RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LARECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ YAHIA FARES DE MÉDIA



FACULTE DE TECHNOLOGIE

DÉPARTEMENT DE GÉNIE DES PROCÉDÉS ET DE L'ENVIRONNEMENT

MÉMOIRE DE MASTER

Filière : Génie des procédés

Spécialisation : Génie chimique

Thème :

Modélisation des Comportements Thermophysiques des Nanofluides : étude Comparative

Présenté par :

SIDI MOHAMED Abdellahi Taleb Ahmed
KARSOO Mahmoud Abdalnasser Ayoub

Proposé et réalisé par :

LAIDI Maamar
OUAISSA Meriem

Année Académique 2024 / 2025

Remerciement

Nous aimerions bien évidemment débuter cette page à exprimer notre profonde gratitude à Allah, Le Tout-Puissant pour nous avoir accordé la force, l'endurance et la persévérance nécessaires afin de mener à bien ce travail.

Au terme de ce modeste travail, nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à notre promoteur, ***M. laidi Maamar*** *pour son encadrement attentif, ses orientations précieuses et sa disponibilité constante malgré ses horaires chargés.*

Nous remercions également notre Co-promotrice, ***Mme. Ouaissa Meriem*** *pour son accompagnement bienveillant, ses conseils pertinents et son soutien tout au long de cette recherche. À tous deux, nous exprimons notre sincère reconnaissance et notre profonde appréciation.*

Nous exprimons également notre reconnaissance à l'ensemble des enseignants de la formation Génie des procédés bien particulière Génie chimique pour la qualité de l'enseignement qu'ils nous ont transmis tout au long de notre parcours.

Nous tenons également à remercier tous les étudiants de notre promotion (2024-2025) et particulièrement notre spécialité génie chimique.

Merci aux Docteurs ***M. Ali Agha Hamza et M. Rahal Soufiane*** *pour avoir acceptés de juger de ce modeste travail.*

Une reconnaissance infinie est due à nos parents, véritables piliers de notre réussite. Leur affection, leur soutien et leurs prières ont été notre moteur à chaque étape.

Dédicace

Je dédie ce travail à la mémoire de mes chers parents, dont l'amour profond et les sacrifices m'ont toujours accompagné. Que leur âme repose en paix.

À Mes belles sœurs ***mariem****,* ***mettou*** *et* ***elwzena*** *et* ***rida***

À Mes chers frères ***Deyde*** *et* ***Eje*** *et* ***Mohamed lemin***

À tous mes cousines et mes proches

À mon binôme ***Karsoo Mahmoud***

Sidi Mohamed

Dédicace

Je dédie ce travail à la mémoire de mon père ***Abdel Nasser****, et de mon frère* ***Suhaib****, dont l'amour profond et les sacrifices m'ont toujours accompagné. Que Dieu ait pitié d'eux et leur accorde une place au Paradis.*

À mes seconde parents ***Omar*** *et* ***Siham Benallal***

À ***ma chère mère****, que Dieu la protège et prolonge sa vie*

À Mes belles sœurs ***Lina*** *et* ***Rouhaifa***

À mes chers frères ***Baker****,* ***Ibrahim*** *et* ***Oussama***

À mes oncles, tantes, cousins et proches, en particulier mes oncles ***Ismail*** *et* ***Abdulrahman****.*

À mes amis ***Youssef****,* ***Mohammed****,* ***Abdulmalik****,* ***Hisham****,* ***Islam*** *et* ***Shihab.***

À mon binôme, ***SIDI Mohammed***

Karsoo Mahmoud

Résumé

Les nanofluides sont largement utilisés dans les systèmes énergétiques avancés tels que les capteurs solaires, les échangeurs de chaleur, les dispositifs de refroidissement électronique et les systèmes thermiques industriels. La viscosité dynamique et la conductivité thermique sont deux propriétés thermophysiques essentielles qui influencent directement leur comportement et leur efficacité en matière de transfert de chaleur. Une prédiction précise de ces propriétés est donc cruciale pour concevoir des systèmes performants à base de nanofluides.

Dans ce mémoire, deux modèles de régression basés sur l'algorithme XGBoost (Extreme Gradient Boosting Regressor) sont développés pour prédire la viscosité dynamique et la conductivité thermique de nanofluides. Les données expérimentales, totalisant 520 mesures de viscosité et 514 de conductivité, ont été recueillies à partir de publications scientifiques. Pour développer les modèles neuf variables d'entrée ont été considérées, incluant la température, la fraction volumique, les propriétés thermophysiques des nanoparticules (masse molaire, diamètre, densité, chaleur spécifique) et celles du fluide de base.

Les performances du modèle XGBR ont été évaluées à l'aide de plusieurs métriques statistiques (R^2, RMSE, MAE, MSE, Q^2cv) et par un test externe sur une base cachée. Les résultats montrent une excellente précision prédictive, avec un R^2 de 0,992 pour la viscosité et 0,967 pour la conductivité thermique, surpassant nettement d'autres approches telles que les réseaux de neurones artificiels (ANN, LM-ANN), Forêt Aléatoire (Random Forest) et GMDH (Group Method of Data Handling). De plus une analyse de l'importance des variables a révélé que la masse molaire du fluide de base, masse molaire du nanoparticules, température et la fraction volumique étaient les facteurs les plus influents sur les deux propriétés étudiées

Ces résultats confirment l'efficacité du modèle XGBR pour la modélisation avancée des propriétés thermophysiques des nanofluides et ouvrent des perspectives prometteuses pour des applications industrielles nécessitant des prédictions rapides, précises et généralisables.

Mot clés : Nanofluides, Propriétés thermophysiques, Modélisation, Intelligence artificielle

Abstract

Nanofluids are widely used in advanced energy systems such as solar collectors, heat exchangers, electronic cooling devices, and industrial thermal systems. Dynamic viscosity and thermal conductivity are two key thermophysical properties that directly affect their behavior and efficiency in heat transfer applications. Accurate prediction of these properties is therefore crucial for designing high-performance systems based on nanofluids.

In this thesis, two regression models based on XGBoost algorithm (Extreme Gradient Boosting Regressor) were developed for the prediction of the dynamic viscosity and thermal conductivity of nanofluids. The experimental dataset includes a total of 520 viscosity measurements and 514 conductivity measurements, collected from literature. To build the models, nine input variables were considered, including temperature, volume fraction, and the thermophysical properties of nanoparticles (molar mass, diameter, density, specific heat) as well as those of the base fluid.

The performance of the XGBR model was evaluated using several statistical metrics (R^2, RMSE, MAE, MSE, Q^2cv) and external test in new unseen data. The results show excellent predictive accuracy, with an R^2 of 0.992 for viscosity and 0.967 for thermal conductivity, significantly outperforming other approaches such as Artificial Neural Networks (ANN, LM-ANN), Random Forest, and GMDH. Furthermore, a variable importance analysis revealed that the molar mass of the base fluid, the molar mass of the nanoparticles, temperature, and volume fraction were the most influential factors for both properties.

These results confirm the effectiveness of the XGBR model for advanced modeling of the thermophysical properties of nanofluids and open promising prospects for industrial applications requiring fast, accurate, and generalizable predictions.

Keywords: Nanofluids, Thermophysical properties, Modelling, Artificial Intelligence

الملخص

تُستخدم الموائع النانوية على نطاق واسع في أنظمة الطاقة المتقدمة مثل المجمعات الشمسية، المبادلات الحرارية، أجهزة التبريد الإلكتروني، والأنظمة الحرارية الصناعية. تُعد اللزوجة الديناميكية والتوصيلية الحرارية من الخصائص الحرارية الفيزيائية الأساسية التي تؤثر مباشرة على سلوك هذه الموائع وفعاليتها في تطبيقات نقل الحرارة. لذا فإن التنبؤ الدقيق بهذه الخصائص يُعد أمرًا بالغ الأهمية لتصميم أنظمة عالية الأداء تعتمد على الموائع النانوية.

في هذه الأطروحة، تم استخدام نموذج انحدار يعتمد على خوارزمية XGBoost (الانحدار المعزز بالتدرج الشديد)، وهي إحدى تقنيات الذكاء الاصطناعي الحديثة والقوية، للتنبؤ في آنٍ واحد باللزوجة الديناميكية والتوصيلية الحرارية للموائع النانوية. ولتطوير هذه النماذج، تم أخذ عشر متغيرات إدخال بعين الاعتبار، من بينها درجة الحرارة، الكسر الحجمي، والخصائص الحرارية الفيزيائية للجسيمات النانوية (الكتلة المولية، القطر، الكثافة، الحرارة النوعية)، بالإضافة إلى خصائص السائل الأساسي. تم تجميع قاعدة بيانات تضم 520 نقطة خاصة باللزوجة الديناميكية و514 نقطة خاصة بالناقلية الحرارية تم أخذها من مقالات علمية.

تم تقييم أداء نموذج XGBR باستخدام عدة مقاييس إحصائية (R^2، RMS، MAE، MSE، Q^2cv) ومن خلال الاختبار الخارجي. أظهرت النتائج دقة تنبؤية ممتازة، حيث بلغ معامل التحديد R^2 قيمة 0.992 للزوجة و0.967 للتوصيلية الحرارية، متفوقًا بشكل ملحوظ على طرق أخرى مثل الشبكات العصبية الاصطناعيةANN، LM-ANN، Random Forest، و GMDH كما أظهرت تحليلات أهمية المتغيرات أن الكتلة المولية للسائل الأساسي، الكتلة المولية للجسيمات النانوية، درجة الحرارة، والكسر الحجمي كانت العوامل الأكثر تأثيرًا على الخاصيتين المدروستين.

تؤكد هذه النتائج فعالية نموذج XGBR في النمذجة المتقدمة للخصائص الحرارية الفيزيائية للموائع النانوية، وتفتح آفاقًا واعدة لتطبيقات صناعية تتطلب تنبؤات سريعة، دقيقة، وقابلة للتعميم.

الكلمات المفتاحية:

الموائع النانوية، الخصائص الحرارية الفيزيائية، النمذجة، الذكاء الاصطناعي

Introduction Générale ---------- **1**

I. Chapitre I : Notions sur les nano-fluides ---------- **3**

I.1. Introduction ---------- **4**

I.2. Les nano-fluides ---------- **5**

I.2.1. Définition ---------- ***5***

I.2.2. Les Nanoparticules et les fluides porteurs ---------- ***6***

I.2.2.1. Les nanoparticules ---------- **6**

I.2.2.2. Fluides porteurs ---------- **8**

I.2.3. Les compositions des nano-fluides ---------- ***9***

I.2.4. Les avantage et inconvénients des nano-fluides ---------- ***10***

I.2.4.1. Les avantage des nano-fluides ---------- **10**

I.2.4.2. Les inconvénients des nano-fluides ---------- **11**

I.3. Domaines d'applications des nano-fluides ---------- **11**

I.4. Caractéristiques thermophysiques des nano-fluides ---------- **13**

I.4.1. La viscosité dynamique ---------- ***13***

I.4.2. Conductivité thermique des nano-fluides ---------- ***15***

I.4.3. Masse volumique (ρ) ---------- ***16***

I.4.4. Chaleur spécifique ---------- ***17***

I.4.5. Stabilité colloïdale ---------- ***18***

I.5. Techniques des caractérisations ---------- **18**

I.5.1. Diffraction des rayons X (XRD) ---------- ***18***

I.5.2. Spectroscopie UV-Vis ---------- ***19***

I.5.3. Microscopie Electronique à Transmission (MET) ou Electronique à balayage (MEB) ---------- ***19***

I.6. Conclusion ---------- **20**

II. Chapitre II : La modélisation par apprentissage automatique ---------- **22**

II.1. Introduction ---------- **23**

II.2. Généralité sur la modélisation ---------- **24**

II.2.1. La définition de la modélisation ---- *24*
II.2.2. Les types de modélisation ---- *24*
II.3. L'apprentissage automatique ---- **25**
II.3.1. Types d'apprentissage automatique ---- *25*
II.3.1.1. Apprentissage automatique supervisé ---- **26**
II.3.1.2. Apprentissage non supervisé ---- **27**
II.3.1.3. Apprentissage semi-supervisé ---- **27**
II.3.1.4. Apprentissage par renforcement ---- **27**
II.4. Les algorithmes de l'apprentissage automatique ---- **28**
II.4.1. Choix du modèle ---- *28*
II.4.2. XGBoost Régression : ---- *29*
II.4.2.1. Les hyperparamètres dans XGBoost ---- **29**
II.5. Étapes de la Modélisation par Apprentissage Automatique ---- **29**
II.6. Conclusion ---- **31**

III. Chapitre III : Développement d'un model XGBR pour la prédiction de viscosité et la conductivité thermique des nanofluides ---- **32**

III.1. Introduction ---- **33**
III.2. Matérielle et méthodes ---- **33**
III.2.1. Collecte de la base des données ---- *33*
III.2.2. Division base de Données ---- *35*
III.2.2.1. Division base de Données pour conductivité thermique ---- **35**
III.2.2.2. Division base de Données pour viscosité dynamique ---- **35**
III.3. Modélisation par apprentissage automatique : application du modèle XGBR ---- **36**
III.3.1. Validation croisée 5-fold ---- *36*
III.3.2. Utilisation de Grid Search : ---- *37*
III.3.3. Evaluation des modèles par métriques statistiques ---- *37*
III.4. Résultats et discussions ---- **38**
III.4.1. Matrice de corrélation ---- *38*
III.4.2. Meilleure Grid Search de hyperparamètres : ---- *40*
III.5. Validation ---- **40**
III.5.1. Résultats de métriques statistiques ---- *40*

III.5.2. Comparaison entre les valeurs expérimentales et prédites par XGBR----------41

III.6. Test de validation externe (base de données cachée) ----------43

III.6.1. Résultats de métriques statistiques ----------43

III.6.2. La comparaison entre les valeurs expérimentales et prédites par XGBR ---------43

III.7. Contribution des variables indépendantes au modèle ----------45

III.7.1. Les variables d'entrées les plus influents pour conductivité thermique ----------45

III.7.2. Les variables d'entrées les plus influents pour la viscosité dynamique----------46

III.8. Comparaisons des XGBR aux approches existantes ----------47

III.8.1. Comparaison de la viscosité dynamique ----------47

III.8.2. Comparaison de la conductivité thermique----------48

III.9. Conclusion----------49

Conclusion Générale ----------51

IV. Références----------53

Chapitre I

Figure I.1.Gamme de taille des nanoparticules comparées à celles des principaux organes vivants [3] 6
Figure I.2.Illustration de la structure d'un fullerène nC60 [5] 6
Figure I.3.Illustration de la corrélation entre taille et surface spécifique [6] 7
Figure I.4.Images TEM de quelques exemples de nanoparticules : (a) Nanoparticules sphériques, (b) Nanotubes de carbone et Nanofeuilles de (c) graphèn [6] 7
Figure I.5.Mono-composants des nano-fluides [10] 9
Figure I. 6.Hybride des nano-fluides [10] 10
Figure I.7.Paramètres affectant la viscosité des nano-fluides [6] 14
Figure I. 8.Paramètres affectants la conductivité thermique des nano-fluides [6] 16
Figure I.9.Schéma de principe (a) MEB ; (b) MET 20

Chapitre II

Figure II.1.les quatre Types de système d'apprentissage automatique [4] 25
Figure II.2. Visualisation d'un modèle de régression [6] 26
Figure II.3. Structure de l'apprentissage par renforcement [7] 28

Chapitre III

Figure III.1. Matrice de corrélation d'entrée pour conductivité thermique 39
Figure III.2. Matrice de corrélation d'entrée pour la viscosité 39
Figure III.3. Graphe de la viscosité expérimentale avec celle prédites par modèle XGBR 42
Figure III.4. Graphe de la conductivité expérimentale avec celle prédites par modèle XGBR ... 42
Figure III.5. Prédiction de la viscosité expérimentale par le modèle XGBR : test externe 44
Figure III.6. Prédiction de la conductivité thermique par le modèle XGBR : test externe 44
Figure III. 7. Représente la contribution des variables d'entrée à la prédiction de la conductivité thermique des nanofluides. 46
Figure III.8. Représente la contribution des variables d'entrée à la prédiction de la viscosité des nanofluides. 47

Chapitre I

Tableau I.1. Conductivité thermique de divers fluides de base et matériaux à 20°C [2]..... 5

Tableau I.2. Tableau récapitulatif des différences entre MET et MEB [31]..... 20

Chapitre III

Tableau II.1. Les étapes de la modélisation par Apprentissage Automatique [10]..... 30

Chapitre III

Tableau III.1. Caractéristiques expérimentales des nanofluides extraites de 16 études scientifiques..... 34

Tableau III.2.Répartition des données pour la modélisation de conductivité thermique..... 35

Tableau III.3.Répartition des données pour la modélisation de la viscosité dynamique..... 36

Tableau III.4. Hyperparamètres de XGBoost Régression 37

Tableau III.5.Métriques statistiques utilisent dans notre modèle 38

Tableau III.6. Meilleurs hyperparamètres choisie 40

Tableau III.7. Les métriques statistiques pour la conductivité thermique 41

Tableau III.8. Les métriques statistiques pour la viscosité dynamique 41

Tableau III.9. Les métriques statistiques pour la conductivité thermique et la viscosité issues des tests externes 43

Tableau III.10. Comparaison des performances des modèles pour la prédiction de la viscosité dynamique des nanofluides..... 48

Tableau III.11. Comparaison des performances des modèles pour la prédiction de la conductivité thermique des nanofluides. 49

ANN	Artificial Neural Network
DENS-NP	Densité de nanoparticules
DENS-FB	Densité du fluide de base
DIAM-NP	Diamètre de nanoparticule
DQN	Deep Q-Network
FB	Fluide de Base
LM-ANN	Linear Model-Artificial Neural Network
MAE	Mean Absolute Error
MEB	Microscopie électronique à balayage
MET	Microscopie électronique à transmission
M-FB	Masse molaire du fluide de base
MSA	Mean Signed Absolute
MSE	Mean Squared Error
NP	Nanoparticule
NTC	Nanotubes de carbone
PPO	Proximal Policy Optimization
PVT	Photovoltaïques-thermiques
RMSE	Root Mean Square Error
SHC-FB	Chaleur spécifique de fluide de base
SHC-NP	Chaleur spécifique de nanoparticule
SVR	Support Vector Regression
XCT	X-ray Computed Tomography
XGBR	Extreme Gradient Boosting Regressor
XRD	Diffraction des rayons X

Introduction Générale

Depuis plusieurs décennies, les nanotechnologies ont profondément transformé le paysage scientifique et industriel, en donnant naissance à de nouveaux matériaux aux propriétés remarquables, tels que les nanofluides. Ces derniers sont obtenus par la dispersion homogène de nanoparticules dans un fluide de base, et présentent des caractéristiques thermophysiques améliorées, notamment une conductivité thermique accrue, une viscosité ajustée ainsi qu'une meilleure stabilité. Ces propriétés rendent les nanofluides particulièrement attractifs pour une multitude d'applications, notamment dans les domaines du refroidissement industriel, des échangeurs thermiques, de la microélectronique ou encore des systèmes énergétiques renouvelables.

Cependant, la compréhension et la prédiction des propriétés des nanofluides demeurent un véritable défi scientifique. En effet, ces propriétés dépendent de nombreux paramètres interconnectés, tels que les caractéristiques des nanoparticules (taille, forme, masse molaire, chaleur spécifique, concentration), les propriétés du fluide de base (densité, masse molaire, capacité calorifique), ainsi que les conditions opératoires (notamment la température). Les modèles théoriques classiques, tels que ceux d'Einstein, Maxwell ou Batchelor, reposent généralement sur des hypothèses simplificatrices qui ne permettent pas de reproduire fidèlement les comportements expérimentaux observés, en particulier dans des configurations multiparamétriques et non linéaires.

Dans ce contexte, l'apprentissage automatique (machine learning) s'impose comme une approche innovante et puissante, grâce à sa capacité à exploiter les données expérimentales pour modéliser des phénomènes complexes sans hypothèses a priori sur la forme des relations. Il permet de développer des modèles prédictifs à la fois précis et robustes. Parmi les algorithmes les plus performants dans ce domaine, XGBoost (Extreme Gradient Boosting) se distingue par sa rapidité, ses capacités de régularisation et sa précision, ce qui en fait un candidat idéal pour la modélisation des propriétés thermophysiques des nanofluides.

Outre cette introduction générale, ce mémoire est structuré en trois chapitres principaux :

- Le premier chapitre présente les notions fondamentales relatives aux nanofluides, à leurs propriétés et à leurs domaines d'application.

- Le deuxième chapitre introduit les bases de l'intelligence artificielle, en mettant l'accent sur l'apprentissage supervisé, qui permet de modéliser les propriétés complexes des nanofluides.
- Le troisième chapitre développe deux modèles prédictifs, l'un pour la viscosité et l'autre pour la conductivité thermique des nanofluides, à partir d'une base de données composée de 784 points extraits de publications scientifiques récentes. Les performances de ces modèles sont comparées à celles des approches existantes, à l'aide de plusieurs indicateurs statistiques. Le modèle optimal est ensuite confronté à ceux disponibles dans la littérature, portant sur la modélisation de la conductivité thermique et/ou de la viscosité des nanofluides mono-composants.

Enfin, ce mémoire se conclut par une synthèse générale des principaux résultats obtenus, ainsi que par une discussion des perspectives de recherche futures.

I. Chapitre I : Notions sur les nano-fluides

I.1. Introduction

Ces dernières années, la demande énergétique a connu une croissance significative, poussant les chercheurs à explorer de nouvelles approches économiques pour éviter une potentielle crise énergétique. Dans ce contexte, divers systèmes industriels capables de générer des flux thermiques élevés ont été conçus dans des domaines variés tel que l'énergie thermique aux énergies renouvelables, en passant par le secteur biomédical et l'électronique où les fluides de refroidissement traditionnels comme l'eau, l'éthylène glycol ou l'huile s'avèrent souvent insuffisants.

Une approche prometteuse pour améliorer les propriétés thermo-physiques des fluides consiste à intégrer des particules solides de haute conductivité thermique et de taille nanométrique dans le fluide de base. Cette nouvelle classe de fluides, appelée nano-fluides, correspond à un mélange colloïdal de nanoparticules de moins de 100 nm. Introduit par Choi et Eastman [1] en 1995, ce terme reste couramment employé pour désigner ces suspensions colloïdales spécifiques.

Les nano-fluides offrent des performances thermiques bien supérieures aux fluides de transfert de chaleur conventionnels. Leur principal objectif est d'optimiser les propriétés thermo-physiques tout en maintenant une faible concentration de nanoparticules (idéalement inférieure à 1 % en volume). Cela repose sur une dispersion homogène et une suspension stable des nanoparticules, dont le diamètre est de préférence inférieur à 10 nm, au sein des fluides de base.

La première partie propose une synthèse bibliographique visant à mieux comprendre les nano-fluides, les classifications selon la composition des nano-fluides leurs domaines d'application et les techniques des caractérisations ainsi que leurs propriétés thermo-physiques. Elle est donc consacrée à une revue des principaux travaux publiés sur le transfert thermique des nano-fluides et leurs caractéristiques thermo-physiques. Par ailleurs, les nanoparticules y sont classées en quatre catégories : les nanoparticules métalliques, les nanoparticules d'oxydes métalliques et les nanoparticules non métalliques et nanoparticules hybride.

La deuxième partie se concentre sur l'analyse des connaissances actuelles concernant les propriétés thermophysiques et le comportement thermophysique des nano-fluides dans les systèmes thermiques, elle inclut également une présentation des certains modèles utilisés pour estimer ces propriétés, telles que la conductivité thermique, la viscosité dynamique, chaleur spécifique ou encore la masse volumique.

I.2. Les nano-fluides

I.2.1. Définition

Les nano-fluides sont des solutions colloïdales constituées des particules de taille nanométrique en suspension dans un liquide porteur. Ce type de solution suscite un grand intérêt depuis la découverte de leurs propriétés thermiques particulières.

En effet, les fluides de base souvent utilisés dans les applications de refroidissement ou de chauffage ont des conductivités thermiques très faibles **(**Tableau I.1**)** qui limitent leur capacité de transfert de chaleur. L'idée est alors d'insérer au sein des liquides de base des nanoparticules de conductivité très élevée, afin d'augmenter la conductivité thermique effective du mélange et ainsi améliorer ces performances thermiques [2].

Les liquides de base généralement utilisés dans la préparation des nano-fluides sont ceux d'usage commun dans les applications de transfert de chaleur tels que l'eau, l'éthylène glycol, l'huile de moteur ou le Toluène, les fluides frigorigènes …

Tableau I.1. Conductivité thermique de divers fluides de base et matériaux à 20°C [2]

Éléments	Conductivité thermique λ $(\boldsymbol{W/m.K})$
Eau	0.599
50% eau + 50% éthylène glycol	0.410
Ethylène glycol	0.250
Huile de moteur	0.140
Nanotube de carbone	3000-6000
Cuivre (métal pur)	401
Nickel (métal pur)	237
Silicone (non métallique)	148
Alumine (Al_2O_3)	40

Les nano-fluides sont des dispersions de particules de taille nanométrique appelées nanoparticules, dans un fluide de base afin d'en améliorer certaines de ces propriétés.

Le terme « nanoparticule » est utilisé lorsque la particule a au moins une de ses dimensions inférieures à 100 nm.

I.2.2. Les Nanoparticules et les fluides porteurs

I.2.2.1. Les nanoparticules

Une nanoparticule est un assemblage des quelques centaines à quelques milliers d'atomes, conduisant à un objet dont au moins l'une des dimensions est de taille nanométrique (1 à 100 nm). Les nanoparticules se situent à la frontière entre l'échelle microscopique et l'échelle atomique ou moléculaire, Elles ont un intérêt à la fois fondamental qu'appliqué et sont très étudiées de nos jours.

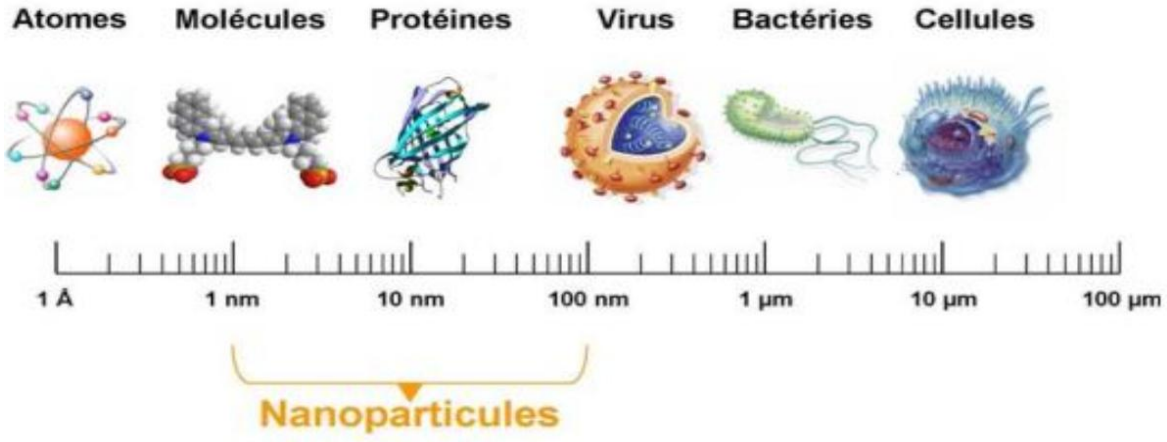


Figure I.1. Gamme de taille des nanoparticules comparées à celles des principaux organes vivants [3]

Le rayon typique d'un atome étant de l'ordre de 0,1 nm, une nanoparticule peut être constituée de quelques dizaines à plusieurs centaines d'atomes. Par exemple, les nanoparticules les plus célèbres, les fullerènes, sont constituées de seulement 60 ou 70 atomes de carbone (Figure I.2). Leur très petite taille donne aux nanoparticules des surfaces spécifiques très importantes [4].



Figure I.2.Illustration de la structure d'un fullerène nC60 [5]

La surface spécifique développée par les nanoparticules est 1000 fois plus importante que celle d'une microparticule (Figure I.3). De même, le nombre d'atomes de surface augmente avec la diminution de la taille des nanoparticules et la réactivité, étant souvent liée à des propriétés de surface, cela explique l'intérêt développé pour les nanoparticules.

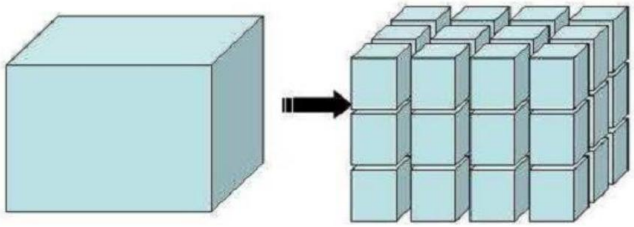


Figure I.3. Illustration de la corrélation entre taille et surface spécifique [6]

D'une manière générale, les nanoparticules peuvent être classées selon leur forme en trois grandes catégories (Figure I.4) [7].

Elles ont généralement la forme sphérique et cylindrique, ou en forme de tube comme les nanotubes de carbone (NTC) [8].

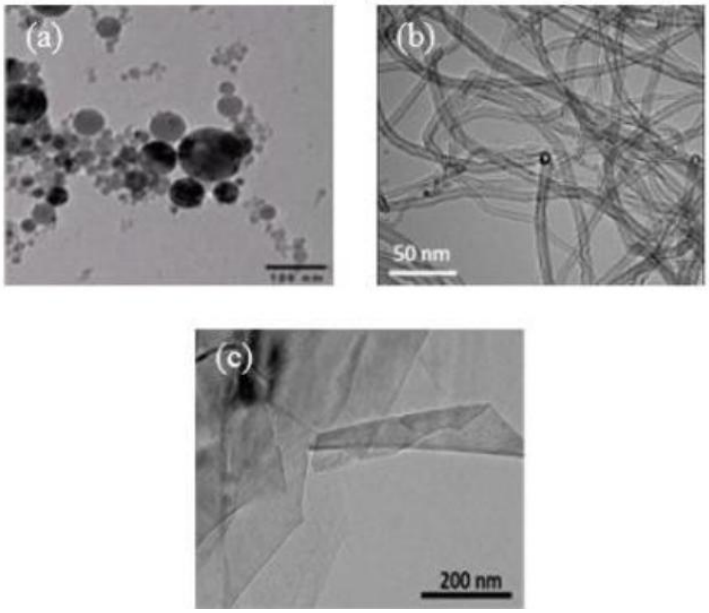


Figure I.4. Images TEM de quelques exemples de nanoparticules : (a) Nanoparticules sphériques, (b) Nanotubes de carbone et Nanofeuilles de (c) graphèn [6]

Types des nanoparticules

Les nanoparticules les plus utilisées sont classées dans trois grandes familles, à savoir :

- Les nanoparticules d'oxydes métalliques :
  - L'oxyde d'aluminium (Al2O3).
  - L'oxyde de cuivre (CuO).
  - L'oxyde de silicium (SiO2).
  - L'oxyde de Titanium (TiO2).
  - Les nanoparticules métalliques :
  - L'aluminium (Al).
  - Le cuivre (Cu).
  - L'or (Au).
  - L'argent (Ag).
- Les nanoparticules non métalliques :
  - Les nanotubes de carbone (CNT).
  - Le diamant (C).
- Nanoparticules hybrides
  - Moncomposants (Al_2O_3)
  - Binaires (Al_2O_3- CuO)
  - Ternaires (Al_2O_3- CuO- TiO_2)

I.2.2.2. Fluides porteurs

Les fluides porteurs constituent la matrice essentielle dans laquelle les nanoparticules sont dispersées pour former les nano-fluides , leur rôle est déterminant car ils influencent directement la stabilité, la distribution homogène des nanoparticules et les propriétés thermiques du système global, les caractéristiques physico-chimiques du fluide porteur telles que la viscosité, la densité, la capacité calorifique et la conductivité thermique déterminent en grande partie d'efficacité du transfert de chaleur et la performance mécanique du nanofluide et parmi les fluides porteurs les plus utilisées l'eau figure en bonne place en raison de ses propriétés thermiques avantageuses, de sa disponibilité et de sa faible toxicité. D'autres, comme l'éthylène glycol, diverses huiles minérales ou synthétiques, et des solvants organiques, sont également choisis pour répondre à des exigences spécifiques d'applications particulière, le choix du fluide porteur doit ainsi prendre en compte non seulement ses propriétés intrinsèques, mais aussi sa compatibilité avec les nanoparticules et les conditions opérationnelles prévues.

I.2.3. Les compositions des nano-fluides

La classification des nano-fluides selon leur composition repose sur le nombre et la diversité des nanoparticules incorporées dans le fluide porteur on peut diviser à quatre catégories :

a) Nano-fluides mono-composants (simple nano)

Dans cette catégorie, un seul type de nanoparticules est dispersé dans un fluide de base la formulation reste relativement simple, ce qui facilite la maîtrise de la stabilité du mélange et la prédiction de ses propriétés thermiques. Par exemple, le nanofluide Al_2O_3/eau, où les nanoparticules d'oxyde d'aluminium améliorent la conductivité thermique de l'eau, est fréquemment utilisé pour optimiser les systèmes de refroidissement dans l'électronique et d'autres domaines nécessitant un transfert de chaleur efficace [9].

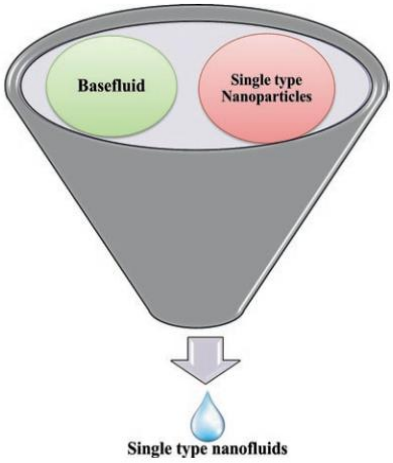


Figure I.5. Mono-composants des nano-fluides [10]

b) Nano-fluides binaires (mélange double)

Ces fluides intègrent deux types différents de nanoparticules dans un même fluide de base. La force de cette formulation réside dans la complémentarité des propriétés de chaque composant, ce qui conduit à des performances supérieures à celles des nano-fluides à composant unique. Par exemple, un mélange d'Al_2O_3 et de CuO dispersé dans l'eau peut considérablement améliorer la conductivité thermique et la stabilité, rendant cette approche particulièrement intéressante pour des applications industrielles exigeantes [11].

c) Nano-fluides ternaires (triple mélange)

Dans cette catégorie trois types de nanoparticules sont dispersés simultanément dans le fluide l'intégration d'un troisième composant permet de combiner plusieurs caractéristiques recherchées,

telles qu'une conductivité thermique accrue, une meilleure stabilité ou même des propriétés optiques spécifiques. Un exemple typique serait un mélange de Al_2O_3, CuO et TiO_2 dans l'eau, où chaque nanoparticule contribue à un aspect particulier de la performance globale du nanofluide.

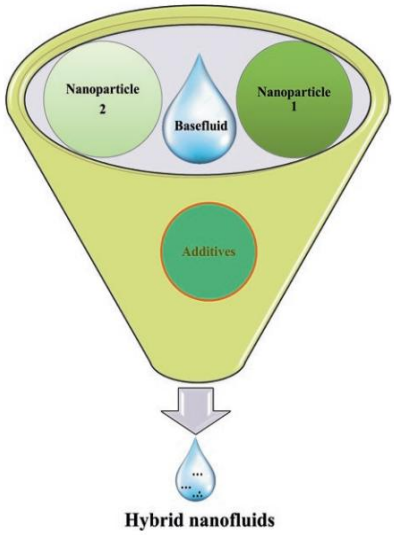


Figure I.6. Hybride des nano-fluides [10]

I.2.4. Les avantage et inconvénients des nano-fluides

I.2.4.1. Les avantage des nano-fluides

Les nano-fluides offrent plusieurs avantages significatifs par rapport aux fluides conventionnels ces avantages peuvent être classés en différentes catégories :

- Une grande surface de transfert de chaleur entre les particules et les fluides [12].
- Haut dispersion et stabilité avec prédominante mouvement brownien des particules.
- Réduit par rapport au liquide pur pour obtenir équivalent intensification de transfert de chaleur.
- Propriétés ajustables, dont la conductivité thermique et la mouillabilité de la surface, en faisant varier les concentrations de particules en fonction de différentes applications.
- Réduction de l'utilisation de fluides polluants : Grâce à leur efficacité accrue, ils permettent de réduire la quantité de fluide nécessaire dans un système.

I.2.4.2. Les inconvénients des nano-fluides

Malgré leurs performances thermiques élevées, les nano-fluides présentent des contraintes technologiques et économiques qui limitent leur intégration dans les systèmes industriels à grande échelle.

- **Instabilité et agglomération des nanoparticules**

  Au fil du temps, les nanoparticules tendent à s'agglomérer ou à se déposer, ce qui peut réduire l'homogénéité du mélange. Cette instabilité de la suspension conduit à une dégradation des performances thermiques et peut générer des blocages dans les canaux d'écoulement, surtout dans des systèmes de refroidissement à micro-canaux.

- **Augmentation de la viscosité et demande énergétique**

  L'ajout de nanoparticules augmente généralement la viscosité du fluide de coup une viscosité plus élevée peut nécessiter une puissance de pompage plus importante, entraînant ainsi une consommation énergétique accrue et pouvant réduire l'efficacité globale du système.

- **Risques de corrosion et d'usure**

  Les nanoparticules peuvent interagir avec les surfaces internes des circuits de refroidissement ou d'échange thermique. Ces interactions peuvent provoquer de la corrosion ou une usure prématurée des composants, réduisant la durabilité et la fiabilité des installations.

- Le manque de l'accord des résultats obtenus par différents chercheurs.
- Le coût élevé des nano-fluides

I.3. Domaines d'applications des nano-fluides

Grâce à leurs propriétés thermiques améliorées, les nano-fluides offrent un fort potentiel pour renforcer le transfert de chaleur et l'efficacité énergétique dans différents dispositifs thermiques. Dans cette partie, nous examinerons plusieurs domaines d'application tels que le refroidissement de composants électroniques, les systèmes d'énergie renouvelable, ainsi que les usages biomédicaux.

a. Refroidissement des systèmes thermiques

Le mélange d'éthylène-glycol et l'eau, sont utilisés comme liquide de refroidissement dans les moteurs des véhicules. L'addition des nanoparticules dans ces liquides ce dernier améliore le taux de refroidissement [13]. Le refroidissement des systèmes thermiques a été étudié par plusieurs

chercheurs comme Tzeng et al [14] . Ont dispersé les nanoparticules de CuO et Al2O3 dans l'huile de refroidissement du moteur de transmission leurs résultats expérimentaux montrent que CuO a le meilleur effet de transfert de chaleur.

b. Refroidissement des systèmes électroniques

Le refroidissement constitue un défi majeur dans le domaine de l'électronique, notamment en raison de la forte densité de chaleur générée et de l'espace réduit pour son évacuation.

Les nano-fluides ont démontré une efficacité remarquable dans ce domaine ils permettent, par exemple, de doubler la capacité de calcul des microprocesseurs grâce à une meilleure gestion thermique, Ma et al [15] ont étudié l'influence des nano-fluides sur le transfert thermique dans un caloduc oscillant. Ils ont montré qu'à une puissance d'entrée de 80 W et pour une faible concentration volumique de $\varphi = 1$ %, la différence de température entre le vaporisateur et le condensateur n'était que de 16,6 °C.

c. La biomédecine

Les nano-fluides et nanoparticules trouvent de nombreuses applications en biomédecine. Par exemple, les nanoparticules à base de fer sont utilisées comme vecteurs de médicaments afin de réduire les effets secondaires des traitements anticancéreux. Elles permettent également un refroidissement localisé, améliorant la sécurité lors d'interventions chirurgicales, Jordan et al [16] . Ont effectué une étude où les nano-fluides pourraient être employés pour produire une température plus élevée autour des tumeurs permettant ainsi de détruire les cellules cancéreuses sans endommager les cellules saines environnantes.

d. L'Energie renouvelable

Les nano-fluides, composés de nanoparticules en suspension dans un fluide, améliorent significativement le transfert de chaleur dans les systèmes solaires thermiques. En augmentant la conductivité thermique du fluide caloporteur, ils optimisent l'absorption et l'échange de chaleur, ce qui conduit à une meilleure efficacité énergétique des capteurs solaires et des systèmes de stockage thermique, des recherches récentes ont mis en évidence l'efficacité des nano-fluides dans diverses applications solaires :

- **Systèmes photovoltaïques-thermiques (PVT)** : Une étude a présenté un prototype de système PVT utilisant un nanofluide d'oxyde de zirconium (ZrO_2) comme agent de refroidissement. Ce système a démontré une réduction notable de la température de

fonctionnement des modules photovoltaïques, améliorant ainsi leur performance globale [17].

- **Centrales solaires à concentration** : Des simulations numériques ont évalué l'impact des nano-fluides sur le transfert de chaleur dans des canaux plans horizontaux, simulant les conditions des panneaux solaires thermiques. Les résultats ont montré que l'augmentation de la fraction volumique de nanoparticules améliore le transfert de chaleur, avec le nanofluide Cu-eau surpassant le Al_2O_3-eau en termes de performance [18]

I.4. Caractéristiques thermophysiques des nano-fluides

I.4.1. La viscosité dynamique

La viscosité caractérise l'aptitude d'un fluide à s'écouler , donc est une propriété importante de l'écoulement des fluides, sa connaissance est fondamentale pour toutes les applications impliquant le transport de fluides, en plus le transfert de chaleur par convection dépend directement de la viscosité des fluides , il a été démontré précédemment que l'ajout de nanoparticules dans un fluide de base permet d'améliorer la conductivité thermique du nanofluide obtenu, mais cela peut aussi conduire à une augmentation défavorable de la viscosité dynamique [19] **,** La majorité des études qui ont traité de la viscosité des nano-fluides ont eu recours, pour son calcul à partir de la viscosité du fluide de base et de la fraction volumique φ, aux relations de Stokes-Einstein ou de Brinkman [12]. Plusieurs modèles théoriques ont été développés pour prédire l'évolution de la viscosité dynamique des suspensions sous certaines conditions on peut prendre comme exemple le modèle d'einstein.

a) Modèle d'Einstein

Le modèle d'Einstein est l'un des premiers modèles théoriques pour prédire l'augmentation de la viscosité d'une suspension de particules dans un fluide de base, bien que ce modèle ait été initialement formulé pour des suspensions très diluées de particules rigides et non-inter agissantes, il sert souvent de point de départ pour comprendre le comportement des nano-fluides. Dans sa forme la plus simple, le modèle d'Einstein s'exprime par la relation :

$$\mu nf = \mu f\ (1 + 2.5\varphi) \qquad (1)$$

- μnf est la viscosité effective du nano-fluide.
- μf est la viscosité du fluide de base.
- ϕ est la fraction volumique (ou le pourcentage en volume) des nanoparticules.

Cette équation indique qu'en ajoutant une petite quantité de nanoparticules (c'est-à-dire pour des valeurs faibles de ϕ), la viscosité du mélange augmente linéairement avec la concentration, avec un coefficient de 2,5.

Les Paramètres affectants la viscosité dynamique des nano-fluides

L'incorporation de particules solides dans un liquide entraîne généralement une augmentation, plus ou moins marquée, de la viscosité du mélange. Cette variation peut être influencée par de nombreux facteurs. Même en utilisant des nanoparticules de même nature et de taille identique dans un fluide de base donné, plusieurs paramètres peuvent significativement modifier la viscosité. Parmi ceux-ci figurent la qualité de la dispersion, la viscosité initiale du fluide porteur, la fraction volumique en nanoparticules ainsi que la température du système, comme l'illustre la Figure I.7

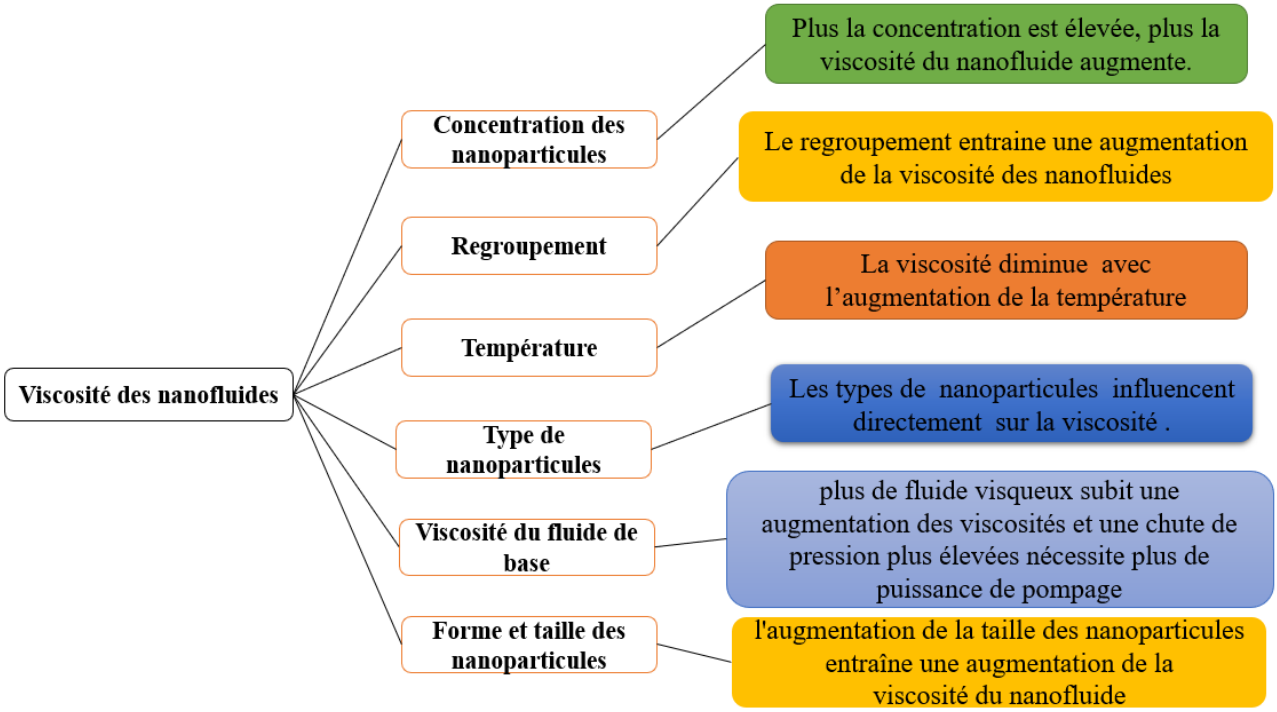


Figure I.7. Paramètres affectant la viscosité des nano-fluides [6]

I.4.2. Conductivité thermique des nano-fluides

La conductivité thermique, λ $(W/m.K)$, exprime la capacité d'un matériau de conduire ou de transmettre de la chaleur, elle est définie comme la quantité de chaleur transférée par unité de surface et de temps sous un gradient de température de 1K par mètre.

La conductivité thermique est la propriété la plus importante des nano-fluides car la principale raison de l'ajout de nanoparticules dans le fluide de base est justement d'augmenter sa conductivité thermique. C'est pour cela, qu'une grande partie des travaux traitant les nano-fluides porte sur la quantification de l'augmentation de leur conductivité thermique [12].

Différents modèles théoriques ont été élaborés pour prédire, sous certaines conditions, la conductivité thermique des suspensions on peut prendre comme exemple le premier modèle à dériver modèle de maxwell.

a. Modèle de Maxwell

Maxwell fut le premier à dériver un modèle pour estimer la conductivité thermique d'une suspension contenant des particules. Le modèle de Maxwell est satisfaisant pour les suspensions contenant des particules sphériques de concentrations volumiques relativement faibles mais ne tient pas compte de l'effet de la taille ni de la forme des particules. Il est à noter aussi que l'effet des interactions inter-particules est négligé dans ce modèle. Le modèle de Maxwell est donné par la formule suivant [20]:

$$\frac{K_{nf}}{K_{fb}} = \frac{K_{np}+2K_{fb}-2\varphi(K_{fb}-K_{np})}{K_{np}+2K_{fb}+2\varphi(K_{fb}-K_{np})} \qquad (2)$$

Où Knf, Kfb et Knp représentent respectivement la conductivité thermique $(W/m.K)$ du nanofluide, du fluide de base et des nanoparticules. φv Représente la fraction volumique des nanoparticules.

Les Paramètres influençant la conductivité thermique des nanofluide

La littérature scientifique rapporte de nombreuses études mettant en évidence que la conductivité thermique des nano-fluides est fortement influencée par plusieurs facteurs. Parmi ceux-ci figurent la nature du liquide de base, le type de matériau constituant les nanoparticules, ainsi que leurs caractéristiques physico-chimiques telles que la taille, la forme, et la concentration volumique. La température joue également un rôle déterminant dans l'évolution de cette propriété thermique, comme l'illustre la Figure I.8.

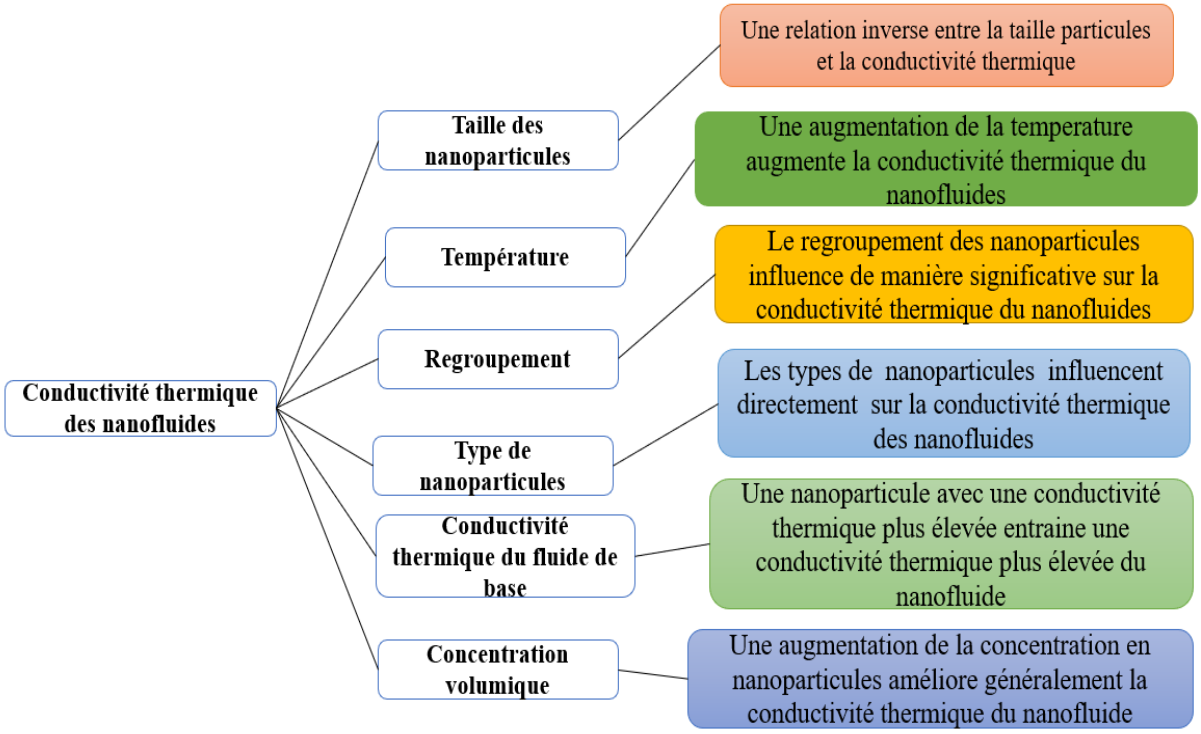


Figure I. 8. Paramètres affectants la conductivité thermique des nano-fluides [6]

I.4.3. Masse volumique (ρ)

La masse volumique d'une substance, notée ρ, correspond à la masse de cette substance dans une unité de volume, la masse volumique des nano-fluides est proportionnelle à la fraction volumique des particules solides.

Le calcul de la masse volumique effective ρnf d'un nanofluide est assez simple et assez conforme aux valeurs expérimentales, elle est souvent estimée sur la base du principe de la règle de mélange en supposant le nanofluide comme un milieu homogène (bonne dispersion des nanoparticules dans le fluide)[21].

La masse volumique du nanofluide est donnée par la formule suivante :

$$\rho nf = (1 - \varphi)\,\rho f + \varphi\rho \qquad (3)$$

Où ρnf, ρp et ρf dénotent respectivement la masse volumique du nanofluide, la masse volumique des nanoparticules et la masse volumique du fluide de base[12].

I.4.4. Chaleur spécifique

La conductivité thermique et la viscosité dynamique sont les deux propriétés thermophysiques les plus étudiées dans le cas des nano-fluides , la chaleur spécifique des nano-fluides , quant à elle, est très rarement étudiée [22].

Par définition la chaleur spécifique Cp est la capacité calorifique par unité de masse d'une substance ou d'un système homogène.

La chaleur spécifique correspond à l'apport de chaleur nécessaire pour élever la température de l'unité de substance de 1K lors de la transformation considérée.

Elle reflète la capacité d'un matériau à accumuler de l'énergie sous forme thermique, pour une masse donnée, quand sa température croit, une capacité thermique élevée signifie qu'une grande quantité d'énergie peut être stockée moyennant une augmentation relativement faible de la température, la dispersion de nanoparticules solides aux fluides de base provoque généralement une diminution de la chaleur spécifique du nanofluide obtenu, car la chaleur spécifique des nanoparticules solides est plus faible que celle des fluides de base [19].

Il existe deux modèles pour le calcul de la chaleur spécifique des nano-fluides, la chaleur spécifique peut être estimée à l'aide de la règle des mélanges ou sur la base de l'hypothèse de l'équilibre thermique neutre des particules solides et du fluide de base. En se basant sur la règle de mélange d'une suspension homogène, Pak et Cho [23] ont proposé l'expression suivante pour le calcul de la chaleur spécifique de nano-fluides :

$$Cpeff = \varphi Cp\,p + (1 - \varphi)\,Cp\,fb \qquad (4)$$

Où $Cpeff$, Cpp et $Cpfb$ dénotent respectivement la chaleur spécifique du nanofluide, la chaleur spécifique des nanoparticules et la chaleur spécifique du fluide de base. Et φ est la fraction volumique des nanoparticules.

De son côté, Xuan et Roetzel [24]. Ont développé un modèle de la chaleur spécifique des nano-fluides basé sur l'hypothèse de l'équilibre thermique entre les particules solides et le fluide de base de la manière suivante :

$$C_{p\,eff} = \frac{\varphi\,\rho_p C_{p\,p} + (1-\varphi)\rho_{fb} C_{p\,fb}}{\varphi\,\rho_p + (1-\varphi)\rho_{fb}} \qquad (5)$$

Où ρp, $\rho f b$ dénotent respectivement la masse volumique des nanoparticules et la masse volumique du fluide de base.

I.4.5. Stabilité colloïdale

La stabilité des nano-fluides représente le maintien de leurs performances pendant une durée plus longue en conservant leurs propriétés sans agrégation ni regroupement de nanoparticules dans le fluide de base [25] malgré la petite taille des nanoparticules, la gravité est la principale raison de l'instabilité des nano-fluides , en plus des énergies cinétiques résultant du mouvement brownien qui font qu'il ne reste pas en suspension pendant une longue période [26] et l'adhérence des particules dispersées dans le fluide de base provoque la sédimentation des agrégats de particules en raison de la gravité [27] Le nanofluide est considéré comme stable lorsque la concentration en taille des particules surnageantes reste constante [28] la régulation du pH du fluide est l'une des méthodes utilisées pour augmenter la stabilité des nano-fluides en créant une charge de surface autour de la nanoparticule qui produit de fortes forces qui aident à la dispersion des particules [28]

I.5. Techniques des caractérisations

La caractérisation des nano-fluides une étape cruciale pour analyser leurs propriétés physico-chimiques, structurales et thermiques, diverses techniques sont mobilisées selon les paramètres étudiés. Par exemple, la diffraction des rayons X (XRD) permet d'identifier la structure cristalline, tandis que la microscopie électronique à balayage (SEM) ou à transmission (TEM) offre des informations sur la morphologie et la taille des nanoparticules, l'analyse élémentaire est généralement réalisée par spectroscopie EDX. D'autres techniques comme la diffusion dynamique de la lumière (DLS) et la spectroscopie UV-Vis servent à évaluer la dispersion et la stabilité colloïdale des nanoparticules dans le fluide.

I.5.1. Diffraction des rayons X (XRD)

La radiographie aux rayons X est une technique d'imagerie basée sur l'enregistrement de l'intensité des rayons X traversant un objet à l'aide de films ou de détecteurs, permettant ainsi de rendre visible sa structure interne grâce aux variations locales de l'absorption. L'un des développements majeurs de ces dernières années dans ce domaine est la tomographie assistée par ordinateur aux rayons X (X-ray Computed Tomography - XCT).

Enfin, les méthodes de diffraction des rayons X (XRD) reposent sur la capacité des cristaux à diffracter les rayons X de manière caractéristique, permettant une étude précise de la structure des phases cristallines. Les spectres de diffraction enregistrés contiennent des contributions additives de plusieurs caractéristiques micro- et macro-structurales de l'échantillon. En exploitant la position des pics de diffraction, il est possible d'étudier les paramètres de maille, le groupe d'espace, la composition chimique, les contraintes macroscopiques, ainsi que l'analyse qualitative des phases[29].

I.5.2. Spectroscopie UV-Vis

Absorbance UV-Visible spectrophotométrie C'est une technique d'analyse quantitative qui consiste à mesurer l'absorbance d'un milieu en fonction de la longueur d'onde et d'en étudier l'évolution au cours du temps. Plus la solution est concentrée, plus l'intensité du rayonnement absorbé est importante dans la limite de la proportionnalité entre la concentration et l'absorbance annoncée par la loi de Beer-Lambert. Dans le cas des nanoparticules en suspension dans un liquide de base, la spectrophotométrie UV-visible est particulièrement intéressante pour indiquer l'état de dispersion des particules ainsi que la présence ou non des agglomérats en se basant sur l'intensité du faisceau absorbé ou transmis. En effet, la variation de la concentration et la taille des particules surnageantes dans le temps est détectée par la mesure de l'absorbance des suspensions[30]

I.5.3. Microscopie Electronique à Transmission (MET) ou Electronique à balayage (MEB)

La microscopie Electronique à Transmission ou à Balayage permet d'observer des éléments à l'échelle atomique, plus particulièrement leurs tailles, leurs formes et leurs distributions. Le figure I.7 illustre le schéma de principe de fonctionnement du MEB (a) et du MET (b). Ces procédés ne permettent pas de mesurer sous situation réelle des nanoparticules en suspension dans un liquide de base, car les mesures s'effectuent généralement sur des échantillons préalablement séchés. Néanmoins, ces techniques fournissent des informations pertinentes sur la structure des nanoparticules et du réseau qu'elles peuvent former, à l'image des figures I.5. Elles permettent de contrôler la formation et la taille des agrégats au sein du nanofluide [31]

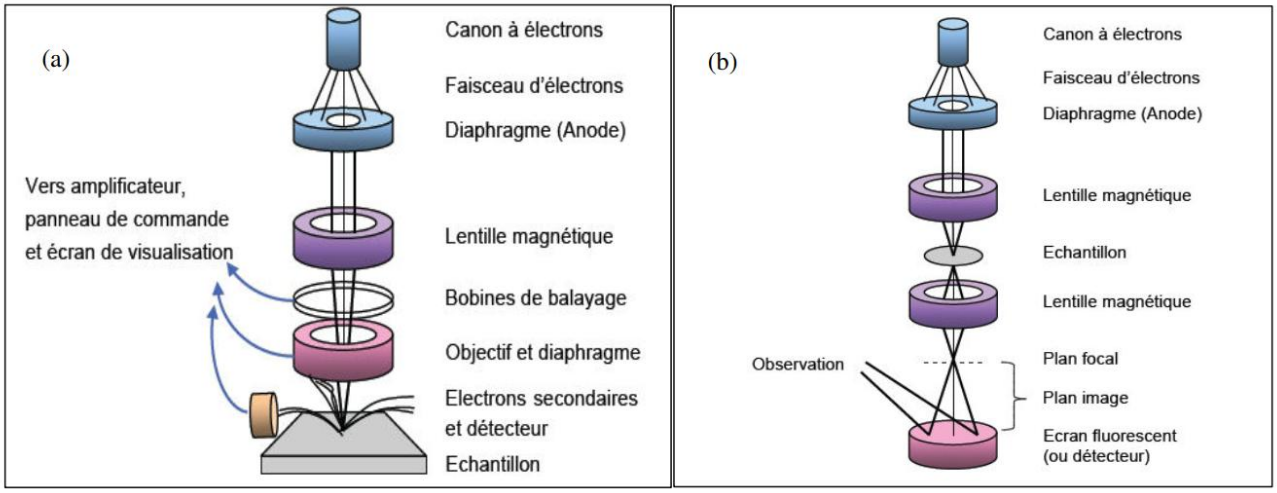


Figure I.9. Schéma de principe (a) MEB ; (b) MET

Tableau I.2. Tableau récapitulatif des différences entre MET et MEB [31]

Caractéristique	MET (Transmission)	MEB (Balayage)
Principe	Faisceau d'électrons traversant un échantillon ultra-fin	Faisceau d'électrons balayant la surface
Résolution	Très haute (jusqu'à 0,1 nm)	Moins élevée (quelques nm)
Type d'image	2D, structure interne	3D, surface de l'échantillon
Préparation	Complexe (coupes ultrafines, fixation, coloration)	Plus simple (métallisation parfois nécessaire)
Application	Biologie, cristallographie, nanomatériaux	Matériaux, biologie, industrie, analyse chimique

I.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons donné une exploration approfondie des nano-fluides, couvrant leur définition, leurs composants, leurs avantages et inconvénients, ainsi que leurs caractéristiques thermophysiques et les techniques de caractérisation associées. Les nano-fluides, constitués de nanoparticules dispersées dans des fluides porteurs, présentent des propriétés thermiques améliorées, les rendant prometteurs pour diverses applications industrielles. Cependant, leur utilisation nécessite une compréhension précise de leurs propriétés thermophysiques, telles que la viscosité dynamique, la conductivité thermique, la masse volumique, la chaleur spécifique et la stabilité colloïdale.

L'évaluation rigoureuse de ces propriétés est essentielle pour optimiser les performances des nano-fluides dans les systèmes thermiques. De plus, la maîtrise des techniques de caractérisation, notamment la diffraction des rayons X (XRD), la spectroscopie UV-Vis et la microscopie électronique à transmission (MET) ou à balayage (MEB) est cruciale pour analyser et contrôler les caractéristiques des nano-fluides. Ainsi, une approche intégrée combinant une caractérisation précise et une compréhension approfondie des propriétés des nano-fluides est indispensable pour leur développement et leur application efficace dans les technologies thermiques avancées.

II. Chapitre II : La modélisation par apprentissage automatiq

II.1. Introduction

Dans un monde où les données sont devenues une ressource stratégique, l'intelligence artificielle et plus particulièrement l'apprentissage automatique (machine Learning) s'impose comme un outil incontournable pour exploiter cette richesse informationnelle, permet aujourd'hui à des systèmes intelligents d'effectuer des tâches complexes telles que la reconnaissance d'images, la prévision de séries temporelles ou encore la segmentation de clients….

L'apprentissage automatique repose sur une diversité de techniques, adaptées selon la nature des données et les objectifs à atteindre, il se décline ainsi en plusieurs types supervisé, non supervisé, semi-supervisé et par renforcement. Chacun répondant à des besoins spécifiques en matière de modélisation et d'analyse.

Dans ce contexte, la modélisation par apprentissage automatique occupe une place centrale, elle consiste à traduire un problème réel en un modèle mathématique capable d'apprendre à partir des données disponibles pour en extraire des prédictions fiables. Contrairement aux méthodes traditionnelles de modélisation fondées sur des équations fixes, l'approche par apprentissage automatique repose sur l'adaptation dynamique du modèle aux données, ouvrant la voie à des performances plus robustes et à une meilleure généralisation.

Dans ce chapitre nous avons exploré les fondements et les mécanismes de l'apprentissage automatique selon la structure suivante :

Dans une première partie, nous avons défini les principes de l'apprentissage automatique et ses principaux types. Ensuite, nous avons abordé la modélisation à travers apprentissage automatique, en insistant sur ses spécificités face aux autres approches. Puis, nous avons présenté les algorithmes les plus couramment utilisés en portant l'attention sur XGBoost Régression. Enfin, nous avons détaillé les différentes étapes de la modélisation, de la collecte des données jusqu'à l'évaluation et l'optimisation du modèle.

II.2. Généralité sur la modélisation

II.2.1. La définition de la modélisation

La modélisation est le processus qui consiste à représenter un phénomène réel ou un système complexe sous une forme simplifiée et compréhensible, généralement à l'aide d'un modèle mathématique, statistique ou informatique [1].

Les principaux objectifs de la modélisation consistent à comprendre le fonctionnement d'un système, en en identifiant les relations essentielles entre ses différentes variables, afin de pouvoir ensuite prédire son comportement dans diverses conditions. Cette compréhension permet également de simuler ou d'optimiser différents scénarios, en testant virtuellement les effets de certains changements sans avoir à les expérimenter directement. Enfin, la modélisation fournit une base solide pour prendre des décisions éclairées à partir des données disponibles, ce qui en fait un outil clé dans de nombreux domaines scientifiques, industriels et économiques [1].

II.2.2. Les types de modélisation

Pour déterminer les propriétés des nanofluides (comme la viscosité, la conductivité thermique, la densité, la capacité calorifique, etc.), plusieurs types de modélisation peuvent être utilisés.

La modélisation théorique, aussi appelée modélisation analytique, est un type de modélisation physique ou physico-chimique qui repose sur des équations empiriques, semi-empiriques ou dérivées de principes théoriques. Elle permet d'estimer certaines propriétés des nanofluides en utilisant des formules mathématiques relativement simples. Parmi les exemples les plus connus figurent le modèle d'Einstein pour la viscosité, le modèle de Maxwell pour la conductivité thermique, ainsi que ceux de Brinkman ou Batchelor. Ces modèles sont généralement utilisés pour prédire de façon approximative les propriétés des nanofluides en fonction de paramètres comme la fraction volumique des nanoparticules, la température ou la taille des particules [2].

La modélisation par apprentissage automatique (ou Machine Learning) est un type de modélisation dite data-driven, car elle repose sur l'apprentissage à partir de données expérimentales. Contrairement aux modèles théoriques basés sur des équations physiques, cette approche utilise des algorithmes pour détecter des relations complexes entre les variables d'entrée et les propriétés à prédire. Parmi les méthodes couramment utilisées figurent les modèles de régression comme le SVR, XGBoost ou Random Forest. Cette approche permet de prédire avec

précision des propriétés telles que la viscosité et la conductivité thermique des nanofluides, en fonction de plusieurs paramètres comme la température et la taille des particules [2].

II.3. L'apprentissage automatique

L'apprentissage automatique (machine Learning) a été introduit par Arthur Samuel en 1959, qui le définit comme un « champ d'études permettant aux ordinateurs d'apprendre sans être explicitement programmés »[3]. Son principe repose sur l'analyse de grandes quantités des données, la reconnaissance de modèles et l'optimisation des décisions en fonction des résultats obtenus.

L'apprentissage automatique est un sous-domaine de l'intelligence artificielle qui utilise des algorithmes formés sur des ensembles de données pour créer des modèles qui permettent aux machines d'effectuer des tâches qui ne seraient autrement possibles que pour les humains, telles que la catégorisation d'images, l'analyse de données ou la prédiction des fluctuations de prix…

Aujourd'hui, l'apprentissage automatique est l'une des formes les plus courantes d'intelligence artificielle et il est souvent à l'origine d'un grand nombre de biens et de services numériques que nous utilisons tous les jours.

II.3.1. Types d'apprentissage automatique

Les divers biens et services numériques que nous utilisons quotidiennement reposent sur différents types d'apprentissage automatique bien que leur objectif commun soit de développer des machines et des applications autonomes, les approches employées varient selon la méthode utilisée.

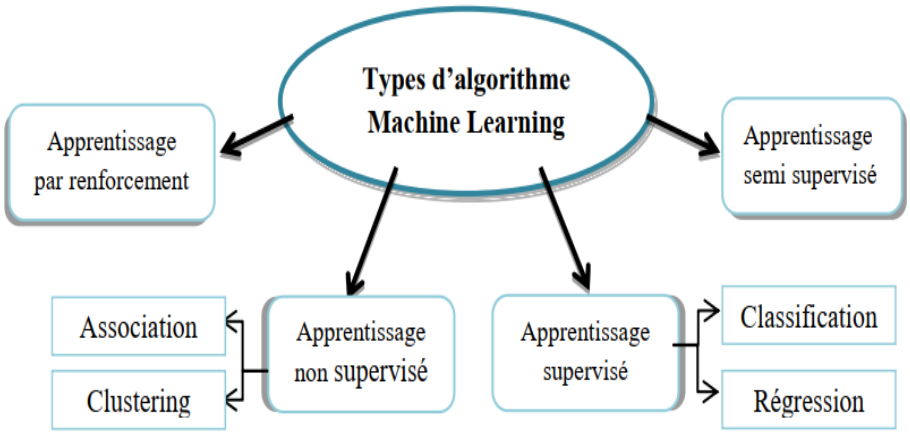


Figure II.1.les quatre Types de système d'apprentissage automatique [4]

L'apprentissage automatique se divise en quatre grandes catégories, en fonction de la nature des données et de la manière dont l'algorithme apprend :

II.3.1.1. Apprentissage automatique supervisé

L'apprentissage supervisé est un type d'apprentissage automatique dans lequel l'algorithme est formé sur un ensemble de données étiquetées cela signifie que les données d'entrée ont déjà été classées ou étiquetées par des humains et que l'algorithme apprend à faire des prédictions sur la base de ces données étiquetées [5].

Dans l'apprentissage supervisé, l'algorithme reçoit à la fois les données d'entrée et les données de sortie correspondantes, et il utilise ces informations pour apprendre une fonction de correspondance entre les deux il existe deux applications courantes de l'apprentissage supervisé : la régression et la classification.

- **La régression :**

Une autre application courante de l'apprentissage supervisé est la régression. Un modèle de régression établit une relation entre une variable dépendante continue (appelée Y) et une ou plusieurs variables indépendantes (X) afin de prédire la valeur de Y pour de nouvelles données [4].

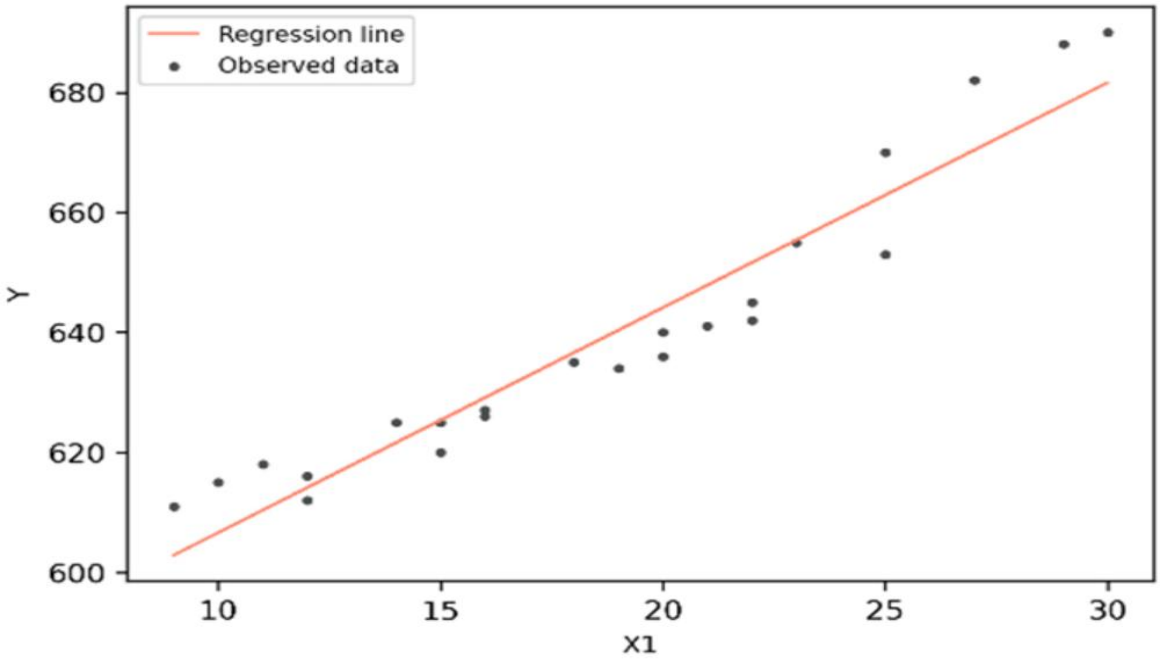


Figure II.2. Visualisation d'un modèle de régression [6]

II.3.1.2. Apprentissage non supervisé

L'apprentissage non supervisé est un autre type courant d'apprentissage automatique où, contrairement à l'apprentissage supervisé, l'algorithme est formé sur un ensemble de données non étiquetées [5].

Dans l'apprentissage non supervisé, l'algorithme ne reçoit aucune information sur la sortie ou les étiquettes des données d'entrée. Au lieu de cela, il apprend à identifier des modèles et des structures dans les données par lui-même les principes types d'apprentissage non supervisé : le regroupement et la réduction de la dimensionnalité.

II.3.1.3. Apprentissage semi-supervisé

L'apprentissage semi-supervisé est une combinaison de techniques d'apprentissage supervisé et non supervisé. L'algorithme est formé sur un ensemble de données qui contient à la fois des données étiquetées et non étiquetées.

Les données étiquetées sont utilisées pour former l'algorithme de manière supervisée, tandis que les données non étiquetées sont utilisées pour aider l'algorithme à en apprendre davantage sur la structure sous-jacente des données.

L'idée derrière l'apprentissage semi-supervisé est que les données non marquées peuvent être utilisées pour améliorer la précision et la capacité de généralisation de l'algorithme [5].

II.3.1.4. Apprentissage par renforcement

Le dernier grand type d'apprentissage automatique est l'apprentissage par renforcement, dans lequel un agent apprend à prendre des décisions en interagissant avec un environnement. Dans l'apprentissage par renforcement, l'agent entreprend des actions dans l'environnement et reçoit un retour d'information sous forme de récompenses ou de punitions, l'objectif de l'agent est d'apprendre à maximiser sa récompense à long terme [5].

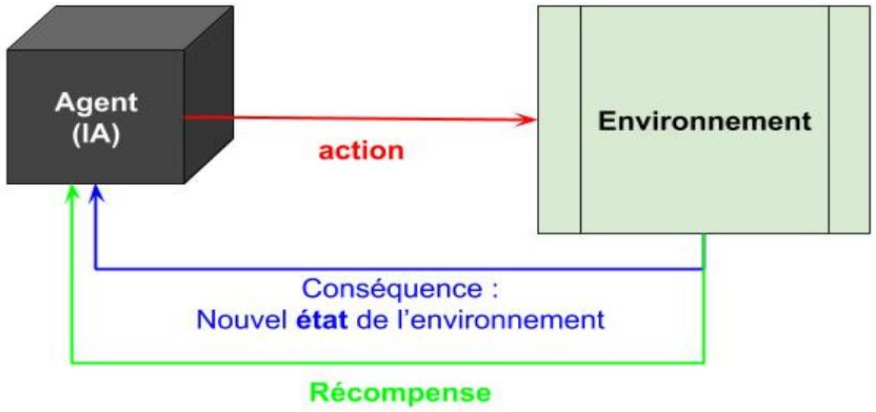


Figure II.3. Structure de l'apprentissage par renforcement [7]

II.4. Les algorithmes de l'apprentissage automatique

Les algorithmes d'apprentissage automatique (machine Learning) sont des méthodes mathématiques et informatiques qui permettent à une machine d'apprendre à partir de données et de faire des prédictions ou des décisions sans être explicitement programmée [3], les algorithmes d'apprentissage automatique les plus courantes sont :

- Régression (linéaire, logistique)
- Arbres de décision / Random Forest
- SVM (Support Vector Machine)
- XGBoost
- K-Means / Clustering
- Apprentissage par renforcement (Q-Learning, DQN, PPO)

II.4.1. Choix du modèle

Il existe une diversité considérable d'algorithmes en apprentissage automatique. Il devient donc essentiel de déterminer lequel choisir. Un premier critère de sélection concerne le type d'apprentissage souhaité ou possible. Ainsi, il est nécessaire de décider si l'on opte pour un apprentissage supervisé, non supervisé ou par renforcement, en fonction des exigences de la tâche à accomplir et des données disponibles [8].

Dans ce travail, nous nous focaliserons sur l'algorithme Extreme Gradient Boosting (XGBoost).

II.4.2. XGBoost Régression :

Dans l'apprentissage automatique, nous combinons souvent différents algorithmes pour obtenir de meilleurs résultats et optimiser les résultats.

Notre objectif principal est de minimiser la fonction de perte pour laquelle, l'un des algorithmes célèbres est la technique XGBoost qui fonctionne en construisant un ensemble d'arbres de décision séquentiellement où chaque nouvel arbre corrige les erreurs commises par le précédent [8].

Il utilise des techniques d'optimisation avancées et des méthodes de régularisation qui réduisent le surajustement et améliorent les performances du modèle [9].

II.4.2.1. Les hyperparamètres dans XGBoost

Un hyperparamètre est un type de paramètre externe au modèle défini avant le début du processus d'apprentissage il est réglable et peut affecter directement les performances d'un modèle [10], les paramètres les plus courants sont :

- **Max_depth** : La profondeur maximale par arbre, un arbre plus profond peut augmenter les performances mais aussi la complexité et les chances de sur-ajustement, la valeur doit être un entier supérieur à 0.
- **Learning_rate (eta) :** le taux d'apprentissage détermine la taille du pas à chaque itération pendant que le modèle s'optimise vers l'objectif, un faible taux d'apprentissage ralentit le calcul et nécessite plus de tours pour obtenir la même réduction d'erreur résiduelle qu'un modèle avec un taux d'apprentissage élevé, mais cela optimise les chances d'atteindre le meilleur optimum, la valeur doit être comprise entre [0, 1] et la valeur par défaut est 0,3.
- **n_estimators :** nombre total d'arbres générés équivaut au nombre de tours de boost, la valeur doit être un entier supérieur à 0.
- **alpha (reg_alpha) :** Contrôle la régularisation L1 sur les poids (Lasso Regression), en réduisant le sur-ajustement en éliminant certaines caractéristiques inutiles.
- **Lambda (reg_lambda) :** contrôle la régularisation L2 sur les poids (Ridge Regression), cela pourrait aider à réduire le surajustement.

II.5. Étapes de la Modélisation par Apprentissage Automatique

La modélisation par apprentissage automatique suit une série d'étapes méthodiques qui permettent de passer des données brutes à un modèle fiable capable de faire des prédictions ou de classer des informations, ces étapes sont essentielles pour garantir la qualité, la pertinence et la

robustesse du modèle construit. le processus de création d'un modèle d'apprentissage automatique comprend six étapes [11] :

1- Collecte et compréhension des données
2- Prétraitement des données
3- Séparation des données
4- La configuration et l'entrainement du modèle
5- L'évaluation des performances
6- Le test et l'ajustement du modèle

Tableau II.1. Les étapes de la modélisation par Apprentissage Automatique [10]

etapes	descriptive
Collecte et compréhension des données	Cette première étape consiste à rassembler les données nécessaires à la modélisation et crucial de comprendre la nature de variable
Prétraitement des données	Cette étape concentre sur le nettoyage des données comme la normalisation ou la standardisation des variables…
Séparation des données	Dans cette etapes les données sont divisée a deux partie training set et test set
La configuration et l'entrainement du modèle	La configuration ou le choix de l'algorithme dépend du type de problème (régression, classification, etc.) et des caractéristiques des données par contre L'entraînement consiste à ajuster les paramètres internes du modèle pour minimiser une fonction de perte.
L'évaluation des performances	Le modèle est évalué à l'aide de métriques adaptées : ❑ Régression : MAE, RMSE, R^2 ❑ Classification : Accuracy, Precision
Le test et l'ajustement du modèle	La dernière étape de l'apprentissage automatique consiste à évaluer les performances du modèle dans des conditions réelles.

II.6. Conclusion

L'apprentissage automatique transforme radicalement notre manière de comprendre, prédire et agir sur le monde qui nous entoure, grâce à la puissance des algorithmes et à l'abondance des données, il permet aux machines de développer des comportements intelligents, souvent comparables, voire supérieurs, à ceux de l'humain dans certaines tâches spécifiques.

Tout au long de ce chapitre, nous avons exploré les fondements de cette discipline, en commençant par ses types et ses techniques clés, nous avons ensuite mis en lumière la modélisation spécifique à l'apprentissage automatique, en soulignant ses avantages face aux approches traditionnelles.

L'analyse des algorithmes couramment utilisés, avec un accent particulier sur XGBoost Régression, nous a permis de mieux comprendre la mécanique d'apprentissage. Enfin, les étapes de la modélisation ont été détaillées afin de fournir une méthodologie rigoureuse et reproductible pour développer des modèles performants.

III. Chapitre III : Développement d'un model XGBR pour la prédiction de viscosité et la conductivité thermique des nanofluides

III.1. Introduction

Dans le cadre de ce travail, la modélisation de deux propriétés thermophysiques des nanofluides la viscosité et conductivité thermique a été réalisée en s'appuyant sur des données expérimentales publiées et sur l'algorithme de régression XGBoost (Extreme Gradient Boosting Regressor). Ce chapitre présente de manière détaillée la méthodologie adoptée pour collecter, préparer et traiter ces données, ainsi que les étapes suivies pour entraîner et valider le modèle prédictif. Enfin, les résultats des modèles développées sont analysés à travers différents paramètres statistiques (R^2, Q^2_{CV}, RMSE, MSE, MSA) et par la prédiction des nouveaux points de la base cachée. L'interprétation des modèles XGBR a été réalisée par l'analyse de la contribution et l'importance de chaque paramètre d'entrée sur la conductivité thermique.

III.2. Matérielle et méthodes

III.2.1. Collecte de la base des données

Dans le cadre de cette étude, un ensemble de 520 données expérimentales sur la viscosité et de 514 sur la conductivité a été extrait de la littérature scientifique. Comme présenté dans le **tableau III.1** chaque étude rapporte des mesures précises de viscosité et de conductivité thermique pour divers types de nanofluides.

Cinq variables ont été considérées pour caractériser les nanoparticules : la masse molaire, le diamètre, la chaleur spécifique et la fraction volumique. Pour le fluide de base, trois variables ont été prises en compte : la masse molaire, la densité et la chaleur spécifique. La température du nanofluide a également été incluse comme variable d'entrée.

La présence de multi-colinéarité parmi les dix descripteurs sélectionnés pour chaque modèle a été analysée à l'aide des coefficients de corrélation. Toute variable explicative présentant un coefficient de corrélation supérieur à 0,75 a été écartée de l'analyse afin de limiter les redondances et préserver la robustesse du modèle. Les données expérimentales couvrent une large gamme de configurations expérimentales, ce qui permet une représentation complète et diversifiée des comportements thermophysiques des nanofluides.

Tableau III.1. Caractéristiques expérimentales des nanofluides extraites de 16 études scientifiques

Reference	Nanofluides	Input	Output
[1]	Ag/H2O	T (50-90) ; ϕ (0,0.3,0.6,0.9) ;d_{np} (61.5nm)	λ η
[2]	TiO2/H20	T (15-35) ; ϕ (0,0.2,0.6,1,1.5,2) ; d_{np}(50nm)	λ η
[3]	AL2O3/water	T (32-67) ; ϕ (0,1.3,2.8,4.3) ; d_{np}(13nm)	λ η
[4]	Fe3O4/water	T (20-60) ; ϕ(0,0.2,0.4,0.6,0.8,1,1.5,2) ;d_{np}(13nm)	λ η
[5]	Ag/EG	T (25-55) ; ϕ (0,0.25,0.5,0.75,1,1.5,2) ;d_{np}(40nm)	η
[6]	CuO/R134a	T (27-52) ;ϕ (1,2,3,4,5) ;d_{np}(20nm)	λ η
[7]	Al2O3/Transol	T (20-50) ;ϕ (0,0.1,0.3,0.5,1) ;d_{np}(20nm)	λ η
[8]	MgO/H2O	T (20-50) ;ϕ (0,0.25,0.5,0.75,1,1.25,1.5,2) d_{np}(55nm)	λ
[9]	ZnO/H2O	T (20-60) ;ϕ (0,0.5,0.75,1) ;d_{np}(20nm)	η
[10]	Al2O3/R141b	T (5-20) ;ϕ (0.1,0.2,0.3,0,4) ;d_{np}(13nm)	λ η
[11]	GO/H2O	T (20-50) ; ϕ (0,0.25,0.5,0.75,1,1.25,1.5,2) ;d_{np}(5.5nm)	λ
[12]	Fe/EG	T (26-55) ;ϕ (0.125,0.25,0.5,1,2,3) ; d_{np}(40nm)	η
[13]	SiO2/H2O	T (25-55) ; ϕ (0,0.1,0.25,0.5,1,1.5,2,2.5,3) ; d_{np}(50nm)	λ
[14]	SiC/H2O	T (10-50) ;ϕ (0,0.04,0.1,0.4,0.8,1) ;d_{np}(25nm)	λ
[15]	SiO2/H2O	T (20-50) ;ϕ (0,0.5,1,2) ;d_{np}(69.09nm)	λ
[16]	GQDs/H2O	T (10-40) ; ϕ (0,0.05,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5) ;d_{np}(20nm)	λ η

III.2.2. Division base de Données

III.2.2.1. Division base de Données pour conductivité thermique

Pour garantir un apprentissage optimal de modèle XGBoost. Un ensemble des 514 données expérimentales ont été divisé en deux sous-ensembles. La premier base (433 points) a été consacrée pour le développement de modèle. Cette dernière est répartie en deux sous-ensembles, 80 % pour l'apprentissage (352 points) et 20 % pour le test (81 points), comme présenté dans le Tableau III.2.

La deuxième base (81) a été utilisé comme un test externe pour valider la capacité du modèle à généraliser à de nouvelles données. Cette approche assure une évaluation objective et fiable des performances prédictives.

Tableau III.2.Répartition des données pour la modélisation de conductivité thermique

Ensemble de données	Première division de Data	Nombre de points	Description
Apprentissage	1er sous-ensemble (433points)	352	Utilisé pour entraîner le modèle (80 %)
Test		81	Utilisé pour évaluer le modèle pendant l'entraînement (20 %)
Test externe	2ème sous-ensemble (81 points)	81	Utilisé pour valider la performance du modèle sur des données jamais vues
Total	514	514	Ensemble complet de données expérimentales

III.2.2.2. Division base des Données pour viscosité dynamique

Toujours dans le but d'assurer un apprentissage optimal du modèle XGBoost, un ensemble de 520 données expérimentales a été réparti en deux base des données distincts. La première base des données (433 points), a été consacrée pour le développement du modèle. Cette dernière a été subdivisé en deux sous-ensembles : 80 % des données (352 points) ont été affectés à la phase d'apprentissage, tandis que les 20 % restants (81 points) ont servi à un test, comme le représente le **Tableau III.3.**

Le deuxième base (87) a été utilisé pour un test externe dans le but d'estimer sa capacité de généralisation à de nouvelles données. Cette méthodologie garantit une validation rigoureuse et fiable des performances prédictives.

Tableau III.3.Répartition des données pour la modélisation de la viscosité dynamique

Ensemble de données	Première division de Data	Nombre de points	Description
Entraînement (Training)	1er sous-ensemble (433points)	352	Utilisé pour entraîner le modèle (80 %)
Test interne (Testing)		81	Utilisé pour évaluer le modèle pendant l'entraînement (20 %)
Test externe	2ème sous-ensemble (87 points)	87	Utilisé pour valider la performance du modèle sur des données jamais vues
Total	520	520	Ensemble complet de données expérimentales

III.3. Modélisation par apprentissage automatique : application du modèle XGBR

Des modèles de régression basés sur l'algorithme XGBoost (Extreme Gradient Boosting Regressor – XGBR) ont été développés afin de prédire la conductivité thermique et la viscosité dynamique des nanofluides à partir des variables d'entrée considérées.

III.3.1. Validation croisée 5-fold

Dans cette étude, la validation croisée à 5 plis (5-fold cross-validation) a été utilisée afin d'évaluer les performances du modèle de manière fiable. L'ensemble d'apprentissage (80 % des données du 1ier sous ensemble) a été divisé en cinq sous-ensembles. À chaque itération, quatre sous-ensembles sont utilisés pour l'entraînement, et le cinquième, différent à chaque fois, sert au test. Ce processus est répété sur tous les parties de base des données, de sorte que chaque sous-ensemble soit utilisé une fois pour l'évaluation. Les résultats sont ensuite moyennés afin d'obtenir une estimation plus stable et représentative des performances du modèle, réduisant ainsi les risques de surapprentissage.

III.3.2. Utilisation de Grid Search :

Une recherche par grille (Grid Search) a été utilisée lors de la phase d'apprentissage afin d'optimiser les hyperparamètres du modèle XGBoost. Cette méthode consiste à tester de manière exhaustive plusieurs combinaisons de valeurs pour des hyperparamètres clés, notamment (Learning_rate, max_depth, n_estimators, reg_alpha et reg_lambda).

Chaque combinaison est évaluée à l'aide de la validation croisée, et celle offrant les meilleures performances moyennes est retenue. Les plages de valeurs choisies sont présentées dans le **Tableau III.4.**

Tableau III. 4. Hyperparamètres de XGBoost Régression

Paramètre	Learning rate	Max_depth	N_estimators	Reg alpha	Reg lambda
Intervalle	[0.01, 0.1, 0.2]	[3, 5, 7]	[50, 100, 200]	[0.1, 0.5, 1.0]	[0.5, 1.0, 2.0]

III.3.3. Evaluation des modèles par métriques statistiques

Afin d'évaluer de manière rigoureuse la performance et la fiabilité du notre modèle développé, une validation approfondie a été effectuée en combinant deux approches complémentaires : la validation interne et la validation externe.

Les métriques statistiques qui ont été utilisées sont : le coefficient de détermination (R^2), l'erreur quadratique moyenne (RMSE), l'erreur absolue moyenne (MAE) et l'erreur quadratique moyenne simple (MSE), comme représenté dans le **Tableau III.5**.

Tableau III. 5.Métriques statistiques utilisent dans notre modèle

Formule des métriques statistiques	Descriptive
$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_R - y_p)\text{^}2}{\sum_{i=1}^{n}(y_R - y_m)\text{^}2}$	le coefficient de détermination mesure la proportion de la variance des valeurs d'une variable dépendante expliquée par le modèle de régression[1].
$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_R - y_p)\text{^}2}$	RMSE est l'écart-type des résidus, les résidus sont la mesure de l'écart entre les points de données et la ligne de régression elle indique la concentration des données autour de la ligne du meilleur ajustement[2]
$\text{MAE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\|y_R - y_p\right)\right\|$	MAE mesure la taille moyenne des erreurs dans un ensemble de prédictions, sans tenir compte de leur direction, elle est mesurée comme la différence absolue moyenne entre les valeurs prédites et les valeurs réelles et sert à évaluer l'efficacité d'un modèle de régression [3].
$\text{MSE}= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_R - y_p)\text{^}2$	Est un indicateur de vérification de la fiabilité d'un modèle et elle étudie les écarts entre les valeurs réellement observées et les valeurs prédites par le modèle[4].
$Q^2_{cv} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_R - y_p)\text{^}2}{\sum_{i=1}^{n}(y_R - y_m)\text{^}2}$	Coefficient de prédiction croisée est une mesure statistique utilisée pour évaluer la capacité prédictive d'un modèle de régression. Il est calculé via la validation croisée et reflète la proportion de la variance des données de réponse qui peut être prédite par le modèle[5].

III.4. Résultats et discussions

III.4.1. Matrice de corrélation

L'analyse des coefficients de corrélation entre les variables d'entrée d'un ensemble de données permet d'identifier la nature et la force des relations linéaires entre les variables. Elle joue un rôle clé dans l'analyse exploratoire des données et la sélection des caractéristiques pertinentes pour les modèles d'apprentissage automatique. En visualisant ces corrélations, on peut détecter les relations positives, négatives ou nulles, ce qui facilite la compréhension des interdépendances entre variables et guide les décisions lors de la modélisation des données.

Les **Figures III.1 et III.2** montrent qu'il y'a pas de corrélation assez importante entre les variables d'entrée supérieur à 0.75 Ce qui nous a permis de suggérer l'absence de corrélation linéaire significative entre les variables d'entrée sélectionnés.

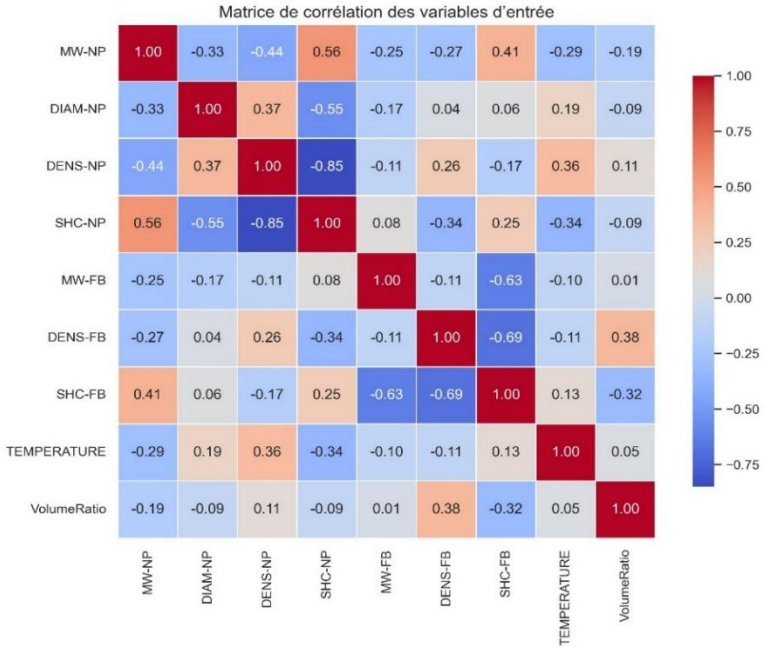


Figure III.1. Matrice de corrélation d'entrée pour conductivité thermique

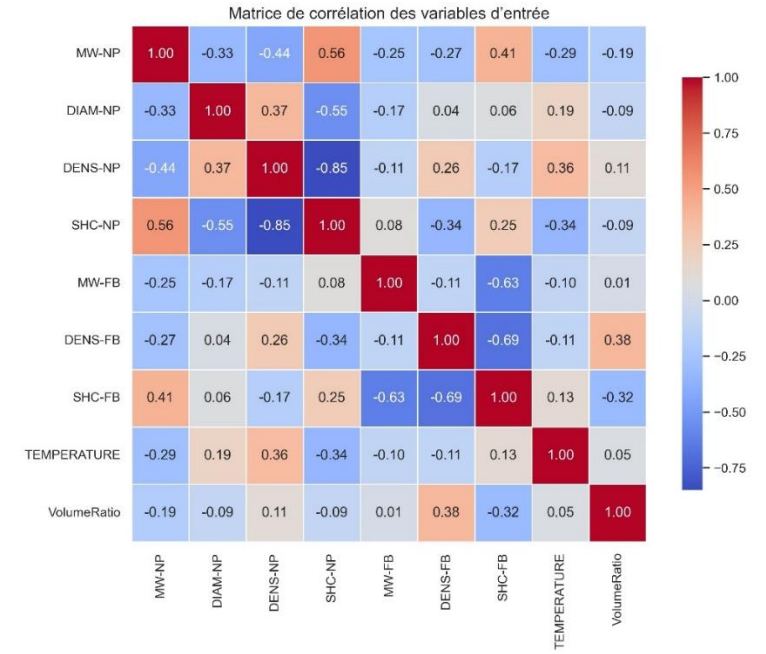


Figure III.2. Matrice de corrélation d'entrée pour la viscosité

III.4.2. Meilleure Grid Search des hyperparamètres :

Les meilleurs hyperparamètres ont été déterminés après l'évaluation de 1215 combinaisons différentes, les valeurs optimales retenues présentées dans le **Tableau III.6** ont permis d'atteindre les meilleures performances du modèle. Ces choix reflètent un bon équilibre entre complexité du modèle et capacité de généralisation.

Tableau III.6. Meilleurs hyperparamètres choisie

Paramètre	Learning rate	max_depth	n_estimators	reg_alpha	reg_lambda
Conductivité thermique	0.2	7	100	0.1	0.5
Viscosité dynamique	0.2	3	200	0.5	2

III.5. Validation

III.5.1. Résultats de métriques statistiques

L'évaluation des performances des modèles a été réalisée pour la prédiction de deux propriétés thermophysiques des nanofluides : la viscosité dynamique et la conductivité thermique.
Les résultats montrent une excellente capacité de prédiction Pour la viscosité dynamique le modèle atteint un coefficient de détermination R^2 de 0.9921 sur l'ensemble de test, avec une erreur quadratique moyenne (RMSE) de 0.637 et une erreur absolue moyenne (MAE) de 0.01788 et la validation croisée Q^2_{cv} très élevé 0.98033 ce qui confirme la stabilité et la robustesse du modèle.

Concernant la conductivité thermique, les performances restent également très satisfaisantes avec R^2 de 0.967 sur l'ensemble de test, un RMSE de 0.038 et un MAE de 0.01788 et la valeur Q^2_{cv} de 0.98510 témoigne d'une excellente capacité de prédiction et tous le détaille présentée dans le Tableau III.

Tableau III.7. Les métriques statistiques pour la conductivité thermique

Métriques statistiques	Entrainement	Test
R^2	0.997	0.967
RMSE	0.011	0.038
MSE	0.00013	0.00145
MAE	0.00733	0.01788
Q^2_{cv}	0.98510	-----

Tableau III.8. Les métriques statistiques pour la viscosité dynamique

Métriques statistiques	Entrainement	Test
R^2	0.999	0.9921
RMSE	0.228	0.637
MSE	0.052	0.4057
MAE	0.141	0.01788
Q^2_{cv}	0.98033	-----

III.5.2. Comparaison entre les valeurs expérimentales et prédites par XGBR

Les **Figures III.3** et **III.4** représentent respectivement la comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites pour la viscosité dynamique et la conductivité thermique, obtenues à l'aide du modèle XGBR. Ces comparaisons ont été réalisées en utilisant les ensembles de données d'apprentissage et de test (validation interne et externe).

Dans les deux figures, les points correspondant aux données d'apprentissage (noirs) et de test (bleus) sont majoritairement alignés autour de la ligne idéal (ligne pointillée noire), indiquant une très bonne concordance entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites. La courbe de régression linéaire (ligne rouge) est pratiquement superposée à la ligne idéale, traduisant une forte capacité prédictive du modèle pour les deux propriétés thermophysiques de nanofluides.

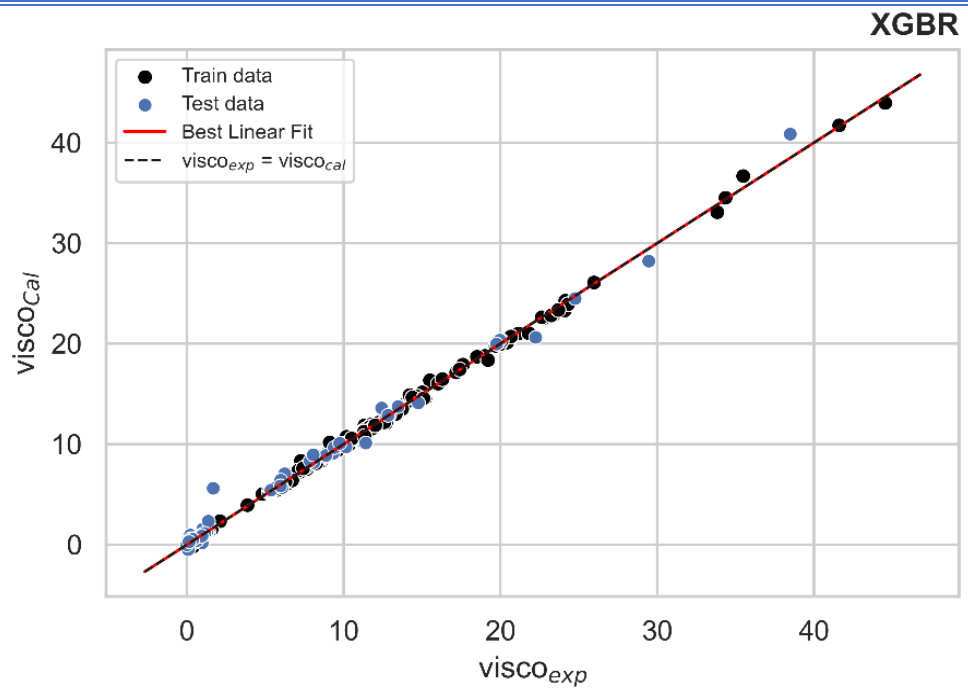


Figure III.3. Graphe de la viscosité expérimentale avec celle prédites par modèle XGBR

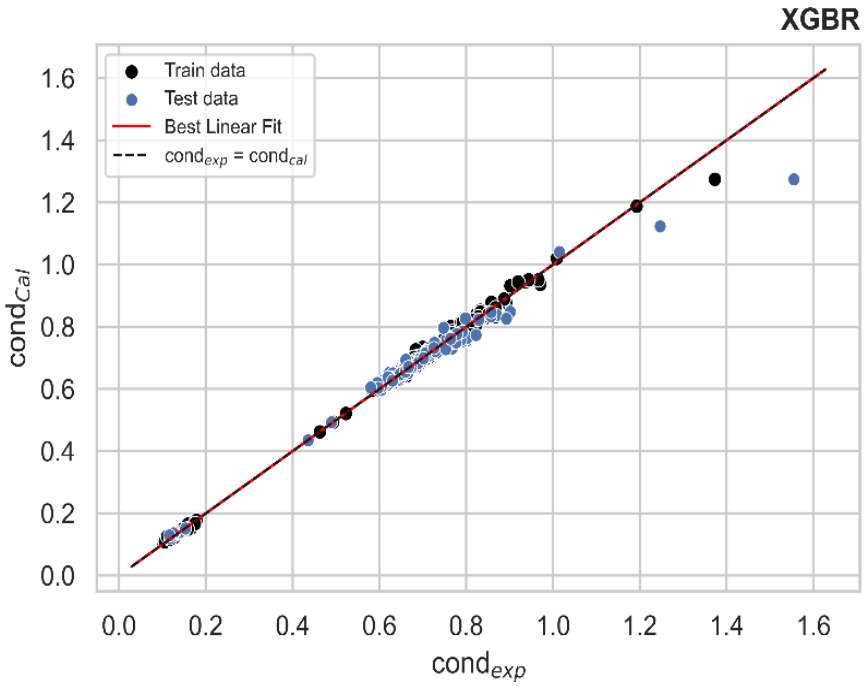


Figure III.4. Graphe de la conductivité expérimentale avec celle prédites par modèle XGBR

III.6. Test externe (base de données cachée)

III.6.1. Résultats de métriques statistiques

Les résultats du test externe (**Tableau III.9**) montrent que le modèle XGBR prédit avec une grande précision la viscosité dynamique (R^2 = 0.992, RMSE = 0.637) et la conductivité thermique (R^2 = 0.989, RMSE = 0.024). Les faibles erreurs (MAE, MSE) confirment sa capacité à généraliser sur des données jamais vues auparavant. Ces performances démontrent la robustesse et la fiabilité du modèle pour la prédiction des propriétés thermophysiques de nanofluides.

Tableau III.9. Les métriques statistiques pour la conductivité thermique et la viscosité issues des tests externes

Viscosité dynamique		**Conductivité thermique**	
Métriques statistiques	**Test externe**	**Métriques statistiques**	**Test externe**
R^2	0.992	R^2	0.989
RMSE	0.637	RMSE	0.024
MSE	0.40	MSE	0.00059
MAE	0.342	MAE	0.0142

III.6.2. La comparaison entre les valeurs expérimentales et prédites par XGBR

Les résultats du test externe confirment la capacité de généralisation du modèle XGBR, avec des prédictions précises pour la viscosité et la conductivité thermique. La forte concordance avec les valeurs expérimentales et la faible dispersion des points autour des droites de régression idéales comme dans les **Figures III.5** et **III.6** démontrent la robustesse du modèle, y compris pour les cas de base cachée. Ces performances valident son efficacité pour des applications pratiques et soulignent l'importance des tests externes dans l'évaluation des modèles prédictifs.

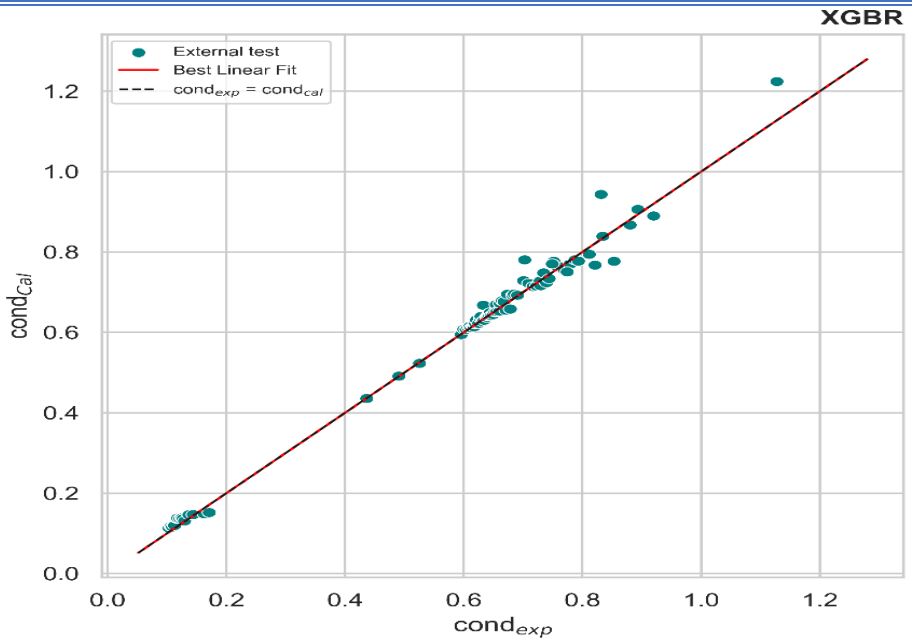


Figure III.5. Prédiction de la viscosité expérimentale par le modèle XGBR : test externe.

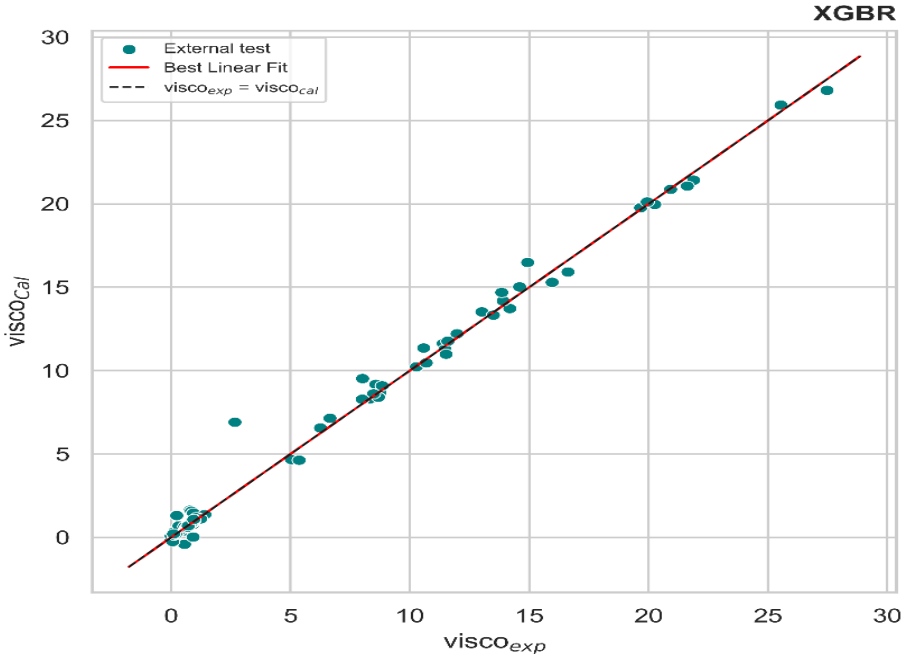


Figure III.6. Prédiction de la conductivité thermique par le modèle XGBR : test externe

III.7. Contribution des variables indépendantes au modèle

III.7.1. Les variables d'entrées les plus influents pour conductivité thermique

Les paramètres sont classés selon leur contribution à la conductivité thermique, allant des plus influents aux moins influents. On observe que certaines variables ont un impact significatif (positif ou négatif), tandis que d'autres ont un effet négligeable.

Les valeurs faibles (en bleu) de la masse molaire du fluide de base (M-FB) augmentent la conductivité thermique, contrairement à ses valeurs élevées (en rouge) qui la diminuent. En revanche, pour d'autres paramètres comme la masse molaire des nanoparticules (M-NP), le fraction volumique (volume ratio), la capacité thermique spécifique des nanoparticules (CP-NP), et le diamètre des nanoparticules (DIAM-NP), ce sont les valeurs élevées (en rouge) qui augmentent la conductivité thermique, tandis que les valeurs faibles (en bleu) la réduisent.

Enfin, les paramètres DENS-NP, CP-FB, et DENS-FB montrent un impact très limité, voire négligeable, sur la conductivité thermique. Parmi tous les paramètres, la masse molaire du fluide de base (M-FB) se révèle être le facteur le plus influent sur la conductivité thermique.

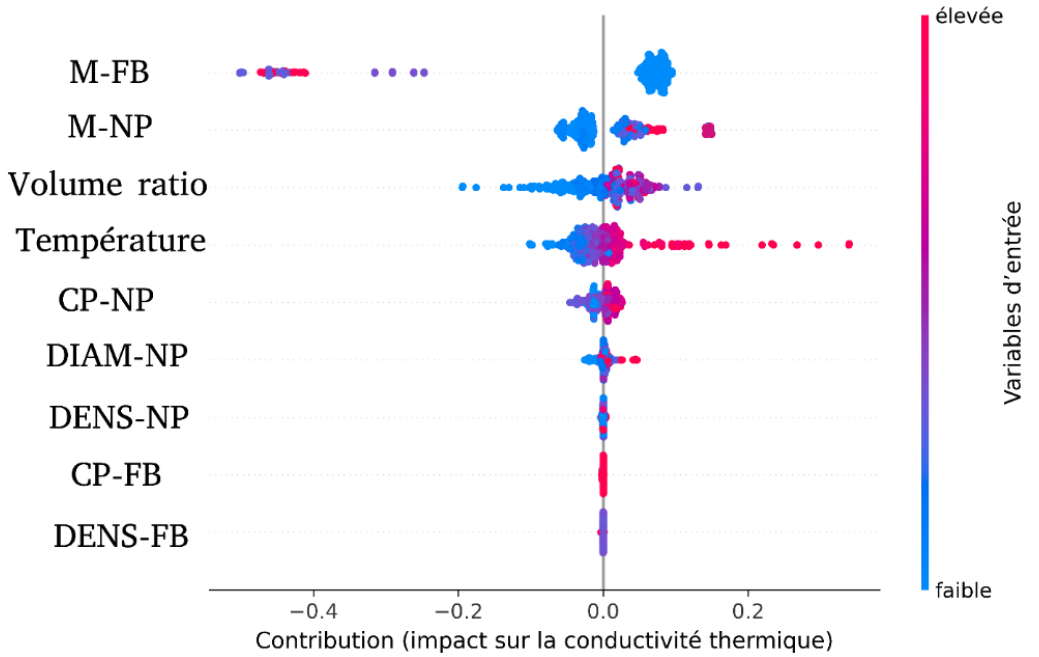


Figure III. 7. Représente la contribution des variables d'entrée à la prédiction de la conductivité thermique des nanofluides.

III.7.2. Les variables d'entrées les plus influents pour la viscosité dynamique

Les paramètres sont classés selon leur contribution à la viscosité, allant des plus influents aux moins influents. On observe que certaines variables ont un impact significatif (positif ou négatif), tandis que d'autres ont un effet négligeable.

Les valeurs faibles (en bleu) de la masse molaire du fluide de base (M-FB) et de la fraction volumique (Volume Ratio) diminuent la viscosité, contrairement à leurs valeurs élevées (en rouge) qui l'augmentent.

En revanche, pour d'autres paramètres comme la température, la densité de nanoparticules (DENS-NP), la densité du fluide de base (DENS-FB) et la masse molaire des nanoparticules (M-NP), ce sont les valeurs élevées (en rouge) qui diminuent la viscosité, tandis que les valeurs faibles (en bleu) l'augmentent.

Enfin, les paramètres diamètre de nanoparticule (DIAM-NP), chaleur spécifique de nanoparticule SHC-NP, chaleur spécifique de fluide de base SHC-FB montrent un impact très limité, voire négligeable, sur la viscosité.

Parmi tous les paramètres, la masse molaire du fluide de base (M-FB) se révèle être le facteur le plus influent.

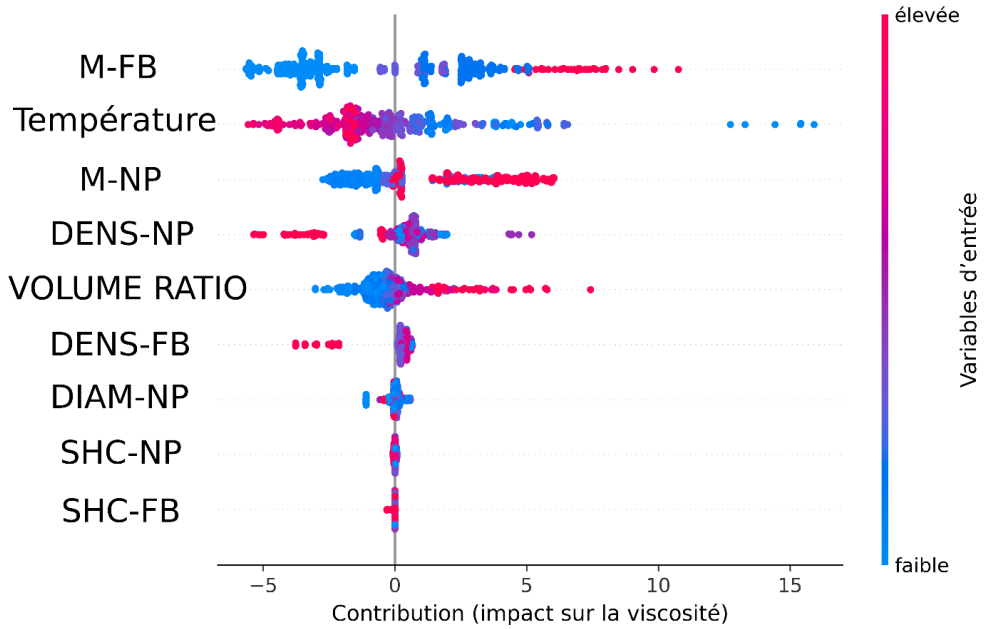


Figure III.8. Représente la contribution des variables d'entrée à la prédiction de la viscosité des nanofluides.

III.8. Comparaisons des XGBR aux approches existantes

III.8.1. Comparaison de la viscosité dynamique

Une prédiction précise de la viscosité, l'une des propriétés thermophysiques les plus importantes des nanofluides, est essentielle dans les applications de fluides caloporteurs dans de nombreuses industries et pour la première fois, XGBoost Régression, une méthode d'intelligence artificielle robuste est utilisée pour prédire avec précision la viscosité des nanofluides.

Le modèle XGBoost Régression (XGBR) développé dans cette étude a démontré une performance prédictive remarquable pour la prédiction de la viscosité des nanofluides. Avec un coefficient de détermination (R^2=0.992, RMSE=0.637, MSE=0.40, MAE=0.342), XGBR surpasse nettement les autres modèles d'intelligence artificielle comparée, le Random Forest malgré son efficace, présente un R^2 légèrement inférieur de 0.989 mais une RMSE significativement meilleure (0.139), mais cette méthode n'a pas été validée sur une base externe ce qui limite sa capacité de généralisation, contrairement à XGBR testé et validé sur des données non vues (base de cachée), le modèle ANN (Artificial Neural Network) affiche un R^2=0.9842, traduisant une bonne capacité de généralisation mais sans surpasser XGBR en termes de précision globale, le modèle LM-ANN

(Linear Model - ANN) atteint un R^2=0.99 avec une MSE extrêmement faible (0.000678), ce qui indique une très bonne précision locale mais avec un jeu de données plus réduit (210 points contre 520 pour XGBR), ce qui limite la comparaison directe.

En ce qui fait que notre modèle plus dominant avec des approches comparer ce que on a utilisé base de données cachée pour tester la généralisation de performance de notre modèle sur des points qui n'jamais vu auparavant (R^2=0.992, RMSE=0.637, MSE=0.40, MAE=0.342)

Tableau III.10. Comparaison des performances des modèles pour la prédiction de la viscosité dynamique des nanofluides

MODEL	PERFORMANCE	NANNOFLUIDS	TRAINING%	TESTING%	POINT DE DONNEE	REFERANCE
Notre modèle (XGBR)	R^2=0.992, $RMSE$=0.637 MSE=0.40, MAE=0.342	Plusieurs types de nanofluides	80	20	520	----
Random forest	R^2=0.989, $RMSE$=0.139	Plusieurs types de nanofluides	75	25	2890	[8]
ANN	$R^2 = 0.9842$	Différents nanofluides à base d'eau	70	30	622	[11]
LM-ANN	R^2 = 0.99, MSE = 0.000678	Al2O3/ Eau	70	30	210	[12]

III.8.2. Comparaison de la conductivité thermique

La prédiction précise de la conductivité thermique des nanofluides est essentielle pour concevoir des systèmes de transfert de chaleur plus performants et pour cette raison, nous avons utilisé le modèle XGBoost Regression (XGBR) pour prédire la conductivité thermique de plusieurs types de nanofluides, et nous avons comparé ses performances à celles des modèles GMDH et LM-ANN.

Le modèle XGBR a obtenu une excellente précision prédictive avec un coefficient de détermination R^2= 0.967, un RMSE de 0.034, une MSE de 0.00145 et une MAE de 0.01788.

À titre de comparaison, le modèle GMDH, appliqué sur une base de données réduite **(**56 points**)** et limité à un seul type de nanofluide (Fe_3O_4/Paraffine**),** affiche une performance légèrement inférieure avec un R^2=0.9600 et un RMSE = 0.0179**.**

De son côté, le LM-ANN, testé sur le système Al_2O_3/Eau avec 210 points de données**,** présente un R^2=0.99 et une MSE = 0.000678, indiquant une bonne précision, mais uniquement pour un type de nanofluide donné.

Ainsi, le modèle XGBR s'impose comme la méthode la plus robuste et généralisable, combinant une précision élevée, une faible erreur, et une capacité d'adaptation à différents nanofluides, ce qui le rend particulièrement adapté à des applications industrielles où la diversité des conditions est courante.

En Ce qui fait que notre modèle plus dominant avec des approches comparer, ce que on a utilisé base de données cachée pour tester la généralisation de performance de notre modèle sur des points qui n'jamais vu auparavant (R^2=0.989, RMSE=0.024, MSE=0.00059, MAE=0.0142)

Tableau III.11. Comparaison des performances des modèles pour la prédiction de la conductivité thermique des nanofluides.

MODEL	PERFORMANCE (THERMAL CONDUCTIVITY)	NANOFLUIDS	TRAINING%	TESTING%	POINT DE DONNEE	REFERANCE
Notre modèle XGBR	R^2=0.967, $RMSE$=0.038 MSE=0.00145, MAE=0.01788	Plusieurs types de nanofluides	80	20	514	---
GMDH	R^2= 0.9600, $RMSE$= 0.0179	Fe_3O_2/Paraffine	---	---	56	[4]
LM-ANN	R^2 = 0.99, MSE = 0.000678	Al2O3/ Eau	70	30	210	[12]

III.9. Conclusion

Dans ce chapitre, un modèle de régression par gradient boosting extrême (XGBR) a été développé afin de prédire deux propriétés thermophysiques majeures des nanofluides : la conductivité thermique et la viscosité dynamique. En s'appuyant sur une base de données expérimentales riche et variée, extraite de 16 articule scientifiques couvrant 784 points de mesure,

le processus de modélisation a été conduit selon une méthodologie rigoureuse intégrant la sélection des variables, la validation croisée à 5 fold, et l'optimisation des hyperparamètres par Grid Search.

Les résultats ont démontré une excellente performance prédictive du modèle, en particulier, les coefficients de détermination (R^2) élevés, accompagnés de faibles valeurs des erreurs (RMSE, MAE, MSE), ont confirmé la précision et la robustesse du modèle. La très bonne concordance entre les valeurs expérimentales et les prédictions, illustrée par les graphiques de comparaison, renforce la fiabilité de l'approche adoptée.

L'analyse de la contribution des variables d'entrée a également permis de mieux comprendre l'influence relative de chaque paramètre sur les propriétés thermophysiques étudiées.

Enfin, une comparaison avec les approches existantes basées sur d'autres algorithmes de machine Learning (GMDH, LM-ANN, Random Forest, ANN) a été réalisée. Les résultats ont montré que le modèle XGBR surpasse systématiquement ces méthodes en termes de précision et de stabilité. Grâce à sa capacité à gérer la non-linéarité, à éviter le surapprentissage via la régularisation, et à optimiser automatiquement les interactions complexes entre variables, XGBR constitue une approche de pointe et fiable pour la prédiction des propriétés thermophysiques des nanofluides.

Conclusions Générales

Le travail entamé dans ce mémoire se décline en deux parties distinctes :

La première partie a été consacrée à la constitution d'une base de données riche et variée, couvrant un ensemble de 520 données expérimentales sur la viscosité et 514 sur la conductivité, extraites de la littérature scientifique portant sur divers types de nanofluides mono-composants. Les variables considérées incluent des paramètres thermophysiques des nanoparticules (masse molaire, diamètre, chaleur spécifique, fraction volumique), du fluide de base (masse molaire, densité, capacité calorifique) ainsi que la température du système. Un nettoyage rigoureux des données a été réalisé pour éliminer la redondance et la multi-colinéarité entre les variables. Cette étape a permis de poser les fondations d'une modélisation robuste et généralisable.

Dans la deuxième partie des modèles prédictifs ont été développés à l'aide de l'algorithme XGBoost optimisés par Grid Search et évalués à l'aide d'une validation croisée 5-fold ainsi que d'un test externe sur une base de données cachée. Les résultats obtenus révèlent des performances remarquables : des valeurs de R^2 de 0.992 pour la viscosité et 0.989 pour la conductivité thermique, accompagnées de très faibles erreurs de prédiction (RMSE, MAE, MSE). Ces performances ont été confirmées par une analyse fine de la concordance entre les valeurs prédites et expérimentales, aussi bien en apprentissage qu'en validation. De plus, l'étude de l'importance des variables d'entrée a permis d'identifier les facteurs ayant le plus d'influence sur chacune des propriétés cibles.

Une comparaison approfondie avec d'autres approches de la littérature (Random Forest, ANN, LM-ANN, GMDH) a permis de mettre en évidence la supériorité du modèle XGBR en termes de précision, de robustesse et de capacité à généraliser à de nouvelles données. Contrairement aux méthodes empiriques ou aux corrélations spécifiques à un type de nanofluide, notre modèle offre une applicabilité élargie et s'adapte à différents systèmes expérimentaux.

Les principaux résultats qu'on peut ressortir de cette mémoire sont les suivants :

- L'algorithme XGBR permet une prédiction très précise des propriétés thermophysiques des nanofluides, en s'appuyant exclusivement sur des données expérimentales disponibles dans la littérature
- Le compromis entre amélioration de la conductivité thermique et augmentation de la viscosité reste un facteur critique pour l'optimisation des nanofluides dans des applications pratiques

- La validation croisée et les tests externes montrent une excellente concordance entre les valeurs simulées et les données expérimentales avec des métriques statistiques très élevées ($R^2 > 0.98$) et des erreurs absolues moyennes très faibles.
- La masse molaire du fluide de base, masse molaire du nanoparticules, température et la fraction volumique étaient les facteurs les plus influents sur les deux propriétés étudiées.

IV. Références

Chapitre I

[1] S. U. Choi et J. A. Eastman, « Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles », Argonne National Lab.(ANL), Argonne, IL (United States), 1995. Consulté le: 22 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.osti.gov/biblio/196525

[2] S. Halelfadl, « Caractérisation des propriétés thermo-physiques et d'échanges de chaleur des nanofluides à base de nanotubes de carbone », phdthesis, INSA de Rennes, 2014. Consulté le: 7 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://theses.hal.science/tel-01127363

[3] G. Dine, « Nanotechnologie et cancer Colloque international organisé par l'Institut National du Cancer: Le 5 octobre 2009 à Paris », *Bio Trib. Mag.*, vol. 33, n° 1, p. 6-17, déc. 2009, doi: 10.1007/s11834-009-0130-5.

[4] O. Zeyons, « Etudes des interactions physicochimiques et biologiques entre des nanoparticules manufacturées et des bactéries de l'environnement. », PhD Thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2008. Consulté le: 22 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://theses.hal.science/tel-00331931/

[5] « Les fullerènes sont-ils dangereux pour l'environnement ? » Consulté le: 7 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.futura-sciences.com/sciences/actualites/physique-fullerenes-sont-ils-dangereux-environnement-16752/

[6] W. Grine, « Modèles prédictifs de la conductivité thermique des nanoparticules pour simulation des nanofluides », Thesis, 2021. Consulté le: 7 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://dspace.univ-guelma.dz/jspui/handle/123456789/11069

[7] S. Hamze, « Graphene based nanofluids: development, characterization and application for heat and energy systems », PhD Thesis, Université de Rennes, 2020. Consulté le: 22 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://theses.hal.science/tel-03033677/

[8] A. Tahiri, « Contribution à l'étude des transferts thermo convectifs d'un fluide non-Newtonien en écoulement dans un conduit », PhD Thesis, Université M'hamed Bougara de Boumerdès, Département de Méc, 2018. Consulté le: 22 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.ccdz.cerist.dz/admin/notice.php?id=000000000000000862432000621

[9] J. Tielke, M. Maas, M. Castillo, K. Rezwan, et M. Avila, « Statistical analysis of thermal conductivity experimentally measured in water-based nanofluids », *Proc. R. Soc. Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 477, nº 2250, p. 20210222, juin 2021, doi: 10.1098/rspa.2021.0222.

[10] C.-Y. Hsu, G. Satpathy, F. I. Al Kamzari, E. Manikandan, Y. Ajaj, et A. S. Al Kindi, « Thermophysical Characteristics of Nanofluids: A Review », in *Modern Nanotechnology: Volume 2: Green Synthesis, Sustainable Energy and Impacts*, J. A. Malik et M. J. Sadiq Mohamed, Éd., Cham: Springer Nature Switzerland, 2023, p. 337-362. doi: 10.1007/978-3-031-31104-8_15.

[11] A. Jan, B. Mir, et A. A. Mir, « Hybrid Nanofluids: An Overview of their Synthesis and Thermophysical properties », 13 mai 2019, *arXiv*: arXiv:1905.04968. doi: 10.48550/arXiv.1905.04968.

[12] W. Grine, « Modèles prédictifs de la conductivité thermique des nanoparticules pour simulation des nanofluides », Thesis, 2021. Consulté le: 12 avril 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://dspace.univ-guelma.dz/jspui/handle/123456789/11069

[13] A. Baraka et K. Mansouri, « Simulation numérique d'un nano-fluide en jet laminaire sur une paroi chauffée », Thesis, 2020. Consulté le: 11 avril 2025. [En ligne]. Disponible sur: http://192.168.100.2:8080//handle/123456789/8465

[14] S.-C. Tzeng, C.-W. Lin, et K. D. Huang, « Heat transfer enhancement of nanofluids in rotary blade coupling of four-wheel-drive vehicles », *Acta Mech.*, vol. 179, nº 1-2, p. 11-23, sept. 2005, doi: 10.1007/s00707-005-0248-9.

[15] H. B. Ma *et al.*, « Effect of nanofluid on the heat transport capability in an oscillating heat pipe », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 88, nº 14, p. 143116, avr. 2006, doi: 10.1063/1.2192971.

[16] A. Jordan, R. Scholz, P. Wust, H. Fähling, et Roland Felix, « Magnetic fluid hyperthermia (MFH): Cancer treatment with AC magnetic field induced excitation of biocompatible superparamagnetic nanoparticles », *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 201, nº 1, p. 413-419, juill. 1999, doi: 10.1016/S0304-8853(99)00088-8.

[17] M. Bekhti et R. Saim, « Revue sur les nanofluides et leurs applications dans le domaine de l'énergie solaire », *J. Renew. Energ.*, vol. 24, nº 1, p. 152-176, 2021.

[18] M. Chaour, S. Boulkroune, B. Hamadi, T. Achour, et D. Boucherma, « Étude numérique du transfert de chaleur des nanofluides dans un canal plan application au panneau solaire thermique », *J. Phys. Chem. Res.*, vol. 2, nº 1, p. 53-60, 2023.

[19] M. K. A. ZOHUD, « Amélioration des caractéristiques thermiques des réfrigérants par l'addition de nanoparticles », PhD Thesis, Université Mohamed Boudiaf des Sciences et de la Technologie-Mohamed Boudiaf …. Consulté le: 23 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.pnst.cerist.dz/detail.php?id=903255

[20] J. C. Maxwell, *A Treatise on Electricity and Magnetism*. Clarendon Press, 1873.

[21] S. Ferrouillat, A. Bontemps, J.-P. Ribeiro, J.-A. Gruss, et O. Soriano, « Hydraulic and heat transfer study of SiO2/water nanofluids in horizontal tubes with imposed wall temperature boundary conditions », *Int. J. Heat Fluid Flow*, vol. 32, nº 2, p. 424-439, avr. 2011, doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2011.01.003.

[22] S. Halelfadl, « Caractérisation des propriétés thermo-physiques et d'échanges de chaleur des nanofluides à base de nanotubes de carbone », PhD Thesis, INSA de Rennes, 2014. Consulté le: 23 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://theses.hal.science/tel-01127363/

[23] B. C. Pak et Y. I. Cho, « HYDRODYNAMIC AND HEAT TRANSFER STUDY OF DISPERSED FLUIDS WITH SUBMICRON METALLIC OXIDE PARTICLES », *Exp. Heat Transf.*, vol. 11, nº 2, p. 151-170, avr. 1998, doi: 10.1080/08916159808946559.

[24] Y. Xuan et W. Roetzel, « Conceptions for heat transfer correlation of nanofluids », *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 43, nº 19, p. 3701-3707, 2000.

[25] E. J. W. Verwey, « Theory of the Stability of Lyophobic Colloids. », *J. Phys. Colloid Chem.*, vol. 51, nº 3, p. 631-636, mars 1947, doi: 10.1021/j150453a001.

[26] A. Ghadimi, R. Saidur, et H. S. C. Metselaar, « A review of nanofluid stability properties and characterization in stationary conditions », *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 54, nº 17-18, p. 4051-4068, 2011.

[27] I. Popa, G. Gillies, G. Papastavrou, et M. Borkovec, « Attractive and Repulsive Electrostatic Forces between Positively Charged Latex Particles in the Presence of Anionic Linear Polyelectrolytes », *J. Phys. Chem. B*, vol. 114, nº 9, p. 3170-3177, mars 2010, doi: 10.1021/jp911482a.

[28] A. Ghadimi, R. Saidur, et H. S. C. Metselaar, « A review of nanofluid stability properties and characterization in stationary conditions », *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 54, nº 17-18, p. 4051-4068, 2011.

[29] J. Epp, « 4 - X-ray diffraction (XRD) techniques for materials characterization », in *Materials Characterization Using Nondestructive Evaluation (NDE) Methods*, G. Hübschen, I. Altpeter, R. Tschuncky, et H.-G. Herrmann, Éd., Woodhead Publishing, 2016, p. 81-124. doi: 10.1016/B978-0-08-100040-3.00004-3.

[30] E. Natarajan et R. Sathish, « Role of nanofluids in solar water heater », *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, juill. 2009, doi: 10.1007/s00170-008-1876-8.

[31] « Critical Issues in Nanofluids Preparation, Characterization and T...: Ingenta Connect ». Consulté le: 23 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.ingentaconnect.com/content/ben/cnano/2009/00000005/00000001/art00013

Chapitre II

[1] « Introduction to Modeling and Simulation William A. Menner - Recherche Google ». Consulté le: 7 mai 2025.

[2] « Comparative Analysis of Machine Learning Models for Nanofluids Viscosity Assessment ». [En ligne]. Disponible sur: https://www.mdpi.com/2079-4991/10/9/1767

[3] S. K. Actinvision, « L'apprentissage automatique, ou comment les ordinateurs apprennent à partir des données », Actualités : analyse de données, Business Intelligence, Data Science, Big Data. Consulté le: 7 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.decideo.fr/L-apprentissage-automatique-ou-comment-les-ordinateurs-apprennent-a-partir-des-donnees_a8338.html

[4] « 91- Développement d'un modèle de machine learning (apprentissage automatique).pdf ». Consulté le: 6 avril 2025.

[5] G. Elias, « Les différents types d'apprentissage automatique », Skim AI. Consulté le: 6 avril 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://skimai.com/fr/les-differents-types-dapprentissage-automatique/

[6] « Les principaux algorithmes de régression pour l'apprentissage supervisé | Linedata ». Consulté le: 7 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://fr.linedata.com/les-principaux-algorithmes-de-regression-pour-lapprentissage-supervise

[7] « Principe-apprentissage-par-renforcement.jpg (571×296) ». Consulté le: 6 avril 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://penseeartificielle.fr/wp-content/uploads/2019/06/Principe-apprentissage-par-renforcement.jpg

[8] « Critical Issues in Nanofluids Preparation, Characterization and T...: Ingenta Connect ». Consulté le: 23 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.ingentaconnect.com/content/ben/cnano/2009/00000005/00000001/art00013

[9] « ML | XGBoost (eXtreme Gradient Boosting) », GeeksforGeeks. Consulté le: 6 avril 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.geeksforgeeks.org/ml-xgboost-extreme-gradient-boosting/

[10] « XGBoost: un guide complet pour affiner et optimiser votre modèle ». Consulté le: 7 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://ichi.pro/fr/xgboost-un-guide-complet-pour-affiner-et-optimiser-votre-modele-394174478884833

[11] Laura, « 6 étapes pour construire un modèle de Machine Learning », Freelance Engineering. Consulté le: 6 avril 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.freelance-engineering.fr/blog/construire-modele-machine-learning/

Chapitre III

[1] « R-carré ou R2 – Définition ». Consulté le: 1 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.cashbee.fr/lexique/r-carre-ou-r2

[2] « Oracle® Fusion Cloud EPM Utilisation de Planning ». Consulté le: 5 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://docs.oracle.com/cloud/help/fr/pbcs_common/PFUSU/insights_metrics_RMSE.htm#PFUSU-GUID-FD9381A1-81E1-4F6D-8EC4-82A6CE2A6E74

[3] « What is Mean Absolute Error? Formula & Significance », Deepchecks. Consulté le: 5 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://www.deepchecks.com/glossary/mean-absolute-error/

[4] R. Kassel, « Qu'est ce que l'erreur quadratique moyenne ? », DataScientest. Consulté le: 1 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: https://datascientest.com/erreur-quadratique-moyenne

[5] M. N. Triba *et al.*, « PLS/OPLS models in metabolomics: the impact of permutation of dataset rows on the K-fold cross-validation quality parameters », *Mol. Biosyst.*, vol. 11, n° 1, p. 13-19, janv. 2015, doi: 10.1039/c4mb00414k.