Titre: Numerical methods and optimisation for micro-swimming
Candidat: Luca Berti – Institut de recherche mathématique avancée (Strasbourg)
Directeur de thèse: Christophe Prud'homme – Institut de recherche mathématique avancée (Strasbourg)
Co-encadrante: Laetitia Giraldi – INRIA Sophia-Antipolis

L'étude de la natation à la micro-échelle (micro-natation) a subi une évolution majeure dans les dernières années. Son but était initialement comprendre le mouvement de micro-organismes flagellés (comme les spermatozoïdes, ou les bactéries) et extraire les principes qui décrivent la nage à cette échelle et qui la différencient de la nage basée sur les contributions inertielles. Maintenant, des investigations basées sur la théorie de la commande optimale et l'investigation de la forme de ces nageurs ont été établies. Ces dernières sont motivées par l'application médicale des micro-robots nageurs, qui est déjà une réalité dans des laboratoires de recherche grâce à des études in vitro et in vivo. De nombreux défis sont encore présents et motivent la recherche dans le domaine, tels que le contrôle de ces nageurs, leur comportement dans des endroits confinés, la meilleure forme pour les robots. La simulation numérique est un outil qui peut aider à résoudre ces questions, et elle peut agir complémentairement aux expériences de laboratoire, qui peuvent à leur tour en valider les résultats.

Pendant cette thèse nous nous sommes concentrés à la fois sur la description numérique de la micro-natation et sur ses interactions avec les problèmes susmentionnés de forme optimale. Pour faire cela, nous avons considéré deux méthodes numériques pour résoudre les équations fluides, à savoir la méthode des éléments finis et la méthode des éléments de frontière. Ces méthodes ont été appliquées à des nageurs flagellés différents, en tenant compte de leur stratégie propulsive et de l'influence de cette dernière sur un domaine fluide éventuellement maillé. En fait, parmi les nageurs à flagelle, il est possible d'identifier deux types de propulsions, qui se basent sur la propagation d'ondes hélicoïdales ou d'ondes planaires. Le premier type de nageur, lors de la rotation de ses flagelles, produit une déformation du maillage fluide qui comporte un remaillage très fréquent, tandis que dans le deuxième cas le remaillage pourrait être fait moins souvent. De plus, en termes de modélisation, la flagelle du premier type de nageurs est souvent considérée comme une hélice rigide, or que le deuxième cas est modélisé avec une flagelle déformable. C'est donc pour cela que le premier type de nageurs a été simulé à l'aide des éléments de frontière et le deuxième à l'aide des éléments finis, car seulement cette dernière méthode requiert le maillage du domaine fluide.

Voici le contexte dans lequel cette thèse s'est développée et les contributions qui peuvent être mise en avant :

- L'étude de la forme optimale de nageurs à inspiration bactérienne, multi-flagellés, qui en optimise la vitesse de propulsion tout en favorisant la nage dans une direction prescrite. La méthode numérique utilisée est la méthode des éléments de frontière pour la résolution des équations de Stokes couplées avec les contraintes d'auto-propulsion. Cette méthode est basée sur la fonction de Green et la formulation intégrale des équations de Stokes et sur le fait qu'on peut obtenir la solution du problème fluide en discrétisant juste la frontière du nageur. Les systèmes algébriques induits par cette méthode sont denses (car la fonction de Green couple chaque nœud du maillage avec chaque autre nœud) et de petite taille si comparés avec les systèmes éparses produits par une discrétisation aux éléments finis. Cela nécessite que différentes techniques de stockage et de résolution sont requises par cette méthode. Différents cas test issus de la littérature sont mis en œuvre pour valider la méthode numérique de résolution du problème fluide. Le problème d'optimisation est ensuite attaqué en utilisant la méthode d'optimisation Bayesienne, qui n'a jamais été utilisée dans le cadre de l'optimisation de forme en micro-natation. Cette méthode procède en construisant un meta-modèle du problème d'optimisation de forme en se basant sur un budget fini d'évaluations, car la résolution du problème fluide reste couteuse et augmente avec le nombre de flagelles. Le principe de cette méthode est d'utiliser les évaluations de la fonction coût pour construire,

à l'aide de la régression Gaussienne, un modèle probabiliste de cette fonction, dont moyenne et variance sont mises à jour chaque fois qu'une nouvelle mesure est disponible. De plus, grâce à ces estimations, il est possible de choisir le point successif où la fonction coût sera évaluée dans les régions où la variance, l'incertitude du modèle, est majeure.

- L'étude du mouvement de nageurs à inspiration bactérienne, bi-flagellés, pour lesquels on modélise l'élasticité des jonctions à l'aide de ressorts de torsion. Cette partie est une extension de la première : la méthode des éléments de frontière est encore une fois employée dans le but de la comparer avec une méthode moins couteuse mais aussi moins précise, la Resistive Force Theory (RFT). La RFT est une méthode approximée qui est tout de même valable dans l'étude d'organismes mono-flagellés, sous la contrainte de négliger la contribution des interactions entre les différents parties qui composent le nageur, à savoir queue et corps cellulaire. Elle permet d'arriver à des formulations analytiques qui clarifient l'impact des différents paramètres qui décrivent le nageur. Elle a été utilisée pour des études de commande optimale de nageurs robotiques validés avec des expériences de laboratoire. Dans une première partie nous nous concentrons sur la modélisation d'un nageur à deux flagelles à l'aide de la RFT pour mettre en valeur l'effet que la position des jonctions élastiques et la forme du corps cellulaire ont sur la vitesse de propulsion du nageur. Cette approximation est valable lors que les queues sont éloignées et les effets hydrodynamiques entre elles sont négligeables. Dans un deuxième temps, nous considérons le modèle BEM dans lequel nous laissons les queues libres se réorienter suite à l'interaction entre le fluide et les jonction élastiques.

- L'utilisation de la librairie Feel++ pour la simulation aux éléments finis du problème de la micro-natation. La méthode des éléments finis est rarement utilisée dans l'étude de la micro-natation car souvent lourde et couteuse pour les études normalement menés dans ce domaine. Par contre, si l'objectif est d'étudier des fluides biologiques complexes (à partir du sang, jusqu'à la matrice extracellulaire) et leurs interactions avec des micro-nageurs, ou bien modéliser l'élasticité des nageurs en utilisant un modèle décrit par des équations aux dérivées partielles, la méthode des éléments finis regagne son intérêt aussi pour la micro-natation. La méthode choisie pour décrire l'interaction fluide-nageur est la méthode Arbitrary-Lagrangian-Eulerian, qui découple en partie l'évolution du milieu fluide de l'évolution du domaine computationnel. Cette méthode, déjà présente dans la librairie grâce au travail de V. Chabannes pour la simulation des écoulements sanguins, a été augmentée en ajoutant la partie qui décrit le mouvement d'un corps rigide immergé dans le fluide, nécessaire pour décrire la position du nageur à tout moment. Cette description de la nage oblige aussi à considérer les problèmes liés au déplacement du maillage et à sa reconstitution lors d'une déformation trop importante. C'est dans cette optique que l'évaluation de la qualité du maillage et l'inclusion du remaillage à l'aide des librairies MMG et parMMG ont été considérées. Dans cette partie de la thèse nous avons considéré différents méthodes qui peuvent être utilisées pour décrire le mouvement d'un nageur en nous basant sur la littérature : soit on connait la forme exacte du nageur à chaque instant temporel, grâce à une description analytique de sa forme ; soit cette forme est décrite par un modèle simplifié (par exemple des ODEs qui, une fois résolues, donnent la forme du nageur à chaque instant) ; soit la forme dérive d'un modèle basé sur des EDPs. Chacun de ces cas demande un traitement particulier, spécialement si un remaillage est déclenché, et on les a considérés dans les développements proposés. Nous avons aussi proposé une modélisation pour étudier la nage de nageurs à plusieurs corps (inspirés du modèle « three-sphere swimmer » introduit par A. Najafi en 2004) et d'un micro-robot partiellement magnétique. Enfin, nous avons considéré des modèles d'élasticité dite « active », qui sont utilisés pour modéliser la déformation active des flagelles des spermatozoïdes, par exemple. Ces modèles, dont il existent deux types, à savoir « active strain» et «active stress», modélisent

la déformation des flagelles à l'aide d'une fonction d'activation qui vise à mimer à la macro-échelle le glissement des microtubules qui composent les flagelles des micro-nageurs.

Communications orales

- *Developments in Feel++ for micro-swimming simulations,* Séminaire d'équipe Inria CALISTO - 10/12/2020
- *Numerical methods for micro-swimming,* Journée du LabEx IRMIA – 07/10/2020
- *Mathematical and computational framework for low Reynolds number swimmers using ALE approach,* Talk in Parallel Sessions at « 9e Biennale Française des Mathématiques Appliquées et Industrielles » (Congrès SMAI 2019) – 16/05/2019
- *Optimal transport and cut locus of a surface,* Talk at the Séminaire Doctorants de l'IRMA - 31/01/2019

Présentations de poster

- *Optimal shapes for biflagellated microswimmers,* Poster presentation at the workshop « Micro-swimmers and Soft Robotics » (Haifa)- 04/02/2020
- *Méthodes numériques pour la micro-natation,* Poster presentation for the doctoral school MSII 269 – 08/10/2019
- *Swimming at low Reynolds number: a PDE approach,* Poster at the Journée de Restitution des projets INFINITI du CNRS (Paris)- 31/08/2018

Articles

- *Microswimming framework in Feel++,* Luca Berti, Vincent Chabannes, Laetitia Giraldi and Christophe Prud'homme (in preparation)
- *Modeling and finite element simulation of multi-sphere swimmers,* Luca Berti, Vincent Chabannes, Laetitia Giraldi and Christophe Prud'homme (accepté in Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences)
- *Shapes enhancing the propulsion of multiflagellated helical microswimmers,* Luca Berti, Mickael Binois, François Alouges, Matthieu Aussal, Christophe Prud'homme and Laetitia Giraldi (submitted)
- *Swimming at low Reynolds number,* Luca Berti, Laetitia Giraldi and Christophe Prud'homme, ESAIM Proceedings and Surveys (2020). Vol. 60, p. 46-60.