

# Accélération de calcul multi-niveaux pour la modélisation numérique de microcapsules en écoulement

*Laboratoire* : Biomécanique et Bioingénierie (UMR CNRS-UTC 7338), UTC Compiègne

*Equipe de recherche* : Interactions Fluides-Structures Biologiques (<http://www.utc.fr/~salsacan/>)

*Champs EURAXESS* : Biomedical Engineering, Mechanical Engineering, Simulation Engineering, 3D Modelling, Modelling Tools, Computational Mathematics

## Sujet de thèse

### 1. Contexte de l'étude

Les micro-capsules sont des gouttes fluides entourées d'une membrane mince élastique. Elles sont courantes dans la nature (ex : globules rouges) et dans de nombreuses applications industrielles (biotechnologie, pharmacologie, cosmétique, industrie agroalimentaire) [1]. Dans le contexte de la bio-ingénierie, les microcapsules artificielles sont utilisées pour protéger et transporter des principes actifs, en les isolant du fluide externe suspendant. Une application médicale à haut potentiel est leur utilisation pour la **thérapie ciblée**, qui nécessite de contrôler temporellement et spatialement l'apport d'un principe actif. Du point de vue de la mécanique, les capsules sont soumises à de grandes déformations une fois injectées dans l'écoulement sanguin, à cause des interactions fortes avec ce dernier. Pour comprendre le comportement d'une suspension de capsules en **écoulement dans un microcanal** (seringue, vaisseau sanguin, ...), le recours à des modélisations numériques est nécessaire, mais la résolution de ce problème aux physiques couplées et hautement non-linéaires génère des temps de calcul longs, ce qui est un facteur limitant pour leur application.

Dans la thèse, nous nous intéresserons à l'écoulement confiné **d'une suspension diluée de capsules** dans un microcanal, et en particulier au cas de microcapsules circulant dans des microcanaux présentant une constriction, de telles situations se produisant en pratique dès l'entrée de la suspension dans l'aiguille de la seringue d'injection. Les études antérieures [2-3] ont montré que des blocages pouvaient se produire même pour des suspensions diluées (dès deux capsules en interaction).

Le défi sera de réduire les temps de calcul au moyen de techniques d'accélération multi-niveau. Les objectifs du projet sont de combiner des techniques d'accélération matérielle (parallélisation, calcul GPU) avec des innovations numériques (techniques de réduction de modèles intrinsèques ou intégrées au modèle numérique complet – full-order model) pour accélérer les simulations des interactions fluide-structure entre une/des capsule (s) et l'écoulement dans un canal (avec ou sans constriction).

### 2. Simulation numérique haute définition de microcapsules dans un canal avec et sans constriction

L'écoulement et la déformation de microcapsules seront modélisés numériquement au moyen du code Caps3D, qui couple le solveur solide Eléments Finis avec une méthode des intégrales de frontières pour résoudre les équations de Stokes 3D [4-7]. Un challenge de taille sera de diminuer les temps de calcul, et de rendre possible des simulations dans des régimes d'écoulement complexes multi-capsules. Nous voulons travailler sur plusieurs volets : optimisation du code et parallélisation, intégration de techniques d'accélération de calcul d'intégrales par apprentissage, ajout de pré-conditionnement innovant dans la résolution des systèmes d'équations, etc. Les résultats seront comparés au code Caps3D dans sa version initiale, et dans sa version couplée à Basilisk [7-11].

Une fois le code opérationnel, une étude paramétrique sera réalisée pour créer une base de données et quantifier l'influence de la géométrie du canal (diamètres et longueurs des sous-parties, forme de constriction) et des propriétés géométriques et mécaniques des capsules sur leur écoulement. On étudiera l'influence des interactions multi-capsules sur le potentiel blocage de la

constriction. Cela permettra d'apporter des réponses à la question scientifique de la variété des écoulements de capsules dans des canaux à section variable et de leur blocage.

### 3. Modèles réduits pour prédire en temps réel l'écoulement de capsules dans un canal

L'objectif de la 2<sup>ème</sup> partie de la thèse sera d'appliquer/développer des techniques d'apprentissage statistiques et d'intelligence artificielle. Pour réduire les temps de calcul, nous développerons des **modèles réduits** à partir des bases de données obtenues avec le calcul haute-fidélité. Dans la continuité de travaux antérieurs [12-16], nous utiliserons des techniques couplant décomposition en modes propres (POD), décomposition par modes dynamiques (DMD, EDMD, kernel-DMD). Les modèles permettront une très forte accélération en temps de calcul, tout en permettant une analyse fine de la physique du problème.

#### Encadrants :

Le(a) doctorant(e) sera intégré(e) au Laboratoire Biomécanique et Bioingénierie (BMBI - UTC) et travaillera en collaboration avec le Laboratoire de Mathématiques de Compiègne (LMAC - UTC) et l'Institut Jean Le Rond d'Alembert (IJLRA - SU). Les 3 équipes d'accueil offrent des compétences complémentaires en simulations numériques et réduction de modèles, indispensables à la mise en œuvre du projet centré sur un problème de biomécanique des fluides.

- **Anne-Virginie Salsac** (DR CNRS, BMBI, directrice de thèse) est spécialisée dans l'étude des écoulements sanguins, de la microcirculation à l'hémodynamique dans les grands vaisseaux, et de techniques endovasculaires (microencapsulation pour thérapie ciblée, colles et microsphères pour l'embolisation vasculaire, stents, ...). Elle développe des recherches originales sur la modélisation des écoulements physiologiques en se focalisant sur l'étude des interactions fluides-structures (IFS) qui se produisent avec des structures flexibles (membranes de microcapsules et cellules, parois vasculaires, dispositifs biomédicaux). Elle a une longue expertise dans la modélisation numérique de microcapsules (code Caps3D), et couple à cela une expertise expérimentale, ce qui permet le transfert des résultats théoriques vers des applications pratiques (caractérisation mécanique, tri, enrichissement de suspensions de cellules ou capsules). <http://www.utc.fr/~salsacan/>

- **Florian de Vuyst** (Prof, LMAC) est spécialisé dans le développement de nouveaux outils pour la modélisation numérique en mécanique des fluides, avec un focus en particulier sur la modélisation d'ordre réduit. Il est spécialisé dans le développement de techniques numériques pour modéliser des problèmes multiphysiques d'ingénierie et optimiser des problèmes grande échelle par des approches de réduction de modèles. Il a aussi travaillé sur des algorithmes de CFD accélérés sur GPU. <https://fdevuyst.jimdo.com/>

- **Jose-Maria Fullana** (Prof, IJLRA) a une très grande expertise dans les méthodes numériques pour écoulements diphasiques. Avec l'équipe, ils développent des logiciels « open source » axés sur la simulation directe pour des écoulements interfaciaux (gouttes, bulles, ondes) dans des configurations complexes, (i) soit industrielles comme l'atomisation primaire et secondaire des jets, (ii) soit académiques comme les écoulements microfluidiques ou l'éclatement des bulles. Les logiciels (ParisSimulator, Gerris et Basilisk) sont basés sur la résolution des équations de Navier-Stokes avec tension de surface sur maillages cartésiens. <http://www.lmm.jussieu.fr/~fullana/>

#### Adéquation à l'Institut ISCD

Le projet, centré autour de la modélisation mathématique et simulation numérique multiphysique, et appliqué à un problème dans le domaine de la Santé (utilisation de microcapsules déformables à cœur liquide pour la thérapie ciblée), rentre pleinement dans les contours de l'Institut ISCD. Ses verrous scientifiques sont en effet (i) l'optimisation de codes couplés dans un but de calcul intensif, (ii) l'obtention d'une base de données de résultats, et (iii) l'analyse de données via des techniques de réduction de modèles, basées sur la décomposition tensorielle, la méthode DMD, ...

#### Profil du candidat

Nous recherchons un candidat hautement motivé, dynamique et rigoureux, pleinement investi et qui ait les compétences suivantes :

- Socle solide de connaissances en mécanique des solides et/ou fluides et en simulation numérique/analyse numérique
- Des connaissances en biomécanique/parallélisation de codes/réduction de modèles seront un plus. On attend un candidat qui soit force de proposition/innovation sur le plan algorithmique.
- Très bonne maîtrise de l'anglais (écrit, oral) et si possible du français
- Gestion de projet, capacité à s'adapter dans un contexte interdisciplinaire, esprit d'équipe

### Documents requis pour candidater

Les candidats intéressés pourront envoyer par email une lettre de motivation, avec un CV complet, les copies de notes des différentes années post-baccalauréat, et au moins une lettre de recommandation et/ou contact de référents.

Anne-Virginie Salsac (Directrice de Recherche CNRS), [a.salsac@utc.fr](mailto:a.salsac@utc.fr)

Florian de Vuyst (Prof), [florian.de-vuyst@utc.fr](mailto:florian.de-vuyst@utc.fr)

Jose-Maria Fullana (Prof), [fullana@lmm.jussieu.fr](mailto:fullana@lmm.jussieu.fr)

### **Références :**

- [1] Patwardhan S.A., Das K.G. Microencapsulation. In Das K.G. editor, *Controlled release technology - bioengineering aspects*, 121–141, Wiley, New York, 1983.
- [2] Bielinski C., Aouane O., Harting J., Kaoui B. Squeezing multiple soft particles into a constriction: Transition to clogging. *Physical Review E*. 104, 065101 (2021).
- [3] Marin I., Lhuissier H., Rossi M., Kähler C. Clogging in constricted suspension flows. *Physical Review E*. 97, 065101 (2017).
- [4] Walter J., Salsac A.-V., Barthès-Biesel D., Le Tallec, P. Coupling of finite element and boundary integral methods for a capsule in a Stokes flow. *Int. J. Num. Meth. Eng.* 83, 829-850, 2010.
- [5] Foessel É., Walter J., Salsac A.-V., Barthès-Biesel D. Influence of internal viscosity on the large deformation and buckling of a spherical capsule in a simple shear flow. *J. Fluid Mech.* 672, 477-486, 2011.
- [6] Hu X., Salsac A.-V., Barthès-Biesel D. Flow of a spherical capsule in a pore with circular or square cross-section, *J. Fluid Mech.* 705, 176-194, 2012.
- [7] Dupont C., Delahaye F., Barthès-Biesel D., Salsac A.-V. Stable equilibrium configurations of an oblate capsule in shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*. 791, 738-757 (2016).
- [8] Sarkis B. Étude numérique de la relaxation de capsules confinées par couplage des méthodes Volumes Finis - Éléments Finis via la méthode des frontières immergées IBM. *Doctorat, Sorbonne Université* (2018).
- [9] Sarkis B., Fullana J.M., Salsac A.-V. Relaxation of a capsule in a quiescent fluid: effect of inertia and confinement on the viscoelastic time constants. *Phys Rev Fluids*. Soumis (2021).
- [10] Sarkis B., Salsac A.-V., Fullana J.M. Capsule relaxation under flow in a tube. Dans: *Ecoulements Sanguins*. Iste-Wiley. In Press (2021).
- [11] Ling Y., Fullana J.-M., Popinet S., Josserand Ch., Droplet migration in a Hele-Shaw cell: Effect of the lubrication film on the droplet dynamics. *Physics of Fluids*. 28, 6 (2016).
- [12] Quesada C., Villon P., Salsac A.-V. Real-time prediction of the deformation of microcapsules using Proper Orthogonal Decomposition. *Journal of Fluids and Structures*. 101, 103193 (2021).
- [13] Quesada C., Dupont C., Villon P., Salsac A.-V. Diffuse approximation for the identification of the mechanical properties of microcapsules. *Mathematics and Mechanics of Solids*. 26, 1018-1028 (2021).
- [14] Fahlaoui T., De Vuyst F. Nonintrusive data-based learning of a switched control heating system using POD, DMD and ANN. *Comptes Rendus Mécanique*. 347, 793-805 (2019).
- [15] Boubehziz T., Quesada C., Dupont C., Villon P., de Vuyst F., Salsac A.-V. Resolution of time-dependent coupled problems with a data-driven space-time-parameter reduced-order model: application to capsule dynamics in microchannels. *Entropy*. 23, 1193 (2021).
- [16] De Vuyst F., Dupont C., Salsac A.-V. Space-time-parameter PCA and data-driven modeling with application in Bio-engineering, chapter in book "Principal Component Analysis", F.P. Garcia Marquez Ed., ISBN 978-1-80355-766-3. Accepted (2022).