l'espace des données mesurées),

l : Nombre de composantes retenues dans le modèle ACP (dimension du sous espace des composantes principales)

k : Indice du temps,

X_i : la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur x

T : la matrice des facteurs scores..

W : les vecteurs du poids pour les colonnes de X

P : la matrice des vecteurs propre de Σ

Q : La matrice des coefficients de regression

Y : la matrice des variables réponses de la regression PLS

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

Ce travail de thèse a pour thème « Etude des verres métalliques massifs à base de terre rare en utilisant l'approche du datamining ».

Les verres métalliques massifs sont des matériaux relativement récents, produits depuis 1960 sous forme de rubans d'épaisseur environ 0,1 mm par trempe sur roue (melt spinning en anglais) puis depuis environ 20 ans sous forme massive, c'est-à-dire dont la plus petite dimension est de l'ordre du centimètre. Ces matériaux présentent des caractéristiques uniques, liées à leur structure amorphe, et font l'objet d'intenses recherches, aussi bien par des approches théoriques qu'expérimentales.

Récemment, les verres métalliques massifs à base de terre rare (REBMGs) ont suscité un intérêt croissant en raison de leurs propriétés intéressantes (excellente aptitude à la vitrification, module d'élasticité plus grand...etc) pour cela on s'est intéressés à ces matériaux dans notre étude.

Pour la conception de nouveaux matériaux, non seulement la détermination des données par des calculs ou à partir des expériences est importante, mais aussi la manière d'analyser ces données d'une façon efficace et complète est également nécessaire. Certains des défis dans la conception des matériaux est la difficulté d'analyser de grandes quantités de données, de comprendre les corrélations entre les différentes propriétés, et l'utilisation de ces corrélations pour concevoir des matériaux avec des propriétés désirées.

Dans le contexte d'analyse de données, les techniques de datamining sont actuellement bien établies comme étant des outils efficaces et rapides. Ils permettent de gérer une quantité de données aussi importante qu'elle puisse être et de l'examiner de sorte que les tendances et les corrélations deviennent évidentes. En plus, le nombre de propriétés exigées pour expliquer un système peut être réduit à un minimum.

A cet effet, nous proposons dans ce mémoire d'étudier les verres métalliques à base de terre rare qui sont des alliages ternaire du type ($RE_{55}Al_{25}Co_{20}$), en utilisant deux techniques bien connues en datamining tel que l'analyse en composante principale (ACP) et la régression des moindres carrés partiels (PLS).

Cet étude se divise en trois chapitre.

Le premier chapitre donne une synthèse bibliographique qui traite les verres métalliques à base de terres rares en général. Il s'agit dans cette partie de donner quelques

Introduction générale

définitions des verres métalliques massifs et leurs propriétés intéressantes ainsi l'utilité de ces derniers.

Le deuxième chapitre nous donne une idée générale sur l'ensemble des techniques de datamining, leur historique et leurs champs d'application en plus d'un exposé relativement détaillé des deux algorithmes dont nous avons fait usage, notamment la PCA et la PLS.

Le troisième chapitre contient l'exposé des résultats liés à l'application de ces nouvelles approches du Datamining, l'analyse en composante principale (ACP) et la régression des moindres carrés partiels (PLS) ainsi qu'une discussion détaillée de la pertinence de notre procédure analysée sur la lumière des données de la littérature. Enfin, une conclusion générale où on récapitulera les principaux résultats obtenus et proposera des perspectives d'évolutions futures.

CHAPITRE I : Généralité sur les verres métalliques

I.1.Introduction

Les verres métalliques sont essentiellement des métaux caractérisés par l'absence d'une structure cristalline. Par conséquent, ils exhibent des propriétés physiques, mécaniques et chimiques extraordinaires telles qu'une résistance mécanique élevée combinée avec une haute élasticité .

Les verres métalliques ont commencé à être produits suivant les méthodes de melt spinning dans les années 1960, et il faut attendre le début des années 1980 pour qu'ils soient élaborés sous forme massive, c'est-à-dire avec une plus petite dimension supérieure au millimètre, par des techniques de creus et froid. Ces alliages se définissent avant tout par leur absence d'ordre à longue distance, qui leur confère des propriétés mécaniques profondément différentes de celles de leurs homologues cristallins. En effet, dans le cas des métaux ordinaires, celles-ci sont essentiellement fixées par les défauts à l'échelle du cristal (dislocations, joints de grains, lacunes, etc.). Dans le cas des verres, en l'absence de réseau cristallin et de symétrie de translation, ces défauts ne peuvent pas être définis. Il s'ensuit, notamment, une élévation importante de la limite élastique à température ambiante, proche de la limite théorique. Par ailleurs, si la structure des verres métalliques les éloigne des métaux ordinaires, elle les rapproche d'autres classes de matériaux : les matériaux amorphes, tels que les polymères ou les verres d'oxydes. De fait, les verres métalliques vont présenter des comportements analogues à ces classes de matériaux. Tout d'abord, on pourra définir deux températures caractéristiques essentielles : la température de transition vitreuse (T_g) et la température de cristallisation (T_x). En termes de propriétés mécaniques, à haute température – proche de la transition vitreuse –, ils présentent une très forte capacité à la déformation plastique que l'on rencontre également dans le cas des polymères et des verres d'oxyde. À température ambiante, en revanche, leur rupture se produit dans des conditions macroscopiquement fragiles (comme pour les verres ordinaires ou des polymères à froid), même si elle est précédée d'une intense activité plastique extrêmement localisée dans des bandes de cisaillement. En outre, à proximité de la transition vitreuse, les verres métalliques présentent un comportement anélastique similaire, voire identique à celui des polymères et des verres d'oxydes. Il ressort de ces rapides observations que les propriétés mécaniques des verres métalliques vont être largement déterminées par la nature amorphe de leur structure.[1]

Deux limitations majeures font cependant que les verres métalliques ne sont pas utilisés dans un plus grand nombre d'applications industrielles : leur taille critique, et le faible nombre de systèmes vitrifiables.

I-2 L'état cristallin et l'état amorphe :

Les matériaux se divisent en deux classes suivant qu'ils sont cristallins ou amorphes. La théorie cinétique des gaz nous enseigne que les molécules possèdent une énergie proportionnelle à la température absolue. Cette énergie, sous forme cinétique, communique aux molécules une vitesse élevée.

Si la température basse, l'énergie cinétique des molécules n'est plus suffisante pour leur permettre de se déplacer. Elles sont animées d'un mouvement de vibrations de faible amplitude autour d'une position fixe. C'est l'état solide. De plus, elles ne sont pas immobilisées dans des positions quelconques, mais tendent à se disposer d'une manière parfaitement ordonnée qui détermine une configuration géométrique répétitive dans les trois dimensions de l'espace. Cet état ordonné de la matière solide s'appelle l'état cristallin.

L'état cristallin est défini par un caractère périodique et ordonné à l'échelle atomique ou moléculaire. Le cristal est obtenu par translation dans toutes les directions d'une unité de base appelée maille élémentaire.

Dans l'état cristallin, les molécules sont arrangées selon une configuration parfaitement géométrique. Les atomes y sont disposés régulièrement suivant un réseau tridimensionnel [Figure I.1]

La plupart des substances minérales à l'état solide sont cristallisées. L'état cristallin est l'état normal du règne minéral. Certains corps font exception et les atomes qui les constituent sont disposés en désordre. Ce sont principalement les verres et certains plastiques. Les physiciens les considèrent comme de "faux états solides" et les assimilent à des liquides extrêmement visqueux. L'état cristallin ne se limite pas uniquement aux beaux cristaux des musées, mais il s'étend à la quasi totalité des substances solides du règne minéral. [2]

Les matériaux cristallins comprennent les métaux, une grande partie des céramiques, une partie des polymères et la plupart des minéraux.

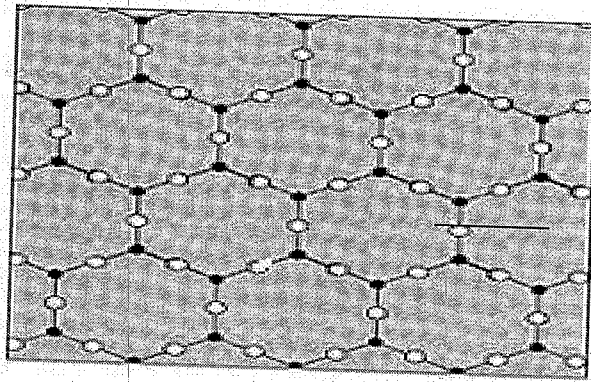


Figure [I.1] : L'état cristallin

L'état amorphe est caractérisé au contraire par des atomes placés de façon plus irrégulière dans lesquels on ne peut construire aucun réseau à distance. Sa structure inaccessible par les rayons X ou par la diffraction électronique est plus difficile à étudier.

Les recherches concernant cette structure se sont développées de façon considérable notamment à l'aide de la microscopie électronique. Les matériaux amorphes comprennent en dehors des verres de nombreux polymères de poids moléculaire élevé, quelques composés inorganiques et un petit nombre d'éléments chimiques. Cette classification des matériaux qui ne tient compte que de la géométrie suivant laquelle sont disposés les atomes permet de comprendre une partie de leurs propriétés [3].

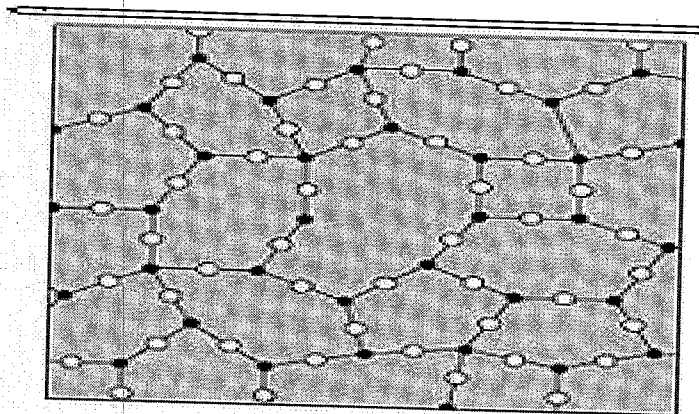


Figure [I.2] : L'état amorphe

I.3 Caractéristique macroscopique d'un solide amorphe :

Nous observons régulièrement dans notre environnement de nombreux solides amorphes sans compter ceux dont la structure complexe est intermédiaire entre le cristal et l'amorphe.

L'exemple le plus commun est ce que l'on appelle en langage courant le verre. On sait qu'un morceau de verre est dur, qu'il est indéformable : même par une forte pression ou traction, on ne peut pas sensiblement en changer la forme à moins de le briser, ce qui est par contre assez facile ; on dit que le verre est fragile. A l'examen, à l'œil nu ou même à l'aide d'un fort microscope, le verre apparaît comme une substance homogène, continue, et cela a un caractère important car il reflète à notre échelle la nature de sa structure atomique.[4]

I.4 Les verres métalliques :

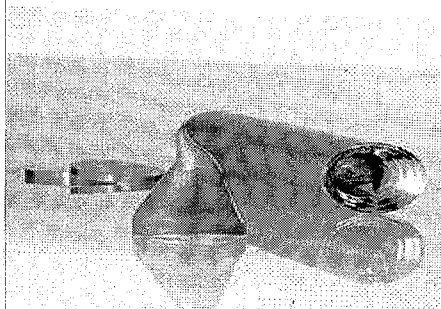
I.4.1 aspect général sur les verres métalliques :

Un alliage métallique amorphe, appelé aussi « métal amorphe », est un alliage métallique solide doté d'une structure amorphe plutôt que cristalline. Ces matériaux peuvent être obtenus par refroidissement très rapide depuis l'état fondu de l'alliage, ou par d'autres méthodes. On parle de « verre métallique » sans que cela n'exclue les autres appellations lorsque le solide est obtenu à partir de l'alliage fondu, par analogie avec le verre de silice. Figure [I.3]

Un paramètre qui définit l'aptitude à l'amorphisation des alliages métalliques est le rapport entre la température de transition vitreuse T_g et la température du liquidus T_l .

Il existe plusieurs méthodes de préparation des alliages métalliques amorphes :

Trempe rapide, pulvérisation cathodique, déposition électrolytique, implantation ionique, irradiation, diffusion à l'état solide. La plus utilisée est la trempe rapide sur roue (figure I.3) [5]



Figure[I.3] :Pièces d'un alliage métallique amorphe Vitreloy 4. Composition chimique : Zr47 Ti8 Cu7.5 Ni10 Be27.5. Le diamètre du cylindre et d'1 cm.[6]

Les verres métalliques se présentent le plus souvent sous formes de rubans ou tiges (figuresI.4)

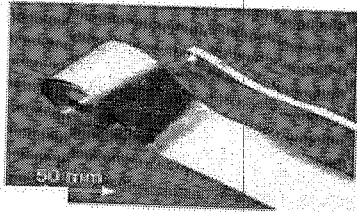


Figure a

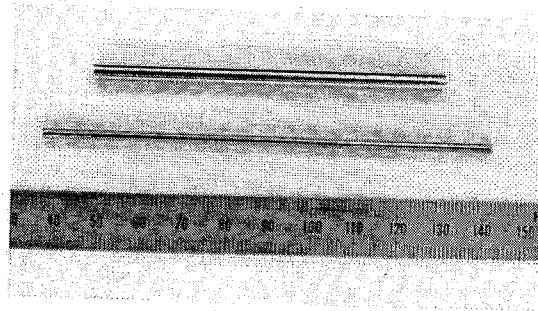


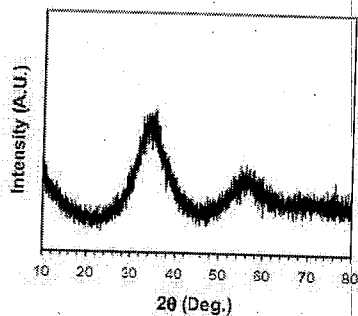
Figure b

Figures [1.4] : (a) Exemple de rubans de verre métallique à base de zirconium, (b) Exemple de tiges de verres métalliques à base de fer. [7]

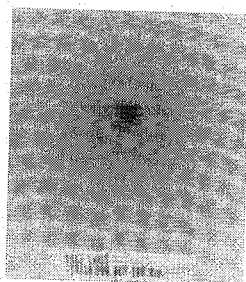
Les verres métalliques sont des alliages amorphes obtenus par trempe depuis la phase liquide [08]. Ces alliages peuvent aussi être obtenus par d'autres techniques telles que : le broyage, le laminage , le dépôt en couche mince , ou le dépôt électrochimique[09] . Les verres métalliques se distinguent des métaux cristallisés par l'absence de microstructures (pas de joints de grain, ni de grain), et l'absence d'ordre atomique à longue distance, ce qui se traduit:

- ❖ par l'absence de raies de diffraction et la présence d'halos diffus sur un diffractogramme RX (figure 1.5a)
- ❖ . par la présence de cercles concentriques sur le cliché de diffraction électronique (figure 1.5b) .

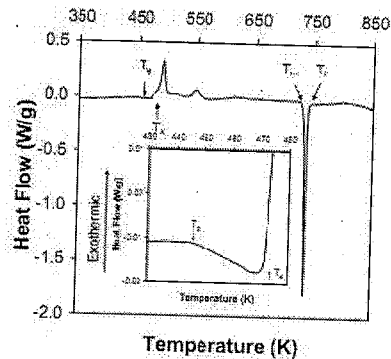
enfin, le thermogramme d'un verre présente un phénomène endothermique de transition vitreuse suivi d'une cristallisation exothermique (figure 1.5c).



(a)



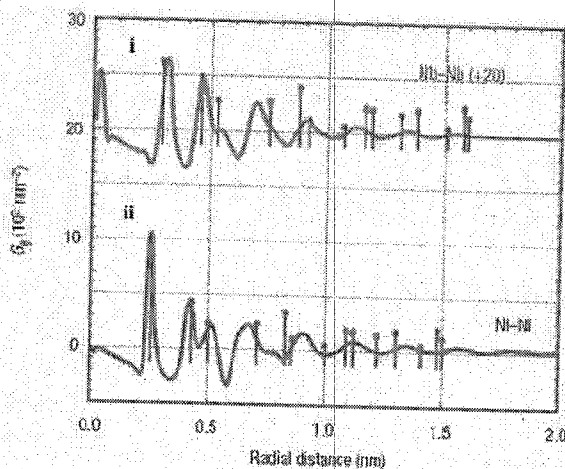
(b)



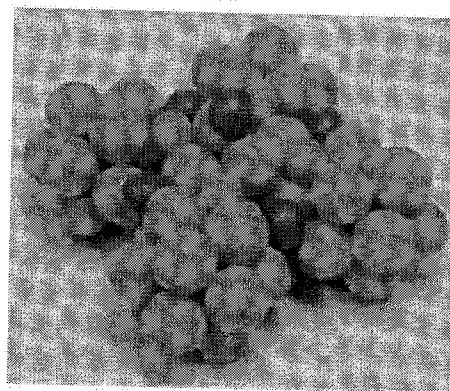
(c)

Figures 1.5 : (a) Diffractogramme RX d'un verre métallique montrant les halos diffus, (b) Image de diffraction électronique d'un verre métallique montrant les cercles concentriques, (c) Thermogramme d'un verre métallique mettant en évidence la température de transition vitreuse (T_g). [10]

Néanmoins, les verres métalliques ne sont pas des matériaux totalement désordonnés. En effet, la fonction de distribution radiale d'un verre montre qu'il existe un ordre à courte et moyenne distance (figure 1.6a), ce qui a conduit à chercher une représentation topologique des verres métalliques (figure 1.6b) par le modèle appelé « Efficient Cluster Packing (ECP) » développé par Miracle et al.[11]



(a)



(b)

Figures 1.6 : (a) Comparaison entre fonctions de distribution radiales partielles réduites (G_{ij}) des verres $Ni_{63}Nb_{37}$ et $Nd_{60}Ni_{40}$. Les courbes représentent l'expérience et les barres verticales les distances Nb-Nb et Ni-Ni calculées à partir du modèle ECP, (b) Représentation topologique d'un verre selon le modèle ECP.[12]

Un verre métallique est donc un alliage d'atomes majoritairement métalliques qui forment une phase amorphe. Ils se distinguent des alliages métalliques habituels par le fait qu'ils ne présentent pas d'ordre atomique au-delà de quelques liaisons atomiques ou plus concrètement quelques angströms. Ils possèdent néanmoins un ordre local.

1.4.2 Les propriétés du verres métalliques :

Les caractéristiques structurales (absence d'ordre atomique, présence d'une température de transition vitreuse, isotropie idéale) confèrent aux verres métalliques un ensemble original de propriétés, qui diffèrent des alliages et métaux cristallisés.

Parmi celles-ci nous pouvons citer en premier lieu les propriétés mécaniques tout à fait intéressantes. L'absence de grains et de joints de grains leur confère effectivement une bonne dureté (H), une ténacité élevée K_C , une très haute limite élastique (σ_E) et une déformation élastique (ϵ_E) deux fois supérieure en comparaison avec celles des alliages cristallisés. Ils ne possèdent cependant quasiment pas de E ductilité, ou alors que très faiblement. Par contre, leur rigidité, ou module de Young (E), reste équivalente à celle de leur homologue cristallisé. Ainsi, les verres métalliques présentent un comportement super élastique. Pour des détails concernant les valeurs des différentes paramètres ($E, H, K_C, \epsilon_E, \sigma_E$) en fonction des compositions, le lecteur pourra se reporter à une bibliographie abondante sur le sujet. [13]

Une autre propriété intéressante des verres métalliques est qu'ils possèdent une température de transition vitreuse (T_g). Pour des températures proches de T_g , le liquide surfondu se comporte comme un liquide visqueux, et il est alors possible de l'injecter dans des moules pour lui conférer des formes complexes. Cette méthode porte le nom de déformation à chaud. Le retrait après refroidissement étant très faible, il est possible de reproduire par coulée en moule, ou déformation à chaud, des formes complexes et fines, avec des détails très fins [14] (figure 1.7)

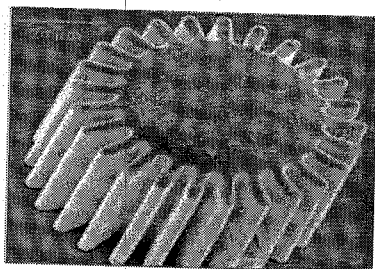


Figure 1.7 : Image MEB d'un engrenage en alliage amorphe obtenue par coulée en moule[15]

Plus, si le moule est parfaitement lisse, l'aspect final de l'objet sera brillant comme un miroir, ce qui est également très attractif d'un point de vue esthétique. .

D'autres propriétés comme leurs propriétés magnétiques [16] (champs coercitifs faibles, perméabilités fortes, pas d'anisotropie magnétique), ou leurs propriétés chimiques [17] (bonne résistance à la corrosion en milieu acide de certains alliages), font des verres métalliques des matériaux très attractifs.

1.4.3 obtention des verres métalliques :

Pour obtenir un verre métallique, il faut éviter sa cristallisation et la remplacer par une transition vitreuse. Un moyen d'éviter cette réaction est de refroidir suffisamment rapidement le liquide pour que la cristallisation n'ait pas le temps de s'effectuer, alors la structure du liquide, ce qui conduit à un verre. Il faut donc empêcher la germination et la croissance des cristaux.

Comme les alliages métalliques cristallisent très facilement, il faut refroidir extrêmement rapidement toute l'épaisseur du produit. La vitesse de refroidissement au cœur du produit est limitée par l'épaisseur de celui-ci et par la conduction thermique du matériau. Pour obtenir une vitesse élevée, il faut donc une épaisseur suffisamment faible [18].

1.4.4. Que peut-on faire avec des verres métalliques ?

Les verres métalliques sont aujourd'hui utilisés dans de nombreux domaines ; il se trouve cependant qu'ils sont « nés » au départ sans application. En réalité, les applications pour lesquelles ces matériaux sont aujourd'hui utilisés sont apparues a posteriori, au fur et à mesure que des propriétés nouvelles ont été mises en évidence. Ces matériaux sont à vrai dire toujours dans une période d'incubation, puisque toutes leurs propriétés n'ont pas encore été complètement explorées. Certains verres métalliques sont néanmoins, aujourd'hui déjà commercialement exploités (figure 1.8).

A titre d'exemples, nous pouvons citer l'utilisation de ces derniers dans la fabrication de clubs de golf, de raquettes de tennis, de battes de baseball, mais aussi de ressorts pour des pistons de soupapes utilisés dans l'industrie automobile. Il est important dans ce type d'applications que le matériau puisse emmagasiner et restituer un maximum d'énergie élastique dans un volume minimal. Un matériau est considéré comme performant si son

Rapport σ_E^2/E est grand. Dans le cas des verres métalliques, le rapport σ_E^2/E est plus grand que pour les autres matériaux existants.

Les verres métalliques sont aussi exploités pour la fabrication de transformateurs, d'aimants doux, de têtes de lecture pour disques magnétiques, ou d'antivols, car ils présentent des champs coercitifs faibles, des perméabilités fortes, et globalement, de faibles pertes énergétiques durant le cycle aimantation/désaimantation.

Enfin, leur aspect brillant et leur bonne dureté en font d'excellents matériaux pour la fabrication de miroirs de projecteur, ou d'« objets-bijoux » qui nécessitent une bonne qualité de surface et un poli parfait. Nous citerons par exemple leur utilisation dans la fabrication des cadrans de montres, des bijoux, des boîtiers de téléphones portables, ou de clés USB figure (I.8)[19].

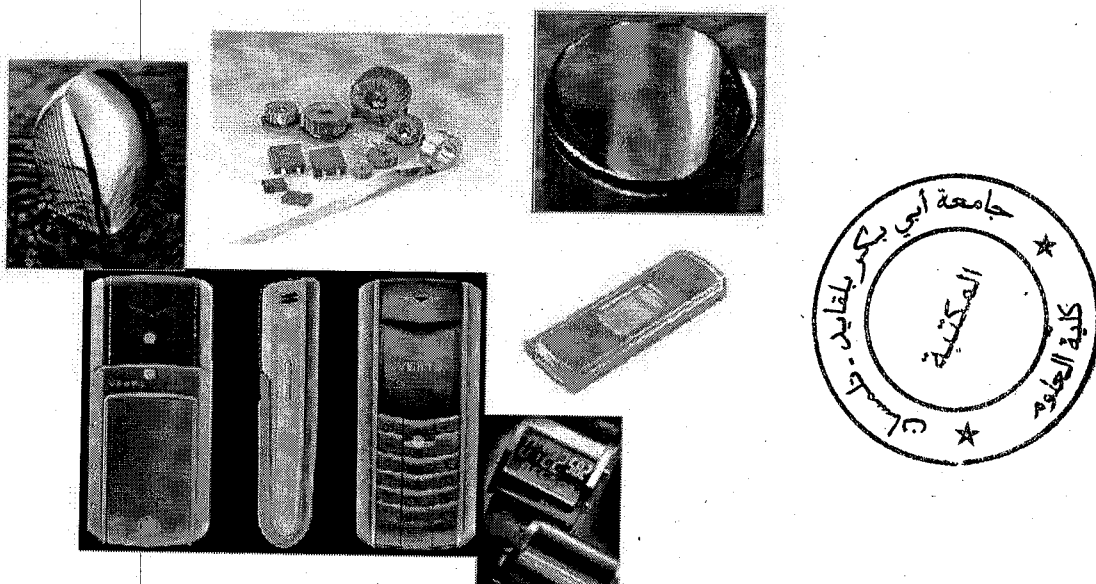


Figure 1.8 : Quelques objets commercialement disponibles qui exploitent certaines propriétés attractives des verres métalliques (club de golf, transformateurs, miroir, téléphone, clé USB et montre.[21]

1.4.4 les verres métalliques massifs à base de terre rare :

Les verres métalliques massifs à base de terre rare ont obtenu beaucoup d'attention à la fois scientifique et technologique en raison de leur excellente aptitude à la vitrification . Ces REBMGs ont des propriétés uniques et fonctionnelles des applications potentielles comme les matériaux vitreux , ils ont afficher de nombreuses propriétés fascinantes telles que

des propriétés thermoplastiques près de la température ambiante, effet magnétocalorique excellente, le magnétisme dur, et polyamorphism, qui sont tous de l'intérêt non seulement pour la recherche fondamentale mais aussi pour la métallurgie et de la technologie

REBMGS ont une transition vitreuse beaucoup plus élevée et des températures de cristallisation plus élevée et des modules élastiques plus grande. Il est constaté que la stabilité thermique est étroitement corrélée avec les constantes élastiques dans les verres métalliques massifs à base de terre rare.

En raison de la structure électronique unique d'éléments de terres rares, les propriétés électriques et magnétiques des REBMGS sont particulièrement pris en compte. Les travaux ont des implications pour la recherche de nouveaux verres métalliques avec des propriétés contrôlables et pour comprendre la nature de la formation du verre.[22]

I.4.5 l'aptitude à la vitrification (Glass Forming Ability)

L'aptitude à la vitrification (GFA) est une terminologie très importante dans l'étude de la formation des verres métalliques. Cependant, aucune définition standard n'a été déposée pour cette dernière jusqu'à maintenant, pour cela plusieurs indicateurs ont été développés [23].

La haute GFA signifie que les alliages peuvent être vitrifiés sous forme massifs ce qui correspond à une basse vitesse de refroidissement critique R_c , et les verres obtenus présentent une résistance à la cristallisation élevée. La GFA peut quantitativement être décrit par la valeur de R_c , mais R_c ne peut pas être mesurée de manière pratique en raison du processus de refroidissement susceptible. Par conséquent, différents critères et paramètres ont été proposés pour prédire et évaluer la GFA d'un alliage [24]. Il s'agit notamment de la température de transition vitreuse réduite Trg ($Trg = T_g / T_l$, où T_g et T_l sont la température de transition vitreuse et la température de liquidus, respectivement), l'intervalle de température de la surfusion de la région liquide ΔT et le paramètre γ ($\gamma = T_x / (T_g + T_l)$, où T_x est la température de cristallisation).

- [1] Glenn orveillon-dubajic :Verres métalliques : conception, synthèse et caractérisation des propriétés magnétiques et de transport 2008. Nd3566
- [2] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, seventh edition.
- [3] - Elisabeth Adam ,Pascal Bouffandeau ,Alexandre Darraspen ,Romuald FixSébastien et joueOlivier Welker : Méthodes d'analyse des composes amorphe
- [4] - Elisabeth Adam ,Pascal Bouffandeau ,Alexandre Darraspen ,Romuald FixSébastien et joueOlivier Welke :Méthodes d'analyse des composes amorphes.
- [5] – Cuimin BAO : Etude sur la définition du terme « amorphe » par l'analyse comparative de rubans de Pd₈₂Si₁₈ en terme de production structure , microstructure ,qualité et propriétés mequaniques 2007
- [6] Glenn orveillon-dubajic :Verres métalliques : conception, synthèse et caractérisation des propriétés magnétiques et de transport 2008. Nd3566
- [7] Révész Á., Concustell A., Varga L.K., Suriñach S., Baró M.D., *Materials Science and Engineering A* 375–377 (2004) 776
- [8] Koike J., Parkin D.M., Nastasi M., *Journal of Materials Research* 5(1990) 1414
- [09] Glenn orveillon-dubajic :Verres métalliques : conception, synthèse et caractérisation des propriétés magnétiques et de transport 2008. Nd3566
- [10] Glenn orveillon-dubajic :Verres métalliques : conception, synthèse et caractérisation des propriétés magnétiques et de transport 2008. Nd3566
- [11] Miracle D.B., *Acta Materialia* 54 (2006) 4317
- [12] 7 Miracle D.B., *Nature Materials* 3 (2004) 697
- [13] Inoue A., *Acta Materialia*, 48 (2000) 279 , Xu D.H., Duan G., Johnson W.L., Garland C., *Acta Materialia* 52 (2004) 3493.
- [14] Inoue A., Takeuchi A., *Materials and Science Engineering A* 375-377(2004) 16
- [15] Image copiée du site de la société liquidmetal (www.liquidmetal.com).

[16] -Lin C.Y., Tien H.Y., Chin T.S., Applied Physics Letters 86(2005) 162501, Chiriac H., Lupu N., Physica B 299 (2001) 293

[17] -Asami K. Qin C.L., Zhang T., Inoue A., Materials and Science Engineering A 375-377(2004) 235A.

[18]. A.-F. GOURGUES-LORENZON :les verres métalliques massifs .

[19]- Glenn orveillon-dubajic :Verres métalliques : conception, synthèse et caractérisation des propriétés magnétiques et de transport 2008. Nd3566

[20]- Glenn orveillon-dubajic :Verres métalliques : conception, synthèse et caractérisation des propriétés magnétiques et de transport 2008. Nd3566

[21]- F.Q. Guo, S.J. Poon, G.J. Shiflet, Appl. Phys. Lett. 83 (2003) 2575, O.N. Senkov, D.B. Miracle, H.M. Mullens, J. Appl. Phys. 97 (2005)103502.

[22] -A.L. Greer, Nature 366 (1993) 303.

CHAPITRE II : Les techniques du Datamining

II.1 Data mining

II.1.1 Historique :

L'expression « data mining » avait une connotation péjorative, au début des années 1960, exprimant le mépris des statisticiens pour les démarches de recherche de corrélation sans hypothèses de départ. Elle tombe dans l'oubli, puis Rakesh Agrawal l'emploie à nouveau dans les années 80 lorsqu'ils entamaient ses recherches sur des bases de données d'un volume de 1Mb. Le concept d'exploration de données fait son apparition, d'après Pal et Jain, aux conférences de l'IJCAI en 1989. Gregory Piatetsky-Shapiro chercha un nom pour ce nouveau concept dans la fin des années 80, aux GTE Laboratories. « Data mining » étant sous la protection d'un copyright, il employa l'expression « Knowledge discovery in data bases » KDD.

II.1.2 Présentation générale :

L'exploration de données, connue aussi sous l'expression de fouille de données, forage de données, prospection de données, data mining, ou encore extraction de connaissances à partir de données, « ECD » en français, « KDD » en anglais, a pour objet l'extraction d'un savoir ou d'une connaissance à partir de grandes quantités de données, par des méthodes automatiques ou semi-automatiques.

Le Data mining est un sujet qui dépasse aujourd'hui le cercle restreint de la communauté scientifique pour susciter un vif intérêt dans le monde des affaires. La littérature spécialisée et la presse ont pris le relais de cet intérêt et proposent pléthore de définitions générales du Data Mining :

- ❖ L'extraction d'informations originales, auparavant inconnues, potentiellement utiles à partir de données.
- ❖ La découverte de nouvelles corrélations, tendances et modèles par tamisage d'un large volume de données.
- ❖ Un processus d'aide à la décision où les utilisateurs cherchent des modèles d'interprétation dans les données.

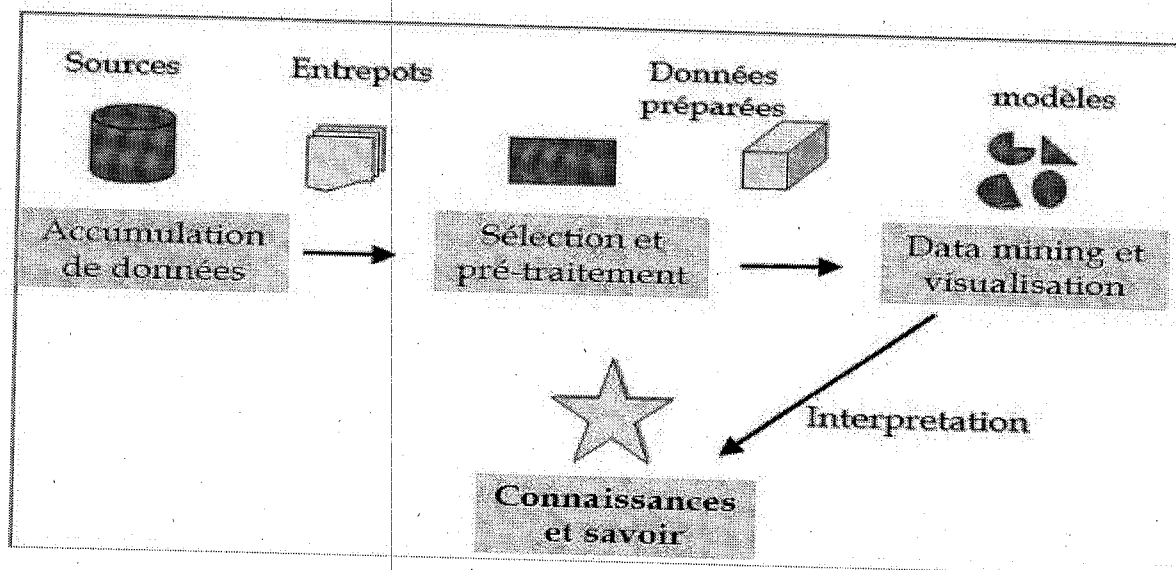
- ❖ D'autre, plus poétiques, parlent de « torturer l'information disponible jusqu'à ce qu'elle avoue.

Plus généralement, les spécialistes du domaine considèrent que la « découverte de connaissances dans les bases de données » (ou Knowledge Discovery in Database, abrégé en KDD) englobe tout le processus d'extraction de connaissances à partir de données. Le mot « connaissance » est compris ici comme étant un ensemble de relations (règles, phénomènes, exceptions, tendances ...) entre des données.[1]

II.1.3 Les processus du Datamining :

Quel que soit le domaine d'applications, une opération de datamining suit globalement un processus en huit étapes :

- ✦ Poser le problème
- ✦ Rechercher des données.
- ✦ Sélectionner les données pertinentes.
- ✦ Nettoyer les données.
- ✦ Transformer les variables
- ✦ Rechercher le modèle.
- ✦ Evaluer les résultats.
- ✦ Intégrer la connaissance.[2]



Figure(II.1) : les différentes étapes de l'opération du Datamining[3]

Ce processus n'est pas linéaire, il se veut cyclique, et ne consiste pas à une succession d'études ad hoc, mais doit bien permettre de capitaliser les connaissances acquises sous forme de connaissances explicites. Ceci est possible en structurant les contenus de la manière suivante :

- Classification : elle permet de prédire si une instance de donnée est membre d'un groupe ou d'une classe prédéfinie, (apprentissage supervisé: classe connue à l'avance).
- Clustering (segmentation) : c'est le partitionnement logique de la base de donnée en groupes présentant les mêmes similarités, (apprentissage non supervisé : classes inconnues).
- Recherche d'associations : cette étape est non supervisé puisque elle cherche à trouver des corrélations et relations entre attribuées.
- Recherche de séquences : elle consiste à l'exploration de liaisons entre les événements et l'extension des règles d'association.

Détection de déviation : en se basant sur la notion de la distance entre instances, et sur l'expression du problème en lui-même, s'il est temporelle et les instances évoluent, ou il est spatiale et caractérise un cluster d'instances, nous allons repérer les instances ayant les caractéristiques les plus différents des autres.

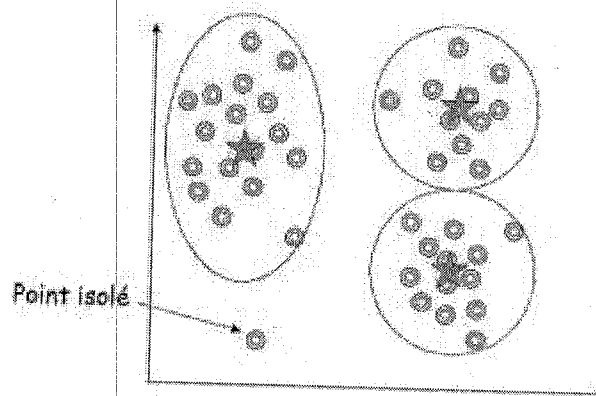


Figure (II.2) Illustration du schéma d'exploitation de la base de donnée [4]

II.1.4. Les principales applications du Data Mining :

- Grande distribution : Analyse des comportements des consommateurs, recherche des similarités des consommateurs en fonction de critères géographiques ou socio-démographiques...

- Laboratoires pharmaceutiques : Modélisation comportementale et prédiction de médications ou de visites, optimisation des plans d'action des visiteurs médicaux pour le lancement de nouvelles molécules, ...
- Banques : recherche de formes d'utilisation de cartes caractéristiques d'une fraude , modélisation prédictive des clients partants, détermination de pré-autorisation de crédit revolving,...
- Assurance : modèles de sélection et de tarification, analyse des sinistres,...
- Transport et voyagistes : optimisation des tournées, prédiction de carnets de commande,...
- Télécommunications , eau et énergie : simulation de tarifs , détection de formes de consommation frauduleuses,[5]

Dans le cadre de cette étude nous utilisons deux techniques pour analyser la base de donnée des verres métalliques massifs à base de terre rare qui sont : la régression PLS et L'analyse en composantes principales (ACP).

II.2.L'Analyse en composantes principales :

II.2.1-Présentation générale :

L'Analyse en Composantes Principales (ACP) est une méthode de la famille de l'analyse des données et plus généralement de la statistique multivariée, qui consiste à transformer des variables liées entre elles (dites "corrélées" en statistique) en nouvelles variables décorrélées les unes des autres. Ces nouvelles variables sont nommées "composantes principales", ou axes. Elle permet au praticien de réduire l'information en un nombre de composantes plus limité que le nombre initial de variables.

Il s'agit d'une approche à la fois géométrique (représentation des variables dans un nouvel espace géométrique selon des directions d'inertie maximale) et statistique (recherche d'axes indépendants expliquant au mieux la variabilité - la variance - des données). Lorsqu'on veut alors compresser un ensemble de variables aléatoires, les premiers axes de l'ACP sont un meilleur choix, du point de vue de l'inertie ou la variance expliquée.

L'analyse en composantes principales (A.C.P.) est une méthode mathématique d'analyse graphique de données qui consiste à rechercher les directions de l'espace qui représentent le mieux les corrélations entre n variables aléatoires (relation linéaire entre elles).

Simplement dit, une A.C.P. permet de trouver des similitudes de comportement d'achat entre les classes des données observées.

Même si l'A.C.P. est majoritairement utilisée pour visualiser des données, il ne faut pas oublier que c'est aussi un moyen :

- ✓ De décorrélérer ces données. Dans la nouvelle base, constituée des nouveaux axes, les points ont une corrélation nulle
- ✓ De classifier ces données en amas (clusters) corrélés (dans l'industrie c'est surtout cette possibilité qui est intéressante!).[6]

Remarque: L'A.C.P. est aussi connue sous le nom de "transformée de Karhunen-Loève" ou de "transformée de Hotelling" et peut aussi bien être appliquée sans programmation V.B.A. dans MS Excel que dans des logiciels spécialisés (ou le temps de calcul sera par contre plus bref... et plus précis aussi...).

Lorsque nous ne considérons que deux effets, il est usuel de caractériser leurs effets conjoints via le coefficient de corrélation. Lorsque l'on se place en dimension deux, les points disponibles (l'échantillon de points tirés suivant la loi conjointe) peuvent être représentés sur un plan. Le résultat d'une A.C.P. sur ce plan est de déterminer les deux axes qui expliquent le mieux la dispersion des points disponibles.

Lorsqu'il y a plus de deux effets, par exemple trois effets, il y a trois coefficients de corrélations à prendre en compte. La question qui a donné naissance à l'A.C.P. est : comment avoir une intuition rapide des effets conjoints?

En dimension plus grande que deux, une A.C.P. va toujours déterminer les axes qui expliquent le mieux la dispersion du nuage des points disponibles.

II.2.2.La methode ACP

L'ACP propose, à partir d'un tableau rectangulaire de données comportant les valeurs de p variables quantitatives pour n unités (appelées aussi individus), des représentations géométriques de ces unités et de ces variables. Ces données peuvent être issues d'une procédure d'échantillonnage ou bien de l'observation d'une population toute entière. Les représentations des unités permettent de voir s'il existe une structure, non connue a priori, sur cet ensemble d'unités. De façon analogue, les représentations des variables permettent d'étudier les structures de liaisons linéaires sur l'ensemble des variables considérées. Ainsi, on cherchera si l'on peut distinguer des groupes dans l'ensemble des unités en regardant quelles sont les unités qui se ressemblent, celles qui se distinguent des autres, etc. Pour les variables, on cherchera quelles sont celles qui sont très corrélées entre elles, celles qui, au contraire ne sont pas corrélées aux autres, etc.[7]

II.2.3 -Tableau de données :

Les données sont les mesures effectuées sur n unités $\{u_1, u_2, \dots, u_i, \dots, u_n\}$. Les p variables quantitatives qui représentent ces mesures sont $\{v_1, v_2, \dots, v_j, \dots, v_p\}$.

Le tableau des données brutes à partir duquel on va faire l'analyse est noté X

$$\begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \dots & v_j & \dots & v_p \\ x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2j} & \dots & x_{2p} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \dots & \cdot \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nj} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} \quad \text{[II.1]}$$

On peut représenter chaque unité par le vecteur de ses mesures sur les p variables [8]:

$$u_i = [x_{i1} \ x_{i2} \ \dots \ x_{ij} \ \dots \ x_{ip}] \quad \text{[II.2]}$$

Ce qui donne

$$U_i = \begin{pmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \cdot \\ x_{ij} \\ \cdot \\ x_{ni} \end{pmatrix} \quad \text{[II.3]}$$

Alors U est un vecteur de R^p

De façon analogue, on peut représenter chaque variable par un vecteur de R^n dont les composantes sont les valeurs de la variable pour les n unités :

$$v_j = \begin{pmatrix} x_{1j} \\ x_{2j} \\ \cdot \\ x_{ij} \\ \cdot \\ x_{nj} \end{pmatrix} \quad \text{[II.4]}$$

Pour avoir une image de l'ensemble des unités, on se place dans un espace affine en choisissant comme origine un vecteur particulier de R^p , par exemple le vecteur dont toutes les coordonnées sont nulles. Alors, chaque unité sera représentée par un point dans cet espace. L'ensemble des points qui représentent les unités est appelé traditionnellement "nuage des individus".

En faisant de même dans R^n , chaque variable pourra être représentée par un point de l'espace affine correspondant. L'ensemble des points qui représentent les variables est appelé "nuage des variables".

II.2.4 Choix d'une distance :

Pour faire une représentation géométrique, il faut choisir une distance entre deux points de l'espace. La distance utilisée par l'ACP dans l'espace où sont représentés les unités, est la distance euclidienne classique. La distance entre deux unités u_i et u_r est égale à

$$d^2(u_i, u_i') = \sum_{j=1}^p (x_{ij} - x_{i'j})^2 \quad [II.5]$$

Avec cette distance, toutes les variables jouent le même rôle et les axes définis par les Variables constituent une base orthogonale. à cette distance on associe un produit scalaire entre deux vecteurs [10] :

$$\langle \vec{ou}_i, \vec{ou}_i' \rangle = \sum_{j=1}^p (x_{ij} x_{i'j}) = 'U_i U_i' \quad [II.6]$$

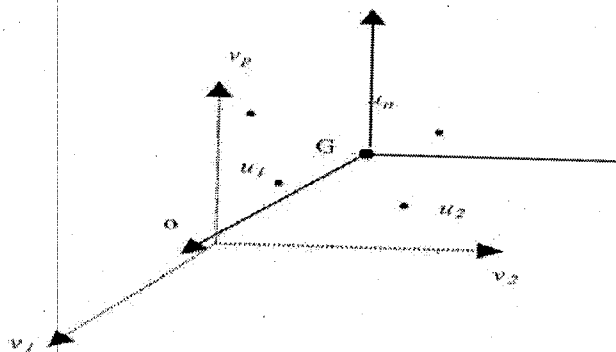
ainsi que la norme d'un vecteur :

$$\|\vec{ou}_i\|^2 = \sum_{j=1}^p x_{ij}^2 = 'U_i U_i' \quad [II.7]$$

On peut alors définir l'angle α entre deux vecteurs par son cosinus :

$$\cos(\alpha) = \frac{\langle \vec{ou}_i, \vec{ou}_i' \rangle}{\|\vec{ou}_i\| \|\vec{ou}_i'\|} = \frac{\sum_{j=1}^p x_{ij} x_{i'j}}{\sqrt{\sum_{j=1}^p x_{ij}^2} \sqrt{\sum_{j=1}^p x_{i'j}^2}} = \frac{'U_i U_i'}{\sqrt{'U_i U_i'} \sqrt{'U_i' U_i'}} \quad [II.8]$$

II.2.5 Choix de l'origine :



Figure(II.3) : Choix de l'origine[11]

Le point o correspondant au vecteur de coordonnées toutes nulles n'est pas forcément une origine satisfaisante, car si les coordonnées des points du nuage des individus sont grandes, le nuage est éloigné de cette origine. Il apparaît plus judicieux de choisir une origine liée au nuage lui-même : le centre de gravité du nuage (Fig II-3)

Pour l'ACP on choisit de donner le même poids à tous les individus.

Le centre de gravité G du nuage des individus est alors le point dont les coordonnées sont les valeurs moyennes des variables :

$$G = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{i1} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij} \\ \vdots \\ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ip} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{\bullet 1} \\ \vdots \\ x_{\bullet j} \\ \vdots \\ x_{\bullet p} \end{pmatrix} \quad [II.8]$$

En effet, lorsqu'il existe des corrélations entre les m variables descriptives d'une distribution de données, la dimension m de l'espace des données excède le nombre ℓ de variables caractéristiques réellement nécessaires pour décrire ces données. En statistique, m est appelée dimension superficielle des données tandis que ℓ désigne leur dimension intrinsèque. Plus fortes sont les corrélations entre variables descriptives des données, plus petit est le nombre de variables caractéristiques utiles à leur représentation. Suivant ces observations, les m variables descriptives apparaissent comme des fonctions des ℓ variables caractéristiques, encore appelées variables latentes ou facteurs.

-II.2.6. Identification du modèle ACP :

Soit $x = [X_1, \dots, X_m]^T$ un vecteur d'observations de n variables aléatoires. On notera \bar{x} le vecteur correspondant à la moyenne des observations de x et Σ la matrice de covariance de ces m observations. L'estimation des paramètres du modèle ACP se résume en une estimation des valeurs et vecteurs propres de la matrice de covariance Σ . Puisque la matrice de covariance Σ est carrée de dimension $n \times n$ et symétrique, on peut, selon l'algèbre linéaire, vérifier une relation de type : [12]

$$P^t \Sigma P = L \quad [II.10]$$

Où L est une matrice diagonale et P est une matrice orthonormale. Les éléments diagonaux de $L = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ sont les valeurs propres de la matrice de covariance Σ alors que les vecteurs colonnes de P sont les vecteurs propres de Σ .

Les valeurs propres λ_i peuvent être obtenues par la solution de l'équation caractéristique

$$\text{Det} [\Sigma - \lambda_i I] = 0 \tag{II.11}$$

pour les n valeurs propres. Connaissant les valeurs propres λ_i , on peut déduire les vecteurs propres de la matrice de covariance par la solution de

$$[\Sigma - \lambda_i I] A_i = 0 \tag{II.12}$$

Et

$$U_i = \frac{A_i}{\sqrt{A_i^T A_i}} \tag{II.13}$$

Pour les n vecteurs propres. Notons que l'équation (II.12) est aussi appelée équation de normalisation. Il est intéressant de constater qu'ici les éléments des vecteurs u_i sont les cosinus directeurs des axes générés par une rotation dans l'espace des observations. Nous pouvons donc calculer tout un ensemble de valeurs à partir des ces nouveaux axes.

II.2.7 Interprétation des résultats de l'ACP :

En ACP normée, les variables projetées sur chaque plan factoriel se trouvent à l'intérieur d'un cercle de rayon unité. Plus une variable est projetée vers le bord du cercle, mieux elle est représentée. Par ailleurs, deux variables bien représentées et proches l'une de l'autre sont corrélées positivement tandis que deux variables qui s'opposent sont corrélées négativement. Une orthogonalité entre deux variables traduit l'absence de corrélation linéaire.

Notons que l'ACP ne mesure que des liens linéaires entre variables. Avant de conclure sur l'existence ou l'absence de relations entre variables, il est donc utile d'examiner l'allure de leurs nuages de corrélation.

II.3.La régression PLS

Introduction :

La régression PLS (« Partial Least Squares régression » ou « Projection to Latent Structure », moindres carrés partiels en français) . La régression PLS maximise la variance des prédicteurs(X_i) =X et maximise la corrélation entre X et la variable à expliquer Y . Cet algorithme emprunte sa démarche à la fois à l'analyse en composantes principales (ACP) et à la régression . Plus précisément, la régression PLS cherche des composantes, appelées variables latentes, liées à X et à Y , servant à exprimer la régression de Y sur ces variables et finalement de Y sur X. On distingue la régression PLS univariée, ou « régression PLS1 », de la régression PLS multivariée, appelée également « régression PLS2 ». Dans le premier cas, la régression ne porte que sur une seule variable expliquée. Dans le second, il peut y avoir plusieurs variables expliquées.[13]

II.3.1-Contexte historique :

La régression PLS (Partial Least Squares régression) est une technique d'analyse et de prédiction relativement récente. Elle a été conçue pour faire face aux problèmes résultants de l'insuffisance de l'utilisation de la régression linéaire classique, qui trouve ses limites dès lors que l'on cherche à modéliser des relations entre des variables pour lesquelles il y a peu d'individus, ou beaucoup de variables explicatives en comparaison au nombre d'individus (le nombre de variables explicatives pouvant excéder très largement le nombre d'individus), ou encore lorsque les variables explicatives sont fortement corrélées entre elles.

La régression PLS tire son origine des sciences sociales, plus précisément des sciences économiques, Herman Wold 1966 [14]. Elle devient très populaire en chimie grâce au fils d'Herman, Svante. La régression PLS est née de l'association de l'algorithme NIPALS (Non linear Itérative Partial Least Squares) développé par H. Wold [15] pour l'analyse sur composantes principales et de l'approche PLS proposée par H. Wold pour l'estimation des modèles d'équations structurelles sur les variables latentes. Il en résulte une représentation "classique" de la régression PLS sous la forme d'un algorithme (remarquons qu'il y a plusieurs versions possibles de l'algorithme NIPALS aboutissant aux mêmes résultats). Une méthode d'estimation alternative pour les composantes de la régression est l'algorithme SIMPLS de Jong [16].

1966 : Herman Wold [15] publie un ouvrage introduisant le PLS, alors appelé Non Linear Iterative Partial Least Squares NIPALS. 1983 : Svante Wold (le fils d'Herman) et Harold Mertens [17] adaptent NIPALS au problème de régression avec trop de prédicteurs et appellent PLS cette adaptation de l'algorithme. 1990 : Stone et Brooks [18] introduisent la PLS dans le contexte du "Continuum Regression" (elle ajoute un paramètre continu λ , autorisant la méthode de modélisation à varier continûment entre MLR "Multiple Linear Regression" ($\lambda = 0$), PLS ($\lambda = 0.5$) et PCR "Principal Component Régression" ($\lambda = 1$)). Ce qui signifie une première projection sérieuse du PLS dans un contexte statistique. Plus récemment la littérature concernant la méthode PLS s'est largement étoffé, surtout dans le journal "Chemometric". De plus un ouvrage entièrement en français dédié à cette méthode a été écrit par Tenenhaus en 1998 [19].

II.3.2- Le principe :

Le modèle de l'approche PLS s'applique sur des blocs de variables continues appelées variables manifestes, chacun de ces blocs sont des observations effectuées sur les mêmes individus. On pense dans ce modèle que chaque bloc de variables peut être résumé par une variable latente. Les variables manifestes peuvent engendrer les variables latentes, elles sont appelées alors variables manifestes formatives, ou bien elles peuvent être engendrées par les variables latentes auquel cas elles sont dénommées variables manifestes réflexives. Les variables latentes dites endogènes sont expliquées par les autres variables latentes, les variables latentes explicatives sont dénommées exogènes.

La régression sur composantes principales produit une matrice de poids W reflétant la structure de covariances entre les variables prédictives alors que la régression PLS produit une matrice de poids W reflétant les structures de covariance entre les prédicteurs et les réponses. Pour établir le modèle, la régression PLS produit une matrice de poids pour X telle que $T = XW$, c'est à dire les colonnes de W sont des vecteurs de poids pour les colonnes de X produisant la matrice de facteurs de score $T_{n \times c}$ correspondante.

Comme les régressions linéaires, PLS prend pour hypothèse le modèle [20]

$$Y = XB + E$$

[II.13]

Où B : coefficients de régression.

E : terme de bruit pour le modèle.

On recherche deux séries de matrices T et U de « scores » (cotes), P et Q de « loadings » (charges) tels que

$$X = TP' + E$$

$$Y = UQ' + F$$

$$T = XW^*$$

[II.14]

D'autre part, les cotes de X sont de bons prédicteurs de Y , ce qui s'écrit

$$Y = UQ' + G$$

[III.15]

où X est une matrice de $m \times l$ prédicteurs,

Y est une matrice $n \times p$ de variables réponses,

T et U sont des matrices $n \times l$ de cotes, composantes ou facteurs,

P et Q sont les matrices $m \times l$ et $p \times l$ des charges,

et les matrices E et F sont les termes d'erreur, présumés être normaux.

S. Wold et coll. expliquent ainsi les différentes matrices de l'approche PLS : Les matrices de cotes T multipliées par les matrices de charges P' sont un bon résumé de X garantissant que les termes de résidus E soient faibles. De même U et Q' sont de bons résumés de Y , minimisant F . Les cotes de X sont aussi de bons prédicteurs de Y voir l'éq (II.15).

Les résidus G expriment l'écart entre l'observation et le modèle. On retrouve le modèle de régression multivarié

$$Y = XW^* + Q' + F$$

[III.16]

$OU\ B=W*Q'$

II.3.3 la methode :

La méthode PLS est une méthode de régression linéaire de c variables réponses sur p variables explicatives toutes mesurées sur les mêmes n individus. Les tableaux des observations, notés respectivement Y et X , de dimensions $n \times c$ et $n \times p$, sont supposés centrés et éventuellement réduits par rapport aux poids

(p_1, \dots, p_n) . On note $D = \text{diag}(p_1, \dots, p_n)$ la matrice diagonale des poids .

L'intérêt de la méthode PLS comparée à la régression sur composantes principales (RCP) , réside dans le fait que les composantes PLS sur les X , notées t , sont calculées "dans le même temps que des régressions partielles sont exécutées.

II.3.4- Propriétés des composantes t_1, \dots, t

Les formules d'actualisation des variables à la relation

$$(t_k, t_l)_D = (t_k, u_l)_D = 0, \forall l > k \tag{II.17}$$

La non corrélation ou D -orthogonalité, mutuelle entre les composantes t_1, \dots, t_k a de multiples conséquences. On montre ainsi par récurrence que t_k appartient à ImX espace vectoriel engendré par les prédicteurs. Plus précisément, [21]

$$t_k = X\alpha_k \text{ avec } \alpha_1 = w_1 \quad \text{et}$$

$$\alpha_k = \left[I_p - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{\alpha_j \alpha_j^T}{\|\alpha_j\|_D^2} X^T D X \right] w_k, \quad \forall k > 1 \tag{II.18}$$

La non corrélation implique en outre que

$$\sum_{k=1}^{k-1} P_{t_k} = P_{T_A}, \text{ où } P_{T_A} = T_A (T_A^T D T_A)^{-1} T_A^T D \tag{II.19}$$

CHAPITRE II

est le projecteur orthogonal sur la matrice $T_A = [t_1 \parallel \dots \parallel t_A]$.

. Les deux derniers résultats permettent de considérer PTA comme le projecteur sur le sous espace de ImX engendré par les composantes t_1, \dots, t

. Dans le cas particulier où $A = rang(X)$, $PTA = PX$.

II.3.5-Les avantages de la régression PLS :

La régression PLS vise également à élaborer des facteurs, résumés des variables initiales. A la différence que la méthode tient compte des informations de l'endogène pour élaborer les axes factoriels. Ce faisant elle cumule un double avantage nécessaire:

- (1)- elle résiste bien à la colinéarité et fournit des coefficients qui permettent d'évaluer la contribution de chaque exogène dans l'explication des valeurs de la variable à prédire ;
- (2) -les axes factoriels sont optimisés pour l'explication de Y, ils sont de significativité décroissante, nous n'avons plus besoin, comme dans la régression sur facteurs de l'ACP, de travailler en deux temps en choisissant d'abord les axes porteurs d'information, puis de vérifier leur efficacité dans la prédiction.

les avantages de la régression PLS sont nombreux :

- Tout d'abord, dans le cas régression PLS multivariée (régression PLS2), il peut y avoir plusieurs variables expliquées. Nous n'évoquons malheureusement pas ce cas.
- Dans le cas où une des variables explicatives serait une stricte combinaison linéaire des autres, la régression linéaire ne peut avoir lieu sans enlever au moins une variable explicative de l'analyse. La régression PLS ne présente pas cet inconvénient.
- La régression PLS peut traiter des cas où les individus seraient moins nombreux que les variables explicatives. La régression linéaire ne peut le faire.
- La régression PLS, étant basée sur l'algorithme NIPALS, permet de travailler sur des échantillons même si certaines données manquent pour certains individus pour certaines variables, et ce sans même à avoir à estimer au préalable les données en question. Néanmoins,

nous nous limiterons dans ce mémoire aux formules de la régression sans données manquantes, car elles sont plus faciles à interpréter.

- Lorsque les variables explicatives sont fortement corrélées entre-elles, la régression linéaire devient très peu pertinente, au sens où les coefficients qui en ressortent deviennent très instable lorsque l'on « bruite » les données (on fait varier, de manière aléatoire et très légère, les données de l'échantillon). La régression PLS, basée sur des critères de covariance, est considérée comme étant plus robuste. Les coefficients demeurent stables et gardent une certaine significativité, même en présence de corrélations fortes entre les variables.[22]

Cas particulier :

- $PLS(X,X) = ACP(X)$.

Quand $Y = X$, les composantes t_k et u_k sont identiques. Le problème qui était de maximiser la covariance entre t et u , revient alors à maximiser la variance de t sous la contrainte $\|w\|^2=1$. Alors, $\lambda_1 = \text{var}(t_1)$ est la plus grande valeur propre de $V = X^TDX$, matrice des covariances de X . On peut montrer que $\lambda_2 = \text{var}(t_2), \dots, \lambda_k = \text{var}(t_k)$ pour tout $k = 1, \dots, A$, et que, par récurrence, les w_k , qui sont de norme 1, sont les vecteurs propres associés aux valeurs propres λ_k de V classées en ordre décroissant. On retrouve donc l'Analyse en Composantes Principales de X .

- [1]- Gilles Venturi et René : Lefébure Gestion de la relation client « le Datamining » 1984
- [2] Gilles Venturi et René : Lefébure gestion de la relation client « le datamining » 1984
- [3] Morineau A., Aluja-Banet T. L'Analyse en Composantes Principales. CISIA, Paris, 1998.
- [4] Wuensch, K. L. (2001). Principal component analysis
- [5]]- Gilles Venturi et René : Lefébure Gestion de la relation client « le Datamining » 1984
- [6]- Wuensch, K. L. (2001). Principal component analysis
- [7] Morineau A., Aluja-Banet T. L'Analyse en Composantes Principales. CISIA, Paris, 1998.
- [8] - C. Duby, S. Robin, "*Analyse en Composantes Principales*", Département O.M.I.P(2006)
- [9]- C. Duby, S. Robin, "*Analyse en Composantes Principales*", Département O.M.I.P(2006)
- [10] C. Duby, S. Robin, "*Analyse en Composantes Principales*", Département O.M.I.P(2006)
- [11]- C. Duby, S. Robin, "*Analyse en Composantes Principales*", Département O.M.I.P(2006)
- [12]- http://www.cs.otago.ac.nz/cosc453/student_tutorials/principal_components.pdf.
- [13] A. Hoskuldsson, "PLS regression methods", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 2 (1988) 211-228.
- [14] Wold, H. (1966), "Estimation of principal component and related models by iterative least squares", *Multivariate Analysis*, ed. P.R. Krishnaiah, Newyork : Academic Press, 391 420
- [15] de Jong, S. (1993), SIMPLS : "An alternative approach to partial least squares regression", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 18, pp. 251-263.
- [16] Wold, S., Martens, H. & Wold, H. (1983), "The multivariate calibration problem in chemistry solved by the PLS method", in Proc. March 1982, *Lecture Notes in Mathematics*, Springer Verlag, Heidelberg, PP. 286-293.

- [17] Stone, M. & Brooks, R. (1990)," Continuum regression : Cross-validated sequentially constructed prediction embracing ordinary least squares, partial least squares, and principal components regression", Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 52(2), 237-269.
- [18] Tenenhaus, M. (1998), "La régression PLS, théorie et pratique" Paris : Technip.
- [19] Pagès, J. & Tenenhaus, M. (2001), "Multiple factor analysis combined with PLS path modeling. Application to the analysis of relationships between physicochemical variables, sensory profiles and hedonic judgments, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems", 58, 261-273.
- [20] A. Hoskuldsson, "PLS regression methods", Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 2 (1988) 211-228.
- [21] S.Wold, P.Geladi, k. Esbensen, J. Åohman, "*Multiway Principal Components and PLS Analysis*", Journal of Chemometrics, 1(1987), 41-56.
- [22] H. Haario, V.M. Taavitsainen, " Nonlinear data Analysis II. Examples on new link functions and optimization aspects", Chemometrics and Intelligent Laboratory Systeme 23 (1994) 51-64.

CHAPITRE III : Résultats et discussions

III.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons, les résultats liés à l'utilisation de l'Analyse en composantes principales (ACP) et la régression (PLS), appliquées sur les verres métalliques massifs à base de terre rare.

En utilisant l'analyse en composante principal (ACP) et la méthode des moindres carrés partiels (PLS), nous prouvons que les propriétés de différents verres métalliques sont fortement corrélées entre eux, et nous montrons comment cette corrélation peut être employée pour pouvoir caractériser les verres métalliques massifs qui ont une bonne aptitude à la vitrification.

Les caractéristiques structurales (absence d'ordre atomique, présence d'une température de transition vitreuse, isotropie idéale) confèrent aux verres métalliques un ensemble original de propriétés intéressantes, une bonne dureté (H), une ténacité élevée (K_C), une limite élastique (σ_E) et une déformation élastique (ϵ_E) plus élevée, d'où l'intérêt de les étudier.

Les calculs ont été faits avec ces deux techniques en utilisant le logiciel XLSTAT décrit dans l'annexe.

Afin d'étudier les corrélations entre les différents matériaux, on construit une base de données pour quelques verres métalliques massifs comprenant la température de transition vitreuse T_g , la température de cristallisation T_x , la température de fusion T_m , la température de liquidus T_l , la température de transition vitreuse réduite T_{rg} , la taille critique d_c et le critère γ .

III.2 La base de données :

La base de données (BD) est l'ensemble de données accessibles et exploitables au moyen d'un ensemble de programmes.

Le tableau ci-dessous est une base de données des verres métalliques massifs à base de terre rare.

BMG	dc(mm)	Tg (K)	Tx (k)	Tm (k)	Tl (k)	ΔT (k)	Trg (k)	γ
Y55Al25Co20	2	633	694	1035	1060	61	0,597	0,41
La55Al25Co20	5	477	540	712	771	63	0,619	0,433
Pr55Al25Co20	5	509	585	806	826	76	0,616	0,438
Nd55Al25Co20	2	525	593	839	859	68	0,611	0,428
Sm55Al25Co20	1	529	555	842	885	26	0,598	0,393
Gd55Al25Co20	2	585	657	949	971	72	0,602	0,422
Tb55Al25Co20	3	612	674	973	1001	62	0,611	0,418
Dy55Al25Co20	3	635	708	998	1031	73	0,616	0,425
Ho55Al25Co20	3	649	707	1035	1055	58	0,615	0,415
Er55Al2Co20	5	663	722	1056	1079	59	0,628	0,414

Référence [1]

Tableau[III.1.a] : Les verres métalliques massifs a base de terre rare

III.3 Les techniques de calculs :

III.3.1 L'analyse en composantes principales :

L'analyse en composantes principales ACP est efficace pour la découverte des informations de base qui peuvent être perdues quand on a une grande quantité de données à exploiter.

Après l'application de technique de l'analyse en composantes principales sur les Verres métalliques massifs a base de terre rare, on trouve que la matrice de corrélation est le premiers resultat necessaire à interpréter.

Variables	Dc	Tg	Tx	Tm	Tl	ΔT	Trg	γ
Dc	1	-0,098	-0,004	-0,186	-0,182	0,443	0,851	0,625
Tg	-0,098	1	0,979	0,990	0,994	0,058	0,112	-0,368
Tx	-0,004	0,979	1	0,966	0,962	0,261	0,184	-0,179
Tm	-0,186	0,990	0,966	1	0,996	0,047	0,006	-0,406
Tl	-0,182	0,994	0,962	0,996	1	0,005	0,007	-0,439
ΔT	0,443	0,058	0,261	0,047	0,005	1	0,370	0,869
Trg	0,851	0,112	0,184	0,006	0,007	0,370	1	0,505
γ	0,625	-0,368	-0,179	-0,406	-0,439	0,869	0,505	1

Tableau [III.2] : matrice de corrélation

Les corrélations les plus importantes sont en jaune

D'après le tableau on remarque que γ est fortement corrélée a (ΔT ,dc et Trg) avec les valeurs (0.869),(0.625) ,et (0.505) respectivement et elle est inversement corrélée a (Tg , Tx ,Tm et Tl,) avec les valeurs (-0.368), (-0.179) , (-0.406) et (-0.439)..

Cela indique que les propriétés(ou les indicateurs de l'aptitude à la vitrification) (γ ,Trg, dc et ΔT) sont fortement corrélée entre eux et inversement corrélée avec (Tx,Tg,Tl et Tm)

L'analyse en composantes principales permet de définir les axes principaux nommés PC1

et PC2. Ces axes correspondent aux vecteurs propres relatifs aux deux plus grandes valeurs propres de la matrice des covariances des données

L'analyse en composantes principales produit deux graphes : le score plot ou diagramme des individus et le loading plot ou diagramme des propriétés . Dans notre cas l'analyse des résultats de l'ACP de 10 verres métalliques massifs a base de terre rare est donnée par les graphes des observations « score » et des variables « loading ».

" Les "scores" donnent des informations sur les échantillons et traite la façon dont ils se comportent (fig III.1) et les "loadings" donnent des informations sur les relations qui existent Entre les propriétés (fig III.2).

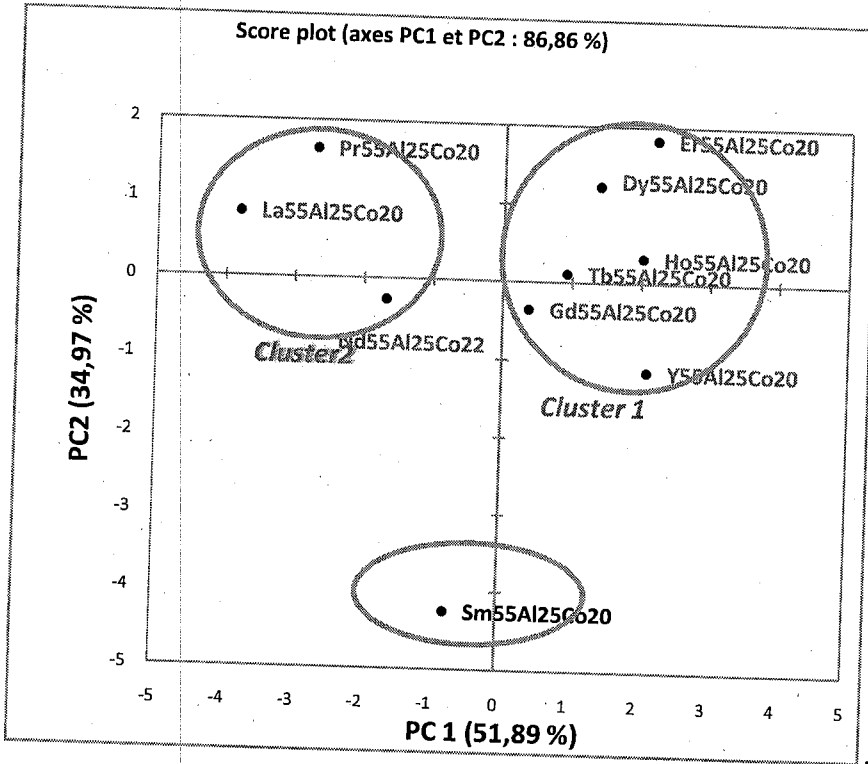


Fig [III.1] : Graphe des observations pour les verres métalliques massifs a base de terre rare

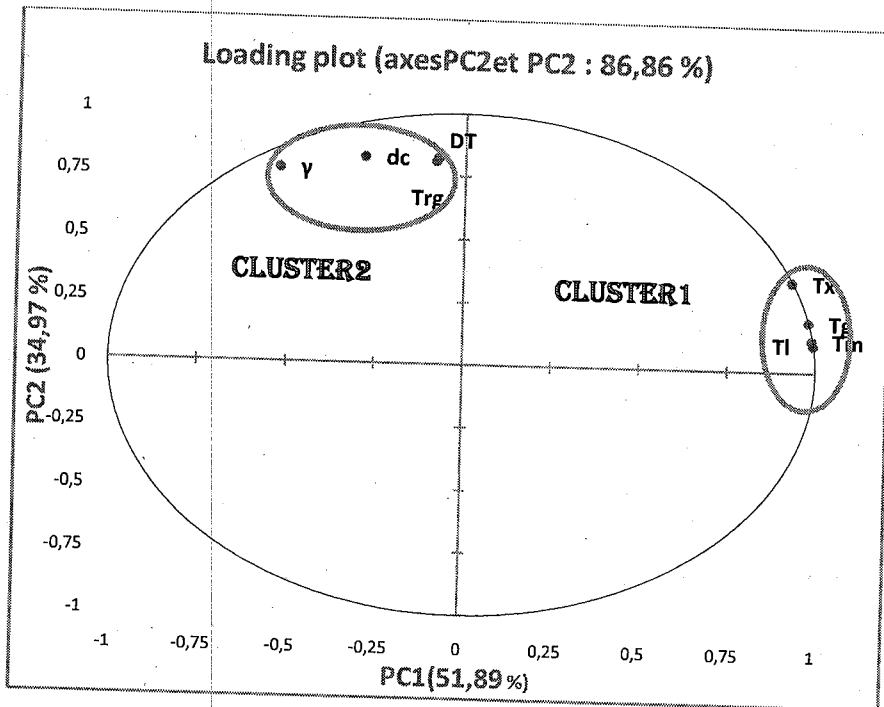


Fig [III.2] : Graphe des variables pour les verres métalliques massifs a base de terre rare

La figure (III.1). Présente le diagramme des variables. Les verres métalliques massifs que nous avons inclus dans notre étude sont dispersés sur un graphe bidimensionnel (PC1,PC2). PC1 capture (51.89%) et PC2 (34.97%) du désaccord dans l'ensemble de données.

Pour confirmer de manière quantitative si un individu est fortement lié ou non à l'une des composantes principales, il faut connaître la valeur du cosinus carré. C'est-à-dire la composante relative de cet individu sur l'axe en question. Plus la valeur (absolue) du cosinus est élevée plus l'individu est lié à l'axe. Plus le cosinus est proche de zéro, moins la variable est liée à l'axe.

Le tableau [III.3] présente l'ensemble des cosinus carrés de tous les individus pour les axes principaux PC1 et PC2. mais également pour d'autres axes où une information résiduelle existe bien que ces axes en moyenne présentent un pourcentage d'information très faible.

Le tableau suivant représente le cosinus carré des variables des verres métalliques massifs a base de terre rare

	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7
Dc	0,080	0,673	0,177	0,069	0,000	0,000	0,000
Tg	0,957	0,041	0,002	0,000	0,001	0,000	0,000
Tx	0,863	0,130	0,007	0,000	0,001	0,000	0,000
Tm (K)	0,977	0,017	0,002	0,000	0,002	0,002	0,000
Tl	0,987	0,012	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000
ΔT	0,007	0,652	0,339	0,000	0,002	0,001	0,000
Trg	0,006	0,676	0,263	0,055	0,000	0,000	0,000
γ	0,274	0,598	0,123	0,002	0,002	0,001	0,000

Tableau [III.3] cosinus carré des variables

D'après le tableau ci-dessus on trouve que l'axe PC1 est lié à (Tg,Tx,Tm et Tl) avec des cosinus (0.957), (0.863), (0.977) et (0.987) respectivement. Et l'axe PC2 est lié à les variables (dc,ΔT, Trg,γ) qui sont les indicateurs de GFA avec des cosinus (0.673), (0.652), (0.676) et (0.598).

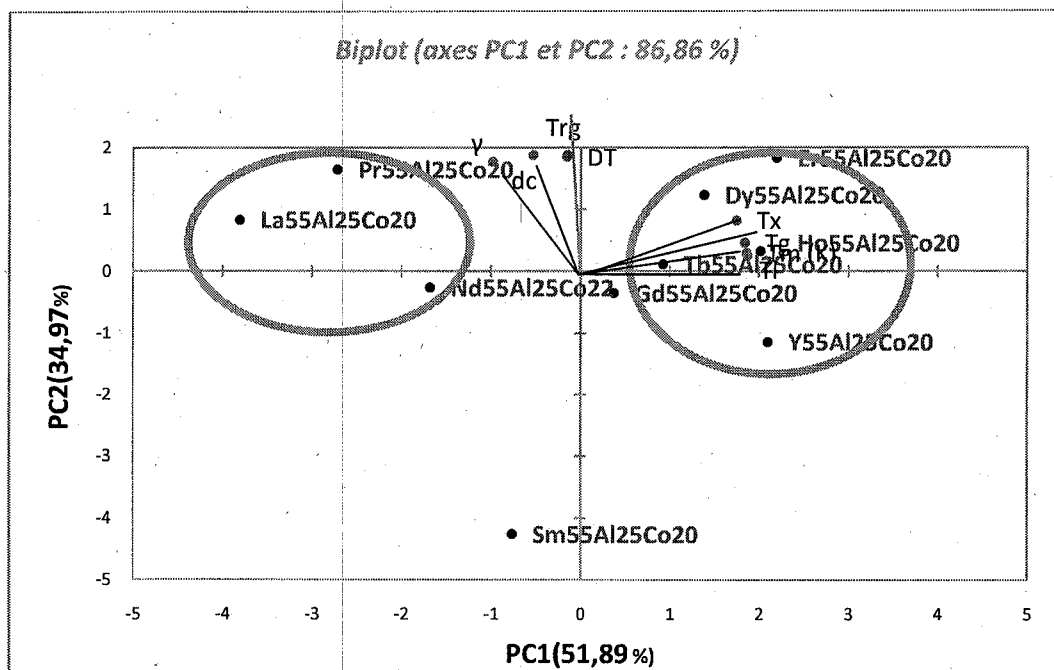
En analysant la figure (III.1), nous constatons l'émergence de plusieurs groupes. Ceux avec un PC1 positif, que nous notons cluster 1 (Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Dy₅₅Al₂₅Co₂₀, Ho₅₅Al₂₅Co₂₀, Tb₅₅Al₂₅Co₂₀, Gd₅₅Al₂₅Co₂₀ et Y₅₅Al₂₅Co₂₀) ceux avec un PC1 négatif que nous notons cluster 2 (Pr₅₅Al₂₅Co₂₅, La₅₅Al₂₅Co₂₀ et Nd₅₅Al₂₅Co₂₂). comme il est indiqué sur la figure (III-1)

Les axes principaux sont identiques pour le graphe des observations (scores plot) et le graphe des variables (loadings plot) donc l'information dans ces deux graphes peut être comparée directement.

D'après les figures précédentes, fig(III.1) et (III.2) on remarque que le premier cluster correspond à des verres métalliques massifs à base de terre rare avec une faible aptitude à la vitrification.

Le deuxième cluster correspond à des verres métalliques avec une bonne aptitude à la vitrification.

Pour confirmer les résultats obtenus au dessus on regarde les graphes suivants des "Biplot" superposant les matériaux et les propriétés :



FIG(III.3) : Graphe superposant les verres métalliques massifs à base de terre rare et leurs propriétés.

Après l'analyse du graphe précédent on constat que :

- ❖ les matériaux du 2eme cluster sont fortement corrélés avec $[Trg, \Delta T, d_c, \gamma]$ qui sont les indicateurs du GFA ce qui indique bien que ces matériaux ont une bonne aptitude à la vitrification avec des tailles critiques de 5 mm
- ❖ les matériaux du 1er cluster sont inversement corrélés avec les indicateurs du GFA ce qui implique que ces matériaux ont une faible aptitude à la vitrification avec des tailles critiques de 2 mm
- ❖ les verres métalliques à base du Sm ont une tendance différente car tous simplement ces matériaux ne peuvent pas être trouvés sous forme massifs car ils possèdent des tailles critiques inférieures à 1mm

($d_c < 1\text{mm}$).

Ce qui est bien en accord les observations expérimentales

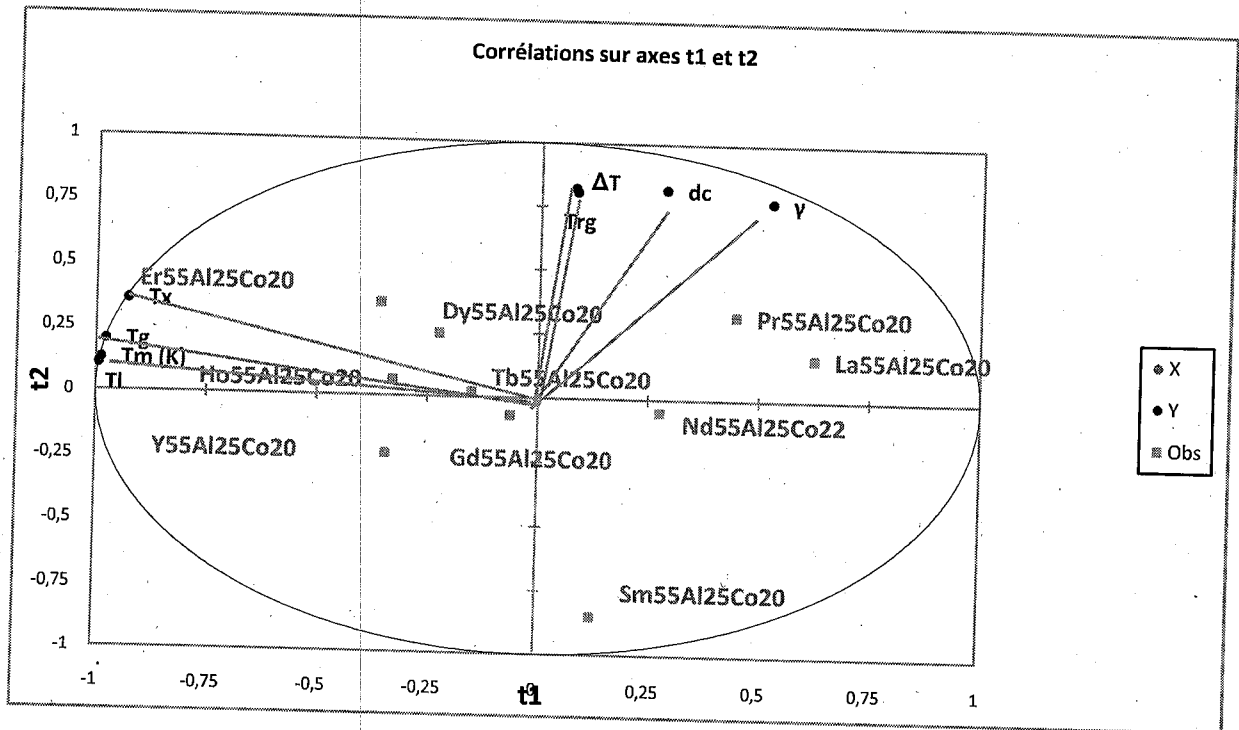
III.3.2 Le model PLS (la methode des moindres carrés partiels) :

III.3.2.1 Le cercle de corrélations :

L'avantage de la régression PLS est la possibilité d'obtenir des graphiques facilement interprétables, qui nous permettent de donner les relations entre les variables explicatives ou les variables dépendantes entre elles, ainsi qu'entre variables dépendantes (les propriétés) et explicatives (les verres métalliques)

Parmi les premiers résultats obtenus du PLS on trouve que le graphe de corrélations (fig III.4) est très important, il traduit bien les corrélations à chaque groupe de variables X et Y.

Ce graphe des observations X(Xscores) nous montre bien que les 10 verres métalliques massifs à base de terre rare regroupés selon leurs propriétés similaires forment deux clusters.



FigIII.4 :Graphe des observation (t1,t2) des verres metalliques massifs a base de terre rare

D'après le graphe on remarque que les variables dependentes sont globalement bien corrélées avec les variables explicatives (les verres metalliques).

En ce qui concerne les variables explicatives on remarque que :

-[Pr₅₅Al₂₅Co₂₀, La₅₅Al₂₅Co₂₀, et Nd₅₅Al₂₅Co₂₂] sont bien liées aux indicateurs du GFA (ΔT, T_{rg}, dc et le critere γ) ce qui implique que ces materiaux ont une bonne aptitude à la vitrification.

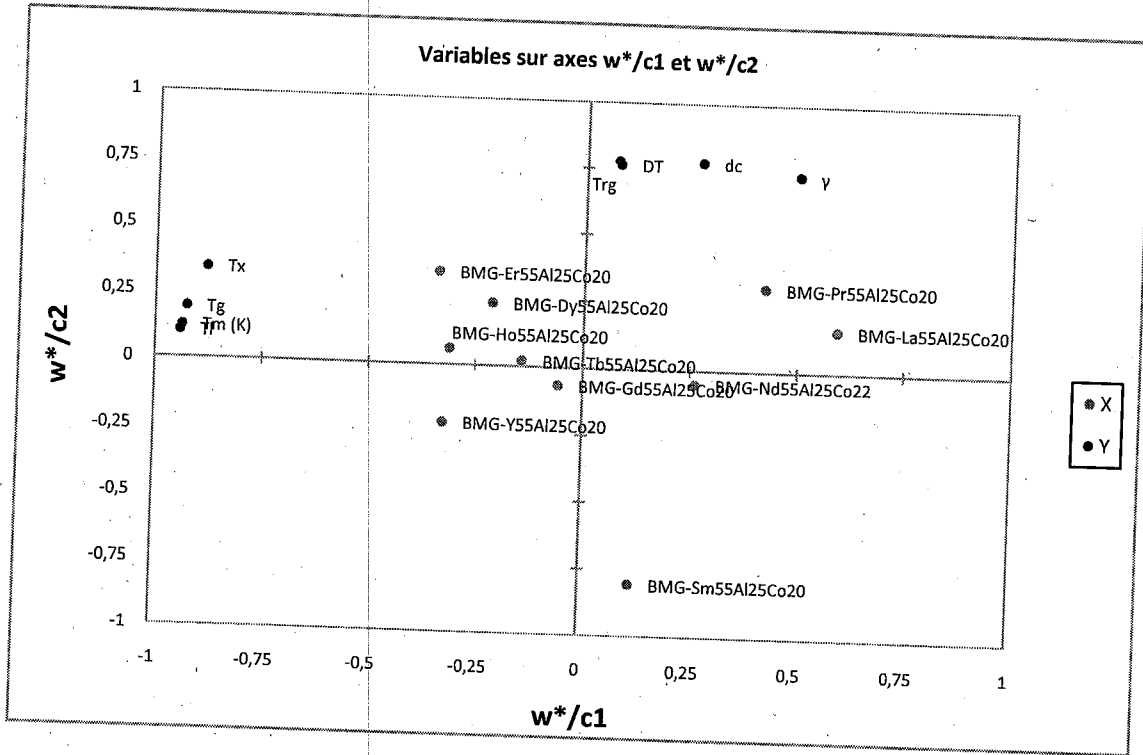
-[Ho₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Py₅₅Al₂₅Co₂₀, Yb₅₅Al₂₅Co₂₀ et Y₅₅Al₂₅Co₂₀]

Sont fortement liées aux [Tl, Tx, Tm et Tg] est faiblement corrélées aux indicateurs du GFA cette faible liaison montre que ces materiaux ont une faible aptitude à la vitrification.

III.3.2.2 Les vecteurs du poids w et c :

Pour l'interprétation du PLS, il faut tracer les vecteurs du poids w et c qui est une représentation unidimensionnelle de la matrice de corrélation, ce graphique superposant les variables dépendantes sur les vecteurs c et les variables explicatives sur les vecteurs w* qui est toujours nommé graphe des variables (Loadings) (Figure [III.5]), permet de visualiser la relation globale entre les variables, sachant que les w* sont représentatifs du poids des variables dans le modèle. Si l'on projette une variable explicative sur le vecteur d'une variable

dépendante, on a une idée de son poids dans le modèle concernant cette même variable dépendante.



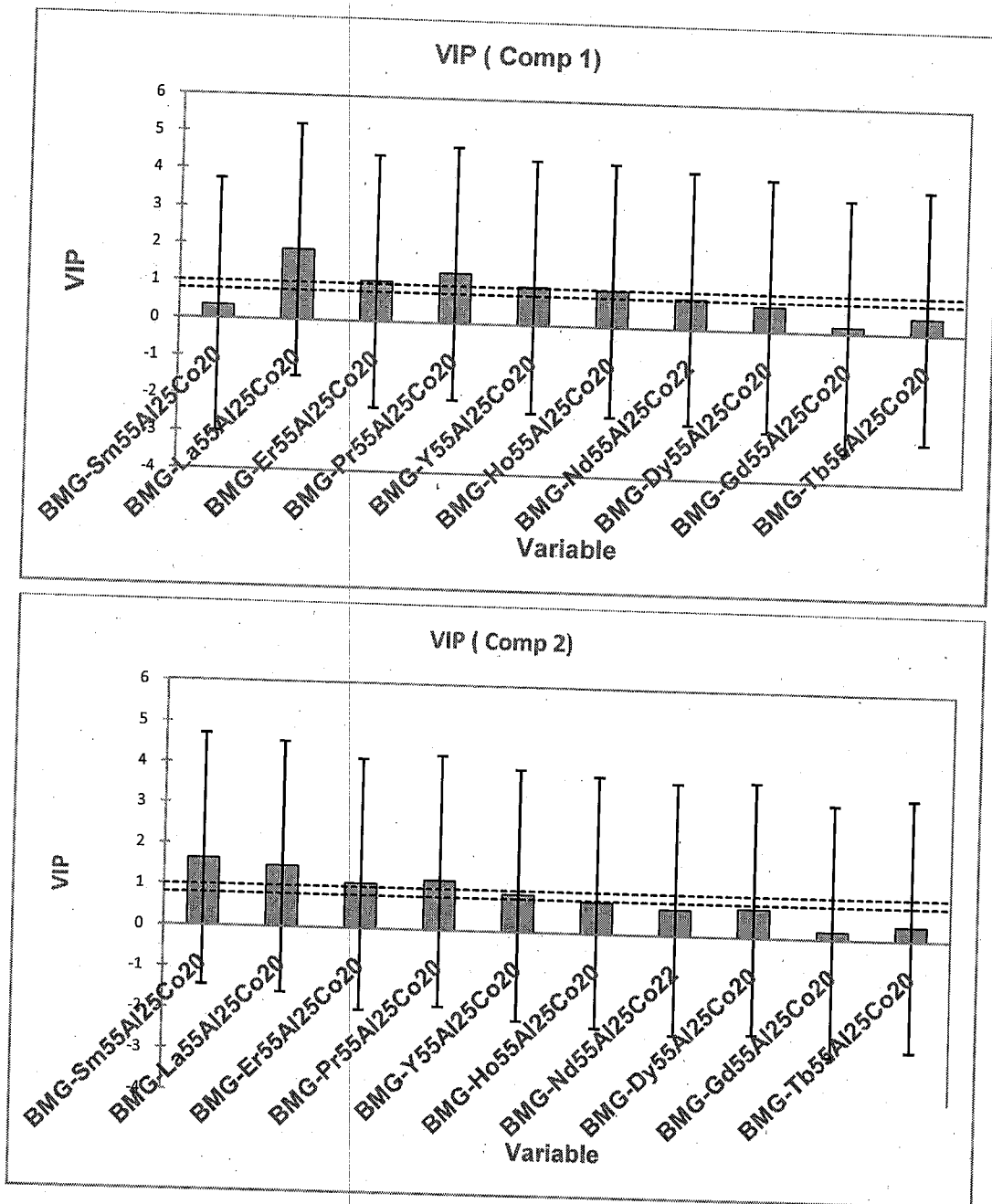
Fig(III.5) Graphe des variables pour les verres métalliques

la figure(III.5) montre que la première composante PLS dominée par les propriétés ($Tg, dc, \Delta T, \gamma$) dans le sens positif et, (Tx, Tg, Tm, Tl) dans le sens négatif, et la deuxième composante avec toutes les propriétés dans le sens positif.

Puisque dc est inversement corrélé avec Tx et Tg on constate que : si la température de cristallisation et la température de transition vitreuse augmentent, la taille critique diminue et l'inverse est juste.

III.3.2.3 Mesures de l'importance de variables

Dans le modèle PLS, un résumé de l'importance d'une variable X pour X et Y à la fois est donnée par le graphe des VIP (Variable Importance for the Projection) pour chacune des variables explicatives, sur chaque composante. Cela permet d'identifier rapidement quelles sont les variables explicatives les plus importantes sur l'ensemble des modèles (figure [III.6]).



Fig(III .6) : VIP pour les deux premières composantes pour les 10 verres métalliques

D'après les figures ci-dessus on remarque que sur la première composante [La₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Pr₅₅Al₂₅Co₂₀, Y₅₅Al₂₅Co₂₀ et Ho₅₅Al₂₅Co₂₀] ont des valeurs du VIP très importantes ce qui implique que ses variables explicatives sont les plus importantes sur l'ensemble des modèles, pour la deuxième composante on trouve que [Sm₅₅Al₂₅Co₂₀, La₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Pr₅₅Al₂₅Co₂₀ et Y₅₅Al₂₅Co₂₀] influence le modèle

III.3.2.4 Les résidus et prédictions :

Pour identifier la qualité de la méthode des moindres carrés partiel PLS nous interprétons les graphes de résidus et prédictions ainsi les graphes correspondant aux coefficients normalisés. Nous obtenons alors des résultats plus riches en prenant les graphiques ci-dessous qui correspondent aux coefficients normalisés pour le modèle avec 2 composantes et ceci pour les huit variables ($\gamma, \Delta T, T_g, T_m, T_l, T_{rg}, dc, \text{ et } T_x$)

VARIABLE dc :

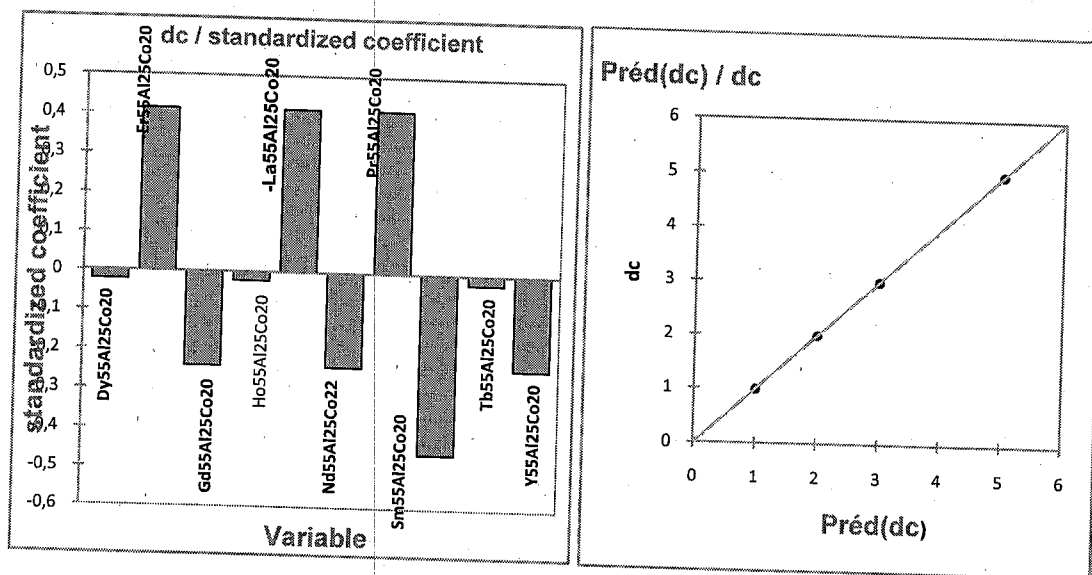


Figure (III.7) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable dc

En analysant les graphes (III.7) de la première variable «dc» on peut conclure que les verres métalliques [Er₅₅Al₂₅Co₂₀, La₅₅Al₂₅Co₂₀ et Pr₅₅Al₂₅Co₂₀] sont significatifs et influencent le modèle. On constate là aussi que dans le graphe des prédictions la variation est linéaire entre les valeurs de «dc» prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique la bonne qualité du modèle.

Variable Tg :

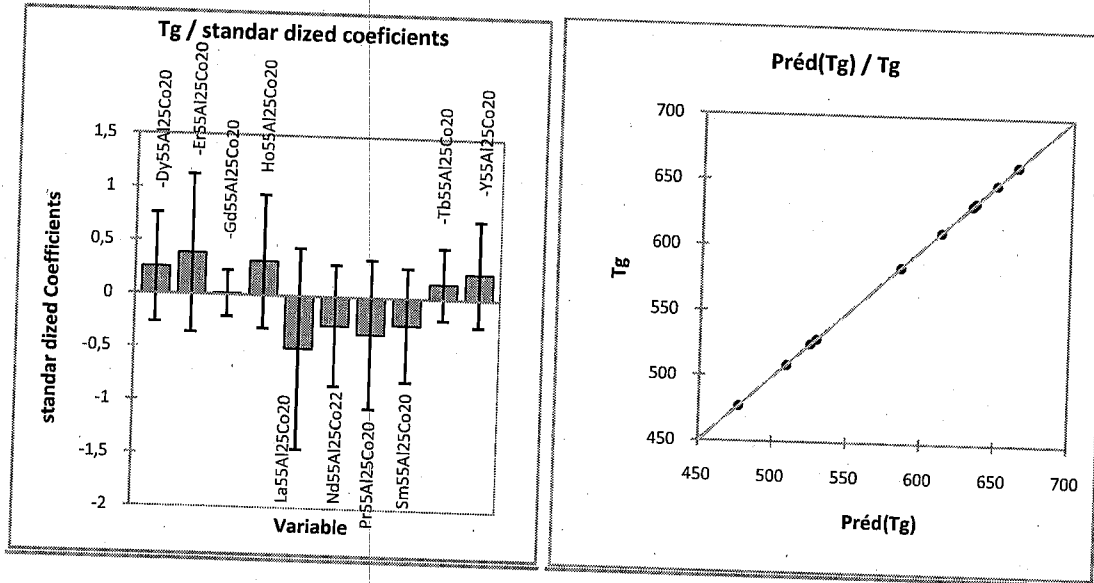


Figure (III.8) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable Tg

L'analyse du modèle correspondant à la dixième variable Tg nous permet de conclure que les ensembles des verres [Dy₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Ho₅₅Al₂₅Co₂₀, Tb₅₅Al₂₅Co₂₀ et Y₅₅Al₂₅Co₂₀] sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable Tg que la variation est linéaire entre les valeurs de Tg prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Variable Tx :

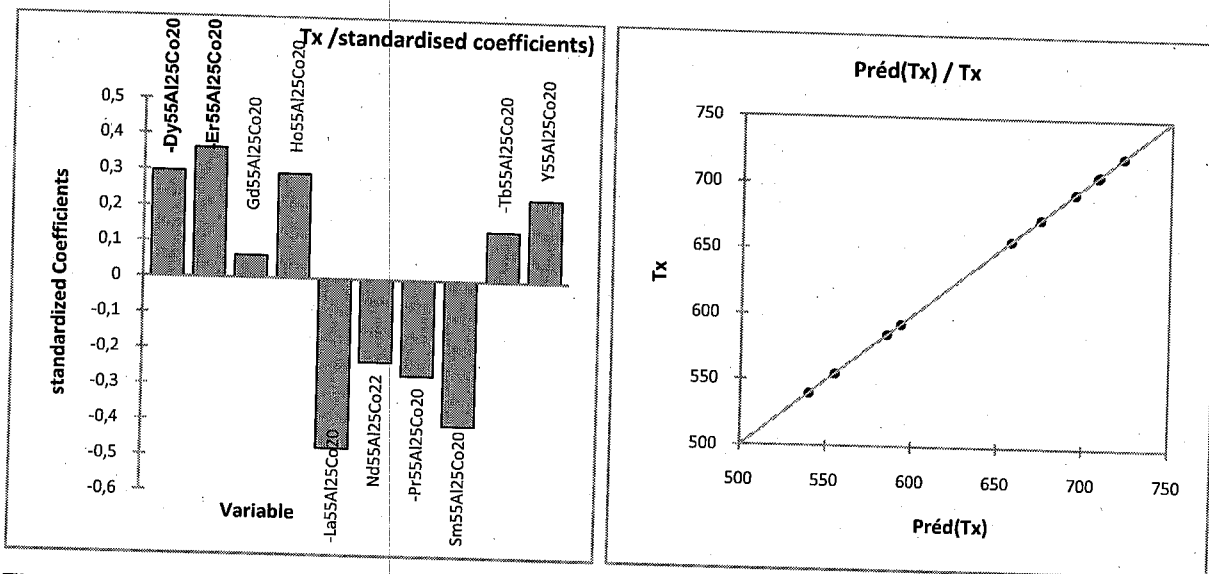


Figure (III.9) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable Tx

L'analyse du modèle correspondant à la troisième variable T_x nous permet de conclure que les ensembles des verres $[Dy_{55}Al_{25}Co_{20}, Er_{55}Al_{25}Co_{20}, Ho_{55}Al_{25}Co_{20}, Tb_{55}Al_{25}Co_{20}, Y_{55}Al_{25}Co_{20}$ et $Gd_{55}Al_{25}Co_{20}]$ sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable T_x que la variation est linéaire entre les valeurs de T_x prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Variable T_m :

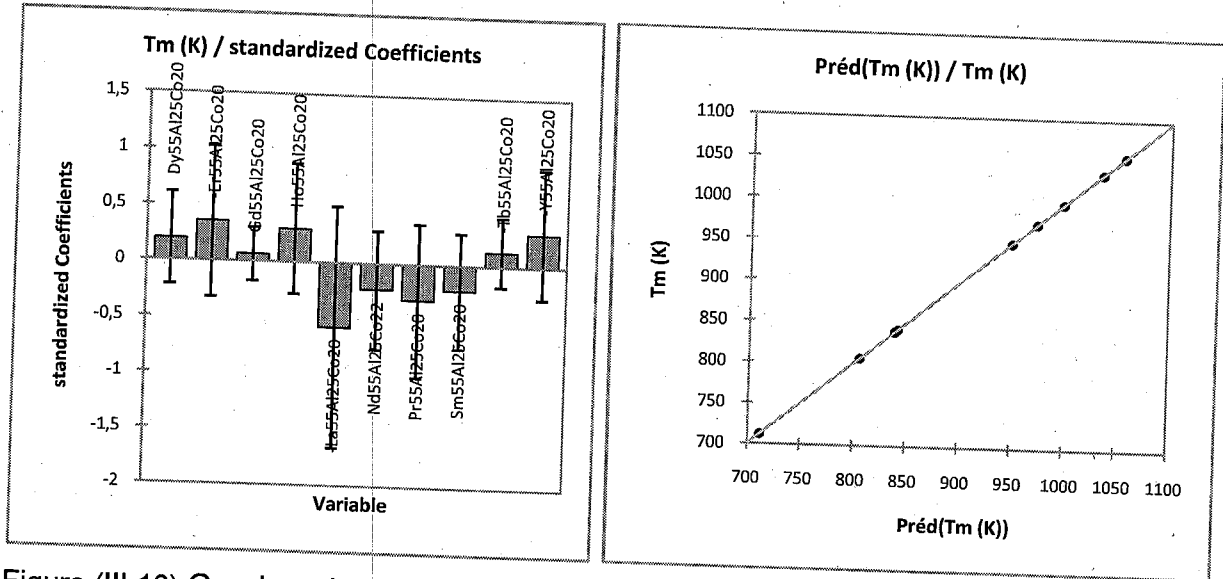


Figure (III.10) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable T_m

L'analyse du modèle correspondant à la quatrième variable T_m nous permet de conclure que les ensembles des verres $[Dy_{55}Al_{25}Co_{20}, Er_{55}Al_{25}Co_{20}, Ho_{55}Al_{25}Co_{20}, Tb_{55}Al_{25}Co_{20}, Y_{55}Al_{25}Co_{20}$ et $Gd_{55}Al_{25}Co_{20}]$ sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable T_m que la variation est linéaire entre les valeurs de T_m prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Variable TI

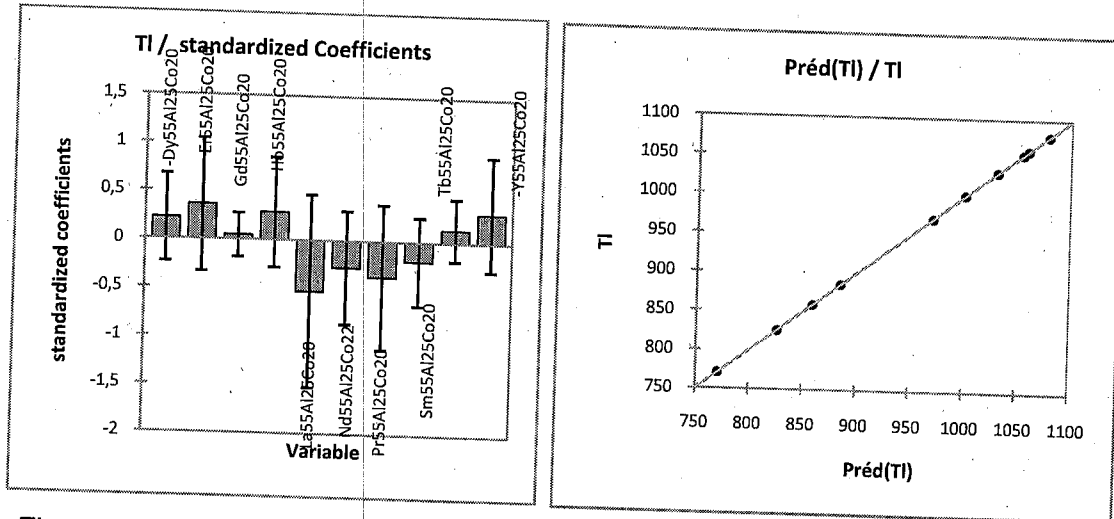


Figure (III.11) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable TI

L'analyse du modèle correspondant à la cinquième variable TI nous permet de conclure que les ensembles des verres [Dy₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Ho₅₅Al₂₅Co₂₀, Tb₅₅Al₂₅Co₂₀, Y₅₅Al₂₅Co₂₀ et Gd₅₅Al₂₅Co₂₀] sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable TI que la variation est linéaire entre les valeurs de TI prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Variable ΔT :

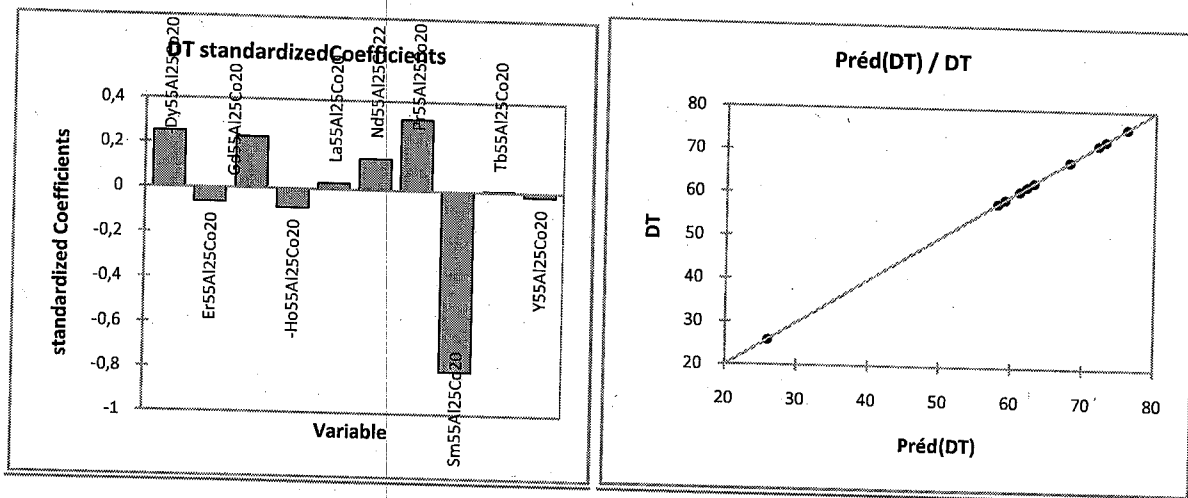


Figure (III.12) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable ΔT

L'analyse du modèle correspondant à la sixième variable ΔT nous permet de conclure que les ensembles des verres [Dy₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Ho₅₅Al₂₅Co₂₀, Tb₅₅Al₂₅Co₂₀, Y₅₅Al₂₅Co₂₀ et Gd₅₅Al₂₅Co₂₀] sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable ΔT que la variation est linéaire entre les valeurs de ΔT

prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Variable Trg :

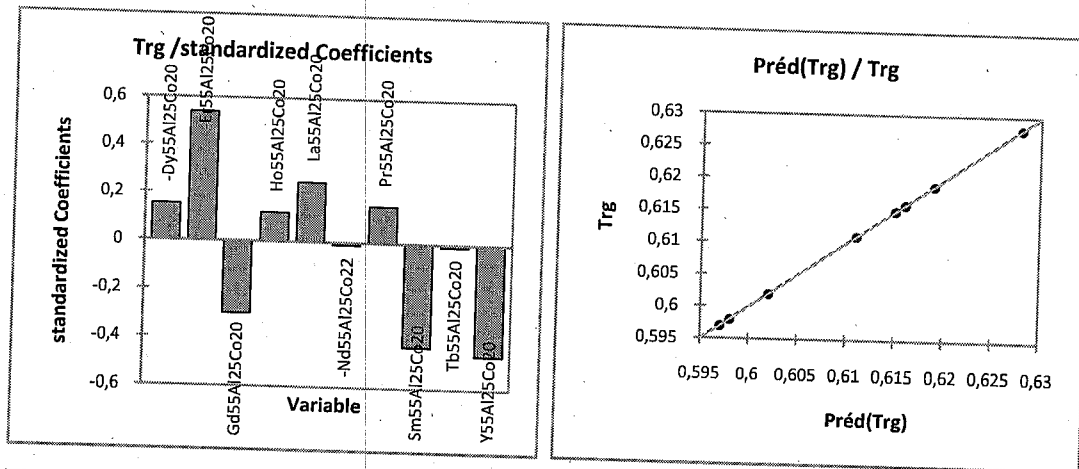


Figure (III.13) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable Trg

L'analyse du modèle correspondant à la septième variable Trg nous permet de conclure que les ensembles des verres [Dy₅₅Al₂₅Co₂₀, Er₅₅Al₂₅Co₂₀, Ho₅₅Al₂₅Co₂₀, La₅₅Al₂₅Co₂₀ et Pr₅₅Al₂₅Co₂₀] sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable Trg que la variation est linéaire entre les valeurs de Trg prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Variable y :

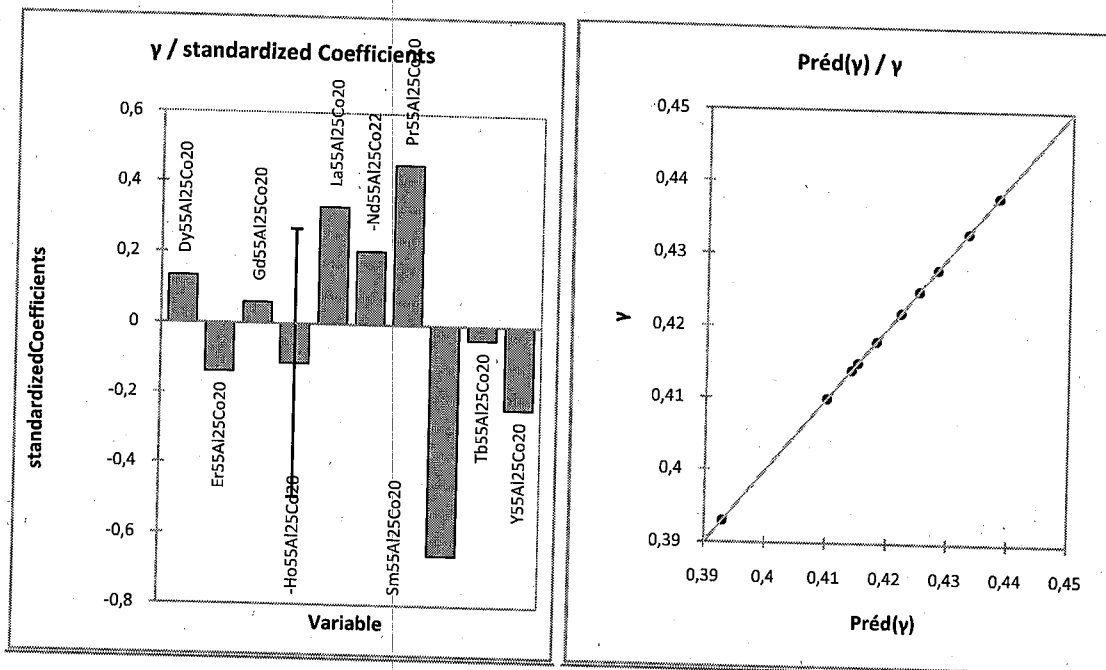


Figure (III.14) Graphes des résidus et prédictions correspondant au variable y

L'analyse du modèle correspondant à la huitième variable γ nous permet de conclure que les ensembles des verres $[\text{Dy}_{55}\text{Al}_{25}\text{Co}_{20}, \text{Pr}_{55}\text{Al}_{25}\text{Co}_{20}, \text{Nd}_{55}\text{Al}_{25}\text{Co}_{20}, \text{La}_{55}\text{Al}_{25}\text{Co}_{20}$ et $\text{Gd}_{55}\text{Al}_{25}\text{Co}_{20}]$ sont significatives et influencent le modèle, et nous remarquons la même tendance pour la variable γ que la variation est linéaire entre les valeur de γ prédites en fonction de celle utilisée en entrée, ce qui indique bien la bonne qualité du modèle.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons essayés de générer une base de données comprenant les verres métalliques massifs a base de terre rare ainsi que quelques propriétés à laquelle nous appliquons une technique d'extraction de données pour découvrir des nouvelles corrélations. L'analyse en composantes principales (PCA) et des moindres carrés partiels (PLS) qui sont des techniques informatiques d'analyse des données, ont été appliqués aux différents verres métalliques massifs afin de découvrir les corrélation qui existe entre les matériaux et la régression PLS.

La technique d'analyse en composantes principales nous ont permis de visualiser notre base de données sur des graphiques et d'étudier les relations qui existent entre les variables qui forment cette base de données, L'ACP permet aussi d'identifier la structure de dépendance entres les observations, afin d'obtenir une description ou une représentation, sous une projection des données sur différents axes, appelés axes principaux (PC1, et PC2).

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Ce mémoire étudie les « verres métalliques massifs à base de terre rare ».

Les caractéristiques structurales (absence d'ordre atomique, présence d'une température de transition vitreuse, isotropie idéale) confèrent aux verres métalliques massifs à base de terre rare un ensemble original de propriétés intéressantes, une bonne dureté (H), une ténacité élevée (KC), une limite élastique remarquable et une forte aptitude à la vitrification d'où l'intérêt de les étudier.

Dans le but d'étudier les verres métalliques massifs à base de terre rare nous avons essayés de générer une base de données comprenant ces derniers ainsi que quelques propriétés à laquelle nous appliquons une technique d'extraction de données pour découvrir des nouvelles corrélations.

La technique d'analyse en composantes principales nous a permis de visualiser notre base de données sur des graphiques et d'étudier les relations qui existent entre les variables qui forment cette base de données, elle permet aussi d'identifier la structure de dépendance entre les observations, afin d'obtenir une description ou une représentation, sous une projection des données sur différents axes, appelés axes principaux (*PC1*, et *PC2*).

La technique de régression PLS nous a permis d'obtenir des graphiques facilement interprétables, qui nous permettent de donner les relations entre les variables explicatives entre elles ou les variables dépendantes entre elles, ainsi qu'entre variables dépendantes (les propriétés) et explicatives (les verres métalliques).

Ce travail est une première méthodologie pour analyser l'information contenue dans la structure électronique. Ceci peut être développé sur d'autres systèmes et permet d'accélérer ainsi la prédiction de la structure de nouveaux matériaux. En perspective, il devrait servir à l'intégration de l'informatique de matériaux dans la prédiction et augmenter aussi nos chances de découvrir de nouveaux matériaux aux propriétés désirées qui répondent aux besoins recherchés.

Annexe

I. Introduction :

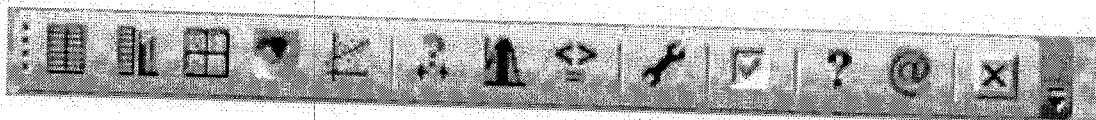
Le logiciel XLSTAT est un outil statistique d'analyse de données pour Microsoft Excel le plus complet et le plus utilisé, et il est destiné aux tests multidimensionnels sur les moyennes et les variances, XLSTAT offre de très nombreuses fonctionnalités qui font d'Excel un outil performant et facile d'accès pour répondre à la majorité de nos besoins en analyse de données et modélisation. XLSTAT fonctionne avec toutes les versions d'Excel, depuis la version 97 jusqu'à la version 2007 sous l'environnement Windows.

Ce logiciel peut remplir plusieurs fonctions y compris la régression PLS et l'analyse en composantes principales (ACP) et ceci en faisant rentrer les variables explicatives (les X du modèle) qui sont indiquées par les verres métalliques massifs à base de terre rare dans notre cas, et les variables dépendantes (les Y du modèle) indiquées par les propriétés (Tg, Tx, Tl, Tm, Trg, dc, γ , ΔT)

Dans cette annexe nous détaillons l'utilisation pratique du logiciel. Les tableaux des résultats et les graphes obtenus, sont décrits dans la partie précédente des résultats et discussions.

2. Utilisation de XLSTAT-Pro:

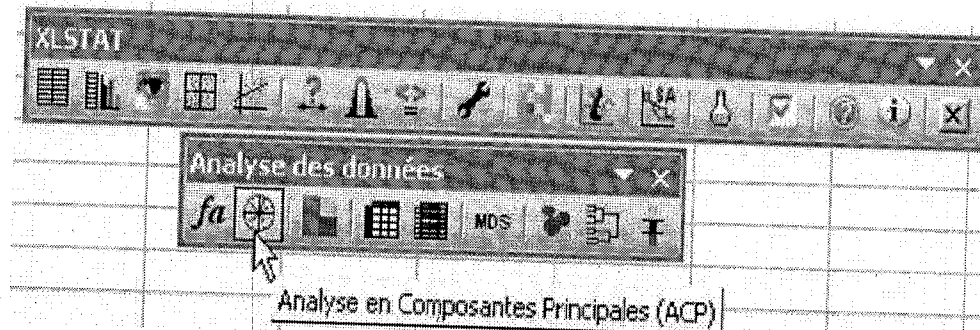
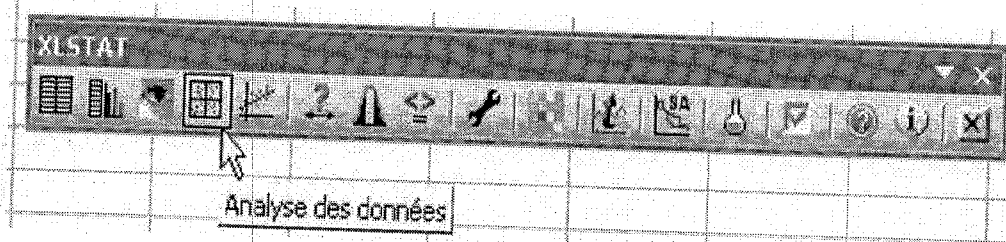
La figure suivante présente l'interface utilisateur du logiciel XLSTAT-Pro. L'utilisation des différents boutons dépendra du type d'action désirée par l'utilisateur, parmi ces boutons, une correspond la régression PLS et l'autre à l'ACP.



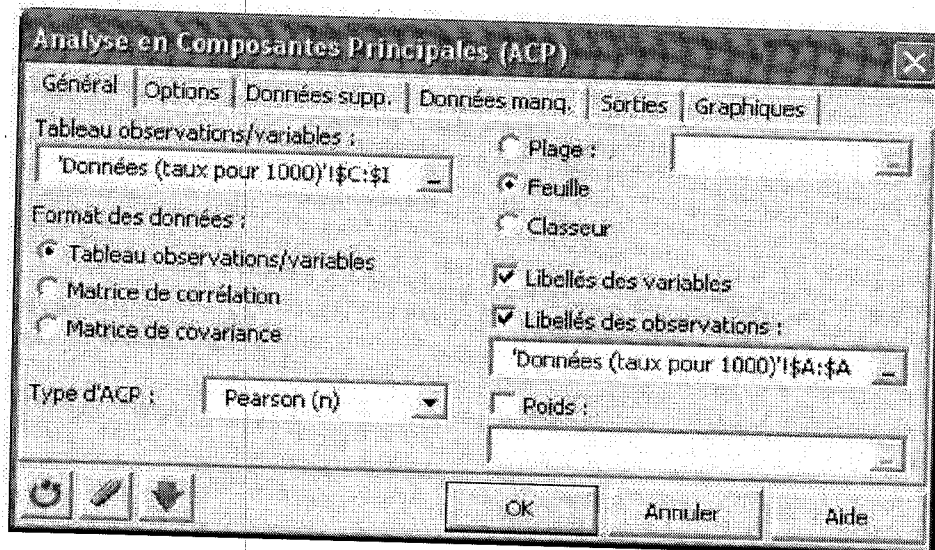
3. Effectuer une Analyse en Composantes Principales (ACP) avec XLSTAT-Pro :

Nous cliquons sur le menu XLSTAT-Pro/Analyse de données/Analyse en Composantes Principales, ou cliquons sur le bouton correspondant de la barre "Analyse de données" (voir ci-dessous).

Annexe

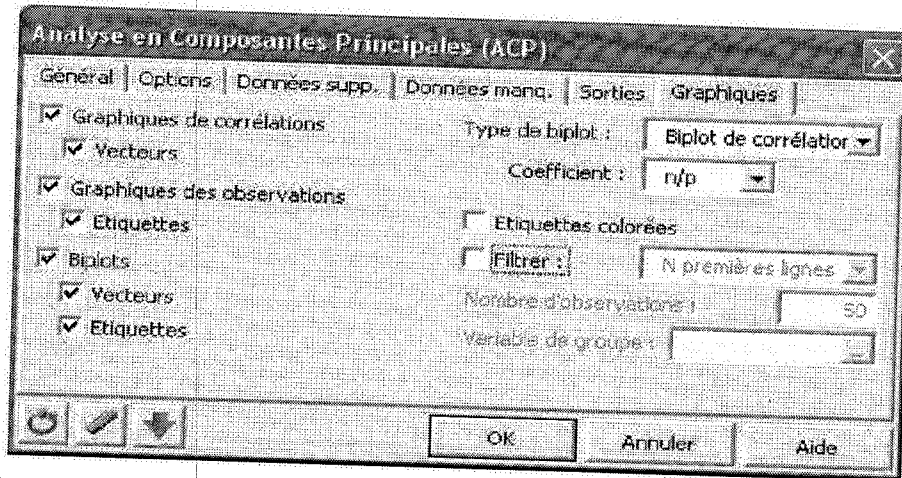


Une fois le bouton cliqué, la boîte de dialogue correspondant à l'Analyse en composantes principales apparaît. Nous pouvons alors sélectionner les données sur la feuille Excel.




Dans l'onglet "Graphiques", les options d' "Etiquettes" sont toutes activées afin que les libellés des variables et des observations soient bien affichés. L'option de filtrage des observations à afficher est aussi désactivée afin d'afficher toutes les observations. Lorsqu'il y a beaucoup d'observations, il est conseillé de ne pas afficher les étiquettes pour accélérer la génération du graphique, et de ne pas afficher toutes les observations afin de rendre le graphique plus lisible

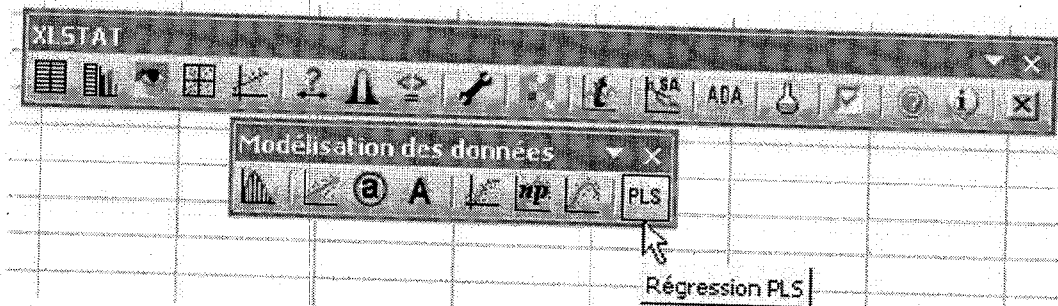
Annexe



Le premier résultat intéressant est la matrice des corrélations. Les tableaux des valeurs et vecteurs propres sont ensuite affichés. Tous les graphiques et tableaux sont mentionnés dans la partie résultat.

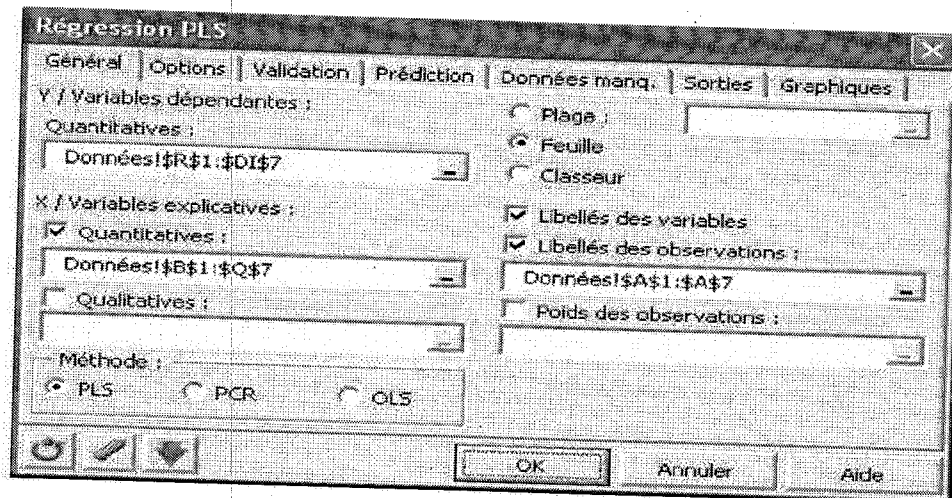
4-Effectuer une régression (PLS) avec XLSTAT-Pro

Nous lançons XLSTAT en cliquant sur le bouton  de la barre d'outils Excel, puis nous sélectionnons la commande Régression PLS de la barre d'outils "Modélisation des données".



Une fois que nous avons cliqué sur le bouton, la boîte de dialogue apparaît. Sélectionnons au niveau des "Variables dépendantes" (les "Y" du modèle), les propriétés des matériaux. Ce sont en effet les données que l'on veut expliquer à travers des variables explicatives quantitatives (les "X" du modèle) que sont les verres métalliques massifs à base de terre rare

Annexe



Le premier tableau et le graphique correspondant permettent de visualiser la qualité de la régression PLS en fonction du nombre de composantes retenues.

Résumé

Les verres métalliques massifs à base de terre rare ont obtenu beaucoup d'attention à la fois scientifique et technologique en raison de leur excellente aptitude à la vitrification . Ces REBMGs ont afficher de nombreuses propriétés fascinantes telles que des propriétés thermoplastiques près de la température ambiante, effet magnétocalorique excellente, le magnétisme dur, qui sont tous de l'intérêt non seulement pour la recherche fondamentale mais aussi pour la métallurgie et de la technologie .Ils ont une température de transition vitreuse et des températures de cristallisation plus élevé et des modules élastiques plus grandes.

Pour étudier les tendances et les corrélations qui existent entre les différents verres métalliques massifs à base de terre rare et entre les propriétés on utilise les techniques de datamining comme étant des outils efficaces et rapides, tel que l'analyse en composante principal (ACP)et la regression des moindres carrés partiels (PLS).

Mots clés : Les verres métalliques massifs à base de terre rare, aptitude à la vitrification, les indicateurs du GFA, Datamining, ACP ,PLS.

Abstract

Bulk metallic glasses (BMGs) have obtained considerable attention from both scientific and technological aspects in the past decades due to their excellent glass forming ability (GFA) .These REBMGs display many fascinating properties such as heavy fermion behavior, thermoplastic properties near room temperature, excellent magnetocaloric effect, hard magnetism, and polyamorphism, all of which are of interest not only for basic research but also for metallurgy and technology.They have a hight glass transition temperature and hight cristalization temperature and a hight elastic modulus.

To stady the correlations between defferent Bulk metallic glasses and their properties Datamining techniques such as principal component analysis(PCA) and the partial least squ ares (PLS) are used as effectively and rapidly tools.

Keywords: Rare earth based bulk metallic glasses , glass forming ability ,GFA indicators, data mining, PCA,PLS,

ملخص:

REBMG تحظى باهتمام كبير علميا وتكنولوجيا بسبب قدرتها الهائلة على التزجج . هذه المواد لها خصائص رائعة مثل الخصائص الحرارية قرب درجة حرارة الغرفة ،صلابة المغناطيس ، وهي صالحة جدا ليس فقط للبحوث الأساسية ولكن أيضا للتعددين والتكنولوجيا ، REBMG لديها درجة حرارة التحول الزجاجي كبيرة ، ومرونة كبيرة .

لدراسة الروابط والعلاقات الموجودة بين مختلف هذه المواد وبعض مميزاتنا استخدمنا تقنيات Datamining . لأنه فعال وسريع مثل تحليل المكون الرئيسي ACP والانحدار الجزئي للمربعات الصغرى PLS :

الكلمات المفتاحية: القدرة على تشكيل الزجاج GFA ، مؤشرات التعددين ، PLS ,ACP ,Datamining