UNIVERSITE YAHIA FARES DE MEDEA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE

Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de Master

En Chimie

Spécialité : Chimie Pharmaceutique

Par :

ABDI Dalel

Thème :

MODELISATION DU COMPORTEMENT THERMOPHYSIQUE DES NANOFLUIDES A DES FINS PHARMACEUTIQUES

Soutenu publiquement le : 23/06/2026, Devant le jury composé de :

Dr. BOUAZZA Fatima	MCB.	Université de Médéa	Présidente
Dr. TURKMAN Meriem	MCA.	Université de Médéa	Examinatrice
Dr. EULDJI Amel	MCB.	Université de Médéa	Encadrant

Année Universitaire 2025/2026

ملخص/RESUME/ABSTRACT

نمذجة السلوك الحراري الفيزيائي للسوائل النانوية لأغراض الصيدلانية

ملخص

تتناول هذه الأطروحة نمذجة الديناميكا الحرارية المائية لسائل نانوي ثلاثي الألومنيوم (AA7072 و AA7075) وأكسيد الزركونيوم (ZrO2) التركيب يتدفق في وسط مسامي، بهدف تطبيقات نقل الحرارة في الطب الحيوي والطاقة. تم حل نموذج رياضي لا بُعدي عدديًا لإنشاء قاعدة بيانات تضم 500 حالة، مع تغييرسنة معايير تحكم (عدد رينولدز، المسامية، الإشعاع الحراري، السحب/الحقن، ومعدل الإجهاد، سرعة المائع غير البعدية)، واستخراج الكميات المحلية للجدار: درجة الحرارة، معامل الاحتكاك، ورقم نوسلت. بعد ذلك، تم تدريب شبكة عصبية اصطناعية متعددة الطبقات ونموذج انحدار SVM على قاعدة البيانات هذه، مع تطبيع البيانات وتحسين المعلمات الفائقة.

يُظهر التقييم أن كلا نهجي الحوسبة المرنة يُعيدان إنتاج استجابات النموذج العددي بدقة، حيث تتجاوز معاملات التحديد R^2 عادةً 0.95 لجميع المخرجات، وتتراوح معدلات الخطأ المتوسطة (MAE) بين 10^{-3} و10^{-2} اعتمادًا على الكمية المدروسة. مع ذلك، تُظهر الشبكة العصبية أفضل أداء إجمالي، حيث تتجاوز قيم R^2 0.98، وقيم MSE أقل باستمرار من قيم SVM، لا سيما بالنسبة لرقم نوسلت ومعامل الاحتكاك السطحي. تؤكد هذه النتائج إمكانات تقنيات الذكاء الاصطناعي في النمذجة السريعة للسوائل النانوية ثلاثية هجينة في التكوينات المسامية المعقدة، وتجعل الشبكة العصبية أداةً مفضلةً للتنبؤ بالخصائص الحرارية والهيدروليكية وتحسينها في المجالات الطبية الحيوية والطاقة.

الكلمات المفتاحية: سائل نانوي ثلاثي هجين، وسط مسامي، انتقال الحرارة، شبكة عصبية، SVM، الحوسبة المرنة، نوسلت المحلي، الاحتكاك السطحي، النمذجة العددية.

MODELISATION DU COMPORTEMENT THERMOPHYSIQUES DES NANOFLUIDES A DES FINS PHARMACEUTIQUES

RESUME

Ce mémoire traite de la modélisation thermo-hydrodynamique d'un nanofluide trihybride(d'aluminium (AA7072 et AA7075) et l'oxyde de zirconium (ZrO2)) s'écoulant dans un milieu poreux, en vue d'applications de transfert de chaleur en biomédical et en énergétique. Un modèle mathématique adimensionné est résolu numériquement pour construire une base de 500 cas, en faisant varier six paramètres de contrôle (Reynolds, porosité, rayonnement thermique, succion/injection et taux de déformation, vitesse adimensionnelle du fluide), et en extrayant les grandeurs locales de paroi : température, coefficient de frottement et nombre de Nusselt. Un réseau de neurones artificiels multicouche et un modèle SVM en régression sont ensuite entraînés sur cette base, avec une normalisation des données et une optimisation des hyperparamètres.

L'évaluation montre que les deux approches de soft computing reproduisent fidèlement les réponses du modèle numérique, avec des coefficients de détermination R^2 typiquement supérieurs à 0,95 pour toutes les sorties, et des erreurs moyennes (MAE) de

l'ordre de 10^{-3} à 10^{-2} selon la grandeur considérée. Le réseau de neurones présente toutefois les meilleures performances globales, avec des R^2 pouvant dépasser 0,98 et des valeurs de MSE systématiquement inférieures à celles du SVM, en particulier pour le nombre de Nusselt et le coefficient de frottement pariétal. Ces résultats confirment l'intérêt des techniques d'intelligence artificielle pour la méta-modélisation rapide des nanofluides trihybrides dans des configurations poreuses complexes, et positionnent le réseau de neurones comme outil privilégié pour la prédiction et l'optimisation thermo-hydrauliques en contexte biomédical et énergétique.

Mots-clés : Nanofluide trihybride, Milieu poreux, Transfert de chaleur, Réseau de neurones, SVM, Soft computing, Nusselt local, Skin friction, Modélisation numérique.

MODELING THE THERMOPHYSICAL BEHAVIOR OF NANOFLUIDS FOR PHARMACEUTICAL PURPOSES

ABSTRACT

This thesis addresses the thermohydrodynamic modeling of a trihybrid nanofluid flowing in a porous medium, with a view to heat transfer applications in biomedicine and energy. A dimensionless mathematical model is numerically solved to build a database of 500 cases, varying five control parameters (Reynolds, porosity, thermal radiation, suction/injection, and strain rate), and extracting the local wall quantities: reduced velocity, temperature, friction coefficient, and Nusselt number. A multilayer artificial neural network and a regression SVM model are then trained on this database, with data normalization and hyperparameter optimization.

The evaluation shows that both soft computing approaches faithfully reproduce the responses of the numerical model, with coefficients of determination R^2 typically greater than 0.95 for all outputs, and mean error rates (MAEs) on the order of 10^{-3} to 10^{-2} depending on the quantity considered. However, the neural network exhibits the best overall performance, with R^2 values exceeding 0.98 and MSE values consistently lower than those of the SVM, particularly for the Nusselt number and the skin friction coefficient. These results confirm the potential of artificial intelligence techniques for the rapid meta-modeling of trihybrid nanofluids in complex porous configurations, and position the neural network as a preferred tool for thermo-hydraulic prediction and optimization in biomedical and energy contexts.

Keywords: Trihybrid nanofluid, Porous medium, Heat transfer, Neural network, SVM, Soft computing, Local Nusselt, Skin friction, Numerical modeling.

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier, le bon DIEU, pour m'avoir donné le courage et la détermination nécessaire pour finaliser ce travail de recherche qui compte tant pour mon avenir intellectuel et professionnel.

Je tiens tout particulièrement à adresser mes vifs remerciements à ma directrice de mémoire, Madame EULDJI Amel, pour m'avoir proposé ce sujet de recherche et surtout pour ses orientations et remarques fructueuses. Qu'elle trouve ici l'expression de mon profond respect.

Je suis très sensible à l'honneur que m'a fait Madame BOUAZZA Fatiha, pour l'intérêt qu'elle a accordé à ce travail en acceptant de présider le jury.

Mes remerciements s'adressent également à Madame TURKMAN Meriem, pour m'avoir honoré de sa présence en acceptant de juger ce travail. Ses critiques et suggestions seront certainement constructives.

Et à la fin, je remercie toutes les personnes qui m'ont soutenu, de près ou de loin, tout au long de mon cursus universitaire.

DEDICACES

Je dédie ce mémoire de Master en Chimie Pharmaceutique :

À ma très chère mère (Yamina Aouf), symbole de tendresse, de patience et de dévouement. Merci pour ton amour inconditionnel, tes sacrifices et tes encouragements qui m'ont accompagnée tout au long de mon parcours.

À mon très cher père (Ali Abdi), pour son soutien constant, ses précieux conseils et sa confiance en moi. Que ce travail soit le témoignage de ma profonde reconnaissance.

À mon frère et à ma sœur (Badri Abdi, Fella Abdi), pour leur affection, leur soutien moral et leur présence dans les moments les plus importants de ma vie.

À mes amis (Romaysa, Ferial, Hadjar, Asmaa ,Kadar, Abdo, Chahra, Salma, Sidali, Houda, Maroua, Walid), qui ont partagé avec moi les joies et les difficultés de ce parcours universitaire et qui m'ont toujours encouragée à aller de l'avant.

À mon professeur encadreur (Amel Euldji), pour son accompagnement, sa disponibilité, ses conseils avisés et son aide précieuse dans la réalisation de ce mémoire.

À toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de ce travail.

Je leur exprime ma sincère gratitude et mon profond respect.

GLOSSAIRE

LISTE DES ABREVIATIONS	
Cfx	Coefficient de frottement pariétal
f′	Vitesse adimensionnelle
MAE	Erreur moyenne absolue
MSE	Erreur quadratique moyenne
NOG	Oxyde de graphène
Nux	Nombre de Nusselt
ODA	Octadécylamine
PE	Polyéthylène
pH	potentiel Hydrogène
PVP	Polyvinylpyrrolidone
R^2	Coefficient de détermination
Rd	Paramètre de rayonnement thermique
Re	Nombre de Reynolds
RMSE	Root Mean Square Error
RNA	Réseaux de neurones artificiels
S	Paramètre d'aspiration / injection
SANSS	Système de Synthèse de Nanoparticules par Arc Submergé
SVM	Machine a vecteurs de support
SVR	SVM pour la régression
β	Paramètre de porosité
θ	Température adimensionnelle
Ω	Taux de déformation

GLOSSAIRE

CFD	Dynamique des fluides numérique
DAS / SAR	Débit d'Absorption Spécifique
DOX	Doxorubicine (médicament anticancéreux)
EMA	Agence européenne des médicaments
ERO / ROS	Espèces Réactives de l'Oxygène
FDA	Agence américaine des produits alimentaires et médicamenteux
GFP	Protéine fluorescente verte
IRM / MRI	Imagerie par Résonance Magnétique
MEB / SEM	Microscopie Électronique à Balayage
MLP	Perceptron multicouche (type de RNA)
NTC / CNT	Nanotubes de carbone
PEG	Polyéthylène glycol
PLGA	Copolymère d'acide lactique et glycolique
RBF	Fonction de base radiale (noyau SVM)
ReLU	Unité linéaire rectifiée (fonction d'activation)
SPIO	Nanoparticules d'oxyde de fer superparamagnétiques
TEP / PET	Tomographie par Émission de Positons

SOMMAIRE

Abstract/Résumés/ملخص	
Remerciements	
Dédicaces	
Glossaire	
Sommaire	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Liste des schémas	
Liste des annexes	
INTRODUCTION GENERALE	
1. Contexte de l'étude	a
2. Objectifs du mémoire et organisation du manuscrit	c
PARTIE 1 : ETAT DE L'ART	
CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES NANOFLUIDES	
1. Introduction	1
2. Particularité des nanoparticules	2
2.1. Nanoparticules et les fluides porteurs	2
2.2. La taille des particules	2
2.3. La forme des particules	3
3. Méthodes de préparation des nanofluides	3
3.1. Méthode en deux étapes	3
3.2. Méthode en une étape	4
3.3. D'autres nouvelles méthodes	5
4. Domaines d'applications des nanofluides	6

SOMMAIRE

4.1. Refroidissement des systèmes thermiques	6
4.2. Refroidissement des systèmes électroniques	7
4.3. Refroidissement des systèmes militaires	7
4.4. Refroidissement des systèmes spatiaux	7
4.5. Refroidissement des systèmes nucléaires	7
4.6. La biomédecine	8
4.7. D'autres applications	8
5. Caractéristiques des nanofluides	8
5.1. La Masse volumique	8
5.2. La chaleur spécifique	9
5.3. La conductivité thermique des nanofluides	10
5.3.1. Méthodes de mesure de la conductivité thermique	10
5.3.2. Mécanismes d'amélioration de la conductivité thermique	11
5.3.2.1. Mouvement brownien de nanoparticules	11
5.3.2.2. Le regroupement des nanoparticules	12
5.3.2.3. La Superposition de liquide autour des	13
5.3.2.4. Transport balistique de phonon dans des nanoparticules	14
5.3.2.5. Le Rayonnement Près du champ	14
5.3.3. Effets de certains paramètres sur la conductivité thermique des nanofluides	15
5.3.3.1. La Fraction volumique des particules	15
5.3.3.2. La matière particulaire	16
5.3.3.3. Le fluide de base	17
5.3.3.4. La Taille des particules	17
5.3.3.5. La forme des particules	18
5.3.3.6. La température	19

SOMMAIRE

5.3.3.7. Le regroupement	19
5.3.3.8. La Valeur de pH	20
6. Conclusion	21
CHAPITRE II : IMPACT DES NANOFLUIDES DANS LE DOMAINE PHARMACEUTIQUE	
1. Introduction	22
2. Utilisation des nanofluides dans le domaine biomédical	23
3. Applications des nanofluides dans l'administration des médicaments	24
3.1. Administration magnétique des médicaments	25
3.2. Systèmes bio-microélectromécaniques et microfluidiques	26
3.3. Nanocristaux et nanoparticules	27
4. Applications thérapeutiques des nanofluides	28
4.1. Méthode d'hyperthermie	28
4.2. Hyperthermie par fluide magnétique	29
4.3. Nano-cryochirurgie	30
4.4. Nanofluides magnétiques pour le traitement de l'anémie	31
4.5. Ablation par radiofréquence	32
5. Applications en diagnostic	32
6. Applications antibactériennes	34
6.1. Nanofluides métalliques et d'oxydes métalliques	34
6.2. Nanoparticules composites	36
7. Autres applications des nanofluides	37
7.1. Nanofluides dans les pansements	37
7.2. Cryoconservation	38
8. Conclusion	39
REFERENCES	41

SOMMAIRE

PARTIE 2 : PARTIE MODELISATION	
Introduction	51
CHAPITRE III. MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMIQUE ET HYDRODYNAMIQUE	
1. Introduction	53
2. Contexte de l'étude	53
3. Présentation de la base de données	55
3.1. Variables d'entrée	55
3.1.1 Re – Nombre de Reynolds	55
3.1.2. β – Paramètre de porosité	56
3.1.3. Rd – Paramètre de rayonnement thermique	56
3.1.4. S – Paramètre d'aspiration / injection	56
3.1.5. Ω – Taux de déformation	56
3.1.6. f' – Vitesse adimensionnelle	56
3.2 Variables de sortie	56
3.2.1. θ – Température adimensionnelle	57
3.2.2. C_{fx} – Coefficient de frottement pariétal	57
3.2.3. Nu_x – Nombre de Nusselt	57
4. Structure de la base de données	58
5. Prétraitement des données	58
5.1. Importation de la base de données	58
5.2. Analyse exploratoire des données	59
5.3. Description statistique des données	59
5.4. Description statistique des données	63

SOMMAIRE

5.5. Vérification des valeurs manquantes/aberrantes	67
5.5. Normalisation des données	68
5.6. Division de la base de données	70
5.7. Préparation des données pour les modèles SVM et RNA	70
6. Modélisation par les réseaux de neurones artificielles RNA	70
6.1. Préparation de l'apprentissage	70
6.2. Évaluation des performances du modèle RNA	73
6.3. Analyse résiduelle	76
7. Modélisation par les Machines à Vecteurs de Support (SVM)	79
7.1. Paramètres de la modélisation par SVM	80
7.1.1. Paramètre C et marge souple	80
7.1.2. Noyaux et non-linéarité	80
7.1.3. SVM pour la régression (SVR)	80
7.2. Étapes principales du schéma SVM	80
7.2.1. Espace d'entrée (feature space initial)	81
7.2.2. Transformation (optionnelle) par noyau	81
7.2.3. Recherche de l'hyperplan optimal	81
7.2.4. Marge et vecteurs de support	81
7.3. Évaluation des performances du modèle SVR	81
7.4. Analyse résiduelle	84
8. Conclusion	87
BIBLIOGRAPHIE DE LA PARTIE II	90
CONCLUSION GENERALE	
Conclusions de la thèse	91

LISTE DES FIGURES

PARTIE 1 : ETAT DE L'ART		
CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES NANOFLUIDES		
1	La procédure en deux étapes pour la préparation des nanofluides.	4
2	Représentation schématique du processus de transfert de phase	5
3	Illustration schématique représentant le phénomène de groupement	12
4	Illustration schématique représentant la superposition de liquide autour des nanoparticules	13
CHAPITRE II : IMPACT DES NANOFLUIDES DANS LE DOMAINE PHARMACEUTIQUE		
1	Système de nano-administration à huit micro-canaux	27
2	Représentation de la réponse des microsphères creuses magnétiques PLGA à la modification du champ magnétique	30
3	Effet de contraste magnétique des nanoparticules magnétiques dans l'eau ; le champ magnétique induit un assombrissement de l'image de résonance magnétique	33
4	Résultats du traitement par nanofluide trimétallique à base d'Au/Pt/Ag pour une réponse antibactérienne améliorée	37
5	Les micrographies de fluorescence montrent une forte coloration de la glycoprotéine de surface SSEA-1	38
PARTIE 2 : PARTIE MODELISATION		
CHAPITRE III. MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMIQUE ET HYDRODYNAMIQUE		
1	Modèle d'écoulement de nanofluide trihybride à base de sang.	54
2	Modèle d'écoulement de nanofluide trihybride à base de sang.	61
3	Histogramme de la distribution statistique de C_{fx}	62
4	Histogramme de la distribution statistique de Nu_x	62
5	Heatmap montrant les corrélations entre variables de notre base de données plus le nombre de Reynolds augmente, plus la vitesse adimensionnelle f' augmente	64
6	Corrélations entre les variables de sortie	66

LISTE DES FIGURES

7	Boxplots montrant les valeurs aberrantes de notre base de données	67
8	Visualisation de la normalisation des entrées (avant/après)	69
9	Schéma montrant l'architecture des réseaux de neurones artificielles	71
10	Courbe d'apprentissage du RNA	74
11	Diagramme réel-prévu pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x du modèle RNA	75
12	Résidus du modèle RNA en fonction des valeurs prédites pour θ, C_{fx} et Nu_x	76
13	Distributions des résidus du modèle RNA pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x	77
14	Diagrammes Q–Q des résidus du modèle RNA pour les sorties θ, C_{fx} et Nux	78
15	Schéma de la machine à vecteurs de support (SVM) : hyperplan optimal,marge et vecteurs de support	79
16	Courbe d'apprentissage du SVR	83
17	Diagramme réel-prévu pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x du modèle SVR	84
18	Résidus du modèle SVR en fonction des valeurs prédites pour θ, C_{fx} et Nu_x	85
19	Distributions des résidus du modèle SVR pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x	86
20	Diagrammes Q–Q des résidus du modèle SVR pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x	87
	CHAPITRE III. RESULTATS &	
1	Représentation schématique de la forme de la bulle avant la ligne de figeage	68

LISTE DES TABLEAUX

PARTIE 1 : ETAT DE L'ART		
CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES NANOFLUIDES		
1	Rapport des masses volumiques des différentes nanofluides en fonction de la fraction volumique	9
2	Valeurs des conductivités thermiques des nanoparticules et des fluides utilisés	10
PARTIE 2 : PARTIE MODELISATION		
CHAPITRE III. MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMIQUE ET HYDRODYNAMIQUE		
1	Les variables d'entrée de notre base de données.	55
2	Les variables de sortie de notre base de données	57
3	Statistiques descriptives – Entrées	59
4	Statistiques descriptives – Sorties	60
5	Matrice de corrélation (Entrées + Sorties)	63
6	Définition du réseau de neurone de notre apprentissage automatique	72
7	Indicateur de performance du modèle RNA par variable de sortie	73
8	Statistiques descriptives des résidus du modèle RNA pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x	76
9	Indicateur de performance du modèle SVR par variable de sortie	82
10	Statistiques descriptives des résidus du modèle SVR pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x	86

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

L’administration ciblée des médicaments désigne l’ensemble des stratégies qui visent à délivrer un principe actif spécifiquement au tissu malade, en augmentant sa concentration locale tout en épargnant les tissus sains. Elle permet de prolonger et de localiser l’action du traitement, de réduire la dose totale administrée et de limiter les effets secondaires systémiques, ce qui est particulièrement critique en oncologie ou en thérapies lourdes. Pour y parvenir, on utilise des vecteurs comme des nanoparticules, liposomes ou polymères intelligents, capables de reconnaître un site cible (par exemple via des ligands ou anticorps) ou de libérer le médicament en réponse à un stimulus local (pH, température, enzymes). Ce type de systèmes de délivrance ouvre la voie à des thérapies plus efficaces et personnalisées, en lien direct avec les développements en nanomédecine et en ingénierie des matériaux pour le drug delivery.

L'administration ciblée a été améliorée par l'application des nanotechnologies dans le domaine biomédical, notamment grâce à l'utilisation de nanofluides. Les nanofluides sont des vecteurs efficaces de médicaments dans le corps humain grâce à leur conductivité thermique accrue et leurs propriétés d'écoulement contrôlées. Dans l'industrie pharmaceutique, les nanofluides présentent une efficacité thermique supérieure et un écoulement régulé, ce qui en fait des transporteurs efficaces au sein du corps humain. L'étude des nanofluides hybrides et multi-hybrides, en particulier en présence de rayonnement thermique, a suscité un intérêt croissant en raison de leur potentiel d'amélioration de l'administration d'agents médicamenteux. Il est essentiel de comprendre le comportement des nanofluides dans les milieux poreux afin de créer des systèmes d'administration de médicaments efficaces et thermosensibles.

Le potentiel d'optimisation de l'administration thérapeutique a suscité un intérêt pour la recherche sur les nanofluides hybrides et multi-hybrides, en particulier lorsqu'ils sont exposés à un rayonnement thermique. La conception de systèmes d'administration de médicaments efficaces et thermosensibles nécessite de comprendre le comportement des nanofluides dans les milieux poreux. Un seul type de nanoparticule dissoute dans un fluide de base constitue un nanofluide, et les nanofluides trihybrides sont un sous-ensemble des nanofluides.

L'ajout de trois nanoparticules distinctes au flux sanguin illustre l'écoulement d'un nanofluide trihybride, ce qui améliore la stabilité du modèle d'écoulement. Ses applications incluent des caractéristiques multifonctionnelles permettant de contrôler la santé vasculaire et d'administrer des médicaments à des régions critiques. Les distributions de vitesse, les isothermes, les lignes de courant, les nombres de Nusselt, l'entropie et les nombres de Bejan

sont les paramètres de sortie examinés pour évaluer les performances du système et ses fluctuations. L'étude des nanofluides a considérablement progressé, comme en témoignent de nombreuses études examinant leurs propriétés dans divers domaines.

L'administration ciblée des médicaments repose de plus en plus sur des modèles de soft computing capables de prédire de manière fiable les champs de température, de vitesse ou de concentration afin d'optimiser les conditions d'injection et la géométrie des dispositifs. Bien que la découverte de l'analyse par réseaux de neurones artificiels (RNA) remonte à une cinquantaine d'années, les logiciels d'application capables de traiter des problèmes pratiques n'ont émergé qu'au cours des deux dernières décennies. Les RNA excellent dans certaines activités, mais présentent des lacunes dans d'autres. Ils sont particulièrement efficaces pour les opérations impliquant des ensembles de données ou des informations insuffisants, ainsi que pour les situations très complexes et ambiguës, où les humains s'appuient généralement sur leur intuition pour prendre des décisions. Les réseaux de neurones artificiels (RNA) ont été utilisés avec succès dans divers domaines, notamment les mathématiques, l'ingénierie, la médecine, la psychologie, etc.

Les Machines à Vecteurs de Support (SVM) constituent une approche d'apprentissage supervisé particulièrement intéressante : en régression, le SVM cherche une fonction qui approxime au mieux la relation entrée–sortie tout en maximisant la marge et en contrôlant explicitement la complexité du modèle via des hyperparamètres. Cette structure le rend souvent moins sensible au sur-apprentissage sur des bases de données de taille modérée, ce qui est typique des études numériques et expérimentales en nanofluides et en administration ciblée.

Pour sélectionner le modèle le plus robuste, il est nécessaire de comparer systématiquement le SVM et le réseau de neurones sur plusieurs critères : performances numériques (R^2, MSE, MAE, éventuellement RMSE) sur les données de test, stabilité des résultats sous validation croisée, sensibilité aux variations des hyperparamètres et capacité à généraliser en dehors du domaine strict d'apprentissage. Le réseau de neurones offre en général une plus grande flexibilité pour capturer des non-linéarités complexes, mais il peut être plus difficile à régler (choix du nombre de couches, neurones, fonctions d'activation, régularisation) et plus sensible au sur-apprentissage si la base de données est limitée. À l'inverse, un SVM bien paramétré avec un noyau adapté peut fournir une généralisation très robuste avec moins de réglages structurels, au prix parfois d'une précision légèrement inférieure sur certaines grandeurs.

INTRODUCTION GENERALE

Dans une approche de méta-modélisation pour la thermo-hydrodynamique ou pour la prédiction de champs pertinents en administration ciblée des médicaments, la démarche rationnelle consiste donc à entraîner et optimiser les deux familles de modèles (SVM et réseaux de neurones), puis à comparer leurs performances numériques et leur comportement en généralisation. Le modèle retenu comme « le plus robuste » sera celui qui combine : bonne précision globale sur toutes les sorties d'intérêt, erreurs stables sur différentes partitions des données, faible sensibilité aux hyperparamètres et cohérence physique des prédictions sur l'ensemble du domaine paramétrique, ce qui en fait un outil fiable pour guider la conception et l'optimisation des systèmes d'administration ciblée. L'organisation de ce mémoire s'articule autour de trois chapitres complémentaires.

CHAPITRE I : GÉNÉRALITÉS SUR LES NANOFLUIDES, qui présente les notions fondamentales relatives aux nanofluides, leurs propriétés thermophysiques, les principaux types de nanoparticules et de fluides de base, ainsi que les modèles de base décrivant leur comportement en milieu poreux.

CHAPITRE II : APPLICATION DES NANOFLUIDES DANS LE DOMAINE PHARMACEUTIQUE, consacré aux usages des nanofluides et des nanomatériaux en nanomédecine, notamment pour l'administration ciblée des médicaments, l'amélioration du transfert de chaleur biologique et le rôle des systèmes de drug delivery dans l'optimisation des thérapies.

CHAPITRE III : MODÉLISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMIQUE ET HYDRODYNAMIQUE, portant sur le développement et la résolution du modèle adimensionné pour prédire le comportement thermique de l'écoulement d'un nanofluide trihybride à base de sang, appliqué à des configurations biomédicales d'administration ciblée de médicaments. Ce dernier chapitre détaille la formulation mathématique, la génération de la base de données numérique et la mise en œuvre des modèles de soft computing pour la prédiction du comportement thermo-hydrodynamique.

PARTIE 1 :

ETAT DE L'ART

CHAPITRE I :

GENERALITES SUR LES NANOFLUIDES

CHAPITRE I : GENERALITES SUR LES NANOFLUIDES

1. Introduction

Le développement des nanotechnologies représente un enjeu majeur pour les années à venir. Les nanosciences s'intéressent à l'étude de la matière à l'échelle moléculaire et nanométrique afin d'apporter des innovations dans plusieurs domaines, tels que l'environnement, la production et le stockage de l'énergie, le refroidissement des composants électroniques, la biologie, le diagnostic médical ainsi que le traitement des eaux.

Grâce aux avancées récentes dans le domaine des nanotechnologies, il est désormais possible de produire, avec une relative facilitée, des particules de taille nanométrique appelées nanoparticules.

Le transfert de chaleur dans les fluides joue un rôle essentiel dans de nombreuses applications pratiques et industrielles, notamment dans le domaine du transport (moteurs à combustion), de l'approvisionnement en énergie, de la climatisation ainsi que du refroidissement des composants électroniques.

Les fluides classiques tels que l'eau, l'huile ou l'éthylène-glycol possèdent une conductivité thermique relativement faible comparée à celle des solides cristallins. Afin d'améliorer les propriétés thermophysiques de ces fluides, des particules solides de taille nanométrique, appelées nanoparticules, et présentant d'excellentes caractéristiques thermiques, sont dispersées dans le fluide de base. Cette nouvelle catégorie de fluides est connue sous le nom de « nanofluides ». Ce terme a été introduit par Stephen U. Choi [1] en 1995 au laboratoire Argonne National Laboratory aux États-Unis, et il est depuis largement utilisé pour désigner ce type de suspension colloïdale.

Un nanofluide est un mélange biphasique (solide-liquide) constitué d'une phase continue, généralement un liquide saturé tel que l'eau, l'huile ou l'éthylène-glycol, et d'une phase dispersée composée de particules de taille nanométrique (généralement inférieure à 100 nm), telles que des nanoparticules, nanotubes, nanofibres, nanofils, nanotiges, nanofeuilles ou encore des gouttelettes [2].

Grâce à leurs propriétés remarquables, les nanofluides suscitent un grand intérêt auprès des chercheurs. En effet, il a été démontré que leur conductivité thermique est significativement supérieure à celle du fluide de base.

En effet, plusieurs études expérimentales [3,4] ont montré qu'une faible fraction volumique de particules, de l'ordre de 1 %, constituée de nanoparticules de cuivre ou de nanotubes de carbone dispersés dans l'éthylène-glycol, peut entraîner une augmentation de la conductivité thermique du mélange pouvant atteindre respectivement 40 % et 150 %.

Par conséquent, les nanofluides représentent une alternative très prometteuse pour l'amélioration du transfert de chaleur dans diverses applications thermiques [3,5,6].

2. Particularité des nanoparticules

2.1. Nanoparticules et les fluides porteurs

Les nanoparticules sont des structures constituées de quelques centaines à plusieurs milliers d'atomes, dont au moins une dimension est comprise entre 1 et 100 nm, soit à l'échelle nanométrique.

Les nanoparticules se situent à l'interface entre l'échelle microscopique et l'échelle atomique ou moléculaire. Elles présentent un intérêt aussi bien fondamental qu'appliqué, ce qui explique l'attention croissante qu'elles suscitent dans la recherche actuelle. De nombreux physiciens et chimistes travaillent sur leur synthèse, tandis que d'autres chercheurs étudient les propriétés physiques de ces objets nanométriques. Par ailleurs, les biologistes les utilisent notamment comme marqueurs cellulaires [7,8].

Il existe plusieurs types de particules pouvant être dispersées dans les fluides. Les premières particules utilisées étaient principalement de nature métallique, telles que l'or, le cuivre, l'argent et l'aluminium, en raison de leur conductivité thermique élevée. Cependant, ces particules présentaient certains inconvénients, notamment leur tendance à l'oxydation et leur sensibilité à l'érosion dans les fluides.

Pour cette raison, les chercheurs privilégient désormais les particules d'oxydes, qui offrent une meilleure stabilité et une meilleure compatibilité avec le fluide de base. Les nanotubes de carbone suscitent également un grand intérêt dans les recherches en raison de leur faible densité et de leur excellente conductivité thermique. Il existe par ailleurs d'autres types de particules, sélectionnées en fonction des applications recherchées. En effet, l'intérêt des nanofluides ne se limite pas uniquement à l'amélioration du transfert de chaleur.

Les nanotechnologies trouvent aussi des applications dans les domaines de l'usinage, du nucléaire, du biomédical et bien d'autres secteurs. Ainsi, il est possible de développer des nanofluides à base de nitrates, de silicone ou encore de verre.

Dans le domaine du transfert de chaleur par les nanofluides, les chercheurs privilégient généralement les nanoparticules d'oxyde de cuivre (CuO), d'alumine (Al_2O_3) et de graphite, en raison de leur bonne stabilité chimique.

2.2. La taille des particules

Les nanoparticules utilisées dans la préparation des nanofluides possèdent généralement un diamètre inférieur à 100 nm. Dans certaines études sur les nanofluides [9], des particules de

taille aussi réduite que 10 nm ont été employées. Lorsque les particules ne sont pas sphériques mais présentent une forme de tige ou de tube, leur diamètre demeure inférieur à 100 nm, tandis que leur longueur peut atteindre l'ordre du micromètre.

Par ailleurs, en raison du phénomène d'agglomération, ces particules peuvent se regrouper et former des amas de taille micrométrique.

2.3. La forme des particules

Les particules sphériques sont les plus couramment utilisées dans les nanofluides. Toutefois, des nanoparticules de formes variées, telles que des tiges, des tubes ou des disques, sont également employées [10]. Par ailleurs, les agglomérats formés par ces nanoparticules peuvent présenter des structures complexes de type fractal.

3. Méthodes de préparation des nanofluides

Les études réalisées sur des fluides caloporteurs contenant des particules de taille micrométrique (10^{-6} m) ont mis en évidence plusieurs inconvénients, notamment la sédimentation des particules ainsi que l'augmentation des pertes de charge. En revanche, lorsque les particules sont de taille nanométrique (10^{-9} m), ces problèmes deviennent pratiquement négligeables.

En supposant que la suspension soit stable et durable, que l'agglomération des particules soit négligeable et qu'aucune modification chimique du fluide ne se produise, les nanofluides peuvent être préparés selon différentes méthodes [11].

3.1. Méthode en deux étapes

La méthode en deux étapes est la technique la plus couramment utilisée pour la préparation des nanofluides. Dans un premier temps, les nanoparticules, nanofibres, nanotubes ou autres nanomatériaux sont synthétisés sous forme de poudres sèches par des procédés chimiques ou physiques. Dans un second temps, cette poudre nanométrique est dispersée dans le fluide de base à l'aide de différentes techniques, telles que l'agitation magnétique intensive, l'ultrasonication, le mélange à haut cisaillement, l'homogénéisation ou encore le broyage à boulets.

La méthode en deux étapes représente la technique la plus économique pour la production des nanofluides à grande échelle, notamment parce que les procédés de synthèse des nanopoudres sont déjà adaptés à une production industrielle. Toutefois, en raison de leur grande surface spécifique et de leur forte activité de surface, les nanoparticules ont tendance à s'agglomérer. Afin d'améliorer leur stabilité dans les fluides, l'utilisation d'agents tensioactifs constitue une solution largement adoptée. Néanmoins, l'efficacité de ces tensioactifs à haute

température demeure une préoccupation majeure, particulièrement dans les applications thermiques à haute température.

En raison des difficultés rencontrées pour obtenir des nanofluides stables par la méthode en deux étapes, plusieurs techniques ont été développées, notamment la méthode en une seule étape.

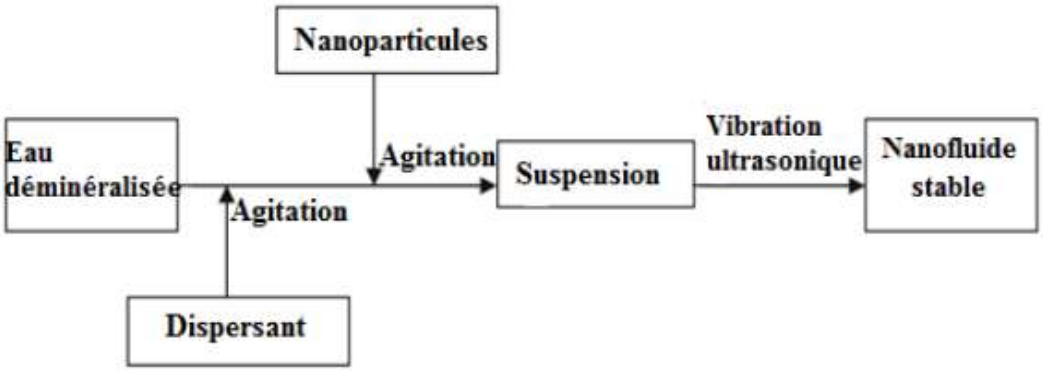


Figure 1. La procédure en deux étapes pour la préparation des nanofluides

3.2. Méthode en une étape

Afin de limiter l'agglomération des nanoparticules, Eastman et ses collaborateurs ont développé un procédé physique de condensation de vapeur en une seule étape pour la préparation des nanofluides Cu/éthylène-glycol [13]. Cette méthode consiste à synthétiser et à disperser simultanément les nanoparticules dans le fluide de base. Ainsi, les étapes de séchage, de stockage, de transport et de dispersion des nanoparticules sont éliminées, ce qui permet de réduire considérablement leur agglomération et d'améliorer la stabilité des nanofluides [14].

Les procédés en une seule étape permettent d'obtenir des nanoparticules uniformément dispersées, assurant ainsi une suspension stable dans le fluide de base.

Le SANSS (Système de Synthèse de Nanoparticules par Arc Submergé) constitue une autre méthode efficace pour la préparation des nanofluides en utilisant différents liquides diélectriques [15,16]. Les morphologies obtenues dépendent principalement des propriétés de conduction thermique de ces liquides diélectriques. De plus, ce procédé permet de limiter efficacement l'agrégation indésirable des particules.

La méthode physique en une seule étape présente certaines limites, notamment l'impossibilité de produire des nanofluides à grande échelle ainsi que son coût élevé. Par conséquent, la méthode chimique en une étape connaît un développement rapide.

Le transfert de phase des nanoparticules d'argent résulte de leur interaction avec les molécules d'ODA présentes dans la phase organique, soit par la formation de liaisons de coordination, soit par de faibles interactions covalentes. La méthode de transfert de phase a ainsi été développée afin d'obtenir des colloïdes d'oxyde de graphène homogènes et stables.

Les nanofeuillets d'oxyde de graphène (NOG) ont été transférés avec succès de l'eau vers le n-octane après modification par l'oléylamine. La représentation schématique du processus de transfert de phase est illustrée dans la figure (2) [17].

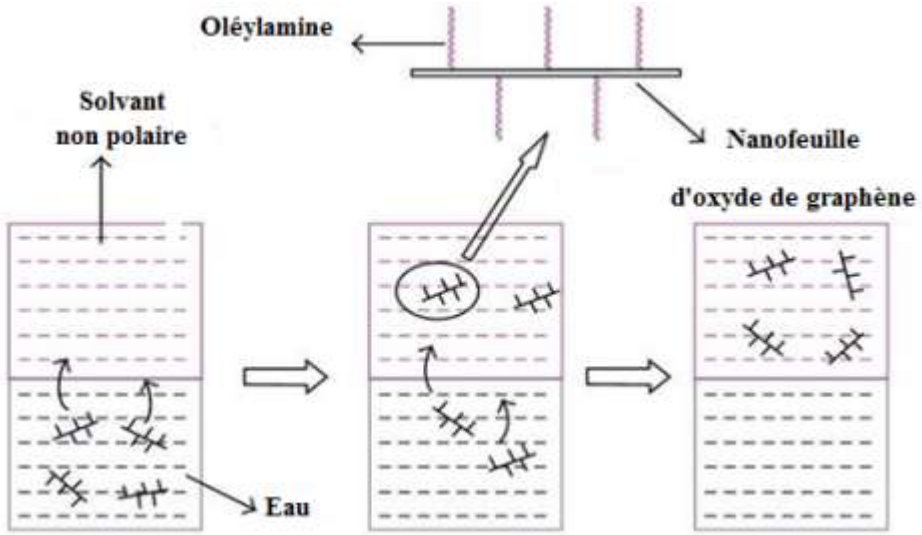


Figure 2. Représentation schématique du processus de transfert de phase [17].

Cependant, la méthode en une seule étape présente certains inconvénients. Le principal réside dans la présence de réactifs résiduels dans les nanofluides, due à des réactions incomplètes ou aux agents de stabilisation utilisés. Par conséquent, il devient difficile d'évaluer précisément l'effet des nanoparticules sans éliminer l'influence de ces impuretés.

3.3. D'autres nouvelles méthodes

Wei et ses collaborateurs ont développé un microréacteur microfluidique à débit continu destiné à la synthèse de nanofluides de cuivre. Cette méthode permet de produire continuellement des nanofluides de cuivre tout en contrôlant leur microstructure et leurs propriétés grâce à l'ajustement de différents paramètres, tels que la concentration des réactifs, le débit et les additifs utilisés. Par ailleurs, des nanofluides de CuO à forte fraction volumique solide (jusqu'à 10 %) peuvent être obtenus par une nouvelle méthode de transformation de précurseurs assistée par irradiation ultrasonique et micro-ondes [18].

Le précurseur $Cu(OH)_2$ est entièrement transformé en nanoparticules de CuO dans l'eau sous l'effet d'une irradiation micro-ondes. Le citrate d'ammonium joue un rôle important en limitant la croissance et l'agglomération des nanoparticules, ce qui permet d'obtenir un nanofluide aqueux stable de CuO présentant une conductivité thermique supérieure à celle des nanofluides préparés par d'autres méthodes de dispersion.

Feng et ses collaborateurs ont utilisé la méthode de transfert de phase organique-aqueuse pour préparer des nanoparticules d'or, d'argent et de platine, en se basant sur la diminution de l'hydrosolubilité du PVP avec l'augmentation de la température [19].

Par ailleurs, cette méthode de transfert de phase a également été appliquée à la préparation de nanofluides stables de Fe_3O_4 à base de kérosène. L'acide oléique a été greffé avec succès à la surface des nanoparticules de Fe_3O_4 par chimisorption, ce qui a permis d'améliorer leur compatibilité avec le kérosène [20].

Les nanofluides de Fe_3O_4 préparés par la méthode de transfert de phase ne présentent pas la dépendance temporelle de la conductivité thermique observée précédemment. La maîtrise de la microstructure des nanofluides constitue aujourd'hui un enjeu majeur, car leurs propriétés dépendent fortement de la structure et de la forme des nanomatériaux utilisés.

Des recherches récentes ont montré que les nanofluides synthétisés par la méthode de solution chimique présentent une conductivité thermique plus élevée ainsi qu'une meilleure stabilité que ceux obtenus par d'autres procédés [21].

De plus, la microstructure des nanofluides peut être contrôlée et modifiée en ajustant différents paramètres de synthèse, tels que la température, l'acidité, l'irradiation ultrasonique et micro-ondes, ainsi que la nature, la concentration et l'ordre d'ajout des réactifs et des additifs dans la solution.

4. Domaines d'applications des nanofluides

Les nanofluides peuvent être utilisés afin d'améliorer le transfert thermique ainsi que l'efficacité énergétique dans de nombreux systèmes thermiques. Cette section présente quelques domaines d'application, notamment le transport, la microélectronique, la défense, le nucléaire, l'aérospatial et le secteur biomédical.

4.1. Refroidissement des systèmes thermiques

Le mélange d'eau et d'éthylène-glycol est couramment utilisé comme liquide de refroidissement dans les moteurs automobiles. L'ajout de nanoparticules à ce fluide permet d'améliorer les performances de refroidissement et d'augmenter l'efficacité du transfert thermique. Cette problématique a été étudiée par plusieurs chercheurs. Ainsi, Tzeng et ses

collaborateurs [22] ont dispersé des nanoparticules de CuO et d'Al_2O_3 dans l'huile de refroidissement des systèmes de transmission automobile.

Dans une autre étude, Zhang et Que [23] ont montré que l'utilisation de nanoparticules comme additifs lubrifiants permet de réduire l'usure, d'améliorer les propriétés tribologiques et d'augmenter la résistance à l'usure, tout en diminuant les frottements entre les composants mécaniques mobiles.

4.2. Refroidissement des systèmes électroniques

Dans le domaine des circuits intégrés, les nanofluides ont été envisagés comme des fluides de refroidissement performants. À cet effet, plusieurs recherches ont été menées afin d'évaluer leur efficacité thermique. Ainsi, Tsai et ses collaborateurs [46] ont utilisé un nanofluide à base d'eau pour le refroidissement de l'unité centrale de traitement d'un microordinateur.

Par ailleurs, Ma et ses collègues [25] ont étudié l'influence des nanofluides sur les capacités de transfert thermique d'un caloduc oscillant. Leurs résultats ont montré qu'avec une puissance d'entrée de 80 W et une concentration volumique de seulement $\varphi = 1$ %, la différence de température entre l'évaporateur et le condenseur atteignait 16,6 °C.

4.3. Refroidissement des systèmes militaires

Les applications militaires des nanofluides concernent notamment le refroidissement de l'électronique de puissance ainsi que des armes à énergie dirigée. Ces systèmes génèrent des flux thermiques très élevés ($q > 500$ à 1000 W/cm²) [1], pour lesquels les nanofluides ont démontré une grande efficacité en matière de dissipation thermique. Ils peuvent également être utilisés pour le refroidissement d'autres équipements militaires, tels que les véhicules militaires, les sous-marins et les diodes laser de haute puissance.

4.4. Refroidissement des systèmes spatiaux

Dans le domaine spatial, You ainsi que Vassallo [26,27] ont mené plusieurs études démontrant que l'ajout de nanoparticules aux fluides de refroidissement utilisés en électronique joue un rôle essentiel dans les applications spatiales, où les densités de puissance thermique sont particulièrement élevées.

4.5. Refroidissement des systèmes nucléaires

Massachusetts Institute of Technology a mis en place un centre interdisciplinaire consacré au développement des nanotechnologies, notamment des nanofluides, dans le domaine de l'énergie nucléaire. Actuellement, les recherches menées portent sur l'évaluation

de l'impact potentiel des nanofluides sur la sûreté neutronique ainsi que sur les performances économiques des systèmes nucléaires.

4.6. La biomédecine

Les nanofluides et les nanoparticules présentent de nombreuses applications dans le domaine biomédical. Par exemple, afin de réduire certains effets secondaires associés aux méthodes conventionnelles de traitement du cancer, des nanoparticules à base de fer ont été utilisées comme vecteurs de médicaments.

Par ailleurs, Jordan et ses collaborateurs [28] ont réalisé une étude montrant que les nanofluides peuvent être utilisés pour générer localement des températures élevées autour des tumeurs afin de détruire les cellules cancéreuses, tout en préservant les cellules saines environnantes. Cette approche contribue également à rendre certaines interventions chirurgicales plus sûres grâce à un refroidissement efficace des zones opératoires.

4.7. D'autres applications

Dans de nombreuses situations, l'amélioration de l'efficacité du transfert thermique peut avoir une influence directe sur la qualité, la quantité ainsi que le coût des produits ou des procédés industriels. Par exemple, dans le domaine des énergies renouvelables, les nanofluides sont utilisés afin d'optimiser le transfert de chaleur des capteurs solaires vers les réservoirs de stockage et d'augmenter la densité énergétique des systèmes.

Les fluides réfrigérants à base de nanofluides présentent également un fort potentiel d'application dans plusieurs industries de transformation, notamment celles des matériaux, de la production chimique, de l'agroalimentaire, des boissons, ainsi que des secteurs pétrolier et gazier [1].

5. Caractéristiques des nanofluides

La connaissance des propriétés thermophysiques des nanofluides est indispensable pour évaluer leurs performances thermiques. Dans ce contexte, de nombreuses études théoriques et expérimentales ont été consacrées à l'analyse de ces propriétés, en particulier la conductivité thermique et la viscosité.

5.1. La Masse volumique

La masse volumique d'un nanofluide dépend naturellement des caractéristiques des nanoparticules ainsi que de celles du fluide de base. Dans cette partie, nous présenterons les principaux paramètres susceptibles d'influencer la viscosité du mélange.

Afin de calculer la masse volumique d'un nanofluide supposé parfaitement homogène, c'est-à-dire caractérisé par une bonne dispersion des nanoparticules dans le fluide de base, en

fonction de la fraction volumique et à une température donnée (T), il est nécessaire de se référer à la définition de la masse volumique du mélange [7].

Le tableau (1) présente les valeurs du rapport entre la masse volumique des nanofluides et celle du fluide de base pour cinq types de nanofluides : (eau + Al_2O_3), (eau + CuO), (eau + Cu), (eau + Ag) et (eau + Au), en fonction de la fraction volumique ((\varphi)), variant de 0 % à 8 %.

Tableau 1. Rapport des masses volumiques des différentes nanofluides en fonction de la fraction volumique [7].

	$\rho nf/\rho f$				
φ%	Eau+Al_2O_3	Eau+CuO	Eau+Cu	Eau+Ag	Eau+Au
0%	1	1	1	1	1
1%	1.0296	1.0546	1.0797	1.0951	1.1833
2%	1.0593	1.1092	1.1594	1.1903	1.3666
3%	1.0890	1.1638	1.2391	1.2855	1.5500
4%	1.1186	1.2184	1.3188	1.3807	1.7333
5%	1.1483	1.2730	1.3985	1.4759	1.9167
6%	1.1780	1.3276	1.4782	1.5711	2.1000
7%	1.2077	1.3823	1.5579	1.6663	2.2834
8%	1.2373	1.4369	1.6376	1.7615	2.4667

La viscosité d'un nanofluide dépend fortement de la fraction volumique des nanoparticules dispersées dans le fluide de base. Pour les nanofluides à base d'eau, on observe que la présence de nanoparticules métalliques entraîne une augmentation importante de la viscosité.

5.2. La chaleur spécifique

La chaleur spécifique représente la capacité calorifique par unité de masse d'une substance ou d'un système homogène. Elle correspond à la quantité de chaleur nécessaire pour élever de 1 K la température d'une unité de masse du matériau au cours de la transformation considérée.

Pour la détermination de la chaleur spécifique d'un nanofluide, différentes relations ont été proposées dans la littérature, mais jusqu'à ce jour-là, aucune donnée expérimentale relative à la chaleur spécifique des nanofluides n'a été rapportée dans la littérature. Il est évident que les expressions proposées par les chercheurs conduisent à des résultats différents. Or, les études portant sur l'écoulement des nanofluides nécessitent la détermination précise de cette propriété thermophysique. En général, les chercheurs utilisent l'une des relations proposées sans justification clairement établie.

5.3. La conductivité thermique des nanofluides

Les études consacrées à la conductivité thermique des nanofluides ont montré qu'il est possible d'obtenir des améliorations significatives de cette propriété grâce à l'utilisation de nanoparticules. En effet, des augmentations de conductivité thermique supérieures à 20 % peuvent être atteintes pour des fractions volumiques de particules inférieures à 5 % [29,30].

De telles améliorations dépassent les prédictions des modèles théoriques développés pour les suspensions contenant des particules de plus grande taille. Cela laisse supposer l'existence de mécanismes supplémentaires de transfert thermique contribuant à l'amélioration des performances thermiques des nanofluides.

Le tableau 2 présente les valeurs des conductivités thermiques des nanoparticules et des fluides de base utilisées pour former des nanofluides.

Tableau 2. Valeurs des conductivités thermiques des nanoparticules et des fluides utilisés. [7]

Les Matériaux	Les formes	Les conductivités thermiques (W/mK)
Les carbones	nanotube de carbone	2000-3000
	Diamant	2300
	Graphite	110-190
	Fullerènes	0.4
Des solides métalliques	Cuivre	401
	Aluminium	237
	Argent	429
	Nickel	158
	Or	317
Des oxydes métalliques	Stilicon	148
	Oxyde d'aluminium	40
	Oxyde de Titane	8.9538
	Oxyde de cuivre	17
	Brique rouge	60
Des liquides métalliques	Sodium	72.3
Des liquides non métalliques	Eau	0.613
	Ethylène glycol	0.253
	Huile de moteur	0.145
	Glycérol	0.289
	Huile	0.141

5.3.1. Méthodes de mesure de la conductivité thermique

Dans les mesures de la conductivité thermique des nanofluides, la méthode transitoire du fil chaud est la technique la plus couramment employée [31,32]. Toutefois, dans le cas des nanofluides conducteurs d'électricité, une version modifiée de cette méthode est nécessaire. Cette modification consiste à isoler électriquement le fil chauffant afin d'éviter les interférences liées à la conductivité électrique du fluide.

D'autres méthodes expérimentales ont également été utilisées par certains chercheurs, notamment la technique à plaques parallèles en régime stationnaire, la méthode d'oscillation de température, la méthode de la bande microchauffante (microhot strip) ainsi que la technique de déflexion du faisceau optique [33,34].

À partir de la résolution de l'équation de l'énergie, de nombreux modèles ont été développés afin d'estimer la conductivité thermique des nanofluides, notamment ceux contenant des nanoparticules de forme régulière, telles que les particules sphériques. Les modèles présentés dans la littérature constituent des outils de prédiction permettant de mieux comprendre les mécanismes de transfert thermique au sein des nanofluides.

Les auteurs attribuent généralement ces imprécisions au manque important de données expérimentales disponibles. Par ailleurs, les corrélations empiriques proposées dans la littérature comportent souvent des paramètres complexes, dont la détermination nécessite des données expérimentales précises.

En résumé, il n'existe actuellement aucune expression théorique universelle permettant de prédire avec précision la conductivité thermique de tous les types de nanofluides. Les recherches consacrées à la modélisation de cette propriété restent limitées en raison du manque de données expérimentales disponibles.

En effet, la base de données expérimentales demeure relativement restreinte, et les résultats rapportés présentent souvent des différences importantes d'un laboratoire à un autre. De plus, les études expérimentales portent généralement sur des fractions volumiques de nanoparticules ne dépassant pas 8 %.

5.3.2. Mécanismes d'amélioration de la conductivité thermique

5.3.2.1. Mouvement brownien de nanoparticules

Le mouvement brownien correspond au déplacement aléatoire des particules en suspension dans un fluide. Dans le cas des nanofluides, ce mouvement aléatoire contribue directement au transport de l'énergie par les nanoparticules. Par ailleurs, un effet de micro-convection, généré par le brassage du fluide autour des nanoparticules en mouvement, est également considéré comme un mécanisme important participant à l'amélioration du transfert thermique.

De nombreuses études ont été consacrées, dans la littérature, à l'influence du mouvement brownien sur la conductivité thermique des nanofluides. À ce sujet, Bhattacharya et ses collaborateurs ont utilisé des simulations de dynamique brownienne afin de déterminer

la conductivité thermique effective des nanofluides, en prenant en considération le mouvement brownien des nanoparticules.

Prasher et ses collaborateurs [35] ont comparé les effets du mouvement brownien de translation et de la convection induite par ce mouvement. Ils ont également étudié l'existence d'un potentiel d'interaction entre les nanoparticules.

À partir d'une analyse d'ordre de grandeur, les auteurs ont conclu que la convection du liquide provoquée par le mouvement brownien des nanoparticules constitue le principal mécanisme responsable de l'amélioration anormale de la conductivité thermique des nanofluides. Toutefois, dans leur étude, l'influence de la concentration des nanoparticules n'a pas été analysée.

5.3.2.2. Le regroupement des nanoparticules

Les nanoparticules ont tendance à former des agrégats, dont la structure peut être décrite à l'aide de la théorie des fractales [36–38]. Evans et ses collaborateurs [39] ont proposé que ces regroupements puissent favoriser un transfert rapide de la chaleur sur des distances relativement importantes. En effet, la conduction thermique s'effectue beaucoup plus rapidement à travers les particules solides qu'au sein de la matrice liquide environnante. Ce phénomène est illustré schématiquement dans la Figure 3 suivante :

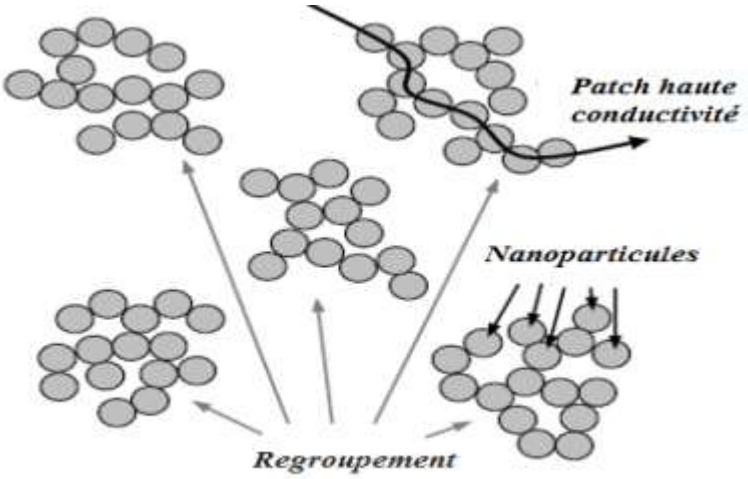


Figure 3. Illustration schématique représentant le phénomène de groupement [36].

La présence de chemins à forte conductivité thermique favorise ainsi un transfert rapide de la chaleur sur de grandes distances.

Evans et ses collaborateurs [39] ont également étudié l'influence des agrégats de nanoparticules ainsi que de la résistance thermique interfaciale sur la conductivité thermique des nanofluides. L'effet du regroupement des nanoparticules a été analysé en trois étapes à

l'aide du modèle de Bruggeman, du modèle proposé par Xiang-Qi Wang Nan et ses collaborateurs [40], ainsi que du modèle de Maxwell–Garnett (M–G).

Concernant la résistance thermique interfaciale, les résultats ont montré qu'elle tend à réduire l'amélioration de la conductivité thermique. Cependant, cet effet devient moins prononcé dans les nanofluides caractérisés par de grands agrégats de particules.

Une autre conclusion importante est que les nanoparticules de forme fibreuse sont plus efficaces pour améliorer la conductivité thermique que les particules sphériques. Toutefois, il a également été observé que ces particules fibreuses ou agglomérées entraînent une augmentation significative de la viscosité des nanofluides.

5.3.2.3. La Superposition de liquide autour des nanoparticules

Une étude récente a montré que les molécules du liquide peuvent s'organiser en structures en couches autour des surfaces solides. Il a été suggéré que ces monocouches possèdent une conductivité thermique effective supérieure à celle de la matrice liquide. À partir de cette observation, les structures en couches formées autour des nanoparticules ont été proposées comme l'un des mécanismes responsables de l'amélioration de la conductivité thermique des nanofluides [41,42]. Ce phénomène est illustré schématiquement dans la Figure 4

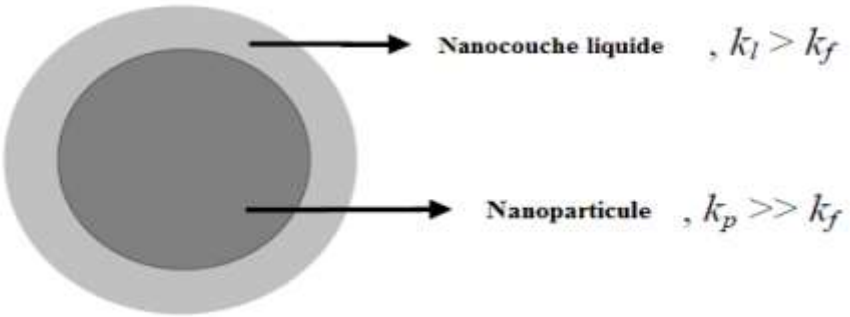


Figure 4. Illustration schématique représentant la superposition de liquide autour des nanoparticules. [42]

k_l, k_f, k_p et sont la conductivité thermique de la nanocouche, fluide de base, et des nanoparticules, respectivement.

L'absence de données expérimentales concernant l'épaisseur ainsi que la conductivité thermique de ces nanocouches constitue l'une des principales limites du mécanisme proposé [43]. Certains chercheurs ont développé des modèles théoriques en prenant en considération la couche liquide formée autour des nanoparticules. Toutefois, les prédictions de ces modèles reposent généralement sur des hypothèses simplificatrices concernant les valeurs de l'épaisseur et de la conductivité thermique de la nanocouche.

D'autres modèles supposent que la conductivité thermique de la nanocouche varie linéairement selon la direction radiale. Certains chercheurs prennent également en considération l'influence de la température sur la conductivité thermique de ces couches [73,74]. En ajustant convenablement les paramètres associés à la nanocouche, il est possible d'obtenir des résultats en accord avec les données expérimentales. Toutefois, cette concordance ne constitue pas une preuve suffisante de la validité du mécanisme proposé.

5.3.2.4. Transport balistique de phonon dans des nanoparticules

Dans les matériaux solides, le transfert de chaleur par diffusion est valable lorsque le libre parcours moyen des phonons est inférieur à la dimension caractéristique de la particule considérée. Keblinski et ses collaborateurs [46] ont estimé, à partir de la théorie développée par Peter Debye et rapportée par Geiger et Poirier [47], que le libre parcours moyen des phonons dans l'Al_2O_3 à température ambiante est d'environ 35 nm.

Ainsi, lorsque le diamètre des particules est inférieur à 35 nm, le transport de chaleur ne suit plus un régime diffusif, mais devient de nature balistique.

Bien que ce phénomène limite l'application des théories classiques utilisées pour modéliser la conductivité thermique des nanofluides, Keblinski et ses collaborateurs ont souligné que le transport balistique de la chaleur ne peut, à lui seul, expliquer les augmentations anormales de la conductivité thermique observées. En effet, la température à l'intérieur des nanoparticules demeure pratiquement uniforme, de sorte qu'elle ne dépend pas du mode de transport thermique, qu'il soit diffusif ou balistique.

Par conséquent, les conditions aux limites imposées au fluide de base restent identiques dans les deux cas, ce qui conduit finalement à des valeurs similaires de conductivité thermique pour les nanofluides.

5.3.2.5. Le Rayonnement Près du champ

Domingues et al. ont étudié l'influence du rayonnement en champ proche sur le transfert de chaleur entre deux nanoparticules. À l'aide de simulations de dynamique moléculaire, ils ont montré que lorsque la distance séparant les nanoparticules devient inférieure au diamètre des particules, la conductance thermique augmente considérablement, atteignant des valeurs deux à trois ordres de grandeur plus élevées que celles observées entre deux particules en contact.

Ce résultat peut être interprété comme un mécanisme potentiel d'amélioration du transfert thermique dans les nanofluides, étant donné que la distance séparant les nanoparticules peut devenir extrêmement faible lorsque leur taille est inférieure à 10

nanomètres. De plus, le mouvement brownien des nanoparticules pourrait renforcer ce phénomène, car les variations aléatoires et rapides de la distance interparticulaire favorisent les interactions thermiques entre les particules.

Une étude marquante sur ce sujet a été réalisée par Ben-Abdallah. Dans cette recherche, les interactions en champ proche entre les nanoparticules ont été analysées numériquement dans le cas d'un nanofluide Cuivre/éthylène glycol. Les résultats ont montré que ces interactions n'influencent pas de manière significative la conductivité thermique du nanofluide. Il a également été souligné que ces conclusions demeurent valables pour différents types de nanoparticules, notamment les métaux, les oxydes métalliques et les particules polaires.

5.3.3. Effets de certains paramètres sur la conductivité thermique des nanofluides

Les études expérimentales montrent que la conductivité thermique des nanofluides dépend de plusieurs paramètres, tels que la fraction volumique des nanoparticules, la nature du matériau particulaire, la taille et la forme des particules, le fluide de base ainsi que la température. Par ailleurs, la quantité et le type d'additifs, ainsi que l'acidité des nanofluides, se sont également révélés influents dans l'amélioration de la conductivité thermique.

Dans les sections suivantes, les travaux expérimentaux consacrés à la conductivité thermique des nanofluides sont présentés. Chaque section traite d'un paramètre particulier susceptible d'influencer les performances thermiques des nanofluides.

5.3.3.1. La Fraction volumique des particules

De nombreuses études publiées dans la littérature se sont intéressées à l'effet de la fraction volumique des particules, représentant la concentration des nanoparticules dans les nanofluides, sur leur conductivité thermique. Masuda et al. ont ainsi mesuré la conductivité thermique de nanofluides contenant des nanoparticules d'Al_2O_3 (13 nm), de SiO_2 (12 nm) et de TiO_2 (27 nm), les valeurs indiquées entre parenthèses correspondant aux diamètres moyens des particules.

Cette étude constitue la première investigation expérimentale consacrée à la conductivité thermique des nanofluides. L'eau y a été utilisée comme fluide de base, tandis qu'une méthode de préparation en deux étapes a servi à élaborer les nanofluides. Les résultats ont montré une amélioration significative de la conductivité thermique effective, atteignant 32,4 % pour un nanofluide Al_2O_3/eau contenant 4,3 % en volume de nanoparticules, à une température de 31,85 °C.

L'amélioration maximale observée de la conductivité thermique était de 20 %, obtenue pour un nanofluide CuO/éthylène glycol avec une fraction volumique de nanoparticules de 4 %. Pour les nanofluides à base d'eau et d'éthylène glycol, le rapport de conductivité thermique a présenté une variation linéaire en fonction de la fraction volumique des particules, les courbes représentant cette relation étant pratiquement confondues.

La fraction volumique des particules constitue un paramètre étudié dans la quasi-totalité des travaux expérimentaux, et les résultats obtenus présentent généralement une bonne concordance qualitative. La plupart des chercheurs ont rapporté une augmentation de la conductivité thermique avec l'accroissement de la fraction volumique des nanoparticules, cette relation étant le plus souvent de nature linéaire. Néanmoins, certaines études ont également mis en évidence un comportement non linéaire.

Selon les auteurs, une relation non linéaire peut, par exemple, être interprétée comme le signe d'interactions entre les particules. Ils ont conclu que, malgré une fraction volumique très faible, les nanotubes de carbone peuvent interagir entre eux en raison d'une concentration particulaire très élevée, de l'ordre de 10^{11} particules/cm^3.

5.3.3.2. La matière particulaire

La plupart des études indiquent que la nature des particules constitue un paramètre important influençant la conductivité thermique des nanofluides. À première vue, on pourrait supposer que cet effet est principalement dû aux différences de conductivité thermique entre les matériaux des particules. Cependant, plusieurs travaux montrent que le type de particules peut également influencer la conductivité thermique des nanofluides par d'autres mécanismes.

Par exemple, Lee et al. ont observé que les nanofluides contenant des nanoparticules de CuO présentent une amélioration plus importante de la conductivité thermique que ceux préparés avec des nanoparticules d'Al_2O_3. Il est important de noter que, pourtant, l'Al_2O_3 possède une conductivité thermique intrinsèque plus élevée que celle du CuO.

Par conséquent, la conductivité thermique du matériau constituant les particules n'est pas nécessairement le paramètre dominant qui détermine celle du nanofluide. Selon les auteurs, le facteur clé réside dans le fait que les nanoparticules d'Al_2O_3 ont tendance à former des agglomérats plus importants que celles de CuO. Cette observation peut constituer une explication plausible si l'on considère que le principal mécanisme d'amélioration de la conductivité thermique est le mouvement brownien des nanoparticules, dont l'effet diminue avec l'augmentation de la taille des particules.

Cependant, il convient de noter que certaines études considèrent également l'agglomération des nanoparticules comme un mécanisme contribuant à l'amélioration de la conductivité thermique. Une autre étude prenant en compte l'effet du type de nanoparticules a été réalisée par Chopkar et al., qui ont dispersé des nanoparticules d'Al_2Cu et d'Ag_2Al dans de l'eau et de l'éthylène glycol (φ = 1 %), en utilisant l'acide oléique comme agent tensioactif. Les mesures ont été effectuées à température ambiante.

Les résultats ont montré que les nanoparticules d'Ag_2Al entraînent une légère amélioration supérieure de la conductivité thermique par rapport aux nanoparticules d'Al_2Cu. Selon les auteurs, cette différence est attribuée à la conductivité thermique plus élevée de l'Ag_2Al par rapport à l'Al_2Cu.

5.3.3.3. Le fluide de base

Selon les modèles classiques de conductivité thermique, tels que le modèle de Maxwell, une diminution de la conductivité thermique du fluide de base d'un mélange entraîne une augmentation du rapport de conductivité thermique (k_{nf}/k_f), où k_{nf} représente la conductivité thermique du nanofluide et k_f celle du fluide de base.

Dans le cas des nanofluides, la situation est toutefois plus complexe, car la viscosité du fluide de base influence le mouvement brownien des nanoparticules, ce qui affecte à son tour la conductivité thermique du nanofluide [48,49]. Par ailleurs, Lee a étudié l'effet de la double couche électrique formée autour des nanoparticules sur la conductivité thermique des nanofluides et a montré que celle-ci ainsi que l'épaisseur de la couche dépendent du fluide de base.

Il est difficile de quantifier de manière précise l'influence de ces différents facteurs pris ensemble. Par conséquent, des études expérimentales systématiques sont nécessaires afin de mieux mettre en évidence l'effet du fluide de base sur la conductivité thermique des nanofluides.

5.3.3.4. La Taille des particules

La taille des particules constitue un autre paramètre important influençant la conductivité thermique des nanofluides. Il est possible de synthétiser des nanoparticules de dimensions variées, généralement comprises entre 5 et 100 nm. Eastman et al. ont étudié des nanoparticules de cuivre dispersées dans de l'éthylène glycol comme fluide de base. Grâce à une méthode de synthèse en une seule étape, ils ont obtenu des suspensions contenant des nanoparticules de cuivre de taille inférieure à 10 nm. De l'acide thioglycolique (moins de 1 % en volume) a été ajouté à certains échantillons afin d'assurer leur stabilisation et d'améliorer

leurs performances, et ces échantillons ont présenté une amélioration nettement supérieure par rapport à ceux préparés sans acide thioglycolique.

Une augmentation de 40 % de la conductivité thermique a été observée pour une fraction volumique de particules de 0,3 % en présence d'acide thioglycolique. À titre de comparaison, il convient de noter que dans l'étude de Lee et al., les auteurs ont obtenu une amélioration de 20 % pour une fraction volumique de 4 % avec un nanofluide CuO (23,6 nm)/éthylène glycol.

En raison des améliorations anormalement élevées observées, Eastman et al. ont conclu que la taille des nanoparticules constitue un facteur important influençant l'amélioration de la conductivité thermique. Ce résultat est en contradiction avec les prédictions des modèles classiques, tels que celui de Hamilton et Crosser [50], qui ne prennent pas en compte l'effet de la taille des particules sur la conductivité thermique.

Cependant, à des températures plus élevées, les nanofluides Al_2O_3/eau contenant des particules plus petites présentent une amélioration plus importante de la conductivité thermique. Les résultats expérimentaux ont été comparés aux modèles théoriques, et il a été conclu que le modèle proposé par Chon et al. permet de bien prédire les données expérimentales obtenues.

En revanche, lorsque les données dépendantes de la température issues des travaux de Murshed et al., Das et al. et Chon et Kihm sont comparées, il apparaît que le rapport de conductivité thermique varie peu malgré des tailles de particules nettement différentes (80 nm, 38,4 nm et 47 nm, respectivement).

5.3.3.5. La forme des particules

Dans les recherches sur les nanofluides, on distingue principalement deux formes de particules : les particules sphériques et les particules cylindriques. Ces dernières se caractérisent généralement par un rapport longueur/diamètre élevé. Xie et al. ont étudié la conductivité thermique de nanofluides SiC/eau distillée et SiC/éthylène glycol.

Deux types de nanoparticules ont été utilisés pour la préparation des nanofluides : des particules sphériques de diamètre moyen de 26 nm et des particules cylindriques de diamètre moyen de 600 nm. Les résultats ont montré qu'un nanofluide à base d'eau avec une fraction volumique de 4,2 % et des particules sphériques présente une amélioration de la conductivité thermique de 15,8 %, tandis qu'un nanofluide à 4 % contenant des particules cylindriques présente une amélioration plus élevée, de 22,9 %.

Cependant, il convient de noter que les nanofluides contenant des particules cylindriques présentent généralement une viscosité nettement plus élevée que ceux à base de particules sphériques [51]. Par conséquent, l'augmentation de la puissance de pompage associée est importante, ce qui limite l'applicabilité des nanofluides à particules cylindriques dans certaines utilisations pratiques.

5.3.3.6. La température

Dans les suspensions classiques de particules solides (de taille millimétrique ou micrométrique) dans des liquides, la conductivité thermique du mélange dépend de la température uniquement à travers la variation de la conductivité thermique du fluide de base et des particules solides.

En revanche, dans le cas des nanofluides, les variations de température influencent le mouvement brownien des nanoparticules ainsi que leur agglomération [52], ce qui entraîne des modifications significatives de la conductivité thermique en fonction de la température. Masuda et al. ont mesuré la conductivité thermique de nanofluides à base d'eau contenant des nanoparticules d'Al_2O_3, de SiO_2 et de TiO_2 à différentes températures.

Le rapport de conductivité thermique a diminué avec l'augmentation de la température, ce qui est en contradiction avec de nombreux résultats rapportés dans la littérature. Das et al. ont étudié la dépendance en température de la conductivité thermique de nanofluides Al_2O_3 (38,4 nm)/eau et CuO (28,6 nm)/eau. La diffusivité thermique a été mesurée à l'aide d'une technique d'oscillation de température, puis la conductivité thermique a été déduite à partir de ces mesures.

Plusieurs mesures ont été réalisées à différentes températures comprises entre 21 et 51 °C. Il a été observé que, pour une fraction volumique de 1 %, le nanofluide Al_2O_3/eau présente une amélioration de la conductivité thermique passant de 2 % à 21 °C à 10,8 % à 51 °C.

La dépendance à la température est encore plus marquée pour une fraction volumique de 4 % d'Al_2O_3, où l'amélioration de la conductivité thermique augmente de 9,4 % à 21 °C à 24,3 % à 51 °C. Une relation linéaire entre le rapport de conductivité thermique et la température a été observée pour les deux fractions volumiques (1 % et 4 %).

5.3.3.7. Le regroupement

Le regroupement correspond à la formation de particules de plus grande taille par agrégation des nanoparticules. Cet effet est toujours présent dans les nanofluides et constitue un paramètre influençant la conductivité thermique. Hong et al. ont étudié cet effet dans le cas d'un nanofluide Fe (10 nm)/éthylène glycol.

La conductivité thermique des nanofluides a été évaluée en fonction de la durée d'application des ultrasons, variant de 0 à 70 minutes, c'est-à-dire jusqu'à l'absence de traitement par vibration ultrasonique.

Il a été observé que le rapport de conductivité thermique augmente avec la durée d'application des vibrations, tandis que le taux d'augmentation devient de plus en plus faible lorsque le temps de vibration est prolongé. Par ailleurs, l'évolution de la conductivité thermique du nanofluide après l'arrêt des vibrations a également été étudiée, et il a été constaté qu'elle diminue progressivement avec le temps.

La variation de la taille moyenne des agglomérats a également été analysée en fonction du temps après l'application des vibrations, et il a été noté que cette taille augmente avec le temps.

À la suite de ces observations, il a été conclu que la taille des agglomérats formés par les nanoparticules exerce une influence déterminante sur la conductivité thermique. Par ailleurs, la variation du rapport de conductivité thermique du nanofluide Fe/éthylène glycol en fonction de la fraction volumique des particules a été jugée non linéaire. Ce comportement a été attribué au fait que, à des fractions volumiques élevées, les nanoparticules ont tendance à former des agglomérats plus importants.

Il convient également de noter que Zhu et al. ont étudié l'effet du regroupement des nanoparticules sur la conductivité thermique du nanofluide Fe_3O_4/eau et ont montré que l'agglomération ainsi que l'alignement des nanoparticules sont principalement responsables de l'amélioration anormale de la conductivité thermique.

5.3.3.8. La Valeur de pH

Le nombre d'études consacrées à l'effet du pH sur les nanofluides reste limité par rapport à celles portant sur d'autres paramètres. Xie et al. ont mesuré la conductivité thermique de nanofluides préparés par dispersion de nanoparticules d'Al_2O_3 dans l'eau, l'éthylène glycol et l'huile de pompe.

Ils ont observé une diminution significative du rapport de conductivité thermique lorsque la valeur du pH augmente. Il a également été constaté que le taux de variation de la conductivité thermique en fonction de la fraction volumique des particules dépend du pH.

L'amélioration de la conductivité thermique d'un nanofluide Al_2O_3/eau à 5 % a été de 23 % lorsque le pH est égal à 2,0, puis elle a diminué à 19 % lorsque le pH atteint 11,5. Les auteurs ont expliqué cette dépendance par le fait que, plus l'écart entre le point isoélectrique

des nanoparticules d'Al_2O_3 et le pH de la solution est important, plus la mobilité des nanoparticules augmente, ce qui renforce l'effet de micro-convection.

Wang et al. ont également étudié l'influence du pH sur la conductivité thermique des nanofluides. Ils ont considéré des nanofluides Cu/eau et Al_2O_3/eau, en utilisant le dodécylbenzène sulfonate de sodium comme agent dispersant. Ils ont identifié des valeurs optimales de pH, d'environ 8,0 pour Al_2O_3/eau et 9,5 pour Cu/eau, correspondant à une amélioration maximale de la conductivité thermique. Il convient également de noter que la conductivité thermique du fluide de base varie très peu avec le pH.

Les auteurs ont attribué ce phénomène au fait qu'à la valeur optimale du pH, la charge de surface des nanoparticules augmente, ce qui engendre des forces de répulsion entre elles. Cet effet limite l'agglomération excessive des nanoparticules, laquelle peut entraîner leur sédimentation et, par conséquent, réduire l'amélioration de la conductivité thermique.

Une autre étude portant sur l'influence du pH sur les nanofluides a été réalisée par Murshed et al.. Les auteurs ont examiné la conductivité thermique d'un nanofluide TiO_2/eau et ont observé une légère diminution de celle-ci avec l'augmentation du pH. Toutefois, cette variation reste peu significative, avec une réduction d'environ 2 % lorsque le pH passe de 3,4 à 9.

6. Conclusion

Il est difficile de comparer directement les différentes études expérimentales sur les nanofluides, car elles ont été réalisées avec des nanoparticules de tailles variées ainsi que des protocoles de préparation d'échantillons différents.

Par ailleurs, l'agglomération des particules ne permet pas d'évaluer de manière rigoureuse l'influence de leur taille sur l'augmentation de la conductivité thermique du fluide. Un meilleur contrôle des propriétés physico-chimiques de ces fluides serait donc nécessaire afin de les étudier de façon plus précise et de mieux comprendre leur comportement.

En conclusion, aucun modèle théorique unique ne permet à ce jour de prédire avec précision la conductivité thermique effective des nanofluides. Des recherches supplémentaires sont donc nécessaires afin de mieux comprendre leur comportement rhéologique. Les études futures devront prendre en compte plusieurs paramètres essentiels, notamment la taille et la forme des nanoparticules, les interactions particules–fluide, ainsi que la dépendance à la température et les mouvements aléatoires des particules.

CHAPITRE II : IMPACT DES NANOFLUIDES DANS LE DOMAINE PHARMACEUTIQUE

1. Introduction

Ce chapitre s'intéresse aux nanofluides en tant que plateformes émergentes pour la nanomédecine moderne, en particulier sous forme de nanosuspensions où des nanoparticules ou nanocomposites solides sont dispersés dans un milieu liquide biocompatible. Les avancées récentes en essais cliniques et en recherche biomédicale ont montré que ces systèmes offrent une large palette d'applications, allant du diagnostic à la thérapie, grâce à leur capacité à transporter des agents actifs, à moduler localement le transfert de chaleur et à interagir de façon contrôlée avec les tissus biologiques. Le terme « nanofluide » désigne ici des suspensions stables et homogènes qui assurent une bonne dispersion des nanoparticules, condition indispensable pour garantir des propriétés physiques et biologiques reproductibles et sûres.

Parmi les différentes formes de nanofluides, les nanosuspensions occupent une place centrale, car elles permettent d'incorporer des particules solides (métalliques, polymériques, céramiques ou hybrides) adaptées à des fonctions spécifiques, telles que le ciblage de tumeurs, la libération contrôlée de médicaments ou la génération de chaleur en hyperthermie. Ce chapitre propose ainsi une synthèse structurée des principales applications biologiques de ces nanofluides, en se concentrant sur trois axes majeurs : les systèmes d'administration de médicaments, les techniques d'imagerie et l'activité antibactérienne. Dans le cadre du drug delivery, les nanofluides offrent des vecteurs capables d'améliorer la solubilité et la biodisponibilité de nombreux principes actifs, de cibler sélectivement des sites pathologiques et de réduire les effets secondaires systémiques.

Les nanofluides magnétiques constituent un cas particulier particulièrement prometteur : en combinant des nanoparticules magnétiques à un fluide support, ils permettent, sous l'action d'un champ magnétique externe, de guider l'administration de médicaments vers une région donnée, de générer une hyperthermie contrôlée pour le traitement de tumeurs, ou encore d'améliorer le contraste en imagerie médicale. Par ailleurs, face à la montée de la résistance aux antibiotiques, l'activité antibactérienne de certains nanofluides (par exemple à base de nanoparticules d'argent, d'oxyde de zinc ou d'oxyde de cuivre) ouvre la voie à de nouvelles approches thérapeutiques, capables de perturber les membranes bactériennes ou de générer des espèces réactives de l'oxygène. En synthèse, l'exploration des nanofluides et des nanosuspensions dans ces différents contextes diagnostiques et thérapeutiques permet d'esquisser des stratégies innovantes pour une médecine plus ciblée, plus efficace et

potentiellement personnalisée, tout en mettant en lumière les perspectives et défis des recherches futures dans ce domaine.

2. Utilisation des nanofluides dans le domaine biomédical

Les nanofluides sont des émulsions ou des suspensions de nanoparticules (NP) dans des fluides, qui peuvent être utilisées pour améliorer directement le transfert de chaleur dans de nombreuses applications industrielles, les échangeurs de chaleur, les transports, l'électronique ainsi que la biomédecine et l'industrie agroalimentaire. [53]

L'utilisation des nanofluides en nanotechnologie biomédicale suscite un intérêt croissant; de ce fait, leurs propriétés physico-chimiques subissent de nombreuses modifications par rapport à leurs formes solides. Récemment, les applications biologiques des nanofluides ont été envisagées pour plusieurs usages, tels que l'administration de médicaments et les thérapies antibactériennes. [54]

De nombreux articles ont également été publiés sur les systèmes combinés utilisant des nanofluides, l'imagerie et le diagnostic (par exemple, administration de médicaments + imagerie, forte fièvre + imagerie), ou l'imagerie multimodale (par exemple, imagerie optique + IRM, TEP + IRM). [55]

Pour une application optimale et sûre des nanofluides, plusieurs exigences clés doivent être satisfaites. Ces exigences comprennent une bonne caractérisation de la composition, de la taille, de la cristallinité et de la morphologie. Par ailleurs, la stabilité, la non-agglomération et la biocompatibilité sont des propriétés essentielles. [55] Une grande partie des nanoparticules se disperse partiellement dans les solutions aqueuses. La stabilité de la dispersion dépend principalement de la composition, de la structure, de la taille et de la morphologie des nanoparticules. [56] Pour obtenir un nanofluide stable, plusieurs procédures peuvent être envisagées, notamment la synthèse de nanomatériaux, l'agitation physique, l'homogénéisation ultrasonique, l'ingénierie de surface, et l'utilisation de tensioactifs et d'autres additifs chimiques. [57] De plus, la sécurité médicale et l'approbation législative de ces additifs doivent être prises en compte. La plupart des études sur les nanofluides ont été menées sur les matériaux, la science des surfaces et la théorie des colloïdes. Par conséquent, de nombreuses propriétés des systèmes à base de nanoparticules ont été optimisées. Cependant, les applications biomédicales des nanofluides sont loin d'être simples en pratique et nécessitent un examen plus approfondi. [58-60]

Il existe peu de recherches de synthèse traitant exclusivement des applications biomédicales des nanofluides. Plusieurs articles ont passé en revue les vastes utilisations des

nanofluides dans de nombreux domaines. Parmi ces domaines, les applications biomédicales sont abordées de manière concise et générale. Wong et al. [61] ont brièvement mentionné certains travaux de recherche relatifs à chaque sous-catégorie d'applications diverses des nanofluides.

Wei et al. [62] ont uniquement indiqué l'activité antibactérienne et l'administration de médicaments. Certains auteurs ont consacré quelques paragraphes aux applications médicales des nanofluides. [63] On peut également trouver un autre article de synthèse, qui n'a pas décrit les applications biomédicales. [64] Conformément à la définition des nanofluides mentionnée précédemment, toutes les suspensions ou nanosuspensions contenant des nanoparticules ont été prises en compte, et les applications de ces fluides dans l'administration de médicaments et les traitements antibactériens et biomédicaux sont examinées dans ce chapitre. Ce chapitre présente des méthodes et des applications des nanofluides dans divers domaines biomédicaux.

3. Applications des nanofluides dans l'administration des médicaments

L'objectif principal de la conception d'un système d'administration de médicaments est de libérer le médicament de manière contrôlée au site souhaité. Les premières études sur les systèmes d'administration de médicaments portaient sur la cinétique de libération du médicament, la sensibilité au pH et à la température, les polymères, l'administration nasale et l'administration orale. [65] L'utilisation de nanomatériaux dans les systèmes d'administration de médicaments est un sujet qui a été étudié par de nombreux chercheurs ces dernières années.

Ces dernières années, ils présentent certains avantages, tels qu'une administration précise aux cellules cibles, des propriétés thérapeutiques et une sécurité accrues, une toxicité réduite et une bonne biocompatibilité. [14] Concernant le développement d'une formulation nanofluidique pour l'administration de médicaments, le système doit permettre un chargement et une libération optimaux du médicament, une durée de conservation prolongée et une bonne biocompatibilité. [67] Un aspect crucial des médicaments nanofluidiques est la charge des nanoparticules (NP) dans le fluide. La charge de surface des particules biologiques fondamentales du sang est presque négative, et les parois internes des vaisseaux sanguins sont chargées négativement. Ainsi, elles se repoussent mutuellement et les cellules sanguines ne s'agglomèrent pas dans les vaisseaux. [68] Par conséquent, les particules thérapeutiques doivent généralement être chargées négativement pour éviter l'agrégation.

L'opsonisation, processus mis en œuvre par les protéines opsonines, est un mécanisme essentiel qui aide les macrophages à se défendre contre les particules étrangères telles que les bactéries et les virus.

Dans le cas des vecteurs de nanomédicaments, une réduction de la biodisponibilité des médicaments nano-colloïdaux serait un problème. [69] Des efforts considérables ont été consacrés à la résolution de ces limitations, et plusieurs solutions ont été proposées. L'adsorption de polyéthylène glycol (PEG) sur les nanoparticules est la méthode la plus utilisée. [69] L'albumine, chargée négativement, est une autre molécule qui protège les nanoparticules de l'opsonisation. [70] Plusieurs systèmes d'administration colloïdale de médicaments (SACM) d'analgésiques ont montré une efficacité acceptable dans les études précliniques et cliniques. [70,71]

3.1. Administration magnétique des médicaments

Parmi les différents types de nanoparticules (NP), les NP magnétiques sont largement reconnues comme vecteurs de médicaments. Ceci est dû à la contrôlabilité de ces NP, à leur petite taille et à leurs propriétés de surface, qui permettent de diriger le vecteur vers l'emplacement souhaité grâce à un champ magnétique. Dans l'administration magnétique de médicaments, le sang joue le rôle de fluide principal, tandis que les NP magnétiques servent de vecteurs pour le médicament. Les NP magnétiques chargées de médicament sont injectées près de la tumeur, et grâce au gradient magnétique intense et concentré, la tumeur peut absorber le médicament. Cette méthode permet de réduire les effets secondaires de la chimiothérapie. Un autre avantage est la possibilité d'utiliser des doses plus élevées de médicaments anticancéreux, sans endommager les tissus sains environnants. [72-74]

L'une des méthodes les plus efficaces pour traiter le cancer est l'utilisation de NP magnétiques : un aimant est placé près de la tumeur, puis le médicament est injecté dans les vaisseaux les plus proches du site tumoral. La dynamique de ces nanoparticules peut être influencée par le mouvement péristaltique des ondes générées dans les parois asymétriques coniques du canal. L'analyse de l'écoulement du nanofluide, influencé par ce type de mouvement, peut grandement contribuer au traitement des tissus cancéreux. [73]

Les nanoparticules d'oxyde de fer superparamagnétiques (SPIO) sont les nanoparticules magnétiques les plus utilisées pour l'administration de médicaments magnétiques dans les applications cliniques. De nouvelles études ont mis en évidence de nombreuses applications des SPIO dans la détection, le dépistage et le traitement du cancer. [75,76]

Une étude a également été menée sur la biosynthèse verte de nanoparticules de magnétite superparamagnétiques Fe_3O_4 et leurs applications biomédicales dans les systèmes d'administration ciblée de médicaments anticancéreux. De plus, des exemples de nanoparticules à base de Fe_3O, utilisées comme vecteurs de médicaments anticancéreux dans

le traitement de différents types de lignées cellulaires cancéreuses avec divers médicaments anticancéreux, ont été rapportés ces dernières années. [77] Par ailleurs, en 2018, une nouvelle étude a rapporté l'amélioration des activités photodynamiques anticancéreuses de nanoparticules magnétiques multifonctionnelles (Fe_3O_4), conjuguées à la chlorin e6 et à l'acide folique, dans des cellules cancéreuses de la prostate et du sein. [78] Les SPIOs sont constituées d'un noyau d'oxyde de fer et d'une enveloppe comportant des groupes hydrophiles pour faciliter leur solubilité. Généralement, l'enveloppe peut être un acide gras, un polymère organique ou un polysaccharide. [79] Dans une étude de Pattayil et Kunnoth [80] en 2015, le médicament (curcumine) a été inséré dans une cavité de cyclodextrine β modifiée. La curcumine est l'un des médicaments bien connus pour le traitement du cancer, et en raison de sa faible solubilité dans l'eau, il est nécessaire d'utiliser un vecteur pour l'acheminer jusqu'au tissu cible.

La cyclodextrine β est un vecteur modifié adapté aux médicaments hydrophiles. [81] Dans une étude intéressante sur la dose thérapeutique, Lim et al. [82] ont développé des nanoparticules magnétiques (DMNP) sensibles au pH, destinées à l'administration de médicaments, en tant que nanovecteurs théranostiques. Ces nanovecteurs libèrent la doxorubicine (DOX) dans les conditions acides des cellules cancéreuses. Ils ont rapporté que la cinétique de libération du médicament par les DMNP, combinée au profil d'accumulation des nanoparticules dans les cellules tumorales, pouvait être suivie par imagerie par résonance magnétique (IRM) pour optimiser les schémas posologiques. Ainsi, les résultats de ces précieuses études pourraient être utilisés pour améliorer l'efficacité des médicaments et réduire leurs effets secondaires dans les systèmes d'administration de médicaments intelligents. [83]

3.2. Systèmes bio-microélectromécaniques et microfluidiques

Concernant l'application de la technologie microfluidique, les chercheurs ont étudié comment transférer et contrôler le flux. Les équipements microfluidiques comportent généralement des composants tels que des réservoirs, des canaux, des pompes, des vannes, des mélangeurs, des activateurs, des filtres ou des échangeurs de chaleur pour une administration de haute précision. L'une des applications des systèmes d'administration de nanomédicaments est de surveiller les réponses des cellules cibles aux stimuli médicamenteux ou de faciliter le processus de développement de médicaments. [61,66,84-88]

Dans ce cas, les nanoparticules sont en suspension dans une solution aqueuse dont la concentration et la température du solvant sont prédéterminées.

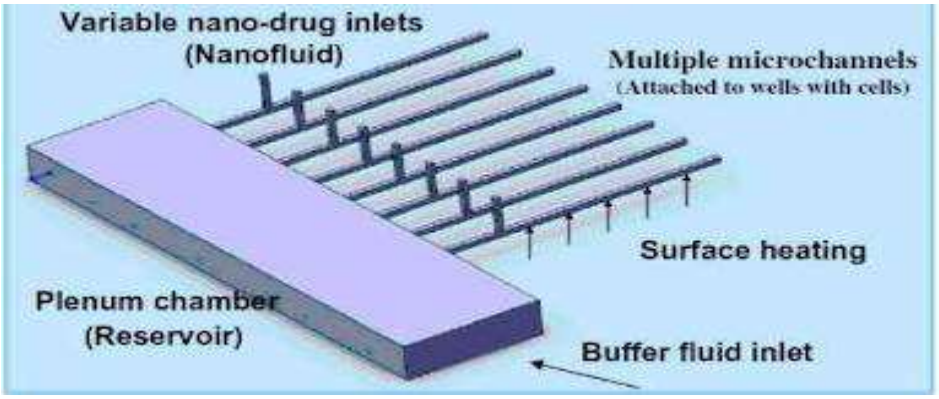


Figure 1. Système de nano-administration à huit micro-canaux [89]

Comme illustré sur la Figure 1, ces nanofluides sont acheminés vers les cellules vivantes par l'intermédiaire des microcanaux. Parmi les autres applications de ce dispositif microfluidique, on peut citer les tests pharmaceutiques et la réalisation d'analyses biomédicales à haute efficacité. [61,84-87]

La Figure 1 présente un réservoir destiné au stockage de la solution ou du liquide de nettoyage. Les microcanaux permettent de modifier la quantité de fluide entrant dans le site de test en ajustant leur résistance ou leur pression interne.

L'objectif principal est d'obtenir une concentration uniforme de nanodiscite à la sortie du microcanal. La présence d'un flux thermique approprié provenant de la paroi inférieure du microcanal garantit que le mélange médicament-fluide est délivré aux cellules vivantes à une température optimale (37 °C). L'intensité de ce flux thermique dépend de la vitesse du nanofluide et de celle du fluide de nettoyage. La présence de ce flux thermique a également un effet positif sur l'uniformité de la concentration du médicament. [89] En général, l'uniformité de la concentration du nanodiscite est influencée par certains facteurs tels que la longueur du canal, la taille des nanoparticules et le nombre de Reynolds correspondant à la source du nanofluide et aux microcanaux principaux. [89]

3.3. Nanocristaux et nanoparticules

Les nanocristaux sont des nanoparticules médicamenteuses sans support, dépourvues de toute autre molécule liée. Un nanofluide de nanocristaux est une suspension du médicament peu soluble (dans la plupart des cas) dans l'eau, ou dans un autre solvant, stabilisée par un tensioactif ou un stabilisant.

Les produits pharmaceutiques à base de nanocristaux sont disponibles sur le marché ; la rapamycine, l'aprépitant, le fénofibrate et le mégestrol sont quelques exemples de médicaments à base de nanocristaux. Les principaux avantages des nanocristaux sont l'amélioration de la solubilité, l'augmentation de la vitesse de dissolution, la solubilité à

saturation, la facilité d'utilisation et la biodisponibilité élevée. [90] Les nanoparticules de ZnO et leurs combinaisons sont particulièrement performantes dans les applications en nanobiotechnologie et en nanomédecine. La raison de ce problème réside dans l'état adéquat des électrons de la couche de valence des NP (avec de grands faisceaux). [91] Les NP de ZnO, grâce à leurs propriétés biologiques (antibactériennes, faible toxicité, blocage des UV), pourraient être utilisées dans le traitement du cancer, notamment du cancer du sein. [91] Dans certaines études, [92] les effets cytotoxiques des NP d'oxyde de zinc sur les cellules d'hépatome ont été étudiés. Il a également été démontré dans, [92-94] que le ZnO induisait des dommages supplémentaires au processus de division rapide des cellules cancéreuses.

Dans une étude menée par Abdolmohammadi et al. [93] en 2017, les effets cytotoxiques de deux types de nanomatériaux de ZnO sur la croissance de la lignée cellulaire MCF-7 dans le cancer du sein ont été étudiés. Les résultats de cette étude ont montré qu'avec l'augmentation des concentrations de NP de ZnO après 48 et 72 heures de traitement, le taux de survie des cellules MCF-7 dans le cancer du sein diminuait. Dotan et al. [95] ont mis au point une plateforme nanofluidique en conjuguant des nanotubes de carbone multi-parois (NTC) avec soit un anticorps spécifique de la thyroïde, soit l'hormone thyréostimulante. Le nanofluide a ciblé sélectivement et détruit in vitro les cellules cancéreuses papillaires de la thyroïde, avec un effet cytotoxique minimal sur les cellules non ciblées.

4. Applications thérapeutiques des nanofluides

Les nanofluides sont utilisés dans plusieurs approches thérapeutiques avancées, telles que l'hyperthermie, la cryochirurgie, l'ablation thermique et les traitements anticancéreux ciblés. Ces méthodes exploitent les propriétés thermiques, magnétiques et biologiques des nanoparticules afin de détruire sélectivement les tissus pathologiques.

4.1. Méthode d'hyperthermie

L'hyperthermie est une méthode de traitement du cancer. Le terme hyperthermie est dérivé des deux mots grecs, « hyper » et « thermie », qui signifient respectivement élévation et chaleur. [96] Les études montrent qu'un chauffage à une température comprise entre 41 et 46 °C, pendant au moins 20 à 60 minutes, arrête la croissance des cellules cancéreuses. [97,98] La méthode d'hyperthermie présente certains inconvénients, tels que la distribution hétérogène de la température au sein de la masse tumorale et l'impossibilité d'éviter la surchauffe dans les tumeurs profondes.

Par conséquent, afin de répondre au besoin d'une solution appropriée pour surmonter ces problèmes, les scientifiques ont proposé l'utilisation de nanoparticules magnétiques. Grâce à ces nanoparticules, la chaleur peut être diffusée uniformément par cette méthode, appelée MNFHT (hyperthermie par nanofluide magnétique). De plus, le contrôle de la distribution de chaleur et de la température est essentiel dans cette approche thérapeutique. [99,100]

Pour exprimer la distribution d'énergie, le DAS (Débit d'Absorption Spécifique) a été utilisé. Son unité est le W/m^3 ou le W/g. [86] Ce nombre indique le pouvoir des nanoparticules magnétiques à éliminer les cellules cancéreuses, mesuré par de nombreux capteurs de température placés dans le gel d'agarose.

Dans une étude de Salloum et al. [100] en 2007, des nanofluides ont été injectés dans un gel d'agarose pour étudier leur mouvement dans le tissu extracellulaire. Cette recherche a été menée in vitro, et le gel d'agarose a été utilisé comme équivalent tissulaire. [101] L'objectif de cette étude était de fournir une méthode de chauffage tumoral contrôlé ; il a été démontré que, si la distribution du nanofluide au sein du gel était sphérique, cet objectif pouvait être atteint. Dans les tumeurs présentant une géométrie inhabituelle, la méthode d'injections multiples a été proposée pour obtenir une augmentation uniforme de la température tumorale. [100]

Selon les études, la géométrie cubique des nanoparticules (NP) présente un DAS (débit d'absorption spécifique) supérieur à celui des autres formes (sphérique, bâtonnet, étoile, polyèdre et cône). [101]

Les valeurs du DAS sont influencées par plusieurs facteurs, tels que la taille et la forme des NP, la température, la fréquence de variation du champ magnétique et l'intensité du champ magnétique. [97,101] Un facteur important déterminant l'efficacité des NP magnétiques est leur taille. La petite taille des NP présente plusieurs avantages, notamment des états ultraparamagnétiques (ultramagnétiques) des NP, une meilleure dispersion, une meilleure distribution de la chaleur, la prévention de l'agglomération et une augmentation du DAS. Malgré ces avantages, si la taille des nanoparticules est inférieure à la taille habituelle (2 à 5 nm), leurs performances seraient réduites. [101] En 2005, des chercheurs ont rapporté que les nanoparticules superparamagnétiques (de 10 à 40 nm) étaient adaptées aux applications cliniques, en raison de leur capacité à générer une chaleur importante et une variation de basse fréquence. [102]

4.2. Hyperthermie par fluide magnétique

L'hyperthermie par fluide magnétique consiste en l'exposition sélective à la chaleur du tissu ciblé à l'aide de nanoparticules magnétiques en présence d'un champ magnétique

externe. [103] Dans une étude menée par Salloum et al. [104] sur des souris de laboratoire en 2008, le taux d'augmentation de la température dans les tissus animaux pendant l'hyperthermie a été étudié à l'aide de nanoparticules magnétiques. Dans cette recherche, deux paramètres critiques de l'hyperthermie magnétique ont été mentionnés : le débit de perfusion sanguine et la quantité de nanofluide administrée au tissu. [104]

Les nanotubes de carbone (NTC) pourraient être utilisés sous l'influence d'un champ magnétique pour traiter les cellules cancéreuses. Dans les travaux de recherche connexes, les nanoparticules sont injectées dans les vaisseaux sanguins proches de la tumeur, et un aimant est placé à proximité de celle-ci. [105,106]

Un système d'administration contrôlée de médicaments a été développé, avec des microsphères magnétiques de PLGA (poly(acide lactique-co-glycolique)) chargées de doxorubicine, pour l'inhibition de la croissance tumorale dans le cancer du sein [107] (Figure 2).

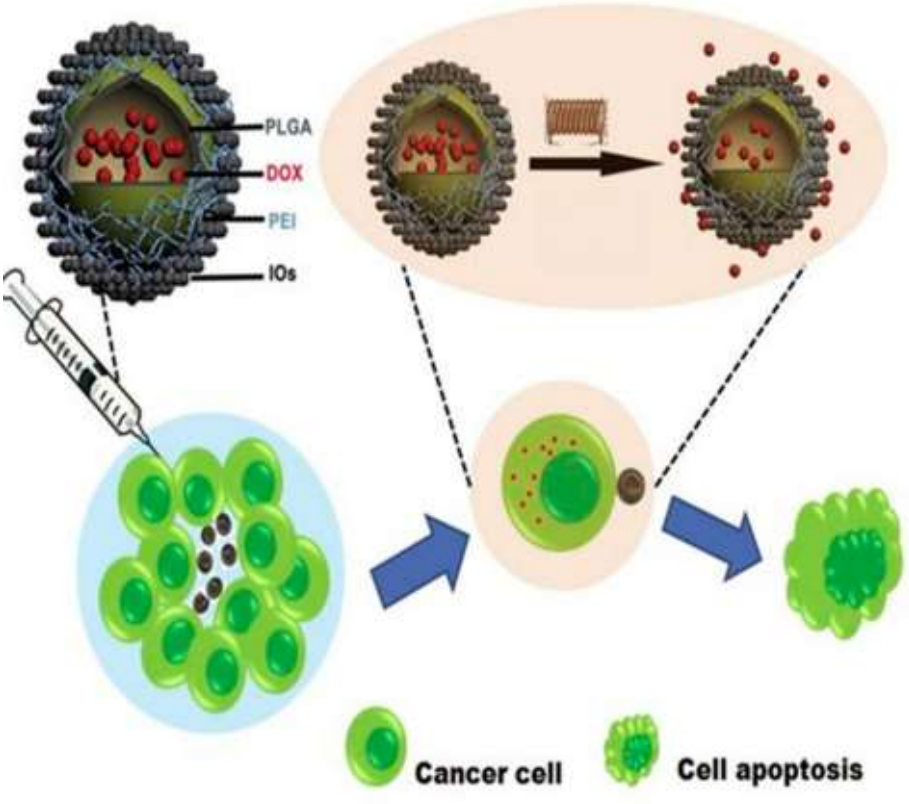


Figure 2 Représentation de la réponse des microsphères creuses magnétiques PLGA à la modification du champ magnétique [107]

4.3. Nano-cryochirurgie

La cryochirurgie est l'une des méthodes les plus efficaces pour le traitement et le contrôle complets des cellules tumorales. Cette méthode utilise de l'azote liquide ou du

dioxyde de carbone solide. La création d'un froid extrême provoque la formation de cristaux de glace, et ainsi, la membrane de la cellule ciblée peut être rompue par déshydratation. [87,108]

Cependant, cette méthode présente certains inconvénients, tels qu'une congélation inappropriée, susceptible d'endommager les tissus sains environnants. Le tissu tumoral est chargé de nanoparticules hautement conductrices afin d'améliorer la capacité de congélation. [86,87,108] Certains chercheurs ont étudié la toxicité des nanoparticules et leurs effets sur les tissus sains. Ces recherches ont permis de constater que les nanoparticules d'Al_2O_3, de Fe_3O_4 et d'Au sont biocompatibles, ce qui pourrait permettre de les utiliser largement dans des applications médicales. [80,81,88,89] Il a également été démontré que les nanoparticules d'Au présentent la plus grande efficacité de congélation parmi tous les types de nanoparticules utilisés, produisant une taille maximale de boule de glace. Outre l'augmentation de la vitesse de congélation, la présence de nanoparticules pourrait également contrôler la taille et la croissance des cristaux de glace formés pendant le processus de congélation.

Cette propriété permet la destruction des tissus malins indésirables avec un minimum de dommages aux tissus sains environnants. [87] La variation des types et des dosages de solutions de nanoparticules pourrait jouer divers rôles dans le processus de congélation et conduire à une efficacité de congélation différente. Par conséquent, la sélection des nanoparticules et l'optimisation de la dose de suspension de nanoparticules constitueraient des enjeux importants pour les travaux de recherche futurs. [109]

4.4. Nanofluides magnétiques pour le traitement de l'anémie

L'une des conditions préalables à l'utilisation de nanoparticules d'oxyde de fer magnétiques en applications médicales est leur stabilité à l'interface fluide. [94] Dans les travaux de recherche de Vazhnichaya et al. [110] en 2015, ils ont obtenu un nanofluide contenant des nanoparticules magnétiques stabilisées, présentant des propriétés anti-anémiques. La stabilisation de ces nanoparticules a été réalisée à l'aide de PVP (polyvinylpyrrolidine) et de Mexidol (succinate de 2-éthyl-6-méthyl-3-hydroxypyridine). Ils ont ensuite testé le matériau sur des animaux de laboratoire (109 souris albinos mâles) dans des conditions appropriées, après une importante perte de sang. Les résultats de cette étude ont indiqué que le nanofluide stimulait la production de globules rouges, et d'hémoglobine et d'hématocrite, chez les animaux sains. En cas d'anémie sévère consécutive à une perte de sang, le nanofluide contribue à compenser cette perte et à augmenter le nombre de réticulocytes. Ce nanofluide stimule l'érythropoïèse chez les animaux intacts et active la réaction régénératrice de l'érythron en cas d'anémie due à une perte de sang.

4.5. Ablation par radiofréquence

L'ablation par radiofréquence (ARF) est une technique médicale dans laquelle les ondes radio de courte longueur d'onde (350 à 500 kHz) génèrent une forte chaleur dans le tissu ciblé. Concrètement, cette méthode consiste à introduire une électrode d'ablation dans le tissu tumoral, puis à y faire augmenter la température sous l'effet des ondes générées par les électrodes. Le tissu environnant, généralement le tissu tumoral, est alors chauffé, ce qui entraîne sa destruction. Si la chaleur produite est suffisante, le tissu tumoral disparaît en quelques minutes. [111,112] Dans une étude de Wu et al. [112] l'application de nanoparticules de fer (nanoparticules de fer enrobées de carbone) a été étudiée par la méthode ARF. Les résultats de la recherche ont montré que l'utilisation d'un nanofluide entraînait une augmentation de 41 % de la conductivité thermique. [112]

5. Applications en diagnostic

Les nanofluides occupent une place croissante en diagnostic médical, car ils permettent d'améliorer la sensibilité et la précision de nombreux outils d'imagerie et de détection. En incorporant des nanoparticules (métalliques, magnétiques ou fluorescentes) dans un fluide biocompatible, on obtient des agents de contraste ou des sondes capables de cibler sélectivement certains tissus, cellules ou biomarqueurs.

Ces nanofluides peuvent par exemple renforcer le contraste en IRM (nanoparticules magnétiques), en imagerie optique ou en tomographie, facilitant la détection précoce de tumeurs ou de lésions. Dans les biocapteurs, la présence de nanoparticules augmente souvent la réponse optique ou électrochimique, ce qui permet de détecter des concentrations très faibles de molécules (protéines, ADN, marqueurs inflammatoires). Ainsi, l'usage des nanofluides en diagnostic ouvre la voie à des méthodes plus sensibles, plus ciblées et potentiellement plus rapides pour le dépistage et le suivi des pathologies.

L'une des applications les plus intéressantes des nanomatériaux en médecine diagnostique est leur utilisation en imagerie par résonance magnétique (IRM). L'utilisation de nanoparticules magnétiques améliore le contraste et la sensibilité en IRM (Figure 3). Les nanoparticules superparamagnétiques (SPMNP) constituent l'un des meilleurs choix pour améliorer le contraste en IRM. Ces agents peuvent être composés d'oxydes de fer, d'or et de nanoparticules de gadolinium. [113] Les SPMNP sont composées d'un noyau d'oxyde de fer et d'une matrice polymère, qui leur confèrent une stabilité colloïdale ; le noyau peut également contenir un composite Fe/Mn.

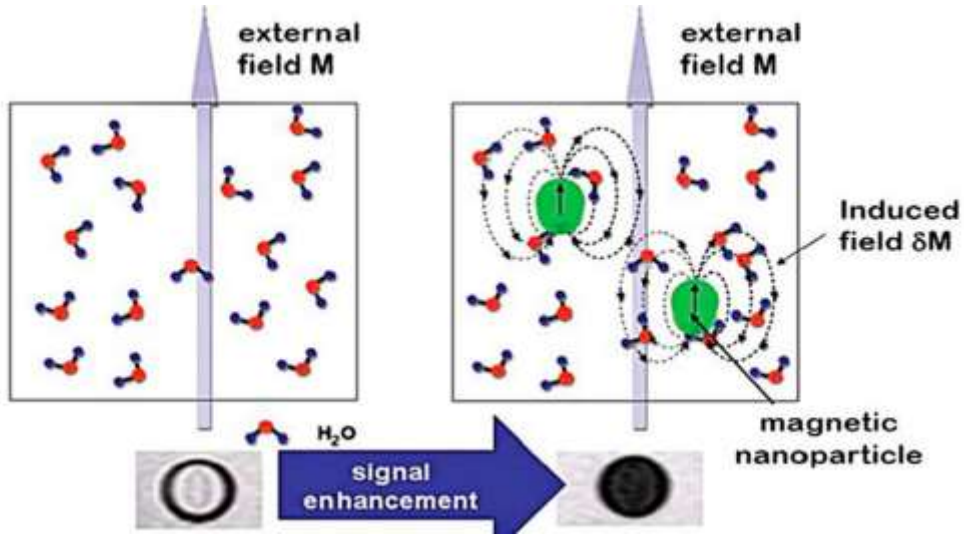


Figure 3. Effet de contraste magnétique des nanoparticules magnétiques dans l'eau ; le champ magnétique induit un assombrissement de l'image de résonance magnétique. [113]

Des agents de contraste magnétiques injectables ont été approuvés par la Food and Drug Administration (FDA) américaine et l'Agence européenne des médicaments (EMA). Les agents de contraste à base de gadolinium sont fréquemment utilisés en IRM. [114] En raison des problèmes de toxicité du gadolinium, notamment chez les patients souffrant d'insuffisance rénale, son utilisation présente certaines limitations. [113]

Du point de vue de leur application, les agents de contraste pour IRM peuvent être classés en trois groupes : les agents de contraste extracellulaires (également appelés agents de contraste intraveineux), les agents de contraste intravasculaires (également appelés agents de contraste sanguins) et les agents ciblés. Certains agents de contraste pour IRM sont administrés par voie orale, et certaines formulations ont été développées pour l'injection intraveineuse. [113,115]

La sécurité et la tolérance des produits de contraste sont des facteurs importants. Un bon agent de contraste doit être biologiquement et chimiquement inerte et être complètement éliminé de l'organisme sans aucun effet secondaire ni réaction indésirable. [115,116] De nombreux agents de contraste de ce type sont disponibles sur le marché et sont utilisés régulièrement. [117,118]

Le ciblage des agents de contraste entraîne une forte accumulation de ces agents au niveau des sites cibles. L'IRM ciblée permet, une forte accumulation d'agents de contraste au niveau de la zone souhaitée conduit à un diagnostic précis. Les agents de ciblage se fixent généralement aux anticorps spécifiques du tissu présents sur l'organe cible.

La plupart des agents de contraste ciblés ont été utilisés pour l'imagerie hépatique. [119] Les agents de contraste ciblés à base d'oxyde de fer superparamagnétique et de liposomes sont

disponibles dans le commerce. [120] À cet égard, les nanoparticules de Fe_3O_4-dextran (Fe_3O_4 recouvert d'un revêtement de dextrane oxydé) ont été utilisées pour créer du contraste en imagerie IRM. Ces nanoparticules présentent des propriétés importantes telles qu'une bonne stabilité, une biocompatibilité, une bioconjugaison et une faible cytotoxicité. [121] Huang et al. [122] ont présenté les images IRM de cellules cancéreuses, auxquelles ont été ajoutées des nanoparticules de Fe_3O_4-dextran (avec différents titres d'anticorps), à différentes concentrations. Avec une augmentation de la concentration en fer de 0,75 mM à 1,15 mM, l'image des cellules cancéreuses s'est assombrie, indiquant que la présence de nanoparticules (NP) augmentait le contraste de l'IRM. De même, avec une augmentation de la taille du noyau des nanoparticules, à concentration constante, les images se sont assombries de NP5 à NP15. Les images ont été acquises selon deux modes, avec et sans anticorps. Ces nanofluides sont également adaptés à des applications telles que l'administration de médicaments, l'hyperthermie magnétique et la bioséparation magnétique à haute efficacité.

6. Applications antibactériennes

En raison de l'utilisation excessive des produits antibactériens courants, des souches résistantes de pathogènes apparaissent de jour en jour. D'où la nécessité de développer de nouvelles solutions pour contrôler les pathogènes résistants. Ces dernières années, plusieurs suspensions de nanoparticules organiques et inorganiques ont démontré des propriétés antibactériennes. [123]

6.1. Nanofluides métalliques et d'oxydes métalliques

Les agents antibactériens jouent un rôle essentiel dans l'industrie, notamment pour la désinfection de l'eau, dans l'industrie textile, le secteur médical et l'emballage alimentaire. [124-126] Parmi les différents types de nanoparticules d'oxyde métallique, l'oxyde de zinc (ZnO) possède une capacité significative à inhiber la croissance bactérienne chez un large éventail de bactéries. [126,127] L'activité antibactérienne des nanofluides de ZnO, inoffensifs pour les cellules humaines, a été particulièrement étudiée par rapport à d'autres nanofluides. [128] Des études morphologiques de la paroi cellulaire bactérienne, traitée avec des nanoparticules de ZnO, réalisées par microscopie électronique à balayage (MEB) et à balayage à émission de champ (MEB-FEG), ont mis en évidence plusieurs aspects de la toxicité du ZnO (ces nanoparticules endommagent la paroi cellulaire bactérienne). La création d'espèces réactives de l'oxygène (ERO) et la libération d'ions antibactériens, principalement Zn^{2+}, sont d'autres aspects de la toxicité du ZnO. [129] L'utilisation de dispersants tels que le polyéthylène glycol

(PEG), de défloculants contenant du silicate de sodium ou du carbonate de sodium a amélioré la stabilité des nanofluides de ZnO. [129,130]

De plus, les nanoparticules de TiO_2 et de SiO_2 présentent des propriétés antibactériennes similaires à celles du ZnO_2. Cependant, les propriétés antibactériennes du ZnO sont supérieures à celles du TiO_2 et du SiO_2. [126] L'illumination par la lumière UV entraîne la production d'espèces réactives de l'oxygène (ERO) et un effet antibactérien accru. Ces trois nanoparticules sont photosensibles, tandis que le TiO_2 a été utilisé dans les systèmes de désinfection de l'eau. [131] De plus, les nanomatériaux MgO et $Mg(OH)_2$ ont suscité un vif intérêt au fil des ans, en raison de leurs applications dans le domaine pharmaceutique. [132] Il a été rapporté que les nanomatériaux $Mg(OH)_2$ ont un effet antibactérien significatif sur E. coli, B. phytofirmans et d'autres bactéries. [133] Dong et al. [133] ont indiqué que le mécanisme antibactérien des nanoparticules de $Mg(OH)_2$ serait très différent de celui des composés à base de métaux ; l'accumulation d'ions OH^- dans les cellules bactériennes augmente le pH jusqu'à 10, ce qui entraîne la mort des bactéries. De plus, les nanoparticules de MgO sont un agent bactéricide efficace contre les pathogènes d'origine alimentaire, notamment E. coli et Salmonella Stanley. [134] Lueng et al. [135] ont rapporté que la toxicité du nanofluide de MgO envers E. coli pouvait se produire en l'absence de production d'espèces réactives de l'oxygène (ROS) et de stress oxydatif. Ils ont donc proposé une nouvelle théorie sur le mécanisme de toxicité du MgO, impliquant la détérioration de la membrane cellulaire sans peroxydation lipidique.

Les activités antibactériennes des nanoparticules de Cu et de CuO ont été démontrées contre un large spectre de bactéries Gram-positives et Gram-négatives. [136-139] L'activité antibactérienne dépend de la taille des nanoparticules et de leur température de synthèse. Plus les nanoparticules de CuO sont petites, plus leur activité antibactérienne est importante. Les nanoparticules de CuO peuvent traverser la paroi cellulaire bactérienne. [139] On suppose que ces nanoparticules se lient aux enzymes cellulaires et bloquent les activités vitales de la cellule. [137,140] Les nanoparticules de CuO ne présentent pas de cytotoxicité significative sur les lignées cellulaires HeLa. [137] Il semble donc que les nanoparticules de CuO ne puissent pas pénétrer dans les cellules eucaryotes via la membrane cytoplasmique.

L'argent et ses composés sont utilisés depuis des siècles pour la cicatrisation des plaies et des brûlures, ainsi que pour la désinfection de l'eau. Avec le développement d'une nouvelle génération d'antibiotiques, l'utilisation des composés à base d'argent a été limitée. L'avènement des nanotechnologies au cours des dernières décennies a suscité un regain d'intérêt pour l'utilisation antibactérienne de l'argent nanométrique. [141] En raison de la

cytotoxicité et de la toxicité environnementale des nanomatériaux d'argent, et de leurs effets indésirables potentiels, de nombreuses recherches ont été menées sur la toxicité de l'argent. Les nanoparticules d'argent (NPs) présentent une large gamme de mécanismes de toxicité, principalement la perturbation de la fonction mitochondriale par altération de la perméabilité de la membrane mitochondriale.

De plus, les NPs d'argent induisent des réponses inflammatoires dues à la production d'espèces réactives de l'oxygène (ROS). [142] Compte tenu de cette large gamme de mécanismes de toxicité, l'émergence de souches résistantes semble improbable. [143] Par ailleurs, les NPs d'or sont reconnues comme un nanomatériau biocompatible et relativement peu cytotoxique, aux applications variées. L'activité antibactérienne des NPs d'or n'est pas liée à la production de ROS. Selon Cui et al., [144] cette activité repose généralement sur deux mécanismes : l'inhibition de la synthèse d'ATP par modification du potentiel membranaire et l'inhibition de la liaison de l'ARNt au ribosome.

Au vu de ces explications, en application biomédicale, il convient de garder à l'esprit que les NPs métalliques présentent certains inconvénients, notamment des problèmes de biocompatibilité, de stabilité et d'élimination par l'organisme. Pour les nanoparticules métalliques et d'oxydes métalliques, les problèmes de solubilité sont également importants. La libération d'ions métalliques à partir de nanoparticules dissoutes est liée à la toxicité observée. Les caractéristiques biologiques des nanoparticules sont fortement corrélées à leur nature et à leur structure. Par conséquent, la prise en compte de modifications telles que la modification de surface et le contrôle artificiel de leur taille et de leur forme permet de réduire leur toxicité et d'améliorer leur biocompatibilité.

6.2. Nanoparticules composites

Dans d'autres études, afin de produire une nanoparticule magnétique combinée présentant une stabilité colloïdale améliorée et des propriétés antibactériennes appropriées, l'oxyde de zinc a été combiné à de l'oxyde de fer.

L'efficacité antibactérienne de ces nanoparticules a été testée sur deux types de bactéries : Staphylococcus aureus et Escherichia coli. [145,146] Les résultats de ces études ont indiqué que les propriétés antibactériennes de ce composé étaient proportionnelles au rapport pondéral [Zn]/[Fe] ; ainsi, plus le rapport était élevé, plus l'activité antibactérienne était importante. [146] Il a également été démontré que les particules de ZnO présentaient l'activité antibactérienne la plus élevée contre E. coli. Alors que la combinaison d'oxyde de zinc et d'oxyde de fer, avec un rapport pondéral [Zn]/[Fe] supérieur à 1:1, a démontré un excellent

effet antibactérien sur Staphylococcus aureus. [146] En 2018, des chercheurs ont évalué l'influence d'un nanofluide trimétallique à base d'Au/Pt/Ag sur différentes souches bactériennes et ont montré que ce nanofluide trimétallique était plus efficace que les nanofluides monométalliques à base d'or et bimétalliques Au/Pt [147] (Figure 4).

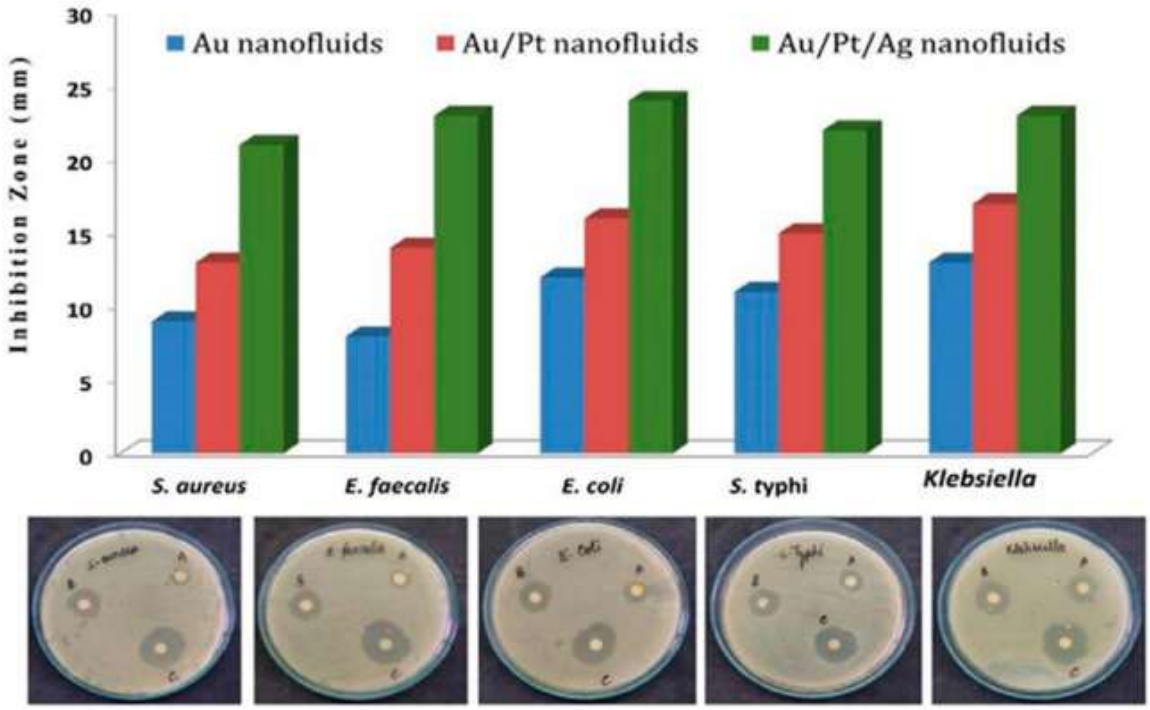


Figure 4. Résultats du traitement par nanofluide trimétallique à base d'Au/Pt/Ag pour une réponse antibactérienne améliorée ; « A », « B » et « C » sur les plaques de gélose correspondent respectivement aux nanofluides Au, Au/Pt et Au/Pt/Ag. [147]

De plus, un nanofluide Fe_3O_4/acide oléique a été proposé comme agent de libération contrôlée pour divers composés. [148] Le rôle de Fe_3O_4/acide oléique dans le transport d'antibiotiques céphalosporines et l'activité antibactérienne du nanofluide ont été démontrés sur des cultures de S. aureus et d'E. coli. [138]

7. Autres applications des nanofluides

7.1. Nanofluides dans les pansements

Les infections cutanées excessives sont fréquentes pendant le traitement ; par conséquent, un pansement approprié est essentiel. Anghel et al. [149], en 2013, ont étudié l'utilisation d'un nanofluide de fer dans les pansements pour prévenir la colonisation par Candida albicans et la formation de biofilm. Les nanoparticules utilisées étaient une combinaison de nanoparticules magnétiques actives, telles que l'oxyde de fer, et les pansements étaient immergés dans ce nanofluide. Cette étude a démontré que la combinaison des propriétés uniques des nanoparticules d'oxyde de fer et de l'huile de Satureja hortensis

permettait d'obtenir un nouveau produit, prévenant la formation de biofilms et la prolifération de champignons sur diverses surfaces d'équipements médicaux et cliniques.

7.2. Cryoconservation

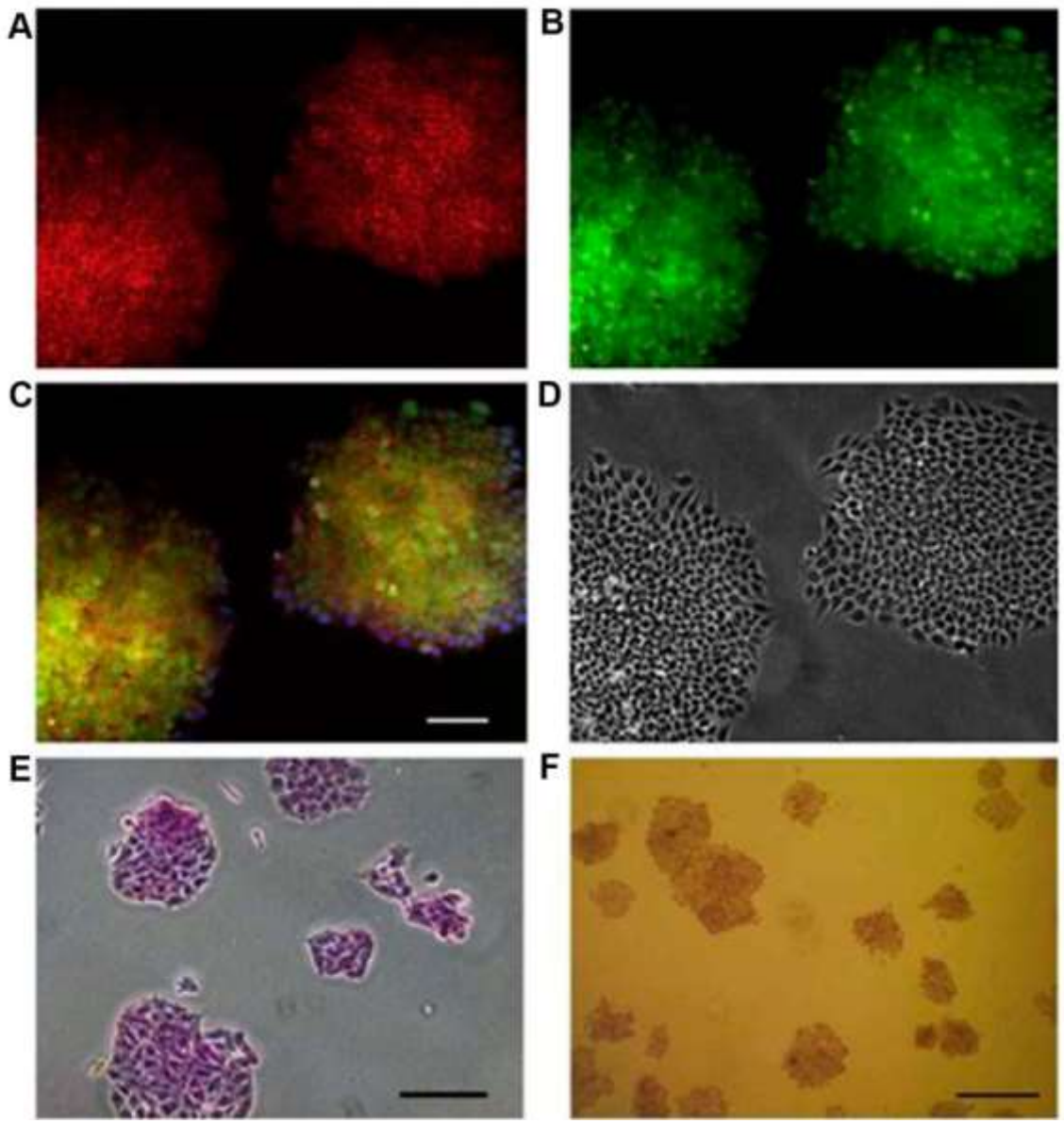


Figure 5. Les micrographies de fluorescence montrent une forte coloration de la glycoprotéine de surface SSEA-1 (A) et l'activité transcriptionnelle d'Oct-4, mise en évidence par l'expression de la GFP (B).(C) La superposition des canaux rouge et vert indique une co-expression importante des deux marqueurs et une coloration nucléaire au DAPI (bleu). L'image en contraste de phase montre des cellules présentant un rapport noyau/cytoplasme élevé et une formation de colonies compactes, caractéristiques des cellules ES pluripotentes (D). La coloration histochimique révèle une forte expression de la phosphatase alcaline à un grossissement de 10× (E), qui est bien distribuée au sein de chaque colonie, comme observé à un grossissement inférieur de 4× (F). [150]

He et al. [150] ont mis au point un système de microcapillaires en quartz pour une vitrification ultra-rapide innovante de cellules de mammifères. Les résultats de leur étude indiquent que la vitrification à faible concentration de cryoprotecteurs intracellulaires serait une approche viable et efficace pour la cryoconservation des cellules souches embryonnaires murines.

Les méthodes de vitrification traditionnelles utilisent généralement des concentrations très élevées de cryoprotecteurs (souvent supérieures à 4 M), souvent toxiques. Dans cette étude, la concentration de cryoprotecteur était de 2 M, identique à celle généralement utilisée pour les méthodes traditionnelles de congélation lente. Ce protocole présente donc simultanément les avantages des méthodes classiques de congélation lente et des méthodes de refroidissement rapide.

Cette méthode a permis la vitrification de cellules souches embryonnaires (ES) murines avec un taux de viabilité similaire à celui des cellules témoins non congelées. La préservation des propriétés indifférenciées des cellules souches embryonnaires (ES) murines pluripotentes post-vitrification a été vérifiée par l'expression de trois protéines différentes, dont le facteur de transcription Oct-4, la glycoprotéine membranaire SSEA-1 et la phosphatase alcaline. La figure 5 représente l'analyse par immunofluorescence et histochimique des cellules ES pluripotentes après vitrification.

8. Conclusion

Parmi la grande variété d'applications des nanofluides, on peut citer leur utilisation dans les domaines médical et biomédical. Cette étude passe en revue les applications des nanofluides en suspension dans l'administration de médicaments, les traitements médicaux, le diagnostic des maladies, les applications antibactériennes, les pansements et la cryoconservation. Dans le domaine de l'administration de médicaments, l'objectif principal a été la prévention de l'agrégation et la stabilité à long terme. La réduction de la biodisponibilité des médicaments nano-colloïdauxa fait l'objet de nombreuses recherches, et de nombreuses études ont été menées à ce sujet.

Les nanocristaux, les nanotubes de carbone (NTC), l'or, l'oxyde de zinc (ZnO) et les nanoparticules magnétiques ont été utilisés pour leurs propriétés spécifiques. L'hyperthermie à base de nanoparticules magnétiques a été utilisée pour chauffer le tissu tumoral, détruire les cellules tumorales, ou les rendre plus sensibles à l'effet des médicaments anticancéreux et des radiations. Les nanofluides augmentent la destruction du tissu tumoral en améliorant la conductivité thermique. Pour l'administration de médicaments, en particulier aux cellules

cancéreuses, seuls quelques types de nanofluides ont été testés. Par conséquent, d'autres types de nanofluides magnétiques sont recommandés afin d'obtenir des résultats potentiellement intéressants pour chaque type de maladie et de cancer.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

[1]	Choi S.U.S, Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles, Developments and Applications of Non-Newtonian Flows, FED-vol 231/MD-vol 66(1995), pp: 99–105.
[2]	Journal of Nanomaterials Volume 2012 (2012), Article ID 435873, 17 pages doi:10.1155/2012/435873
[3]	S. Lee, S. U.-S. Choi, Application of metallic nanoparticle suspensions in advanced cooling systems, ASME Pub. PVP-Vol. 342/MD-Vol. 72, 1996, pp. 227-234
[4]	Q. Li, Y. Xuan, Convective heat transfer performances of fluids with nano-particles, Proc. 12t Int. Heat Transfer Conference, Grenoble, France, 2002, pp. 483-488
[5]	K. Azar, Cooling technology options, Parts 1 & 2, Electronics Cooling, Vol. 9, No. 3, 2003, pp. 10-14 & Vol. 9, No. 4, 2003, pp. 30-36
[6]	G. Roy, C.T. Nguyen, M. Comeau, Electronic component cooling enhancement using nanofluid in a radial flow cooling system, J. of Enhanced Heat Transfer, Vol. 13 (2), 2006, pp.101-115
[7]	http://thesesups.ups-tlse.fr/1054/1/Bachir_Glades.pdf. (Avril 2026)
[8]	http://etd.lib.metu.edu.tr/upload/12611862/index.pdf. (Avril 2018)
[9]	Eastman, J. A., Choi, S. U. S., Li, S., Yu, W., and Thompson, L. J., 2001, "Anomalously Increased Effective Thermal Conductivities of Ethylene Glycol-Based Nanofluids
[10]	http://etd.lib.metu.edu.tr/upload/12611862/index.pdf. (Novembre 2018)
[11]	http://bu.umbb.dz/ressources-electroniq/theses-n/Genie%20mecanique/MAOUASSIAMMAR.pdf (Avril 2018)
[12]	http://link.springer.com.www.sndl1.arn.dz/article/10.1007/s10765-012-1208-y (Avril2018)
[13]	X. Feng, H. Ma, S. Huang et al., "Aqueous-organic phasetransfer of highly stable gold, silver, and platinum nanoparticles and new route for fabrication of gold nanofilms at the oil/water interface and on solid supports," Journal of Physical Chemistry B, vol. 110, no.
[14]	Y. Li, J. Zhou, S. Tung, E. Schneider, and S. Xi, "A review on development of nanofluid preparation and characterization," Powder Technology, vol. 196, no. 2, pp. 89–101, 2009.
[15]	C. H. Lo, T. T. Tsung, and L. C. Chen, "Shape-controlled synthesis of Cu-based nanofluid using submerged arc nanoparticle synthesis system (SANSS)," Journal of Crystal Growth, vol. 277, no. 1–4, pp. 636–642, 2005.
[16]	C. H. Lo, T. T. Tsung, L. C. Chen, C. H. Su, and H. M. Lin, "Fabrication of copper oxide nanofluid using submerged arc nanoparticle synthesis system (SANSS)," Journal of Nanoparticle Research, vol. 7, no. 2-3, pp. 313–320, 2005.
[17]	W. Yu, H. Xie, X. Wang, and X. Wang, "Highly efficient method for preparing homogeneous and stable colloids containing graphene oxide," Nanoscale Research Letters, vol. 6, p. 47, 2011.
[18]	H. T. Zhu, C. Y. Zhang, Y. M. Tang, and J. X. Wang, "Novel synthesis and thermal conductivity of CuO nanofluid," Journal of Physical Chemistry C, vol. 111, no. 4, pp. 1646– 1650, 2007.
[19]	X. Feng, H. Ma, S. Huang et al., "Aqueous-organic phasetransfer of highly stable gold, silver, and platinum nanoparticles and new route for fabrication of gold nanofilms at the oil/water interface and on solid supports," Journal of Physical Chemistry B, vol. 110, no. 25, pp. 12311–12317, 2006.

BIBLIOGRAPHIE

[20]	W. Yu, H. Xie, L. Chen, and Y. Li, "Enhancement of thermal conductivity of kerosene-based Fe3O4 nanofluids prepared via phase-transfer method," Colloids and Surfaces A, vol. 355, no. 1–3, pp. 109–113, 2010.
[21]	L. Wang and J. Fan, "Nanofluids research: key issues," Nanoscale Research Letters, vol. 5, no. 8, pp. 1241–1252, 2010.
[22]	Tzeng S.C, C.W Lin and K.D Huang, Heat Transfer Enhancement of Nanofluids in Rotary Blade Coupling of Four-Wheel-Drive Vehicles. Ac ta Mechanic a 179(2005): 11-23.
[23]	Zhang Z and Q Que, Synthesis, Structure and Lubricating Properties of Dialkyidithiophosphate-Modified Mo-S Compound Nanoclusters, Wear 209(1997): 8-12.
[24]	Tsai C.Y, H.T Chien, P.P Ding, B Chan, T.Y Luh, P.H Chen, Effect of structural character of gold nanoparticles in nanofluid on heat pipe thermal performance, Material Letters 58(2004) 1461– 1465.
[25]	MaH.B, C Wilson, B Borgmeyer, K Park, Q Yu, S.U.S Choi , M Tirumala, Effect of nanofluid on the heat transport capability in an oscillating heat pipe, Applied Physics Letters 88 (14) (2006) 143116.
[26]	You S.M, J.H Kim and K.H Kim, Effect of Nanoparticles on Critical Heat Flux of Water in Pool Boiling Heat Transfer. Applied Physics Letters 83(2003): pp. 3374-3376.
[27]	Vassallo P, R Kumar and S D'Amico, Pool Boiling Heat Transfer Experiments in Silica-Water Nano-Fluids, International Journal of Heat and Mass Transfer 47(2004): 407-411.
[28]	Jordan A, R Scholz, P Wust, H FaMng and R Felix, Magnetic Fluid Hypothermia (MFH): Cancer Treatment with AC Magnetic Field Induced Excitation of Biocompatible Superparamagnetic Nanoparticles. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 201(1999): 413419.
[29]	Chon, C. H., Kihm, K. D., Lee, S. P., and Choi, S. U. S., 2005, "Empirical Correlation Finding the Role of Temperature and Particle Size for Nanofluid (Al2O3) Thermal Conductivity Enhancement," Appl. Phys. Lett., 87(15), 153107.
[30]	Li, C. H., and Peterson, G. P., 2006, "Experimental Investigation of Temperature and Volume Fraction Variations on the Effective Thermal Conductivity of Nanoparticle Suspensions (Nanofluids)," J. Appl. Phys., 99(8), 084314.
[31]	Ding, Y., Alias, H., Wen, D., and Williams, R. A., 2006, "Heat Transfer of Aqueous Suspensions of Carbon Nanotubes (CNT Nanofluids)," Int. J. Heat Mass Tran., 49(1-2), pp. 240- 250.
[32]	Beck, M., Yuan, Y., Warrier, P., and Teja, A., 2009, "The Effect of Particle Size on the Thermal Conductivity of Alumina Nanofluids," J. Nanopart. Res., 11(5), pp. 1129-1136.
[33]	Wang, X., Choi, S. U. S., and Xu, X., 1999, "Thermal Conductivity of Nanoparticle – Fluid Mixture," J. Thermophys. Heat Tran., 13(4), pp. 474-480.
[34]	Putnam, S. A., Cahill, D. G., Braun, P. V., Ge, Z., and Shimmin, R. G., 2006, "Thermal Conductivity of Nanoparticle Suspensions," J. Appl. Phys., 99(8), 084308-6.
[35]	Prasher, R., Bhattacharya, P., and Phelan, P. E., 2005, "Thermal Conductivity of Nanoscale Colloidal Solutions (Nanofluids)," Phys. Rev. Lett., 94(2), 025901.

BIBLIOGRAPHIE

[36]	Prasher, R., Phelan, P. E., and Bhattacharya, P., 2006, "Effect of Aggregation Kinetics on the Thermal Conductivity of Nanoscale Colloidal Solutions (Nanofluid)," Nano Lett., **6**(7), pp. 1529-1534.
[37]	He, Y., Jin, Y., Chen, H., Ding, Y., Cang, D., and Lu, H., 2007, "Heat Transfer and Flow Behaviour of Aqueous Suspensions of TiO2 Nanoparticles (Nanofluids) Flowing Upward through a Vertical Pipe," Int. J. Heat Mass Tran., 50(11-12), pp. 2272-2281.
[38]	Wang, B., Zhou, L., and Peng, X., 2003, "A Fractal Model for Predicting the Effective Thermal Conductivity of Liquid with Suspension of Nanoparticles," Int. J. Heat Mass Tran., 46(14), pp. 2665-2672.
[39]	Evans, W., Prasher, R., Fish, J., Meakin, P., Phelan, P., and Keblinski, P., 2008, "Effect of Aggregation and Interfacial Thermal Resistance on Thermal Conductivity of Nanocomposites and Colloidal Nanofluids," Int. J. Heat Mass Tran., **51**(5-6), pp. 1431-1438.
[40]	Nan, C., Birringer, R., Clarke, D. R., and Gleiter, H., 1997, "Effective Thermal Conductivity of Particulate Composites with Interfacial Thermal Resistance," J. Appl. Phys., 81(10), pp. 6692-6699.
[41]	Yu, C., Richter, A. G., Datta, A., Durbin, M. K., and Dutta, P., 1999, "Observation of Molecular Layering in Thin Liquid Films Using X-ray Reflectivity," Phys. Rev. Lett., 82(11), pp. 2326-2329.
[42]	Yu, W., and Choi, S. U. S., 2003, "The Role of Interfacial Layers in the Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids: A Renovated Maxwell Model," J. Nanopart. Res., 5(1), pp. 167-171.
[43]	Özerinç, S., Kakaç, S., and Yazıcıoğlu, A. G., 2010, "Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids: A State-of-the-Art Review," Microfluid. Nanofluid., 8(2), pp. 145-170.
[44]	Xie, H., Fujii, M., and Zhang, X., 2005, "Effect of Interfacial Nanolayer on the Effective Thermal Conductivity of Nanoparticle-Fluid Mixture," Int. J. Heat Mass Tran., 48(14), pp. 2926-2932.
[45]	Sitprasert, C., Dechaumphai, P., and Juntasaro, V., 2009, "A Thermal Conductivity Model for Nanofluids Including Effect of the Temperature-Dependent Interfacial Layer," J. Nanopart. Res., 11(6), pp. 1465-1476.
[46]	Keblinski, P., Phillpot, S. R., Choi, S. U. S., and Eastman, J. A., 2002, "Mechanisms of Heat Flow in Suspensions of Nano-Sized Particles (Nanofluids)," Int. J. Heat Mass Tran., 45(4), pp. 855-863.
[47]	Geiger, G. H., and Poirier, D. R., 1973, *Transport Phenomena in Metallurgy*, Addison-Wesley, Reading, PA.
[48]	Maxwell, J. C., 1873, *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, Oxford .
[49]	Xuan, Y., Li, Q., and Hu, W., 2003, "Aggregation Structure and Thermal Conductivity of Nanofluids," AIChE Journal, 49(4), pp. 1038-1043.
[50]	Hamilton, R. L., and Crosser, O. K., 1962, "Thermal Conductivity of Heterogeneous TwoComponent Systems," Ind. Eng. Chem. Fund., **1**(3), pp. 187-191.
[51]	Timofeeva, E. V., Routbort, J. L., and Singh, D., 2009, "Particle Shape Effects on Thermophysical Properties of Alumina Nanofluids," J. Appl. Phys., 106(1), 014304-10.

BIBLIOGRAPHIE

[52]	Li, C. H., Williams, W., Buongiorno, J., Hu, L., and Peterson, G. P., 2008, "Transient and Steady-State Experimental Comparison Study of Effective Thermal Conductivity of Al2O3/Water Nanofluids," J. Heat Transfer, 130(4), 042407-7.
[53]	Wong KV, De Leon O. Applications of Nanofluids: Current and Future, in Nanotechnology and Energy. Jenny Stanford Publishing; 2017:105–132
[54]	Lim E-K, Jang E, Lee K, et al. Delivery of cancer therapeutics using nanotechnology. Pharmaceutics. 2013;5(2):294–317. doi:10.3390/ pharmaceutics5020294
[55]	Lim E-K, Kim T, Paik S, et al. Nanomaterials for theranostics: recent advances and future challenges. Chem Rev. 2015;115(1):327–394. doi:10.1021/cr300213b
[56]	Stankic S, Suman S, Haque F, et al. Pure and multi metal oxide nanoparticles: synthesis, antibacterial and cytotoxic properties. J Nanobiotechnology. 2016;14(1):1–20.
[57]	Yu F, Chen Y, Liang X, et al. Dispersion stability of thermal nanofluids. Prog Nat Sci. 2017;27(5):531–542. doi:10.1016/j. pnsc.2017.08.010
[58]	Florence AT. "Targeting" nanoparticles: the constraints of physical laws and physical barriers. J Controlled Release. 2012;164 (2):115–124. doi:10.1016/j.jconrel.2012.03.022
[59]	Eytan O, Elad D. Analysis of intra-uterine fluid motion induced by uterine contractions. Bull Math Biol. 1999;61(2):221–238. doi:10.1006/bulm.1998.0069
[60]	Mekheimer KS. Peristaltic flow of blood under effect of a magnetic field in a non-uniform channels. Appl Math Comput. 2004;153 (3):763–777. doi:10.1016/S0096-3003(03)00672-6
[61]	Wong KV, De Leon O. Applications of nanofluids: current and future. Adv Mech Eng. 2010;2:519659. doi:10.1155/2010/519659
[62]	Yu W, Xie H. A review on nanofluids: preparation, stability mechanisms, and applications. J Nanomater. 2012;2012:17. doi:10.1155/ 2012/435873
[63]	Saidur R, Leong KY, Mohammed HA. A review on applications and challenges of nanofluids. Renewable Sustainable Energy Rev. 2011;15(3):1646–1668. doi:10.1016/j.rser.2010.11.035
[64]	Choi SUS. Nanofluids: from vision to reality through research. J Heat Transfer. 2009;131(3):033106–033106-9. doi:10.1115/ 1.3056479
[65]	Park K. Controlled drug delivery systems: past forward and future back. J Controlled Release. 2014;190:3–8. doi:10.1016/j.jconrel.2014.03.054
[66]	Bañobre-López M, Teijeiro A, Rivas J. Magnetic nanoparticle-based hyperthermia for cancer treatment. Rep Pract Oncol Radiother. 2013;18(6):397–400. doi:10.1016/j.rpor.2013.09.011
[67]	De Jong WH, Borm PJA. Drug delivery and nanoparticles: applicationsand hazards. Int J Nanomedicine. 2008;3(2):133–149. doi:10.2147/IJN.S596
[68]	Srinivasan S, Sawyer PN. Role of surface charge of the blood vessel wall, blood cells, and prosthetic materials in intravascular thrombosis. J Colloid Interface Sci. 1970;32(3):456–463. doi:10.1016/0021-9797(70)90131-1
[69]	Owens DE, Peppas NA. Opsonization, biodistribution, and pharmacokinetics of polymeric nanoparticles. Int J Pharm. 2006;307 (1):93–102. doi:10.1016/j.ijpharm.2005.10.010
[70]	Roser M, Fischer D, Kissel T. Surface-modified biodegradable albumin nano- and microspheres. II: effect of surface charges on in vitro phagocytosis and biodistribution in

BIBLIOGRAPHIE

[71]	Puglia C, Tirendi GG, Bonina F. Emerging role of colloidal drug delivery systems (CDDS) in NSAID topical administration. Curr Med Chem. 2013;20(14):1847–1857. doi:10.2174/0929867311 320140004
[72]	Gorfine SR, Onel E, Patou G, et al. Bupivacaine extended-release liposome injection for prolonged postsurgical analgesia in patients undergoing hemorrhoidectomy: a multicenter, randomized, double-blind, placebo-controlled trial. Dis Colon Rectum. 2011;54 (12):1552–1559. doi:10.1097/DCR.0b013e318232d4c1
[73]	Bárcena C, Sra AK, Gao J. Applications of Magnetic Nanoparticles in Biomedicine, in Nanoscale Magnetic Materials and Applications. Springer; 2009:591–626.
[74]	Kothandapani M, Prakash J. The peristaltic transport of Carreau nanofluids under effect of a magnetic field in a tapered asymmetric channel: application of the cancer therapy. J Mech Med Biol. 2015;15 (03):1550030. doi:10.1142/S021951941550030X
[75]	Pankhurst QA, Connolly J, Jones SK, et al. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. J Phys D: Appl Phys. 2003;36(13): R167. doi:10.1088/0022-3727/36/13/201
[76]	Katz E. Magnetic Nanoparticles. Multidisciplinary Digital Publishing Institute; 2020.
[77]	Hosu O, Tertis M, Cristea C. Implication of Magnetic Nanoparticles in Cancer Detection, Screening and Treatment. Magnetochemistry. 2019;5(4):55. doi:10.3390/magnetochemistry5040055
[78]	Yew YP, Shameli K, Miyake M, et al. Green biosynthesis of superparamagnetic magnetite Fe3O4 nanoparticles and biomedical applications in targeted anticancer drug delivery system: A review. Arab J Chem. 2020;13(1):2287–2308. doi:10.1016/j.arabjc.2018.04.013
[79]	Choi K-H, Nam K, Cho G, et al. Enhanced photodynamic anticancer activities of multifunctional magnetic nanoparticles (Fe_3O_4) Conjugated with chlorin e6 and folic acid in prostate and breast cancer cells. Nanomaterials. 2018;8(9):722. doi:10.3390/nano8090722
[80]	Tietze R, Zaloga J, Unterweger H, et al. Magnetic nanoparticle-based drug delivery for cancer therapy. Biochem Biophys Res Commun.2015;468(3):463–470. doi:10.1016/j.bbrc.2015.08.022
[81]	Jayaprabha KN, Joy PA. Citrate modified β-cyclodextrin functionalized magnetite nanoparticles: a biocompatible platform for hydrophobic drug delivery. RSC Adv. 2015;5(28):22117–22125. doi:10.1039/C4RA16044D
[82]	Banerjee SS, Chen D-H. Magnetic nanoparticles grafted with cyclodextrin for hydrophobic drug delivery. Chem Mater. 2007;19 (25):6345–6349. doi:10.1021/cm702278u
[83]	Lim E-K, Huh Y-M, Yang J, et al. pH-triggered drug-releasing magnetic nanoparticles for cancer therapy guided by molecular imaging by MRI. Adv Mater. 2011;23(21):2436–2442. doi:10.1002/ adma.201100351
[84]	Lim E-K, Chung BH, Chung SJ. Recent advances in pH-sensitive polymeric nanoparticles for smart drug delivery in cancer therapy. Curr Drug Targets. 2018;19(4):300–317. doi:10.2174/ 1389450117666160602202339
[85]	Meng E, Hoang T. Micro-and nano-fabricated implantable drug-delivery systems. Ther Deliv. 2012;3(12):1457–1467. doi:10.4155/tde.12.132

BIBLIOGRAPHIE

[86]	Bugliarello G, Sevilla J. Velocity distribution and other characteristics of steady and pulsatile blood flow in fine glass tubes.Biorheology. 1970;7(2):85–107. doi:10.3233/BIR-1970-7202
[87]	Wiedeman MP. Dimensions of blood vessels from distributing artery to collecting vein. Circ Res. 1963;12(4):375–378. doi:10.1161/01. RES.12.4.375
[88]	Singh S, Bhargava R. Simulation of phase transition during cryosurgical treatment of a tumor tissue loaded with nanoparticles using meshfree approach. J Heat Transfer. 2014;136(12):121101. doi:10.1115/1.4028730
[89]	Chua K, Chou S, Ho J. An analytical study on the thermal effects of cryosurgery on selective cell destruction. J Biomech. 2007;40 (1):100–116. doi:10.1016/j.jbiomech.2005.11.005
[90]	Kleinstreuer C, Li J, Koo J. Microfluidics of nano-drug delivery. Int J Heat Mass Transf. 2008;51(23):5590–5597. doi:10.1016/j. ijheatmasstransfer.2008.04.043
[91]	Junghanns J-UAH, Müller RH. Nanocrystal technology, drug delivery and clinical applications. Int J Nanomedicine. 2008;3 (3):295–309. doi:10.2147/ijn.s595
[92]	Fakhroueian Z, Dehshiri AM, Katouzian F, et al. In vitro cytotoxic effects of modified zinc oxide quantum dots on breast cancer cell lines (MCF7), colon cancer cell lines (HT29) and various fungi. J Nanopart Res. 2014;16(7):2483. doi:10.1007/s11051-014-2483-2
[93]	Yuan L, Wang Y, Wang J, et al. Additive effect of zinc oxide nanoparticles and isoorientin on apoptosis in human hepatoma cell line. Toxicol Lett. 2014;225(2):294–304. doi:10.1016/j.toxlet.2013.12.015
[94]	Abdolmohammadi MH, Fallahian F, Fakhroueian Z, et al. Application of new ZnO nanoformulation and Ag/Fe/ZnO nanocomposites as water-based nanofluids to consider in vitro cytotoxic effects against MCF-7 breast cancer cells. Artif Cells Nanomed Biotechnol. 2017;45(8):1769–1777. doi:10.1080/21691401.2017.12 90643
[95]	Tran N, Webster TJ. Magnetic nanoparticles: biomedical applications and challenges. J Mater Chem. 2010;20(40):8760–8767. doi:10.1039/ c0jm00994f
[96]	Dotan I, Roche PJR, Paliouras M, et al. Engineering Multi-walled carbon nanotube therapeutic bionanofluids to selectively target papillary thyroid cancer cells. PLoS One. 2016;11(2):e0149723. doi:10.1371/journal.pone.0149723
[97]	Gas P, Essential Facts on the History of Hyperthermia and their Connections with Electromedicine. arXiv preprint arXiv:1710.00652, 2017.
[98]	Chiriac H, Petreus T, Carasevici E, et al. In vitro cytotoxicity of Fe–Cr–Nb–B magnetic nanoparticles under high frequency electromagnetic field. J Magn Magn Mater. 2015;380:13–19. doi:10.1016/j. jmmm.2014.10.015
[99]	Moroz P, Jones S, Gray B. Magnetically mediated hyperthermia: current status and future directions. Int J Hyperthermia. 2002;18 (4):267–284. doi:10.1080/02656730110108785
[100]	Hedayatnasab Z, Abnisa F, Daud WMAW. Review on magnetic nanoparticles for magnetic nanofluid hyperthermia application. Mater Des. 2017;123:174–196. doi:10.1016/j.matdes.2017.03.036
[101]	Salloum M, Ma R, Zhu L. Controlling nanoparticle delivery in hyperthermia for cancer treatment: in vitro experimental study. in ASME 2007 International Mechanical Engineering Congress and Exposition. 2007. American Society of Mechanical Engineers. Saettle, Washington,USA.

BIBLIOGRAPHIE

[102]	Attaluri A, Ma R, Zhu L. Using microCT imaging technique to quantify heat generation distribution induced by magnetic nanoparticles for cancer treatments. J Heat Transfer. 2011;133(1):011003. doi:10.1115/1.4002225
[103]	Lv Y-G, Deng Z-S, Liu J. 3-D numerical study on the induced heating effects of embedded micro/nanoparticles on human body subject to external medical electromagnetic field. IEEE Trans Nanobioscience. 2005;4(4):284–294. doi:10.1109/TNB.2005.859549
[104]	Frazier N, Ghandehari H. Hyperthermia approaches for enhanced delivery of nanomedicines to solid tumors. Biotechnol Bioeng. 2015;112(10):1967–1983. doi:10.1002/bit.25653
[105]	Salloum M, Ma R, Zhu L. An in-vivo experimental study of temperature elevations in animal tissue during magnetic nanoparticle hyperthermia. Int J Hyperthermia. 2008;24(7):589–601. doi:10.1080/02656730802203377
[106]	Saleh H, Alali E, Ebaid A. Medical applications for the flow of carbon-nanotubes suspended nanofluids in the presence of convective condition using Laplace transform. J Assoc Arab Univ Basic Appl Sci. 2017;24(1):206–212. doi:10.1016/j.jaubas.2016.12.001
[107]	Ebaid A, Aly EH. Exact analytical solution of the peristaltic nanofluids flow in an asymmetric channel with flexible walls and slip condition: application to the cancer treatment. Comput Math Methods Med. 2013;2013:1–8. doi:10.1155/2013/825376
[108]	Fang K, Song L, Gu Z, et al. Magnetic field activated drug release system based on magnetic PLGA microspheres for chemo-thermal therapy. Colloids Surf B Biointerfaces. 2015;136:712–720. doi:10.1016/j.colsurfb.2015.10.014
[109]	Hou Y, Sun Z, Rao W, et al. Nanoparticle-mediated cryosurgery for tumor therapy. Nanomedicine. 2018;14(2):493–506. doi:10.1016/j.nano.2017.11.018
[110]	Liu J, Deng Z-S. Nano-Cryosurgery: advances and Challenges. J Nanosci Nanotechnol. 2009;9(8):4521–4542. doi:10.1166/jnn.2009.1264
[111]	Vazhnichaya YM, Mokliak YV, Zabozlaev AA. Effectiveness of Magnetite Nanoparticles Stabilized by 3-hydroxypyridine Derivative and Polyvinyl Pyrrolidone in Experimental Therapy of Acute Blood Loss. Современные технологии в медицине. 2015;7:84–91
[112]	Friedman M, Mikityansky I, Kam A, et al. Radiofrequency ablation of cancer. Cardiovasc Intervent Radiol. 2004;27(5):427–434. doi:10.1007/s00270-004-0062-0
[113]	Wu Q, Zhang H, Chen M, et al. Preparation of carbon-coated iron nanofluid and its application in radiofrequency ablation. J Biomed Mater Res B Appl Biomater. 2015;103(4):908–914. doi:10.1002/jbm.b.33275
[114]	Shokrollahi H. Contrast agents for MRI. Mater Sci Eng C. 2013;33(8):4485–4497. doi:10.1016/j.msec.2013.07.012
[115]	Estelrich J, Sánchez-Martín MJ, Busquets MA. Nanoparticles in magnetic resonance imaging: from simple to dual contrast agents. Int J Nanomedicine. 2015;10:1727–1741. doi:10.2147/IJN.S76501

BIBLIOGRAPHIE

[116]	Xiao Y-D, Paudel R, Liu J, et al. MRI contrast agents: classification and application. Int J Mol Med. 2016;38(5):1319–1326. doi:10.3892/ijmm.2016.2744
[117]	Shellock FG, Kanal E. Safety of magnetic resonance imaging contrast agents. J Magn Reson Imaging. 1999;10(3):477–484. doi:10.1002/(SICI)1522-2586(199909)10:3<477::AID-JMRI33>3.0.CO;2-E
[118]	Mornet S, Vasseur S, Grasset F, et al. Magnetic nanoparticle design for medical applications. Prog Solid State Chem. 2006;34(2):237–247. doi:10.1016/j.progsolidstchem.2005.11.010
[119]	Gao Z, Ma T, Zhao E, et al. Small is smarter: nano MRI contrast agents - advantages and recent achievements. Small. 2016;12(5):556–576. doi:10.1002/smll.201502309
[120]	Zhou Z, Lu ZR. Gadolinium-based contrast agents for magnetic resonance cancer imaging. Wiley Interdiscip Rev Nanomed Nanobiotechnol. 2013;5(1):1–18. doi:10.1002/wnan.1198
[121]	Su HY, Chang-Qiang W, Dan-Yang L, et al. Self-assembled superparamagnetic nanoparticles as MRI contrast agents - A review. Chin Phys B. 2015;24(12):127506
[122]	Wu M, Huang S. Magnetic nanoparticles in cancer diagnosis, drug delivery and treatment. Mol clin oncol. 2017;7(5):738–746. doi:10.3892/mco.2017.1399
[123]	Huang S, Yan W, Hu G, et al. Facile and green synthesis of biocompatible and bioconjugatable magnetite nanofluids for high-resolution T 2 MRI contrast agents. J Phys Chem C. 2012;116(38):20558–20563. doi:10.1021/jp305211d
[124]	Beyth N, Houri-Haddad Y, Domb A, et al. Alternative antimicrobial approach: nano-antimicrobial materials. Evidence Based Complementary Altern Med. 2015;2015:1–16. doi:10.1155/2015/246012
[125]	Yamamoto O. Influence of particle size on the antibacterial activity of zinc oxide. Int J Inorg Mater. 2001;3(7):643–646. doi:10.1016/S1466-6049(01)00197-0
[126]	Li Q, Mahendra S, Lyon DY, et al. Antimicrobial nanomaterials for water disinfection and microbial control: potential applications and implications. Water Res. 2008;42(18):4591–4602. doi:10.1016/j.watres.2008.08.015
[127]	Adams LK, Lyon DY, Alvarez PJ. Comparative eco-toxicity of nanoscale TiO2, SiO2, and ZnO water suspensions. Water Res. 2006;40(19):3527–3532. doi:10.1016/j.watres.2006.08.004
[128]	Jones N, Ray B, Ranjit KT, et al. Antibacterial activity of ZnO nanoparticle suspensions on a broad spectrum of microorganisms. FEMS Microbiol Lett. 2008;279(1):71–76. doi:10.1111/j.1574-6968.2007.01012.x
[129]	Vandebriel RJ, De Jong WH. A review of mammalian toxicity of ZnO nanoparticles. Nanotechnol Sci Appl. 2012;5:61–71. doi:10.2147/NSA.S23932

BIBLIOGRAPHIE

[130]	Sirelkhatim A, Mahmud S, Seeni A, et al. Review on zinc oxide nanoparticles: antibacterial activity and toxicity mechanism. Nano Micro Lett. 2015;7(3):219–242. doi:10.1007/s40820-015-0040-x
[131]	Zhang L, Jiang Y, Ding Y, et al. Investigation into the antibacterial behaviour of suspensions of ZnO nanoparticles (ZnO nanofluids). J Nanopart Res. 2007;9(3):479–489. doi:10.1007/s11051-006-9150-1
[132]	Wei C, Lin WY, Zainal Z, et al. Bactericidal activity of TiO2 photocatalyst in aqueous media: toward a solar-assisted water disinfection system. Environ Sci Technol. 1994;28(5):934–938. doi:10.1021/es00054a027
[133]	Tong K, Song X, Xiao G, et al. Colloidal processing of mg(oh) 2 aqueous suspensions using sodium polyacrylate as dispersant. Ind Eng Chem Res. 2014;53(12):4755–4762. doi:10.1021/ie5002857
[134]	Dong C, Cairney J, Sun Q, et al. Investigation of Mg(OH)2 nanoparticles as an antibacterial agent. J Nanopart Res. 2010;12(6):2101–2109. doi:10.1007/s11051-009-9769-9
[135]	Jin T, He Y. Antibacterial activities of magnesium oxide (MgO) nanoparticles against foodborne pathogens. J Nanopart Res. 2011;13(12):6877–6885. doi:10.1007/s11051-011-0595-5
[136]	Leung YH, Ng AMC, Xu X, et al. Mechanisms of antibacterial activity of MgO: non-ROS mediated toxicity of MgO nanoparticles towards escherichia coli. Small. 2014;10(6):1171–1183. doi:10.1002/smll.201302434
[137]	Usman MS, El Zowalaty ME, Shameli K, et al. Synthesis, characterization, and antimicrobial properties of copper nanoparticles. Int J Nanomedicine. 2013;8:4467–4479. doi:10.2147/IJN.S50837
[138]	Mahapatra O, Bhagat M, Gopalakrishnan C, et al. Ultrafine dispersed CuO nanoparticles and their antibacterial activity. J Exp Nanosci. 2008;3(3):185–193. doi:10.1080/17458080802395460
[139]	Grumezescu AM, Saviuc CChifiriuc MC, et al. Inhibitory activity of Fe(3) O(4)/oleic acid/usnic acid-core/shell/extra-shell nanofluid on S. aureus biofilm development. IEEE Trans Nanobioscience. 2011;10(4):269–274.
[140]	Thekkae Padil VV, Cernik M. Green synthesis of copper oxide nanoparticles using gum karaya as a biotemplate and their antibacterial application. Int J Nanomedicine. 2013;8:889–898. doi:10.2147/IJN.S40599
[141]	Akbar NS, Butt AW. Magnetic field effects for copper suspended nanofluid venture through a composite stenosed arteries with permeable wall. J Magn Magn Mater. 2015;381:285–291. doi:10.1016/j.jmmm.2014.12.084
[142]	Rai M, Yadav A, Gade A. Silver nanoparticles as a new generation of antimicrobials. Biotechnol Adv. 2009;27(1):76–83. doi:10.1016/j.biotechadv.2008.09.002
[143]	Akter M, Sikder MT, Rahman MM, et al. A systematic review on silver nanoparticles-induced cytotoxicity: physicochemical properties and perspectives. J Adv Res. 2018;9:1–16. doi:10.1016/j.jare.2017.10.008

BIBLIOGRAPHIE

[144]	Chen X, Schluesener HJ. Nanosilver: a nanoproduct in medical application. Toxicol Lett. 2008;176(1):1–12. doi:10.1016/j.toxlet.2007.10.004
[145]	Cui Y, Zhao Y, Tian Y, et al. The molecular mechanism of action of bactericidal gold nanoparticles on Escherichia coli. Biomaterials. 2012;33(7):2327–2333. doi:10.1016/j.biomaterials.2011.11.057
[146]	Vazhnichaya YM, Mokliak YV, Zabozlaev A. Effectiveness of magnetite nanoparticles stabilized by 3-hydroxypyridine derivative and polyvinyl pyrrolidone in experimental therapy of acute blood loss. Современные технологии в медицине. 2015;7(2 (eng)).
[147]	Gordon T, Perlstein B, Houbara O, et al. Synthesis and characterization of zinc/iron oxide composite nanoparticles and their antibacterial properties. Colloids Surf a Physicochem Eng Asp. 2011;374(1–3):1–-8. doi:10.1016/j.colsurfa.2010.10.015
[148]	Yadav N, Jaiswal AK, Dey KK, et al. Trimetallic Au/Pt/Ag based nanofluid for enhanced antibacterial response. Mater Chem Phys. 2018;218:10–17. doi:10.1016/j.matchemphys.2018.07.016
[149]	Buteică AS, et al. The anti-bacterial activity of magnetic nanofluid: fe3O4/oleic acid/cephalosporins core/shell/adsorption-shell proved on S. Aureus and E. Coli and possible applications as drug delivery systems. Digest J Nanomater Biostruct. 2010;5(4):927–932.
[150]	Anghel I, Grumezescu A, Holban A, et al. Biohybrid nanostructured iron oxide nanoparticles and Satureja hortensis to prevent fungal biofilm development. Int J Mol Sci. 2013;14(9):18110–18123. doi:10.3390/ijms140918110
[151]	He X, Park EYH, Fowler A, et al. Vitrification by ultra-fast cooling at a low concentration of cryoprotectants in a quartz micro-capillary: A study using murine embryonic stem cells. Cryobiology. 2008;56(3):223–232. doi:10.1016/j.cryobiol.2008.03.005

PARTIE 2 :

PARTIE MODELISATION

PARTIE 2 : PARTIE MODELISATION

Les nanofluides représentent une nouvelle génération de fluides de transfert thermique obtenus par la dispersion de nanoparticules (métalliques, oxydes, carbures, graphène, etc.) dans un fluide de base (eau, éthylène-glycol, huile, huile végétale). L'introduction de nanoparticules, même à faible fraction volumique, modifie de façon significative les propriétés thermophysiques du fluide : conductivité thermique, viscosité, capacité calorifique, densité et comportement convectif. Ces modifications ouvrent des perspectives importantes pour améliorer l'efficacité des échangeurs de chaleur, des systèmes de refroidissement électronique, des réfrigérateurs à absorption, des procédés industriels intensifs en chaleur et des applications biomédicales (transport de chaleur localisé, hyperthermie).

L'amélioration des performances thermiques des nanofluides n'est pas automatique ni triviale. Elle dépend d'un grand nombre de paramètres interconnectés et souvent non linéaires : caractéristiques des nanoparticules (matériau, taille, forme, rugosité, revêtement surfactant), concentration massique ou volumique des particules, propriétés du fluide de base (viscosité, conductivité, stabilité colloïdale), température de fonctionnement et gradients thermiques, régime d'écoulement (laminaire, transition, turbulent) et paramètres hydrodynamiques (nombre de Reynolds, nombre de Prandtl), interactions particule-fluide et phénomène d'agrégation ou de sédimentation, ou aux procédés de préparation (méthode de synthèse, dispersion, sonication, traitement de surface).

Ces facteurs influencent à la fois les transferts thermiques (conduction, convection) et les pertes de charge (augmentation de la viscosité). La compréhension et la prédiction quantitatives exigent donc soit des campagnes expérimentales étendues et coûteuses, soit des modèles théoriques et numériques complexes (modélisation multi-échelle, CFD avec modèles de particules Lagrangiens ou approches pseudo-continuum).

Pour pallier les limitations des approches purement expérimentales ou numériques, les techniques d'intelligence artificielle (IA) et d'apprentissage automatique offrent des alternatives puissantes. Elles permettent de construire des modèles empiriques ou semi-empiriques capables d'apprendre directement les relations non linéaires à partir de données expérimentales ou simulées, obtenir des prédictions rapides (temps réel ou quasi temps réel) utiles pour le contrôle, l'optimisation et la conception, intégrer facilement de nombreuses variables d'entrée hétérogènes (paramètres physiques, conditions opératoires, propriétés chimiques) et quantifier l'incertitude et identifier les variables les plus influentes via des techniques d'interprétabilité.

Parmi les méthodes d'apprentissage supervisé couramment utilisées, les Réseaux de Neurones Artificiels (RNA) et les Machines à Vecteurs de Support (SVM) sont reconnues

pour leur capacité à modéliser des relations complexes et non linéaires. Le présent travail vise à développer et comparer des modèles prédictifs basés sur deux familles d'algorithmes : les RNA et les SVM.

Les objectifs spécifiques de ce travail sont : constituer une base de données consolidée à partir de résultats expérimentaux publiés et/ou de simulations CFD ; étudier les propriétés thermophysiques (conductivité thermique effective, viscosité), les performances de transfert (coefficient de convection, nombre de Nusselt) et les pertes de charge associées. Un prétraitement et une normalisation des données s'avèrent nécessaires afin de gérer les valeurs manquantes et les données aberrantes, puis d'effectuer un partitionnement entraînement/validation/test robuste (k-fold, validation croisée). La conception, l'entraînement et l'optimisation des architectures de Réseaux de Neurones Artificiels (RNA) et des Machines à Vecteurs de Support (SVM) — choix du noyau, réglage des hyperparamètres C et γ — seront menés. Les modèles seront évalués selon des métriques standard (RMSE, MAE, R^2) et comparés en termes de précision, robustesse et capacité de généralisation. Enfin, l'analyse des facteurs dominants (par exemple via SHAP ou importance par permutation) permettra d'interpréter l'influence des variables et de proposer des recommandations pour la conception optimale de nanofluides en fonction d'objectifs thermiques et hydrauliques (par exemple maximiser le nombre de Nusselt sous contrainte de perte de charge).

CHAPITRE III :

MODÉLISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMIQUE ET HYDRODYNAMIQUE

CHAPITRE III : MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMIQUE ET HYDRODYNAMIQUE

1. Introduction

L'administration ciblée de médicaments a été améliorée par l'application des nanotechnologies dans le domaine biomédical, notamment grâce à l'utilisation de nanofluides. Les nanofluides sont des vecteurs efficaces de médicaments dans le corps humain grâce à leur conductivité thermique accrue et à leurs propriétés d'écoulement contrôlées. Dans l'industrie pharmaceutique, les nanofluides présentent une efficacité thermique supérieure et un écoulement régulé, ce qui en fait des transporteurs efficaces au sein du corps humain. L'étude des nanofluides hybrides et multi-hybrides, en particulier en présence de rayonnement thermique, a suscité un intérêt croissant en raison de leur potentiel d'amélioration de l'administration d'agents médicamenteux. Il est essentiel de comprendre le comportement des nanofluides dans les milieux poreux afin de créer des systèmes d'administration de médicaments efficaces et thermosensibles.

L'étude du comportement des nanofluides nécessite généralement la résolution de modèles mathématiques complexes ou la réalisation d'expériences coûteuses. Afin de réduire le temps de calcul et de fournir des outils de prédiction rapides et précis, les techniques d'intelligence artificielle sont devenues des alternatives efficaces pour la modélisation des phénomènes thermofluidiques.

Dans ce contexte, le présent travail vise à développer des modèles prédictifs basés sur deux techniques d'apprentissage automatique : les Réseaux de Neurones Artificiels (RNA) et les Machines à Vecteurs de Support (Support Vector Machine, SVM). Ces méthodes sont reconnues pour leur capacité à apprendre les relations complexes existant entre les variables d'entrée et les variables de sortie à partir d'un ensemble de données.

2. Contexte de l'étude

La présente étude examine les propriétés de transport thermique d'un nanofluide tri-hybride à base de sang dans un canal perméable situé dans un milieu poreux. Les effets de la magnétisation et de la traînée inertielle de Darcy-Forchheimer ont été pris en compte pour améliorer les caractéristiques d'écoulement. La relation entre les nanoparticules d'aluminium (AA7072 et AA7075) et l'oxyde de zirconium (ZrO_2) dans le contexte du sang comme liquide de base est étudiée, en incluant le rayonnement thermique et les sources de chaleur.

De plus, une nouvelle approche d'apprentissage automatique est utilisée pour traiter le modèle adimensionnel, et les résultats de l'étude sont corroborés par des recherches antérieures. Les développements récents dans les domaines scientifiques et technologiques

sont motivés par l'utilisation de dispositifs contemporains performants, durables et potentiellement efficaces.

Ce chapitre étudie la précision et l'efficacité des approches d'apprentissage automatique appliquées aux systèmes d'écoulement sanguin à base de nanoparticules pour l'administration ciblée de médicaments.

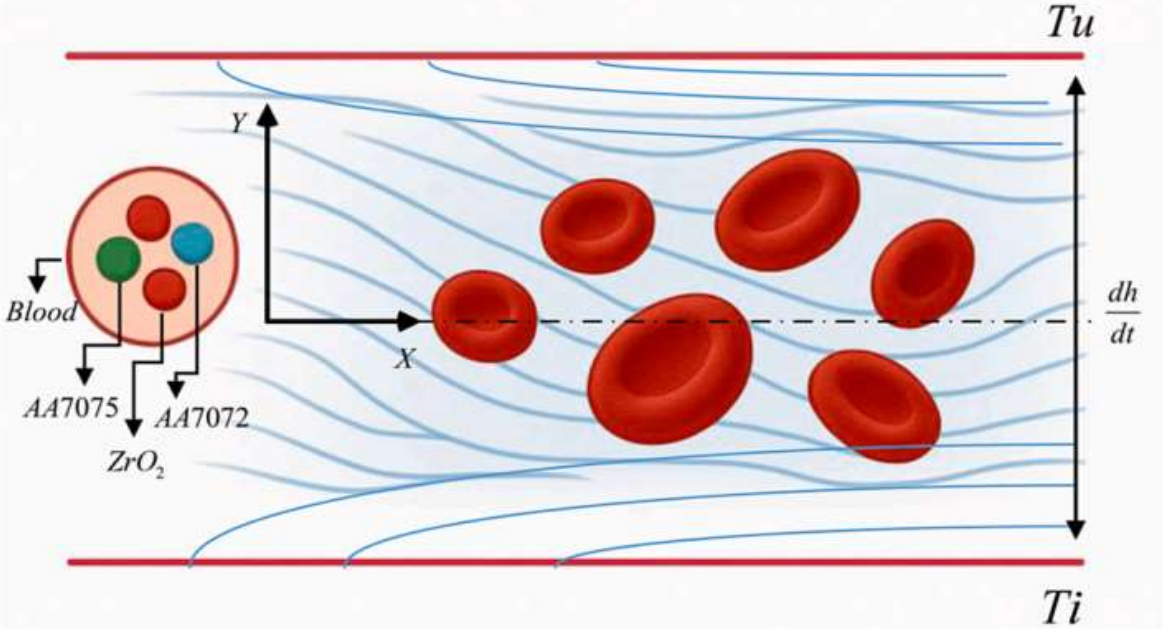


Figure 1. Modèle d'écoulement de nanofluide trihybride à base de sang.

Ce nanofluide trihybride s'écoule dans un canal perméable parallèle rempli d'une matrice poreuse, le fluide de base étant le sang. Les effets de la magnétisation et de la traînée inertielle de Darcy-Forchheimer ont été pris en compte afin d'améliorer les caractéristiques d'écoulement. L'écoulement est analysé dans une section rectangulaire représentant le flux sanguin dans une artère, les parois du canal étant espacées de 2h(t). Les deux parois du canal sont positionnées horizontalement le long de l'axe x, tandis que l'axe y est perpendiculaire. La section centrale du canal est fixée à l'origine du repère cartésien. Les parois supérieure et inférieure sont ainsi positionnées à y = h(t) et −h(t). Al et Au représentent la perméabilité des parois du canal. De plus, l'hypothèse sous-jacente suppose que la dilatation et la contraction des parois se produisent uniformément à une vitesse h(t) dépendant du temps. Un champ magnétique uniforme d'intensité B_0 est appliqué perpendiculairement à l'écoulement, comme illustré sur la figure 1. Les hypothèses de l'étude proposée régissent les phénomènes d'écoulement du nanofluide trihybride.

3. Présentation de la base de données

La qualité d'un modèle d'intelligence artificielle dépend fortement de la qualité et de la représentativité des données utilisées lors de son apprentissage. Dans cette étude, la base de données exploitée a été construite à partir des résultats rapportés dans la littérature scientifique concernant l'écoulement et le transfert de chaleur d'un nanofluide dans un milieu poreux soumis à différents effets physiques.

La base de données comprend six variables d'entrée décrivant les conditions physiques et hydrodynamiques du système ainsi que trois variables de sortie représentant les réponses thermiques et dynamiques du nanofluide.

3.1. Variables d'entrée

Les paramètres d'entrée utilisés pour le développement des modèles d'apprentissage statistique sont les suivants :

Tableau 1. Les variables d'entrée de notre base de données.

Symbole	Paramètre	Description
Re	Reynolds Number	Nombre de Reynolds caractérisant le régime d'écoulement
β	Porosity Parameter	Paramètre de porosité du milieu
Rd	Thermal Radiation Parameter	Paramètre de rayonnement thermique
S	Suction/Injection Parameter	Paramètre d'aspiration ou d'injection
Ω	Deformation Rate	Taux de déformation de l'écoulement
f'	Velocity	Vitesse adimensionnelle du fluide

Ces variables constituent les paramètres indépendants du modèle et influencent directement les caractéristiques thermiques et hydrodynamiques du nanofluide. Voici des descriptions claires et académiques pour chaque paramètre du tableau.

3.1.1 Re – Nombre de Reynolds

Le nombre de Reynolds Re est un nombre sans dimension qui mesure le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses dans un écoulement de fluide. Il permet de caractériser le régime d'écoulement (laminaire, transitoire ou turbulent) en fonction de la vitesse, de la taille caractéristique et des propriétés du fluide. [1]

3.1.2. β – Paramètre de porosité

Le paramètre de porosité **β** décrit la structure poreuse du milieu à travers lequel le fluide s'écoule. Il est généralement lié à la fraction volumique de vides (porosité) et peut intervenir dans les modèles de milieux poreux pour quantifier l'influence de la matrice solide sur la résistance à l'écoulement et le transfert de chaleur. [2]

3.1.3. Rd – Paramètre de rayonnement thermique

Le paramètre de rayonnement thermique **Rd** est un nombre adimensionnel qui traduit l'intensité relative des effets de rayonnement par rapport à la conduction ou à la convection dans le bilan d'énergie. Il intervient dans les équations d'énergie modifiées (par exemple à partir de l'approximation de Rosseland) pour caractériser l'importance du transfert radiatif dans le milieu. [3]

3.1.4. S – Paramètre d'aspiration / injection

Le paramètre **S** d'aspiration/injection (souvent appelé paramètre de succion ou de soufflage) représente l'intensité de la vitesse normale à la paroi (aspiration si $S>0$, injection si $S<0$). Il permet de quantifier l'effet d'un pompage ou d'une injection de fluide à la paroi sur l'épaisseur de la couche limite, la stabilité de l'écoulement et les transferts de chaleur ou de masse. [4]

3.1.5. Ω – Taux de déformation

Le paramètre **Ω** désigne le taux de déformation (ou taux de cisaillement) caractéristique de l'écoulement. Il mesure la vitesse à laquelle les éléments de fluide se déforment sous l'action des contraintes, et intervient dans la description des écoulements à fort cisaillement, des fluides non newtoniens ou dans l'approximation des équations de Navier–Stokes adimensionnelles. [5]

3.1.6. f′ – Vitesse adimensionnelle

La fonction **f′** correspond à la vitesse adimensionnelle du fluide dans un cadre de similitude (par exemple transformation de Falkner–Skan ou Blasius). Elle représente le profil de vitesse réduit, obtenu après non-dimensionnalisation et changement de variables, et permet de décrire la distribution de vitesse dans la couche limite ou dans un écoulement simplifié en fonction d'une seule variable de similarité. [6]

3.2 Variables de sortie

Les variables de sortie considérées dans cette étude sont :

Tableau 2. Les variables de sortie de notre base de données

Symbole	Paramètre	Description
θ	Temperature	Température adimensionnelle
C_{fx}	Skin Friction Coefficient	Coefficient de frottement pariétal
Nu_x	Nusselt Number	Nombre de Nusselt représentant le taux de transfert thermique

Ces paramètres représentent les réponses du système qui seront prédites par les modèles développés.

Voici des descriptions académiques et cohérentes pour chacune de tes variables de sortie.

3.2.1. θ – Température adimensionnelle

La variable θ représente la température adimensionnelle du fluide ou du milieu. Elle est généralement définie à partir d'une mise à l'échelle de la température (par exemple $T = \frac{T-T_\infty}{T_\omega - T_\infty}$, ce qui permet de travailler avec des grandeurs sans dimension dans les équations d'énergie et de comparer plus facilement différents cas d'écoulement et de transfert de chaleur. [7]

3.2.2. C_{fx} – Coefficient de frottement pariétal

Le coefficient de frottement pariétal C_{fx} est une grandeur adimensionnelle qui quantifie l'intensité des efforts de cisaillement exercés par le fluide sur la paroi dans la direction de l'écoulement. Il est généralement défini à partir de la contrainte de cisaillement à la paroi, normalisée par la pression dynamique (par exemple $C_{fx} = \frac{\tau_\omega}{\frac{1}{2}\rho U^2}$, et permet de caractériser les pertes de charge locales et le comportement de la couche limite visqueuse. [1]

3.2.3. Nu_x – Nombre de Nusselt

Le nombre de Nusselt Nu_x est un nombre adimensionnel qui caractérise le taux de transfert thermique convectif au voisinage de la paroi à la position x.
Il est défini comme le rapport entre le flux de chaleur transféré par convection et le flux de chaleur qui serait transféré uniquement par conduction, pour la même différence de température et la même longueur caractéristique (par exemple $Nu_x = \frac{h_x L}{k}$.

Des valeurs élevées de Nu_x indiquent un échange thermique par convection plus intense par rapport à la conduction pure. [7]

4. Structure de la base de données

La structure générale de la base de données peut être représentée sous la forme suivante :

$$[\theta, C_{fx}, Nu_x) = f\ (Re, \beta, Rd, S, \Omega, f')]$$

Cette relation traduit la dépendance des caractéristiques thermiques et hydrodynamiques du nanofluide vis-à-vis des paramètres physiques étudiés.

Chaque ligne de la base de données correspond à une observation indépendante comprenant les six variables d'entrée et les trois variables de sortie associées.

La base de données constitue l'élément fondamental du processus d'apprentissage. Elle permet aux modèles SVM et RNA d'identifier les relations complexes et non linéaires entre les paramètres d'entrée et les réponses du système. Plus la base de données est diversifiée et représentative des différentes conditions physiques étudiées, plus les performances prédictives des modèles sont élevées.

L'utilisation de cette base de données permet ainsi de développer des modèles capables de prédire rapidement et avec précision la température adimensionnelle, le coefficient de frottement pariétal et le nombre de Nusselt sans avoir recours à des simulations numériques ou à des expérimentations supplémentaires.

5. Prétraitement des données

Le prétraitement des données constitue une étape fondamentale dans le processus de modélisation par intelligence artificielle. La qualité des données utilisées influence directement les performances des modèles prédictifs. Ainsi, avant l'application des algorithmes SVM et RNA, plusieurs opérations ont été réalisées afin d'assurer la cohérence, la fiabilité et l'efficacité du processus d'apprentissage.

5.1. Importation de la base de données

La base de données a été importée dans un environnement IDE de python choisi à partir d'un fichier de 500 données. Les données ont ensuite été converties sous forme de tableau numérique afin de faciliter leur manipulation et leur exploitation par les bibliothèques Python dédiées à l'apprentissage automatique.

Après l'importation, la structure de la base de données a été vérifiée afin de s'assurer que toutes les observations étaient correctement enregistrées et qu'aucune donnée n'était manquante.

5.2. Analyse exploratoire des données

Une analyse exploratoire a été réalisée afin d'obtenir une première compréhension des données. Cette étape a permis d'identifier la distribution des variables, d'examiner les valeurs minimales et maximales, d'évaluer la dispersion des données, et de détecter d'éventuelles anomalies.

Les principaux paramètres statistiques calculés sont la moyenne, la médiane, l'écart-type, la variance, et les valeurs minimale et maximale. Les résultats obtenus permettent de caractériser quantitativement chaque variable étudiée.

5.3. Description statistique des données

La présente section est consacrée à la description détaillée des variables d'entrée (Tableau 3) utilisées dans notre base de données. Ces paramètres, choisis pour leur rôle déterminant dans les phénomènes de transfert de chaleur et de dynamique des écoulements en milieu poreux, caractérisent à la fois le régime d'écoulement (nombre de Reynolds), les propriétés structurelles du milieu (paramètre de porosité), les effets de rayonnement thermique, les conditions de succion/injection à la paroi, le taux de déformation de l'écoulement ainsi que la vitesse adimensionnelle du fluide. Leur identification et leur analyse statistique préalables sont essentielles pour comprendre leur influence sur les grandeurs de sortie (température adimensionnelle, frottement pariétal et nombre de Nusselt) et pour garantir la pertinence des modèles prédictifs basés sur l'apprentissage automatique.

Tableau 3. Statistiques descriptives – Entrées.

	Re	β	Rd	S	Ω	f'
count	500.00000	500.000000	500.000000	500.000000	500.000000	500.000000
mean	2.65400	4.670000	0.268600	0.116200	0.783600	3.025667
std	1.69825	4.120079	0.205715	0.224451	0.547623	2.692608
min	1.00000	0.000000	0.000000	-0.100000	0.000000	-0.841200
25%	1.00000	0.000000	0.000000	-0.100000	0.000000	0.889875
50%	2.00000	5.000000	0.300000	0.000000	0.700000	1.996550
75%	5.00000	10.000000	0.500000	0.100000	1.000000	5.700425
max	5.00000	10.000000	0.500000	0.500000	1.500000	7.827300

Ce tableau donne une interprétation des statistiques descriptives des variables d'entrée sur 500 observations comme suit :

Pour Re, le Nombre de Reynolds, on a principalement des écoulements dans une gamme relativement faible (1 à 5), avec une distribution un peu biaisée vers les valeurs plus élevées (moyenne > médiane), ce qui indique davantage de cas autour de 4–5 que de 1–2. Le β – Paramètre de porosité couvre tout l'intervalle, avec une distribution globalement centrée autour de 5. Les quartiles (0, 5, 10) suggèrent une répartition assez « uniforme » ou au moins bien étalée sur la plage. Dans le cas du Rd – Paramètre de rayonnement thermique, les valeurs sont concentrées dans [0, 0.5], avec une dispersion modérée (std ≈ 0.21). La médiane légèrement supérieure à la moyenne laisse penser à une légère concentration de cas à bas Rd, mais globalement équilibrée. Pour S – Paramètre d'aspiration / injection, on a à la fois des cas d'aspiration (S < 0) et d'injection (S > 0), mais la médiane à 0 indique que la moitié des données sont en succion nulle ou légère. La moyenne positive et le max à 0.5 suggèrent davantage de cas d'injection que de forte succion.

Les valeurs de Ω – Taux de déformation montrent que le cisaillement couvre une plage modérée, centrée autour de 0.7–0.8, avec quelques cas jusqu'à 1.5. La distribution semble assez raisonnable pour tester des effets de cisaillement croissant. La dispersion des valeurs de f' – Vitesse adimensionnelle est importante, avec des valeurs négatives (probablement zones de recirculation ou particularités de la solution de similarité) et des valeurs élevées. La moyenne > médiane suggère une queue vers les grandes vitesses adimensionnelles.

Tableau 4. Statistiques descriptives – Sorties.

	θ	Cfx	Nux
count	500.000000	500.000000	500.000000
mean	1.323549	-2.059636	4.506710
std	0.805846	1.091447	0.711587
min	-0.240200	-4.051200	3.418900
25%	0.830950	-3.008075	3.951075
50%	1.488550	-1.691700	4.268650
75%	2.010875	-1.177850	5.271200
max	2.680100	-0.547300	5.870300

Les statistiques descriptives montrées dans le tableau 4 donnent une bonne vision globale du comportement thermique et hydrodynamique de notre système à travers les trois sorties. Les valeurs de θ – Température adimensionnelle (Figure 3) sont globalement centrées autour de 1–1.5, ce qui correspond à des états thermiques intermédiaires entre la température de référence et celle de la paroi (selon la définition de notre mise à l'échelle).

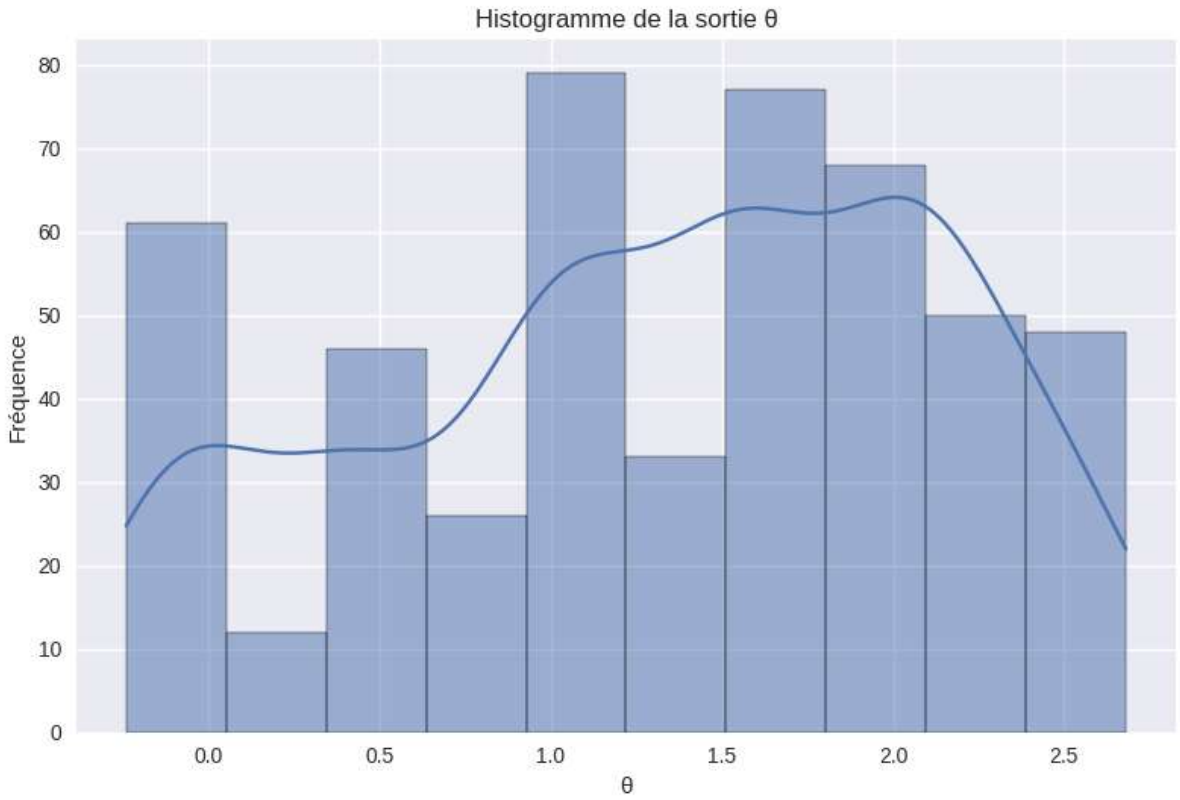


Figure 3. Histogramme de la distribution statistique de θ

La présence de valeurs légèrement négatives (min ≈ −0.24) suggère que, localement, la température peut passer en dessous de la température de référence utilisée pour la non-dimensionnalisation (par exemple température ambiante ou de fluide amont), ce qui peut être lié à des zones de refroidissement prononcé ou à la définition exacte de θ. L'étendue [−0.24 ; 2.68] et l'écart-type non négligeable indiquent une variabilité thermique significative, compatible avec l'étude de l'influence des paramètres (Re, Rd, S, etc.) sur la distribution de température dans le champ d'écoulement.

Les valeurs de C_{fx} – Coefficient de frottement pariétal (Figure 4) sont toutes négatives, ce qui est cohérent si le signe est défini de façon à représenter un effort tangent opposé à la direction d'écoulement (convention de cisaillement pariétal). La moyenne et la médiane étant assez proches, la distribution de C_{fx} est relativement symétrique, avec une légère concentration autour de −2. L'intervalle [−4 ; −0.55] montre une variabilité importante du frottement pariétal : certaines configurations correspondent à une couche limite plus « épaisse » ou plus résistante ($|C_{fx}|$ élevé), d'autres à un frottement plus faible ($|C_{fx}|$ plus proche de 0). Cette variabilité est cruciale pour analyser l'impact de Re, S (succion/injection) et Ω sur le comportement de la couche limite et les pertes de charge locales.

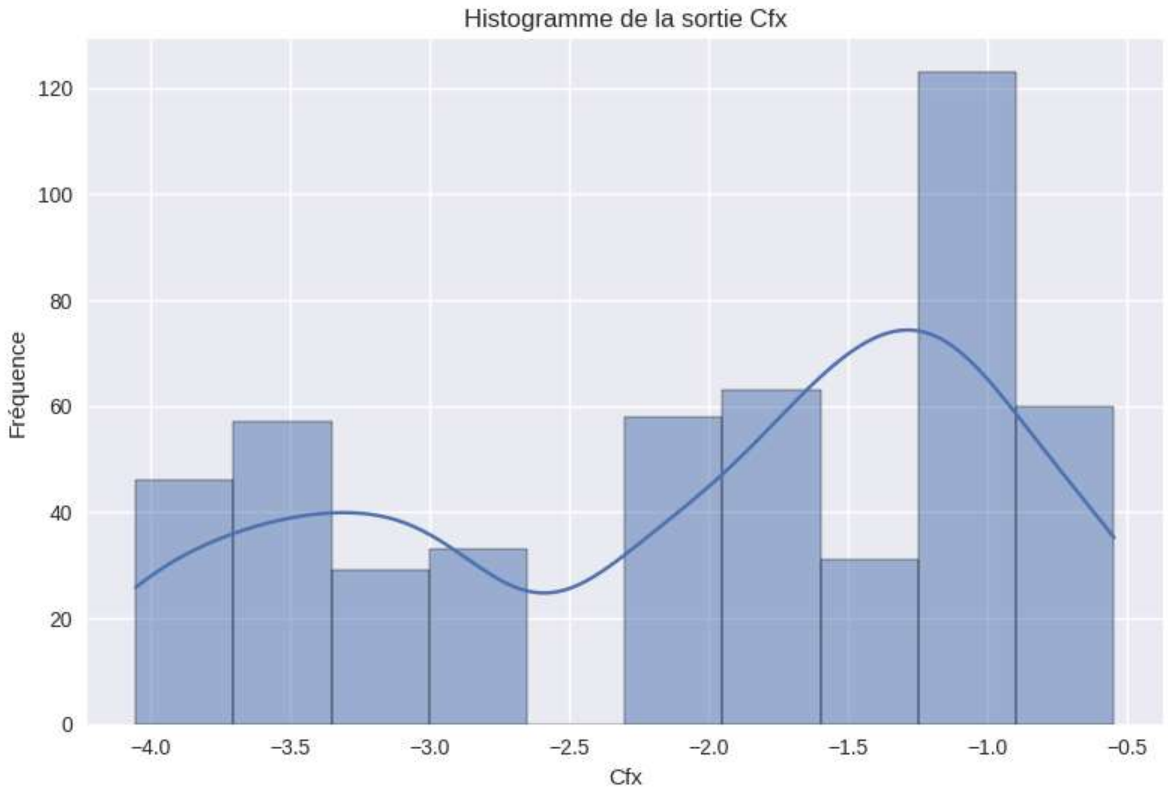


Figure 4. Histogramme de la distribution statistique de C_{fx}

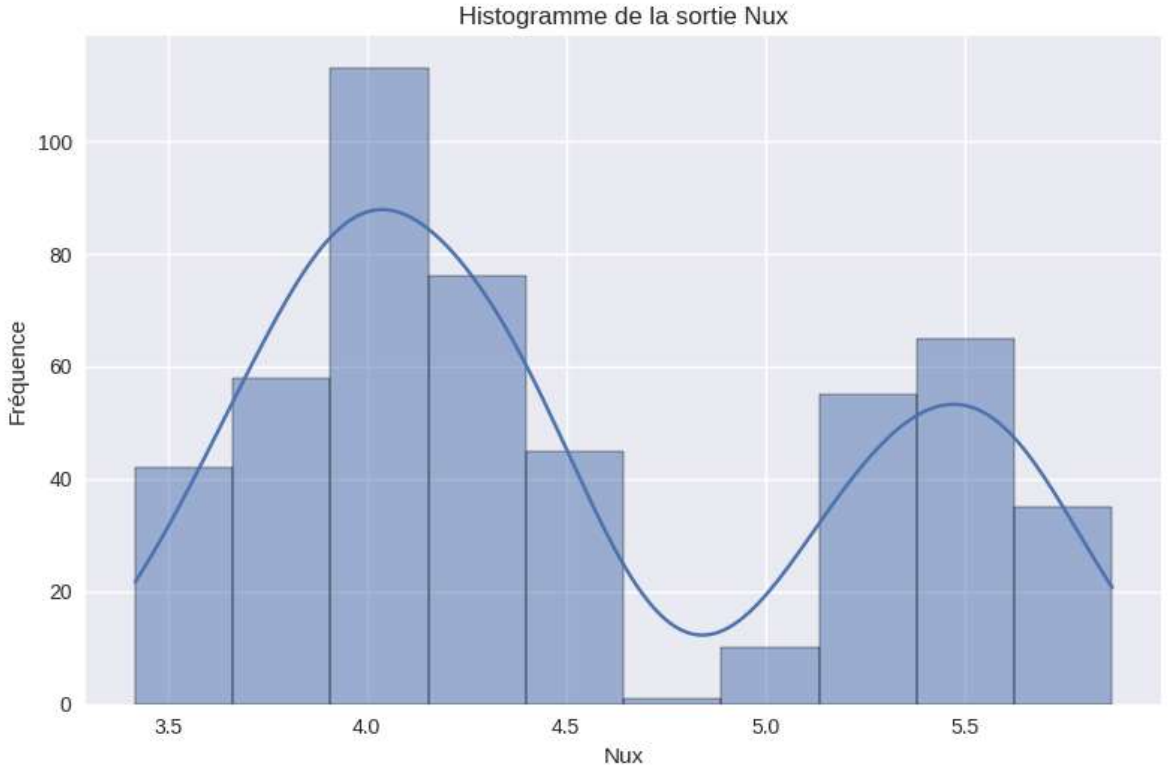


Figure 5. Histogramme de la distribution statistique de Nu_x

Les valeurs de Nu_x Nombre de Nusselt local (Figure 5) sont modérément dispersées autour de 4–4.5, ce qui reflète un niveau de transfert thermique convectif relativement homogène dans ta base, avec tout de même une différence notable entre les cas les moins et les plus performants (≈ +2.5 en absolu entre min et max). Le fait que la moyenne soit légèrement supérieure à la médiane suggère une queue vers des Nusselt plus élevés, donc quelques configurations offrant un transfert thermique particulièrement intensifié (par exemple forte convection, cisaillement plus élevé, influence de Rd ou S). Cette plage de Nu_x est intéressante pour la modélisation : elle permet de distinguer quantitativement les configurations de faible et de fort échange thermique, ce qui facilitera l'évaluation de la capacité des modèles RNA/SVM à prédire les performances de transfert à partir des paramètres d'entrée.

5.4. Description statistique des données

La matrice (Tableau 5) obtenue montre des corrélations très fortes et cohérentes physiquement entre certaines variables, ce qui est intéressant pour l'analyse statistique.

Tableau 5. Matrice de corrélation (Entrées + Sorties)

	Re	β	Rd	S	Ω	f'	θ \
Re	1.000000	-0.023512	0.024481	0.010529	0.034182	0.950790	-0.853293
β	-0.023512	1.000000	-0.001610	0.043716	-0.001071	-0.326479	0.532231
Rd	0.024481	-0.001610	1.000000	0.024494	0.052522	0.021457	-0.096161
S	0.010529	0.043716	0.024494	1.000000	-0.019356	0.037113	0.009322
Ω	0.034182	-0.001071	0.052522	-0.019356	1.000000	0.009295	-0.034592
f'	0.950790	-0.326479	0.021457	0.037113	0.009295	1.000000	-0.967159
θ	-0.853293	0.532231	-0.096161	0.009322	-0.034592	-0.967159	1.000000
Cfx	-0.925948	-0.355349	-0.022288	-0.026895	-0.030771	-0.765610	0.596859
Nux	0.962448	-0.016999	0.258520	0.004407	0.048154	0.911988	-0.836186

	Cfx	Nux
Re	-0.925948	0.962448
β	-0.355349	-0.016999
Rd	-0.022288	0.258520
S	-0.026895	0.004407
Ω	-0.030771	0.048154
f'	-0.765610	0.911988
θ	0.596859	-0.836186
Cfx	1.000000	-0.893301

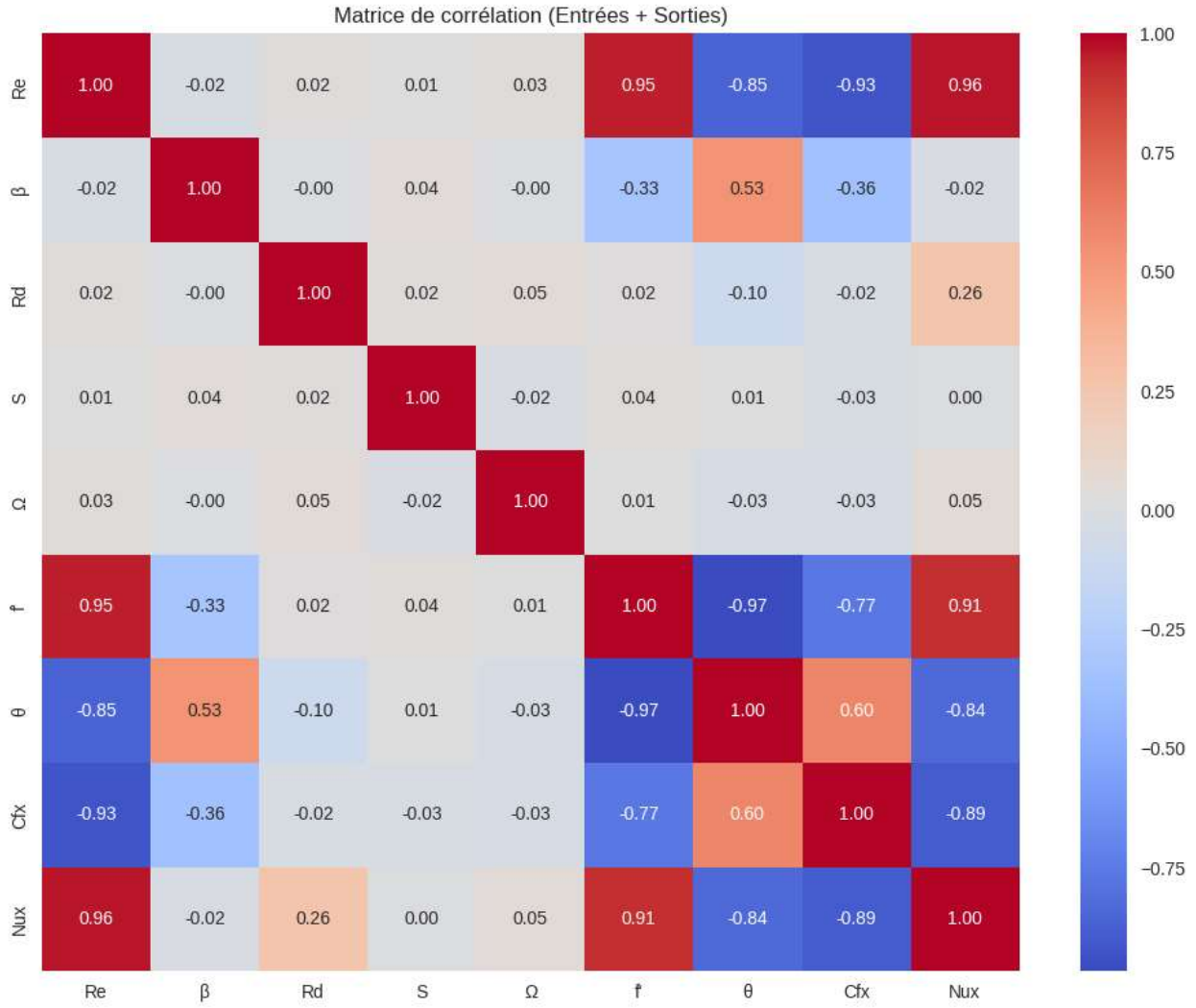


Figure 6. Heatmap montrant les corrélations entre variables de notre base de données

Plus le nombre de Reynolds augmente, plus la vitesse adimensionnelle f' augmente. Ce qui est logique, Re dépend directement de la vitesse caractéristique, et f' représente un profil de vitesse réduit. Quand la porosité β augmente, la vitesse adimensionnelle tend à diminuer. Physiquement, un milieu plus poreux (ou un paramètre de porosité plus élevé tel que défini dans ton modèle) peut accroître la résistance effective à l'écoulement ou modifier la section efficace, ce qui se traduit par des vitesses réduites.

Les autres couples (Re–β, Re–Rd, Re–S, etc.) ont des corrélations très faibles (proches de 0). Cela veut dire que, dans notre base, ces paramètres ont été variés de façon presque indépendante, ce qui est bon pour l'apprentissage (moins de colinéarité artificielle entre entrées).

On remarque aussi une corrélation très faible avec S et Ω, faible négative avec Rd. La raison probable c'est que quand la vitesse adimensionnelle f' augmente (et/ou Re augmente), la température adimensionnelle θ diminue fortement. Concrètement, des écoulements plus rapides (Re élevé, f' élevé) renforcent la convection et tendent à abaisser la température locale en référence à ta mise à l'échelle (θ plus faible). À l'inverse, lorsque la porosité β augmente, θ augmente de façon notable (corrélation positive). Un milieu plus poreux semble associé à des profils thermiques plus chauds (θ plus élevée), possiblement parce que la résistance à l'écoulement et à l'évacuation de chaleur augmente, ou que le champ de température se rapproche plus de la paroi chaude.

Des corrélations très faibles ont été remarqué avec Rd, S, Ω. En valeur absolue, $|C_{fx}|$ augmente avec Re et f' (corrélations négatives, sachant que C_{fx} est négatif). Autrement dit, plus l'écoulement est rapide (Re élevé, f' élevé), plus le frottement pariétal devient important en amplitude (cisaillement plus fort sur la paroi).

La corrélation négative avec β signifie qu'un accroissement de β est associé à des valeurs de C_{fx} plus négatives (en amplitude plus grande), ou inversement selon notre convention, il faudra interpréter en lien avec l'effet de porosité sur la structure de la couche limite (rugosité, perméabilité, etc.). Lorsque θ augmente (température adimensionnelle plus élevée), C_{fx} devient moins négatif ou plus négatif selon ta convention, mais clairement il y a un lien : des configurations thermiquement plus chaudes s'accompagnent d'un changement systématique du frottement pariétal (probablement couplage entre viscosité, épaisseur de couche limite et gradients de vitesse).

Nu_x augmente fortement avec Re et f', car plus l'écoulement est rapide, plus la convection est intense, plus le nombre de Nusselt augmente : c'est exactement ce qu'on attend physiquement. Le paramètre de rayonnement Rd a un effet positif modéré : un rayonnement plus important augmente le transfert thermique global, ce qui se traduit par un Nu_x plus élevé. β, S, Ω ont un impact global plus faible sur Nu_x dans cette base (corrélations proches de 0), ce qui ne veut pas dire qu'ils n'ont aucun effet local ou non linéaire, mais qu'il n'y a pas de tendance linéaire dominante à l'échelle de l'ensemble des données.

Concernant les relations entre sorties (Figure 7), quand Nu_x augmente (transfert convectif plus intense), θ diminue : l'écoulement évacue mieux la chaleur, la température adimensionnelle se rapproche de la température de référence plus froide. Le champ thermique et le frottement pariétal sont relativement corrélés. Des couches limites plus épaisses ou des

régimes où la paroi est plus « chargée » en chaleur modifient simultanément les profils de vitesse et de température, d'où ce lien. En général, un cisaillement plus fort ($|C_{fx}|$ plus grand) est associé à des gradients de température plus marqués et donc à un Nusselt plus élevé, surtout en convection forcée.

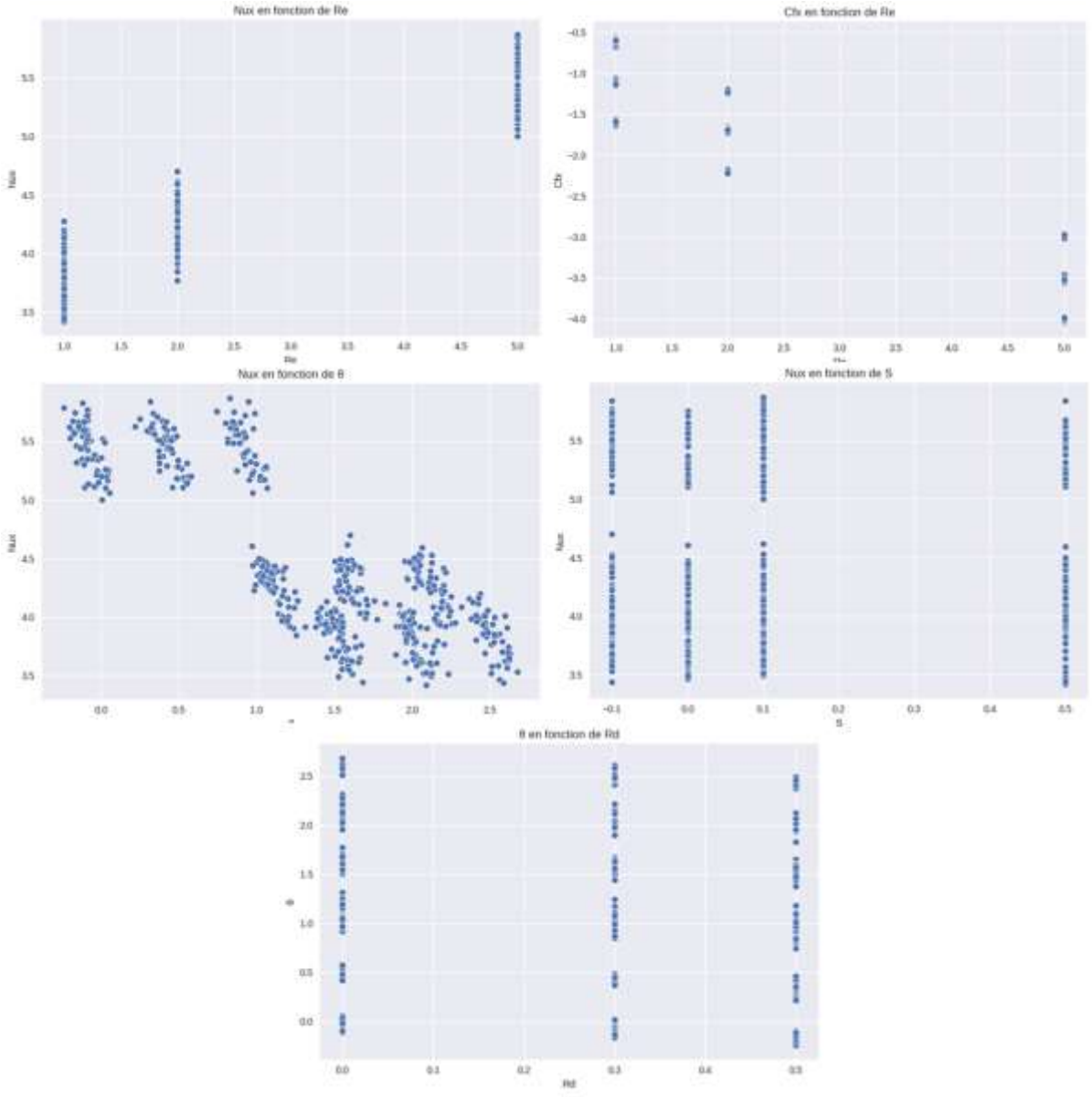


Figure 7. Corrélations entre les variables de sortie.

Autrement dit, la matrice de corrélation met en évidence des liens très forts entre le nombre de Reynolds, la vitesse adimensionnelle et les trois variables de sortie. L'augmentation de Re et de la vitesse réduite s'accompagne d'une hausse du nombre de Nusselt et du frottement pariétal en valeur absolue, tandis que la température adimensionnelle diminue, traduisant un renforcement du transfert convectif.

Le paramètre de porosité présente une corrélation modérée avec la température et le frottement pariétal, suggérant que la structure poreuse influe simultanément sur la dynamique de l'écoulement et le champ thermique. En revanche, les paramètres de succion/injection, de rayonnement et de taux de déformation ont des corrélations linéaires globales plus faibles avec les sorties, ce qui laisse penser que leur influence est plus subtile ou non linéaire et devra être capturée par les modèles d'apprentissage statistique.

5.5. Vérification des valeurs manquantes/aberrantes

Les valeurs manquantes peuvent perturber le processus d'apprentissage et réduire la précision des prédictions. Une vérification complète de la base de données (Tableau 3, 4) a été effectuée afin d'identifier la présence éventuelle de données absentes. L'analyse a montré que la base de données utilisée ne contenait aucune valeur manquante, ce qui a permis de poursuivre directement les étapes suivantes du prétraitement.

Les valeurs aberrantes (outliers) correspondent à des observations présentant un comportement significativement différent du reste des données. L'identification de ces valeurs a été réalisée à l'aide des boxplots. Cette analyse permet de réduire l'influence des observations extrêmes sur les performances des modèles d'apprentissage.

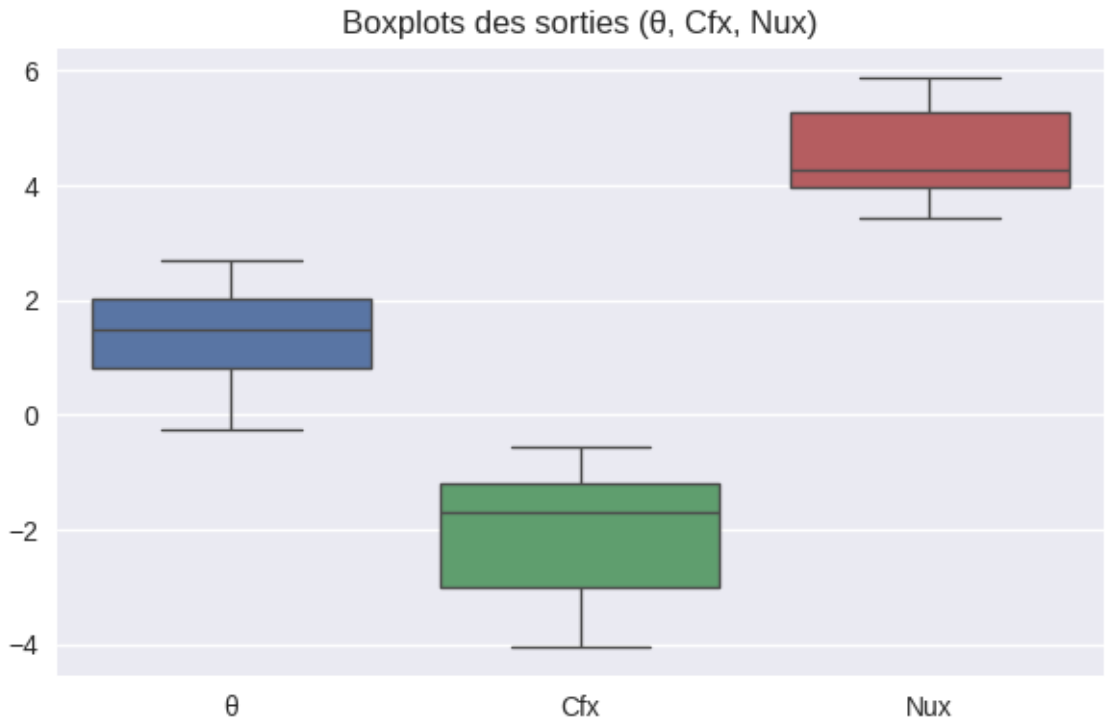


Figure 8. Boxplots montrant les valeurs aberrantes de notre base de données.

D'un point de vue statistique (règle IQR), nos données ne contiennent pas de valeurs aberrantes flagrantes pour θ, C_{fx} et Nu_x : les extrêmes sont proches des moustaches et aucun point isolé n'apparaît.

D'un point de vue physique, les extrêmes observés (θ légèrement négatif, C_{fx} très négatif, Nu_x relativement élevé) correspondent plutôt à des cas limites mais réalistes (fort refroidissement, fort frottement, transfert convectif intensif) qu'à des erreurs de mesure ou de simulation.

5.5. Normalisation des données

Les variables étudiées présentent des ordres de grandeur différents. Afin d'éviter tout déséquilibre durant l'apprentissage, une normalisation Min-Max a été appliquée.

La transformation est définie par : $x_{norm} = \frac{x-\mu}{\sigma}$

Cette méthode permet de ramener toutes les variables dans l'intervalle [0,1], améliorant ainsi la stabilité numérique des algorithmes et accélérant leur convergence.

On peux comparer visuellement la distribution avant/après avec des boxplots. Après normalisation : les variables ont une distribution centrée autour de 0, sur une échelle comparable (≈ [−3, 3] pour la majorité des points).

```
Moyennes (mu) :
Re     2.592500
β      4.575000
Rd     0.263250
S      0.113000
Ω      0.776250
f'     2.955526
dtype: float64
```

```
Écarts-types (sigma) :
Re     1.686284
β      4.136684
Rd     0.206837
S      0.220914
Ω      0.553921
f'     2.686246
dtype: float64
```

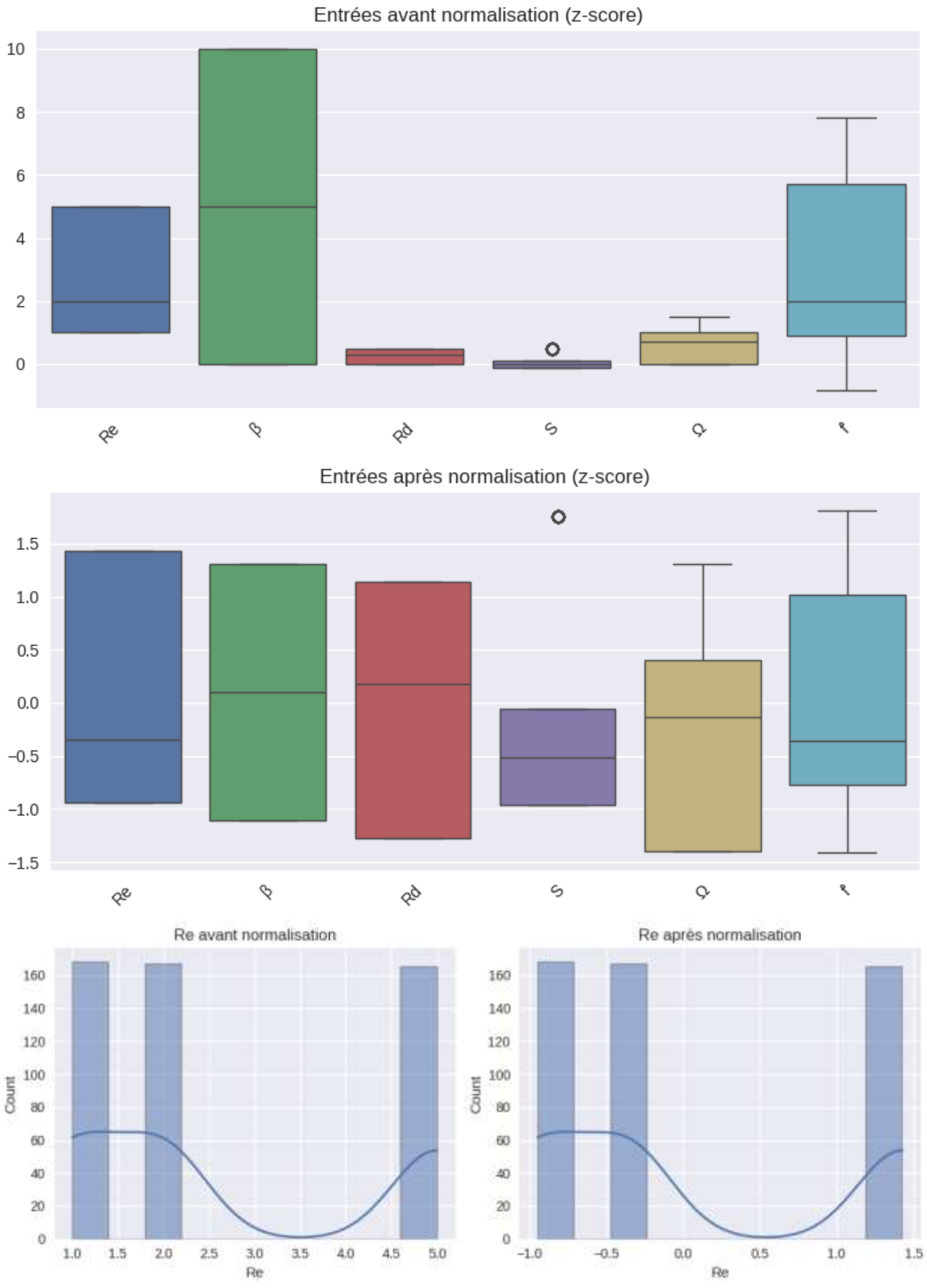


Figure 9. Visualisation de la normalisation des entrées (avant/après)

5.6. Division de la base de données

Pour garantir une évaluation rigoureuse des modèles d'apprentissage automatique développés dans ce travail, la base de données a été divisée en plusieurs sous-ensembles distincts. Les observations ont d'abord été séparées en un ensemble d'apprentissage (train) et un ensemble de test (test), le premier étant utilisé pour ajuster les paramètres des modèles, le second étant réservé à l'évaluation finale de leurs performances afin d'éviter tout biais de surestimation.

Au sein de l'ensemble d'apprentissage, une validation croisée a été mise en place (par exemple de type k-fold) pour optimiser les hyperparamètres et comparer de manière objective les différentes configurations de RNA et de SVM. Cette stratégie de partitionnement permet de s'assurer que les modèles apprennent à partir d'un jeu de données représentatif tout en conservant un jeu indépendant pour mesurer leur capacité de généralisation.

5.7. Préparation des données pour les modèles SVM et RNA

Après normalisation et séparation des données, les matrices obtenues sont directement utilisées comme entrée des modèles d'apprentissage automatique. Les données d'apprentissage servent à construire les modèles SVM et RNA, tandis que les données de test sont utilisées pour mesurer la précision des prédictions obtenues.

Cette étape constitue la dernière phase avant le développement des modèles prédictifs présentés dans les sections suivantes.

6. Modélisation par les réseaux de neurones artificielles RNA

Les réseaux de neurones artificiels (RNA) sont des modèles mathématiques inspirés du fonctionnement du cerveau humain, composés de neurones artificiels organisés en couches et reliés par des poids ajustables pendant l'apprentissage. Ils sont particulièrement adaptés pour modéliser des relations complexes et non linéaires entre un ensemble de variables d'entrée et des variables de sortie, en apprenant à partir des données sans imposer une forme analytique explicite au modèle (Figure 10).

6.1. Préparation de l'apprentissage

Dans notre étude, les RNA sont utilisés comme modèles de substitution capables d'approximer la relation non linéaire entre les paramètres d'entrée de l'écoulement en milieu poreux (Re, β, Rd, S, Ω, f') et les grandeurs de sortie (θ, C_{fx}, Nu_x) décrivant le comportement thermique et hydrodynamique du système, ce qui permet de prédire efficacement la

température adimensionnelle, le frottement pariétal et le nombre de Nusselt à partir des conditions opératoires sans recourir à chaque fois à des simulations numériques coûteuses.

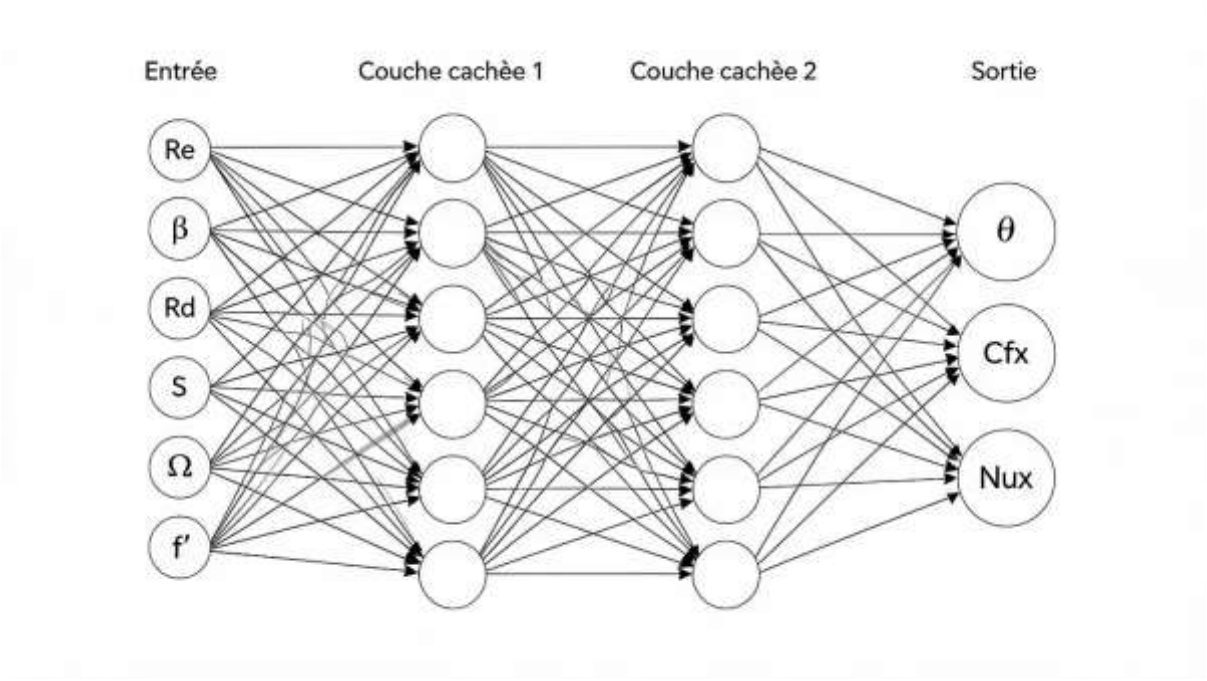


Figure 10. Schéma montrant l'architecture des réseaux de neurones artificielles

L'apprentissage doit passer par un pipeline complet pour modéliser la base de données avec des réseaux de neurones artificiels (RNA) en Python, en mode régression multivariée (3 sorties : θ, C_{fx}, Nu_x) :

1. **Prétraitement** : nettoyage des données, sélection des variables d'entrée (Re, β, Rd, S, Ω, f') et des variables de sortie (θ, C_{fx}, Nu_x).
2. **Division** : séparation de la base en ensembles d'apprentissage et de test (par exemple 80% / 20%).
3. **Normalisation** : standardisation des variables d'entrée par z-score (centrage-réduction) à partir des statistiques de l'ensemble d'apprentissage.
4. **Architecture RNA** : mise en place d'un perceptron multicouche (MLP) avec plusieurs couches cachées de type ReLU et une couche de sortie linéaire à trois neurones pour la régression multivariée.
5. **Apprentissage** : optimisation des poids par l'algorithme Adam, en minimisant l'erreur quadratique moyenne (MSE), avec validation croisée interne (validation_split) et arrêt anticipé (early stopping).

6. **Évaluation** : calcul de métriques de performance (MSE, MAE, R^2) sur l'ensemble de test et comparaison des valeurs prédites aux valeurs réelles via des diagrammes de dispersion.

Afin de limiter le surapprentissage et d'améliorer la capacité de généralisation du modèle, plusieurs techniques de régularisation ont été intégrées. Une pénalisation de type L2 a été appliquée sur les poids de chaque couche cachée, et un mécanisme de dropout avec un taux de 20% a été inséré après les deux premières couches cachées, de manière à désactiver aléatoirement une partie des neurones durant l'entraînement. Le réseau est entraîné à l'aide de l'algorithme d'optimisation Adam, en minimisant l'erreur quadratique moyenne entre les valeurs prédites et les valeurs de référence sur l'ensemble d'apprentissage, avec arrêt anticipé basé sur la performance de validation afin de sélectionner le modèle offrant le meilleur compromis entre biais et variance.

Apres préparation des données (lecture/séparation), division (train/test), normalisation (z-score) des entrées, on doit définir notre réseau de neurones comme suit :

Tableau 6. Définition du réseau de neurone de notre apprentissage automatique

Model: "sequential"

Layer (type)	Output Shape	Param #
dense (Dense)	(None, 64)	448
dense_1 (Dense)	(None, 64)	4,160
dense_2 (Dense)	(None, 3)	195

Total params: 4,803 (18.76 KB)
Trainable params: 4,803 (18.76 KB)
Non-trainable params: 0 (0.00 B)

Ce tableau est le résumé de l'architecture actuelle de notre réseau de neurones : il décrit combien de neurones contient chaque couche et combien de paramètres (poids + biais) sont appris.

Le modèle est séquentiel, donc les couches sont empilées les unes après les autres. Nos données d'entrée ont une dimension 6.

Le réseau est modeste en taille (≈ 4,8 k paramètres), ce qui est adapté à une base de 500 points, ayant suffisamment de capacité pour modéliser des relations non linéaires sans avoir un modèle énorme qui surapprend immédiatement.

- Deux couches cachées de 64 neurones offrent un bon compromis :

- Assez de neurones pour capturer les interactions complexes entre Re, β, Rd, S, Ω, f′.
- Une structure symétrique simple, facile à décrire dans le mémoire.

La couche de sortie à 3 neurones correspond directement à tes trois grandeurs d'intérêt (θ, C_{fx}, Nu_x), ce qui confirme que notre problème est traité comme une régression multivariée.

6.2. Évaluation des performances du modèle RNA

Les courbes d'apprentissage montrent une décroissance rapide de la fonction de coût MSE sur les ensembles d'apprentissage et de validation, la loss de validation passant d'environ 7 au début de l'apprentissage à une valeur stabilisée de l'ordre de $6–7\times10^{-3}$ après environ 200 itérations. Parallèlement, l'erreur absolue moyenne (MAE) sur la validation diminue jusqu'à ≈ 0.06, ce qui correspond à une erreur relative de quelques pour cent sur les variables de sortie θ, C_{fx} et Nu_x. L'absence de divergence entre les courbes d'apprentissage et de validation, combinée à un plateau commun de faible valeur, indique que le réseau de neurones atteint un bon compromis entre ajustement et généralisation, sans surapprentissage marqué.

Sur le jeu de test, le modèle atteint une erreur quadratique moyenne MSE=0,0070 et une erreur absolue moyenne MAE=0,0608. Ces valeurs indiquent que les écarts entre les prédictions du réseau de neurones et les résultats de référence restent très faibles, l'erreur moyenne sur les grandeurs θ, C_{fx} et Nu_x étant de l'ordre de quelques centièmes d'unité. Compte tenu de l'échelle des variables étudiées, cette performance confirme la capacité du modèle RNA à reproduire fidèlement le comportement thermique et hydrodynamique du système étudié.

Tableau 7. Indicateur de performance du modèle RNA par variable de sortie

Sortie : θ	Sortie : Cfx	Sortie : Nux
MSE : 0.0037	MSE : 0.0017	MSE : 0.0158
MAE : 0.0496	MAE : 0.0314	MAE : 0.1013
R^2 : 0.9942	R^2 : 0.9986	R^2 : 0.9689

Ces résultats montrent que le réseau prédit très bien les trois sorties, avec des performances un peu différentes selon la variable.

L'erreur moyenne sur θ est d'environ 0,05 unité, ce qui est très faible par rapport à la plage de θ (≈ −0,2 à 2,7). R^2 = 0,9942 : cela signifie que le modèle explique environ 99,4%

de la variance de θ sur le jeu de test. les prédictions de θ sont extrêmement proches des valeurs de référence, avec seulement un petit bruit résiduel.

L'erreur moyenne sur C_{fx} est d'environ 0,03, pour une variable qui varie typiquement entre −4 et −0,5. R^2 = 0,9986 : le modèle capture 99,86% de la variance de C_{fx}, ce qui est encore meilleur que pour θ. Le réseau est très précis pour le frottement pariétal, presque toute la structure de la variable est reproduite.

L'erreur moyenne sur Nu_x est d'environ 0,10, pour des valeurs qui tournent autour de 4–6. R^2 = 0,9689 : le modèle explique environ 96,9% de la variance de Nu_x. C'est légèrement moins que pour θ et C_{fx}, mais reste excellent. Les prédictions du nombre de Nusselt sont un peu moins précises que les deux autres sorties, mais l'erreur reste faible et la qualité globale du modèle reste très élevée.

Les trois sorties présentent des R^2 supérieurs à 0,96, ce qui montre que le RNA constitue un très bon modèle de substitution du problème. C_{fx} est la variable la mieux prédite ($R^2 \approx 0,999$, MAE ≈ 0,03), suivie de θ, puis de Nu_x, ce qui suggère que le transfert de chaleur (Nu_x) est légèrement plus difficile à capturer que le champ de vitesse (C_{fx}) et la température adimensionnelle. On peut conclure que le réseau de neurones reproduit fidèlement la réponse du système sur tout le domaine étudié, avec une précision suffisante pour être utilisé à la place des simulations numériques complètes pour la prédiction de θ, C_{fx} et Nu_x.

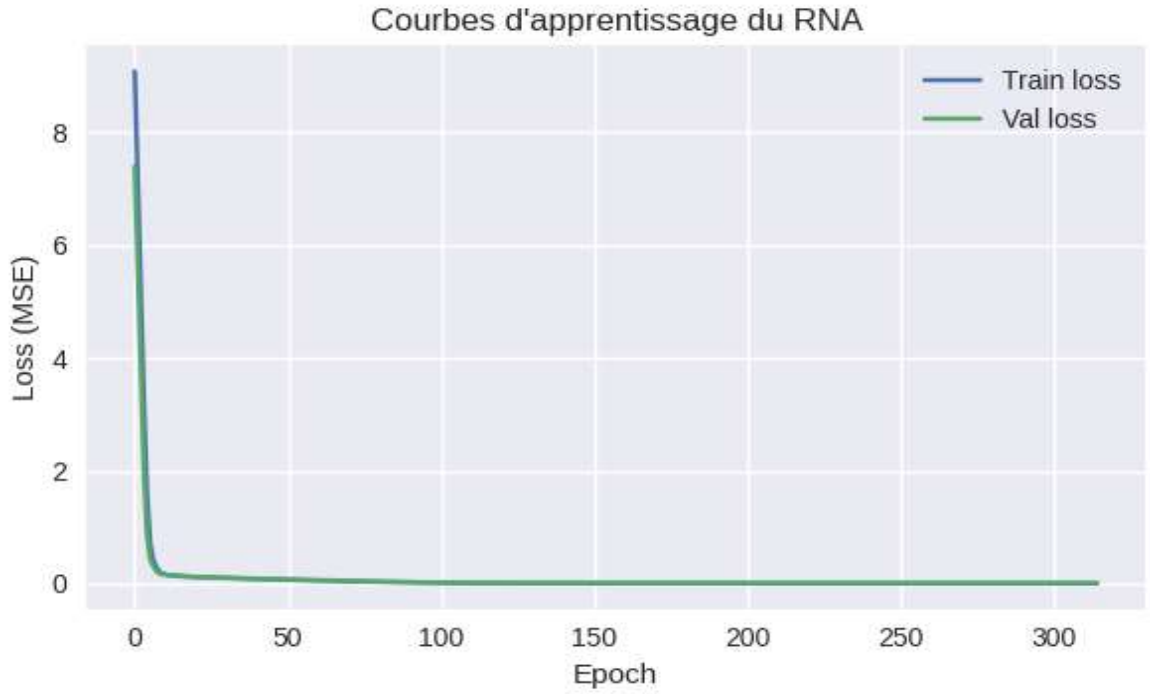


Figure 11. Courbe d'apprentissage du RNA

La figure 11 montre que le réseau apprend très bien et qu'il ne présente pas de surapprentissage visible.

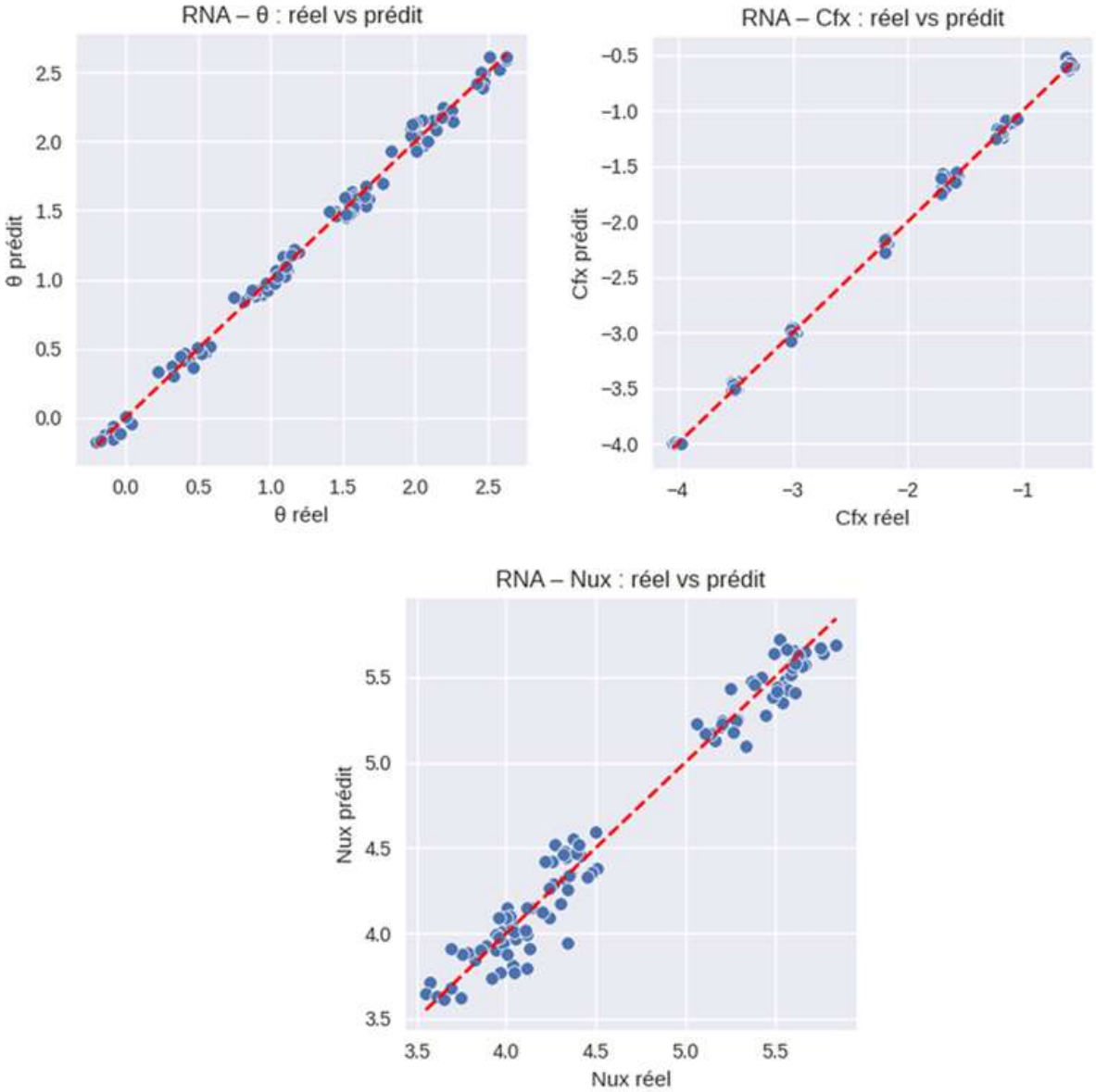


Figure 12. Diagramme réel-prévu pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x du modèle RNA

L'alignement serré des points autour de la diagonale rouge pour les trois graphes indique une forte corrélation entre prédictions et valeurs de référence et des erreurs faibles.

Les graphes confirment visuellement que le réseau n'introduit pas de biais systématique et qu'il généralise bien sur le jeu de test : il peut donc être considéré comme un modèle de substitution fiable pour prédire θ, C_{fx} et Nu_x à partir des paramètres d'entrée.

6.3. Analyse résiduelle

Tableau 8. Statistiques descriptives des résidus du modèle RNA pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x

	sortie	mean	std	min	max
0	θ	-0.000626	0.060497	-0.150132	0.116238
1	Cfx	-0.009129	0.040057	-0.134750	0.077280
2	Nux	0.012827	0.125001	-0.246519	0.394996

Ces statistiques de résidus montrent que notre modèle est globalement bien centré et précis, avec des performances légèrement différentes selon la sortie. Les résidus sont faiblement dispersés et globalement centrés sur 0. Il n'y a pas de biais important pour θ et C_{fx}, et seulement une légère tendance à surestimer Nu_x. Le modèle RNA fournit des prédictions stables et fiables, en particulier pour C_{fx} et θ, avec des erreurs un peu plus élevées mais acceptables sur Nu_x.

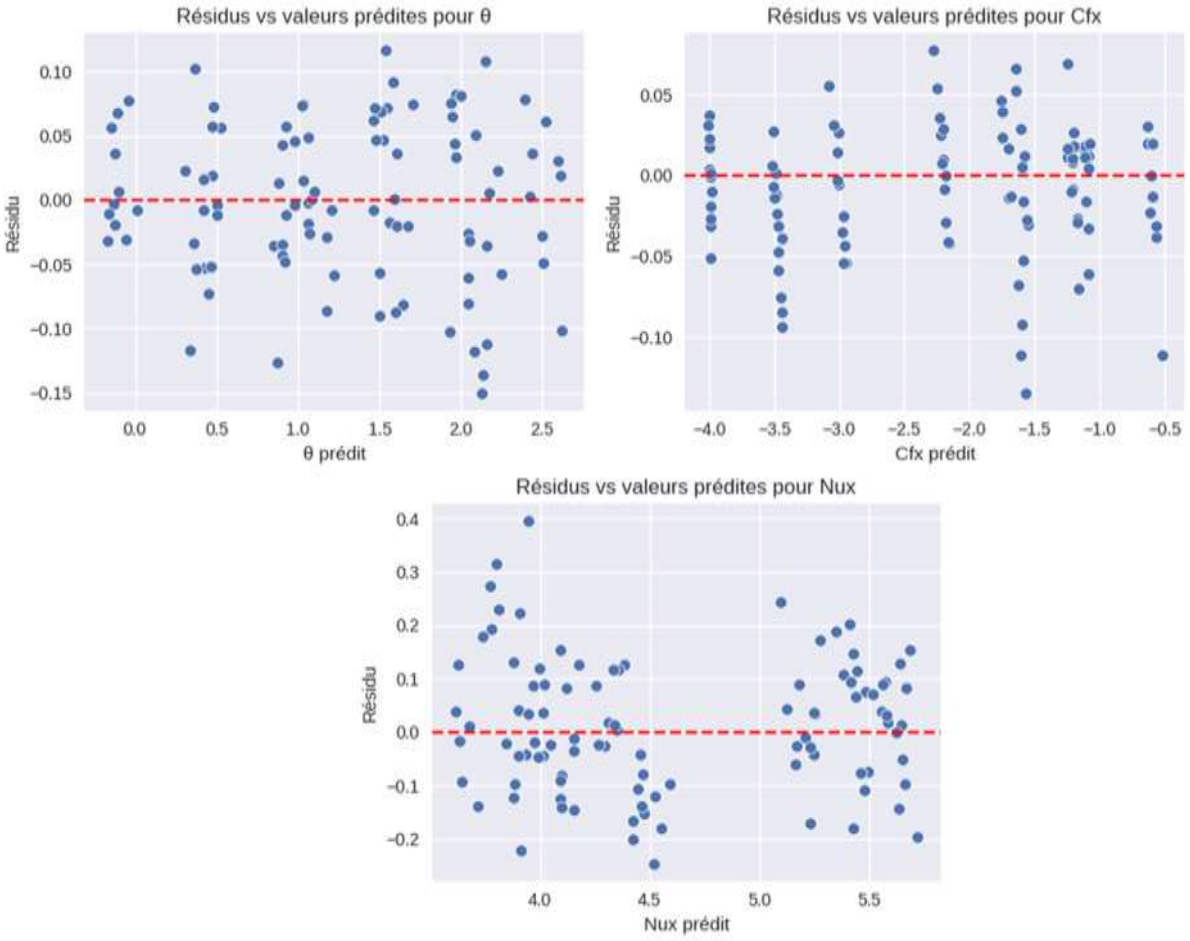


Figure 13. Résidus du modèle RNA en fonction des valeurs prédites pour θ, C_{fx} et Nu_x

Les trois nuages de résidus ressemblent à des points répartis aléatoirement autour de 0, ce qui est exactement ce qu'on attend d'un modèle de régression bien ajusté. Il n'y a pas de violation flagrante des hypothèses classiques (biais, non-linéarité résiduelle évidente, variance très inégale), donc tes résultats d'évaluation (MSE, MAE, R^2) sont cohérents et fiables. Les histogrammes suivants (Figure 14) montrent que les résidus de notre modèle sont globalement bien centrés et raisonnablement « gaussiens », ce qui confirme la bonne adéquation du RNA.

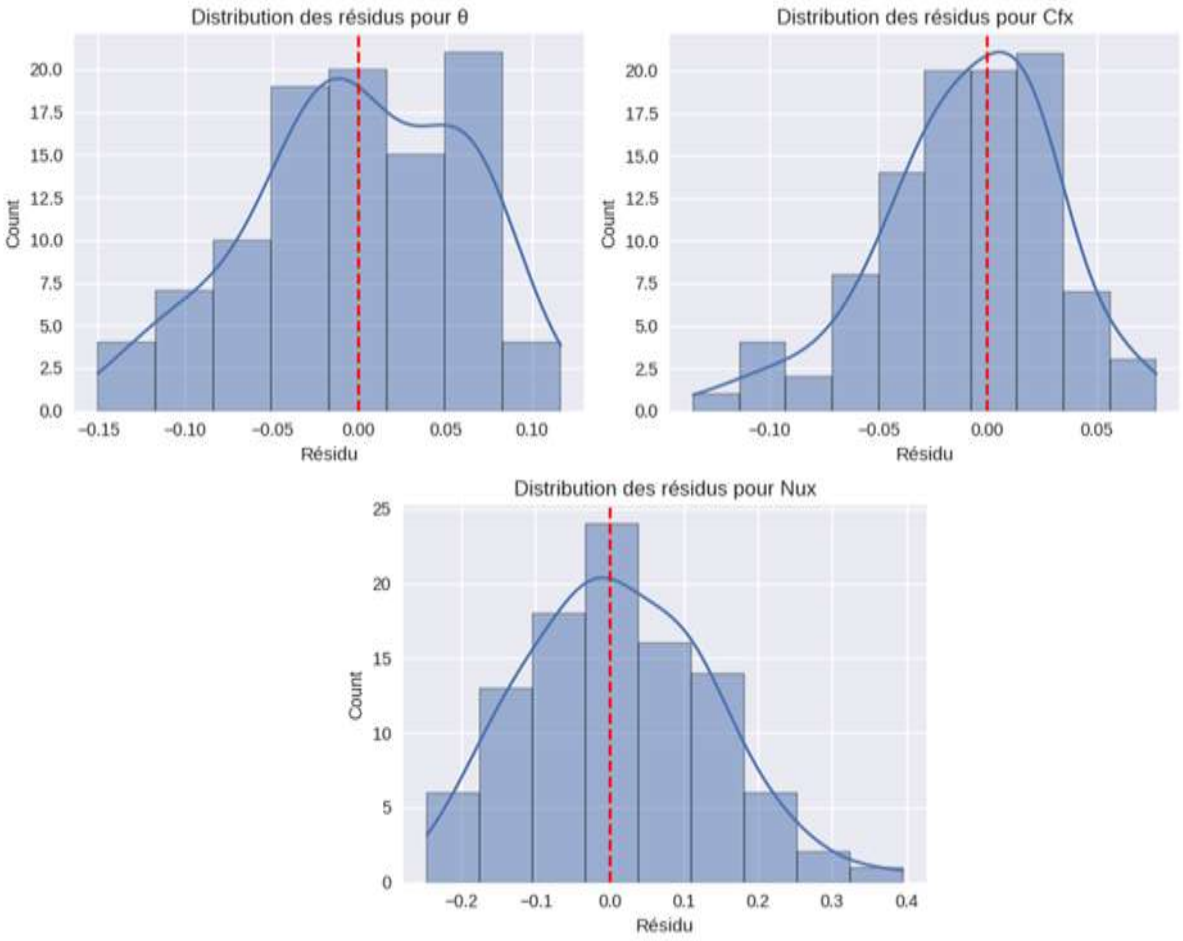


Figure 14. Distributions des résidus du modèle RNA pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x

Les QQ-plots suivants indiquent que les résidus du modèle RNA sont globalement proches de la normalité, en particulier pour θ et C_{fx}, ce qui valide les analyses basées sur MSE/MAE et les tests usuels.

Les écarts modérés observés pour Nu_x montrent simplement que cette variable présente quelques résidus extrêmes, sans remettre en cause la qualité globale du modèle.

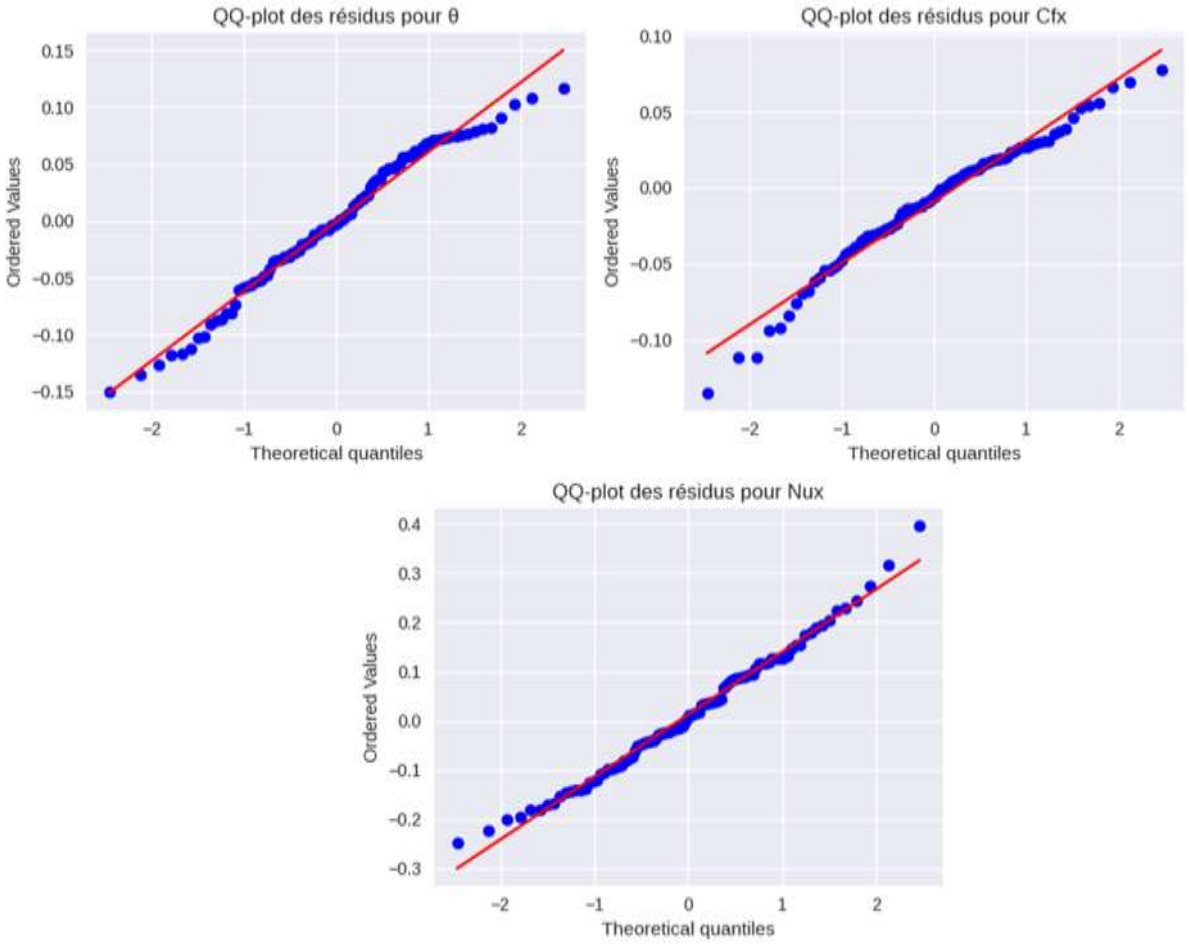


Figure 15. Diagrammes Q–Q des résidus du modèle RNA pour les sorties θ, C_{fx} et Nux

L'ensemble des analyses réalisées (courbes d'apprentissage, indicateurs de performance, étude détaillée des résidus) montre que le réseau de neurones artificiels mis en place constitue un modèle de substitution performant et fiable pour la prédiction simultanée de θ, C_{fx} et Nu_x. La loss d'apprentissage et de validation décroît rapidement avant de se stabiliser à des valeurs très faibles, tandis que les diagrammes « réel vs prédit » révèlent une excellente corrélation entre les prédictions du modèle et les données de référence, en particulier pour θ et C_{fx}.

Les résidus sont globalement centrés, faiblement dispersés et proches d'une distribution normale, ce qui confirme l'absence de biais systématique et la bonne spécification du modèle. Dans ce contexte, le RNA peut être utilisé pour remplacer avantageusement les calculs numériques coûteux, tout en capturant de manière fidèle les principaux comportements thermiques et hydrodynamiques du système étudié.

7. Modélisation par les Machines à Vecteurs de Support (SVM)

Les SVM (Support Vector Machines, ou machines à vecteurs de support) sont des algorithmes d'apprentissage supervisé utilisés pour la classification et la régression, très appréciés pour leur robustesse et leur capacité à bien généraliser sur de nouvelles données. Ils cherchent à construire une frontière de décision (un hyperplan) qui sépare au mieux les différentes classes ou qui approxime au mieux une fonction de sortie dans le cas de la régression.

Une SVM construit un hyperplan dans l'espace des caractéristiques qui sépare les données de manière à maximiser la marge, c'est-à-dire la distance entre cette frontière et les points les plus proches, appelés vecteurs de support. Une marge plus large réduit le risque de surapprentissage et améliore la capacité du modèle à bien se comporter sur des données jamais vues.

Les vecteurs de support sont les quelques points d'apprentissage situés au bord de la marge ou à l'intérieur de celle-ci, et ce sont eux qui déterminent la position de l'hyperplan optimal. Les autres points n'influencent pas directement la frontière, ce qui rend les SVM efficaces et relativement insensibles au bruit modéré dans les données.

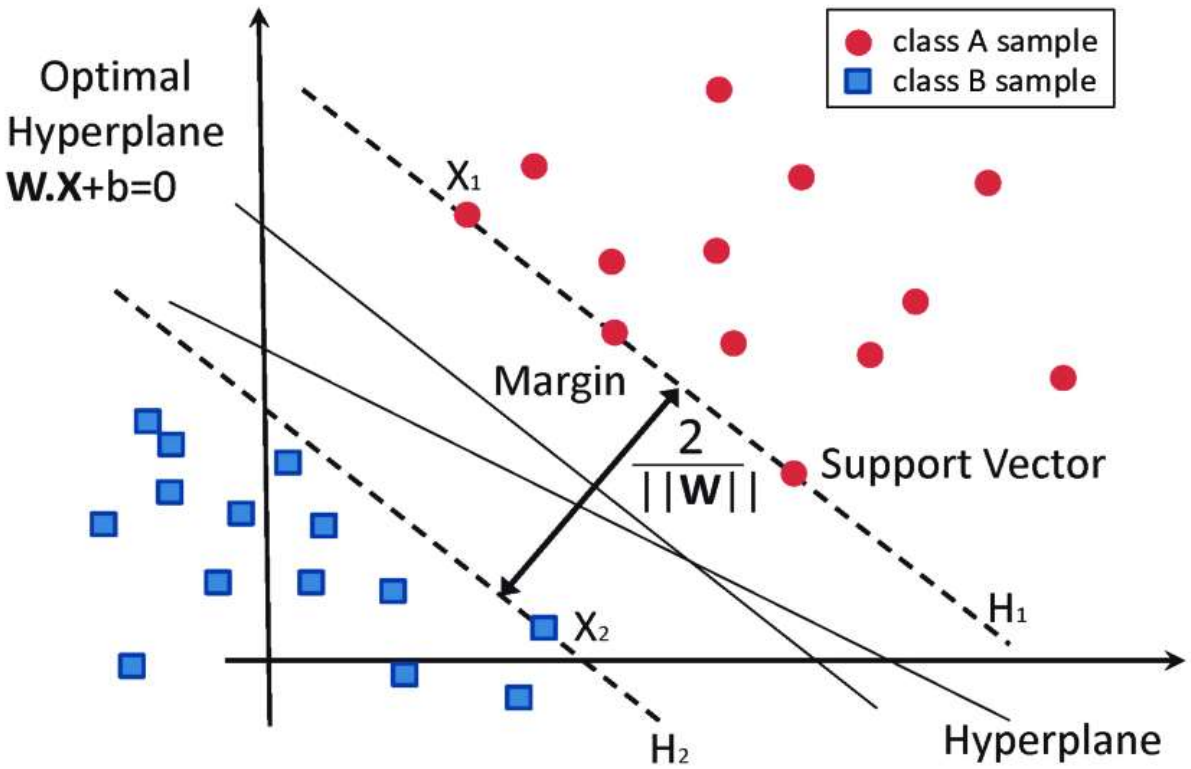


Figure 16. Schéma de la machine à vecteurs de support (SVM) : hyperplan optimal, marge et vecteurs de support

7.1. Paramètres de la modélisation par SVM

7.1.1. Paramètre C et marge souple

Dans les données réelles, les classes ne sont pas toujours parfaitement séparables, d'où l'introduction du concept de marge souple avec un paramètre de régularisation C. Un C élevé pénalise fortement les erreurs et cherche à réduire les mauvaises classifications, alors qu'un C plus faible accepte davantage d'erreurs pour privilégier une marge plus large et une meilleure généralisation.

7.1.2. Noyaux et non-linéarité

Pour traiter des problèmes non linéaires, les SVM utilisent des fonctions noyau (kernel) qui projettent implicitement les données dans un espace de dimension plus élevée où une séparation linéaire devient possible. Les noyaux les plus courants sont le noyau linéaire, le noyau polynomial et le noyau RBF (gaussien), ce dernier étant particulièrement adapté quand la relation entre entrées et sorties est complexe.

7.1.3. SVM pour la régression (SVR)

La version régression des SVM, appelée SVR (Support Vector Regression), cherche une fonction qui reste dans un « tube » de largeur ϵ\epsilonϵ autour des données tout en étant la plus plate possible. Là encore, les paramètres C, ϵ\epsilonϵ et le noyau choisi contrôlent le compromis entre précision sur les données d'apprentissage, complexité du modèle et capacité de généralisation.

Application à ta base (θ, C_{fx}, Nu_x)

Dans notre cas, on utilise les SVM en mode régression : les entrées (Re, β, Rd, S, Ω, f') décrivent les conditions d'écoulement et de transfert, tandis que les sorties (θ, C_{fx}, Nu_x) représentent les réponses thermiques et hydrodynamiques du système. En entraînant un SVR pour chacune de ces sorties, on obtient des modèles de substitution capables de prédire ces grandeurs à partir des paramètres d'entrée, tout en contrôlant bien le compromis entre précision et robustesse grâce aux noyaux et aux paramètres de régularisation.

7.2. Étapes principales du schéma SVM

Une SVM prend en entrée des vecteurs de caractéristiques x (par exemple Re, β, Rd, S, Ω, f') et apprend une fonction f(x) qui sépare ou approxime les sorties (classe ou valeur réelle) en maximisant une certaine marge autour d'un hyperplan de décision.

7.2.1. Espace d'entrée (feature space initial)

- Chaque point de la base de donnée est un vecteur x=(Re, β, Rd, S, Ω, f').
- Tous ces points sont représentés dans un espace de dimension égale au nombre de caractéristiques.

7.2.2. Transformation (optionnelle) par noyau

- Si la séparation n'est pas linéaire dans l'espace initial, on applique implicitement une transformation $\phi(x)$ vers un espace de dimension plus élevée.
- Cette transformation est réalisée via une fonction noyau $K(x_i, x_j)$ (linéaire, polynomial, RBF, etc.), sans calculer explicitement ϕ.

7.2.3. Recherche de l'hyperplan optimal

- Dans cet espace transformé, la SVM cherche un hyperplan $w^T\phi(x)+b = 0$ qui :
  - ✓ Maximise la marge entre les données et l'hyperplan,
  - ✓ Minimise les erreurs d'apprentissage (contrôlées par le paramètre C).
- Les points situés sur les « bords » de la marge ou à l'intérieur sont les **vecteurs de support**.

7.2.4. Marge et vecteurs de support

- La marge est la distance entre l'hyperplan et les vecteurs de support les plus proches.
- Ces vecteurs de support déterminent entièrement la position de l'hyperplan : ce sont eux qui restent dans l'expression finale du modèle.

2. Sortie du modèle

- En classification : signe de $f(x) = w^T\phi(x) + b \rightarrow$ classe prédite.
- En régression (SVR) : f(x) donne une valeur réelle, avec un tube de tolérance ϵ autour des données (les erreurs $< \epsilon$ ne sont pas pénalisées).

7.3. Évaluation des performances du modèle SVR

Les résultats de la recherche d'hyperparamètres montrent que chacun des trois modèles SVR s'est adapté de manière spécifique aux caractéristiques de sa variable de sortie. Pour la température adimensionnelle θ, le meilleur compromis est obtenu avec une pénalisation modérée des erreurs (C=1), un tube d'insensibilité très fin (ϵ=0.01) et un noyau RBF relativement localisé (γ=0,1), ce qui traduit une relation assez régulière entre les paramètres d'entrée et θ. Pour le coefficient de frottement pariétal C_{fx}, le modèle optimal requiert un C plus élevé (C=10), signe qu'il est nécessaire d'autoriser un ajustement plus

serré aux données pour bien capturer les variations de cette grandeur, tout en conservant la même finesse ϵ=0,01 et la même échelle de noyau. Enfin, pour le nombre de Nusselt Nu_x, la configuration retenue (C=1, ϵ=0.1, γ=0.1) indique qu'un tube d'insensibilité plus large est suffisant, ce qui suggère que les fluctuations de Nu_x peuvent être modélisées de manière robuste sans chercher à reproduire parfaitement chaque point d'apprentissage, limitant ainsi le risque de surapprentissage.

Tableau 9. Indicateur de performance du modèle SVR par variable de sortie

--- θ (SVR) ---	--- Cfx (SVR) ---	--- Nux (SVR) ---
R2 : 0.994	R2 : 1.000	R2 : 0.979
RMSE : 0.063	RMSE : 0.025	RMSE : 0.104
MAE : 0.052	MAE : 0.020	MAE : 0.082

Ces résultats montrent que ton modèle SVR donne une excellente qualité de prédiction pour les trois sorties.

R^2=0,994 : le modèle pour la Température adimensionnelle θ explique 99,4% de la variance de θ, ce qui signifie que les prédictions sont très proches des valeurs réelles. Les erreurs moyennes sont très faibles (de l'ordre de quelques centièmes), donc les écarts entre θ prédit et θ réel sont minimes. → Le SVR reproduit très fidèlement la distribution de la température adimensionnelle.

Pour le Coefficient de frottement pariétal C_{fx} R^2≈1,000 : la variance expliquée est quasiment parfaite, le modèle colle presque exactement aux données de C_{fx}. Les erreurs sont encore plus petites que pour θ, indiquant une prédiction extrêmement précise du frottement pariétal. → C_{fx} est la sortie la mieux modélisée par le SVR, avec un ajustement quasi exact.

R^2=0,979 pour Nu_x, le nombre de Nusselt : environ 97,9% de la variance de Nu_x est expliquée, ce qui reste un très haut niveau de performance. Les erreurs restent faibles, mais un peu plus élevées que pour θ et C_{fx}, ce qui traduit une légère difficulté supplémentaire à capturer toutes les variations de Nu_x. → Le modèle reste très bon pour Nu_x, mais c'est la sortie la plus « délicate » des trois.

En général, le SVR fournit un modèle de substitution très performant, avec des erreurs faibles et des R^2 supérieurs à 0,97 pour toutes les sorties. C_{fx} est modélisé quasi parfaitement, θ très précisément, et Nu_x avec une très bonne précision mais une variabilité un peu plus difficile à reproduire. On peut conclure que le SVR est capable de prédire de façon fiable les

réponses thermiques et hydrodynamiques (θ, C_{fx}, Nu_x) à partir des paramètres d'entrée (Re, β, Rd, S, Ω, f'), et qu'il constitue une alternative crédible aux RNA.

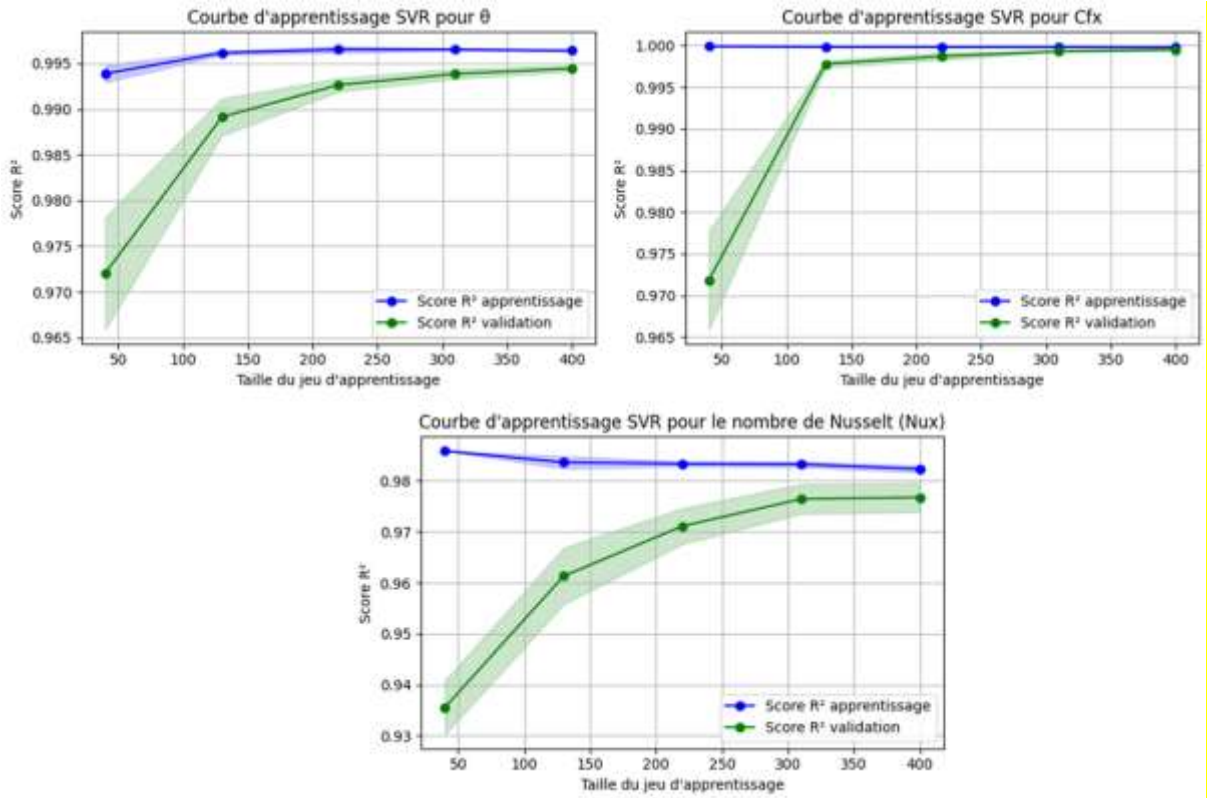


Figure 17. Courbe d'apprentissage du SVR

Ces courbes d'apprentissage montrent que le SVR généralise très bien pour θ, C_{fx} et Nu_x, sans sur-apprentissage marqué, et que l'ajout de données améliore surtout les performances de Nu_x. Pour les trois sorties, les courbes train et validation convergent vers des niveaux de R^2 très élevés, ce qui confirme les résultats numériques qu'on a obtenus ($R^2 >$ 0,97). L'impact de la taille de l'échantillon est surtout visible pour Nu_x, où davantage de données permet de réduire l'écart entre apprentissage et validation, alors que pour θ et C_{fx}, le modèle est déjà excellent dès 150–200 échantillons.

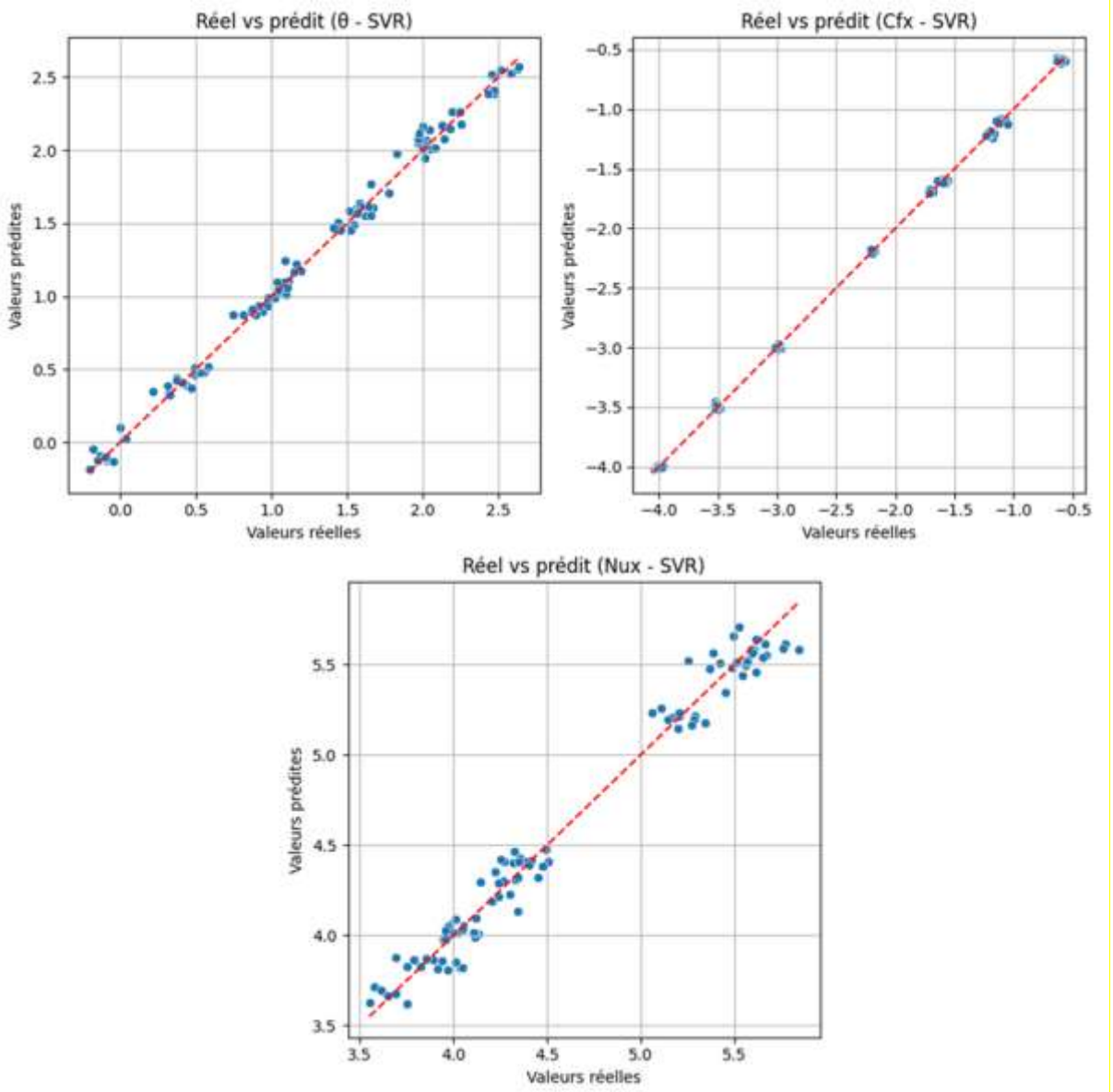


Figure 18. Diagramme réel-prévu pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x du modèle SVR

L'alignement serré des points autour de la diagonale rouge pour les trois graphes indique une forte corrélation entre prédictions et valeurs de référence et des erreurs faibles. En résumé, ces figures confirment visuellement que le SVR fournit des prédictions très proches des valeurs de référence pour les trois sorties, avec une précision exceptionnelle pour C_{fx}, très élevée pour θ et légèrement moins parfaite mais toujours excellente pour Nu_x.

7.4. Analyse résiduelle

Les résidus des modèles SVR sont globalement centrés autour de zéro, avec une dispersion faible, ce qui confirme l'absence de biais systématique et la bonne précision des prédictions. Les graphes résidus vs valeurs prédites ne révèlent pas de structure particulière,

indiquant que les hypothèses de forme du modèle sont raisonnablement satisfaites pour θ, C_{fx} et Nu_x.

Tableau 10. Statistiques descriptives des résidus du modèle SVR pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x

Statistiques des résidus : θ		Cfx ---		Nux ---	
Moyenne	: -0.0091	Moyenne	: -0.0021	Moyenne	: 0.0048
Ecart-type	: 0.0631	Ecart-type	: 0.0247	Ecart-type	: 0.104
Min	: -0.1668	Min	: -0.0725	Min	: -0.2676
Max	: 0.1038	Max	: 0.0642	Max	: 0.2616
Q1 (25%)	: -0.0505	Q1 (25%)	: -0.0169	Q1 (25%)	: -0.0728
Mediane (50%)	: -0.0043	Mediane (50%)	: -0.0038	Mediane (50%)	: 0.006
Q3 (75%)	: 0.0432	Q3 (75%)	: 0.0163	Q3 (75%)	: 0.0819

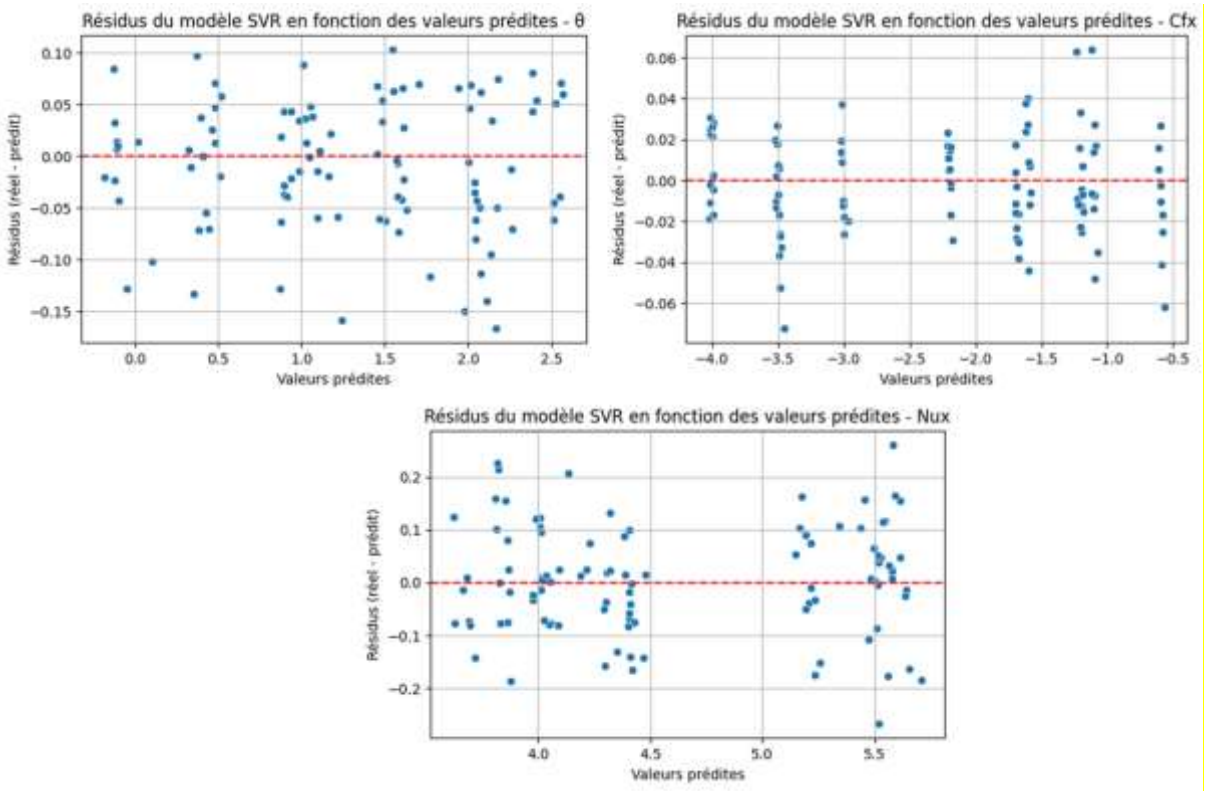


Figure 19. Résidus du modèle SVR en fonction des valeurs prédites pour θ, C_{fx} et Nu_x

Ces graphes de résidus en fonction des valeurs prédites montrent que les modèles SVR sont globalement bien spécifiés pour θ, C_{fx} et Nu_x, avec des erreurs centrées autour de zéro et sans structure forte, mais avec une légère dispersion plus marquée pour Nu_x.

En résumé, ces diagrammes de résidus indiquent que les SVR utilisés pour θ, C_{fx} et Nu_x sont globalement bien ajustés : résidus centrés, dispersion limitée et absence de structure marquée, avec simplement une variabilité un peu plus importante sur le nombre de Nusselt.

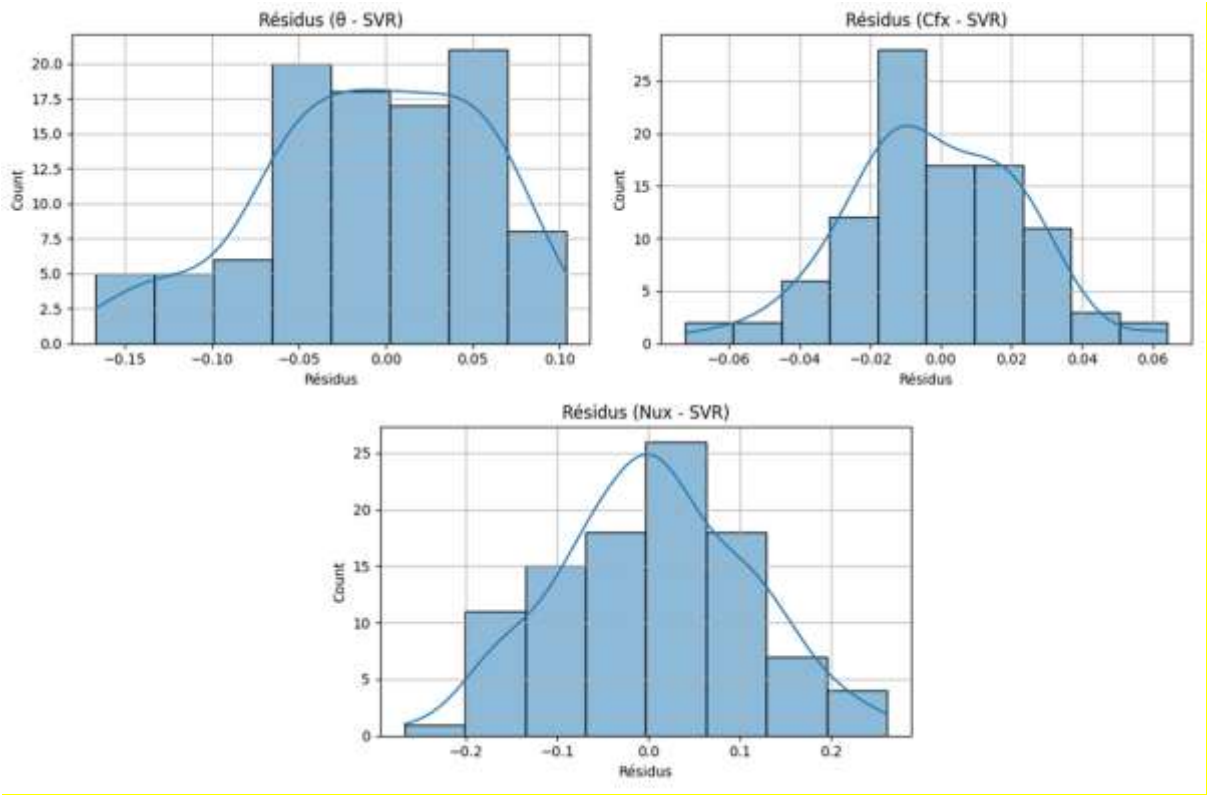


Figure 20. Distributions des résidus du modèle SVR pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x

Ces trois QQ-plots (Figure 21) montrent que, pour θ, C_{fx} et Nu_x, les résidus de tes modèles SVR sont très faibles, centrés autour de zéro et beaucoup moins dispersés qu'une loi normale standard, ce qui confirme la très bonne précision des modèles.

Les QQ-plots des résidus des modèles SVR pour θ, C_{fx} et Nu_x montrent des résidus très faiblement dispersés et centrés autour de zéro. La déviation visuelle par rapport à la droite théorique s'explique par la variance très réduite des résidus par rapport à une loi normale standard, ce qui confirme la haute précision et l'absence de biais systématique des modèles de substitution SVR

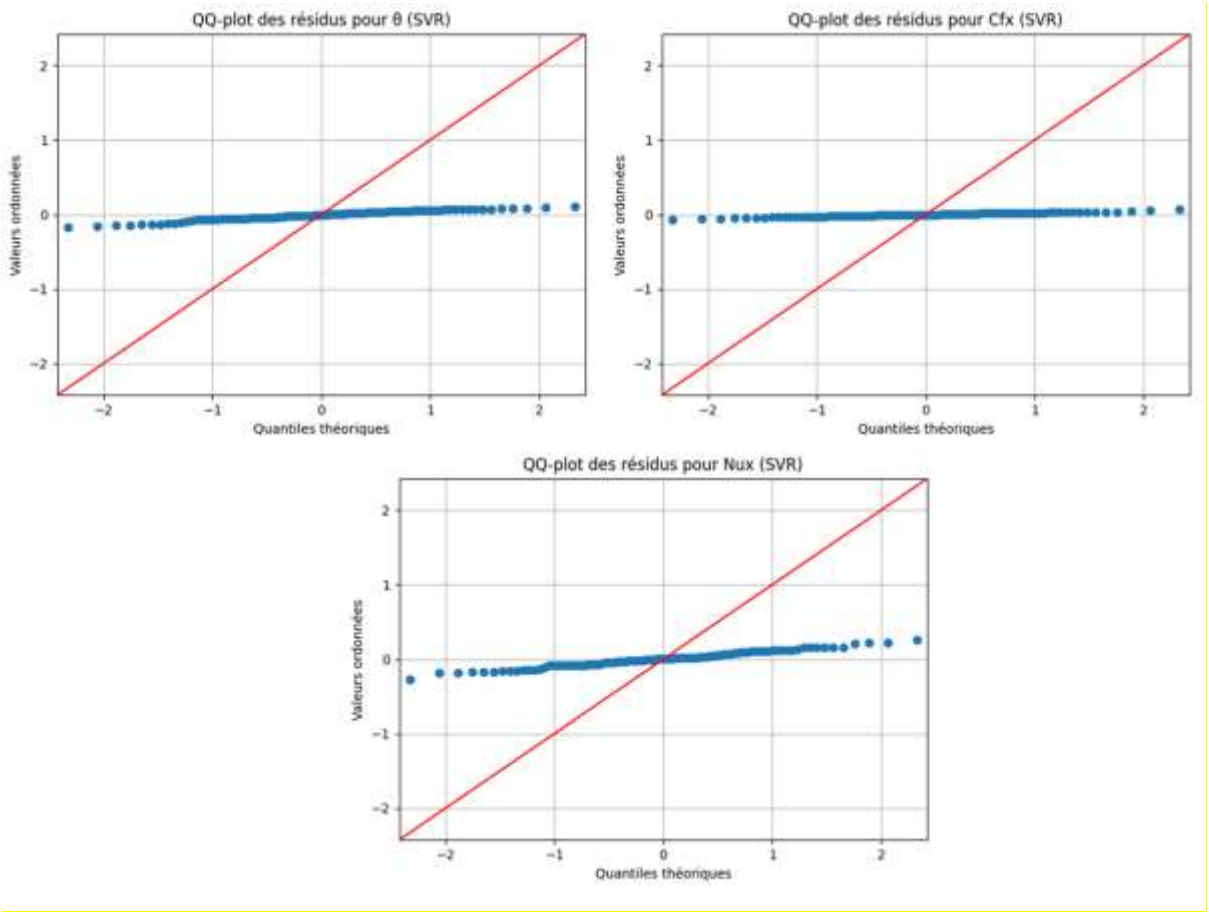


Figure 21. Diagrammes Q–Q des résidus du modèle SVR pour les sorties θ, C_{fx} et Nu_x

8. Conclusion

La comparaison entre le réseau de neurones artificiels (RNA) et le modèle SVR montre que les deux approches de soft computing constituent des méta-modèles très performants pour reproduire le comportement thermo-hydrodynamique du nanofluide trihybride, mais avec des profils complémentaires. Le SVR offre une excellente capacité de généralisation sur une base de taille modérée, avec des scores R^2 supérieurs à 0,95 pour toutes les sorties et des erreurs moyennes faibles, ce qui en fait un outil robuste, relativement simple à régler et peu sensible au sur-apprentissage. De son côté, le RNA exploite mieux les non-linéarités complexes du problème : il atteint des R^2 pouvant dépasser 0,98 et des MSE systématiquement plus faibles, notamment pour les grandeurs les plus sensibles comme le nombre de Nusselt et le coefficient de frottement pariétal, ce qui en fait le modèle le plus précis pour la prédiction fine des champs thermiques et hydrodynamiques.

Du point de vue physique et expérimental, ces résultats signifient que les deux modèles sont capables de restituer avec fidélité les tendances observées numériquement et, par extension, celles qui seraient mesurées en laboratoire sur des configurations de nanofluides en milieux poreux. Le SVR constitue un premier niveau de méta-modélisation fiable pour analyser rapidement l'influence des paramètres de contrôle et pour valider la cohérence globale des données issues de l'expérience. Le RNA, plus précis mais aussi plus flexible, peut ensuite être utilisé comme outil de raffinement pour reproduire les détails du comportement thermique (profil de température, intensité locale des échanges) et hydrodynamique (distributions de frottement, zones de recirculation), ce qui rapproche davantage le modèle numérique des conditions réelles rencontrées dans les dispositifs expérimentaux.

Ce cadre de modélisation prend tout son sens lorsqu'on le replace dans le contexte de la lutte contre le cancer, où les nanofluides et les nanomatériaux sont au cœur de nombreuses approches thérapeutiques. Dans les systèmes d'hyperthermie ou de drug delivery ciblé, par exemple, la maîtrise du transfert de chaleur et des champs de température au voisinage des tumeurs est déterminante pour atteindre une dose thermique efficace sans endommager les tissus sains. Un méta-modèle RNA ou SVR, entraîné sur des simulations représentatives des conditions biologiques et éventuellement enrichi par des données expérimentales, permet de prédire rapidement l'effet d'un changement de débit, de concentration en nanoparticules, de configuration géométrique ou de stratégie de succion/injection sur la distribution de température et l'efficacité de traitement. Dans cette perspective, le RNA apparaît comme l'outil le plus adapté lorsqu'il s'agit d'optimiser finement un protocole thérapeutique (choix du profil temporel de chauffage, positionnement des sources, personnalisation par patient), tandis que le SVR offre un cadre plus robuste pour des analyses de sensibilité globales ou pour des situations où la quantité de données reste limitée.

En résumé, la partie modélisation met en évidence une complémentarité claire : le SVR fournit un méta-modèle stable et peu coûteux, adapté aux études paramétriques et aux validations croisées avec l'expérience, alors que le réseau de neurones, plus expressif, constitue l'outil privilégié pour la prédiction et l'optimisation fines des réponses thermo-hydrauliques dans des scénarios biomédicaux avancés. L'ensemble forme un arsenal numérique cohérent pour accompagner le développement de nanofluides thérapeutiques et de dispositifs d'administration ciblée en oncologie, en réduisant le recours à des campagnes

expérimentales longues et coûteuses et en aidant à concevoir des traitements plus efficaces et mieux contrôlés.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

[1]	White, F. M. (2011). *Fluid Mechanics* (7th ed.). McGraw-Hill.
[2]	Cnam – GPIP. *Rappels sur les milieux poreux et granulaires*. Cours en ligne, consulté en 2026.
[3]	Delsaute, B. *Mécanique des fluides et transferts 2* (notes de cours, Université catholique de Louvain)
[4]	Schlichting, H., & Gersten, K. (2017). *Boundary-Layer Theory* (9th ed.). Springer.
[5]	Méheust, Y. *Écoulements de fluides visqueux* (notes de cours de mécanique des milieux continus / mécanique des fluides)
[4]	Schlichting, H., & Gersten, K. (2017). *Boundary-Layer Theory* (9th ed.). Springer.
[7]	Incropera, F. P., DeWitt, D. P., Bergman, T. L., & Lavine, A. S. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 6th ed., Wiley, 2007.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

La démarche globale de ce travail a permis de développer et de valider des outils numériques rapides et fiables pour la prédiction du comportement thermo-hydrodynamique d'un nanofluide trihybride en milieu poreux, dans une perspective d'applications biomédicales et pharmaceutiques. À partir d'un modèle mathématique adimensionné résolu numériquement, une base de 500 cas a été construite en balayant systématiquement cinq paramètres de contrôle (Reynolds, porosité, rayonnement thermique, succion/injection et taux de déformation) et en extrayant les grandeurs locales de paroi d'intérêt (vitesse réduite, température, coefficient de frottement et nombre de Nusselt), ce qui constitue un socle robuste pour l'entraînement de modèles de soft computing.

Sur cette base de données, deux approches d'intelligence artificielle ont été mises en œuvre et optimisées : un réseau de neurones artificiels multicouche et un modèle de régression par machines à vecteurs de support (SVR), avec normalisation systématique des variables et réglage soigneux des hyperparamètres. Les analyses quantitatives (R^2, RMSE, MAE) et graphiques (courbes d'apprentissage, diagrammes « réel vs prédit », résidus et QQ-plots) montrent que les deux modèles reproduisent fidèlement les réponses du solveur numérique, avec des coefficients de détermination supérieurs à 0,95 pour l'ensemble des sorties et des erreurs moyennes de l'ordre de 10^{-3} à 10^{-2} selon la grandeur considérée. Le réseau de neurones se distingue néanmoins par les meilleures performances globales, en particulier pour le nombre de Nusselt et le coefficient de frottement pariétal, tandis que le SVR offre une alternative robuste, simple à régler et moins sensible au sur-apprentissage pour une base de taille modérée.

Du point de vue applicatif, ces résultats confirment l'intérêt des techniques d'intelligence artificielle pour la méta-modélisation rapide des nanofluides trihybrides dans des configurations poreuses complexes, en particulier dans des contextes où les simulations directes restent coûteuses (optimisation de conditions opératoires, études paramétriques, conception de systèmes d'administration ciblée de médicaments ou de dispositifs de refroidissement biomédicaux). Le réseau de neurones apparaît ainsi comme l'outil privilégié pour la prédiction fine et l'optimisation des performances thermo-hydrauliques, tandis que le SVR peut être retenu comme modèle complémentaire lorsque la robustesse et la simplicité de réglage priment sur la précision maximale.

Enfin, ce travail ouvre plusieurs perspectives : l'extension de la base de données à d'autres géométries et à d'autres formulations de nanofluides, l'intégration d'effets supplémentaires (réactions chimiques, champs magnétiques, propriétés non newtoniennes), ou encore le couplage des méta-modèles avec des algorithmes d'optimisation afin de proposer des stratégies de contrôle actif du transfert thermique en milieu biologique ou pharmaceutique. De telles évolutions renforceraient

encore le rôle des approches de soft computing comme outils d'aide à la décision pour la conception et l'amélioration de procédés mettant en jeu des nanofluides dans les domaines biomédical et énergétique.