

Étude numérique de la relaxation de capsules confinées par couplage des méthodes Volumes Finis - Éléments Finis via la méthode des frontières immergées IBM : influence de l'inertie et du degré de confinement.

Bruno Sarkis

▶ To cite this version:

Bruno Sarkis. Étude numérique de la relaxation de capsules confinées par couplage des méthodes Volumes Finis - Éléments Finis via la méthode des frontières immergées IBM : influence de l'inertie et du degré de confinement.. Biomécanique [physics.med-ph]. Sorbonne Université, 2018. Français. NNT : 2018SORUS184 . tel-02451650

HAL Id: tel-02451650 https://theses.hal.science/tel-02451650

Submitted on 23 Jan2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

Présentée par

Bruno SARKIS

Pour l'obtention du grade de

Docteur de Sorbonne Université

École Doctorale SMAER (ED 391)

Spécialité Biomécanique

Étude numérique de la relaxation de capsules confinées par couplage des méthodes Volumes Finis - Éléments Finis via la méthode des frontières immergées IBM : influence de l'inertie et du degré de confinement.

Thèse réalisée à l'Institut Jean Le Rond d'Alembert (UMR 7190) en partenariat avec le laboratoire Biomécanique et BioIngénierie (UMR 7338) et co-dirigée par Jose-Maria FULLANA et Anne-Virginie SALSAC.

Thèse soutenue le 12/12/2018 devant le jury composé de :

Pr.	Mme.	Anne	JUEL	Rapporteur
Pr.	M.	Franck	NICOUD	Rapporteur
M.C.	Mme.	Astrid	DECOENE	Examinateur
Pr.	M.	Pierre	VILLON	Examinateur
D.R.	M.	Stéphane	POPINET	Examinateur
D.R.	Mme.	Anne-Virginie	SALSAC	Directeur de thèse
Pr.	M.	Jose-Maria	FULLANA	Directeur de thèse

Remerciements

Une reconversion professionnelle est un chemin difficile qui ne pourrait aboutir sans le soutien de personnes bienveillantes. Les remercier du fond du cœur, c'est moins que le minimum. J'espère à travers ces lignes retranscrire fidèlement l'immense gratitude que j'ai envers celles-ci pour m'avoir fait ce merveilleux cadeau que j'espérais depuis si longtemps. C'est un rêve qui s'est réalisé.

Mes premiers remerciements s'adressent à mes directeurs de thèse Anne-Virginie Salsac et Jose-Maria Fullana. Après une recherche de thèse longue et difficile, j'ai eu la chance de rencontrer ces deux personnes. J'ai vite été marqué par leur ouverture d'esprit et leur gentillesse, alors-même que j'allais bénéficier de leur encadrement d'excellence. Ils m'ont ouvert les portes du monde de la recherche, donc ma dette envers eux était déjà immense dès le début de ma thèse. Ce n'était pourtant qu'une fraction infime de ce qu'elle est devenue aujourd'hui, car c'était sans compter leurs implication, pédagogie, indulgence, persévérance et patience infinie, auxquelles j'ajouterais une clarté extrême dans la communication, une cohérence à toute épreuve et une coordination sans faille. Je terminerai par le soutien inconditionnel qu'ils m'ont apporté durant ma thèse alors-même que je traversais un événement personnel particulièrement difficile à surmonter. Grâce à vous, j'ai réussi ma thèse, j'ai réalisé un rêve. Je vous serai éternellement reconnaissant pour cela et vous adresse le plus grand merci qu'il soit en mon pouvoir d'adresser. Je garderai un excellent souvenir de ces trois ans passés avec vous et recommanderai votre duo de choc à tout étudiant que je croiserai sur ma route. Vive les capsules !

Je tiens ensuite à remercier mon jury de thèse, à commencer par son président Pierre Villon, tout d'abord pour cette présidence mais également pour m'avoir suivi et conseillé lors de mes Comités de Suivi Individuels. Merci également à Anne Juel et à Franck Nicoud d'avoir été les rapporteurs de mon manuscrit de thèse. Merci à Stéphane Popinet pour cela, pour les conseils et inspirations scientifiques, l'aide en Basilisk et pour avoir souligné le poids de la méthodologie en début de thèse. Merci à Astrid Decoene, tant pour avoir fait partie de mon jury que pour m'avoir soutenu quatre ans plus tôt, lorsque je cherchais ma thèse.

Avant de quitter le monde des permanents, je tiens à remercier Patrick Le Tallec et Grétar Tryggvason. Bien qu'elle fut de courte durée, leur aide a été essentielle dans ma compréhension de la méthode. Un très grand merci à Dominique Barthès-Biesel pour son aide scientifique. Merci à Jean-Dominique Polack pour l'aide à la relecture des annexes C et D. Merci à Jean-Baptiste Leblond pour les explications mathématiques. Merci également Antoine Ferreira, David Folio, Stéphane Régnier et Stéphane Zaleski. Merci aux membre de l'administration du laboratoire et à L'École Doctorale. Je pense notamment à Olivier Labbey, pour avoir eu la patience et le courage de remplir mes innombrables ordres de mission Paris-Compiègne et états liquidatifs associés! Merci aux informaticiens : les deux Pascal, Patrick et Élisée, pour votre aide et pour toutes ces discussions agréables. Merci Sophie, pour ta gentillesse et pour tous ces bons moments.

Merci à mes deux postdoc préférés : David Poirier et Wojciech Aniszewski. David, tu es si gentil et optimiste que parler avec toi cinq minutes peut égayer toute une journée. Merci aussi de m'avoir utilisé comme cobaye de réalité virtuelle pour tes travaux en acoustique. Wojciech, mon cher co-bureau de fin de thèse, merci de ton aide et pour ces discussions intéressantes (scientifiques ou non).

En parlant de co-bureau, passons aux doctorants en commençant justement par mes collègues de bureau. Tout d'abord à *d*'Alembert : Alessio, Alice, Antoine, Arthur, Étienne, Haroon, Hervé, Gabriel, Jeanne, Manuel, Marie, Paul, Quentin, Victor et Vincent ! Merci d'avoir partagé ce lieu de travail commun pendant presque 3 ans à l'Institut. J'ai particulièrement apprécié la qualité de nos interactions. Merci pour vos conseils, vos encouragements et pour toutes nos discussions. Mention spéciale à Arthur et à Jeanne (vive la Biomécanique !). Merci Arthur pour tout : ton aide, ton soutien, ta gentillesse, ces bons moments, ton intérêt pour mon travail et j'en passe. Ensuite, au BMBI : Benjamin, Nicolas (vive Yoda !), Xingyi, Yongjiang, etc. Merci également à tous ceux qui sont venus en conférence à Dublin, et à Bruno et autres pour les Doctoriales. Ainsi qu'à ceux que j'ai pu rencontrer en conférence et qui ont parfois inspiré mes travaux, je pense notamment à Hugo Casquero. Merci aux autres collègues (ex-)doctorants, notamment Antoine, Thomas, Christian, Raphaël et Nelson (vive Poisson !). Merci aussi à Baptiste et Carlos. Sur un plan plus personnel, je voudrais commencer par remercier tous mes professeurs, que ce soit en sciences ou dans d'autres domaines. Tous, vous avez contribué à façonner ma personne en me prodiguant un enseignement de qualité. Je pense notamment à mes professeurs de mathématiques de classes préparatoires MPSI et MP, respectivement Patrick Fradin et Jean-Claude Soladié, d'informatique et d'aide à la décision Mohamed Chachoua, de mécanique des milieux continus Boumediene Nedjar et de karaté Luc Rigaudias, cette dernière discipline m'ayant aidé à bien des égards sur le plan personnel durant ces trois années.

Je voudrais également remercier tous les membres des différentes associations dont je fais partie (AFT, Karaté Club Chevry II). Merci à Pascal Faure (TDAH).

On dit souvent qu'on juge une personne à ses ami(e)s, eh bien personnellement je dis qu'on se construit en grande partie grâce à eux. C'est dans cet esprit que j'aimerais les remercier. Combien de fois m'avez vous apporté la joie, combien de fois m'avez-vous aidé, combien de fois m'avez vous soutenu? Merci à Alexandre Archambault, Alexandre Lepoivre, Alexis Berny, Anthony Thunderbolt, Arnaud Drieu, Arnaud Heinrich, Brice Cazenave, Clément Conseil, Dang Liem Do, Danielle Vanni, Delphine Bernat, Élie Moussallem, Emily Cooper, Emmanuel Lacharme, Emmanuel Roblin, Frédéric Jacquelin, Guillaume Perrin, Guy Bilman, Jérémy Saâda, Jonathan Paventa, Julia Mesner, Julien Flageul, Justin Ledoux, Ludvig Haddad, Lydia Kheloui, Nassime Blin, Noémie Lago, Patrick Passedat, Qi Liu, Raphaël Augris, Rémy Jacobi, Tatiana Dmitrieva, Toufik Saouchi, Valerio Gamberini, Vincent Gamondes, Wesley Noël, Willy Viel et Youssef Saadeh. Je souhaiterais remercier Marie Leroy Ep Marzougui et Dali Marzougui (Rouya!). Merci d'avoir pris soin de mon défunt père, qui était aussi un peu le vôtre. Merci Malika pour les enfants. Merci Ania, Marc, Sylvie, Marcela, Carla, Louis et Saïd.

Merci à ma mère Ilse Gutekunst de m'avoir mis au monde, élevé, tant donné et créé les conditions propices à mon coup de foudre pour les sciences dès mon plus jeune âge. Merci à mon gentil petit frère Carl de m'avoir encouragé à postuler en thèse et de m'avoir tant soutenu dans la vie. Je t'aime, mon frère. Mélina et toi, vous êtes extrêmement brillants. Je vous souhaite de réussir à la hauteur de ce potentiel et d'être aussi heureux que je le suis aujourd'hui. Merci à mes enfants adorés, Julien et Étienne, les étoiles de demain. J'espère que vous serez heureux.

Merci enfin à mon épouse Lavinia Elena Sarkis Nicula et à mon défunt père Fouka Sarkis, qui ont tout donné pour moi. Ma chérie, Papa, je vous dédie ma thèse pour exprimer la gratitude, l'admiration et l'amour que je vous porte.

> À ta mémoire, Feu mon Père, et à ma chère et tendre épouse. Si ces travaux peuvent servir, à l'avenir et tant soit peu, Le combat contre le cancer, alors on m'en verra heureux. Il me tarde que la recherche avec ce fléau en découse.

Table des matières

11

Notations et symboles	

1	Introduction			19	
	1	Capsules et encapsulation			
	2	Dynamique de capsules sous écoulement			
		2.1	Expérimental	21	
		2.2	Analytique et numérique	22	
	3	Déter	mination des propriétés mécaniques de la capsule par analyse		
		invers	e	31	
	4	Relaxa	ation de capsules	32	
	5	Objec	tifs et plan de l'étude	33	
2	Méthode numérique : principe et validation				
	1	Résolution des équations fluides Volumes Finis			
			dion des equations nuides volumes ring		
		1.1	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Rey-		
		1.1	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Rey- nolds	36	
		1.1 1.2	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Rey- nolds	36 36	
		1.1 1.2 1.3	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Reynolds Équations de la physique du fluide Schéma temporel	36 36 37	
		 1.1 1.2 1.3 1.4 	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Reynolds Équations de la physique du fluide Schéma temporel Discrétisation spatiale	36 36 37 38	
	2	1.1 1.2 1.3 1.4 Élasti	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Reynolds Équations de la physique du fluide Schéma temporel Discrétisation spatiale cité bidimensionnelle : modèle de membrane	36 36 37 38 45	
	2	 1.1 1.2 1.3 1.4 Élasti 2.1 	Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Reynolds nolds Équations de la physique du fluide Équations de la physique du fluide Schéma temporel Discrétisation spatiale Schéma temporel cité bidimensionnelle : modèle de membrane Schéma temporel	36 36 37 38 45 45	

	3	Couplage fluide-structure : la méthode IBM			
	4	Corre	ection de volume par multiplicateurs de Lagrange	58	
	5	IBM adaptatif			
		5.1	Rough boxing versus IBM localement régulier	60	
		5.2	Critères pour forcer localement la taille des mailles eulé-		
			riennes dans Basilisk	61	
		5.3	Un algorithme de sélection rapide du tampon optimal :		
			Multi-Level Box Sieving (MLBS)	66	
	6	Valida	ation	71	
		6.1	Validation du schéma numérique en maillage régulier	71	
		6.2	Validation et performances de la méthode IBM localement		
			régulier	76	
3	Jus	tificatio	on des paramètres et des options IBM	79	
	1	Choix	méthodologiques IBM intrinsèques من من من المنافقة من المنافقة من	79	
		1.1	Choix du filtre	79	
		1.2	Correction de volume	87	
	2	Méth	ode IBM en maillage régulier	88	
		2.1	Choix des pas spatiaux	88	
		2.2	Choix du pas de temps	90	
	3	Méth	ode IBM en maillage adaptatif localement régulier	90	
		3.1	Paramètres en IBM localement régulier : précision et stabilité	90	
		3.2	Gain en temps de calcul en IBM localement régulier	91	
	4	Conc	lusion du chapitre	91	
4	Rela	axation	de capsules dans un fluide au repos	93	
	1	Prése	ntation du problème	93	
	2	Résul	tats des simulations tridimensionnelles de relaxation de cap-		
		sule d	ans un fluide au repos	94	
		2.1	Évolution temporelle de la forme de la capsule et vitesse		
			induite dans le cas de référence	95	
		2.2	Influence de l'inertie sur le régime de relaxation	98	
		2.3	Étude de l'effet du confinement	99	
		2.4	Paramètres clé et diagramme de phase	100	

	3	Modèle de Kelvin-Voigt à inertie		
		3.1	Prédiction de l'évolution temporelle de la demi-longueur de	
			capsule	102
		3.2	Ajustement des résultats numériques 3D	106
	4	Trans	ferts énergétiques durant la relaxation	108
	5	Concl	usion du chapitre	112
5	Rela	xation	de capsules sous écoulement	115
	1	Prései	ntation du problème	116
		1.1	Problème physique	116
	2	Relaxa	tion d'une capsule en écoulement de Stokes	118
		2.1	Forme de la capsule lors de son écoulement dans le canal carre	é119
		2.2	Forme, longueur, vitesse, énergie et tensions de la capsule	
			lors de son écoulement dans le canal avec marche	122
		2.3	Champs de vitesse et pression	126
	3	Etude	de l'effet de l'inertie sur la relaxation de la capsule en écou-	
		lemen	t	129
		3.1	Validation des résultats en régime de Navier Stokes	129
		3.2	Influence de l'inertie sur la relaxation de la capsule	130
		3.3	Modèle de Kelvin-Voigt appliqué à la relaxation sous écou-	
			lement	131
	4	Discus	ssion et conclusion	134
6	Con	clusion	et perspectives	139
	1	Conclu	usion générale	139
	2	Perspe	ectives	143
A	Cal	cul de l	'énergie libre de pré-déformation dans une capsule sphérique	9
	étan	che de	loi de Skalak de paramètre $C = 1$ pré-déformée en ellipsoïde	5
	de r	évoluti	on	145
	1	Descr	iption du calcul.	145
	2	Calcu	l de l'énergie surfacique libre de pré-déformation	146
		2.1	Calcul du tenseur des déformations	146

		2.2	Calcul du tenseur symétrique des déformations de Cauchy-	
			Green et des invariants de déformation	148
		2.3	Calcul de de l'énergie surfacique libre $w_{\rm s}^{\rm Sk}$ en fonction du	
			paramètre de pré-déformation Λ et de la colatitude θ par	
			rapport à l'axe Ox	149
	3	Calcu	l de l'énergie libre de pré-déformation	150
В	Fon	ction N	ALBS pour IBM localement régulier	151
C	Per	te de p	récision des filtres produits à variables séparées lors du pas	-
	sage	de la 1	lD à la 2D ou à la 3D	153
	1	Descr	iption du problème de l'approximation d'une fonction dont	
		la déri	vée présente un saut	153
	2	Cas 1	D (rappel de Beyer et Leveque)	154
	3	Cas 2	D (nouveau)	156
		3.1	Présentation du cas 2D	156
		3.2	Apparition d'un terme parasite d'ordre 1 dans l'approxima-	
			tion	157
		3.3	Condition d'annulation du terme parasite en certains points	159
		3.4	Non annulation systématique du terme parasite en ces points	3162
	4	Concl	usion de l'annexe	164
D	Exp	loratio	n généralisée de l'espace des filtres	165
	1	Notati	ons	165
	2	Constr	ruction historique du filtre de Peskin	166
	3	Exten	sion de l'ensemble des solutions	172
	4	Une fo	orme plus précise des solutions	179
Bi	bliog	raphie		187

Notations et symboles

Généralités

(O, x, y, z)) Repère cartésien associé à un référentiel galliléen	27
$[a_{\alpha}]_i$, $[a^{\alpha}]$	$_i$ Coordonnée respective des vecteur \underline{a}_{α} et \underline{a}^{α} selon l'axe Ox_i	27
$\mathcal{B}_3(O,h_0)$) Boule ouverte de \mathbb{R}^3 , de centre <i>O</i> et de rayon $h_0 > 0$	38
1	Indicatrice d'un ensemble	58
t	Temps [s]	28
x_i	Coordonnée eulérienne selon l'axe $Ox_i : x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$	27
Grand	eurs physiques du problème Fluide	
$\underline{\mathbb{D}}$	Tenseur des déformations de vitesse	29
μ	Viscosité dynamique [Pa.s]	28
ρ	Masse volumique [kg.m ⁻³]	28
<u>a</u>	Accélération (terme source de l'équation de Navier-Stokes dans Basili	sk)
	$[m.s^{-2}]$	28
<u>f</u>	Force volumique (terme source de l'équation de Navier-Stokes) [N.m 28]
<u>v</u>	vitesse l'écoulement fluide [m.s ⁻¹]	28
<u>⊄</u> ext	Tenseur des contraintes dans le fluide externe (sur la membrane)	41

$\underline{\underline{\sigma}}_{int}$	Tenseur des contraintes dans le fluide interne (sur la membrane)	41
1	Échelle de longueur (demi-largeur du canal carré) [m]	28
La	Nombre de Laplace	49
р	Pression [Pa]	28
T_V	Temps convectif [s]	28
V	Échelle de vitesse convective $[m.s^{-1}]$	28
Grand	eurs physiques du problème Solide	
<u>û</u>	Déplacement virtuel	41
λ_1, λ_2	Dilatations principales	40
$(\underline{a}^1, \underline{a}^2, \underline{a}^3)$) Base contravariante (configuration actuelle)	39
$\mathcal{J}_{\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_{0},0}}\left(O\right)$) Jacobienne du \mathcal{C}^∞ -difféomorphisme en O	38
\mathcal{S}_0	Configuration de référence de la membrane	38
$\mathcal{V}_{\underline{X}_0}$	Un voisinage de \underline{X}_0	38
NH	Loi Néo-Hookéenne	40
Sk	Loi de Skalak	40
$ abla_{\mathrm{s}}$	Opérateur gradient surfacique	41
$ abla_{\mathrm{s}}.$	Opérateur divergence surfacique	41
$\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X},t}$	C^{∞} -difféomorphisme de $\mathcal{B}_3(O, h_0)$ dans \mathbb{R}^3 autour de $\underline{X} \in \mathcal{S}$ (configuration actuelle)	ra- 39
$\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}$	\mathcal{C}^{∞} -difféomorphisme d'une boule ouverte $\mathcal{B}_{3}\left(O,h_{0} ight)$	38
$\underline{\Phi}_t$	Transformation lagrangienne	38
$\underline{A}_1, \underline{A}_2$	Vecteurs tangents de la base covariante (configuration de référence)	38
<u>b</u>	Vecteur binormal sur un contour élémentaire de la membrane	41

 $\frac{df_{\underline{q}}}{\underline{q}}$ Force élémentaire exercée par le fluide sur un élément de surface membranaire 41

$\underline{df}_{\underline{T}}$	Force élémentaire de tension exercée sur un segment élémentaire de	la
	membrane	41
<u>N</u>	Vecteur normal de la base covariante (configuration de référence)	38
<u>q</u>	Charge surfacique exercée sur la membrane	41
<u>X</u>	Position lagrangienne actuelle	27
<u>x</u>	Position eulérienne	27
<u>X</u> 0	Position lagrangienne de référence (au repos)	38
<u>π</u>	Tenseur des tensions de Piola-Kirchhoff	40
£	Tenseur symétrisé du gradient surfacique de déplacement (tenseur	li-
	néarisé des déformations)	42
<u>C</u>	Tenseur de Cauchy-Green	40
₽	Tenseur de Green-Lagrange	40
<u>F</u>	Tenseur gradient surfacique de la transformation	39
<u>I</u>	Tenseur identité	38
$\underline{\underline{I}}_{s}^{0}$	Tenseur identité de surface (configuration de référence)	40
<u>T</u>	Tenseur des tensions de Cauchy	41
<i>a</i> ₀	Rayon au repos de la capsule	37
С	Paramètre de la loi de Skalak	40
dl	Longueur de contour infinitésimale sur une portion élémentaire de	la
	membrane	41
$G_{\rm s}$	Module de cisaillement surfacique de la membrane	38
I_1, I_2	Invariants de déformation	40
Js	Jacobien surfacique de la transformation	41
S, S_t	configuration actuelle de la capsule	38

Grandeurs physiques d'Interaction Fluide-Structure (IFS)

$ au_{ m c}$	Temps critiqu	ie en régime	e critique [s]	97
--------------	---------------	--------------	----------------	----

$ au_{ m long}$	Temps long en régime purement amorti [s]	97
$ au_{ m osc}$	Temps d'amortissement en régime oscillant amorti [s]	97
$ au_{ m short}$	Temps court en régime purement amorti [s]	97
L_x	Demi-Longueur de la capsule selon l'axe Ox [m]	88
$L_{x,\infty}$	Demi-Longueur asymptotique de la capsule selon l'axe Ox [m]	88
rφ	Rayon caractéristique d'influence de la viscosité sur la capsule [m]	96
r _m	Rayon caractéristique d'influence de l'inertie sur la capsule [m]	96
t _b	Durée d'initialisation de la relaxation (fluide au repos) [s]	88
$T_{\rm osc}$	Pseudo-période des oscillations en régime oscillant amorti [s]	97

Nombres adimensionnels

Са	Nombre Capillaire	48
La	Nombre de Laplace	86
La _c	Nombre de Laplace critique	94
Re	Nombre de Reynolds	28
We	Nombre de Weber	48

Grandeurs numériques

Δ	Taille de maille eulérienne / pas spatial eulérien local(e)	36
$\delta_{ m BL}$	Filtre de Beyer and Leveque (1992)	49
Δ_{max}	Taille de maille eulérienne (active) la plus grossière (i.e. taille maximu en maillage adaptatif	ım) 83
$\delta_{ m PM}$	Filtre PolynoMex	79
Δ_{\min}	Taille de maille eulérienne la plus fine (i.e. taille minimum) en maille	age
	adaptatif	52
$\lambda_{\rm c}$	Multiplicateur de Lagrange pour la correction de volume	50
$\{R\}$	matrice des résultante	46
ε	Grille eulérienne (ensemble des centres de mailles)	31

${\cal F}$	Ensemble des faces triangulaires du maillage icomes h $n_{\rm it}+1$ 1	51
$\mathcal{K}_{\mathcal{P}}$	Parallélépipède rectangle pour l'étape préliminaire de la méthode MI 60	LBS
\mathcal{T}_{opti}	Tampon optimal	52
CFL	Nombre de Courant-Friedrichs-Lewy	29
Ω	Domaine de maillage fluide	31
$\Omega_{\rm c}$	Domaine de calcul fluide	33
<u>F</u> _i	Force transmise au fluide par le solide au nœud d'indice global i	47
\underline{R}_i	Vecteur résultante locale du nœud d'indice global $i \in \llbracket 1N_{\mathcal{L}} rbracket$	47
\underline{R}_{m_i}	Matrice des résultante locales aux nœuds de la maille m_i	46
$\underline{R}_{m_i}^{(p)}$	Vecteur résultante locale du nœud d'indice local (p) de la maille m_i	46
$\underline{V}\left(\underline{X}\right)$	Vitesse d'advection au nœud $\underline{X} \in \mathcal{S}$ (configuration actuelle)	49
\underline{v}_*	Champ de vitesse auxiliaire	29
ζ	Rapport adimensionnel déterminant le régime. Le	97
C _{int}	Champ scalaire indicateur d'interactions IBM / indicateur d'interaction58	ons
d_{H}	Distance de Hausdorff	64
d _{H,p}	Distance de Hausdorff approchée par méthode de projection	66
$d_{\mathrm{H,s}}$	Distance de Hausdorff approchée par via la distance inter-nœuds	66
$d_{\mathrm{H}_{\mathrm{m}},\mathrm{p}}$	Distance de Hausdorff modifiée approchée par méthode de projection	n66
$d_{\mathrm{H}_{\mathrm{m}},\mathrm{s}}$	Distance de Hausdorff modifiée approchée via la distance inter-nœu 66	uds
$d_{\mathrm{H}_{\mathrm{m}}}$	Distance de Hausdorff modifiée	64
$f_{\rm int}$	Fonction d'intérêt dans la méthode IBM localement régulier	61
m_k	Une maille (fluide ou solide) parmi d'autres (celle d'indice <i>k</i>)	31
$N^{(1)},, N$	$N^{(6)}$ Base des fonctions P_2	45

n_{Δ}	Nombre de mailles Eulériennes par demi-côté de support IBM	78
$N_{\mathcal{L}}$	Nombre de nœuds lagrangiens	43
$n_{\mathcal{L}}$	Nombre mailles lagrangiennes	43
n _m	Nombre de mailles eulériennes (mailles cubiques pour volumes finis))31
indice H	u Relatif au travail de Hu et al. (2013) (dans la validation)	64
indice pr	Relatif au présent travail (dans la validation)	64

Résumé

Les capsules sont composées d'un cœur liquide protégé par une membrane élastique. Elles sont omniprésentes à l'état naturel (globules rouges, œufs de poisson, champignons unicellulaires...). Les capsules artificielles suscitent des recherches actives dans de nombreux domaines industriels, notamment biomédical, en raison de leur potentiel pour la thérapie ciblée. Si de nombreuses études ont investigué les propriétés hyper-élastiques de la membrane, peu ont exploré les phénomènes de relaxation qui apparaissent dans des conditions instationnaires.

L'objectif de la thèse est de modéliser numériquement la relaxation d'une capsule sphérique de rayon a_0 , en suspension dans un milieu fluide confiné dans un canal micro-fluidique carré de côté 2l, et d'étudier l'influence de l'inertie et du confinement sur la dynamique de la capsule. Deux cas sont examinés en détail : 1) La relaxation d'une capsule pré-déformée en ellipsoïde et relâchée dans un canal carré où le fluide est au repos; 2) La relaxation d'une capsule sous écoulement dans un canal carré présentant une expansion soudaine vers une section rectangulaire $4l \times 2l$.

La membrane de la capsule est modélisée comme hyper-élastique de module de cisaillement surfacique G_s , sans épaisseur (i.e. sans rigidité de flexion), ni viscosité. Les fluides interne et externe sont Newtoniens, de masse volumique ρ et viscosité μ . La dynamique de la capsule est modélisée au moyen d'un code fluidestructure 3D, créé en couplant un solveur fluide Volumes Finis (Basilisk) et un solveur solide Éléments Finis (Caps3D) au moyen de la méthode des frontières immergées IBM. La précision, adaptativité et stabilité de la méthode IBM sont étudiées, ainsi que sa robustesse à très haut degré de confinement.

La relaxation d'une capsule dans un fluide au repos montre que la chronologie d'évolution de sa forme peut être décomposée en 3 phases : d'abord une phase de démarrage, durant laquelle la capsule entame sa rétraction, mettant ainsi les fluides interne et externe en mouvement; ensuite une phase rapide, durant laquelle la capsule se rétracte presque entièrement grâce à la vitesse du fluide; et enfin une phase lente, durant laquelle la capsule atteint asymptotiquement sa forme sphérique de référence. Les deux dernières phases constituent le cœur de la relaxation, qui peut suivre trois régimes possibles, suivant les valeurs du rapport de confinement a_0/l et du nombre de Laplace $La = \rho G_s l/\mu^2$, qui compare les effets élasto-inertiels aux effets visqueux : amortissement pur pour des faibles valeurs de La, critique pour $La = La_c$ et oscillations amorties pour $La > La_c$. Le nombre de Laplace critique La_c ne dépend que du rapport de confinement a_0/l . Un modèle de Kelvin-Voigt inertiel (KV-m) est proposé pour modéliser la dynamique du système couplé et prédire à partir des grandeurs critiques les temps de réponse propres à la relaxation du système.

La relaxation sous écoulement est gouvernée par trois paramètres : le nombre de Reynolds $Re = \rho V l/\mu$, le nombre capillaire $Ca = \mu V/G_s = 0.05$ et $a_0/l =$ 1.1. Un bon accord à la littérature est obtenu pour Re = 0, les quelques écarts aux résultats expérimentaux montrant néanmoins l'existence d'une viscosité de membrane et d'une raideur de flexion. La même dynamique d'oscillateur amorti est observée en fonction de l'inertie et du confinement que pour la capsule dans un fluide au repos. Le modèle KV-m parvient partiellement à décrire sa dynamique.

Les travaux de thèse ont donc permis de mettre au point un solveur fluidestructure 3D permettant de simuler la relaxation d'une capsule en milieu confiné et en prenant en compte les effets d'inertie. Bien que la capsule subisse une déformation hautement tridimensionnelle au cours de la relaxation, elle se comporte comme un oscillateur amorti et est modélisable par un modèle de Kelvin-Voigt inertiel. Cette étude ouvre la voie à la modélisation de l'écoulement transitoire de capsules et cellules confinées dans des systèmes micro-fluidiques complexes.

Mots clé : capsule, relaxation, inertie, confinement, volumes finis, éléments finis, méthode des frontières immergées IBM, modèle de Kelvin-Voigt inertiel.

Chapitre 1

Introduction

On expose ici le thème et l'objet de cette thèse. On présente tout d'abord les capsules, tant à l'état naturel qu'à l'état artificiel, à travers les recherches et développements dont elles font l'objet. On décrit ensuite les méthodes expérimentales et numériques utilisées pour étudier la dynamique des capsules immergées, en notant leurs points forts et leurs points faibles. Le phénomène de relaxation de capsules est ensuite succinctement présenté. On précise enfin les objectifs d'étude de la relaxation de capsules, les moyens à mettre en œuvre pour y parvenir et l'organisation générale du présent manuscrit de thèse.

1 Capsules et encapsulation

Une capsule est un objet mixte constitué d'une enveloppe solide entourant une substance interne : le cœur de la capsule. Lors de l'encapsulation, une grande diversité de matériaux, naturels ou bioartificiels, peuvent être utilisés pour créer l'enveloppe et protéger la substance interne. Selon le(s) matériau(x) qui la constitue(nt) et son épaisseur, la paroi peut aller d'une simple membrane mince ultra-flexible et fragile de quelques dizaines de nanomètres d'épaisseur à une coque rigide. Suivant sa perméabilité aux substances internes et externes, la capsule aura la capacité de protéger le milieu interne de l'environnement intérieur. Elle joue le triple rôle de vecteur pour le cœur de la capsule, de barrière protectrice et de contrôleur des échanges entre la substance interne et le milieu extérieur.

Les capsules sont omniprésentes et extrêmement variées à l'état naturel. Dans le règne viral, le matériel génétique de la plupart des virus est enfermé dans une coque protectrice appelée capside, obtenue par assemblage structuré d'ensembles de protéines appelés capsomères. Dans les 5 règnes du vivant (procaryote, protiste, fongique, végétal et animal), de nombreux organismes unicellulaires répondent à la définition de capsule. Un exemple typique dans le règne fongique est celui d'un champignon unicellulaire de type levure appelé cryptococcus neoformans. La cryptococcose tue dans le monde plus de 600 000 personnes par an.

Chez les organismes pluricellulaires, la notion de capsule se retrouve par exemple dans la reproduction à travers les spores et les œufs (fécondés ou non), ou encore au niveau du transport corporel interne des vertébrés : la circulation sanguine, où I'on trouve des cellules libres comme les globules rouges et blancs et les plaquettes sanguines. On peut aussi y retrouver d'autres types de capsules, plus atypiques mais tout aussi importantes, comme par exemple lors du transport de cholestérol par des lipoprotéines. De nombreuses substances nécessaires au fonctionnement de l'organisme sont vectorisées par les enveloppes biologiques qui les renferment. Le processus de vectorisation peut être relativement pérenne : le globule peut parcourir plusieurs centaines de kilomètres avant d'être endommagé. Pourtant, la majorité de la longueur totale du réseau sanguin humain (d'environ 100 000 km pour un adulte) est composé de vaisseaux capillaires deux fois plus étroits que le diamètre des globules rouges et dans lesquels le sang circule à environ 1 mm/s (ce qui permet d'assurer les échanges gazeux à travers la membrane). La circulation des globules rouges dans les capillaire est permise par l'élasticité et la résistance membranaires et par le volume réduit de la capsule.

Le principe naturel de vectorisation est l'objet de nombreuses études, notamment pour créer des globules rouges artificiels et plus généralement du sang artificiel. D'autres se concentrent sur la microencapsulation artificielle de principes actifs comme par exemple des médicaments anti-cancer, à des fins de chimiothérapie ciblée (Desai et al., 2010; Singh et al., 2010; Sato et al., 2011; Henning et al., 2012; Zhang et al., 2013; Yan et al., 2016). On peut également citer d'autres applications médicales comme la thérapie génique. Les capsules servent également dans d'autres domaines industriels, notamment agroalimentaire, textile, cosmétique, hygénique, mécanique, automobile, rupestre et environnemental (dépollution). Le nombre d'applications des capsules artificielles ne cesse d'augmenter à mesure que la dynamique de leur écoulement et le rôle de leurs propriétés mécaniques sont de mieux en mieux compris et que l'on peut ainsi mieux les exploiter.

2 Dynamique de capsules sous écoulement

Les utilisations des capsules nécessitent au préalable la prédiction de leur dynamique d'écoulement, qui dépend également des propriétés d'écoulement d'une capsule unique. Celles-ci sont étudiées de façon expérimentale et numérique.

2.1 Expérimental

Les premières études référencées de capsules en écoulement datent du début des années 1920 : la décennie précédente, marquée par la première guerre mondiale, a vu se mettre en place des réseaux de solidarité de transfusion sanguine, qui mettent en place des procédés d'anti-coagulation, de conservation et de redistribution du sang pour soigner les blessés au front. La fin de guerre voit se mettre en place des procédés de synthèse des anticoagulants, comme par exemple la néoarsphénamine en 1919 (Hubans-Belkilani, 2001). Des recherches très actives sont menées sur le processus de coagulation du sang et plus généralement sur les écoulements sanguins. C'est ainsi en 1920 que la notion de rhéologie est introduite par Eugene Bingham pour désigner l'étude de la déformation et de l'écoulement de la matière (Chabannes, 2006). La même année, Boycott (1920) met en évidence un effet rhéologique qui portera son nom : il observe que la sédimentation des globules rouges est plus rapide dans un tube incliné que dans un tube vertical, les globules s'accumulant contre la paroi inférieure, produisant ainsi un contreécoulement remontant contre la paroi supérieure. Des études sont menées sur les capillaires sanguins (Krogh, 1921; Krogh et al., 1922) et l'on commence à observer des oscillations de débit dans les capillaires. Il ne sera compris que bien plus tard que l'un des facteurs de ces oscillations est l'hétérogénéité du sang (fluide non-Newtonien) en termes de pourcentage volumique de globules rouges (appelée "hématocrite"). Au fil des années, il apparaît que les particules sanguines jouent un rôle clé dans la rhéologie et on s'intéresse de plus en plus à leurs propriétés. Taylor (1934) étudie le comportement de gouttes et d'émulsions grâce à deux types d'écoulements toujours fréquemment utilisés en régime visqueux ou à plus grand nombre de Reynolds : l'écoulement hyperbolique plan et l'écoulement de cisaillement simple. Le premier est généré à l'aide d'un système composé de quatre rouleaux dans le fluide, tournant sur eux-mêmes assez lentement pour ne pas provoquer d'instabilités. Le second est généré par le déplacement lent d'une plaque en translation au dessus d'une autre à laquelle elle est parallèle, les deux étant séparées par un fluide. On parle d'écoulement de Couette. Dans les deux cas, l'existence et les caractéristiques géométriques de la forme stationnaire de la goutte (proche d'un ellipsoïde plein) dépendent de trois paramètres : le volume de la goutte, sa tension interfaciale et le rapport des viscosité dynamiques. Ces travaux sont repris bien plus tard (Bentley and Leal, 1986b,a). Peu de temps après, l'expérience de l'écoulement hyperbolique a ensuite été transposée au cas des capsules par Akchiche (1987), Barthès-Biesel (1991) et Chang and Olbricht (1993). Si la forme de la capsule reste ellipsoïdale comme l'est une goutte, sa forme et sa dynamique dépendent, outre son volume, des propriétés élastiques de la membrane comme le module de cisaillement surfacique $G_{\rm s}$. Dans le cas particulier de l'écoulement hyperbolique, le profil déformé de la capsule à l'état stationnaire ne dépend pas du rapport des viscosités interne/externe, car la membrane est alors au repos. De par la condition de non-glissement à la paroi, le fluide interne sera à ce moment-là également au repos (ce n'est bien entendu pas le cas en phase transitoire).

2.2 Analytique et numérique

Pour une étude complète de la dynamique d'écoulement des capsules donnant plus de résultats que ceux directement accessibles à l'expérience, des modèles théoriques puis numériques ont progressivement été développés.

Premières études analytiques en petites déformations et déformations modérées

Barthès-Biesel (1980) effectue les premiers travaux théoriques référencés sur la dynamique d'écoulement des capsules. Ces travaux sont repris par Barthès-Biesel and Rallison (1981). Dans ces travaux, la capsule est soumise à un écoulement de cisaillement simple (modélisant un écoulement de couette en milieu infini). Les hypothèses adoptées pour ces travaux sont : écoulement de Stokes, enveloppe mince, de sorte que ses forces internes de flexion sont très faibles par rapport à celles d'élasticité plane (modèle de membrane dépourvue de flexion) et déformations non-linéaires : les termes du second ordre sont pris en compte, si bien que les déformations, tout en étant modérées, ne peuvent tout de même pas être qualifiées de petites au point que les effets en soient linéarisés. Dans Barthès-Biesel and Rallison (1981), le type d'écoulement est généralisé à l'aide de la méthode des intégrales de frontières, introduite dans Ladyzhenskaya (1969). Dans tous les cas, les éléments de calcul de la mécanique de membrane sont utilisés pour calculer analytiquement les forces surfaciques exercées par la membrane sur le fluide, en réponse aux déformations de la membrane.

Premiers travaux numériques : simulation en axisymétrique

Lorsque les déformations de la capsule s'accentuent (par exemple à cause de l'augmentation du taux de cisaillement), le problème analytique devient rapidement insoluble, le nombre de termes à prendre en compte dans le développement en série entière des équations à résoudre augmentant drastiquement. La première étude numérique de capsules référencée est celle de Li et al. (1988), qui introduisent une structure de schéma numérique qui deviendra le schéma de résolution général de toute une classe de méthodes. La figure 2.1 explicite ce schéma.



Figure 2.1 – Schéma général de résolution numérique introduit pour la première fois par Li et al. (1988). Dans ce schéma, le solide transmet les efforts au fluide et le fluide transporte le solide.

Le solveur développé par Li et al. (1988) est un solveur axisymétrique. Il simule l'élongation "pseudo-ellipsoïdale" dans un écoulement hyperbolique axisymétrique. Un modèle axisymétrique est développé, dans lequel sont repris les éléments de calcul de Barthès-Biesel (1980) et Barthès-Biesel and Rallison (1981), mais à ceci près qu'ils sont utilisés numériquement de façon itérative pas de temps après pas de temps, la solution analytique étant inaccessible. Les travaux de Li et al. (1988) sont également inspirés de travaux similaires sur les gouttes (Rallison and Acrivos, 1978). Dans les travaux de Li et al. (1988), la membrane est décrite (de façon axisymétrique) par 48 points de collocation, et les calculs de déformation et d'efforts sont réalisés à l'aide de la méthode des différences finies, tandis que le fluide est traité de façon axisymétrique par la méthode des intégrales de frontière adaptée au cas axisymétrique et utilisant les mêmes points de collocation. La méthode a une précision acceptable grâce à la précision de la méthode des intégrales de frontières utilisée pour résoudre les écoulements interne et externe à la capsule, mais la résolution du problème solide nécessite encore d'être améliorée. Une grande amélioration est apportée lorsque Diaz et al. (2000) ont discrétisé la membrane par des éléments de frontières à fonction B-splines. La précision spatiale des solveurs axisymétriques s'en trouve fortement améliorée et, dès lors, devient très bonne.

Les solveurs axisymétriques deviennent alors propices pour résoudre les problèmes où le système fluide-structure de capsule immergée est invariant par rotation. Néanmoins, ces cas d'étude sont relativement restreints par rapport à l'ensemble des cas possibles, plus encore qu'il n'y paraît au premier abord : la condition déjà restrictive d'invariance par rotation des conditions initiales et des conditions aux limites du problème ne suffit pas à garantir à tout instant celle du système fluide-structure tout entier. En effet, lorsqu'une membrane mince entre en compression, des plis peuvent se former parallèlement à l'axe de rotation de l'écoulement. L'invariance par rotation est alors perdue et à partir de cet instant, le solveur fluide-structure axisymétrique devient inapproprié.

Premières simulations numériques tridimensionnelles en régime visqueux

Afin de résoudre des cas d'étude non axisymétriques de capsules, des solveurs tridimensionnels sont développés. La plupart d'entre eux reprend le schéma 2.1. On peut les catégoriser en deux classes, qui diffèrent surtout selon le régime qu'ils modélisent : les solveurs des équations de Stokes stationnaire pour les régimes d'écoulement visqueux et les solveurs des équations de Navier-Stokes, où l'inertie est prise en compte via le terme non-linéaire. Inspirés des solveurs axisymétriques, les solveurs de Stokes sont les premiers à être développés.

Les équations de Stokes stationnaires sont linéaires. Elles sont donc résolubles analytiquement, ce qui permet aux solveurs fluides les modélisant d'être très performants, tant sur le plan de la précision que celui de l'optimisation des calculs : dans le schéma 2.1, il est suffisant de calculer la vitesse du fluide sur la membrane. La méthode des intégrales de frontières de Ladyzhenskaya (1969) permettant à la fois cette restriction et une grande précision en espace (au moins à l'ordre 2), elle est omniprésente dans ces solveurs. De plus, les micro-capsules sont de petite taille. Pour toutes ces raisons, le développement historique des solveurs d'écoulement de micro-capsules débute par le régime de Stokes et utilise cette méthode. Aujourd'hui, de tels solveurs demeurent intensivement utilisés. Les équations fluides et solides sont résolues sur le même maillage et seule la méthode de résolution du problème solide varie d'un solveur à l'autre.

C'est à Pozrikidis (1995) que l'on attribue les premières simulations pleinement tridimensionnelles de capsules. Elles sont effectuées en régime de Stokes, en écoulement de cisaillement simple. Le problème solide est résolu de façon directe à l'aide de la méthode des différences finies sur des éléments de frontière obtenus par paramétrage global de la sphère de référence en coordonnées sphériques. Le chargement en un point d'un élément donné est approché par le chargement moyen sur l'élément. Cette approximation dégrade à l'ordre 1 la précision spatiale du solveur couplé. De plus, si le schéma numérique est stable pour de faibles déformations, la discontinuité de chargement la rendent instable aux grandes déformations. C'est notamment le cas près des pôles du maillage, qui favorisent les instabilités.

Ramanujan and Pozrikidis (1998) changent les éléments de frontière en triangles déformables à 6 nœuds. Cette nouvelle configuration du maillage à paramétrage local supprime les "pôles" du paramétrage global de Pozrikidis (1995), mais la discontinuité du chargement demeure. De ce fait, bien que meilleure que celle de Pozrikidis (1995), la méthode n'est toujours pas d'une grande précision et rencontre toujours des instabilités pour certains cas de grandes déformations. Lac (2003), Lac et al. (2004) et Lac et al. (2007) utilisent un maillage à B-splines cubiques. Il est précis, mais devient instable en compression, les B-splines se mettant à osciller quand les nœuds se rapprochent les uns des autres.

Enfin, Walter (2009) et Walter et al. (2010), se basant sur la méthode d'Eggleton and Popel (1998), utilisent un maillage d'éléments finis. Le couplage est stable en grandes déformations, y compris en compression, et donne des résultats précis à l'ordre 4 en espace. Les résultats sont très satisfaisants pour des capsules de forme au repos sphérique ou ellipsoïdale. Il est réutilisé par Foessel et al. (2011), Hu et al. (2012), Hu et al. (2013) et Dupont (2014). A noter que d'autres méthodes sont utilisées pour décrire le fluide en régime de Stokes : Kessler et al. (2008) utilisent une méthode spectrale (de projection de la solution sur les modes de Lamb) avec un nombre fini de nœuds de la membrane.

Émergence de la méthode des frontières immergées : développement, précision et application à la dynamique d'écoulement des capsules

Hormis Milcent and Maitre (2014) qui utilisent un solveur purement eulérien basé sur la méthode des surfaces de niveaux ("Level Set"), la plupart des couplages numériques tridimensionnels couplés de capsules tenant compte de l'inertie n'utilise pas le même maillage pour le fluide et pour le solide. On parle de maillage non conforme. Habituellement pour les capsules, le solveur couplé utilise un maillage fluide eulérien (souvent une grille cartésienne) et un maillage lagrangien à éléments finis triangulaires, ainsi que la méthode de couplage appelée méthode des frontières immergées : Immersed Boundary Method, IBM.

La méthode IBM est utilisée pour la première fois en 2D par Peskin (1972), puis reprise par Peskin (1977), pour simuler les écoulements sanguins dans le cœur. Dans les premières versions, qui sont bidimensionnelles, le fluide est traité par différences finies sur grille cartésienne et le solide est traité par différences finies, modélisé à l'aide de ressorts munis d'éléments de résistance à la courbure. La méthode suit le schéma de la Figure 2.1. Des fonctions de couplage assurent la communication entre les solveurs solide et fluide pour la transmission des forces (du solide vers le fluide) et des vitesses (du fluide vers le solide). A ce stade, la méthode donne des résultats qualitativement corrects mais demeure relativement im-

précise : elle est précise à l'ordre 1 en espace et ne conserve pas le volume. Elle ne conserve pas non plus l'énergie quand son schéma temporel emploie la méthode du point fixe (Peskin, 1972) et elle s'avérera plus tard rendre raides les systèmes d'équation (Stockie and Wetton, 1995). Elle se révèle néanmoins utile de par sa simplicité de mise en œuvre, sa polyvalence, la possibilité de prendre en compte le terme non-linéaire d'inertie de l'équation de Navier-Stokes, et l'utilisation de grilles cartésiennes : cela ouvre la porte à l'utilisation de solveurs rapides (multigrille) pour le fluide, ce qui est mis en œuvre par de nombreux auteurs. Fauci and Peskin (1988) l'utilisent pour simuler une locomotion (2D) d'animal aquatique. Elle est adaptée pour la première fois en 3D pour simuler des suspensions de particules (Fogelson and Peskin, 1988), au moyen d'un solveur numérique rapide qui allège les temps de calcul. Néanmoins, le passage à la résolution 3D fait vite apparaître la difficulté de trouver un compromis entre précision et temps de calcul. La condition de stabilité rend les calculs tridimensionnels d'autant plus coûteux que le solide présente une résistance élastique élevée aux déformations. A la fréquente condition de stabilité de type CFL provenant du solveur fluide vient se superposer, dans le cas des membranes, une condition de stabilité liée aux ondes de surface. Bien souvent, le pas de temps nécessaire est relativement restrictif et diminue avec l'augmentation de la résolution spatiale : quand la taille de maille eulérienne diminue d'un facteur 2, le pas de temps est divisé par un facteur compris entre 2 et 3, ce qui augmente le temps de calcul au moins d'un facteur 16.

Au début des années 1990, les recherches s'intéressent aux conditions de stabilité et de précision de la méthode. Tu and Peskin (1992) étudient la stabilité de la méthode en 2D. Mayo and Peskin (1992) mettent en œuvre une méthode partiellement implicite en temps, ce qui permet d'améliorer la stabilité, et d'autres travaux sur la stabilité suivront (Stockie and Wetton, 1995; Stockie, 1997; Stockie and Wetton, 1999; Newren et al., 2007; Newren, 2007).

Beyer and Leveque (1992) analysent l'ordre de précision en espace de la méthode en 1D, donnant les conditions d'atteinte de n'importe quel ordre de précision et construisent une fonction de couplage ("un filtre") 1D permettant d'interpoler la vitesse du fluide à l'ordre 2 pour calculer avec précision la vitesse d'advection du solide. Malheureusement, ces auteurs n'indiquent pas comment généraliser ce résultat en 2D et en 3D, et par suite de nombreuses applications de la méthode IBM resteront précises à l'ordre 1.

Peskin and Printz (1993) modifient le solveur fluide afin de le rendre compatible avec la conservation du volume par la méthode des frontières immergées. Le résultat est à la hauteur des attentes (erreur de volume considérablement réduite), mais on peut mentionner le désavantage du fait de devoir passer par une modification du solveur fluide. Il serait préférable de régler le problème de conservation de volume en travaillant directement sur le filtre IBM, ce qui résoudrait le problème quels que soient les solveurs à coupler.

En effet, il serait préférable, à des fins de polyvalence de la méthode IBM, de modifier cette méthode de couplage elle-même pour faire en sorte que tout couplage via cette méthode de n'importe quel solveur solide avec n'importe quel solveur solide conservant le volume donne un solveur fluide-structure qui à son tour donne le volume.

Li (1994) introduit la méthode des interfaces immergées (Immersed Interfaces Method, IIM), où il traite d'équations aux dérivées partielles présentant des sauts (discontinuités, singularités) dans leur solution. La méthode IIM est globalement précise à l'ordre 2 (au sens où les études de convergence montrent une précision d'ordre 2) dans la plupart des cas et est même localement d'ordre 2 (au sens où l'erreur spatiale locale au sein du fluide est d'ordre 2) partout hors du voisinage de l'interface (une membrane) mais n'est que d'ordre 1 sur ce dernier⁽¹⁾. Ce constat est repris dans Leveque and Li (1997) mais ne figure plus dans le résumé des travaux : ce dernier indique juste une précision d'ordre 2, et ce n'est que dans le corps de l'article (en fin de p. 715) que l'on peut retrouver le constat à propos la précision.

L'une des premières études numériques tridimensionnelles de capsule sphérique utilisant la méthode des frontières immergées est celle de Doddi and Bagchi (2008). La méthode utilisée est sous sa forme la plus simple : elle utilise les éléments finis P_1 pour le solide (reprenant les travaux de Charrier et al. Charrier et al. (1989), Shrivastava and Tang (1993) et Eggleton and Popel (1998), les différences finies pour le fluide et la méthode des frontières immergées avec le filtre cosinusoïdal de Peskin (1977), la méthode des différences finies pour le fluide. Cette dernière est d'ordre 2 en temps et le solveur fluide est d'ordre 2 en espace, mais

^{1.} on verra que c'est également le cas de la méthode IBM que nous emploierons

la méthode couplée est uniquement d'ordre 1 en espace. Le solveur fluide traite la viscosité de façon implicite, ce qui donne accès à un pas de temps de stabilité raisonnable. Ce point est important dans la mesure où une simulation tridimensionnelle nécessite beaucoup de ressources de calcul lorsque tout le domaine fluide est maillé.

La validation est effectuée en écoulement de cisaillement simple. Les résultats montrent un bon accord avec les résultats d'autres études sur les capsules mais demeurent tout de même peu précis : les différences sont visibles à l'œil nu. Puis, l'article étudie la migration latérale d'une capsule en écoulement de Poiseuille plan qui, décalée par rapport au plan central d'écoulement, a tendance à y revenir. Des écoulements de 122 capsules (cellules sphériques et globules rouges) sont simulés sur des grilles eulériennes comportant 14 millions de nœuds (Doddi and Bagchi, 2009), ce qui est considérable pour l'époque. Puis vient l'étude paramétrique de la rhéologie de capsules (Bagchi, 2010; Bagchi and Kalluri, 2011), puis la dynamique d'une capsule sphérique (et d'un globule rouge) dans un écoulement de cisaillement simple à intensité oscillante Bagchi and Kalluri (2011). La simulation 3D d'une capsule en écoulement de cisaillement simple est comparée à celle 0D où les interactions fluide-structure sont modélisées comme un assemblage parallèle d'un ressort et d'un assemblage série d'un piston et d'un ressort (Yazdani and Bagchi, 2013a). Ce modèle, pourtant d'une grande simplicité, approche très bien les résultats des simulations numérique (cf la Figure 2 de cet article), et un diagramme de phase est fait dans l'étude paramétrique des résultats des simulations tridimensionnelles, tout comme il serait possible de le faire avec un tel modèle. Néanmoins, vu que la méthode de simulation tridimensionnelle reprend celle de Doddi and Bagchi (2008) (à ceci près qu'une viscosité de membrane est ajoutée au modèle), sa précision n'est pas très élevée et cela nuit à la comparaison entre les simulations et le modèle 1D. Il serait intéressant de comparer ce modèle 1D dans ce cas d'étude ou un autre, avec une méthode de simulation tridimensionnelle plus précise.

Parmi les autres travaux récents sur les capsules utilisant la méthode des frontières immergées IBM, on peut mentionner : ceux de Noguchi and Gompper (2004), Noguchi and Gompper (2005) et Noguchi and Gompper (2007) sur les vésicules (capsules particulières, inextensibles et à raideur de flexion mais sans résistance au cisaillement); ceux de Krüger et al. (2009) et ceux de Misbah (2014) sur les suspensions de capsules avec un solveur fluide à méthode de Lattice-Boltzmann; ceux de Huang et al. (2012) utilisant une méthode des frontières immergées pénalisée; ceux de Wang et al. (2016) sur les écoulements à bifurcation; ceux de Guckenberger et al. (2016), qui passent en revue l'implémentation numérique des forces de courbure dans un couplage IBM pour les capsules à raideur de flexion; ceux de Gounley et al. (2017).

Prise en compte du confinement par la méthode IBM

Le confinement est la contrainte imposée à la forme d'un objet (et à son écoulement lorsqu'il est immergé) par la proximité au bord du domaine (d'écoulement) dans lequel il se trouve. Le confinement peut être fort ou faible et selon une ou plusieurs directions de l'espace.

La méthode des frontières immergées IBM (Peskin, 1972, 1977, 2002), prévue pour un maillage fluide cartésien, ne tient pas compte du confinement. En effet, lorsque la membrane de la capsule (et plus généralement la surface solide) est trop proche du bord du domaine fluide (comme par exemple la paroi du canal), une partie du support IBM centré en certains nœuds lagrangiens sort du domaine fluide. La dispersion des forces ne peut alors pas s'opérer correctement. La proximité critique est généralement d'une maille et demie ou deux mailles fluides. La méthode des frontières immergées sur grille régulière n'est donc pas adaptée au confinement extrême, qui heureusement ne survient que rarement en pratique. En effet, les pressions du fluide entre la membrane et les bords augmentent quand ceux-ci se rapprochent du bord, ce qui freine, voire arrête, le rapprochement.

Mendez et al. (2014) ont proposé une méthode adaptée au maillage destructuré, basée sur la méthode Reproducing Kernel Particle Method (RKPM) (Liu et al., 1995), qui permet d'étudier n'importe quelle géométrie et autorise un confinement très élevé. Le solveur fluide YALES2BIO a également l'avantage de corriger le volume par méthode des multiplicateurs de Lagrange. Ce modèle est en 2D mais il est repris en 3D par Gibaud (2015) et Sigüenza (2016). Cependant, l'équipe de F. Nicoud et S. Mendez (Mendez et al., 2014; Gibaud, 2015; Sigüenza, 2016) a presque exclusivement traité des cas non confinés en choisissant des domaines

3 – Détermination des propriétés mécaniques de la capsule par analyse inverse

assez grands pour que les effets du confinements ne se fassent pas ressentir.

Accélération des calculs dans la méthode IBM

Tous les travaux mentionnés jusqu'ici ont utilisé un maillage régulier et peu d'entre eux (Doddi and Bagchi, 2008; Krüger et al., 2009; Misbah, 2014) ont étudié des écoulements de capsules en milieu confiné (c'est-à-dire où le rayon de la capsule au repos est comparable à la taille du domaine physique d'écoulement).

Les premiers travaux concernant la mise en place d'un maillage adaptatif sont ceux de Roma (1996) et Roma et al. (1999). Ils sont repris plusieurs fois (Griffith et al., 2007, 2009). Ces travaux permettent d'améliorer les performances grâce à l'introduction du maillage quadtree en 2D puis octree en 3D, le maillage quadtree ayant été utilisé pour la première fois par Finkel and Bentley (1974) puis introduit en mécanique des fluides par Bayyuk and Powell (1993). Cependant, ces méthodes utilisent toutes des filtres IBM conçus pour des grilles cartésiennes. Elles nécessitent donc que le maillage soit régulier au voisinage des nœuds lagrangiens. Pour des raisons de précision et d'économie de mailles, le raffinement du maillage est maximum uniquement dans ce voisinage. Cela est avantageux car l'application de filtres interpolant à l'ordre 2 en espace permettent d'atteindre le second ordre global en précision. Néanmoins, cela demande d'une part de définir une zone tampon contenant la réunion des supports IBM centrés sur les nœuds lagrangiens, ce qui peut avoir pour conséquence une perte d'efficacité des calculs lorsque cette inclusion est stricte et le volume du tampon est trop important.

3 Détermination des propriétés mécaniques de la capsule par analyse inverse

Outre la prédiction d'écoulement, les simulations numériques permettent de remonter aux propriétés de la capsule, lorsqu'elles sont couplées à des expériences. L'identification des propriétés mécaniques repose sur le principe d'analyse inverse (aussi appelé "calage de modèle") et utilise et utilise un jeu de simulations numériques (basées sur un modèle mathématique) et des expériences pour remonter aux paramètres du modèle qui font le mieux correspondre simulations et expériences. La dynamique d'une capsule sous écoulement est fonction de ses propriétés mécaniques : dans un même environnement, deux capsules de même taille mais de propriétés mécaniques différentes se comporteront différemment. Différents groupes ont développé des techniques (micro)-fluidiques pour identifier les propriétés mécaniques de la membrane à partir du profil déformé de la capsule. On peut notamment mentionner l'aspiration dans une micro-pipette (Hochmuth, 2000; Fery and Weinkamer, 2007), l'écoulement stationnaire dans un conduit de type microcanal à section carrée (Lefebvre et al., 2008; Chu et al., 2011) ou rectangulaire, ou encore la centrifugation dans des tubes en rotation (Husmann et al., 2005). Ces études microfluidiques présentent l'avantage d'être applicables sur des populations entières de capsules et donc d'avoir des statistiques fiables, ce que ne permettent pas les études de compression (Carin et al., 2003) ou d'indentation par microscope à force atomique AFM (Putman et al., 1994).

Contrairement aux propriétés élastiques, la détermination de la viscoélasticité des microcapsules artificielles a reçu moins d'attention. Depuis l'étude préliminaire de Chang and Olbricht (1993) sur des capsules de nylon sous écoulement de Couette, la plupart des études se sont concentrées sur la caractérisation de la viscosité de membrane des globules rouges Chien et al. (1978); Hochmuth et al. (1979); Tran-Son-Tay et al. (1984); Tomaiuolo et al. (2011).

4 Relaxation de capsules

La relaxation d'un objet élastique est sa transition d'un état déformé à un état moins déformé après retrait de tout ou partie des contraintes mécaniques imposant son état initial. Cela inclut les contraintes de confinement.

Gires et al. (2016) étudient la relaxation des microcapsules formées par réticulation de protéines et s'écoulant dans un canal microfluidique à élargissement brutal ("marche"). Ils obtiennent une estimation de la viscosité de membrane en comparant le temps de réponse d'une capsule viscoélastique déterminé expérimentalement à celle prédite numériquement par Diaz et al. (2001) pour une capsule en écoulement transitoire. D'autres approches pour étudier la relaxation de capsule pourraient reposer sur une expérience de relaxation de micro-capsule préalablement allongée à l'aide d'un écoulement hyperbolique (et ce en arrêtant la force d'élongation ou l'écoulement). Mais ce qui manque pour ce dernier cas est une étude complète du phénomène physique gouvernant les interactions fluidestructure lorsque la capsule se relaxe, dans un fluide initialement au repos ou en présence d'écoulement comme pour Gires et al. (2016).

5 Objectifs et plan de l'étude

On a vu que l'étude des déformations de capsules immergées présente un intérêt de recherche et que les simulations numériques permettent d'en faire une étude complète. On a expliqué pourquoi les solveurs des équations de Stokes les plus récents sont très performants en termes de précision et de vitesse de calcul, mais qu'ils ne s'appliquent qu'à des géométries simples et ne permettent pas de prendre en compte l'inertie. Et pourquoi, a contrario, les solveurs des équations de Navier-Stokes, qui couplent presque tous un solveur eulérien sur grille cartésienne à un solveur lagrangien sur maillage à éléments finis triangulaires par le biais de la méthode IBM, sont souvent d'ordre 1 en espace et coûteux en calculs. On a précisé que ces méthodes sont adaptées aux cas confinés à géométrie complexe, mais ne peuvent pas gérer les cas d'extrême proximité entre la membrane et le fluide. On a vu enfin que la relaxation des capsules est une composante fondamentale de la dynamique des capsules qui avait jusqu'ici peu été étudiée. Les objectifs principaux de la thèse sont donc de :

- <u>développer</u> un code d'interaction fluide-structure permettant de tenir compte de l'inertie et du confinement, et d'accélérer des calculs grâce à la mise en compatibilité de la méthode IBM avec le maillage adaptatif;
- <u>exploiter</u> ce code pour étudier l'influence de l'inertie et du confinement dans des simulations de relaxation de capsules. La relaxation en environnement confiné sera d'abord étudiée dans un fluide initialement au repos, puis dans un fluide en écoulement. Elle sera modélisée et il sera vu comment le modèle permet d'obtenir les constantes caractéristiques de la relaxation et de remonter aux caractéristiques dynamiques intrinsèques de la relaxation. Les transferts d'énergie seront analysés.

Pour ce faire, les outils disponibles au début de la thèse sont : un solveur

fluide à volumes finis avec suivi eulérien (Popinet, 2009), précis à l'ordre 2 en temps et en espace, permettant le maillage adaptatif et une liberté totale de choix de la géométrie du domaine fluide; un solveur solide à éléments finis avec suivi lagrangien faisant partie intégrante du solveur Caps3D (Walter et al., 2010), précis à l'ordre 4 en espace lorsqu'il est couplé à la méthode des intégrales de frontières.

Dans un premier temps, on s'attache à décrire et justifier la méthodologie mise en œuvre. Le chapitre 2 décrit la mise en œuvre de la méthode par couplage du solveur fluide et du solveur solide via la méthode IBM, tout d'abord en maillage régulier puis en maillage adaptatif. Pour ce dernier, on utilise deux méthodes : une méthode de localisation rapide des nœuds proches de la membrane pour l'interaction IBM (que l'on appelle méthode MLBS : Multi-Level Box Sieving) et une méthode IBM en maillage adaptatif forçant la régularité du maillage (que l'on appelle IBM localement régulier). Une méthode de conservation de volume est appliquée dans les deux cas. Le modèle est validé dans deux cas de figure, à raison d'une validation par type de maillage. Pour justifier certains aspects cruciaux à la bonne mise en oeuvre de la méthode, le chapitre 3 revient sur les choix paramétriques et les choix méthodologiques de couplage. On distingue les choix intrinsèques à la méthode (choix du filtre IBM en lien avec les performances de la méthode, choix de la méthode de conservation de volume), ceux propres au maillage régulier (paramètres, précision et temps de calcul) ou au maillage adaptatif (paramètres et gain de temps de calcul).

Dans un second temps, on décrit comment le solveur couplé est utilisé pour étudier la relaxation de capsules. Le chapitre 4 traite de la simulation numérique de la relaxation de capsules pré-déformées dans un fluides initialement au repos au sein d'un canal à section rectangulaire carrée. Un modèle 0D de Kelvin-Voigt inertiel est appliqué pour modéliser l'évolution de la demi-longueur de la capsule selon l'axe du canal. Le chapitre 5 traite de la simulation numérique de la relaxation de capsules sous écoulement dans un canal dont la géométrie est à expansion soudaine, les faisant transiter entre un écoulement stationnaire en canal à section carrée vers un écoulement stationnaire dans un canal à section rectangulaire. Enfin, le chapitre 6 conclut et donne les perspectives.

Chapitre 2

Méthode numérique : principe et validation

La méthode numérique utilisée est élaborée en couplant un solveur fluide Volumes Finis (Popinet, 2009) et un solveur solide Éléments Finis réalisant un suivi lagrangien de la position des points matériels de la membrane de la capsule (Walter et al., 2010). Le couplage est réalisé à l'aide de la méthode des frontières immergées IBM - Immersed Boundary Method (Peskin, 2002).

Les deux premières sections décrivent le solveur fluide (section 1) et le solveur solide (section 2). La section 3 décrit la méthode de couplage. La préservation du volume interne de la capsule est traitée en section 4. L'option de maillage adaptatif pour gagner en temps de calcul ainsi sa mise en compatibilité avec la méthode IBM est traitée en section 5. Le solveur couplé est enfin validé en section 6.

Il a été choisi de faire figurer en gras chacun des termes clé de vocabulaire technique à sa première occurrence dans le texte. Les interactions fluide-structure de capsules sous écoulement sont résolues numériquement en 3D après adimensionnalisation des grandeurs physiques. Les calculs sont effectués dans l'espace euclidien usuel \mathbb{R}^3 , dans un repère cartésien adimensionnel $(O, x, y, z) \stackrel{\triangle}{=} (0_{\mathbb{R}^3}, x_1, x_2, x_3)$, sauf mention. Les notations lagrangiennes pour le solide sont inspirées de Pozrikidis (1998) et Walter (2009), mais en divergent toutefois par le fait que l'on note tout nœud lagrangien \underline{X} en majuscule, et tout nœud eulérien \underline{x} en minuscules (Peskin, 2002). Un champ tensoriel est autant souligné que son ordre : 0 pour un scalaire (p), 1 pour un vecteur (\underline{v}) et 2 pour un "tenseur" (\underline{T}). Pour éviter toute confusion, la dérivée partielle d'une fonction f par rapport à une variable ξ^{α} sera notée $\partial_{\alpha} f$ et non $f_{,\alpha}$. On adoptera la notation sommatoire des indices répétés.
1 Résolution des équations fluides Volumes Finis

Les équations de Navier-Stokes 3D sont résolues en utilisant le code open source Basilisk (www.basilisk.fr), basé sur l'approche Volumes Finis et une méthode de projection. Son schéma numérique est précis à l'ordre 2 en temps et en espace et autorise un raffinement adaptatif du maillage à la précision désirée.

1.1 Échelles caractéristiques, adimensionnement, nombre de Reynolds

On considère un système microfluidique de longueur caractéristique l rempli d'un fluide de masse volumique ρ et de viscosité μ , dont la vitesse caractéristique d'écoulement (forcé ou induit) est V. L'échelle de temps convectif est $T_V = l/V$.

Sauf mention contraire, les variables sont adimensionnalisées par les **échelles cinétiques** : les coordonnées $x = x_1, y = x_2, z = x_3$ par l, donnant $\tilde{x} = \tilde{x_1} = x/l, \tilde{y} = \tilde{x_2} = y/l, z = \tilde{x_3} = z/l$, Le temps t par T_V , donnant $\tilde{t} = tV/l$, les accélérations par V^2/l , les forces volumiques par $\rho V^2/l$, les pressions par ρV^2 et les forces par $\rho V^2 l^2$. Ce chapitre faisant uniquement appel à des variables adimensionnelles, les symboles ~sont omis par souci de concision.

1.2 Équations de la physique du fluide

L'équation de Navier-Stokes incompressible adimensionnelle est donnée par

$$\begin{cases} \partial_t \underline{v} + (\underline{v} \cdot \underline{\nabla}) \underline{v} = -\underline{\nabla} p + \frac{1}{Re} \underline{\Delta} \underline{v} + \underline{f} \\ \underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \end{cases} , \qquad (1.1)$$

où \underline{v} est la vitesse, p la pression, \underline{f} le **terme source**⁽¹⁾ et $Re = \rho Vl/\mu$ est le nombre adimensionnel qui caractérise le rapport entre les forces inertielle et visqueuse, appelé **nombre de Reynolds**.

Les équations de Stokes correspondent à Re = 0 et sont obtenus en négligeant le terme non linéaire d'inertie. En effet, si l'on multiplie (1.1) par Re, on adimensionne le temps et la pression non plus par leur échelle cinétique respective ($T_V = l/V$ et $P_V = \rho V^2$) mais par leur échelle visqueuse respective

^{1.} Dans Basilisk, écrit en version dimensionnelle, le terme source est une accélération <u>a</u> placée hors de la parenthèse en $1/\rho$. Comme les variables dimensionnelles <u>f</u> et <u>a</u> sont liées par la relation $f = \rho \underline{a}$. Au vu du système d'adimensionnement choisi on obtient la version adimensionnelle $f = \underline{a}$.

 $(T_{\mu} = \mu l^2 / \rho = ReT_V$ et $P_{\mu} = \mu V / l = P_V / Re$) et que l'on passe à la limite $Re \rightarrow 0$, on obtient l'équation de Stokes instationnaire

$$\begin{cases} \partial_t \underline{v} = -\underline{\nabla}p + \underline{\Delta}\underline{v} + \underline{f} \\ \underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \end{cases}$$
(1.2)

1.3 Schéma temporel

On simplifie et spécifie ici la présentation du schéma numérique de Basilisk à notre cas d'étude. Pour plus de détails, voir Popinet (2003) et Popinet (2009).

Discrétisation temporelle de l'équation de Navier-Stokes

L'équation (1.1) est résolue en une suite finie d'instants $0 = t_0 < ... < t_{n_{\Delta t}} = t_f$, où Δt est la durée adimensionnelle séparant un instant du suivant, appelée **pas de temps (adimensionnel)**. Un pas de temps maximum autorisé DT est fixé. Le pas de temps Δt est de plus ajusté pour respecter la **condition CFL** de stabilité

$$\Delta t < \mathrm{Co} \frac{\Delta x}{V_{\mathrm{max}}},\tag{1.3}$$

où $V_{\text{max}} = || \underline{v}(t) ||_{\infty}$ est la vitesse maximum à l'instant t et où Co est le **nombre de Courant–Friedrichs–Lewy**, fixé par défaut à 0.8. Nous fixons DT = 10^{-4} (sauf pour les études de convergence). Cette valeur est liée à la condition de stabilité numérique du système fluide-structure, bien plus restrictive que la condition (1.3). En pratique, durant la quasi-totalité de la simulation, on aura donc $\Delta t \equiv$ DT.

Lorsque le système (1.1) est semi-discrétisé en temps au temps t_n , cela donne

$$\begin{cases} \frac{\underline{v}_{n+1}-\underline{v}_n}{\Delta t} + \left(\underline{v}_{n+\frac{1}{2}},\underline{\nabla}\right)\underline{v}_{n+\frac{1}{2}} = -\underline{\nabla}p_{n+1/2} + \frac{1}{Re}\underline{\nabla}.\left(\underline{\underline{\mathbb{D}}}_n + \underline{\underline{\mathbb{D}}}_{n+1}\right) + \underline{f}_n \\ \underline{\nabla}.\underline{v}_{n+1} = 0, \end{cases}$$
(1.4)

où $\underline{\mathbb{D}}$ est le tenseur des déformations de vitesse : $\underline{\mathbb{D}} = \frac{1}{2} \left(\underline{\nabla} \underline{v} + \underline{\nabla} \underline{v}^T \right)$.

La pression est une variable duale de la vitesse permettant d'assurer la nullité de sa divergence. Une résolution directe aurait l'avantage de sa simplicité, mais pourrait donner lieu à $\underline{\nabla}.\underline{v}_{n+1} \neq 0$. De plus, une seule équation ne peut être utilisée pour résoudre simultanément les deux inconnues \underline{v}_{n+1} et p_{n+1} . On utilise donc un champ de **vitesse auxiliaire** \underline{v}_* selon la décomposition de Hodge. Le système devient alors (Chorin, 1969)

$$\underline{v}_{n+1} - \underline{v}_n = (\underline{v}_{n+1} - \underline{v}_*) + (\underline{v}_* - \underline{v}_n)$$
(1.5)

$$\underline{v}_* = \underline{v}_{n+1} + \Delta t \underline{\nabla} p_{n+\frac{1}{2}}.$$
(1.6)

En injectant (1.4) dans (1.5), et en remplaçant ⁽²⁾ $\underline{\mathbb{D}}_{n+1}$ par $\underline{\mathbb{D}}_{*}$, on obtient

$$\begin{cases} \frac{\underline{v}_{*}-\underline{v}_{n}}{\Delta t} + \left(\underline{v}_{n+\frac{1}{2}},\underline{\nabla}\right)\underline{v}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{Re}\underline{\nabla}\cdot\left(\underline{\underline{\mathbb{D}}}_{n}+\underline{\underline{\mathbb{D}}}_{*}\right) + \underline{f}_{n}\\ \frac{\underline{v}_{*}}{E} = \underline{v}_{n+1} + \Delta t\underline{\nabla}p_{n+\frac{1}{2}} & . \end{cases}$$
(1.7)
$$\nabla .\underline{v}_{n+1} = 0,$$

On peut enfin réécrire (1.7) en passant la seconde ligne sous l'opérateur de divergence. Eu égard à la dernière ligne de (1.7), cela donne

$$\begin{cases} \frac{\underline{v}_{*}-\underline{v}_{n}}{\Delta t} + \left(\underline{v}_{n+\frac{1}{2}}.\underline{\nabla}\right)\underline{v}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{Re}\underline{\nabla}.\left(\underline{\underline{\mathbb{D}}}_{n} + \underline{\underline{\mathbb{D}}}_{*}\right)\underline{f}_{n} \\ \Delta p_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\nabla.\underline{v}_{*} \\ \underline{v}_{n+1} = \underline{v}_{*} - \Delta t\underline{\nabla}p_{n+\frac{1}{2}} \end{cases}$$
(1.8)

Méthode de résolution temporelle de l'équation de Navier-Stokes par Basilisk

Dans (1.8), le terme non-linéaire $(\underline{v}_{n+\frac{1}{2}}, \underline{\nabla}) \underline{v}_{n+\frac{1}{2}}$ est estimé à l'aide du schéma de Godunov décalé d'ordre 2 de Bell-Collela-Glaz - B.C.G. (Bell et al., 1989)⁽³⁾. Puis, la vitesse auxiliaire \underline{v}_* est résolue implicitement⁽⁴⁾. La pression $p_{n+1/2}$ de la seconde ligne⁽⁵⁾ est résolue par solveur multi-grille de Poisson. Enfin, la troisième équation donne \underline{v}_{n+1} . Le schéma numérique de Basilisk est précis à l'ordre 2 en temps grâce à la discrétisation décalée de la pression.

1.4 Discrétisation spatiale

Maillage Octree : généralités

Le maillage de Basilisk est composé de cubes de volumes finis organisés hiérarchiquement selon une structure de type arbre appelée octree. On introduit progressivement cette notion en partant de la définition générale d'un maillage, puis en donnant les spécificités de l'octree.

^{2.} pour un traitement implicite de la viscosité

^{3.} qui requiert le respect de CFL (1.3)

^{4.} en raison de la présence de \underline{D}

^{5.} où le temps n'intervient pas



Figure 1.1 – Représentation du maillage d'un domaine : une maille parmi d'autres est en rouge. Un voisinage de cette maille : en rose clair. Les mailles voisines (inclues dans le voisinage) sont en rose foncé.

Plaçons-nous dans \mathbb{R}^3 . Le concept de **maillage eulérien** (3D) correspond aux trois données : 1. un **domaine de maillage** Ω , qui est un ouvert connexe non vide à frontière d'intérieur vide. Dans Basilisk, Ω est un cube; 2. un ensemble de **mailles**, qui est un ensemble fini $\{m_k, k \in [\![1..n_m]\!]\}$ d'ouverts connexes non vides, de frontière d'intérieur vide, et dont la réunion des adhérences \overline{m}_k est l'adhérence $\overline{\Omega}$ de Ω ; 3. une relation binaire $\mathcal{R}_{\mathcal{V}}$ sur l'ensemble des mailles, construite sur un critère arbitraire de proximité, appelée **relation de voisinage**. Lorsque l'on a $\overline{m}_k \mathcal{R}_V \overline{m}_{k'}$, on dit que les mailles \overline{m}_k et $\overline{m}_{k'}$ sont **voisines**. Le maillage est le triplet $\mathcal{M} = (\Omega, \{m_k, k \in [\![1..n_m]\!]\}, \mathcal{R}_{\mathcal{V}})$. Par commodité, on s'autorise à identifier un maillage \mathcal{M} à l'ensemble de ses mailles, ce qui permet d'écrire " $m \in \mathcal{M}$ " pour toute maille m de \mathcal{M} . La Figure 1.1 donne un exemple (2D) de maillage.

Dans chaque maille, on choisit un unique point appelé **nœud eulérien**. L'ensemble des nœuds eulériens est la **grille eulérienne**, notée \mathcal{E} . Leur nombre est noté $N_{\mathcal{E}}$. Le maillage est **régulier** lorsque les mailles sont superposables. Un maillage régulier est **cartésien** lorsque le domaine et les mailles, appelées **cellules**, sont des cubes ⁽⁶⁾ aux faces orthogonales aux axes du repère. Les nœuds eulériens alors sont les centres des cellules et la grille eulérienne est aussi appelée **grille cartésienne**. Le côté d'une cellule est appelé **pas spatial eulérien** et est noté Δ .

Considérons deux maillages \mathcal{M} et \mathcal{M}' . On dit que \mathcal{M} emboîte \mathcal{M}' lorsque

^{6.} et plus généralement des parallélépipèdes rectangles



Figure 1.2 – Exemple de couple de maillages emboîtés : a. Le maillage emboîtant, dont trois des mailles ont été coloriées en couleurs vives ; b. Le maillage emboîté, avec coloriage pâle des cellules filles de chacune de ces trois mailles.

toute maille de \mathcal{M} est elle-même maillée par des mailles de \mathcal{M}' . Si \mathcal{M} emboîte \mathcal{M}' , on dit que $m \in \mathcal{M}$ est **mère** (ou **parent**) de $m' \in \mathcal{M}'$ si $m' \subset m$, et que m' est **fille** (ou **enfant**) de m. La Figure 1.2 représente deux maillages emboîtés.

On parle de **suite de maillages emboîtés** pour désigner une suite finie de maillages dont tout élément autre que le dernier emboîte son successeur, appelé maillage **immédiatement plus fin** (et par rapport auquel il est **immédiatement plus grossier**). Le premier maillage de la suite est appelé **maillage le plus grossier** et le dernier, **maillage le plus fin**. On appelle **multi-maillage de type arbre** toute suite de maillage emboîtés dont le maillage le plus grossier est constitué d'une seule maille, appelée **racine**. ⁽⁷⁾ Les cellules du maillage le plus fin sont appelées **feuilles** de l'octree. Une **multigrille** est un multi-maillage de type arbre composé de maillages cartésiens. Enfin, un maillage <u>octree</u> est une multigrille dont toute cellule d'un maillage autre que le plus fin a exactement 8 filles, dites **sœurs** entre elles. Basilisk utilise un maillage octree. Par souci de concision, toutes les notions présentées par la suite sont donc directement déclinées aux maillages octree⁽⁸⁾.

Dans un maillage octree, on appelle **niveau de raffinement** d'un maillage son indice dans la suite. On le note "level". Par convention, la racine est au niveau 0.

^{7.} Une définition équivalent est que le graphe orienté ayant pour sommets les nœuds eulériens

et pour arcs les liens parents \rightarrow enfant, appelé **hiérarchie parentale**, est un arbre, d'où le nom.

^{8.} et ce, aussi génériques que puissent initialement être ces notions.

Le niveau maximum est appelé **profondeur de raffinement**, il est noté "maxlevel". C'est le niveau de raffinement des feuilles. Dans un octree, chaque niveau de raffinement supplémentaire octuple le nombre de mailles et diminue de moitié le pas spatial eulérien Δ . La Figure 1.3 présente un maillage quadtree, qui est l'équivalent 2D d'un maillage octree. Les différents maillages superposés sont représentés les uns au-dessus des autres et quelques liens mère-fille sont représentés en gris.

Cellules actives et inactives, adaptatif octree, masque de domaine

Le maillage octree ⁽⁹⁾ est propice à l'implémentation d'une procédure de raffinement statique ou dynamique. La méthode consiste à activer ou désactiver les cellules fines selon les besoins locaux en précision. On appelle **cellule active** toute cellule en laquelle on calcule la valeur des champs fluides par résolution des équations de Navier-Stokes ⁽¹⁰⁾. Elles constituent la **partie active de l'octree**, les autres cellules sont dites **inactives**. L'activation/désactivation des cellules à chaque pas de temps, appelée **raffinement**/**déraffinement** ⁽¹¹⁾ est gérée automatiquement pour respecter des critères définis par l'utilisateur, pourvu que les quatre règles suivantes soient respectées : 1. Toute cellule autre que la racine a le même état que ses 7 sœurs ; 2. Si une telle cellule est active, alors sa mère l'est aussi ⁽¹²⁾ ; 3. Les cellules actives dont les filles sont inactives, appelées **feuilles actives** ⁽¹³⁾, maillent un domaine $\Omega_c \subset \Omega$ qui est invariant dans le temps, appelé, **domaine de calcul** ⁽¹⁴⁾ ; 4. Toute feuille active ne peut être que deux fois plus petite, de la même taille ou deux fois plus grosse que toute cellule qui la "touche" (au sens : la distance euclidienne entre les deux est nulle).⁽¹⁵⁾

Pour effectuer les calculs en une cellule active, on a besoin de ses voisines (Popinet, 2003, 2009; Van Hooft et al., 2018). Parfois, certaines cellules voisines sont inactives : on les appelle **cellules halo**. Sur le bord du domaine de calcul Ω_c , certaines voisines manquent. Des cellules halo sont alors ajoutées : ces cellules supplémentaires sont alors appelées **cellules fantôme**.

^{9.} et plus généralement les maillages de type arbre

^{10.} et plus généralement les équations aux dérivées partielles résolues par Basilisk

^{11.} ou encore upsampling/downsampling, (Van Hooft et al., 2018).

^{12.} Ou encore : si une cellule qui n'est pas une feuille est inactive, alors sa mère l'est aussi

^{13.} Ce sont feuilles de l'arbre induit par la hiérarchie parentale sur la partie active de l'octree.

^{14.} Et pour cause : les calculs ne sont pas faits sur Ω tout entier mais seulement sur Ω_c

^{15.} Et ce, pour des raisons de calculs dans Basilisk (Popinet, 2003, 2009)).



Figure 1.3 – Maillage quadtree, équivalent 2D du maillage octree. Dans cet exemple, la profondeur de raffinement est de 4. La cellule racine (niveau de raffinement 0) est représentée en blanc et le maillage le plus fin (niveau de raffinement 4) est représenté en jaune. Les liens de parenté (liens mère-fille) ne sont représentés (en gris) qu'entre les cellules actives.



Figure 1.4 – a. Représentation d'un maillage octree, où les liens de parenté ne sont pas représentés mais implicités via le code couleur, calqué sur celui de la Figure 1.3. b. Représentation des feuilles actives de l'octree. Dans cet exemple le raffinement est le plus élevé possible dans le coin inférieur droit avant du domaine de calcul, et le plus bas possible dans les sept autres coins.

Les Figures 1.3 et 1.4a illustrent respectivement les maillages adaptatifs quadtree (2D) et octree (3D). Dans le maillage quadtree représenté en Figure 1.3, les liens de parenté sont représentés entre les cellules actives. Le principe est le même en 3D avec le maillage octree dans la Figure 1.4a, mais les liens de parenté ne sont pas représentés. Enfin, la Figure 1.4b représente le maillage observable, c'est-à-dire l'ensemble des feuilles actives de l'octree (celles dans le coin inférieur droit avant).

L'adaptativité peut être utilisée de deux manières : raffinement "manuel" statique (fonction "refine") et/ou raffinement automatique et **dynamique (maillage adaptatif**), pour respecter un critère de précision défini par l'utilisateur, grâce à la fonction "adapt_wavelet" (Popinet, 2003, 2009; Van Hooft et al., 2018).

Masque de domaine

L'inactivation permanente des mailles de certaines parties du domaine de maillage Ω peut être forcée par une fonction appelée **masque de domaine**. Ce nom est aussi utilisé pour désigner son résultat, qui n'est autre que la partie sans calculs $\Omega \setminus \Omega_c$. Le masque sculpte la forme du domaine de calcul Ω_c en désactivant les cellules contenues dans le reste du domaine de maillage Ω . Dans notre étude, le masque de domaine est utilisé pour obtenir la forme de nos systèmes microfluidiques numériques : un canal à section carrée (cf. chapitre 4) et une combinaison en série d'un canal à section carrée et d'un canal à section rectangulaire (cf. chapitre 5).

Choix de la taille de maille spatiale eulérienne

Dans la présente étude, la taille de maille Δ en maillage régulier ou de raffinement maximum Δ_{\min} est $\Delta = 1/32 \approx 0.03$. Ainsi, pour $\Delta t = 10^{-4}$ on a : $Co\Delta/DT = 250$, donc la condition CFL (1.3) est vérifiée du moment que la vitesse adimensionnelle \underline{v} vérifie $|| \underline{v} ||_{\infty} < 250$. C'est largement vérifié dans les cas que nous avons étudiés, ce qui justifie a posteriori le respect de la condition CFL, comme affirmé en début de chapitre. On verra dans la section 6 de ce chapitre que cela permet d'obtenir une précision suffisante et on étaiera plus ce choix au chapitre 3.

Discrétisation spatiale de l'équation de Navier-Stokes

Les variables de vitesse et de pression sont localisées au centre des cellules, ce qui présente trois avantages (Bague, 2009) : 1. Cela sert au calcul du terme non-linéaire via le schéma B.C.G. (Bell et al., 1989) ; 2. Cela simplifie les calculs de quantité de mouvement en maillage adaptatif octree ; 3. Cela simplifie la discrétisation pour le terme visqueux. Néanmoins, des variables auxiliaires de vitesse et de pression sont calculées sur les faces pour faciliter la résolution de l'équation de Poisson (seconde ligne de (1.8)). Le terme source de l'équation de Navier-Stokes est lui aussi donné aux faces. La précision locale du schéma est d'ordre 2 en espace (selon le pas spatial Δ) et est imposée par l'utilisateur en maillage adaptatif. Par souci de concision, le schéma spatialement discrétisé n'est pas décrit.

2 Élasticité bidimensionnelle : modèle de membrane

Les forces exercées par la membrane sur le fluide sont calculées par le solveur solide du solveur fluide-structure Caps3D à partir de la configuration lagrangienne de référence et de la configuration lagrangienne actuelle. Il repose sur une approche Éléments Finis lagrangiens. Les éléments finis sont précis à l'ordre 3 en espace et dans certains couplages, ils peuvent donner une précision spatiale à l'ordre 4 Walter (2009). Ils comportent une certaine raideur numérique qui garantit la stabilité en compression.

2.1 Équations de la physique du solide

Les équations solides sont résolues par une partie du code structure Caps3D. Elles utilisent une partie de la méthode éléments finis P_2 pour déduire de la forme de la capsule les efforts élastiques internes de sa membrane, et enfin les efforts exercés par celle-ci sur le fluide avoisinant. On présente ici les bases de la mécanique de membrane et la résolution numérique associée, qui repose sur le calcul tensoriel (cf. Salençon (2005) ou Walter (2009) pour l'application aux membranes).

Échelles caractéristiques et adimensionnement du problème solide

On considère une capsule qui au repos est sphérique de rayon a_0 , à cœur liquide et à enveloppe membranaire dont la résistance élastique est caractérisée

par le module de cisaillement surfacique G_s . La membrane est supposée hyperélastique (ie. non dissipative), sans épaisseur, dépourvue de raideur à la flexion et de viscosité membranaire. L'adimensionnement du problème solide est basé sur les échelles a_0 et G_s : les longueurs sont adimensionnalisées par a_0 , les tensions et énergies surfaciques par G_s , les contraintes par G_s/a_0 , les forces par G_sa_0 et les énergies par $G_sa_0^2$.

Paramétrisation, transformations, configurations, bases covariantes

Dans \mathbb{R}^3 , considérons une surface lisse fermée S_0 , que l'on appelle **configura**tion de référence (ou forme au repos) de la membrane. Dans cette thèse, S_0 est la sphère unité. S_0 fait l'objet en tout point \underline{X}_0 d'une paramétrisation locale : un \mathcal{C}^{∞} -difféomorphisme $\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}$ d'une boule ouverte $\mathcal{B}_3(O,h_0)$ vers un ouvert borné $\mathcal{V}_{\underline{X}_0}$ contenant \underline{X}_0 , vérifiant : 1. $\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}(O) = \underline{X}_0$; 2. $\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}(\{z=0\} \cap \mathcal{B}_3(O,h_0)) =$ $\mathcal{S}_0 \cap \mathcal{V}_{\underline{X}_0}$. On suppose de plus que la matrice jacobienne de $\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}$ en O, notée $\mathcal{J}_{\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}}(O)$, est une matrice de rotation et que $\partial_n \underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}$ pointe vers l'extérieur de la capsule.

On note (ξ^1, ξ^2, c_n) le triplet des coordonnées au départ de $\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}$. On les appelle **coordonnées curvilignes**. On appelle **base covariante dans la configuration de référence** la base orthonormée directe $(\underline{A}_1, \underline{A}_2, \underline{N})$ de \mathbb{R}^3 définie par

$$\begin{cases} \underline{A}_{\alpha} \stackrel{\triangle}{=} \partial_{\alpha} \underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_{0},0}(O), \alpha = 1, 2\\ \underline{N} \stackrel{\triangle}{=} \partial_{n} \underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_{0},0}(O) \end{cases}$$

$$(2.1)$$

On considère ensuite, à tout instant t, un C^{∞} -difféomorphisme $\underline{\Phi}_t$ de \mathbb{R}^3 , préservant l'orientation de l'espace, que l'on appelle **transformation au temps** t, vérifiant par définition : 1. En tout point \underline{x} de \mathbb{R}^3 , l'application $t \mapsto \underline{\Phi}_t(\underline{x})$ est de classe C^{∞} sur \mathbb{R}^+ ; 2. Dans la configuration de référence S_0 , cette transformation est l'identité de $\mathbb{R}^3 : \underline{\Phi}_0 = \mathbb{I}$. Au temps t = 0, cette transformation est notée $\underline{\Phi}_{t=0}$ (à ne pas confondre avec $\underline{\Phi}_0$ car capsule n'est pas toujours au repos à t = 0). L'image S_t de S_0 par $\underline{\Phi}_t$ (c'est-à-dire $S_t \stackrel{\triangle}{=} \underline{\Phi}_t(S_0)$) est appelée **configuration actuelle au temps** t. On la note aussi S.

On généralise la notion de base covariante à toutes les configurations : soit \underline{X} un point de S. Il correspond à un unique point \underline{X}_0 de S_0 via la transformation $\underline{\Phi}_t$. On définit la **paramétrisation locale de la configuration actuelle** S en \underline{X}_0 comme



Figure 2.1 – Coordonnées curvilingnes et base covariant (Walter, 2009).

étant l'application $\underline{\mathcal{T}}_{\underline{X},t} \stackrel{\triangle}{=} \underline{\Phi}_t \circ \underline{\mathcal{T}}_{\underline{X}_0,0}$. La base covariante dans la configuration actuelle au temps *t* et au point \underline{X} est alors la base $(\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{n})$ de \mathbb{R}^3 définie par :

$$\begin{cases} \underline{a}_{\alpha} \stackrel{\triangle}{=} \partial_{\alpha} \underline{\mathcal{T}}_{\underline{X},t}(O), \alpha = 1, 2\\ \underline{n} \stackrel{\triangle}{=} \frac{\underline{a}_{1} \wedge \underline{a}_{2}}{||\underline{a}_{1} \wedge \underline{a}_{2}||} \end{cases}$$
(2.2)

La Figure 2.1, empruntée à Walter (2009), représente les coordonnées curvilignes et la base covariante en un point <u>X</u> de la configuration actuelle au temps *t*. Les **vecteurs tangents** \underline{a}_{α} ($\alpha = 1, 2$) engendrent le plan tangent \mathcal{P} à \mathcal{S} en <u>X</u>.

Coordonnées contravariantes

On considère une base covariante $(\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3)$, où $\underline{a}_3 \stackrel{\triangle}{=} \underline{n}$. On appelle **base** contravariante dans la configuration actuelle l'unique base $(\underline{a}^1, \underline{a}^2, \underline{a}^3)$ vérifiant :

$$\underline{a}_{i}.\underline{a}^{j} = \delta_{i,j}, 1 \le i, j \le 3.$$

$$(2.3)$$

La base contravariante est une base directe de \mathbb{R}^3 . Les vecteurs \underline{a}^{α} ($\alpha = 1, 2$) engendrent eux aussi le plan tangent \mathcal{P} et on a $\underline{a}^3 = \underline{n}$. Dans le cas particulier où $\mathcal{S} = \mathcal{S}_0$, on a $(\underline{A}^1, \underline{A}^2, \underline{N}) = (\underline{A}_1, \underline{A}_2, \underline{N})$.

Gradient de transformation, déformations, invariants, lois constitutives

Le gradient surfacique de la transformation à l'instant t, est un tenseur d'ordre 2, noté \underline{F} , qui illustre les variations de la transformation $\underline{\Phi}_t$ lorsque l'on se déplace tangentiellement à S_0 , près d'un point \underline{X}_0 donné. Il est défini par

$$\underline{\underline{F}} = \underline{a}_{\alpha} \otimes \underline{A}^{\alpha}. \tag{2.4}$$

Le tenseur (des dilatations) de Cauchy-Green C défini par

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{F}}^T . \underline{\underline{F}}. \tag{2.5}$$

Ce tenseur est symétrique positif, de rang 2. Les racines carrées de ses valeurs propres non nulles sont notées λ_1 , λ_2 et sont appelées **dilatations principales**. Le **tenseur (des déformations) de Green-Lagrange** caractérise les déformations locales de la membrane. Il est donné par

$$\underline{\underline{e}} = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\underline{C}}} - \underline{\underline{\underline{I}}}_{s}^{0} \right), \qquad (2.6)$$

où $\underline{I}_{s}^{0} = \underline{I} - \underline{N} \otimes \underline{N}$ est le tenseur identité de surface de référence. A partir des dilatations principales, on obtient les invariants de déformation

$$\begin{cases} I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 - 2 \\ I_2 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 - 1 \end{cases}$$
(2.7)

La loi constitutive de la membrane donne l'énergie libre de déformation par unité de surface non déformée, $w_s(I_1, I_2)$. Nous utilisons les deux lois suivantes :

— Loi néo-hookéenne (N.-H.)

$$w_{\rm s}^{\rm NH} = \frac{G_{\rm s}^{\rm NH}}{2} \left(I_1 - 1 + \frac{1}{I_2 + 1} \right);$$
 (2.8)

— Loi de Skalak (Sk)

$$w_{\rm s}^{\rm Sk} = \frac{G_{\rm s}^{\rm Sk}}{4} \left(I_1^2 + 2I_1 - 2I_2 + CI_2^2 \right), \tag{2.9}$$

où l'on a fixé C = 1 tout comme Hu et al. (2013).

Tenseurs des tensions surfaciques de Piola-Kirchhoff et de Cauchy

Le **tenseur de Piola-Kirchhoff** est défini comme le gradient de l'énergie par rapport au tenseur des déformations de Green-Lagrange :

$$\underline{\pi} = \partial_{\underline{e}} w_{\mathrm{s}}.\tag{2.10}$$

Le tenseur $\underline{\pi}$ n'a pas de sens physique direct car il donne des tensions par rapport à la configuration de référence. Pour en donner un, il faut revenir à la configuration actuelle en utilisant le tenseur gradient surfacique des déformations \underline{F} . Le **tenseur des tensions de Cauchy** est ainsi donné par

$$\underline{\underline{T}} = \frac{1}{J_{\rm s}} \underline{\underline{\underline{F}}} \underline{\underline{\underline{F}}} \underline{\underline{\underline{F}}}^{\rm T}, \qquad (2.11)$$

où $J_s = \lambda_1 \lambda_2$, est le jacobien surfacique qui caractérise la dilatation locale de l'aire de la membrane. Le tenseur <u>T</u> permet de trouver la tension <u>T</u> selon un vecteur unitaire <u>b</u> tangent à la surface :

$$\underline{\Gamma}(\underline{b}) = \underline{\underline{T}}.\underline{b}.$$
(2.12)

Concrètement, si l'on considère un segment élémentaire *dl* sur la configuration déformée, de binormale <u>*b*</u>, alors la force exercée sur ce segment est

$$df_{T} = \underline{\underline{T}} \underline{\underline{b}} dl. \tag{2.13}$$

Charge pesant sur la membrane, interaction avec le fluide

La charge surfacique \underline{q} exercée sur la membrane représente le saut de contraintes fluides à sa traversée :

$$\underline{q} = \left(\underline{\underline{\sigma}}_{\text{ext}} - \underline{\underline{\sigma}}_{\text{int}}\right) \underline{.n}, \tag{2.14}$$

où $\underline{\underline{\sigma}}_{ext}$ et $\underline{\underline{\sigma}}_{int}$ sont les tenseurs des contraintes au sein des fluides respectivement externe et interne (à la capsule) au niveau de membrane.

Équation d'équilibre de la membrane

Tout élément de membrane dS est soumis à deux forces : la résultante des contraintes fluides $\underline{df}_{\underline{q}} = \underline{q}dS$ et la circulation sur le contour de dS de la tension \underline{T} dans la direction de sa binormale \underline{b} , qui par le théorème de flux-divergence vaut $\nabla_{\underline{s}} \cdot \underline{T} dS$. L'équation d'équilibre local de la membrane s'écrit donc

$$\underline{\nabla}_{\mathrm{s}}.\underline{\underline{T}} + q = \underline{0}. \tag{2.15}$$

Principe des travaux virtuels

On multiplie l'équation d'équilibre (2.15) par un **déplacement virtuel** $\underline{\hat{u}}$ (défini sur S, à valeurs dans \mathbb{R}^3), on intègre sur la configuration actuelle S et on obtient

$$\oint_{\mathcal{S}} \underline{\hat{u}} \cdot \left(\underline{\nabla}_{s} \cdot \underline{\underline{T}} \right) dS + \oint_{\mathcal{S}} \underline{\hat{u}} \cdot \underline{\underline{q}} dS = 0.$$
(2.16)

Grâce à une formule de Green d'intégration par partie et au fait que la surface est fermée, on obtient le **principe des travaux virtuels pour une membrane fermée**

$$\oint_{\mathcal{S}} \underline{\hat{u}} \underline{q} dS = \oint_{\mathcal{S}} \underline{\underline{\varepsilon}} (\underline{\hat{u}}) : \underline{\underline{T}} dS,$$
(2.17)

où $\underline{\varepsilon}(\underline{\hat{u}}) \stackrel{\triangle}{=} \frac{1}{2} \left(\underline{\nabla_{\underline{s}}} \underline{\hat{u}} + \underline{\nabla_{\underline{s}}} \underline{\hat{u}}^T \right)$ est le tenseur linéarisé des déformations associées au déplacement virtuel. Les membres de gauche et de droite de l'équation (2.16) correspondent respectivement aux efforts externes et internes sur la membrane.

2.2 Calcul direct des forces sur des éléments finis P₂

On présente ici la discrétisation et le calcul numérique effectué à partir de l'équation d'équilibre.

Discrétisation de la membrane

La membrane est discrétisée par des éléments finis triangulaires P_2 . Ce maillage est construit itérativement à partir d'un icosaèdre inscrit dans la sphère unité S_2 via une procédure appelée **icomesh**.

La procédure icomesh créant un maillage d'éléments finis P_1 est illustrée par la Figure 2.2, en affectant à chaque nœud un **ordre hiérarchique** et un **indice global dans le maillage**, c'est-à-dire le numéro identifiant le nœud dans le maillage. Le nombre d'itérations est noté n_{it} . La procédure à n_{it} opérations est notée icomesh n_{it} 1 (le 1 pour éléments P_1).



Figure 2.2 – Représentation du processus de maillage jusqu'à l'ordre 3 en éléments P_1 , et des ordres des nœuds : ordre 0 (en vert), ordre 1 (en bleu), ordre 2 (en violet) et ordre 3 (en mauve).

La procédure se déroule comme suit : 1. Les nœuds de départ sont les sommets de l'icosaèdre, par définition d'ordre O. L'icosaèdre a $4^0 \times 10 + 2 = 12$ sommets,

 $4^0 \times 30 = 30$ arêtes et $4^0 \times 20 = 20$ faces. Leurs indices globaux sont affectés arbitrairement et vont de 1 à 12; 2. À l'itération *i* du raffinement : 2.a. on considère les $4^{i-1} \times 30$ arêtes du maillage déjà présent à l'étape i - 1; 2.b. on prend leur milieu et on le projette sur la sphère unité; 2.c. Le projeté est alors ajouté au maillage, affecté d'un ordre hiérarchique *i*, identifié par l'indice global immédiatement plus grand que le plus grand indice déjà attribué, et relié aux extrémités de l'arête et au projeté du milieu de chacune des 4 autres milieux d'arêtes appartenant aux mêmes mailles que celles contenant l'arête de départ. ; 2.d. Cela fait de nouvelles faces triangulaires, qui remplacent toutes celles de l'étape i - 1. 2.e. De même pour les arêtes de l'étape i - 1 et les milieux de leurs arêtes, qui sont tous effacés. 2.f. On obtient ainsi $4^i \times 10 + 2$ sommets, $4^i \times 30$ arêtes et $4^i \times 20$ faces. 3. En particulier, pour $i = n_{it}$, on obtient un maillage à $N_{\mathcal{L}} = 4^{n_{it}} \times 10 + 2$ nœuds lagrangiens, $4^{n_{it}} \times 30$ arêtes et $4^{n_{it}} \times 20$ faces.

Pour un maillage avec des Éléments Finis P_2 , le principe est le même mais une étape supplémentaire, incomplète, est effectuée à la fin une itération : les milieux des arêtes sont projetés sur la sphère unité, puis effacés avec l'arête dont ils étaient le milieu et les faces triangulaires, mais les projetés sont juste affectés de l'ordre $n_{it} + 1$ et reliés aux extrémités de l'arête dont ils sont issus, pas entre eux. Ce ne sont donc pas de nouvelles faces triangulaires P_1 qui sont créées, mais des mailles P_2 .

Le maillage maillage avec des Éléments Finis P_2 a $N_{\mathcal{L}} = 4^{n_{it}+1} \times 10 + 2$ nœuds lagrangiens $\underline{X}_{0,1}, ..., \underline{X}_{0,N_{\mathcal{L}}}$, les $4^{n_{it}} \times 10 + 2$ premiers nœuds étant qualifiés de **nœuds principaux** et les $4^{n_{it}} \times 30$ restant étant qualifiés de **nœuds secondaires**. Il comporte aussi $n_{\mathcal{L}} = 4^{n_{it}} \times 20$ mailles. Les nœuds constituent la **configuration lagrangienne de référence** \mathcal{L}_0 . La figure 2.3 représente le maillage icomesh 4 2 utilisé pour nos études de relaxation de capsule.

On vient de voir comment la sphère unité était maillée par des mailles d'éléments finis P_2 . Il faut à présent pouvoir décrire les formes de ces mailles en les comparant à une maille triangulaire de référence, **le 2-simplexe de référence** : il s'agit du triangle T_0 de \mathbb{R}^2 délimité par les droites d'équation $\eta^1 = 0$, $\eta^2 = 0$ et $\eta^1 + \eta^2 = 1$, où (η^1, η^2) sont les coordonnées dans la base canonique de \mathbb{R}^2 .

Chaque maille d'éléments finis P_2 a 6 nœuds : 3 principaux et 3 secondaires. Outre leur indice global, chaque nœud reçoit un **indice local** dans la maille, al-



Figure 2.3 – Maillage de la sphère unité (de centre $0_{\mathbb{R}^3}$ et de rayon 1) avec des Éléments Finis, obtenu après 4 itérations et choix des éléments P_2 (icomesh 4 2). Les nœuds principaux sont chacun extrémité d'au moins 5 arêtes du maillage. Les nœuds secondaires (symboles '*') sont les extrémités de deux arêtes du maillage.

lant de (1) à (6). Les indices (1) à (3) sont réservés aux nœuds principaux, et les autres aux nœuds secondaires. Pour décider des détails de cette attribution, on effectue d'abord celle-ci dans le simplexe de référence T_0 (considéré comme la maille de référence, même s'il ne fait pas partie du maillage lagrangien). Le schéma de cette attribution est illustré en Figure 2.4. On met alors en bijection l'ensemble des nœuds de T_0 avec l'ensemble des nœuds de chaque maille, ce qui induit naturellement sur ce dernier une indiciation locale. La convention choisie est que si l'on "regarde" T_0 "de dessus" et une maille "de l'extérieur de la capsule", on "observe" la même numérotation ⁽¹⁶⁾ Les nœuds de la maille m_i sont localement notés $\underline{X}_{0,m_i}^{(p)}$, p = 1..6, et leur coordonnée selon l'axe Ox_j , $\left[X_{0,m_i}^{(p)}\right]_j$. Dans le simplexe de référence, les nœuds dits **voisins** sont ceux qui sont reliés par une arête dans la Figure (2.4) (par exemple (1) et (4)). Cette relation de voisinage via les indices locaux est copiée pour chaque maille. On appelle **pas spatial lagrangien**, et l'on note h, la distance euclidienne maximum entre deux nœuds voisins dans la configuration de référence. Dans la thèse, nous avons choisi la procédure icomesh 4 2

^{16.} Autrement dit, que le plongé canonique de T_0 dans \mathbb{R}^3 soit homotope à chaque maille par une homotopie dont l'image des z > 0 est l'extérieur local de la capsule.



Figure 2.4 – Indices locaux des nœuds dans le simplexe de référence T_0

(4 itérations + éléments P_2), ce qui donne $h \approx 0.04$.

Fonctions de forme, éléments finis P₂

Une fois chaque maille P_2 construite et ses nœuds indicés tant globalement que localement, il convient de la relier au simplexe de référence T_0 par des fonctions permettant de passer des nœuds de T_0 à ceux de la maille. Chaque nœud a 3 degrés de liberté, un par coordonnée. Comme il y a 6 nœuds par maille, cela fait 18 degrés de liberté, à raison de 6 par axe. Il faut donc un espace fonctionnel de dimension 6. C'est justement le cas de l'espace des polynômes de degré total égal à 2, c'est-à-dire $P_{P_2} \stackrel{\triangle}{=} \text{vect} (1, X, Y, X^2, Y^2, XY)$, appelé **espace d'éléments finis triangulaire** P_2 . Une base plus appropriée que la base canonique en est la base des polynômes de Lagrange aux 6 nœuds du simplexe de référence, dont les éléments sont appelés **fonctions de forme** :

$$N^{(1)}(\eta^{1},\eta^{2}) = (1 - \eta^{1} - \eta^{2})(1 - 2\eta^{1} - 2\eta^{2})$$

$$N^{(2)}(\eta^{1},\eta^{2}) = \eta^{1}(2\eta^{1} - 1)$$

$$N^{(3)}(\eta^{1},\eta^{2}) = \eta^{2}(2\eta^{2} - 1)$$

$$N^{(4)}(\eta^{1},\eta^{2}) = 4\eta^{1}(1 - \eta^{1} - \eta^{2})$$

$$N^{(5)}(\eta^{1},\eta^{2}) = 4\eta^{1}\eta^{2}$$

$$N^{(6)}(\eta^{1},\eta^{2}) = 4\eta^{2}(1 - \eta^{1} - \eta^{2})$$
(2.18)

La forme dans la configuration de référence pour la maille m_i , $i = 1, ..., n_L$,

est alors donnée par :

$$\underline{\mathcal{S}}_{0,i} = \sum_{p=1}^{6} \underline{X}_{0,m_i}^{(p)} N^{(p)}.$$
(2.19)

A un instant t, la forme dans la configuration actuelle pour la maille m_i est

$$\underline{\mathcal{S}}_{i} \stackrel{\triangle}{=} \underline{\Phi}_{t} \circ \underline{\mathcal{S}}_{0,i} = \sum_{p=1}^{6} \underline{X}_{m_{i}}^{(p)} N^{(p)}.$$
(2.20)

Enfin, $\mathcal{L} \stackrel{\triangle}{=} \{\underline{X}_1, ..., \underline{X}_{\mathcal{N}_{\mathcal{L}}}\}$ est appelée **configuration lagrangienne actuelle**. A noter que la base covariante (2.2) est approchée numériquement sur une maille m_i par

$$\underline{a}_{\alpha} = \partial_{\alpha} \underline{\mathcal{S}}_{i}. \tag{2.21}$$

Équations algébriques utilisées pour les calculs

Le calcul des efforts nécessite de discrétiser le principe des travaux virtuels (2.17) :

1. On écrit les intégrales sur *S* comme sommes de celles sur chaque maille ;

2. On remarque que les fonctions (2.19) et (2.20) sur chaque maille m_i dépendent uniquement des positions $\underline{X}_{m_i}^{(p)}$, p = 1, ..., 6. L'approximation numérique de \underline{T} sur m_i ne dépend que des $\underline{X}_{m_i}^{(p)}$, $\underline{X}_{0,m_i}^{(p)}$, p = 1, ..., 6;

3. Les intégrales sont calculées par une méthode de Hammer et al. (1956) à 6 points;

4. L'équation (2.17) étant valable pour tout déplacement virtuel $\underline{\hat{u}}$, les équations se simplifient et on obtient l'équation matricielle

$$[M_{m_i}] \cdot \{q_{m_i}\} = \left\{ R_{m_i}\left(\underline{\underline{T}}\right) \right\}, i = 1, ..., n_{\mathcal{L}},$$
(2.22)

où $[M_{m_i}] \in \mathcal{M}_{18}(\mathbb{R})$ et $\{q_{m_i}\} \in \mathcal{M}_{18,1}(\mathbb{R})$ sont respectivement la "matrice de masse" (même structure mais pas d'inertie) et le vecteur des charges sur la maille m_i . Enfin, $\{R_{m_i}(\underline{T})\} \in \mathcal{M}_{18,1}(\mathbb{R})$, appelé **résultante** sur m_i , est donné par

$$\left\{R_{m_{i}}\left(\underline{\underline{T}}\right)\right\}_{j}^{(p)} = \int_{0}^{1} \int_{0}^{1-\eta^{2}} \left[\chi_{\alpha\beta}^{(p)}\right]_{j} T^{\alpha\beta} \sqrt{||\underline{a}_{1}||^{2}||\underline{a}_{2}||^{2} - (\underline{a}_{1}.\underline{a}_{2})^{2}} d\eta^{1} d\eta^{2}, 1 \le p \le 6$$
(2.23)

, où :

$$\left[\chi_{\alpha\beta}^{(p)}\right]_{j} = \frac{1}{2}\partial_{\beta}N^{(p)}\left[a_{\alpha}\right]_{j} + \frac{1}{2}\partial_{\alpha}N^{(p)}\left[a_{\beta}\right]_{j} + N^{(p)}\left[\partial_{\beta}a_{\alpha}\right]_{j} - \left(\partial_{\beta}\underline{a}_{\alpha}.\underline{a}^{i}\right)N^{(p)}\left[a_{i}\right]_{j}$$

$$(2.24)$$

et

$$T^{\alpha\beta} = \frac{2}{J_{\rm s}} \partial_1 w_{\rm s} \underline{A}^{\alpha} . \underline{A}^{\beta} + 2J_{\rm s} \partial_2 w_{\rm s} \underline{a}^{\alpha} . \underline{a}^{\beta}.$$
(2.25)

La matrice de masse et le vecteur des charges ne sont pas détaillés car nous ne les utilisons pas. Dans notre méthode, l'équation (2.22) signifie simplement que l'on a retiré le déplacement virtuel des équations. Enfin, la résultante locale peut être recalculée en chaque nœud lagrangien en sommant les contributions de toutes les mailles dont il est nœud principal ou secondaire :

$$\{\underline{R}_i\} = \sum_{j,p,X_{0,i}=m_j^{(p)}} \left\{ R_{m_j}\left(\underline{\underline{T}}\right) \right\}^{(p)}, i = 1..N_{\mathcal{L}}.$$
(2.26)

Pour tout nœud lagrangien \underline{X}_i , $i = 1..N_{\mathcal{L}}$, \underline{R}_i est une force ponctuelle représentant une intégrale locale sur un tout petit morceau de *S* autour de \underline{X}_i de la charge locale \underline{q} exercée par les fluides sur la membrane. Par action-réaction et par l'hypothèse de nullité de la masse de la membrane, la force $\underline{F}_i \stackrel{\triangle}{=} -\underline{R}_i$ est une force ponctuelle représentant une intégrale locale sur un tout petit morceau de *S* autour de \underline{X}_i de la charge locale $-\underline{q}$ exercée par la membrane sur les fluides. Ce sont les forces \underline{F}_i , $i = 1..N_{\mathcal{L}}$ qui vont être utilisés pour le couplage. La méthode des éléments finis est d'ordre 3 en espace et son couplage à la méthode des intégrales de frontière est spatialement d'ordre 4 (Jund, 2007; Walter, 2009; Walter et al., 2010).

3 Couplage fluide-structure : la méthode IBM

Nous présentons les bases de la méthode des frontières immergées IBM. La méthode IBM est conçue pour coupler un maillage cartésien à un maillage lagrangien (Peskin, 1972, 2002; Mittal and Iaccarino, 2005). Elle utilise une fonction servant à la fois à la dispersion volumique des forces élastiques dans le fluide et à l'approximation des vitesses d'advection du solide par moyenne locale pondérée des vitesses du fluide environnant. Nous appelons cette fonction **filtre** IBM et la notons $\delta_{\Delta,3D}$. Elle est continue à support compact. En 3D, le filtre est obtenu par produit d'un même filtre 1D noté δ_{Δ} appliqué à chaque coordonnée :



Figure 3.1 – Représentation de la méthode IBM : a. les maillages eulérien fluide et lagrangien solide ; b. Quelques examples de filtres 1D. Le filtre en cosinus δ_{cos} (Peskin, 1977, 2002) est représenté par la ligne bleu marine en tirets et celui de Beyer and Leveque (1992) δ_{BL} , que nous utilisons, en ligne pleine bleu clair. Cette figure est extraite de Mittal and Iaccarino (2005).

Le filtre 1D δ_{Δ} est lui-même une **remise à l'échelle** Δ d'un **filtre (1D) dit sous forme canonique** (le terme 1D peut être omis), que l'on note tantôt ϕ (Peskin, 2002), tantôt δ_1 (quand on en prend un exemple particulier) :

$$\delta_{\Delta}(x) = \frac{1}{\Delta}\phi\left(\frac{x}{\Delta}\right) = \frac{1}{\Delta}\delta_1\left(\frac{x}{\Delta}\right), \qquad x \in \mathbb{R}.$$
(3.2)

On dit que le filtre $\psi \stackrel{\triangle}{=} \delta_{1,3D}$ est un **filtre 3D sous forme canonique** (le terme 3D est précisé explicitement)⁽¹⁷⁾. La Figure 3.1 représente un schéma de la méthode IBM (Figure 3.1a) et quelques filtres sous forme canonique (Figure 3.1b).

Voici la déclinaison à notre étude du problème couplé : à chaque pas de temps :

1. On passe de l'adimensionnement fluide à l'adimensionnement solide en multipliant les coordonnées adimensionnelles de chaque nœud $\underline{X}_i \in \mathcal{L}$ (la configuration lagrangienne actuelle) par l/a_0 ;

2. Le problème solide est résolu (cf section 2), ce qui donne la force \underline{F}_i en chaque X_i , $i = 1...N_L$;

3. On remet les forces à l'échelle fluide en les multipliant par $G_{s}a_{0}/\rho V^{2}l^{2} = (a_{0}/l)/We$, où $We = \rho V^{2}l/G_{s} = ReCa$ est le nombre de Weber, Re est le nombre

^{17.} Définition similaire en 2D : à chaque fois, on impose $\Delta = 1$ pour la forme canonique.

de Reynolds (cf section 1), et $Ca = \mu V/G_s$ est le **nombre capillaire**, qui caractérise le ratio entre les forces visqueuses et les forces élastiques. Dans le cas particulier où l'échelle de vitesse est $V_{\mu,G_s} = G_s/\mu$ (par exemple en écoulement induit), on a Ca = 1 et Re = La, où $La = \rho G_s l/\mu^2$ est le **nombre de Laplace**.

4. Les forces ponctuelles \underline{F}_i doivent être lissées/adoucies/dispersées en volume avant d'être injectées dans le fluide, ce qui donne le terme source \underline{f} . Cette dispersion volumique est effectuée sur la grille eulérienne \mathcal{E} via la méthode IBM :

$$\underline{f}(\underline{x},t_n) = \sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \underline{F}(\underline{X}(t_n)) \prod_{i=1}^{3} \delta_{\Delta}(x_i - X_i(t_n)), \qquad \underline{x}\in\mathcal{E}.$$
(3.3)

La forme canonique δ_1 du filtre δ_{Δ} est choisie comme étant $\delta_1 = \delta_{BL}$:

$$\begin{cases} \delta_{BL}(s) = 1 - s^{2}, & |s| \leq 1\\ \delta_{BL}(s) = 2 - 3|s| + s^{2}, & 1 < |s| \leq 2\\ \delta_{BL}(s) = 0, & 2 < |s|. \end{cases}$$
(3.4)

Ce filtre est représenté en bleu clair dans la Figure 3.1. C'est le seul des filtres de cette Figure qui ait des valeurs strictement négatives.

5. La force volumique \underline{f} est le terme source de l'équation de Navier-Stokes (1.1) (section 1). Il est donné avec les conditions aux limites en entrée du solveur fluide, qui calcule le champ de vitesse $\underline{v}(t_{n+1})$. Pour ce faire, passage du terme source centré (3.3), au terme source facial de Basilisk est effectué par interpolation centrée d'ordre 2 le long de l'axe Ox_i pour la composante a_i par

$$a_{j}(i\Delta) = \frac{1}{16} \left(9 \left(a_{j} \left(\left(i - \frac{1}{2} \right) \Delta \right) + a_{j} \left(\left(i + \frac{1}{2} \right) \Delta \right) \right) - \left(a_{j} \left(\left(i - \frac{3}{2} \right) \Delta \right) + a_{j} \left(\left(i + \frac{3}{2} \right) \Delta \right) \right) \right)$$
(3.5)

6. La nouvelle configuration $\mathcal{L}(t_{n+1})$ des nœuds lagrangiens $\underline{X}(t_{n+1})$ est déterminée à l'aide du champ de vitesse $\underline{v}(\underline{x}, t_{n+1})$ et de la méthode d'Euler explicite, la méthode IBM approchant la vitesse d'advection $\underline{V}(\underline{X}(t_n))$ du solide au nœud \underline{X} par la moyenne locale des vitesses fluides environnantes, via

$$\frac{\underline{X}(t_{n+1}) - \underline{X}(t_n)}{\Delta t} = \Delta^3 \sum_{\underline{x} \in \mathcal{E}} \underline{v}(\underline{x}) \prod_{i=1}^3 \delta_\Delta (x_i - X_i(t_n)), \qquad \underline{X} \in \mathcal{L}.$$
(3.6)

Dans la suite, par souci de concision, cette moyenne locale sera abusivement qualifiée d'"**interpolation**" par le filtre ⁽¹⁸⁾. Là encore, on choisit $\delta_1 = \delta_{BL}$.

^{18.} Ce n'est en réalité pas une interpolation à proprement parler, car lorsque la position d'un

4 Correction de volume par multiplicateurs de Lagrange

La capsule, dont la membrane est supposée être étanche, doit conserver le volume du fluide interne. A tout instant t_n , la configuration lagrangienne actuelle $\mathcal{L}(t_n)$ est censée renfermer le même volume que \mathcal{L}_0 , la configuration de référence \mathcal{L}_0 . Or, le schéma numérique (décrit aux sections 1, 2 et 3) ne conserve a priori pas le volume. Une méthode de correction de volume est donc appliquée à la fin de chaque pas de temps. Elle repose sur des calculs par multiplicateurs de Lagrange. C'est une version 3D de la méthode de Mendez et al. (2014) (qui est faite en 2D). La méthode de correction de volume permet de maintenir l'erreur relative de volume inférieure à $6 \times 10^{-4} \, {}^{(19)}$ alors qu'elle peut atteindre environ 10^{-2} pour le même temps de simulation en l'absence de correction.

On donne ici les notations et les bases de la correction de volume. Pour plus de détails, se reporter à Mendez et al. (2014). On note V_0 le volume délimité par \mathcal{L}_0 . On note \mathcal{L}_a la **configuration lagrangienne avant correction**, et V_a le volume qu'elle délimite. On note \mathcal{L}_c la **configuration lagrangienne après correction**, et V_c le volume qu'elle délimite. On note δ_c le **déplacement correctif** ⁽²⁰⁾, de sorte que

$$\mathcal{L}_{\rm c} = \mathcal{L}_{\rm a} + \delta_{\rm c}.\tag{4.1}$$

Dans l'idéal, on voudrait

$$V_{\rm c} = V_0.$$
 (4.2)

Sachant que $V_{c} = V(\mathcal{L}_{c})$ et au vu de (4.1), cela donnerait

$$V\left(\mathcal{L}_{a}+\delta_{c}\right)=V_{0}.$$
(4.3)

On cherche δ_c de norme L_2 minimum parmi les d_c vérifiant (4.3), c'est-à-dire

$$|| \delta_{\rm c} ||_2^2 = \min_{V(\mathcal{L}_{\rm a}+d_{\rm c})=V_0} || d_{\rm c} ||_2^2, \tag{4.4}$$

nœud lagrangien coïncide avec celle d'un nœud eulérien, la vitesse moyennée au premier n'est pas forcément égale à celle du nœud. C'est en revanche le cas quand le filtre canonique 1D vaut 1 en 0 et vaut 0 sur \mathbb{Z}^* , comme par exemple pour le filtre δ_{BL} .

^{19.} sauf une seule simulation à dé-raffinement forcé du maillage loin de la capsule, où elle monte quelques instants à 9×10^{-4} , cf. sections 5, 6.

^{20.} ou plutôt l'ensemble des déplacements correctifs

où $|| d_c ||_2^2 = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^3 d_{c,3(i-1)+j}^2$. Par le théorème des multiplicateurs de Lagrange, il existe donc un réel λ_c tel que le couple (δ_c , λ_c) annule le gradient du lagrangien suivant :

$$\mathbb{L}: \frac{\mathcal{M}_{3N_{\mathcal{L}},1}\left(\mathbb{R}\right) \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}}{\left(d_{c},\lambda\right) \mapsto \mid\mid d_{c}\mid\mid_{2}^{2} + \lambda\left(V\left(\mathcal{L}_{a}+d_{c}\right)-V_{0}\right)}.$$
(4.5)

On se restreint au développement limité à l'ordre 1 en d_c dans l'équation (4.5) et en approchant le volume renfermé par le maillage P_2 icomesh 4 2 par celui renfermé par le maillage triangulaire P_1 icomesh 5 1, ce que l'on appelle **correction** P_1 . Après calcul, on obtient

$$\begin{cases} \lambda_{\rm c} = \frac{72(V_{\rm a} - V_{\rm 0})}{\sum_{j=1}^{N_{\mathcal{L}}} \sum_{l=1}^{3} S_{j,l}^{2}} , & i = 1..N_{\mathcal{L}}, \quad k = 1..3, \\ \delta_{{\rm c},3(i-1)+k} = -\frac{\lambda_{\rm c}}{12} S_{i,k} \end{cases}$$
(4.6)

où :

$$S_{i,k} = \sum_{\left\{f \in \mathcal{F}, \underline{X}_{a,i} \in f\right\}} \gamma_{i_{\text{loc}}(i,f),k} \left(M_{a,f}^{T}\right) \quad , \quad i = 1..N_{\mathcal{L}}, \quad k = 1..3, \quad (4.7)$$

où \mathcal{F} est l'ensemble des faces triangulaires planes du maillage icomesh 5 1 (vues en termes d'ensembles d'indices de nœuds qui en sont les sommets), où pour $f \in$ \mathcal{F} , $M_{a,f}$ désigne la matrice de passage entre la base canonique de \mathbb{R}^3 et celle formée par les trois sommets de f avant correction de volume, T désigne la transposition matricielle, $i_{loc}(i, f)$ désigne l'indice local du nœud \underline{X}_i dans la face f et où, pour une certaine matrice M, $\gamma_{r,s}(M)$ désigne le cofacteur d'indices r et s de M.

Implémentation : Caps3D comporte déjà une fonction retrouvant l'indice local d'un nœud d'une maille P_2 à partir de son indice global. Ensuite, comme on approche le maillage P_2 icomesh n 2 par le maillage triangulaire \mathbb{P}_1 icomesh n+1 1, chaque maille P_2 comporte par quatre "sous-mailles" triangulaires \mathbb{P}_1 . Si se l'on reporte à la Figure 2.4, les 4 sous-mailles ont les triplets d'indices locaux respectifs suivants : (1,4,6), (2,5,4), (3,6,5), et (4,5,6). Il faut donc réaffecter les indices locaux pour en faire le triplet (1,2,3) pour chaque sous-maille.

5 IBM adaptatif

La méthode IBM a initialement été conçue pour un maillage cartésien. En 3D, le calcul est parfois coûteux par rapport aux capacités des ordinateurs (mémoire vive et vitesse des processeurs). C'est pourquoi des méthodes d'IBM adaptatif ont par la suite été développées. Nous présentons à présent une méthode qui permet de rendre les calculs plus performants grâce à la mise en compatibilité de la méthode IBM avec le maillage adaptatif octree de Basilisk.

5.1 Rough boxing versus IBM localement régulier

En 3D, on appelle :

A. Filtre IBM centré en un nœud lagrangien \underline{X} la fonction $\delta_{\Delta_{\min},3D} \circ \tau_{-\underline{X}}$, où $\delta_{\Delta_{\min},3D}$ est le filtre IBM 3D remis à l'échelle avec un maillage adaptatif de maille la plus fine de côté Δ_{\min} et où $\tau_{-\underline{X}}$ désigne la translation selon le vecteur $-\underline{X}$. Son support (compact) est appelé **support IBM centré en un nœud lagrangien**;

E. **Tampon** toute partie compacte du domaine de calcul (fluide) Ω_c contenant la réunion des supports de filtre IBM centrés aux nœuds lagrangiens;

F. **Tampon optimal** la réunion des supports IBM centrés aux nœuds lagrangiens. On le note \mathcal{T}_{opti} . C'est le plus petit tampon pour l'inclusion. Un tampon non optimal est dit **grossier** ("rough"). Il est souvent bien plus volumineux que \mathcal{T}_{opti} ;

C. **Interaction IBM** entre un nœud eulérien et un nœud lagrangien le fait que le nœud eulérien soit dans le support IBM centré au nœud lagrangien;

D. **Test d'interaction** tout test d'appartenance d'un nœud eulérien au tampon optimal et, le cas échéant, à chaque support IBM centré en un nœud lagrangien ;

G. **Rough boxing** tout couplage par méthode IBM en maillage adaptatif, forçant le raffinement maximum sur un tampon grossier;

E. **IBM localement régulier** tout couplage par méthode IBM en maillage adaptatif, ne forçant pas le raffinement maximum ailleurs que sur le tampon optimal, contrairement au rough boxing.

La figure 5.1 représente un schéma en coupe dans le plan *xOz* d'un maillage adaptatif octree et du maillage lagrangien d'une capsule. L'une des premières méthodes d'IBM adaptatif connues est due à Roma et al. (1999). C'est une méthode de "rough boxing" à trois niveaux de raffinement. La Figure 5.2 présente une compilation d'illustrations de couplages fluide-structure rencontrés dans la littérature et utilisant un maillage adaptatif pour le fluide. Dans toutes ces Figures, on constate systématiquement un niveau de raffinement maximum au voisinage du solide. Parmi celles-ci, les trois premières (Figure 5.2a,b,c) utilisent IBM (Roma et al., 1999;



Figure 5.1 – Schéma en coupe d'un maillage adaptatif octree (3D) et du maillage lagragien d'une capsule. Pour un noeud \underline{X} quelconque, on a représenté le support IBM centré en \underline{X} (un cube plein) par la coupe de son bord (le carré noir). Les nœuds eulériens (+) en interaction avec \underline{X} sont les centres des mailles jaunes.

Griffith et al., 2007; Lee et al., 2010). Leur maillage est raffiné sur une réunion de pavés : il s'agit du tampon. Ce tampon est grossier : c'est du rough boxing.

La figure 5.3 schématise le rough boxing en recouvrant une sphère par 6 cubes Les cubes s'intersectent avec deux mailles d'épaisseur, de sorte que ce tampon contienne le tampon optimal. Il est néanmoins bien plus volumineux que ce dernier. Dans une méthode de rough boxing 3D, le nombre de mailles dans le tampon croit comme $2^{3\text{maxlevel}}$. Ainsi, si $N_{\mathcal{L}}$ est le nombre de mailles lagrangiennes, le nombre d'opérations élémentaires de l'algorithme de sélection pour l'interaction IBM a une complexité proportionnelle à $2^{3\text{maxlevel}}N_{\mathcal{L}}$. On aboutit rapidement à un nombre d'interactions beaucoup trop élevé.

5.2 Critères pour forcer localement la taille des mailles eulériennes dans Basilisk

La manière d'imposer un raffinement maximum (respectivement minimum) pour appliquer la méthode IBM localement régulier (respectivement économiser des mailles en maillage adaptatif quelconque) dépend du code fluide. Dans Basilisk, le raffinement repose sur les valeurs de la matrice hessienne du (ou des) champ(s) scalaire(s) dont on souhaite garantir la précision. Une manière d'imposer le raffinement au maximum peut donc être d'accentuer les valeurs de cette hessienne en multipliant le champ par un champ scalaire appelé **fonction d'inté-**



Figure 5.2 – Illustration de diverses méthodes de couplage fluide-structure utilisant un maillage adaptatif : a. Roma et al. (1999); b. Griffith et al. (2007); c. Lee et al. (2010); d. Angelidis et al. (2016); e. Posa et al. (2017); f. Cui et al. (2017); g. Pan et al. (2018); h. Liska and Colonius (2017). Les trois premières utilisent IBM.



Figure 5.3 – a. Recouvrement d'un cercle par des carrés pleins contenant des mailles carrées de côté $2^{-\max level}L_0$ d'un maillage quadtree b. Recouvrement d'une sphère par des mailles cubiques de côté $2^{-\max level}L_0$ d'un maillage octree. Dans les deux cas on voit que le volume du recouvrement est comparable à celui du domaine délimité par la sphère. Le nombre de mailles croit donc comme $2^{D \times \max level}$, où D est la dimension du problème (2 dans a. et 3 dans b.).

rêt, dont les valeurs sont strictement positives, très élevées sur le tampon optimal et 1 ailleurs. De même, on peut forcer un raffinement minimum en afaiblissant les valeurs de la hessienne, grâce à la multiplication du champ dont on veut garantir la précision par un autre champ appelé **fonction de désintérêt** (ou encore **fonction d'écrasement**), qui vaut 1 sur un tampon et des valeurs très basses hors de celui-ci. La fonction d'intérêt est illustrée dans la Figure 5.4 pour un tampon quelconque et la Figure 5.5 pour un tampon optimal.

Cette méthode de contrainte de raffinement dans certaines zones a l'avantage d'être simple. On bénéficie de plus directement de toutes les améliorations apportées par la littérature pour la méthode IBM en maillage régulier. Elle garantit enfin une précision semblable à celle qu'il y aurait en maillage régulier. En revanche, si la Figure 5.4 est utile pour illustrer la notion de fonction d'intérêt et de tampon, on y voit tout de même un élément potentiellement inexact lorsque la première est fonction de l'indicatrice du second : si jamais les valeurs de la matrice hessienne du champ dont on veut garantir la précision sont trop faibles, un dé-raffinement risque de se produire à l'intérieur du tampon. Nous avons donc plutôt choisi $f_{int} = e^{10\sqrt{c_{int}}}$, car elle accentue suffisamment les valeurs de la matrice



Figure 5.4 – a. Représentation monodimensionnelle schématique de l'établissement d'un champ scalaire à adapter sous contrainte de raffinement maximum dans un tampon quelconque : on part du champ à adapter hors contrainte (en bleu foncé) de raffinement. Puis, on considère l'indicatrice du tampon (en rouge vif), que l'on approche par une fonction continue (en rouge bordeaux) et l'on passe cette dernière sous exponentielle, ce qui donne la fonction d'intérêt recherchée (en rose). Enfin, on multiplie la fonction d'intérêt pour obtenir le champ d'entrée de l'opérateur d'adaptativité de Basilisk (en bleu clair). Ce champ est similaire au champ de départ, À ceci près que son gradient (en l'occurence sa dérivée) est accentué(e) dans la zone d'intérêt, ce qui y force le raffinement maximum. Les petites mailles sont notées par un (p), les mailles moyennes par un (m) et les grosses mailles par un (g). b. Transposition de cette logique à un maillage quadtree en 2D (à transposer en 3D pour obtenir ce qui correspond aux présents travaux).



Figure 5.5 – a. Représentation monodimensionnelle schématique de l'établissement d'un champ scalaire à adapter sous contrainte de raffinement maximum dans le tampon optimal : on part du champ à adapter hors contrainte de raffinement (en bleu foncé). Puis, on considère l'indicatrice du tampon (en rouge vif), que l'on approche par une fonction continue (en rouge bordeaux) et l'on passe cette dernière sous exponentielle, ce qui donne la fonction d'intérêt recherchée (en rose). Enfin, on multiplie la fonction d'intérêt pour obtenir le champ d'entrée de l'opérateur d'adaptativité de Basilisk (en bleu clair). Ce champ est similaire au champ de départ, à ceci près que son gradient (en l'occurence sa dérivée) est accentué(e) dans la zone d'intérêt, ce qui y force le raffinement maximum. Les petites mailles sont notées par un (p) et les grosses mailles par un (g). b. Transposition de cette logique à un maillage quadtree en 2D (à transposer en 3D pour obtenir ce qui correspond aux présents travaux).

hessienne sur le tampon optimal pour forcer le raffinement maximum.

5.3 Un algorithme de sélection rapide du tampon optimal : Multi-Level Box Sieving (MLBS)

Principe de la méthode MLBS

La méthode du rough-boxing 3D trouve ses limites dans le fait que le grand nombre de mailles dans le tampon pénalise le gain en temps de calcul apporté par le maillage adaptatif. Le nombre d'opérations élémentaires de l'ensemble des tests d'interaction IBM est asymptotiquement proportionnel à $2^{3\text{maxlevel}}N_{\mathcal{L}}$ et donc à $1/(\Delta^3 h^2)$. A contrario, dans un tampon optimal, ce nombre est asymptotiquement proportionnel à $1/(\Delta^2 h^2)$. Il est donc fortement souhaitable, d'identifier le tampon optimal. Pour ce qui est de l'étape de raffinement, on a vu qu'il vaut mieux privilégier les fonctions d'intérêt à très grandes valeurs accentuant suffisamment la matrice hessienne sur le tampon optimal, sinon un dé-raffinement risque de s'y produire. La méthode **Multi-Level Box Sieving (MLBS)**, développée dans le présent travail, résout ces deux problèmes à la fois en identifiant rapidement le tampon optimal grâce à une fonction appelée fonction indicateur d'interaction.

Définition : on a appelle **indicateur d'interaction**, le champ scalaire c_{int} qui à un nœud eulérien donné <u>x</u> associe le nombre de nœuds lagrangiens <u>X</u> avec lesquels interagit la maille eulérienne. Cela se produit lorsque le centre de la maille eulérienne se trouve dans le support IBM centré en <u>X</u> ($x \in \text{supp}(\delta_{\Delta_{\min}} \circ \tau_{-X})$) :

$$c_{\text{int}}\left(\underline{x}\right) = \sum_{\underline{X} \in \mathcal{L}} \mathbb{1}_{\sup\left(\delta_{\Delta_{\min,3D}} \circ \tau_{-\underline{X}}\right)}\left(\underline{x}\right),\tag{5.1}$$

où 1 désigne le symbole indicatrice et $\delta_{\Delta_{\min}}$ est le filtre 3D en maillage adaptatif à maille la plus fine Δ_{\min} . Vu le choix du filtre de Beyer and Leveque (1992), dont la remise à l'échelle Δ_{\min} a pour support $[-2\Delta_{\min}, 2\Delta_{\min}]$, on a

$$c_{\text{int}}\left(\underline{x}\right) = \sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \prod_{i=1}^{3} \mathbb{1}_{\left[-2,2\right]} \left(\frac{x_i - X_i}{\Delta_{\min}}\right).$$
(5.2)

On se base sur la façon dont est construit le maillage lagrangien icomesh n_{it} 2 (cf. section 2). On connaît l'ordre (entre 0 et n_{it} + 1) de chaque nœud lagrangien. On construit alors une suite de voisinages de ce nœud :

— Tout nœud se voit attribuer un **voisinage d'ordre** $n_{it} + 1$: c'est par définition le support IBM centré en ce nœud, de côté $4\Delta_{min}$;

- Tout nœud d'ordre n_{it} ou moins (c'est-à-dire tout nœud principal) se voit attribuer un second voisinage supplémentaire : un cube deux fois plus gros que le premier (côté $8\Delta_{min}$) qui lui est concentrique : c'est par définition un **voisinage d'ordre** n_{it} ;
- De façon plus générale, tout nœud d'ordre $i \leq n_{it} + 1$ se voit attribuer $n_{it} + 2 - i$ voisinages différents : d'une part (en tant que nœud d'ordre inférieur à i + 1) la suite de voisinages concentriques définis aux points précédents (au nombre de $n_{it} + 1 - i$) et d'autre part un cube deux fois plus gros que le voisinage d'ordre i + 1 et lui étant concentrique : c'est par définition le **voisinage d'ordre** i du nœud considéré ;
- En suivant ce raisonnement, les 12 nœuds d'ordre 0 (sommets de l'icosaèdre dans la configuration de référence) se voient attribuer tous les voisinages possibles : une suite de n_{it} + 2 cubes concentriques, chacun étant deux fois plus petit que celui d'ordre immédiatement inférieur. Celui d'ordre 0 est donc le plus gros, il a un côté 2^{n_{it}+1} fois plus grand que le support IBM.

La Figure 5.6 donne une illustration de ces voisinages pour le maillage "icomesh 3 1" représenté en Figure 2.2 (section 2). Pour revenir au maillage icomesh 4 2 de notre étude (représenté section 2, Figure 2.3), si $n_{it} = 4$, que $\Delta_{min} = \frac{1}{32}$, et si le support IBM a un côté de 4 mailles fines, alors les nœuds d'ordre 0 se voient attribuer une suite de 6 cubes concentriques, le dernier et plus petit d'entre eux, support IBM, étant de côté adimensionnel scalé $4\Delta_{min} = 0.125$ et le plus gros étant de côté 32 fois plus grand, soit un côté adimensionnel de 4. La Figure 5.7 schématise ce type de construction de tampon à partir du maillage fluide et du maillage solide dans le cas d'un maillage icomesh 3 1.

Pour $i = 0..n_{it} + 1$, on définit le **tampon un ordre** *i*, **que l'on note** \mathcal{T}_i , par la réunion des voisinages d'ordre *i*. Le tampon d'ordre 0 est ainsi la réunion de 12 "gros" cubes, et pour tout ordre $i = 1..n_{it} + 1$, le tampon d'ordre *i* est la réunion de $4^i \times 10 + 2$ cubes 2^i fois plus petits. Sous réserve que la capsule ne soit pas trop étirée (ce qui englobe le présent travail), le tampon de n'importe quel ordre *i* contient ainsi (strictement) le tampon d'ordre *i* + 1 et ce pour tout *i* = $0..n_{it}$. Par récurrence, il advient également que n'importe quel tampon contient (strictement) n'importe quel tampon d'ordre (strictement) supérieur. La contraposée de cette dernière propriété pose les bases de la méthode "Multi-Level Box Sie-



Figure 5.6 – Représentation de la suite de voisinages en chaque noeud selon son ordre pour un maillage icomesh 3 1 : les nœuds d'ordre 3 (à gauche) ne se voient attribuer qu'un voisinage d'ordre 3 : un support IBM centré en eux. A contrario, les nœuds d'ordre 0 ont droit se voient attribuer des voisinages de tous ordres.

ving" (MLBS) décrite ci-après. En particulier, tout point n'appartenant pas à au moins un tampon d'un certain ordre ne peut appartenir au tampon optimal : il est éliminé de l'ensemble des candidats à l'interaction IBM avec le maillage lagrangien et n'interagit avec aucun nœud lagrangien.

On procède par itérations, comme suit, pour identifier le tampon optimal et en même temps calculer l'indicateur d'interaction puis la fonction d'intérêt. La procédure globale est la suivante :

- l'indicateur d'interaction est initialisé partout à 0 (cette étape est réalisée en calcul parallèle);
- On sélectionne une maille eulérienne et on considère son centre (idem) :
 - Étape préliminaire : on commence par regarder si son centre est dans l'intersection Ω_c ∩ K_P entre le domaine de calcul Ω_c et un "gros" parallélépipède rectangle K_P. En pratique, on choisit K_P comme étant le plus petit parallélépipède rectangle pour l'inclusion incluant le tampon optimal T_{opti}. C'est aussi l'intersection de tous les parallélépipèdes rectangles incluant T_{opti}. Si le nœud n'y appartient pas, alors il est éliminé d'office, sinon il est soumis à la procédure MLBS;
 - Procédure MLBS : on raisonne par ordre de tampon croissant en partant de 0, on regarde à chaque étape si le candidat est ou non dans le



Figure 5.7 – Construction des tampons : a. Maillage fluide et maillage solide b. Tampons obtenus après affectation et réunions de tous les voisinages du même ordre (représentés par la même couleur de fond). Le tampon rose est celui d'ordre le plus élevé (le tampon optimal), qui est la réunion des supports IBM.

tampon de cet ordre. Si c'est le cas, alors il est sélectionné pour l'étape suivante. Dans le cas contraire, il est éliminé. Seuls les nœuds ayant réussi toutes les étapes sont sélectionnés pour l'interaction IBM avec le maillage lagrangien.

- Si le nœud eulérien a été sélectionné, alors on y calcule l'indicateur d'interaction c_{int} en parcourant le maillage lagrangien. Si au contraire le nœud a été éliminé, alors l'indicateur d'interaction c_{int} est laissé à 0;
- On calcule la fonction d'intérêt par la formule suivante :

$$f_{\rm int} = e^{10\sqrt{c_{\rm int}}},\tag{5.3}$$

où l'on rappelle que le champ c_{int} compte, pour un nœud eulérien donné, le nombre de nœuds lagrangiens en interaction IBM avec lui.

Performances de la méthode MLBS : comparaison avec la méthode la plus simple et la méthode du rough-boxing

Nous comparons les performances de trois méthodes de sélection du tampon optimal pour une membrane sphérique de rayon 1. Par souci de simplicité, on suppose le maillage régulier et on se place dans un domaine de calcul dont les bords sont suffisamment éloignés de la capsule⁽²¹⁾, comme par exemple un domaine de calcul cubique Ω_c de côté $L_0 = 4$ concentrique à la capsule. On choisit $\Delta \approx 0.03$ et $h \approx 0.04$ (icomesh 4 2), de sorte que les nombres de mailles eulériennes et lagrangiennes soient respectivement $N_{\mathcal{E}} = 2^{21} \approx 2 \times 10^6$ et $N_{\mathcal{L}} = 10242 \approx 10^4$.

Le tableau suivant donne le nombre d'opérations élémentaires pour chaque méthode de localisation.

Méthode	Nombre de tests d'interaction IBM en maillage régulier
Méthode simple	$2.1 imes 10^{10}$
Rough boxing	$4.6 imes 10^9$
MLBS	$2.1 imes10^9$

Implémentation de la méthode MLBS

Dans Basilisk, une procédure globale parallélisée (en OpenMP), fait appel à la procédure MLBS : on parcourt le maillage eulérien à l'aide de l'opérateur Basilisk "foreach()". Considérons l'un des nœuds eulériens parcourus par cette boucle. On lui fait subir la procédure MLBS par appel fonctionnel. Si celui-ci arrive à la dernière étape de la sélection, alors tout nœud lagrangien avec lequel il a une interaction IBM fait augmenter d'une unité la valeur locale $c_{int}[]$ (passée par pointeur dans la fonction pour pouvoir y être modifié) du champ scalaire c_{int} . Les nœuds sélectionnés pour l'interaction fluide-structure sont finalement ceux pour lesquels $c_{int}[] > 0$. L'algorithme parallélisé d'appel de la procédure MLBS est le suivant :

Pour tout nœud eulérien (foreach())

```
{

c_{int}[] = 0

Si \underline{x} \in \mathcal{K}_P

MLBS(\underline{x}, *c_{int}[], \mathcal{L}, \Delta_{min})

Fin Si

}
```

^{21.} contrairement à notre étude où elle est confinée

L'algorithme de la fonction MLBS pour IBM régulier ou localement régulier est donné en annexe B. Cet algorithme a été implémenté dans une librairie statique et est appelé à chaque pas de temps dans Basilisk, avant le calcul de l'accélération.

6 Validation

La méthode couplée est validée par trois étude de convergence : une en écoulement de Poiseuille en canal droit et deux en relaxation dans un fluide au repos (cf. chapitre 4), dont une en maillage régulier et l'autre maillage adaptatif. Dans cette étude, les premières simulations ont été effectuées en IBM régulier et les autres, en IBM localement régulier. Il s'agit donc de valider ces deux méthodes.

6.1 Validation du schéma numérique en maillage régulier

La méthode couplée est d'abord validée en comparant les résultats obtenus pour une capsule élastique sous un écoulement de Poiseuille (Re = 0) en canal droit à section transversale carrée avec les résultats obtenus par Hu et al. (2013), qui ont couplé une méthode des intégrales de frontière pour le fluide à la méthode des éléments finis de membrane pour le solide ⁽²²⁾.

Une capsule initialement sphérique de rayon a_0 et de module de cisaillement surfacique G_s est placée au centre d'un canal droit à section transversale carrée, de longueur L et de demi-largeur l, qui est prise comme échelle caractéristique du problème. On note O le centre du canal et on se place dans le repère orthonormé $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z)$, où Ox est l'axe central longitudinal du canal dans le sens de l'écoulement et où Oy est orthogonal à l'un de ses bords rigides. La condition de non-glissement de Dirichlet $\underline{v} = \underline{0}$ est imposée sur les quatre bords rigides du canal, en y = -l, y = l, z = -l et z = l. Un écoulement stationnaire de Poiseuille est imposée en entrée (x = -L/2) et en sortie (x = L/2) du canal, que l'on appelle respectivement **amont** et **aval**. Une pression nulle de référence est imposée en entrée, mais y adopterait une valeur ΔP en l'absence de capsule. On impose en entrée la condition de Neumann $\partial_x p = -\Delta P/L$. La valeur de vitesse en entrée de canal est

^{22.} à ceci près qu'eux calculaient la charge surfacique \underline{q} , tandis que dans le présent travail on se contente de calculer l'opposé du résultante locale {*R*}, cf section 3
imposée via la condition de Dirichlet

$$\underline{v}(y,z) = \frac{16\Delta Pl^2}{\mu L} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{\beta_n^3} \cos\left(\frac{\beta_n y}{2l}\right) \left(1 - \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\beta_n z}{2l}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}\right) \underline{e}_x, \beta_n = (2n-1)\pi,$$
(6.1)

tandis qu'en sortie la vitesse est soumise à la condition de Neumann $\partial_x \underline{v} = \underline{0}$. L'échelle de vitesse *V* est la valeur moyenne de (6.1) sur la section d'entrée. Les nombres adimensionnels gouvernant le problème sont le **rapport de confinement** a_0/l , le nombre capillaire $Ca = \mu V/G_s$ et le nombre de Reynolds $Re = \rho V l/\mu$.

La Figure 6.1 montre la comparaison des formes de la capsule en état stationnaire en régime de Stokes (Re = 0), entre le travail de Hu et al. (2013) et le présent travail. La comparaison est réalisée au rapport de confinement $a_0/l = 0.85$ et pour les valeurs de nombre capillaire suivantes : a. Ca = 0.02, b. Ca = 0.05, c. Ca = 0.10.

Pour évaluer la précision de la méthode, on procède de deux manières : évaluation de la précision à $\Delta \approx 0.03$ pour les trois cas d'étude ci-dessus et étude de convergence spatiale pour Ca = 0.05. ⁽²³⁾ L'erreur numérique est évaluée de la façon suivante : on centre les capsules sur l'isobarycentre des nœuds lagrangiens, et on définit puis on approche la distance de Hausdorff entre la configuration de Hu et al. 2013 S_{Hu} et celle du présent travail S_{pr} . La distance de Hausdorff entre deux parties compactes *K* et *K*' de \mathbb{R}^3 est définie par

$$d_{\mathrm{H}}(K,K') = \max\left(\max_{\underline{x}\in K}\min_{\underline{y}\in K'}d\left(\underline{x},\underline{y}\right), \max_{\underline{y}\in K'}\min_{\underline{x}\in K}d\left(\underline{x},\underline{y}\right)\right), \qquad (6.2)$$

où *d* est la distance Euclidienne usuelle sur \mathbb{R}^3 . Lorsque *K* et *K'* sont finis, on définit la **distance de Hausdorff modifiée** entre *K* et *K'* par

$$d_{\mathrm{H}_{\mathrm{m}}}\left(K,K'\right) = \max\left(\frac{1}{\mid K \mid} \sum_{\underline{x}\in K} \min_{\underline{y}\in K'} d\left(\underline{x},\underline{y}\right), \frac{1}{\mid K' \mid} \sum_{\underline{y}\in K'} \min_{\underline{x}\in K} d\left(\underline{x},\underline{y}\right)\right), \quad (6.3)$$

Seul un membre du maximum externe a été considéré dans chacune des équations (6.2) et (6.3), et ce pour tenir compte de l'inégalité de finesse entre le maillage de Hu et al. (2013) (icomesh 3 2) et celui du présent travail (icomesh 4 2). Deux manières de procéder ont été utilisées pour approcher $d_{\rm H}$ et $d_{\rm H_m}$: la distance

^{23.} Étant donné que le pas de temps adimensionnel est de 10^{-4} , il ne génère pas une erreur significative, même si la méthode est d'ordre 1 en temps donc l'étude de convergence spatiale suffit. De plus, diminuer le pas de temps à sa valeur la plus fine est trop coûteux en calcul (cf chapitre 3).



Figure 6.1 – Comparaison de la forme d'une capsule en écoulement stationnaire de Poiseuille (conditions de Stokes Re = 0) dans un canal droit à section transversale carrée dans le présent travail (à t = 10) avec celui de Hu et al. (2013) pour le rapport de confinement $a_0/l = 0.85$: a. Ca = 0.02, b. Ca = 0.05, c. Ca = 0.10.

inter-nœuds, consistant à remplacer les surfaces S_{pr} et S_{Hu} par les configurations lagrangiennes \mathcal{L}_{pr} et \mathcal{L}_{Hu} , et la projection orthogonale de chaque nœud lagrangien sur les triangles plats reliant les sommets de la maille (chaque maille P_2 est approchée par 4 mailles P_1). Pour l'approximation par distances inter-noeuds :

$$\begin{cases} d_{\mathrm{H,s}}\left(\mathcal{L}_{\mathrm{pr}},\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}\right) = \max_{\underline{Y}\in\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}}\min_{\underline{X}\in\mathcal{L}_{\mathrm{pr}}}d\left(\underline{X},\underline{Y}\right) \\ d_{\mathrm{H}_{\mathrm{m}},\mathrm{s}}\left(\mathcal{L}_{\mathrm{pr}},\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}\right) = \frac{1}{|\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}|}\sum_{\underline{Y}\in\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}}\min_{\underline{X}\in\mathcal{L}_{\mathrm{pr}}}d\left(\underline{X},\underline{Y}\right), \end{cases}$$
(6.4)

Pour l'approximation par projections, les minimums des distances inter-noeuds deviennent des minimums de distances de noeuds à une surface :

$$\begin{cases} d_{\mathrm{H,p}}\left(\mathcal{L}_{\mathrm{pr}},\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}\right) = \max_{\underline{Y}\in\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}}\min_{f\in\mathrm{F}\left(\mathcal{L}_{\mathrm{pr}}\right)}d\left(\underline{Y},f\right) \\ d_{\mathrm{H}_{\mathrm{m}},\mathrm{p}}\left(\mathcal{L}_{\mathrm{pr}},\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}\right) = \frac{1}{|\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}|}\sum_{\underline{Y}\in\mathcal{L}_{\mathrm{Hu}}}\min_{f\in\mathrm{F}\left(\mathcal{L}_{\mathrm{pr}}\right)}d\left(\underline{Y},f\right) \end{cases}, \tag{6.5}$$

où F (\mathcal{L}_{pr}) est l'ensemble des faces triangulaires planes du maillage icomesh $n_{it} + 1$ 1 ayant les mêmes nœuds que \mathcal{L}_{pr} (construit par icomesh n_{it} 2). Par définition, on a toujours $d_{H} \ge d_{H_m}$, ce qui se décline en $d_{H,s} \ge d_{H_m,s}$ et $d_{H,p} \ge d_{H_m,p}$. On a aussi toujours "s \ge p", ce qui se décline en $d_{H,s} \ge d_{H,p}$ et $d_{H_m,s} \ge d_{H_m,p}$.

Se rapportant aux trois cas d'étude illustrés par la Figure 6.1, on trouve pour Ca = 0.02, Ca = 0.05 et Ca = 0.10 un $d_{H,p}$ de 1.3%, 0.84% et 1.2%, et un $d_{H_m,p}$ de 0.10%, 0.13% and 0.14%. La Figure 6.2 montre ensuite les résultats de l'étude de convergence. Pour celle-ci, on part des paramètres spatiaux utilisés dans l'étude : $\Delta \approx 0.03$ et $h \approx 0.04$. On les fait ensuite varier proportionnellement l'un à l'autre. Les variations s'effectuent par multiplications par puissances de 2. Pour des raisons de précision et de coût de calcul, on se restreint à doubler ou diviser par deux les paramètres de départ. On ajuste également par régression linéaire (moindre carrés) les valeurs de $d_{H,s}$ (...) et $d_{H,p}$ (...). On constate un ordre de convergence proche de l'ordre 2, tant pour $d_{H,s}$ que pour $d_{H,p}$, ce qui est conforme aux attentes. Les ajustements sont d'excellente qualité, mais n'utilisent que 3 points. Malgré cette absence de robustesse, les résultats sont conformes aux des performances du filtre δ_{BL} de Beyer and Leveque (1992) en 1D (bien que non évidents car les simulations considérées sont effectuées en 3D). Enfin, chacun des $d_{H_{m,s}}$ et $d_{H_{m,p}}$ ne donne pas spécialement des points alignés sur le graphique. On peut néanmoins en prédire l'encadrement grâce aux inégalités mentionnées plus haut.

Synthèse : excellent accord entre IBM régulier et le couplage Éléments Finis - Intégrales de Frontières (Hu et al., 2013) en écoulement stationnaire de Poiseuille.



Figure 6.2 – Étude de convergence spatiale : en abscisse, la maille eulérienne Δ . En ordonnée, les différentes distances de Hausdorff $d_{\rm H}$ et distances de Hausdorff modifiées $d_{\rm H_m}$, calculées par distances inter-nœud (indice ", s") ou par projection (indice ", p"), ce qui donne : $d_{\rm H,s}$ (+), $d_{\rm H_m,s}$ (×), $d_{\rm H,p}$ (+) et $d_{\rm H_m,p}$ (×). On ajuste également par régression linéaire les valeurs de $d_{\rm H,s}$ (...) et $d_{\rm H,p}$ (...).



Figure 6.3 – Comparaison des courbes : en noir ligne pleine fine : IBM (sur maillage) régulier; en rouge tirets : IBM localement régulier.

6.2 Validation et performances de la méthode IBM localement régulier.

Une capsule sphérique de rayon a_0 et de module de cisaillement surfacique G_s est pré-déformée en ellipsoïde allongé, de révolution autour de l'axe Ox, de demigrand axe $2a_0$ et de demi-petits axes $a_0/\sqrt{2}$. Elle est placée au centre d'un canal à section carrée orienté selon Ox, de demi-largeur l et de longueur L = 8l rempli d'un fluide initialement au repos, de masse volumique ρ et de viscosité μ . A t = 0, on laisse la capsule se relaxer. Pour plus de détails, voir chapitre 4. On prend ici le cas d'étude standard $a_0/l = 0.5$, La = 10. La Figure 6.3 illustre cela. On trouve une erreur maximum $\epsilon_{max} = 2 \times 10^{-3}$, ce qui est une excellente correspondance.

Les paramètres d'IBM régulier restent les mêmes en IBM localement régulier : $\Delta_{\min} = 1/32 \approx 0.03$, $h \approx 0.04$ et $\Delta t = 10^{-4}$. Pour garder une précision minimum loin de la capsule, on pose $\Delta_{\max} = 1/8 = 0.125$. Le nombre de mailles est environ 9 fois plus faible : environ 116000 mailles en moyenne (contre $2^{20} = 1048576$ mailles en maillage régulier), variant d'environ 75000 mailles à environ 550000 mailles. La Figure 6.4 illustre ces variations. On voit clairement que dès $tG_s/\mu l = 5$ (soit la fin de la phase rapide de relaxation illustrée par la Figure 6.3), le nombre de mailles a lui aussi fini de diminuer drastiquement. Enfin, le temps de calcul par unité de temps adimensionnelle est passé d'environ 1 jour à 4h30, soit 5 fois moins.



Figure 6.4 – Comparaison de l'évolution du nombre de mailles entre IBM régulier et IBM localement régulier.

<u>Synthèse</u> : excellent accord entre IBM localement régulier et IBM régulier, pour 9 fois moins de mailles et 5 fois moins de temps de calcul, avec les mêmes paramètres de maillage : $\Delta = \Delta_{\min} \approx 0.03$, $h \approx 0.04$ (icomesh 4 2) et $\Delta t = 10^{-4}$.

Justification des paramètres et des options IBM

Dans ce chapitre, on justifie et analyse les choix effectués au chapitre 2. En section 1, il est question de choix intrinsèques à la méthode IBM. En section 2, on se focalise sur la méthode IBM (en maillage) régulier. En section 3, on se focalise sur la méthode IBM (en maillage adaptatif) localement régulier.

1 Choix méthodologiques IBM intrinsèques

1.1 Choix du filtre

Conservation d'énergie

<u>Propriété</u> : on (re)démontre que prendre le même filtre IBM dans les deux sens équivaut à l'égalité des échanges d'énergie entre le solide et le fluide.

Du point de vue du solide *S*, la puissance reçue de la part du fluide Ω est définie à l'aide de la charge *q* et de la vitesse d'advection <u>V</u> via

$$P_{\Omega \to S} = \oiint_{S} \underline{q} \underline{V} dS, \qquad t \ge 0.$$
(1.1)

L'énergie correspondante est

$$E_{\Omega \to S} = \int_0^t P_{\Omega \to S}\left(t'\right) dt', \qquad t \ge 0.$$
(1.2)

Le fluide reçoit de la part du solide la puissance liée au terme source \underline{f}

$$P_{S \to \Omega} = \iiint_{\Omega} \underline{f} \underline{v} dV, \qquad t \ge 0.$$
(1.3)

L'énergie correspondante est

$$E_{S\to\Omega} = \int_0^t P_{S\to\Omega}\left(t'\right) dt', \qquad t \ge 0.$$
(1.4)

L'égalité des échanges énergétiques s'écrit

$$E_{\Omega \to S}(t) + E_{S \to \Omega}(t) = 0, \qquad t \ge 0.$$
(1.5)

Par dérivation temporelle, elle donne l'égalité des puissances transmises

$$P_{\Omega \to S}(t) + P_{S \to \Omega}(t) = 0, \qquad t \ge 0.$$
(1.6)

La discrétisation les expressions des puissances $P_{\Omega \to S}$ (1.1) et $P_{S \to \Omega}$ (1.3) donne

$$\begin{cases} P_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}} = \sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \left\{ \underline{V}\left(\underline{X}\right) \right\} \cdot \left\{ \underline{q}\left(\underline{X}\right) \right\} \Delta S\left(\underline{X}\right) \\ P_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}} = \sum_{\underline{x}\in\mathcal{E}} \left\{ \underline{v}\left(\underline{x}\right) \right\} \cdot \left\{ \underline{f}\left(\underline{x}\right) \right\} \Delta V \end{cases},$$
(1.7)

où $\Delta V = \Delta^3$ et où $\Delta S(\underline{X})$ est l'aire d'une petite portion de membrane entourant <u>X</u>. De même, la discrétisation des énergies $E_{\Omega \to S}$ (1.2) et $E_{S \to \Omega}$ (1.4) donne

$$\begin{cases} E_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_n) \stackrel{\triangle}{=} \Delta t \sum_{i=0}^n P_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_i) \\ E_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_n) \stackrel{\triangle}{=} \Delta t \sum_{i=0}^n P_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_i) \end{cases}, \qquad n \in \mathbb{N}$$
(1.8)

Pour se conformer à (1.5) et (1.6), on impose leur version numérique

$$\begin{cases} E_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_n) + E_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_n) \equiv 0\\ P_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_n) + P_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_n) \equiv 0 \end{cases}, \qquad n \in \mathbb{N}$$
(1.9)

En sommant les lignes de (1.8) et factorisant les termes au même instant, on obtient

$$E_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_n) + E_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_n) = \Delta t \sum_{i=0}^n \left(P_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_i) + P_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_i) \right), \qquad n \in \mathbb{N}.$$
(1.10)

Les deux équations du système (1.9) sont donc équivalentes, il suffit d'en imposer une. On considère les équations de dispersion volumique des forces et d'interpolation des vitesses (cf. chapitre 2, équations (3.3) et (3.6)). On remplace δ_{Δ} par un filtre $\delta_{\Delta,\underline{f}}$ et un filtre $\delta_{\Delta,\underline{V}}$ pour l'interpolation. Ces filtres sont pris pairs, par souci de symétrie. On veut montrer que $\delta_{\Delta,\underline{f}} = \delta_{\Delta,\underline{V}}$ (= δ_{Δ}). On remplace le membre de gauche de (3.6) par la vitesse d'advection numérique { $\underline{V}(\underline{X})$ } et on obtient

$$\begin{cases} \left\{ \underline{f}\left(\underline{x}\right) \right\} = \sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \left\{ \underline{F}\left(\underline{X}\right) \right\} \prod_{i=1}^{3} \delta_{\Delta,\underline{f}}\left(x_{i} - X_{i}\right), & \underline{x}\in\mathcal{E} \\ \left\{ \underline{V}\left(\underline{X}\right) \right\} = \Delta^{3} \sum_{\underline{x}\in\mathcal{E}} \left\{ \underline{v}\left(\underline{x}\right) \right\} \prod_{i=1}^{3} \delta_{\Delta,\underline{V}}\left(x_{i} - X_{i}\right), & \underline{X}\in\mathcal{L} \end{cases},$$
(1.11)

où $\mathcal{L} = \mathcal{L}(t_n)$ est la configuration lagrangienne au temps t_n et $\underline{v} = \underline{v}(., t_{n+1})$ est le champ de vitesse eulérien post-résolution de Navier-Stokes au pas de temps du temps t_n . En injectant (1.11) dans (1.7) et en factorisant par Δ^3 , on obtient

$$\begin{cases}
P_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}} = \Delta^3 \sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \left(\sum_{\underline{x}\in\mathcal{E}} \left\{ \underline{v}\left(\underline{x}\right) \right\} \prod_{i=1}^3 \delta_{\Delta,\underline{V}}\left(x_i - X_i\right) \right) \cdot \left\{ \underline{q}\left(\underline{X}\right) \right\} \Delta S\left(\underline{X}\right) \\
P_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}} = \Delta^3 \sum_{\underline{x}\in\mathcal{E}} \left\{ \underline{v}\left(\underline{x}\right) \right\} \cdot \left(\sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \left\{ \underline{F}(\underline{X}) \right\} \prod_{i=1}^3 \delta_{\Delta,\underline{f}}\left(x_i - X_i\right) \right)
\end{cases} . (1.12)$$

Par construction on a $\{\underline{F}(\underline{X})\} = -\{\underline{R}(\underline{X})\} = -\{\underline{q}(\underline{X})\} \cdot \Delta S(\underline{X})$, donc en sommant les deux lignes de (1.12), on obtient

$$P_{\mathcal{E}\to\mathcal{L}}(t_{n}) + P_{\mathcal{L}\to\mathcal{E}}(t_{n}) = \Delta^{3} \sum_{\underline{X}\in\mathcal{L}} \sum_{\underline{x}\in\mathcal{E}} \left(\{\underline{v}(\underline{x})\} \cdot \left\{ \underline{q}(\underline{X}) \right\} \left(\prod_{i=1}^{3} \delta_{\Delta,\underline{V}}(x_{i}-X_{i}) - \prod_{i=1}^{3} \delta_{\Delta,\underline{f}}(x_{i}-X_{i}) \right) \Delta S(\underline{X}) \right),$$

$$\forall n \in \mathbb{N} \text{ et } \forall \mathcal{L}, \forall \underline{X} \in \mathcal{L},$$

(1.13)

Les champs \underline{v} et \underline{q} étant vus quelconques et indépendants et les filtres 3D étant produits de filtres 1D à variables séparées, une condition nécessaire et suffisante à (1.9) est $\delta_{\Delta,\underline{V}} = \delta_{\Delta,f}$. Ce filtre commun est noté δ_{Δ} .

Synthèse : pour que les échanges d'énergie entre le fluide et le solide soient égaux, il faut et il suffit que le filtre soit le même dans les deux sens. ⁽¹⁾

Cela implique que $\delta_{\Delta,\underline{V}} = \delta^*_{\Delta,\underline{f}}$ (l'adjoint de $\delta_{\Delta,\underline{f}}$), hypothèse de travail de Newren (2007) qui joue en faveur de la stabilité de leur schéma numérique.

Choix du filtre et stabilité

Dans l'étude de convergence (chapitre 2, section 6), pour les tailles de maille $\Delta \approx 0.016$ et $h \approx 0.02$ avec le filtre δ_{BL} , le seuil de stabilité est $\Delta t \approx 10^{-4}$. En particulier, pour le pas de temps $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$, la simulation est instable avec le filtre δ_{BL} , tandis qu'elle est stable pour le filtre "en cosinus" δ_{cos} (Peskin, 1977).

Problème des filtres strictement positifs dans certains régimes stationnaires

<u>Propriété</u> : on montre qu'un filtre IBM à valeurs strictement positives sur l'intérieur de son support ne peut reproduire fidèlement les écoulements stationnaires vérifiant les trois conditions suivantes :

1. Dans le référentiel de la capsule, la membrane étanche et le fluide interne sont immobiles;

 En au moins un point de la membrane, la dérivée normale de la vitesse tangentielle à l'extérieur immédiat de la capsule n'est pas nulle;

3. La dérivée de la vitesse externe du fluide en ce point selon n'importe quelle direction tangentielle à la membrane est nulle.

Par exemple, l'écoulement de Poiseuille en canal droit vérifie ces trois conditions. Il est abordé dans la littérature utilisant IBM pour des capsules et des vésicules (Wang et al., 2016; Kaoui, 2009). Ces auteurs, tout comme la plupart des auteurs utilisant IBM, adoptent le filtre "en cosinus" $\delta_{\cos}(x) = (1/4) (1 + \cos(\pi x/2)) \mathbb{1}_{|x|<2}$ de Peskin (1977), pourtant strictement positif sur l'intérieur son support.

La première condition exclut les écoulements transitoires et les écoulements stationnaires où la membrane subit un "tank-treading" comme l'écoulement de cisaillement simple (Walter et al., 2010). La seconde condition exclut certaines situations où la membrane ne subit aucun cisaillement, comme le système entièrement au repos et les écoulements uniformes. La troisième condition sert à simplifier le problème. On la retrouve en écoulement de Poiseuille, au voisinage des points de membrane les plus proches des bords rigides du canal.⁽²⁾

On donne à présent la démonstration de la propriété annoncée. Par souci de concision, on suppose les pas de mailles Δ et h aussi petits que nécessaires. Raisonnons par l'absurde : supposons l'écoulement fidèlement reproduit. L'idée est de trouver un nœud lagrangien mobile, ce qui contredirait la première condition. Plaçons nous donc dans le référentiel de la capsule, en un point de membrane respectant les trois conditions. On suppose que c'est un nœud lagrangien <u>X</u> \in \mathcal{L} (hypothèse approchable grâce à la finesse du maillage).

Soit $\underline{d}_n = \partial_n^+ \underline{v}(\underline{X}) \in \mathbb{R}^3$ la dérivée en \underline{X} , du côté externe de la membrane, de la vitesse du fluide \underline{v} , par rapport à la normale locale sortante \underline{n} . Soit $c_n(\underline{x}) = (\underline{x} - \underline{X}) \cdot \underline{n}$ la coordonnée d'un nœud eulérien \underline{x} selon \underline{n} . On approche localement la membrane par son plan tangent $\mathcal{P} = \underline{X} + \text{vect}(\underline{a}_1, \underline{a}_2)$. On note \underline{t} le projeté orthogonal de \underline{d}_n sur \mathcal{P} (ie. la composante tangentielle de \underline{d}_n). Réunissant les trois conditions d'écoulement en \underline{X} , on a $\underline{t} \neq \underline{0}$ (cf. troisième condition) et on obtient le développement limité à l'ordre 1 de la vitesse tangentielle \underline{v}_t au voisinage de \underline{X} :

$$\underline{v}_t(\underline{x}) = c_n^+(\underline{x}) \, \underline{t} + o_{\underline{x} \to \underline{X}} \left(|| \, \underline{x} - \underline{X} \, || \right), \tag{1.14}$$

où $c_n^+ = \max(c_n, 0)$. Le maillage étant fin, ce voisinage contient l'intérieur du support IBM centré en \underline{X} , dont l'intersection avec la grille eulérienne \mathcal{E} est notée \mathcal{V}_{IBM} . On pose $\mathcal{V}_{\text{IBM}}^+ \stackrel{\triangle}{=} \{ \underline{x} \in \mathcal{V}_{\text{IBM}}, c_n^+ (\underline{x}) > 0 \}$. Le support IBM centré en \underline{X} étant

^{2.} La seconde et la troisième considion sont par exemple vérifiées près des points vérifiant $|z| = \max{X_3}$.

coupé par le plan \mathcal{P} en deux parties égales ⁽³⁾, on a toujours (pour la plupart des filtres ⁽⁴⁾) ou presque sûrement ⁽⁵⁾ (pour ceux qui restent ⁽⁶⁾) $\mathcal{V}_{IBM}^+ \neq \emptyset$.

L'injection de (1.14) dans l'interpolation (1.11)2 et le produit scalaire du résultat avec \underline{t} donnent une information sur la vitesse d'advection numérique { \underline{V} } de \underline{X} :

$$\{\underline{V}\}.\{\underline{t}\} = \Delta^3 \mid\mid t \mid\mid^2 \sum_{\underline{x} \in \mathcal{V}_{\text{IBM}}^+} c_n^+(\underline{x}) \prod_{i=1}^3 \delta_\Delta \left(x_i - X_i\right) + o_{\Delta \to 0^+}\left(\Delta^4\right).$$
(1.15)

Dans (1.15), la somme est strictement positive. Par finesse du maillage, on en déduit que $\{\underline{V}\}$. $\{\underline{t}\} > 0$, donc $\{\underline{V}\} \neq \{\underline{0}\}$: le nœud lagrangien \underline{X} est mobile.

<u>Synthèse</u> : un filtre strictement positif sur l'intérieur de son support ne peut reproduire certains états stationnaires. Les filtres y arrivant, comme celui de Beyer and Leveque (1992), sont strictement négatifs sur un ensemble non vide.

Dégradation de l'état stationnaire par ces mêmes filtres

On donne un exemple des conséquences de la propriété ci-dessus : on regarde comment le filtre en cosinus δ_{cos} dégrade la forme stationnaire de la capsule en écoulement de Poiseuille, comme représenté en Figure 1.1⁽⁷⁾.

On constate que la vitesse du cœur liquide n'est pas nulle, il comporte de faibles écoulements numériques parasites. La mobilité de chaque nœud lagrangien, les écoulements parasites et la dégradation globale de la forme stationnaire de la capsule sont des conséquences de la positivité du filtre. Les nœuds lagrangiens partent de la forme stationnaire. La positivité du filtre met certains nœuds en mouvement, ce qui modifie la configuration lagrangienne \mathcal{L} . En réaction, cette dernière produit de petits efforts de rappel qui se répercutent sur le fluide et génèrent un écoulement parasite dit "compensatoire", car il tend à ramener le nœud lagrangien vers sa position d'origine. Cet écoulement comporte une recirculation et prend la forme d'un vortex. La continuité de sa vitesse génère alors d'autres vortex contra-rotatifs dits "dégradants", car ils aplatissement le parachute de la capsule (Hu et al., 2013) par compression de ses bords et extension de son centre.

^{3.} ie. superposables et symétriques l'une par rapport à l'autre, par symétrie centrale en X

^{4.} dont le filtre δ_{cos} de Peskin (1977)

^{5.} la seule éventuelle exception, de probabilité nulle, étant le cas $\underline{X} \in \mathcal{E}$

^{6.} exemple : le filtre "en petit chapeau", cf. (Peskin, 1972)

^{7.} rapport de confinement $a_0/l = 0.85$, nombre capillaire Ca = 0.05 nombre de Reynolds Re = 0



Figure 1.1 – Dégradation de l'état stationnaire en écoulement de Poiseuille pour $a_0/l = 0.85$, Ca = 0.05 et Re = 0 par le filtre δ_{cos} . On représente la capsule (en +), le champ de vitesse (en traits bleus), les écoulements parasites dont certains dégradent l'état stationnaire et d'autres le réparent. La flèche rouge représente l'aplatissement du parachute, à l'arrière de la capsule cf. (Hu et al., 2013).

Synthèse : le filtre $\delta_{cos} \ge 0$ dégrade l'état stationnaire d'une capsule sous écoulement de Poiseuille en aplatissant son parachute.

Ordre de précision en espace

L'ordre de précision en espace peut être vu de deux manières : **l'ordre local** et **l'ordre global**, que nous définissons respectivement comme l'ordre de consistance du schéma numérique et la pente du graphe de l'étude de convergence.

L'ordre global est minoré par l'ordre local minimum sur le domaine de calcul Ω_c . Cette minoration peut être stricte si les erreurs locales d'ordre le plus bas se compensent à l'échelle de la capsule, notamment lorsqu'elles ne surviennent qu'au voisinage de la membrane. Le solveur fluide Basilisk et le solveur solide Caps3D sont d'ordre local ≥ 2 , et la méthode de correction de volume fait appel à de très petits déplacements correctifs⁽⁸⁾. Seule la méthode IBM peut dégrader l'ordre local. Le filtre δ_{cos} donne un ordre global de 1. Le filtre δ_{BL} donne un ordre de 2 globalement en 3D (chapitre 2 section 6) et même localement en 1D (Beyer and

^{8.} Pour IBM régulier, la norme uniforme sur \mathcal{L} des déplacements correctifs vérifie en tout temps $|| \delta_c ||_{\infty} (t) < 5 \times 10^{-6}$ et $\sum_t || \delta_c ||_{\infty} (t) < 10^{-4}$. Idem pour IBM localement régulier.

Leveque, 1992). Néanmoins, Beyer and Leveque (1992) ne mentionnent la 2D et la 3D que dans les perspectives. D'autres auteurs analysent l'ordre de précision en espace, notamment Griffith and Peskin (2005) qui mentionnent l'atteinte globale du second ordre pour des écoulements aux solutions suffisamment régulières ⁽⁹⁾.

Beyer and Leveque (1992) en donnent une explication : la plupart des filtres IBM sont construits pour interpoler à l'ordre 2 les fonctions de classe C^1 (dites "régulières"). Par exemple, dans un problème 1D de transport passif d'un point matériel, le champ de vitesse est régulier et la plupart des filtres IBM l'interpolent à l'ordre 2. En revanche, lorsque le point exerce à son tour une force sur le fluide, cela crée un saut dans la dérivée spatiale de la vitesse.

Beyer and Leveque (1992) analysent la précision de l'interpolation du champ de vitesse en 1D en définissant les moments ordinaires et les moments unilatéraux. Les **moments ordinaires du filtre**, **d'ordre** 0 et d'ordre 1, sont donnés par :

$$\begin{cases} M_{0,o,\Delta}(x) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{y \in \mathcal{E}} \delta_{\Delta}(x-y) \\ M_{1,o,\Delta}(x) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{y \in \mathcal{E}} (x-y) \delta_{\Delta}(x-y) \end{cases}, \qquad x \in \mathbb{R}. \tag{1.16}$$

Beyer and Leveque (1992) montrent⁽¹⁰⁾ que si la fonction à interpoler est de classe C^1 , si sa dérivée est Lipschitzienne et si le filtre respecte les équations $M_{0,o,\Delta} \equiv 1$ et $M_{1,o,\Delta} \equiv 0$, alors l'interpolation par le filtre est d'ordre 2. La plupart des filtres de la littérature respectent ces deux équations, le filtre δ_{cos} faisant exception en ne respectant pas la seconde. Ils interpolent donc localement à l'ordre 2 dans un problème régulier comme celui d'un transport passif.

Le moment unilatéral d'ordre 1 du filtre est donné par :

$$M_{1,\mathbf{u},\Delta}(x) = \Delta \sum_{y \in \mathcal{E}} (x - y) H(x - y) \,\delta_{\Delta}(x - y), \qquad x \in \mathbb{R}, \tag{1.17}$$

où *H* est la fonction échelon de Heaviside. Beyer and Leveque (1992) montrent ⁽¹¹⁾ que si la fonction à interpoler est continue, de classe C^1 à dérivée Lipschitzienne de part et d'autre d'un certain $x_0 \in \mathbb{R}$ et que le filtre vérifie $M_{0,o,\Delta} \equiv 1$, $M_{1,o,\Delta} \equiv 0$, $M_{1,u,\Delta} \equiv 0$, alors l'interpolation par le filtre est d'ordre 2 sur \mathbb{R} tout entier. La condition $M_{1,u,\Delta} \equiv 0$ résout donc le problème de saut de la dérivée. Beyer and Leveque (1992) raisonnent en maillage 1D régulier mais ces conditions restent vraies

^{9.} ce qu'ils appellent "formal second order"

^{10.} dans leur "Lemme 4.1"

^{11.} dans leur "Lemme 4.2"

pour tout maillage 1D. Là encore, les filtres strictement positifs sur l'intérieur de leur support sont disqualifiés car ils ne vérifient pas $M_{1,u,\Delta} \equiv 0$.

Les raisonnements en 1D sont généralisables en 2D et en 3D, sous réserve de tenir compte du saut de gradient de vitesse $\underline{\nabla v}$ à la traversée de la membrane. Cela revient à remplacer dans (1.17) la fonction de Heaviside par la fonction indicatrice de l'intérieur de la capsule. Le filtre doit donc vérifier une condition de type (1.17) en tout point et pour toute orientation locale de la membrane. On démontre dans l'annexe C que ce n'est le cas d'aucun filtre s'écrivant comme produit de filtres 1D à variables séparées ⁽¹²⁾, c'est-à-dire les filtres 2D ou 3D de la forme

$$\begin{cases} \delta_{\Delta,2D}(x_1, x_2) = \prod_{i=1}^2 \delta_{\Delta}(x_i), & \underline{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \delta_{\Delta,3D}(x_1, x_2, x_3) = \prod_{i=1}^3 \delta_{\Delta}(x_i), & \underline{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \end{cases}$$
(1.18)

où δ_{Δ} est un filtre 1D. Un terme parasite d'ordre 1 apparaît, lié au non-alignement de la normale locale sortante <u>n</u> sur les axes du repère. Aucun filtre construit via (1.18) n'annule systématiquement ce terme. Tous interpolent donc à l'ordre 1.

Synthèse : un couplage 3D via la forme d'origine (1.18) de la méthode IBM peut être globalement précis à l'ordre 2, mais est toujours localement précis à l'ordre 1.

Perspectives : recherche de nouveaux filtres pour de meilleures performances

Trois points sont intéressants à examiner pour accroître la précision des schémas numériques utilisant la méthode des frontières immergées :

1. On a examiné plus haut l'impact de la construction d'un filtre 3D à partir d'un filtre 1D via l'équation (1.18) : la précision locale est toujours d'ordre 1 mais la précision globale est d'ordre 2 pour le filtre de Beyer et Leveque et d'ordre 1 pour le filtre en cosinus. Pour chacun de ces deux filtres, la précision globale de la simulation est égale à la précision d'interpolation du filtre 1D. Ce résultat est peutêtre vrai pour l'ordre 3. Pour qu'un solveur couplé faisant appel à des solveurs fluide et solide d'ordre 3 soit d'ordre global 3, il suffirait alors que le filtre 1D interpole à l'ordre 3. On s'intéresse donc à la construction d'un filtre interpolant à l'ordre 3 en s'inspirant de Beyer and Leveque (1992). Les polynômes utilisés sont d'ordre 3 et le nombre de mailles eulériennes par demi-côté de support $n_{\Delta} = 3$. L'ensemble des solutions est infini à un degré de liberté, ce qui permet d'imposer

^{12.} A noter que Leveque and Li (1994) avaient déjà évoqué cette idée, sans la démontrer.

une condition arbitraire supplémentaire. Par exemple, en imposant de plus que le filtre vaille 1 en 0 (pour obtenir une véritable interpolation), on obtient le filtre suivant, que l'on appelle PolynoMex δ_{PM} (Figure 1.2)

$$\begin{cases} \delta_{\rm PM}(x) = \frac{(|x|+2)(1-x^2)}{2}, & |x| < 1\\ \delta_{\rm PM}(x) = (|x|-2)(x^2-1), & 1 \le |x| < 2\\ \delta_{\rm PM}(x) = \frac{(1-|x|)(2-|x|)(3-|x|)}{2}, & 2 \le |x| < 3\\ \delta_{\rm PM}(x) = 0, & 3 < |x| \end{cases}$$
(1.19)



Figure 1.2 – Représentation du Filtre PolynoMex (PM).

Le filtre PolynoMex vérifie $M_{0,o} \equiv 1$, $M_{i,o} \equiv 0$ (i = 1, 2), $M_{i,u} \equiv 0$ (i = 1, 2), où $M_{0,o}$, $M_{1,o}$ et $M_{1,u}$ sont donnés par (1.16) et (1.17), et $M_{2,o}$ et $M_{2,u}$ par

$$\begin{cases} M_{2,o}(x) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{y \in \mathcal{E}} (x - y)^2 \,\delta_{\Delta}(x - y) \\ M_{2,u}(x) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{y \in \mathcal{E}} (x - y)^2 \,H(x - y) \,\delta_{\Delta}(x - y) \end{cases}, \qquad x \in \mathbb{R}, \qquad (1.20)$$

2. On pourrait concevoir une méthode d'ordre local 2 en transposant en 3D la méthode de Beyer and Leveque (1992). Les premiers tests sont en cours.

3. La condition de construction du filtre (1.18) donnant systématiquement lieu à une précision locale d'ordre 1, il serait intéressant de l'ôter pour explorer un ensemble plus vaste de filtres. Une telle exploration est abordée dans l'annexe D.

1.2 Correction de volume

Au chapitre 2 section 4, nous avons choisi la méthode de correction de volume par déplacement minimum (pour la norme L_2) à l'aide de multiplicateurs de Lagrange, inspirée de Mendez et al. (2014). Cette méthode est simple et efficace, bien que non physique. Deux options restaient à choisir : 1. Correction P_1 ou P_2 (c'està-dire en approchant ou non le maillage icomesh n_{it} 2 par un maillage icomesh n_{it} + 1 1). Nous avons choisi la correction P_1 , suffisante pour donner des résultats satisfaisants (cf. chapitre 2 sections 4 et 6). Les calculs deviennent beaucoup plus compliqués en correction P_2 ; 2. L'ordre du développement limité du volume corrigé en fonction déplacement correctif δ_c : nous avons choisi l'ordre 1 en || δ_c || ⁽¹³⁾. Un développement limité à l'ordre 2 en δ_c complique beaucoup les calculs.

Pour la correction de volume, nous avons envisagé 2 autres méthodes : 1. **Correction par déplacement selon la normale locale, au prorata de l'erreur de volume**, adoptée avec succès par Krüger et al. (2014) et Kusters et al. (2014) mais nécessitant quelques précautions, sous peine d'oscillations; 2. **Correction pour annuler la vitesse normale dans le référentiel local de la membrane**⁽¹⁴⁾. Elle pourrait fonctionner pour une membrane en extension. En compression, des plis numériques apparaissent, dont la longueur d'onde est dominée par *h* (Walter et al., 2010), donc l'estimation de la normale n'est pas robuste.

Synthèse : la méthode de correction de volume la plus simple parmi celles envisagées a été adoptée, comme elle donne des résultats très satisfaisants.

2 Méthode IBM en maillage régulier

2.1 Choix des pas spatiaux

Choix du pas spatial eulérien $\Delta \approx 0.03$

Le pas spatial eulérien Δ détermine le nombre de mailles eulériennes $N_{\mathcal{E}}$ et donc la durée de calcul processeur par cycle de pas de temps Δt , notée $D_{\rm p}$. En 3D, on a $N_{\mathcal{E}}(\Delta) \propto 1/\Delta^3$, ce que l'on note $N_{\mathcal{E}} = \kappa \Delta^{-3}$. La **complexité** $\mathcal{K}(\Delta)$ d'un algorithme est son nombre d'opérations élémentaires. On a $D_{\rm p} \propto \mathcal{K}(\Delta)$. Pour un cycle à plusieurs étapes, celle à la complexité la plus élevée détermine $\mathcal{K}(\Delta)$. Le solveur solide de Caps3D a une complexité $\mathcal{K}_{\rm s}(\Delta) = \mathcal{O}(N_{\mathcal{L}})$ et le solveur fluide Basilisk a une complexité $\mathcal{K}_{\rm f}(\Delta) = \mathcal{O}(N_{\mathcal{E}}\ln(N_{\mathcal{E}}))$, due au solveur multi-grille de Poisson (Popinet, 2009). Pour $\Delta \approx 0.03$ et $h \approx 0.04$, on a $N_{\mathcal{E}} \approx 10^6$ et $N_{\mathcal{L}} \approx 10^4$,

^{13.} Cet ordre 1 n'a absolument aucun rapport, avec l'ordre de précision spatial en Δ du schéma numérique global.

^{14.} Cette méthode a été inspirée d'une discussion privée avec Pierre Villon.

donc $\mathcal{K}(\Delta) = \mathcal{O}(N_{\mathcal{E}} \ln (N_{\mathcal{E}}))$. Diminuer Δ de moitié fait donc augmenter D_{p} de :

$$\mathcal{F}_{p}\left(\Delta\right) \stackrel{\triangle}{=} \frac{D_{p}\left(\Delta/2\right)}{D_{p}\left(\Delta\right)} = 8\frac{3\ln 2 + \ln\left(\kappa\right) - 3\ln\left(\Delta\right)}{\ln\left(\kappa\right) - 3\ln\left(\Delta\right)} + o\left(1\right) \rightarrow_{\Delta \to 0^{+}} 8.$$
(2.1)

Dans un canal à section carrée de demi-largeur *l* et de longueur *L* = 8*l*, à $\Delta \approx 0.03$ on a $\kappa = 32$, donc $\mathcal{F}_{p}(\Delta) \approx 9.2$, $D_{p}(\Delta) \approx 7$ sec et $D_{p}(\Delta/2) \approx 1$ min.

Synthèse : à maillage 2 fois plus fin, la durée de calcul processeur par pas de temps est 8 à 10 fois plus élevée.

Choix du pas spatial lagrangien $h \approx 0.04$

Les calculs Éléments Finis P₂ donnent des résultats globalement précis à l'ordre 3 en espace (Jund, 2007). En les couplant aux Intégrales de Frontières, Walter et al. (2010) obtiennent même une convergence d'ordre 4 : pour $h \approx 0.04$ (icomesh 4 2), l'erreur est de 2 × 10⁻⁴. Pour $h \approx 0.08$ (icomesh 3 2), l'erreur est 3 × 10⁻³, soit une précision comparable à celle de notre solveur pour $\Delta \approx 0.03$ et $h \approx 0.04$. Le pas h pprox 0.08 eût toutefois créé d'autres problèmes : Peskin (2002) mentionne que la distance maximum entre nœuds lagrangiens voisins doit rester inférieure à $\Delta/2$, sous peine de "porosité numérique" (gros gradients de vitesse fluide, notamment en composante normale). Or, cette distance peut aller jusqu'à 2h (chapitre 4). Il faudrait donc vérifier $h \leq \Delta/4$. Pour $\Delta \approx 0.03$, cela donne $h \leq 0.008$. Pour tomber sous ce seuil, il faut au moins icomesh 7 2 (7 itérations dans la construction du maillage P_2), donnant $h \approx 0.005$. En revanche, il devient rhédibitoire de vouloir accéder à icomesh 6 2 ou icomesh 7 2 : icomesh 6 2 comporte déjà $N_{\mathcal{L}} \approx 1.6 \times 10^5$ nœuds⁽¹⁵⁾ (pour icomesh 7 2, $N_{\mathcal{L}} \approx 6.6 \times 10^5$), et la création de ces maillages occupe un espace de mémoire vive dépassant la capacité des machines à disposition. Enfin, la correction de volume rend inutile un tel raffinement.

<u>Synthèse</u> : le meilleur compromis entre le coût de calcul (temps de calcul, mémoire vive) et la précision (étude de convergence, applications aux capsules) est icomesh 4 2. Grâce à la correction de volume, il est inutile de respecter $h \le \Delta/4$.

^{15.} Contrairement au solveur fluide, le solveur solide n'est à l'heure actuelle pas parallélisé.

2.2 Choix du pas de temps

Dans le cas de la relaxation dans un fluide au repos (chapitre 4), à rapport de confinement $a_0/l = 0.5$ et à nombre de Laplace La = 10, pour $\Delta \approx 0.03$ (et $h \approx 0.04$), le seuil de stabilité est $\Delta t \in [1.4 \times 10^{-4}, 1.45 \times 10^{-4}]$ et pour $\Delta \approx 0.016$ (et $h \approx 0.016$), on trouve $\Delta t \in [4 \times 10^{-5}, 4.25 \times 10^{-5}]$. En écoulement de Poiseuille (chapitre 2, section 6), le seuil de stabilité est compris entre 10^{-4} et 2×10^{-4} . Dans les deux cas, l'arrondi par défaut du seuil de stabilité pour $\Delta \approx 0.03$ est $\Delta t = 10^{-4}$.

Le temps de calcul processeur par unité de temps adimensionnelle est d'environ 1 jour sur 8 coeurs, pour $\Delta \approx 0.03$, $h \approx 0.04$ (icomesh 4 2) et $\Delta t = 10^{-4}$ pour un canal carré de demi-largeur *l* (échelle d'adimensionnalisation) et de longueur adimensionnelle L = 8. Pour la relaxation d'une capsule dans un fluide initialement au repos (chapitre 4) (1 à 10 unités de temps adimensionnel), le temps de calcul par simulation va de 1 à 7 jours pour $\Delta \approx 0.03$. Pour les simulations en canal droit dans le référentiel de la capsule (5 à 10 unités de temps adimensionnel), le temps de calcul set compris entre 1 et 2 mois de calcul selon les performances machine.

Pour $\Delta t = 10^{-4}$ et $\Delta \approx 0.03$, l'erreur de convergence en temps est d'environ 4×10^{-3} , ce qui ne nuit pas à la précision globale du schéma numérique, l'erreur en convergence spatiale à ces mêmes paramètres étant d'environ 0.4%.

Synthèse : pour $\Delta \approx 0.03$, le seuil de stabilité est arrondi par défaut à $\Delta t = 10^{-4}$, qui est le pas de temps choisi. L'erreur de convergence en temps ne nuit pas à la précision globale du schéma. Les temps de calcul varient de quelques jours à quelques mois.

3 Méthode IBM en maillage adaptatif localement régulier

3.1 Paramètres en IBM localement régulier : précision et stabilité

Au chapitre 2, section 5, on a choisi $\Delta_{\min} \approx 0.03$, $h \approx 0.04$ et $\Delta t = 10^{-4}$. A paramètres égaux⁽¹⁶⁾, les résultats sont les mêmes qu'en maillage régulier (cf. chapitre 2, section 6) : l'erreur maximum autorisée sur la vitesse, fixée à $\epsilon = 10^{-3}$ et conditionnant le raffinement en maillage adaptatif, est inférieure à l'erreur de convergence en maillage régulier. Quant à $\Delta_{\max} = 1/8$, déraffiner encore plus

^{16.} dont $\Delta \equiv \Delta_{\min}$

induirait des problèmes de débit en écoulement de Poiseuille (chapitre 5).⁽¹⁷⁾

3.2 Gain en temps de calcul en IBM localement régulier

Le gain de temps processeur par rapport au maillage régulier dépend de deux facteurs liés : la vitesse du fluide et le rapport de confinement. En relaxation dans un fluide au repos (chapitre 4), le tampon optimal autour de la membrane (chapitre 2, section 5) occupe un volume très faible par rapport au canal et il n'y a pas d'écoulement par défaut. Le dé-raffinement s'opère donc massivement dès que la relaxation ralentit (chapitre 2, section 6). Le ralentissement dès le début explique donc l'économie de mailles et le gain en temps de calcul. A contrario, dans une relaxation sous écoulement (cf. chapitre 5), l'écoulement non perturbé force le raffinement même loin de la capsule. Il est donc impératif d'utiliser des fonctions de désintérêt (appelées aussi fonctions d'écrasement) pour garantir un gain significatif en mailles et en temps de calcul.

4 Conclusion du chapitre

Le présent chapitre a justifié, analysé et approfondi les choix méthodologiques et paramétriques effectués au chapitre 2 dans le cadre de la méthode IBM.

Concernant le filtre :

1. Il doit être le même dans les deux sens (dispersion volumique des forces et interpolation des vitesses) pour assurer la conservation d'énergie;

2. Les filtres comme le filtre δ_{BL} (Beyer and Leveque, 1992) sont plus précis que les filtres strictement positifs sur l'intérieur de leur support comme le filtre "en cosinus" δ_{cos} (Peskin, 1977) : l'ordre de précision globale (ie. dans l'étude de convergence) est respectivement 2 et 1;

3. Les filtres comme le filtre "en cosinus" δ_{cos} (Peskin, 1977) dégradent même certaines formes stationnaires de la capsule, aplatissant par exemple son "parachute" arrière (Hu et al., 2013) sous écoulement de Poiseuille en canal droit;

4. Le seul avantage de δ_{cos} est son seuil de stabilité deux fois plus grand, mais en 3D son temps de calcul processeur à précision égale reste 8 à 10 fois plus élevé;

^{17.} Point soulevé par Stéphane Popinet lors d'une conversation privée à propos des premiers tests.

5. Tout filtre 3D construit via l'habituelle formule à variables séparées (1.18) (dont δ_{BL}), interpole à l'ordre 1 et dégrade donc la précision locale à l'ordre 1 ;

6. Quelques pistes ont été proposées pour trouver des filtres plus performants : filtres 1D interpolant à l'ordre 3, généralisation en 3D de la recherche de filtre de Beyer and Leveque (1992) et retrait de la condition (1.18) (cf. annexe D).

La méthode de correction de volume adoptée est celle par déplacement minium par multiplicateurs de Lagrange. On approche le maillage P_2 par le maillage P_1 à une itération supplémentaire et on ne tient compte que des termes d'ordres 0 et 1 dans le développement limité du volume corrigé selon le déplacement correctif δ_c . C'est de loin la méthode la plus simple et ses résultats sont très satisfaisants.

Concernant la méthode "IBM régulier", les pas spatiaux eulérien $\Delta \approx 0.03$ et lagrangien $h \approx 0.04$, ainsi que le pas de temps $\Delta t = 10^{-4}$, représentent un bon compromis entre précision, stabilité et temps de calcul des simulations au vu des ressources disponibles et des besoins en précision.

Concernant la méthode "IBM localement régulier", les paramètres et les résultats sont les mêmes qu'en maillage régulier ($\Delta_{\min} \approx 0.03$). Les fonctions d'intérêt sont essentielles quand la vitesse du fluide est très faible. Sous écoulement forcé, les fonctions de désintérêt/écrasement garantissent le gain de temps de calcul et la condition $\Delta_{\max} = 0.125$ garantit une estimation correcte du débit.

Chapitre 4

Relaxation de capsules dans un fluide au repos

On présente et modélise les résultats d'une simulation 3D de relaxation d'une capsule pré-déformée en ellipsoïde placée au centre d'un canal à section carrée rempli de fluide initialement au repos.

1 Présentation du problème

On considère une capsule à cœur liquide et à membrane mince que nous modélisons par une surface hyper-élastique isotrope à module de cisaillement surfacique G_s , module de dilatation de surface K_s et dépourvue de résistance à la flexion et de viscosité de membrane. La configuration de référence de la capsule est une sphère de rayon a_0 . La membrane est pré-déformée en un ellipsoïde de demi-grand axe $a > a_0$ le long de l'axe longitudinal Ox du canal, autour duquel l'ellipsoïde est invariant par rotation, et de demi-petits axes $\sqrt{a_0^3/a}$ dans les directions perpendiculaires (cf. Figure 1.1). La capsule pré-déformée est placée au centre O d'un canal rigide à section transversale carrée qui modélise un canal microfluidique. Le canal a une longueur L et une demi-largeur l. Il est rempli d'un fluide Newtonien de masse volumique ρ et de viscosité μ , mêmes propriétés que le fluide du cœur de la capsule, ce qui exclut les effets de flottabilité.

Étant pré-déformée, la capsule débute sa relaxation avec une énergie élastique initiale stockée dans sa membrane, $E_m^0 = E_m (t = 0)$. Une fois relâchée, la membrane se relaxe en mettant le fluide externe en mouvement. La vitesse caractéristique *V*, induite par les déformations de la capsule, a une échelle de l'ordre de $E_m^0 / (\mu a_0^2)$. Trois paramètres peuvent a priori influencer les mouvements et déformations de la capsule durant sa relaxation : (i) le rapport de confinement a_0/l , (ii) le nombre capillaire $Ca = \mu V/G_s$, rapport entre les forces visqueuses et les forces élastiques, et (iii) le nombre de Reynolds $Re = \rho V l/\mu$, rapport des forces inertielles sur les forces visqueuses. L'étude montre plus loin que la relaxation de capsule est en fait fonction de seulement deux paramètres : le rapport de confinement a_0/l et le rapport $Re/Ca = \rho G_s l/\mu^2$, appelé **nombre de Laplace** et noté *La*. Les paramètres pilotant la relaxation sont donc uniquement fonction des propriétés du fluide externe, de l'élasticité de la capsule et des longueurs caractéristiques du problème, et sont ainsi indépendants de l'échelle de vitesse induite *V*.

Toutes les variables utilisées par la suite de ce chapitre sont adimensionnelles : les équations de Navier-Stokes sont issues d'un adimensionnement des longueurs par *l*, des temps par T = l/V et des forces par $\rho V^2 l^2$; l'équation adimensionnelle d'équilibre de la membrane est obtenue en adimensionnant les longueurs par a_0 et les forces par $G_s a_0$.



Figure 1.1 – Représentation 3D de la configuration initiale : une capsule sphérique de rayon a_0 est pré-déformée en un ellipsoïde de révolution allongé de demigrand axe a et de demi-petits axes $\sqrt{a_0^3/a}$, puis relâchée dans un canal à section transversale carrée de longueur L et de demi-largeur l. La capsule et le reste du canal sont remplis de fluides de masse volumique ρ et de viscosité μ . Le demigrand axe est selon l'axe longitudinal Ox du canal et les demi-petits axes sont dans des directions perpendiculaires à cet axe.

2 Résultats des simulations tridimensionnelles de relaxation de capsule dans un fluide au repos.

Nous présentons les résultats des simulations 3D de relaxation de capsule confinées dans un canal à section transversale carrée. Nous étudions d'abord en détail l'évolution de la forme de la capsule et l'écoulement fluide correspondant, induit durant la relaxation dans le cas de référence, lorsque le nombre de Laplace est La = 10 (Ca = 0.05, Re = 0.5) et le confinement est $a_0/l = 0.5$, choisi comme cas de référence. Nous étudions ensuite l'influence des paramètres clé pilotant la relaxation de la capsule.

2.1 Évolution temporelle de la forme de la capsule et vitesse induite dans le cas de référence



Figure 2.1 – Relaxation d'une capsule sphérique pré-déformée en un ellipsoïde allongé de demi-grand axe $a = 2a_0$, pour La = 10 (Ca = 0.05, Re = 0.5) et $a_0/l = 0.5$. a. Coupe de la capsule dans le plan xOz à différents instants, représentée en adimensionnant le temps t par l'échelle de temps viscoélastique $\mu l/G_s$. b. Évolution temporelle de la demi-longueur de la capsule L_x le long de l'axe Ox.

La Figure 2.1a montre la coupe de la capsule dans le plan xOz à différents instants successifs pour le rapport de confinement $a_0/l = 0.5$ et nombre de Laplace La = 10 (Ca = 0.05 et Re = 0.5). Le temps t est adimensionné par l'échelle de temps visco-élastique $\mu l/G_s$. Une fois relâchée, la capsule se rétracte selon l'axe

Ox, ce qui se traduit par une décroissance de sa demi-longueur L_x selon l'axe Ox, tandis qu'elle est en expansion selon les axes Oy et Oz. Le processus de relaxation de la capsule peut être décomposé en trois étapes distinctes :

1. De t = 0 au **temps d'amorçage** t_b (vérifiant $t_bG_s/\mu l = 0.4$), le fluide est mis en mouvement tandis que le processus de relaxation s'amorce;

2. Jusqu'au temps $tG_s/\mu l = 4$, la capsule change rapidement de forme depuis sa forme pseudo-ellipsoïdale à $t = t_b$ jusqu'à une forme quasi-shérique;

3. La relaxation se poursuit durant une phase de ré-adaptation très lente, la capsule se rapprochant de sa forme asymptotique : sa configuration de référence.

La première étape, appelée **phase d'amorçage**, n'est pas étudiée car elle dépend fortement de la forme initiale et n'est pas intrinsèque au processus de relaxation. Les seconde et troisième étapes constituent le **cœur du processus de relaxation** et sont pilotées par les interactions fluide-structure.

Ces deux étapes apparaissent clairement lorsque l'on représente la courbe de l'évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x de la capsule en tant que fonction du temps adimensionnel (Figure 2.1b). Pour les valeurs de paramètres choisies, la demi-longueur L_x décroit de façon monotone vers sa valeur asymptotique au repos $L_{x,\infty}/l = a_0/l = 0.5$.





Dès que la capsule est laissée à sa relaxation, les fluides interne et externe entrent se mettent en mouvement. La Figure 2.2 représente, au temps $t_bG_s/\mu l$, les lignes de courant en 3D, et les colore du champ de vorticité. La vorticité la plus élevée est en rouge, ce qui se produit à ses extrémités, que l'on appelle dorénavant

2 –

Résultats des simulations tridimensionnelles de relaxation de capsule



Figure 2.3 – Lignes de courant et vitesse normalisée dans le plan *xOz* au temps $tG_s/\mu l = t_bG_s/\mu l = 0.4$ pour *La* = 10 (*Ca* = 0.05, *Re* = 0.5) et $a_0/l = 0.5$. a. Lignes de courant. b. Zoom sur les lignes de courant à l'intérieur de la capsule. c. Norme de vitesse normalisée || \underline{v} || / V_{max} , avec $V_{max} \approx 12V$.

pointes. A contrario ses valeurs les plus basses sont en bleu foncé.

La Figure 2.3 montre les lignes de courant et la norme de vitesse normalisée dans le plan xOz au temps $tG_s/\mu l = t_bG_s/\mu l = 0.4$, qui correspond au point d'inflexion sur de la Figure 2.1b et approximativement à l'instant où la vitesse du fluide est maximum. Les lignes de courant dans le plan xOz révèlent l'existence d'une paire symétrique d'anneaux vorticaux. Les écoulements interne et externe sont dirigés vers le centre du canal au niveau de l'axe Ox et loin du centre au niveau de l'axe Oz. C'est une conséquence du mouvement de la membrane de la capsule, qui se rétracte selon l'axe Ox et s'étend selon l'axe Oz. La vitesse des fluides

interne et externe est égale à celle de la membrane de la capsule en raison de la condition de non-glissement. Les anneaux vorticaux symétriques l'un par rapport à l'autre tournent autour de quatre points de ce plan, de coordonnées $x/l \approx \pm 0.6$ et $z/l \approx \pm 0.52$ dans ce cas (Figure 2.3a). La Figure 2.3b, qui zoome sur les lignes de courant au niveau de l'intérieur de la capsule, indique que l'écoulement interne est hyperbolique, de la forme $\underline{v}(\underline{x},t) = -\kappa(t)x\underline{e}_{\underline{x}} + \frac{\kappa(t)}{2}(\underline{y}\underline{e}_{\underline{y}} + \underline{z}\underline{e}_{\underline{z}}) + \mathcal{O}(||\underline{x}||^2)$ (où κ est une fonction scalaire positive du temps). Les plus grandes normes de vitesse se trouvent au voisinage de la membrane, notamment près des pointes en raison de leur tension et leur courbure élevée à $t = t_b$.

La pression correspondante (non représentée par souci de concision) est plus élevée dans le cœur liquide que dans le fluide externe. De façon similaire au champ de vitesse, les variations du champ de pression induites par la relaxation sont concentrées dans une région très étroite de la capsule : les pointes. Les plus grandes surpressions (respectivement sous-pressions) se produisent dans le fluide interne (respectivement externe), au niveau des pointes. En comparaison, la pression est quasi-uniforme partout ailleurs.

2.2 Influence de l'inertie sur le régime de relaxation

Dans le cadre de l'étude paramétrique du problème, nous étudions tout d'abord l'influence de l'inertie en augmentant le nombre de Reynolds *Re* et ainsi le nombre de Laplace *La*, tandis que le nombre capillaire est laissé fixé à *Ca* = 0.05. La Figure 2.4 montre l'évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x pour des nombres de Laplace allant de *La* = 10 à 400 pour un confinement fixé à $a_0/l = 0.5$. On peut observer que le système dynamique évolue d'un régime d'amortissement pur (cas de référence) à un régime d'oscillations amorties. Malgré le fait que la capsule soit un objet tridimensionnel soumis à des déformations élastiques nonlinéaires fortement couplées avec les fluides interne et externe, il apparaît que l'évolution la demi-longueur longitudinale *L_x* montre les trois régimes d'un oscillateur harmonique : amortissement pur pour *La* < 84, amortissement critique pour *La* = 84 et oscillations amorties pour *La* > 84.

La Figure 2.5 illustre le champ fluide dans le plan xOz (lignes de courant et norme de vitesse normalisée) pour La = 200 au temps $tG_s/\mu l = t_bG_s/\mu l = 0.8$, qui est aussi lorsque la relaxation est la plus rapide. On peut noter la présence



Figure 2.4 – Évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale de la capsule L_x pour un nombre de Laplace compris entre La = 10 et 400 et un rapport de confinement de $a_0/l = 0.5$. Le régime est l'amortissement pur pour La < 84, l'amortissement critique pour La = 84 et les oscillations amorties pour La > 84

supplémentaire de deux anneaux vorticaux à l'intérieur de la capsule (cf. Figures 2.5a-b). Générés aux tous premiers instants de la relaxation, ils ne sont alors plus amortis par dissipation visqueuse comme dans le régime purement amorti, mais au contraire persistent tout au long du processus de relaxation. Le champ de vitesse est alors composé de deux paires symétriques d'anneaux vorticaux tournant en sens contraire l'une par rapport à l'autre, l'une impliquant le fluide interne et l'autre impliquant le fluide externe.

2.3 Étude de l'effet du confinement

Nous étudions à présent l'effet du confinement en augmentant le ratio de confinement à $a_0/l = 0.85$, tout en maintenant fixé le nombre de Laplace à La = 10. La Figure2.6 montre les lignes de courant et la norme de vitesse normalisée, et ce dans le plan xOz au temps $tG_s/\mu l = t_bG_s/\mu l = 0.7$, qui est l'instant où la relaxation est la plus rapide. La capsule est en régime purement amorti. Les Figures 2.6a-b montrent qu'à cet instant, il reste une certaine réminiscence d'anneaux des structures internes générées plus tôt dans le processus de relaxation, malgré le fait qu'ils soient presque totalement dissipés et que l'écoulement interne soit sur le



Figure 2.5 – Lignes de courant et norme de vitesse normalisée dans le plan *xOz* au temps $tG_s/\mu l = t_bG_s/\mu l = 0.8$ pour La = 200 (Ca = 0.05, Re = 10) et $a_0/l = 0.5$. a. Lignes de courant b. Zoom sur les lignes de courant à l'intérieur de la capsule. c. Norme de vitesse $||\underline{v}|| / V_{max}$, normalisée par $V_{max} \approx 4V$.

point de devenir hyperbolique : cela indique qu'un confinement plus fort retarde la dissipation visqueuse des structures internes de par leur taille plus importante. La vitesse maximum est $V_{\text{max}} \approx 8V$, ce qui est plus faible qu'à rapport de confinement plus petit (pour rappel, $V_{\text{max}} \approx 12V$ à $a_0/l = 0.5$).

2.4 Paramètres clé et diagramme de phase

L'analyse dimensionnelle de la relaxation d'une capsule à membrane élastique pré-déformée montre que la dynamique de capsule est gouvernée par deux paramètres : le rapport de confinement a_0/l et le nombre de Laplace La = Re/Ca. Ils



c.

Figure 2.6 – Lignes de courant et norme de vitesse normalisée dans le plan *xOz* au temps $tG_s/\mu l = t_bG_s/\mu l = 0.7$ pour La = 10 (Ca = 0.05, Re = 0.5) et $a_0/l = 0.85$. a. lignes de courant b. Zoom sur les lignes de courant à l'intérieur de la capsule. c. norme de vitesse normalisée || \underline{v} || $/V_{max}$, avec $V_{max} \approx 8V$.

apparaissent dans l'équation de Navier-Stokes (1.1) lorsque celle-ci est ré-adimensionnée en utilisant l'échelle de temps visco-élastique $\mu l/G_s$ au lieu de l'échelle de temps convective l/V et l'échelle de vitesse visco-élastique G_s/μ au lieu de la vitesse convective V:

$$\begin{cases} \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + (\underline{v} \cdot \underline{\nabla}) \underline{v} = -\underline{\nabla} p + \frac{1}{La} \underline{\Delta} \underline{v} + \underline{f}, \\ \underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0, \end{cases}$$
(2.1)

le rapport de confinement a_0/l étant contenu dans le terme source f.

Pour illustrer le fait que l'échelle de temps caractéristique est l'échelle de temps visco-élastique $\mu l/G_s$ et que la relaxation dépend de *La* plutôt que de *Re* et *Ca* in-

dépendamment, on considère deux jeux de paramètres comportant le même rapport de confinement $a_0/l = 0.6$ et le même nombre de Laplace La = Re/Ca = 100, mais constitués de nombres de Reynolds Re et capillaire Ca différents : d'un côté, Re = 5 et Ca = 0.05; de l'autre, Re = 2.5 et Ca = 0.025. L'évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x est montrée sur la Figure 2.7, le temps étant adimensionné par l'échelle de temps $\mu l/G_s$ dans la Figure 2.7a et par l'échelle de temps convective l/V dans la Figure 2.7b. On observe une excellente superposition des deux courbes dans la Figure 2.7a, mais pas dans la Figure 2.7b.

Une étude paramétrique complète est conduite, où l'on fait varier le nombre de Laplace *La* de 2 à 800 et le rapport de confinement a_0/l de 0.45 à 0.85. A noter que l'analogie avec un oscillateur harmonique amorti perd en qualité hors de cette plage de rapports de confinement. Les résultats sont représentés dans le diagramme de phase (Figure 2.8), où chaque point correspond à une simulation numérique complète. Les symboles '+' correspondent à un amortissement pur et les symboles 'o' correspondent à des oscillations amorties. Le diagramme de phase indique que pour tous les rapports de confinement testés, le système comporte une transition de l'amortissement pur vers les oscillations amorties à mesure que le nombre de Laplace croît. La transition se produit pour une valeur critique du nombe de Laplace, notée La_c , qui correspond au régime critique. Le confinement a un effet modulant sur la valeur du nombre de Laplace critique : La_c croît avec l'augmentation du rapport de confinement a_0/l .

3 Modèle de Kelvin-Voigt à inertie

3.1 Prédiction de l'évolution temporelle de la demi-longueur de capsule

Nous avons vu que l'évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x de la capsule rappelle la dynamique d'un système masse-ressort amorti. Nous proposons donc un modèle de Kelvin-Voigt à inertie pour prédire l'évolution de cette grandeur géométrique qui fournit des informations intéressantes sur la dynamique de relaxation. L'objectif est d'utiliser le modèle pour ajuster les données de simulation 3D, afin d'identifier les valeurs des constantes du modèle et de quantifier l'importance des contributions de l'inertie et de la viscosité à la relaxation de la capsule.



Figure 2.7 – Evolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x de la capsule pour : Re = 5 et Ca = 0.05; Re = 2.5 et Ca = 0.025. Ces cas correspondent au même nombre de Laplace (La = 100) et au même ratio de confinement ($a_0/l = 0.6$). a. Invariance de l'évolution temporelle de L_x , lorsque le temps est adimensionné par l'échelle de temps de réponse viscoélastique $\mu l/G_s$. b. Même jeu de données lorsque le temps est adimensionné par l'échelle de temps est adimensionné par l'échelle de temps de réponse viscoélastique $\mu l/G_s$. b. Même jeu de l/V.

Le modèle est construit en utilisant trois éléments : (i) un ressort de longueur s, de longueur au repos s_0 et de raideur k qui tient compter de l'élasticité de membrane ; (ii) un amortisseur visqueux de coefficient de friction φ qui tient compte de la viscosité du fluide ; (iii) une masse ponctuelle m qui tient compte de l'inertie du fluide. Dans modèle de Kelvin-Voigt à inertie, le ressort est en parallèle avec l'amortisseur visqueux, et une masse ponctuelle m est ajoutée en série aux deux



Figure 2.8 – Diagramme de phase des régimes de relaxation de la capsule. Il est obtenu en faisant varier les deux paramètres clé, à savoir le nombre de Laplace *La* et le rapport de confinement a_0/l . Les symboles '+' correspondent à un amortissement pur et les symboles 'o' à des oscillations amorties.

premiers éléments (Figure 3.1).



Figure 3.1 – Modèle de Kelvin-Voigt à inertie, composé d'un ressort de raideur k, un amortisseur visqueux de coefficient de frottement φ et d'une masse m.

Pour décliner le modèle à la présente étude, identifions la longueur *s* du ressort à la demi-longueur longitudinale L_x de la capsule. La raideur de membranne *k* est le module d'Young surfacique de la membrane, qui est égal à $3G_s$ dans le cas de la loi de Skalak. Le coefficient de friction φ est exprimé comme le serait le coefficient de traînée agissant sur une sphère en régime visqueux, de sorte que $\varphi = 6\pi\mu r_{\varphi}$, où la constante r_{φ} est le rayon caractéristique de la boule au sein de laquelle la viscosité influence la dynamique de la capsule. La masse *m* est exprimée comme étant $m = \frac{4}{3}\pi\rho r_m^3$, la constante r_m étant le rayon de la boule pilotant l'évolution temporelle de sa demi-longueur longitudinale L_x est donc

$$m\frac{d^{2}L_{x}}{dt^{2}} + \varphi\frac{dL_{x}}{dt} + k\left(L_{x} - a_{0}\right) = 0.$$
(3.1)

Les solutions de (3.1) dépendent du discriminant $\varphi^2 - 4km$. Nous proposons de plutôt les exprimer comme dépendant du rapport adimensionnel $\zeta = 4km/\varphi^2$ régime purement amorti correspond alors simplement à $\zeta < 1$, le régime critique à $\zeta = 1$ et le régime amorti oscillant à $\zeta > 1$. Sachant que $k = 3G_s$ pour la loi de Skalak de paramètre C = 1, que $\varphi = 6\pi\mu r_{\varphi}$ et que $m = \frac{4}{3}\pi\rho r_m^3$, on trouve

$$\zeta = \frac{\rho G_{\rm s} l}{\mu^2} \left(\frac{4}{9} \frac{r_m^3}{\pi l r_{\varphi}^2} \right) = \frac{La}{La_{\rm c}}.$$
(3.2)

(3.3)

On retrouve le fait que $La = La_c$ quand $\zeta = 1$, et donc

$$La_{\rm c} = \frac{9}{4} \frac{\pi l r_{\varphi}^2}{r_m^3}.\tag{3.4}$$

Par souci de simplicité, on suppose que r_m et r_{φ} dépendent seulement du rapport de confinement a_0/l (et sont donc indépendants du nombre de Laplace *La*). Le modèle prédit ainsi que le nombre de Laplace critique La_c est uniquement fonction explicite du rapport de confinement (c'est-à-dire $La_c = La_c (a_0/l)$).

Les solutions analytiques de l'équation (3.1) sont considérées sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \zeta = 1: \frac{L_{x}(t) - a_{0}}{l} = \left(\alpha \frac{t - t_{b}}{T} + \beta\right) e^{-\frac{t - t_{b}}{\tau_{c}}} \\ \zeta < 1: \frac{L_{x}(t) - a_{0}}{l} = \alpha e^{-\frac{t - t_{b}}{\tau_{short}}} + \beta e^{-\frac{t - t_{b}}{\tau_{long}}} , \qquad t \ge t_{b}, \qquad (3.5) \\ \zeta > 1: \frac{L_{x}(t) - a_{0}}{l} = \alpha e^{-\frac{t - t_{b}}{\tau_{osc}}} \cos\left(\frac{2\pi(t - t_{b})}{T_{osc}} + \varphi_{o}\right) \end{cases}$$

où t_b est la durée d'amorçage de la relaxation, à partir de laquelle le modèle est appliqué, et où les constantes de temps caractéristiques sont les suivantes :

$$\begin{cases} \zeta = 1 : \tau_{c} = \frac{\varphi}{2k} \\ \zeta < 1 : \begin{cases} \tau_{short} = \frac{\zeta \varphi}{2k} \frac{1}{1 + \sqrt{1 - \zeta}} \\ \tau_{long} = \frac{\zeta \varphi}{2k} \frac{1}{1 - \sqrt{1 - \zeta}} \end{cases}, \qquad (3.6) \\ \zeta > 1 : \begin{cases} \tau_{osc} = \frac{\zeta \varphi}{2k} \\ T_{osc} = \frac{\zeta \varphi}{2k} \frac{2\pi}{\sqrt{\zeta - 1}} \end{cases} \end{cases}$$

On voit que toutes les constantes de temps sont proportionnelles au temps critique τ_c . Elles peuvent donc être ré-exprimées en utilisant l'équation (3.2) :

$$\begin{cases} \zeta = 1 : \frac{\tau_c G_s}{\mu l} = \pi \frac{r_{\varphi}}{l} \\ \zeta < 1 : \begin{cases} \frac{\tau_{\text{short}}}{\tau_c} = \frac{La/La_c}{1 + \sqrt{1 - La/La_c}} \\ \frac{\tau_{\text{long}}}{\tau_c} = \frac{La/La_c}{1 - \sqrt{1 - La/La_c}} \\ \zeta > 1 : \begin{cases} \frac{\tau_{\text{osc}}}{\tau_c} = \frac{La}{La_c} \\ \frac{T_{\text{osc}}}{\tau_c} = \frac{2\pi La/La_c}{\sqrt{La/La_c - 1}} \end{cases} \end{cases}$$
(3.7)

Le temps critique τ_c est ainsi proportionnel au temps viscoélastique $\frac{\mu l}{G_s}$. Il en va de même pour toutes les autres échelles de temps : une fois normalisées par τ_c , elles sont uniquement fonction du rapport La/La_c entre le nombre de Laplace de la simulation et le nombre de Laplace critique.

3.2 Ajustement des résultats numériques 3D

Nous ajustons à présent les données numériques 3D en utilisant le modèle de Kelvin-Voigt à inertie pour identifier les valeurs de ses constantes de temps. Une technique de descente de gradient est utilisée pour optimiser l'erreur des moindres carrés. Pour chaque cas simulé numériquement, la courbe L_x/l peut être ajustée en régime purement amorti, critique ou d'oscillations amorties. Le régime choisi est alors le régime dont la somme des moindres carrés est la plus faible. Celle-ci est donnée par

$$S(\theta) = \sum_{i=i_{\min}}^{i_{\max}} \left(\frac{L_x}{l}(t_i) - \frac{L_{x,\text{fit},\theta}}{l}(t_i) \right)^2,$$
(3.8)

où $\{t_{i_{\min}}, ..., t_{i_{\max}}\}$ est l'ensemble des instants discrets de la simulation (avec $t_{i_{\min}} = t_b$). L'optimisation est arrêtée en utilisant le critère $|| \nabla S(\theta) || \le 10^{-4}$.

Des exemples d'ajustement de courbe sont représentés en Figure 3.2, un par régime. Ils correspondent à un rapport de $a_0/l = 0.5$ et à un nombre de Laplace de 10, 84 (valeur du nombre de Laplace critique) et 200. La qualité d'ajustement est excellente dans les trois cas. Dans le cas amorti critique, on trouve $\tau_c G_s/\mu l \approx 3.4$. Dans le cas d'un régime purement amorti à La = 10 (Figure 3.2a), le processus d'identification donne $\frac{\tau_{\text{short}}}{\tau_c} \approx 0.162$ et $\frac{\tau_{\text{long}}}{\tau_c} \approx 21.5$, ce qui indique que la dynamique est gouvernée par l'échelle de temps courte. Dans le cas d'un régime amorti oscillant La = 200 (Figure 3.2c), on trouve $\frac{\tau_{\text{osc}}}{\tau_c} = 2.13$ et $\frac{T_{\text{osc}}}{\tau_c} = 9.20$, ce qui indique



Figure 3.2 – Exemples d'ajustement de l'évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x de la capsule à l'aide du modèle de Kelvin-Voigt à inertie. a. régime purement amorti avec $a_0/l = 0.5$, La = 10. b. régime critique avec $a_0/l = 0.5$, La = 84. c. Régime oscillant avec $a_0/l = 0.5$, La = 200.

à la fois que la dynamique du cas à oscillations amorties est bien plus lente que celle du cas purement amorti et que seules quelques oscillations sont visibles, étant donné qu'elles sont amorties très vite par rapport à leur pseudo-période (et ce en cohérence avec la Figure 3.2c).



Figure 3.3 – Évolution de l'échelle de temps court en fonction du nombre de Laplace *La* pour $a_0/l = 0.5$.
Le modèle peut être utilisé pour étudier la transition entre le régime purement amorti et le régime amorti oscillant en se focalisant sur l'échelle des temps courts τ_{short} , qui est l'échelle de temps pilote pour le régime purement amorti $\zeta < 1$. L'expression de τ_{short} , fournie par le modèle théorique, est donnée par l'équation 3.7. Elle indique que $\frac{\tau_{\text{short}}}{\tau_{c}} \sim 0.5 \frac{La}{La_{c}}$ pou les petits nombres de Laplace et que $\frac{\tau_{\text{short}}}{\tau_{c}} = 1$ au nombre de Laplace critique La_{c} .

Les valeurs simulées de τ_{short} sont comparées avec la prédiction fournie par le modèle analytique pour un rapport de confinement $a_0/l = 0.5$ (cf. Figure 3.3). Elles sont identifiées à l'aide du processus d'optimisation à partir des données numériques 3D pour des nombres de Laplace allant de La = 2 à La = 800 et un un même rapport de confinement $a_0/l = 0.5$ (Figure 2.8). On note que les prédictions théoriques sont conformes aux données obtenues à partir des simulations numériques 3D, l'accord étant même excellent pour $La/La_c > 0.4$. Pour des valeurs de La tendant vers 0, le problème est que l'identification des constantes de temps perd en précision, ce qui explique pourquoi les données se situent au-dessus de la courbe de prédiction. En conclusion, cette comparaison fine montre que le modèle théorique est capable de prédire avec précision les échelles de temps du phénomène de relaxation. Il a l'immenses avantage de fournir ces information clé (τ_c , τ_{short} , ...) en quelques secondes et sans avoir à effectuer la simulation numérique complète d'interaction fluide-structure 3D.

Le modèle théorique donne aussi des informations sur les rayons caractéristiques des sphères d'influence des effets visqueux (r_{φ}) et inertiels (r_m). Ces deux constantes sont obtenues à partir de la valeur ajustée du temps caractéristique τ_c , respectivement en utilisant les équations (3.7) puis (3.4). Pour le rapport de confinement $a_0/l = 0.5$, on trouve $r_{\varphi}/l \approx 1.08$ (i.e. $r_{\varphi}/a_0 \approx 2.16$) et $r_m/l \approx 0.46$ (i.e. $r_m/a_0 \approx 0.92$). On conclut ainsi que les effets visqueux ont une influence s'étendant jusqu'à une distance d'un diamètre du centre, soit une portée deux fois plus longue que celle des effets inertiels. Ces derniers sont loin d'être négligeables, mais leur influence est globalement restreinte au fluide interne.

4 Transferts énergétiques durant la relaxation

Nous proposons enfin une analyse énergétique de la relaxation de la capsule en

détaillant les transferts énergétiques durant le processus. Mais concentrons nous tout d'abord sur l'énergie qui est mise en entrée du système à t = 0. Puisque la capsule pré-déformée est initialement placée dans un fluide au repos, l'énergie initiale est celle stockée dans la membrane élastique de la capsule. L'énergie initiale dans le système fluide-structure est ainsi l'énergie libre de pré-déformation initiale de la membrane $E_m^0 = E_m (t = 0)$ en fonction de la pré-déformation $\Lambda = a/a_0$.



Figure 4.1 – a. Configuration de référence et pré-déformation de la capsule. b. Énergie surfacique libre of pré-déformation w_s^0/G_s dans le plan xOz pour $\Lambda = a/a_0 = 2$. Presque toute l'énergie est stockée près du plan yOz. Les croix (en rouge) correspondent aux points où l'énergie surfacique est minimum.

Afin de généraliser les résultats obtenus pour $\Lambda = 2$, nous avons déterminé l'expression analytique de l'énergie libre initiale de déformation par unité de surface non déformée $w_s^0 = w_s (t = 0)$. Et ce, pour une capsule de configuration de référence sphérique pré-déformée en ellipsoïde de révolution, qui est allongé dans nos simulations ($\Lambda > 1$). Dans le cas de la loi de Skalak, l'expression générale de l'énergie surfacique adimensionnelle w_s^0/G_s pour n'importe quel $\Lambda > 0$ est

$$\frac{w_{\rm s}^0}{G_{\rm s}} = \frac{1}{4} \left(\left(\frac{1}{\Lambda^4} - \frac{2}{\Lambda} \right) \cos^4\theta + \left(\frac{1}{\Lambda^2} - 2\Lambda + \Lambda^2 + \Lambda^4 \right) \sin^4\theta - 2\Lambda^2 \sin^2\theta + 3 - \frac{2}{\Lambda} \right), \tag{4.1}$$

où, pour tout point matériel *M* de la membrane, θ est l'angle orienté depuis l'axe *Ox* jusqu'au vecteur <u>*OM*</u> (cf. Figure 4.1a). L'évolution de w_s^0/G_s en fonction de θ est représentée en Figure 4.1b dans le cas $\Lambda = 2$. Quelle que soit la valeur de $\Lambda > 1$, l'énergie surfacique maximum se situe à "l'équateur" ($\theta = \pm \pi/2$), la valeur aux "pôles" ($\theta = 0 \mod \pi$) étant un maximum local bien plus faible. Elle est minimum aux 4 valeurs d'angles indiquées grâces aux croix (en rouge) dans les Figures 4.1a-b. La majeure partie de l'énergie libre de déformation est donc initialement stockée dans la région équatoriale. L'énergie libre de pré-déformation de la membrane $E_{\rm m}^0$ est ensuite obtenue en intégrant l'énergie surfacique libre de pré-déformation de référence. On obtient

$$\frac{E_{\rm m}^0}{G_{\rm s}a_0^2} = \frac{\pi \left(\Lambda - 1\right)^2}{15\Lambda^4} \left(8\Lambda^6 + 16\Lambda^5 + 12\Lambda^4 - 8\Lambda^3 + 17\Lambda^2 + 6\Lambda + 3\right).$$
(4.2)

La Figure 4.2 représente l'évolution de l'énergie libre de pré-déformation de la membrane E_m^0 en tant que fonction de Λ , telle que prédite par l'équation (4.2). On trouve un parfait accord avec les valeurs simulées grâce au solveur solide Caps3D pour $\Lambda = 0.5$, 0.6, 1.2, 1.5 et 2 (erreur relative d'environ 5×10^{-7}), ce qui valide la formule analytique (4.2). Cette dernière indique comment l'énergie libre de pré-déformation E_m^0 augmente avec le paramètre de pré-déformation Λ (vu que $\Lambda > 1$) et fournit une information sur l'intervalle le plus grand possible dans lequel peut se situer le rapport L_x/a_0 durant tout le processus de relaxation. Par exemple, pour $\Lambda = 2$, l'énergie initialement présente dans le système est égale à $E_m^0/G_s a_0^2 \approx 16$, de sorte que le rapport L_x/a_0 ne peut jamais descendre sous la valeur ≈ 0.43 durant le processus de relaxation tout entier. Cette valeur est en réalité un minorant strict en raison de la dissipation d'énergie par effets visqueux.

Tandis que la capsule se relaxe, le mouvement de la membrane entraîne les fluides (interne et externe) environnants, ce qui conduit à un couplage d'interaction fluide-structure. Les fluides se mettant en mouvement, l'énergie libre de pré-déformation de la membrane E_m^0 est progressivement transformée en énergie cinétique des fluides, laquelle est ensuite dissipée par effets visqueux. L'évolution de la membrane E_m , de l'énergie cinétique des fluides E_c et de l'énergie totale $E_t = E_m + E_c$, est représentée en Figure 4.3 en régime purement amorti (Figure 4.3a) et amorti oscillant (Figure 4.3b).

A noter que la différence $(E_t (t = 0) - E_t (t)) / E_m^0$ correspond à l'énergie dissipée par effets visqueux jusqu'à l'instant *t*. Dans les deux cas, on peut voir que l'énergie totale décroît de façon monotone. En revanche, les échelles de temps caractéristiques de cette décroissance sont très différentes d'un cas à l'autre : 90% de



Figure 4.2 – Énergie de libre de pré-déformation adimensionnelle $E_m^0 / G_s a_0^2$ en tant que fonction du paramètre de pré-déformation $\Lambda = a/a_0$: expression analytique (ligne pleine) et valeurs numériques obtenues avec Caps3D (étoiles).



Figure 4.3 – Évolution temporelle de l'énergie de libre de déformation de la de membrane E_m (ligne pleine) et de l'énergie cinétique du fluide E_c (symboles '+'), normalisée par E_m^0 , pour le rapport de confinement $a_0/l = 0.5$. La ligne en pointillés représente l'énergie totale $E_t = E_m + E_c$, normalisée E_m^0 . a. régime purement amorti (La = 10); b. régime d'oscillations amorties (La = 200).

l'énergie initialement disponible est dissipée en un temps $tG_s/\mu l = 0.75$ dans le cas purement amorti, contre $tG_s/\mu l = 5.2$ dans le cas amorti oscillant. La dissipation visqueuse est donc beaucoup plus efficace dans le premier cas.

Les transferts énergétiques durant la relaxation, eux aussi, diffèrent d'un cas à l'autre. Dans le cas purement amorti (Figure 4.3a), l'énergie de déformation de la membrane est progressivement transformée en énergie cinétique du fluide (à son tour dissipée par effets visqueux), mais cette dernière n'est jamais re-transformée en énergie membranaire. L'énergie cinétique augmente durant l'amorçage de la relaxation et atteint sa valeur maximum (environ 12% de l'énergie disponible) au temps $tG_s/\mu l \approx 0.3$. Et même quand elle décroît, elle puise son énergie de celle de la membrane, qu'elle surpasse au temps $tG_s/\mu l \approx 0.5$. Cela est cohérent avec l'information fournie plus haut (par exemple Figure 2.3), qui a montre les lignes de courant à $tG_s/\mu l = t_b = G_s/\mu l = 0.4$, qui correspond approximativement à l'instant où la vitesse du fluide est maximum. En régime d'oscillations amorties (Figure 4.3b), l'énergie est provisoirement re-transformée en temps qu'énergie mécanique de déformation, ce qui s'observe à partir du temps $tG_s/\mu l = 4$. Les oscillations sont clairement visibles, mais elles sont rapidement atténuées par dissipation visqueuse. La valeur maximum de l'énergie cinétique normalisée du fluide est plus élevée dans le cas amorti oscillant que dans le cas purement amorti, et s'y élève à environ 20% de l'énergie disponible.

5 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre ont été présentées des simulations 3D, puis une modélisation, du processus de relaxation d'une capsule pré-déformée dans un fluide initialement au repos, processus physique dont aucune étude n'avait alors été recensée dans la littérature. Il a tout d'abord été étudié la manière dont l'inertie et le confinement affectent tant l'évolution temporelle de la forme de la capsule que la structure des écoulements des fluides interne et externe. Deux régimes de relaxation ont été identifiés : un régime d'amortissement pur et un régime d'oscillations amorties. Il a été montré que l'évolution du système selon l'un ou l'autre de ces régimes dépend exclusivement de deux paramètres clé indépendants : le nombre de Laplace *La* et le rapport de confinement a_0/l . La transition entre ces deux régimes apparaît à un nombre de Laplace critique qui (de par les hypothèses du modèle) dépend exclusivement du rapport de confinement $La_c = La_c(a_0)$, et dont la valeur augmente avec celui-ci, comme indiqué dans le diagramme de phase (Figure 2.8).

Pour comprendre plus en profondeur les phénomènes physiques qui gouvernent la dynamique de relaxation de la capsule, nous avons étudié les échanges entre l'énergie libre de déformation de la membrane, l'énergie cinétique des fluides et la dissipation visqueuse. Cette analyse a mis en lumière les rôles des échanges énergétiques entre la membrane solide et les fluides, et comment cela peut conduire à l'un ou l'autre des deux régimes observés.

L'étude de l'évolution de la forme de la capsule a aussi montré que des informations clé sur le régime de la dynamique de relaxation pouvaient aussi être obtenues à partir de l'évolution temporelle de la demi-longueur longitudinale L_x . Nous avons ainsi proposé de modéliser la relaxation en utilisant un simple modèle de Kelvin-Voigt assemblé en série avec une masse ponctuelle afin de tenir compte des effets inertiels. Le modèle prédit très bien l'évolution de L_x et permet même de déterminer le type de régime, la valeur du nombre de Laplace critique La_c et toutes les constantes de temps avec une très bonne précision.

Il aurait été intéressant de comparer les résultats de simulations numériques ainsi que ceux issus du modèle de Kelvin-Voigt à inertie avec ceux obtenus expérimentalement en stoppant un écoulement hyperbolique, mais aucune expérience de ce type n'est actuellement recensée dans la littérature. Il sera toutefois intéressant d'aborder la relaxation sous écoulement dans des canaux de formes variées, étant donné que des expériences microfluidiques ont été menées dans différentes configurations de canaux, la plupart à rapports de confinements très élevés (Braunmüller et al., 2011; Kusters et al., 2014). Pour simuler numériquement de telles situations, des stratégies de raffinement du maillage, seront nécessaires afin de trouver le meilleur compromis entre précision et temps de calcul dans le cadre d'un couplage à l'aide de la méthode des frontières immergées. Un exemple de telles simulations et stratégies est abordé au chapitre suivant.

Enfin, les limites du modèles de Kelvin-Voigt ont été trouvées aux très faibles et très forts confinements, respectivement en dessous de $a_0/l = 0.45$ et entre $a_0/l = 0.85$ et $a_0/l = 1$. Pour ce dernier, les courbes montrent le développement d'un second mode, une oscillation de faible amplitude qui se superpose à un régime purement amorti et qui ne traverse pas l'asymptote. Il serait intéressant de modéliser ce second mode.

Chapitre 5

Relaxation de capsules sous écoulement

Après avoir étudié la relaxation d'une capsule dans un fluide au repos, nous nous intéressons à l'effet d'un écoulement extérieur et considérons la relaxation d'une capsule, lorsqu'elle s'écoule dans un microcanal avec une marche. Des résultats expérimentaux ont été précédemment obtenus par Gires et al. (2016) pour des populations de microcapsules à membrane protéique s'écoulant dans un canal microfluidique composé d'un canal carré avec une expansion brusque vers un canal rectangulaire de section deux fois plus grande. Les temps de relaxation mesurés expérimentalement ont été comparés aux temps de relaxation obtenus numériquement en relâchant la capsule telle que déformée dans le canal carré au milieu du canal rectangulaire. Comparer les résultats à une simulation numérique complète de l'écoulement de la capsule dans le canal avec la marche permettrait de déterminer avec précision si la capsule possède ou non une viscosité membranaire. Enfin, Gires et al. (2016) rapportant un faible effet du confinement sur les temps de relaxation, nous ne l'examinons pas et nous focalisons ici sur les effets de l'inertie, qui n'ont pas été étudiés jusqu'ici pour la relaxation sous écoulement.

Réaliser une telle simulation représente un défi sur le plan numérique, en raison du fort confinement de la capsule dans le canal, du besoin d'une technique robuste de remaillage et de la nécessité de simuler l'écoulement de la capsule sur une distance suffisante pour voir les effets de relaxation. Le coût du calcul est amoindri grâce à la méthode IBM localement régulier (qui met en compatibilité la méthode IBM avec le maillage adaptatif) et à la mise en place d'une "fonction d'écrasement" (cf. chapitre 2 section 5) qui force le dé-raffinement loin de la capsule et de l'entrée du canal.



Figure 1.1 – Géométrie du micro-canal composée d'une section carrée $(2l \times 2l)$ s'ouvrant sur une portion co-axiale à section rectangulaire $(4l \times 2l)$.

1 Présentation du problème

1.1 Problème physique

La modélisation de la capsule et du fluide est la même que dans le reste du manuscrit, notamment le chapitre 4.

La capsule est placée dans un microcanal composé d'une portion à section carrée $2l \times 2l$ de longueur L (L/l = 16) connectée en série à une portion coaxiale à section rectangulaire $2l \times 4l$ selon les axes Oy et Oz, respectivement, et de longueur L selon Ox (cf. Figure 1.1). La capsule est initialement positionnée à une distance 2l de l'entrée du canal. Pour des rapports d'aspect $a_0/l > 1$, la capsule est pré-déformée en un ellipsoïde de révolution avant d'être insérée dans le canal (Hu et al., 2012, 2013). Il a été choisi de considérer, dans l'étude, une capsule de rapport d'aspect $a_0/l = 1.1$, pré-déformée en un ellipsoïde de demi-grand axe $1.5a_0$ et de demi-petits axes $a_0/\sqrt{1.5}$. Le repère, dont l'axe Ox est orienté dans le sens de l'écoulement, est centré sur la position initiale du centre de gravité de la capsule. La marche est donc située à x/l = 14.

La capsule est ainsi soumise à un écoulement de Poiseuille de vitesse moyenne V, imposé en entrée. L'échelle de temps caractéristique est l/V, donnant le temps adimensionnel $\tilde{t} = tV/l$. En conditions de Stokes, l'échelle de pression est $\mu l/V$, donnant la pression adimensionnelle $\tilde{p} = pl/\mu V$. L'adimensionnement est sinon identique à celui dans le chapitre 4. Les conditions aux limites imposées aux orifices du canal sont une condition de Dirichlet pour la vitesse et une condition de

Neumann pour la pression en entrée, et vice-versa en sortie.

Les nombres adimensionnels qui pilotent l'écoulement de la capsule dans le canal carré sont le rapport d'aspect a_0/l , le nombre capillaire $Ca = \mu V/G_s$, ratio entre les forces élastiques et les forces visqueuses, et le nombre de Reynolds $Re = \rho V l/\mu$. Dans cette étude, le nombre capillaire a été fixé à Ca = 0.05, et le nombre de Reynolds varie : Re = 0 (écoulement de Stokes), 1 et 15.

On s'attache tout d'abord à décrire le régime de Stokes, qui a été étudié expérimentalement par Gires et al. (2016) et dont la partie en canal droit a également été étudiée numériquement par Hu et al. (2012), Hu et al. (2013), Krüger et al. (2014), Kusters et al. (2014), Wang et al. (2016).

Spécificités du point de vue numérique

Pour garantir la stabilité de la simulation, la vitesse moyenne de l'écoulement en entrée, initialement nulle, est augmentée linéairement jusqu'au temps adimensionnel $\tilde{t} = 1$, puis maintenue à la valeur nominale de *V*. Ce temps est choisi de manière à garantir que la capsule ait atteint sa forme stationnaire à une distance minimum de $2a_0$ de la marche. Pour déterminer si l'état stationnaire est atteint, nous vérifions que la variation d'aire de la membrane de capsule, par rapport à la configuration de référence, varie, sur une unité de temps $\tilde{t} = 1$, de moins de 5×10^{-4} pour les cas Re = 0 et Re = 1 et de moins de 2×10^{-3} pour Re = 15.

Afin d'obtenir les résultats plus rapidement pour Re = 1 et Re = 15, une simulation est d'abord exécutée en régime de Stokes, car elle y transite le plus vite vers sa forme stationnaire. A $\tilde{t} = 5$, elle est redémarrée en imposant une rampe de vitesse jusqu'à la valeur moyenne V désirée⁽¹⁾. Pour s'assurer que la capsule atteigne un état stationnaire avant la marche, la capsule est reculée d'une unité de longueur *l* avant de relancer le calcul. Pour pouvoir comparer les résultats à ceux d'une simulation sans redémarrage, le temps de la simulation redémarrée est avancé de $5l/V - l/1.21V \approx 4.17l/V^{(2)}$.

Les temps de simulation sont également réduits à l'aide de la fonction d'écrasement (cf. chapitre 2). La figure 1.2 représente la structure du maillage et la loca-

^{1.} La rampe en vitesse est 100 fois plus raide que précédemment. Pour éviter une relaxation excessive de la capsule lors de cette rampe, on applique la même rampe aux forces IBM.

^{2.} La vitesse de la capsule étant environ égale à 1.21*V* en régime de Stokes.



Figure 1.2 – Représentation dans trois plans de coupes orthogonaux du champ d'indicateur d'interaction localisant la membrane de la capsule pour la méthode IBM localement régulier, et du maillage eulérien adaptatif dans le plan *xOz*.

lisation de la capsule dans le fluide pour la méthode IBM à $\tilde{t} = 13.17$. La capsule a alors fini de traverser la marche (depuis $\tilde{t} \approx 12.98$) et se met à traverser le canal rectangulaire. Le champ indicateur interaction c_{int} compte le nombre de nœuds lagrangiens interagissant avec un nœud eulérien donné (cf. chapitre 2, section 5). Il est à valeurs entières, nulles hors du tampon optimal (ie. la réunion des supports IBM centrés aux nœuds lagrangiens) et strictement positives sur celui-ci. A $\tilde{t} = 13.17$, son maximum est max $_{\mathcal{E}}c_{int} = 22$. Le maillage est raffiné au maximum à $\Delta \equiv \Delta_{min} = 1/32$ sur le tampon optimal. En revanche, loin de la capsule, le dé-raffinement est forcé par la fonction d'écrasement. D'autres zones de dé-raffinement se produisent naturellement en dehors du tampon optimal, notamment dans le cœur liquide où les gradients de vitesse sont faibles par endroits.

2 Relaxation d'une capsule en écoulement de Stokes

La dynamique d'écoulement de la capsule suit 7 étapes :

1. Elle se relaxe rapidement par rapport à sa pré-déformation ⁽³⁾ jusqu'à $\tilde{t} \approx 3$;

^{3.} Presque comme dans un fluide au repos vu que le fluide vient à peine de débuter sa transition

2. Elle subit l'écoulement de Poiseuille (graduel pour $\tilde{t} < 1$ puis constant), jusqu'à atteindre sa forme stationnaire à $\tilde{t} \approx 7.79$;

3. Elle s'écoule de façon stationnaire jusqu'à arriver à une distance $2a_0$ de la marche (x/l = 11.8) à $\tilde{t} \approx 8.94$;

4. Elle approche la marche, commençant à subir son influence, jusqu'à ce que l'avant de la capsule arrive au niveau de la marche à $\tilde{t} \approx 10.77$;

5. Elle subit l'expansion du canal à mesure qu'elle traverse la marche jusqu'à ce que l'arrière de la capsule soit sorti du canal à section carrée, ce qui se produit à $\tilde{t} \approx 12.98$, aussi noté $\tilde{t}_e = t_e V/l$ (Gires et al., 2016);

6. Elle se relaxe sous écoulement au sens de Gires et al. (2016) dans le canal rectangulaire, ne subissant plus la contrainte de confinement selon l'axe Oz du canal carré, jusqu'à $\tilde{t} \approx 19.89$, où le régime stationnaire est atteint;

7. Elle suit un écoulement stationnaire dans le reste du canal rectangulaire.

Les temps de transition entre ces étapes serviront de référence lors de la comparaison avec les autres régimes (Re = 1 et Re = 15).

2.1 Forme de la capsule lors de son écoulement dans le canal carré

Pour valider la simulation numérique dans la partie à carrée du canal, les résultats obtenus en régime de Stokes sont comparés à ceux obtenus par Hu et al. (2013) en utilisant le solveur fluide-structure Caps3D couplant la méthode des intégrales de frontières (BIM) à celle des éléments finis (FEM) (Walter et al., 2010). L'évolution de la forme de la capsule jusqu'à $\tilde{t} = 9$ est montrée en Figure 2.1.

On voit que l'état stationnaire est atteint un peu avant $\tilde{t} = 8$. On peut le vérifier avec l'évolution de la variation relative de l'aire de la membrane et son taux d'accroissement sur une durée adimensionnelle de 1, représentés en figure 2.2.

La Figure 2.2a montre l'évolution de l'aire de la membrane au cours du temps à travers sa variation relative par rapport à la configuration de référence. On voit que l'aire se stabilise un peu avant $\tilde{t} = 8$, à une valeur proche de celle obtenue en canal droit infiniment long par Hu et al. (2012) et Hu et al. (2013). Un très bon accord est obtenu, la variation d'aire étant de 14.1% dans nos simulations et de 14.9% dans la simulation de Hu et al. (2012) et Hu et al. (2013). Par ailleurs, l'aire est quasiment la même pour la simulation redémarrée (pointillés épais) que pour la simulation complète (ligne pleine fine), ce qui contribue à valider la procédure



Figure 2.1 – Evolution de la forme de la capsule dans le canal carré : profil de la capsule dans le plan xOz à différents instants allant de $\tilde{t} = 0$ à $\tilde{t} = 9$.



Figure 2.2 – Évolution temporelle de la variation relative d'aire de la membrane $(S(\tilde{t}) - S_0) / S_0$ et comparaison aux résultats de Hu et al. (2013) et (a) de la variation d'aire $(S(\tilde{t}) - S(\tilde{t} - 1)) / S_0$ au cours d'un intervalle de temps adimensionnel de longueur 1 (b). Les symboles + représentent l'atteinte de l'état stationnaire.



Figure 2.3 – Profil de la capsule dans le plan xOz à l'état stationnaire à $\tilde{t} = 8$: a. Comparaison de la simulation complète avec les résultats de Caps3D (Hu et al., 2013); b. Superposition de la simulation complète avec la simulation redémarrée.

de redémarrage. La Figure 2.2b montre l'évolution du taux d'accroissement de l'aire de la membrane sur une unité de temps adimensionnelle. On voit que le critère de convergence est atteint à $\tilde{t} \approx 7.79$ pour la simulation complète et vers $\tilde{t} \approx 7.2$ pour la simulation redémarrée. Dans les deux cas, l'état stationnaire est atteint avant que la capsule n'arrive à un diamètre $2a_0$ de la marche, qui se produit à $\tilde{t} \approx 8.94$: c'est la **phase d'approche** de la marche. Au-delà de la validation, on constate sur la Figure 2.2a qu'en termes de variation d'aire de la membrane, l'état stationnaire est environ 2.4 fois plus déformé que l'état ellipsoïdal initial, pour lequel la variation relative d'aire n'est que de 6%.

Il s'agit à présent de valider l'état stationnaire en canal carré. La figure 2.3 représente les simulations complète, redémarrée et de Hu et al. (2013) deux à deux superposées. La simulation complète et la simulation redémarrée sont prises à $\tilde{t} = 8$. Le référentiel est celui du centre de gravité *G* de chaque capsule.

La Figure 2.3a représente la superposition entre la simulation complète et celle de Hu et al. (2012)/Hu et al. (2013)/Gires et al. (2016). Les résultats concordent très bien sur presque toute la membrane, la distance de Hausdorff modifiée calculée par méthode de projection ⁽⁴⁾ valant $d_{H_m,p} \approx 8 \times 10^{-3}$, ce qui valide l'état stationnaire de la simulation complète. La qualité de l'accord est toutefois réduite près des bords du parachute arrière de la capsule (Hu et al., 2013), ce qui donne une distance de Hausdorff (calculée par la même méthode) de $d_{H,p} \approx 5 \times 10^{-2}$. La Fi-

^{4.} cf. Chapitre 2 section 6.



Figure 2.4 – Coupes de relaxation sous écoulement, et supersposition avec la Figure 2 de Gires et al. (2016). En bleu, les coupes aux temps numériques non corrigés. En mauve, les coupes aux temps numériques corrigés.

gure 2.3b représente la superposition entre la simulation complète et la simulation redémarrée. Les deux sont en parfait accord ($d_{\rm H,p} \approx 5 \times 10^{-3}$ et $d_{\rm H_m,p} \approx 5 \times 10^{-4}$), ce qui valide la procédure de redémarrage.

2.2 Forme, longueur, vitesse, énergie et tensions de la capsule lors de son écoulement dans le canal avec marche

Après l'atteinte de l'état stationnaire, la capsule approche puis traverse la marche, suite à quoi elle se relaxe. Ces trois étapes sont illustrées par la Figure 2.4, où l'on superpose les résultats de la simulation numérique redémarrée avec les résultats expérimentaux de Gires et al. (2016).

Le fond de plan constitue les résultats de Gires et al. (2016). On y distingue quatre coupes de la capsule durant les différentes étapes de son écoulement : une à l'approche de la marche, l'autre à sa traversée et les deux restantes lors de la relaxation. Les coupes bleues représentent les résultats de nos simulations. Dans la photographie expérimentale, l'abscisse de la marche, la portion de canal à section carrée et la première coupe sont utilisées pour caler la géométrie du canal numérique et retrouver le premier instant adimensionnel $\tilde{t}_1 \approx 10.26$. La seconde coupe expérimentale est utilisée de façon incrémentale par rapport à la première afin de retrouver l'échelle de temps convective après avoir trouvé le temps numérique correspondant $\tilde{t}_2 \approx 12.56$. Les valeurs \tilde{t}_1 et \tilde{t}_2 sont celles optimisant la correspondance entre simulation et expérience. Sachant que la durée réelle entre les deux premiers clichés est $t_2 - t_1 = 84$ ms dans l'expérience de Gires et al. (2016), on retrouve l'échelle de temps convective : $l/V \approx 36.5$ ms. Cette échelle est ensuite utilisée au prorata des durées réelles $t_3 - t_1 = 202$ ms et $t_4 - t_1 = 332$ ms pour retrouver les instants adimensionnels $\tilde{t}_3 \approx 15.79$ et $\tilde{t}_4 \approx 19.35$. Enfin, un facteur correctif de 1.02 est appliqué à $\tilde{t}_3 - \tilde{t}_1$ et à $\tilde{t}_4 - \tilde{t}_1$ pour tenir compte du fait que le rapport de largeur selon Oz du canal de Gires et al. (2016) entre la partie rectangulaire et la partie carrée (et donc le ralentissement du fluide) est de 1.96, et non de 2 comme dans nos simulations. On trouve les temps corrigés $\tilde{t}_{3,corr} \approx 15.90$ et $\tilde{t}_{4,corr} \approx 19.54$.

Globalement, la correspondance est très bonne entre les coupes numériques aux quatre instants \tilde{t}_1 , \tilde{t}_2 , $\tilde{t}_{3,corr}$ et $\tilde{t}_{4,corr}$ et les clichés de Gires et al. (2016) aux instants t_1 , t_2 , t_3 et t_4 . On note toutefois que la capsule simulée a des courbures maximum plus élevées, ce qui traduit dans l'expérience l'existence d'une raideur de flexion. Enfin, on note que la membrane de Gires et al. (2016) possède une viscosité de membrane, ce qui se traduit par la plus lente adoption d'une forme arrière convexe que dans nos simulations. Les auteurs ont eux-mêmes fait ce constat et ont estimé la viscosité de membrane après comparaison avec Diaz et al. (2001).

Une fois la membrane relaxée, elle a atteint sa forme finale et s'écoule de façon stationnaire dans le canal rectangulaire. La Figure 2.5 représente l'évolution de la longueur L_x de la capsule selon O_x entre le temps $\tilde{t} = 3$ et la fin de la simulation. Les numéros correspondent aux étapes décrites en introduction de section. Par souci de clarté, la première des 7 étapes n'est pas représentée. La longueur en canal carré est stabilisée (étape 2) bien avant que l'état stationnaire ne soit atteint (étape 3). Elle diminue en fin de l'approche de la marche (étape 4) et durant son franchissement (étape 5). Elle atteint un minimum global en début de relaxation au sens de Gires et al. (2016) (étape 6), puis tend de façon monotone vers sa valeur asymptotique. La longueur finale $L_x \approx L_{x,\infty}$ ne diffère de celles de Gires et al. (2016) que de 0.02*l*. Quant à la largeur finale de la capsule L_z selon Oz, elle ne diffère que de 0.004*l* de celle, asymptotique, des simulations numériques de Gires et al. (2016), soit une excellente concordance. Enfin, la courbe de la simulation redémarrée est en excellent accord avec celle de la simulation complète.

La Figure 2.6 représente l'évolution de la vitesse (du centre de gravité G) de la capsule. On constate que la vitesse à l'état stationnaire en canal carré est de



Figure 2.5 – Évolution temporelle de la longueur de la capsule en régime de Stokes dans la simulation complète (ligne pleine fine). Comparaison avec la simulation redémarrée (ligne épaisse en pointillés). Les lignes verticales délimitent les étapes de la dynamique de la capsule dans le canal avec marche.



Figure 2.6 – Évolution temporelle de la vitesse de la capsule en régime de Stokes. Comparaison avec la simulation redémarrée. Les lignes verticales délimitent les étapes de la dynamique de la capsule dans le canal avec marche.

 $V_{\text{caps}} = 1.21V$ dans notre simulation, ce qui est en très bon accord avec le $V_{\text{caps}} = 1.2V$ dans la simulation BIM-FEM en canal carré de Hu et al. (2012). Par ailleurs, la courbe de vitesse de la simulation redémarrée se superpose très bien avec celle de la simulation complète. Enfin, au-delà de la validation, on constate une baisse presque monotone de la vitesse à la traversée de la marche (étape 5), en début de relaxation (étape 6), à un petit rebond dont le maximum se produit à $\tilde{t} \approx 13.24$ juste après $\tilde{t} = \tilde{t}_e \approx 12.98$.

Une autre donnée à observer est l'énergie libre de déformation, qui traduit le degré global de déformation de la membrane. Elle est représentée en Figure 2.7.



Figure 2.7 – Évolution temporelle de l'énergie de la membrane en régime de Stokes dans la simulation complète (ligne fine pleine). Comparaison avec la simulation redémarrée (ligne épaisse en pointillés). Les lignes verticales délimitent les étapes de la dynamique de la capsule dans le canal avec marche.

La membrane perd 85% de son énergie entre l'état stationnaire du canal carré et celui du canal rectangulaire, passant de $E_m/G_s a_0^2 \approx 0.74$ à $E_m/G_s a_0^2 \approx 0.11$. Le retrait des contraintes de confinement selon une seule direction (Oz) suffit donc à ce que la membrane soit globalement beaucoup moins déformée. La transition n'est toutefois pas monotone, l'écoulement convectif redonnant de l'énergie mécanique à la membrane lors de son expansion selon L_z en fin d'étape 5 - début d'étape 6. L'énergie atteint alors un maximum local de $E_m/G_s a_0^2 \approx 0.68$ à $\tilde{t} \approx 13.24$, mais ce pic ne dure pas, le maximum n'étant approché à 0.01 unités près qu'entre $\tilde{t} \approx 13.17$ et $\tilde{t} \approx 13.31$. Sur les Figures 2.5 et 2.7, les données caractérisant l'état de la capsule subissent des variations particulières peu après $\tilde{t} = \tilde{t}_e \approx 12.98$, c'est-à-dire en tout début de relaxation sous écoulement (selon Gires et al. (2016)). Nous focalisons donc la suite nos observations en conditions de Stokes sur cette courte phase particulière, plus précisément à $\tilde{t} = 13.17$ (9 unités de temps post-redémarrage), pour lequel nous avons des données détaillées sur la membrane et le fluide.

La figure 2.8 représente l'état de la membrane à l'instant $\tilde{t} = 13.17$. Sur la figure 2.8a, on observe les valeurs des tensions négatives $T_{\text{neg}} \stackrel{\triangle}{=} \min(T_{\min}, 0)$, où $T_{\min} \leq T_{\max}$ sont les deux valeurs propres du tenseur des tensions \underline{T} . Les tensions sont normalisées par G_s . On constate que $|T_{\text{neg}}| / G_s << 1$ partout sauf sur la partie des bords du parachute arrière située près du plan *xOy*. Comme de plus la membrane est en grandes déformations (ie. max { $|T_{\min}|, |T_{\max}|$ }/ $G_s = O(1)$), on a donc $T_{\max}/G_s = O(1)$. La membrane est donc sous tension presque partout, dans une ou deux directions, et en compression presque nulle part. La figure 2.8b



Figure 2.8 – Représentation 3D de l'état de la membrane à $\tilde{t} = 13.17$: a. tensions négatives normalisées $T_{\text{neg}}/G_{\text{s}}$ et b. charges normales normalisées $q_n a_0/G_{\text{s}}$.

montre la charge normale ⁽⁵⁾. Malgré quelques artefacts numériques ⁽⁶⁾, on voit que $q_n < 0$ au centre du parachute. A contrario, on a $q_n > 0$ sur la partie des bords du parachute située près du plan *xOz* et qu'à cet endroit, $|q_n|$ est maximum. Cela suggère que par rapport au cœur liquide, le fluide externe est en surpression près du centre du parachute, et en dépression près de ses bords. Il convient donc de s'intéresser au champ fluide proche de la capsule.

2.3 Champs de vitesse et pression

Les deux avantages de notre solveur numérique en régime de Stokes, par rapport aux moyens utilisés par Gires et al. (2016), sont d'une part qu'il rend fidèlement compte de la géométrie du canal, notamment de celle de la marche, et d'autre part qu'il permet une visualisation complète du champ fluide. On peut ainsi espérer comprendre en détail les interactions fluide-structure avant et pendant la relaxation de capsule sous écoulement. Dans la continuité de ce qui précède, on s'intéresse au champ fluide à $\tilde{t} = 13.17$.

Le franchissement de la marche par la capsule génère une forte perturbation du champ fluide, qui perdure jusqu'au début de la relaxation. La Figure 2.9 montre sur le plan de coupe xOz les lignes de courant dans une portion de canal conte-

^{5.} C'est-à-dire la composante q_n selon la normale locale sortante <u>n</u> de la charge surfacique <u>q</u> exercée par le(s) fluide(s interne et externe) sur la membrane.

^{6.} Dus au non respect de la règle $h \le \Delta/4$, (cf. chapitre 2, section 2).

nant la marche, à deux instants différents. La Figure 2.9a correspond à l'instant $\tilde{t} = 1$. A cet instant, la capsule est encore trop loin de la marche pour y induire une perturbation d'écoulement significative⁽⁷⁾. L'écoulement du fluide près des arêtes de la marche d'équation x/l = 14 et $z/l = \pm 1$ se traduit par une chute locale de pression. Les valeurs numériques (non représentées) indiquent que la vitesse maximum transverse max $\Omega_{c} \cap xO_{z} \mid v_{z} \mid \approx 0.46V$ se produit près de ces arêtes (à $(x/l, z/l) \approx (14.3, \pm 0.95)$) et que la pression y atteint un minimum local : $\tilde{p}(14, 0, \pm 1) \approx 26.6$, contre $\tilde{p}(14, 0, 0) \approx 37.5$ (sur l'axe central) et $\tilde{p}(14,0,\pm 2) \approx 32.6$ (aux bords). A titre indicatif, les données (non représentées) de fin de relaxation ⁽⁸⁾ indiquent un différentiel de pression $\Delta P.l/\mu V \approx 150$ entre l'amont x/l = -2 et l'aval x/l = 30 du système microfluidique complet.⁽⁹⁾ La Figure 2.9b représente les lignes de courant à l'insant t = 13.17, c'est-à-dire juste après l'instant $\tilde{t}_e \approx 12.98$ où la capsule achève de franchir la marche. Toutes les lignes de courant représentées se décomposent en trois parties : une partie amont et une partie aval dans le fluide externe, séparées par une partie intermédiaire située dans le cœur liquide et le traversant de part en part, presque horizontalement. Cela montre d'une part que tout le débit du canal convecte la capsule, que la vitesse au sortir de la marche est plus orientée selon l'axe Ox en présence de la capsule à $\tilde{t} = 13.17$ qu'en son absence à $\tilde{t} = 1$. Cela suggère que la capsule s'éloigne plus rapidement de la marche que le reste du temps, ce qui est conforme au pic de vitesse constaté en figure 2.6.

Cet éloignement rapide impacte le fluide environnant. La Figure 2.10 représente les composantes v_x et v_z du champ de vitesse fluide \underline{v} dans le plan xOz à $\tilde{t} = 13.17$.⁽¹⁰⁾ La composante v_x atteint un maximum local du côté interne des bords du parachute, ce qui confirme qu'ils s'éloignent rapidement la marche. De même, $|v_z|$ est maximum de leur côté externe, en accord avec la Figure 2.9b. Cette

^{7.} La perturbation reste faible jusqu'à ce que la capsule soit à distance $2a_0$ de la section d'équation x/l = 12, ce qui se produit jusqu'à à $\tilde{t} = 7.3$, soit juste après que la simulation redémarré ait atteint le critère de convergence et peu avant que la simulation complète ne l'atteigne.

^{8.} Instant où la capsule n'est que très peu déformée et donc influence le moins le fluide

^{9.} Cette valeur est comparable au $\Delta P.l/\mu V \approx 170$ que l'on pourrait estimer analytiquement en traitant séparément le canal carré et le canal rectangulaire sans tenir compte de l'effet de la marche car tout comme pour un canal carré, cela est calculable analytiquement.).

^{10.} La vitesse v_y est théoriquement nulle sur *xOz*, par symétrie du problème. Numériquement on a max_{*E*} | v_y | < 0.01.



Figure 2.9 – Lignes de courant (-) dans le plan de coupe xOz au voisinage de la marche en conditions de Stokes : a. En l'absence de capsule, au temps $\tilde{t} = 1$; b. Avec présence de la capsule (-), au temps $\tilde{t} = 13.17$.



Figure 2.10 – Champ de vitesse dans le plan *xOz* en conditions de Stokes au temps $\tilde{t} = 13.17$: a. v_x et b. v_z . L'échelle va de $-V_{\text{max}}$ à $+V_{\text{max}}$, où $V_{\text{max}}/V \approx 2.09$.

convergence des lignes de courant et leur éloignement de la marche suggèrent la présence d'une dépression encore plus forte qu'en l'absence de la capsule.

La Figure 2.11 représente la pression dans le plan xOz à l'instant $\tilde{t} = 13.17$. On remarque une nette démarcation entre le cœur liquide et le fluide externe, ce qui signifie un saut de pression à la traversée de la membrane sur la plupart des points de sa coupe dans le plan xOz. La pression adimensionnelle est quasiuniforme dans tout le cœur liquide (dans cette coupe, \tilde{p} varie entre 49 et 51), le maximum se situant du côté interne des bords du parachute. De l'autre côté de la membrane, on enregistre une chute de pression dont le minimum est presque aussi bas que la section aval du canal ($\tilde{p}(x/l \equiv 30) \equiv 0$)⁽¹¹⁾ : par exemple, dans

^{11.} Des pressions négatives tombant jusqu'à $\tilde{p} \approx -6\mu V/l$ ont même été trouvées hors du plan *xOz*, mais il s'agit probablement d'artefacts numériques car elles sont localisées très près de la membrane.



Figure 2.11 – Représentation de la pression dans le plan *xOz* au temps $\tilde{t} = 13.17$. L'échelle va de p_{\min} à p_{\max} , où $\tilde{p}_{\min} = 0$ et $\tilde{p}_{\max} \approx 168$.

le fluide externe on a $\tilde{p}(14,0,\pm 1.15) \approx 3$, tandis que dans le fluide interne on a $\tilde{p}(14.3,0,\pm 1.15) \approx 51$. Tout comme aux pointes d'une capsules en relaxation dans un fluide au repos⁽¹²⁾, l'extension de la membrane sur les bords du parachute définis par $X_{1,\min} = \min_{\mathcal{L}} (X_1)$ génère une forte différence de pression entre les fluides internes et externes voisins. Cela renforce considérablement la chute de pression près des arêtes $(x/l, z/l) = (14, \pm 1)$ déjà constatée dans le fluide non perturbée. La dépression engendrée par la capsule s'étend jusqu'aux arêtes $(x/l, z/l) = (14, \pm 2)$, avec $\tilde{p}(14, 0, \pm 2) \approx 25$. A contrario, ce même raisonnement montre que la concavité de la capsule est liée à une nette augmentation de la pression au centre de la marche par rapport à l'écoulement non perturbé : $\tilde{p}(14,0,0) \approx 56$. Cela confirme que l'écoulement central sortant du canal carré est moteur d'avancée de capsule et de l'extension de sa membrane, qui à leur tour engendrent de considérables chutes de pressions près des bords de la marche.

3 Etude de l'effet de l'inertie sur la relaxation de la capsule en écoulement

3.1 Validation des résultats en régime de Navier Stokes

La Figure 3.1 représente l'évolution de l'aire de la membrane *S* dans les régimes de Stokes et Navier-Stokes relativement à sa valeur au repos *S*₀, ainsi que son taux de variation sur une durée adimensionnelle de 1, ce qui permet de voir quand l'état stationnaire est atteint. La Figure 3.1a montre que l'aire de la membrane varie de façon plus importante dans le cas Re = 15 et est globalement plus élevée qu'en conditions de Stokes ou à Re = 1 à partir de la fin de traversée de la marche. La Figure 3.1b montre que le critère de convergence $|(S(\tilde{t}) - S(\tilde{t} - 1))/S_0| < 2 \times 10^{-3}$ à Re = 15 est atteint vers $\tilde{t} = 8.5$, soit avant

^{12.} cf. chapitre 4



Figure 3.1 – Influence de l'inertie sur a. l'évolution temporelle de la variation relative d'aire de la membrane $(S - S_0)/S_0$ et b. la variation d'aire $|((S - S_0)/S_0)(\tilde{t}) - ((S - S_0)/S_0)(\tilde{t} - 1)|$ au cours d'un intervalle de temps $\tilde{t} = 1$. Le signe + indique l'instant où le régime stationnaire est atteint.

son début d'approche de la marche, $\tilde{t} = 8.92$.⁽¹³⁾ L'état stationnaire est donc bien atteint. Plus généralement, le critère d'atteinte de l'état stationnaire est vérifié suf-fisamment en amont de la marche.

3.2 Influence de l'inertie sur la relaxation de la capsule

La Figure 3.2 représente l'évolution de la longueur de la capsule à partir de l'état stationnaire atteint dans le canal droit (étapes 4 à 7), pour différents régimes. Le nombre de Reynolds Re = 1 donne lieu à une évolution très proche du régime de Stokes Re = 0. Au contraire, la courbe correspondant à Re = 15 s'en éloigne, modérément lors des étapes 3 et 4 (Carroll and Gupta, 2016) mais de façon importante lors de la relaxation elle-même (étape 6) : le processus est plus lent et comporte des oscillations. L'effet de l'inertie sur l'évolution de L_x est donc qualitativement le même que dans le problème de relaxation dans un fluide au repos (cf. chapitre 4). L'état stationnaire n'est cependant pas encore atteint pour Re = 15. Si le critère de convergence $|S(\tilde{t}) - S(\tilde{t} - 1)| / S_0 < 2 \times 10^{-3}$ peut convenir en canal à section carrée, ce n'est pas le cas en section rectangulaire. La simulation

^{13.} Ce temps est très proche du temps de transition $\tilde{t} = 8.94$ en conditions de Stokes. Cela est dû au fait que la longueur et la vitesse à Re = 15 est très proches de celles à Re = 0 (cf. Figures 3.2 et 3.3 plus loin). Ce n'est d'ailleurs pas surprenant : Carroll and Gupta (2016) montrent déjà que la vitesse varie très lentement en fonction de Re.



Figure 3.2 – Comparaison de l'évolution temporelle de la longueur L_x de la capsule pour différents nombres de Reynolds : Re = 0, 1 et 15.

est en réalité trop courte pour prétendre avoir atteint l'état stationnaire et aurait due être effectuée sur un temps plus long.

La Figure 3.3 représente l'évolution de la vitesse de la capsule à partir de l'état stationnaire en canal droit (étapes 2 à 7), pour différents régimes. La vitesse ne dépend que très peu de *Re* et s'ajuste rapidement à la géométrie, ce qui montre la prédominance de la convection. De plus, la vitesse de la capsule est quasiment la même pour les 3 régimes (Carroll and Gupta, 2016), ce qui implique aussi que c'est le cas pour la position de la capsule. Enfin, les figures 3.2 et 3.3 justifient a posteriori l'identité des temps de transition. Par exemple, l'approche de la marche pour *Re* = 15 débute à $\tilde{t} \approx 8.92$, contre $\tilde{t} \approx 8.94$ en conditions de Stokes, ce qui confirme donc que pour *Re* = 15, l'état stationnaire en canal carré a été atteint avant l'approche de la marche.

La Figure 3.4 représente l'évolution de l'énergie pour les différents régimes. Comme pour la relaxation dans un fluide au repos, on constate que l'inertie engendre des échanges (supplémentaires) d'énergie du fluide vers la membrane.

3.3 Modèle de Kelvin-Voigt appliqué à la relaxation sous écoulement

On introduit ici une variante du modèle de Kelvin-Voigt inertiel (KV-m) introduit au chapitre 4 pour modéliser l'évolution de la longueur L_x de la capsule. Cette variante se rapproche plus de celle utilisée par Gires et al. (2016). Notamment, on



Figure 3.3 – Comparaison de la vitesse de la capsule pour différents nombres de Reynolds : Re = 0, Re = 1 et Re = 15.



Figure 3.4 – Comparaison de l'évolution de l'énergie mécanique de la membrane entre les régimes de Stokes et de Navier-Stokes.

impose la valeur initiale de la courbe ajustée, ce qui réduit le modèle d'un degré de liberté et facilite donc l'ajustement des moindres carrés, tout en ne perturbant que de façon négligeable la qualité de celui-ci. Il reste toutefois deux différences avec le modèle de Gires et al. (2016) :

1. On généralise le modèle de Gires et al. (2016) aux trois régimes, le seul régime critique ne pouvant décrire correctement les oscillations à nombre de Reynolds Re = 15 constatées en Figure 3.2;

2. On choisit d'ajuster la courbe L_x non plus à partir de $\tilde{t} = \tilde{t}_e \approx 12.98$ (Gires et al., 2016), mais à partir de $\tilde{t} = \tilde{t}_b \approx 13.81$, quand dL_x/dt est maximum. Nous avons montré précédemment qu'à $\tilde{t} \approx 13.17 > \tilde{t}_e$ et donc a fortiori à $\tilde{t} = \tilde{t}_e$, la capsule interagit encore trop avec la marche par l'intermédiaire du fluide.

Ces trois choix impactent l'équation de la solution au modèle. Pour des raisons de concision, on ne donne que l'exemple du régime purement amorti, qui comporte quatre paramètres⁽¹⁴⁾

$$\frac{L_{x,\text{fit}}(t)}{l} = \alpha e^{-\frac{t-t_{b}}{\tau_{\text{short}}}} + \left(\frac{L_{x}(t_{b}) - L_{x,\infty}}{l} - \alpha\right) e^{-\frac{t-t_{b}}{\tau_{\text{long}}}} + \frac{L_{x,\infty}}{l}.$$
(3.1)

Les paramètres à ajuster sont le temps court τ_{short} , le temps long τ_{long} , la longueur stationnaire en canal rectangulaire $L_{x,\infty}$ et le paramètre α .

La Figure 3.5 représente l'ajustement des courbes de L_x à partir de $\tilde{t} = \tilde{t}_b$. Pour des raisons de concisions, de focalisation sur l'étude de l'effet de l'inertie et de mise en cohérence avec de l'étude sur la relaxation dans un fluide au repos, on se restreint aux cas Re = 1 et Re = 15. Cela est permis par la proximité entre les courbes L_x pour Re = 0 et Re = 1.

Pour Re = 1, l'ajustement est quasi-parfait. On en trouve le temps caractéristique $\tau_{\text{short}}V/l = 0.32$. En échelle de temps viscoélastique cela donne $\tau_{\text{short}}G_s/\mu l =$ 6.34. Pour Re = 15, l'ajustement reste de bonne qualité sur l'intervalle de temps choisi et on trouve $\tau_{\text{osc}}V/l = 0.92$, soit $\tau_{\text{osc}}G_s/\mu l = 18.36$, et $T_{\text{osc}}V/l = 3.29$, soit $T_{\text{osc}}G_s/\mu l = 65.73$. Cependant, il a été vu en figure 3.2 que pour Re = 15, l'état sationnaire n'était pas atteint en fin de simulation en canal rectangulaire. Le modèle de Kelvin-Voigt ne décrit donc que la première partie de la dynamique pour ce nombre de Reynolds.

^{14.} Soit autant que dans le modèle KV-m pour la relaxation dans un fluide au repos



Figure 3.5 – Ajustement des courbes de L_x des simulations par le modèle de Kelvin-Voigt inertiel (KV-m), à partir de l'instant \tilde{t}_b pour a. Re = 1 et b. Re = 15. La ligne pleine épaisse représente la valeur simulée et pointillés épais représente l'ajustement au régime adéquat en imposant $L_{x,\text{fit}}(t_b) = L_x(t_b)$.

4 Discussion et conclusion

Nous avons appliqué un outil numérique performant pour simuler l'écoulement de capsules dans un canal microfluidique à expansion soudaine de type "marche", en prenant fidèlement en compte la géométrie du domaine. Cet outil allie précision et gain de temps de calcul par utilisation de la méthode IBM localement régulier utilisant le filtre de Beyer and Leveque (1992). Cette méthode permet de de dé-raffiner loin de la capsule tandis que le maillage est raffiné au maximum près de sa membrane. Un système de redémarrage a été utilisé pour obtenir plus rapidement les résultats des différentes calculs. Malgré tout cela, chaque simulation dure plus d'un mois en raison de la grande longueur du canal et du temps de simulation important. Trois simulations ont été effectuées, correspondant au même confinement $a_0/l = 1.1$, et au même nombre capillaire Ca = 0.05, mais à nombres de Reynolds différentes : Re = 0 (conditions de Stokes), Re = 1 et Re = 15.

La méthode numérique ainsi que le système de redémarrage ont été validés simultanément en conditions de Stokes (Re = 0), étape par étape : tout d'abord, l'état stationnaire en canal carré a bien été atteint. Ensuite, la forme stationnaire de la capsule a été validée à partir des travaux de Hu et al. (2013). La comparaison

donne globalement un excellent accord (erreur moyenne < 1%). Les bords du parachute font localement exception tout en restant correctement approchés (erreur maximum < 5%). Puis, une superposition de coupes numériques clé à l'approche de la marche, à sa traversée et lors de la relaxation avec les clichés expérimentaux (Gires et al., 2016) a montré un très bon accord à l'expérience. Les différences résiduelles ont même pu être exploitées en révélant et confirmant respectivement la présence d'une raideur de flexion et d'une viscosité de membrane des capsules utilisées dans ces expériences.

L'analyse des résultats numériques en conditions de Stokes Re = 0 a fourni la majeure partie des résultats en écoulement stationnaire, qui varie très lentement lorsque le nombre de Reynolds augmente (Carroll and Gupta, 2016). L'analyse a montré que la capsule perdait environ 10% de sa longueur L_x le long de l'axe Ox, 56% de sa vitesse et 85% de son énergie entre l'état stationnaire en canal carré et celui en canal rectangulaire, ce qui souligne l'importance du confinement sur les interactions fluide-structure en régime stationnaire. Si l'évolution de ces grandeurs a pour bilan une baisse globale, elle n'en n'est pas monotone pour autant : la capsule passe par une longueur L_x minimum, et la courbe transitoire de vitesse et d'énergie comportent toutes deux un pic de regain transitoire, à l'instant $\tilde{t} \approx 13.2$.

L'outil numérique ayant la capacité de reproduire fidèlement la géométrie du domaine et d'investiguer en détail le champ fluide et l'état de la capsule, l'analyse s'est focalisée sur un instant adimensionnel précis, pour lequel nous disposons d'un jeu complet de données : $\tilde{t} = 13.17$. Cet instant a une importance significative puisqu'il est à la fois juste après le temps $\tilde{t}_e \approx 12.98$ auquel l'arrière de la capsule vient termine de traverser la marcher et en plein pic de vitesse et surtout d'énergie. L'analyse de cet instant permet de conclure par une description du processus global de traversée de la marche de la façon suivante :

1. De $\tilde{t} \approx 7.79$ à $\tilde{t} = 8.94$, la capsule est en état stationnaire dans le canal carré, ne subissant pas l'influence de la marche.

2. La capsule approche (jusqu'à $\tilde{t} = 10.77$) puis traverse la marche (jusqu'à \tilde{t}_e (Gires et al., 2016)), subissant son influence.

3. Peu de temps après \tilde{t}_e comme par exemple à $\tilde{t} = 13.17$, la capsule n'est plus directement confinée par le canal carré, mais continue d'en subir une forte influence via le fluide en sortie de la marche : la capsule est alors au maximum de son expansion selon Oz (observé, non représenté mais correspondant à un minimum de L_x , cf. Figure 2.5). Elle obstrue ainsi une bonne partie de la section de sortie du canal carré (d'abscisse x/l = 14), notamment dans le plan de coupe xOz(Figure 2.9b). L'écoulement central en sortie de canal pousse alors la capsule, ce qui se voit tant par la traversée de son parachute arrière par les lignes de courant (Figure 2.9b), que par le pic de vitesse du centre de gravité de la capsule (Figure 2.6) ou encore par la surpression locale du fluide au centre de l'écoulement amont (Figure 2.11). La charge normale sur la membrane, qui est égale au saut de pression, est donc négative, la charge q est orientée vers l'intérieur de la capsule (Figure 2.8b). La membrane étant en équilibre et de forme locale concave au niveau du centre du parachute, cela implique qu'elle soit sous tension (Figure 2.8a). Le parachute est donc sous tension, ce qui tire ses bords. Ceux-ci sont donc tractés par le parachute et s'éloignent horizontalement à leur tour de la membrane. Notamment, les bords du parachute dans le plan de coupe *xOz* ne sont pas confinés et donc pas en compression. Ils sont donc sous tension (Figure 2.8a) et s'éloignent plus vite de la marche que le reste de la membrane dans cette coupe (Figure 2.10a). Cela contribue aussi au regain de vitesse de la capsule à cet instant (Figure 2.6). Par cet éloignement rapide, ils créent dans une fluide externe proche une forte dépression qui se propage jusqu'aux bords du canal (Figure 2.11). Tout cela montre qu'à $\tilde{t} = 13.17$, et donc a fortiori à $\tilde{t} = \tilde{t}_e$, la capsule interagit encore fortement avec la marche via le fluide, donc la capsule n'est pas encore en relaxation sous écoulement.

4. Lors de l'éloignement de la marche, la capsule amorce sa relaxation. L'amorçage se termine et laisse place au cœur de la relaxation lorsque la capsule est suffisamment loin pour ne plus être fortement influencée par la présence de la marche. Nous avons choisi comme instant de référence l'instant $\tilde{t} = \tilde{t}_b \approx 13.81$, où dL_x/dt est maximum.

Tout comme dans le problème de relaxation dans un fluide au repos (chapitre 4), la dynamique de relaxation sous écoulement de la capsule peut être comparée à celle d'un oscillateur harmonique amorti. Sa longueur L_x peut être modélisée par un modèle de Kelvin-Voigt à inertie (KV-m). Cette analyse tend à généraliser celle de Gires et al. (2016) par extension aux trois régimes, mais elle s'applique à partir de $\tilde{t} = \tilde{t}_b$ quand dL_x/dt est maximum, puisqu'il a été montré que la capsule

est encore sous influence de la marche $\tilde{t} = \tilde{t}_e$.

L'application du modèle KV-m en régime critique à partir de l'instant \tilde{t}_e permet de comparer aux résultats expérimentaux et numériques de la littérature Gires et al. (2016). Pour rappel, les axes Oy et Oz sont intervertis par rapport à Gires et al. (2016). Nous trouvons $\tau_{x,c}V/2l \approx 0.71$ pour L_x et $\tau_{z,c}V/2l \approx 0.28$, tandis que les résultats correspondants de Gires et al. (2016) sont respectivement $\tau_xV/2l =$ 0.83 pour la partie expérimentale et $\tau_yV/2l = 0.43$ pour la partie expérimentale et $\tau_{x,num}V/2l = 0.83$ pour la partie expérimentale et $\tau_{y,num}V/2l = 0.18$ pour la partie numérique. Nous constatons donc que notre modèle donne des résultats systématiquement plus faibles que leur partie expérimentale. Notre estimation des constantes du temps selon la direction transversale peu confinée (Oz pour nous, Oy pour eux) est plus proche et conduit à penser que leur estimation de la viscosité membranaire sur la base de leur L_y (notre L_z) est 5/3 fois trop élevée ((0.43 - 0.18)/(0.43 - 0.28) = 5/3).

L'application du modèle KV-m à partir de l'instant t_b pour Re = 1 et Re = 15a donné de très bons résultats, excellents pour Re = 1. Néanmoins, pour Re = 15, le temps de simulation et donc d'ajustement sont trop courts pour englober tout le processus de relaxation jusqu'à l'état stationnaire en canal rectangulaire. Une simulation à Re = 8, lancée sur une plus longue durée (non représentée), a permis de comprendre que l'oscillation produite ne traversait pas l'asymptote. Cela semble similaire à ce qui a été constaté (mais non représenté) aux forts confinements $(a_0/l = 1)$ dans le cadre du problème de relaxation d'une capsule prédéformée placée dans un fluide initialement au repos. Et ce, d'autant plus que la capsule en relaxation sous écoulement ne se relaxe que selon une direction transversale (Oz) et reste fortement confinée selon l'autre (Oy). Le modèle de Kelvin-Voigt ne prend pas en compte ce cas de figure et ne peut donc décrire la totalité de la dynamique d'évolution de la longueur L_x durant la relaxation. Il serait donc intéressant d'ajuster les courbes à l'aide de la somme de deux solutions de modèles de Kelvin-Voigt à paramètres différents : une solution purement amortie et une solution oscillante.

Enfin, la comparaison aux expériences (Gires et al., 2016) ont montré l'existence dans les capsules de celles-ci d'une raideur de flexion et d'une viscosité de membrane. Il serait donc intéressant d'incorporer ces comportements dans le code. La raideur de flexion a déjà été implémentée dans notre solveur (Guckenberger et al., 2016). La viscosité de membrane pourrait être implémentée en s'inspirant de méthodes existantes (Yazdani and Bagchi, 2013b). Il serait alors intéressant de comparer à nouveau les résultats à ceux de Gires et al. (2016) et de faire varier la raideur de flexion et la viscosité de membrane. Cela nous permettrait de comprendre de façon plus exhaustive la dynamique des capsules sous écoulement.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

1 Conclusion générale

La thèse sur porte sur l'étude de la dynamique des capsules en milieu confiné. L'enjeu était de mettre au point un code de simulation numérique 3D afin de modéliser leur relaxation en milieu confiné en tenant compte des effets d'inertie. Peu d'études portent sur ce phénomène (Gires et al., 2016). Deux situations ont été considérés : la relaxation d'une capsule pré-déformée dans un fluide initialement au repos et la relaxation d'une capsule sous écoulement dans un canal à élargissement soudain, passant d'une section carrée à une section rectangulaire.

Le code numérique a été réalisé en couplant le solveur fluide eulérien Basilisk basé sur la méthode des volumes finis (Popinet, 2003, 2009) avec le solveur solide lagrangien de Caps3D basé sur la méthode des éléments finis P_2 (Walter, 2009; Walter et al., 2010). Le couplage repose sur la méthode des frontières immergées IBM (Peskin, 1972, 1977, 2002). Divers ingrédients ont dû être intégrés à la méthode : le choix du filtre, la mise en compatibilité avec le maillage adaptatif octree, la correction de volume et le choix des paramètres de maillage. L'outil a été validé en maillage régulier et en maillage adaptatif.

La méthode IBM repose sur une approximation discrète de la mesure de Dirac, que nous appelons filtre. Le filtre sert à la transmission des forces du solide au fluide par dispersion volumique des forces ponctuelles aux nœuds lagrangiens et, dans le sens inverse, à l'advection du solide dont la vitesse d'advection est estimée par moyenne locale pondérée de la vitesse du fluide. Habituellement, en 3D, le même filtre est choisi dans les deux sens, ce qui permet des échanges conservatifs d'énergie entre le fluide et le solide (Newren, 2007). De plus, le filtre 3D est d'ordinaire construit par produit triple d'un même filtre 1D appliqué séparément à chacune des coordonnées de l'espace. Lors de nos premiers essais (Sarkis et al., 2017a,b), afin de trouver un compromis entre précision et stabilité, nous avions alterné entre le filtre "en cosinus" δ_{cos} (Peskin, 2002) pour les forces et le "petit chapeau" δ_{sh} (Peskin, 1977), ce qui ne conservait pas l'énergie. Nous avons finalement choisi dans les deux sens le filtre δ_{BL} (Beyer and Leveque, 1992), qui s'est avéré en 3D donner une convergence à l'ordre 2 en espace sur la forme de la capsule (précision globale d'ordre 2). Ce n'est pas le cas des filtres à valeurs strictement positives sur l'intérieur de leur support comme δ_{\cos} , qui de surcroît dégrade la forme stationnaire de la capsule en écoulement de Poiseuille par le biais d'écoulements numériques parasites. Enfin, à proximité égale du pas de temps de stabilité et à précision supérieure, δ_{BL} permet des calculs 4 fois moins longs que δ_{cos} et cela correspond à des calculs 8 fois moins longs à pas de temps égal. Nous avons enfin montré qu'un filtre IBM 3D construit selon le mode habituel ne permet jamais d'interpoler les vitesses à l'ordre 2 : un terme d'erreur d'ordre 1 apparaît dès lors que la membrane n'est orthogonale à aucun axe du repère.

La méthode MLBS (Multi-Level Box Sieving), que nous avons utilisée pour réaliser la méthode IBM localement régulier, s'est révélée efficace pour localiser le tampon optimal. A précision similaire, le couplage obtenu est 5 fois plus rapide qu'en maillage régulier dans le cas de validation (cas de référence de la relaxation dans un fluide initialement au repos), ce qui est très performant en milieu confiné. Combiné au changement de filtre, cela fait donc un gain de temps d'un facteur 20 à proximité égale du seuil de stabilité et un facteur 40 à pas de temps égal. Ce gain est en revanche plus faible dans le cas de la relaxation sous écoulement, et ce malgré le dé-raffinement obtenu loin de la capsule grâce aux fonctions d'écrasement : chaque simulation dure toujours plus d'un mois.

La première étude concerne la relaxation dans un fluide initialement au repos. Nous avons montré qu'une capsule sphérique de rayon a_0 pré-déformée en ellipsoïde allongé de même volume, de demi-grand axe $a > a_0$ et placée au centre d'un canal à section carrée se comporte comme un oscillateur harmonique. Nous avons étudié sa demi-longueur L_x le long de l'axe du canal (avec $L_x(0) = a$ et $L_{x,\infty} = a_0$). À l'état initial, la capsule est pré-déformée, ce qui conduit à ce qu'une énergie mécanique $E_m^0 / (G_s a_0^2)$ soit stockée sous formé d'énergie élastique de déformation. Un calcul analytique a fourni l'expression de cette énergie en fonction du paramètre de déformation $\Lambda = a/a_0$. Ce calcul a également fourni un minorant des longueurs énergétiquement accessibles durant le processus de relaxation. Enfin, l'énergie surfacique est maximum dans le plan *yOz*.

Une fois amorcée, la relaxation de la capsule suit deux étapes : une étape rapide où la capsule en grande déformation se relaxe presque entièrement, et une phase lente, durant laquelle elle rejoint asymptotiquement sa forme sphérique. Les paramètres pilotant la relaxation sont le rapport de confinement a_0/l et le nombre de Laplace La, qui apparaissent dans l'équation de Navier-Stokes quand on choisit comme échelle de temps caractéristique le temps viscoélastique $\mu l/G_s$. Trois cas ont été étudiés en détail : un cas de référence ($a_0/l = 0.5$, La = 10), un cas inertiel $(a_0/l = 0.5, La = 200)$ et un cas confiné $(a_0/l = 0.85, La = 10)$. Le cas de référence montre que L_x décroît de façon monotone et que l'écoulement autour de la capsule est constitué de deux anneaux vorticaux dont la ligne instantanée de rotation est à l'extérieur de la capsule. Des oscillations autour de la valeur asymptotique apparaissent à plus forte inertie, ainsi que des structures d'écoulement contra-rotatives à l'intérieur de la capsule. Tout comme l'inertie, l'effet du confinement est de ralentir la relaxation par le biais de petites structures d'écoulement à l'intérieur de la capsule. L'évolution de L_x dans le cas confiné sans inertie reste toutefois monotone, tout comme dans le cas de référence. Dans les trois cas d'étude, la vitesse de l'écoulement est maximum aux extrémités de la capsule en début de relaxation à $t = t_b$, ce qui induit la décroissance rapide de L_x juste après la phase d'amorçage.

Une étude paramétrique a ensuite été réalisée en faisant varier le rapport de confinement entre 0.45 et 0.85 et le nombre de Laplace entre 2 et 800. Les ingrédients d'un oscillateur harmonique (élasticité, viscosité et inertie) étant tous présents dans le phénomène de relaxation, nous l'avons modélisé au moyen d'un modèle de Kelvin-Voigt à inertie. Ce modèle est composé d'un assemblage en série entre une masse ponctuelle et un modèle de Kelvin-Voigt. Il comporte deux régimes, délimités par un nombre de Laplace critique La_c qui ne dépend que du confinement a_0/l : amortissement pur pour $La < La_c$, oscillations amorties pour $La > La_c$. Un ajustement des moindres carrés a été effectué par descente de gradient pour chaque courbe de L_x correspondant aux différents cas simulés pour chacune des valeurs de a_0/l et La. Pour le cas $a_0/l = 0.5$, nous avons trouvé $La_c \approx 84$. Un diagramme de phase a été tracé en fonction de a_0/l et La pour cartographier ces deux régimes. La validité du modèle comporte des limites à différents niveaux : tout d'abord, l'ajustement par le modèle est de très bonne ou excellente qualité pour quasiment toutes les simulations. Toutefois, pour les confinements faibles ($a_0/l < 0.45$) ou forts ($a_0/l > 0.85$), les données s'éloignent du modèle de Kelvin-Voigt : les régimes ajustés ne suivent plus la logique de progression "amorti-critique-oscillant" en fonction de La. Le modèle donne accès aux constantes de temps caractéristiques de la relaxation. Pour un confinement donné, une fois les constantes critiques La_c et τ_c identifiées, le modèle permet de trouver les constantes de temps pour toutes les autres valeurs de La. Pour le confinement $a_0/l = 0.5$, on trouve une très bonne correspondance des temps courts τ_{short} pour $0.4 < La/La_c < 1$. Pour $La/La_c \leq 0.4$, la correspondance est moins bonne, ce qui marque une limite de validité supplémentaire du modèle.

Nous avons enfin analysé les transferts d'énergie, qui pilotent l'interaction fluide-structure : à faible inertie, la décroissance relative de l'énergie est plus rapide que celle de la longueur : à $t = t_b$, elle a déjà diminué de 85% dans le cas de référence (La = 10) et de 72.5% dans le cas inertiel (La = 200). Cette énergie est transférée au fluide, où elle est dissipée (dans les trois cas étudiés) mais peut aussi être partiellement retransmise à la membrane (cas inertiel).

La seconde étude concerne la relaxation sous écoulement, constituée du passage par la capsule d'un canal à section carrée à un canal à section rectangulaire par un élargissement soudain de type "marche". A rapport de confinement en canal carré $a_0/l = 1.1$ et nombre capillaire Ca = 0.05 constants, nous avons tout d'abord étudié cette relaxation en conditions de Stokes, puis augmenté le nombre de Reynolds à Re = 1 puis Re = 15. L'état stationnaire selon le critère choisi est atteint dans les trois cas, en canaux carré comme rectangulaire. Néanmoins, le critère de convergence adopté pour Re = 15 s'avère insuffisant en canal rectangulaire.

Nous avons choisi d'étudier la longueur L_x (Gires et al., 2016) pour les trois nombres de Reynolds. Ces courbes indiquent une relaxation monotone pour Re =0 et Re = 1. Pour Re = 15, elle est plus lente et comporte des oscillations. L'inertie a un effet très faible sur la vitesse de la capsule et la convection prédomine. Pour les trois régimes, la vitesse passe d'environ 1.2*V* à environ 0.7*V*, tandis que la vitesse moyenne d'écoulement non perturbé passe de *V* à 0.5*V*. Relativement à cette dernière, la vitesse de la capsule est donc plus rapide dans le canal rectangulaire que dans le canal carré, car la capsule y est moins confinée.

Nous avons ensuite montré que la capsule perdait en vitesse et en énergie (-85%) entre le canal carré et le canal rectangulaire, mais que ces deux grandeurs remontaient provisoirement, peu après que l'arrière de la capsule soit sorti du canal carré $\tilde{t} = \tilde{t}_e \approx 12.98$. À $\tilde{t} = 13.17$, la capsule est en expansion selon *Oy*, et quasiment tout le débit en sortie du canal carré convecte la capsule horizon-talement. Presque toute la membrane est en extension, notamment le centre du parachute et ses bords près du plan *xOz*. Les seconds font l'objet d'un saut de pression important à la traversée de la membrane. Le fluide externe environnant est en forte dépression par rapport à pression moyenne dans la section x/l = 14.

Nous avons appliqué le modèle de Kelvin-Voigt à la relaxation sous écoulement. Celui-ci s'avère fonctionner correctement pour Re = 1, donnant un ajustement quasi-parfait. Pour Re = 15, l'ajustement est de bonne qualité mais porte sur une durée trop courte pour caractériser toute la relaxation, car l'état stationnaire en canal rectangulaire n'a pas été atteint en fin de simulation. Une simulation supplémentaire (non représentée) à Re = 8 nous a montré que l'oscillation pour Re = 8et Re = 15 se produit en dessous de l'asymptote. Cela suggère que lorsque l'inertie augmente, le modèle de Kelvin-Voigt devient insuffisant pour prédire toute la dynamique de relaxation sous écoulement fortement confiné selon *Oy*.

2 Perspectives

Concernant le maillage adaptatif, des progrès restent à faire pour accélérer les calculs de relaxation sous écoulement. On pourrait par exemple améliorer la méthode MLBS en utilisant non plus seulement la structure hiérarchique du maillage icomesh 4 2 de la membrane, mais également celle de l'octree de Basilisk.

Concernant les filtres en 3D, ceux construits par le mode habituel ne pouvant interpoler les vitesse à l'ordre 2, il serait intéressant d'en construire différemment en appliquant la fonction échelon de Heaviside non plus aux coordonnées cartésiennes, mais à la coordonnée normale à la membrane. On pourrait transposer à la 3D la méthode de construction de Beyer and Leveque (1992), ou encore par exploration généralisée des filtres. Une autre méthode faisant intervenir à la fois
les filtres et la compatibilité avec un maillage adaptatif sans contrainte de raffinement repose sur le couplage (via la méthode MLBS) du maillage octree avec la méthode IBM en maillage destructuré (Pinelli et al., 2010; Mendez et al., 2014; Gibaud, 2015; Sigüenza, 2016). Ce couplage, que nous appelons IBM adaptatif libre, a été implémenté et intensivement testé durant cette thèse, mais pose encore de nombreux problèmes en l'état : poids du couplage encore trop important, choix exclusif entre la stabilité et l'interpolation à l'ordre 2 en présence de confinement ou en cas de dé-raffinement du maillage (pas assez de nœuds eulériens dans le support IBM, notamment à l'extérieur de la capsule près des bords du canal).

Au vu de la précision globale d'ordre 2 du filtre δ_{BL} , des filtres 1D d'ordre 3 comme le filtre PolynoMex δ_{PM} laissent espérer une précision globale d'ordre 3 dès lors que les deux solveurs à coupler sont au moins précis d'ordre 3. Caps3D est d'ordre 4 en espace (Walter et al., 2010) et Basilisk fait actuellement l'objet d'une amélioration visant à le rendre précis à l'ordre 3, ce qui rend cette perspective très intéressante. Enfin, le lien entre ordre local et global doit être analysé.

Deux limites du modèle de Kelvin-Voigt ont été constatées. La première est qu'un fort confinement produit des oscillations qui ne traversent pas (ou peu) l'asymptote. Elles ont été constatées tant pour la relaxation dans un fluide initialement au repos (ex : $a_0/l = 1$, pour La = 300 et La = 600, non représentés) que pour la relaxation sous écoulement ($a_0/l = 1.1$ et Ca = 0.05, pour Re = 8 et Re = 15). Il serait intéressant d'expérimenter l'ajustement des courbes de L_x par la somme d'une solution purement amortie (liée au faible confinement selon Oz) et d'une solution amortie oscillante (liée au fort confinement selon Oy). La seconde est le fait que le modèle ne prend pas en compte la phase d'amorçage, durant laquelle la majeure partie de l'énergie initiale est dissipée. Il serait intéressant d'étudier cette dissipation en partant de plusieurs formes initiales différentes.

Il serait intéressant de modéliser la ligne critique du diagramme de phase par la droite d'équation $\log_{10} (La) \approx 1.51a_0/l + 1.16$. Nous avons aussi commencé à simuler d'autres géométries, comme une capsule traversant un trou carré au centre d'un mur séparant deux boîtes cubiques (Casquero et al., 2018). En outre, les forces de courbure et un noyau "cellulaire" visqueux ont été implémentés mais n'ont pas été exploités. Il serait intéressant de les valider et de les exploiter pour élargir les études de la relaxation de capsules immergées en milieu confiné.

Annexe A

Calcul de l'énergie libre de pré-déformation dans une capsule sphérique étanche de loi de Skalak de paramètre C = 1 pré-déformée en ellipsoïde de révolution

1 Description du calcul.

On considère un référentiel galliléen fixe $(O, \underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z) = (O, \underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z)$. On considère une capsule dont la frontière est modélisée par une membrane hyperélastique dépourvue de flexion, sphérique au repos, de centre O de rayon au repos a_0 et de module de cisaillement surfacique G_s . On suppose de plus la capsule étanche et donc de volume constant $V \equiv V_0 = \frac{4}{3}\pi a_0^3$. On la pré-déforme en un ellipsoïde de révolution autour de l'axe Ox, de demi-grand axe a et de demi-petits axes $\sqrt{a_0^3/a}$. On définit le paramètre de pré-déformation : $\Lambda \stackrel{\triangle}{=} a/a_0$. Cette capsule est supposée suivre la loi de Skalak, dont l'énergie surfacique libre de déformation a été donnée dans le chapitre 2 par l'équation (2.9). Dans tout le problème, toutes les grandeurs physiques sont adimensionnalisées grâce à une combinaison adéquate (dépendante de la grandeur à adimensionnaliser) des grandeurs a_0 et G_s , qui sont les grandeurs caractéristiques du solide.

On va calculer successivement :

— l'énergie surfacique libre de déformation adimensionnelle paramétrée sur la surface non déformée : $w_s^{Sk}(\Lambda, \theta) / G_s$, où θ est la colatitude par rapport à l'axe Ox dans la configuration de référence (la longitude n'étant pas utilisée grâce à l'hypothèse d'invariance par rotation autour de l'axe Ox);

- l'énergie libre totale de déformation adimensionnelle $E_m^{Sk}(\Lambda) / G_s a_0^2$, par intégration de $w_s^{Sk}(\Lambda, \theta)$ sur la surface non déformée. Elle apparaîtra être donnée par une fraction rationnelle dont le dénominateur est Λ^4 et le numérateur est un polynôme de degré 8 en Λ;
- La factorisation (partielle) de ce polynôme en un produit de deux polynômes, l'un de degré 2 et l'autre de degré 6.

Les concepts utilisés ici sont ceux de la mécanique de membrane. Pour plus de détails, se reporter au cours de Salençon (2005) et, pour une adaptation aux capsules, à la thèse Walter (2009) (ou encore, pour plus de concision, à l'article de Walter et al. (2010)).

2 Calcul de l'énergie surfacique libre de pré-déformation

On commence par calculer l'énergie surfacique libre de déformation $w_s^{Sk}(\Lambda, \theta)$ de la loi de Skalak sur la configuration de référence (chapitre 2 équation (2.9)).

2.1 Calcul du tenseur des déformations

Soit \mathcal{L}_0 la configuration de référence (c'est-à-dire en l'absence de déformations) et \mathcal{L} la configuration actuelle (c'est-à-dire en considérant les déformations effectives). On repère un nœud lagrangien $\underline{X}_0 = (X_{x,0}, X_{y,0}, X_{z,0}) \in \mathcal{L}_0$ en coordonnées sphériques par sa colatitude $\theta \in [0, \pi]$ par rapport à l'axe Ox, sa longitude $\varphi \in [-\pi, \pi[$ par rapport à l'origine O et sa distance radiale à l'origine O. A noter qu'à l'exception des points situés sur l'axe Ox (c'est-à-dire $\theta \in \{0; \pi\}$), ce repérage est unique. Le repère local en coordonnées sphériques dans la configuration non déformée est $(\underline{X}_0, \underline{e}^{\theta}, \underline{e}^{\varphi}, \underline{e}^{r})$, où :

$$\begin{cases}
\underline{e}^{\theta} = -\sin\theta \underline{e}_{x} + \cos\theta \cos\varphi \underline{e}_{y} + \cos\theta \sin\varphi \underline{e}_{z} \\
\underline{e}^{\varphi} = -\sin\varphi \underline{e}_{y} + \cos\varphi \underline{e}_{z} \\
\underline{e}^{r} = \cos\theta \underline{e}_{x} + \sin\theta \cos\varphi \underline{e}_{y} + \sin\theta \sin\varphi \underline{e}_{z}
\end{cases}$$
(2.1)

On définit la base contravariante de référence $\left(\underline{A}^{\alpha}, \underline{A}^{\beta}, \underline{N}\right) = \left(\underline{e}^{\theta}, \underline{e}^{\varphi}, \underline{e}^{r}\right).$

Étant donné l'invariance par rotation autour de l'axe Ox, l'énergie surfacique libre de déformation w_s^{Sk} ne dépend pas de la longitude φ . Dès lors, on peut choisir la valeur que l'on veut pour celle-ci. Par commodité, on prend $\varphi = 0$. Dans ces

conditions, l'équation (2.1) se simplifie en :

$$\begin{cases} \underline{e}^{\theta} = -\sin\theta \underline{e}_{x} + \cos\theta \underline{e}_{y} \\ \underline{e}^{\varphi} = \underline{e}_{z} \\ \underline{e}^{r} = \cos\theta \underline{e}_{x} + \sin\theta \underline{e}_{y} \end{cases}$$
(2.2)

Le suivi lagrangien adimensionnel est donné par :

$$\underline{\Phi}: \underbrace{X_{2} \to \mathbb{R}^{3}}_{\underline{X}_{0} = (X_{x,0}, X_{y,0}, X_{z,0}) \mapsto \underline{X}(\underline{X}_{0}) = (\Lambda X_{x,0}, \frac{X_{y,0}}{\sqrt{\Lambda}}, \frac{X_{z,0}}{\sqrt{\Lambda}}).$$
(2.3)

Il est induit sur \mathbb{S}_2 par l'endomorphisme (diagonal) suivant de \mathbb{R}^3 :

$$\underline{\Phi}_{3D}: \frac{\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3}{(x, y, z) = \left(\Lambda x, \frac{y}{\sqrt{\Lambda}}, \frac{z}{\sqrt{\Lambda}}\right)}.$$
(2.4)

La matrice associée au tenseur gradient $\underline{\mathbb{F}}_{v}$ de $\underline{\Phi}_{3D}$ dans la base canonique $\left(\underline{e}_{x}, \underline{e}_{y}, \underline{e}_{z}\right)$ est la suivante :

$$F_{v} = \left(\partial_{j} X_{i}\left(\underline{X}_{0}\right)\right)_{(i,j)\in[\![1..3]\!]^{2}} = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} \end{pmatrix}.$$
 (2.5)

On a alors le tenseur gradient surfacique de $\underline{\Phi}$ suivant :

$$\underline{\underline{\mathbb{F}}} = \underline{\underline{\mathbb{F}}}_{v} \cdot \underline{\underline{\mathbb{1}}}_{s,0}, \tag{2.6}$$

où $\underline{\mathbb{1}}_{s,0}$ est le tenseur mixte de projection sur la surface non déformée :

$$\underline{1}_{s,0} = \underline{A}_{\alpha} \otimes \underline{A}^{\alpha} + \underline{A}_{\beta} \otimes \underline{A}^{\beta}, \qquad (2.7)$$

et où (2.2) se transforme en :

$$\begin{cases} \underline{A}_{\alpha} \otimes \underline{A}^{\alpha} = \sin^{2}\theta \underline{e}_{x} \otimes \underline{e}_{x} + \cos^{2}\theta \underline{e}_{y} \otimes \underline{e}_{y} - \frac{1}{2}\sin^{2}\theta \left(\underline{e}_{x} \otimes \underline{e}_{y} + \underline{e}_{y} \otimes \underline{e}_{x}\right) \\ \underline{A}_{\beta} \otimes \underline{A}^{\beta} = \underline{e}_{z} \otimes \underline{e}_{z} \end{cases}$$
(2.8)

En injectant (2.8) dans (2.7), on obtient :

$$\underline{1}_{s,0} = \sin^2 \theta \underline{e}_x \otimes \underline{e}_x + \cos^2 \theta \underline{e}_y \otimes \underline{e}_y - \frac{1}{2} \sin 2\theta \left(\underline{e}_x \otimes \underline{e}_y + \underline{e}_y \otimes \underline{e}_x \right) + \underline{e}_z \otimes \underline{e}_z.$$
(2.9)

La matrice dans la base canonique $(\underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z)$ de $\underline{\mathbb{1}}_{s,0}$ (donné par l'équation (2.9)) est donc la matrice (de symétrie) suivante :

$$U = \begin{pmatrix} \sin^2 \theta & -\frac{1}{2} \sin 2\theta & 0\\ -\frac{1}{2} \sin 2\theta & \cos^2 \theta & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (2.10)

En traduisant matriciellement dans cette même base l'équation (2.6) à l'aide des équations (2.5) et (2.10), on obtient la matrice dans cette base du tenseur gradient surfacique des déformations :

$$F = F_{v} U = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sin^{2}\theta & -\frac{1}{2}\sin 2\theta & 0\\ -\frac{1}{2}\sin 2\theta & \cos^{2}\theta & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

c'est-à-dire une matrice de la forme :

$$F = \begin{pmatrix} -\tan\theta V(\theta) & V(\theta) & \frac{1}{\sqrt{\Lambda}}E_3 \end{pmatrix}, \qquad (2.12)$$

où :

$$\begin{cases} V(\theta) \stackrel{\triangle}{=} \cos\theta V_0(\theta) \\ V_0(\theta) \stackrel{\triangle}{=} \begin{pmatrix} -\Lambda \sin\theta \\ \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} \cos\theta \\ 0 \end{pmatrix} \\ E_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases}$$
(2.13)

Il apparaît notamment que les colonnes de $\underline{\underline{F}}$ sont liées et donc que l'on a bien det $\underline{\underline{F}} = 0$, conformément au fait que $\underline{\underline{F}}$ est le tenseur surfacique de déformation.

2.2 Calcul du tenseur symétrique des déformations de Cauchy-Green et des invariants de déformation

La matrice du tenseur de Cauchy-Green $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}}$ dans la base canonique est :

$$C = F^{T} \cdot F = \begin{pmatrix} \tan^{2}\theta || V(\theta) ||^{2} & -\tan\theta || V(\theta) ||^{2} & 0 \\ -\tan\theta || V(\theta) ||^{2} & || V(\theta) ||^{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\Lambda} \end{pmatrix}.$$
 (2.14)

On vérifie également au passage que det $\underline{C} = 0$, les deux premières colonnes étant liées, ce qui constitue un critère de vérification supplémentaire des calculs. D'une façon plus compacte, (2.15) peut se réécrire sous la forme suivante : La matrice du tenseur de Cauchy-Green $\underline{C} = \underline{F}^T \cdot \underline{F}$ dans la base canonique est :

$$C = \begin{pmatrix} || V(\theta) ||^{2} W.W^{T} & 0_{2,1} \\ 0_{1,2} & \frac{1}{\Lambda} \end{pmatrix},$$
 (2.15)

148

où :

$$W = \begin{pmatrix} -\tan\theta\\ 1 \end{pmatrix}.$$
 (2.16)

Le bloc W^T . W a pour valeurs propres 0 et $1/\cos^2\theta$ et ce $\forall \theta \in [0, \pi/2[\cup]\pi/2, \pi[$. Et on a :

$$\forall \theta \in \left]0, \pi/2\left[\cup\right]\pi/2, \pi\left[, \left(\frac{||V(\theta)||}{|\cos\theta|}\right)^2 = \left||V_0(\theta)|\right|^2 = \Lambda^2 \sin^2\theta + \frac{\cos^2\theta}{\Lambda}.$$
 (2.17)

Et ainsi, en prolongeant par continuité, on obtient le spectre de \underline{C} pour n'importe quelle colatitude :

$$\forall \theta \in [0, \pi], \operatorname{spec}\left(\underline{\mathbb{C}}\right) = \left\{0, \frac{1}{\Lambda}, \Lambda^2 \sin^2 \theta + \frac{\cos^2 \theta}{\Lambda}\right\}.$$
 (2.18)

Les invariants de déformation sont donc :

$$\begin{cases} I_1 = \Lambda^2 \sin^2 \theta + \frac{1 + \cos^2 \theta}{\Lambda} - 2\\ I_2 = \Lambda \sin^2 \theta + \frac{\cos^2 \theta}{\Lambda^2} - 1 \end{cases}$$
(2.19)

On vérifie au passage que dans la configuration de référence ($\Lambda = 1$), on a $I_1 \equiv I_2 \equiv 0$.

2.3 Calcul de de l'énergie surfacique libre w_s^{Sk} en fonction du paramètre de pré-déformation Λ et de la colatitude θ par rapport à l'axe Ox

En injectant la formule des invariants de déformation (2.19) en fonction de Λ et θ dans l'équation donnant l'énergie surfacique libre de déformation w_s^{Sk} en fonction desdits invariants donnée par l'équation (2.9) du chapitre 2, et en regroupant convenablement par le biais des fonctions trigonométriques, on obtient la forme $w_s^{Sk}(\Lambda, \theta)$ sous forme de polynôme trigonométrique en θ à coefficients en fraction rationnelle en Λ :

$$\frac{w_{\rm s}^{\rm Sk}}{G_{\rm s}}\left(\Lambda,\theta\right) = \frac{1}{4}\left(\cos^4\theta \left(\frac{1}{\Lambda^4} - \frac{2}{\Lambda}\right) + \sin^4\theta \left(\frac{1}{\Lambda^2} - 2\Lambda + \Lambda^2 + \Lambda^4\right) - 2\Lambda^2 \sin^2\theta + 3 - \frac{2}{\Lambda}\right)$$
(2.20)

3 Calcul de l'énergie libre de pré-déformation

Déterminons enfin l'énergie adimensionnelle obtenue (adimensionnée par $G_{s}a_{0}^{2}$) en fonction du paramètre de pré-déformation Λ . Pour cela, on intègre sur la configuration de référence (sphérique) la fonction d'énergie surfacique libre de déformation adimensionnelle $\frac{w_{s}^{Sk}}{G_{s}}$ donnée par (2.20) :

$$\frac{E_{\rm m}^{\rm Sk}}{G_{\rm s}a_0^2}\left(\Lambda\right) = 2\pi \int_0^\pi \frac{w_{\rm s}^{\rm Sk}}{G_{\rm s}}\left(\Lambda,\theta\right) \sin\theta d\theta. \tag{3.1}$$

Après injection de (2.20) dans (3.1), calcul de l'intégrale de chaque monôme trigonométrique en θ et regroupement par puissances de Λ , on obtient :

$$\frac{E_{\rm m}^{\rm Sk}}{G_{\rm s}a_0^2}\left(\Lambda\right) = \pi \left(\frac{1}{5\Lambda^4} + \frac{8}{15\Lambda^2} - \frac{12}{5\Lambda} + 3 - \frac{16\Lambda}{15} - \frac{12\Lambda^2}{15} + \frac{8\Lambda^4}{15}\right),\qquad(3.2)$$

C'est-à-dire :

$$\frac{E_{\rm m}^{\rm Sk}}{G_{\rm s}a_0^2}\left(\Lambda\right) = \frac{\pi P\left(\Lambda\right)}{15\Lambda^4},\tag{3.3}$$

où :

$$P = 8X^8 - 12X^6 - 16X^5 + 45X^4 - 36X^3 + 8X^2 + 3.$$
 (3.4)

Sans aller jusqu'à la factorisation complète de P, on peut montrer que :

$$\begin{cases} P = (X-1)^2 Q, \\ Q \stackrel{\triangle}{=} 8X^6 + 16X^5 + 12X^4 - 8X^3 + 17X^2 + 6X + 3 \end{cases}$$
(3.5)

Le monôme $(X-1)^2$ illustre le fait que la fonction énergie $\frac{E_m^{Sk}}{G_s a_0^2}$ atteint son minimum global (qui vaut 0) en $\Lambda = 1$. Le polynôme Q est sans racine réelle, ce qui correspond au fait que la fonction énergie ne s'annule pas ailleurs qu'en $\Lambda = 1$, c'est-à-dire que toute configuration déformée a une énergie strictement positive, conformément à ce qui est attendu.

Annexe B

Fonction MLBS pour IBM localement régulier

Fonction MLBS ($\underline{x}_{var}, *c_{var}, \mathcal{L}_{var}, \Delta_{var}$)

 $o_r = -1$;//Ordre retenu

 $f_G = 1$;//Facteur géométrique

 $c_{\text{IBM}} = 4\Delta_{\text{var}}$;//Taille du support IBM

Pour *o* allant de 0 à $n_{it} + 1//Ordre$ du tampon et des voisinages

//Nombre de nœuds Lagrangiens ayant un voisinage d'ordre o

Si $o \ge 1$ alors $f_G = 4f_G$;

Fin Si

 $N_{\mathcal{L},o} = 10 f_G + 2$;//Nombre de nœuds lagrangiens du tampon d'ordre o $c_o = 2^{n_{it}+1-o} c_{IBM}$;//Taille d'un voisinage d'ordre o

Pour *i* allant de 1 à $N_{\mathcal{L},o}$

 $\underline{X}_{i} = \mathcal{L}_{var}(i);$ $\mathcal{V}_{i} = \left[-\frac{c_{o}}{2}, \frac{c_{o}}{2}\right]^{3} + \left\{\underline{X}_{i}\right\}; //Voisinage d'ordre o centré en <math>\underline{X}_{i}$ Si $\underline{x}_{var} \in \mathcal{V}_{i}$ alors $o_{r} = o;$ Si $o == n_{it} + 1$ alors $*c_{var} = *c_{var} + 1;$ Fin Si
Fin Si
Fin Pour
Si $o_{r} < o$ alors sortir de la fonction;
Fin Si
Fin Pour

Fin Fonction

Annexe C

Perte de précision des filtres produits à variables séparées lors du passage de la 1D à la 2D ou à la 3D

Nous démontrons ici qu'un filtre 2D $\delta_{\Delta,2D}$ obtenu par produit à variables séparées de filtres 1D identiques δ_{Δ} via la formule $(u, v) \mapsto \delta_{\Delta,2D}(u, v) = \delta_{\Delta}(u) \delta_{\Delta}(v)$ ne garantit dans le cas général qu'une interpolation à l'ordre 1 en Δ . En effet, lorsque la fonction à interpoler (par exemple le champ de vitesse) présente un saut de dérivée normale locale sortante à sa membrane, il apparaît un terme parasite d'erreur à l'ordre 1 en Δ . Ce terme fait intervenir le saut de dérivée selon la coordonnée normale locale sortante et la fonction de Heaviside appliquée à cette coordonnée. On démontre que la condition d'annulation systématique de ce terme n'est vérifiée pour aucun tel filtre 2D : il existe toujours des localisations possibles de nœuds lagrangiens auxquelles, pour certaines orientations locales de la membrane, ce critère n'est pas respecté. Ces localisations sont même presque partout. La 2D a été choisie par souci de clarté, mais la démonstration en 3D est similaire.

1 Description du problème de l'approximation d'une fonction dont la dérivée présente un saut

On considère une fonction interpolée par un filtre⁽¹⁾ :

- δ_Δ en 1D, interpolant une fonction f_1 réelle, continue et deux fois continûment dérivable partout sauf en un point *α*, mais tout de même prolongeable par continuité en une fonction de classe C^2 sur chacun des deux intervalles

^{1.} Beyer et Leveque demandent que la fonction soit de classe C^1 à dérivée localement Lipschitzienne, mais affaiblir autant la régularité est inutile ici (la vitesse est C^2 hors de la membrane), rend plus compliqués les calculs et moins clairs les résultats, donc on prendra une fonction de classe C^2 .

 $]-\infty, \alpha]$ et $[\alpha, +\infty[$. Et ce pour former une fonction interpolée $f_{1,\Delta}$. La fonction f_1 est représentée sur la Figure 1.1a;

— $\delta_{\Delta,2D}(x,y) = \delta_{\Delta}(x) \delta_{\Delta}(y)$ en 2D, interpolant une fonction f du plan à valeurs réelles, continue sur le plan et deux fois continûment différentiable sur le plan sauf sur une droite D (modélisant la membrane), et prolongeable par continuité en une fonction de classe C^2 sur chacun des deux demi-plans fermés de part et d'autre de cette droite. Et ce pour former une fonction interpolée f_{Δ} . La fonction f est représentée sur la Figure 1.1b.



Figure 1.1 – Fonctions 1D et 2D à valeurs réelles, continues partout sur leur domaine de définition de classe C^2 partout sur leur domaine de définition sauf respectivement en un point et sur une droite : a. cas 1D et b. cas 2D.

On veut savoir dans chaque cas si le filtre interpole avec une précision spatiale d'ordre 2 ou non.

2 Cas 1D (rappel de Beyer et Leveque)

Cadre mathématique

a.

On considère $\alpha \in \mathbb{R}$ et une fonction f_1 à valeurs réelles, définie sur \mathbb{R} , continue sur \mathbb{R} , de classe C^2 sur $\mathbb{R} \setminus \{\alpha\}$ et prolongeable en une fonction C^2 sur chacun des deux intervalles $]-\infty, \alpha]$ et $[\alpha, +\infty[$ (cf Figure 1.1a). On considère également une grille Eulérienne 1D (ensemble des demi-multiples entiers impairs de Δ) :

$$\mathcal{E}_{\Delta} \stackrel{\triangle}{=} \left\{ s_i \stackrel{\triangle}{=} \left(i + \frac{1}{2} \right) \Delta, i \in \mathbb{Z} \right\}.$$
(2.1)

On considère un filtre sous forme canonique ϕ , remis à l'échelle Δ (échelle de

 \mathcal{E}_{Δ}) de la façon suivante (cf. chapitre 3, équation (3.2)) :

$$\delta_{\Delta}(x) = \frac{1}{\Delta}\phi\left(\frac{x}{\Delta}\right), x \in \mathbb{R}.$$
 (2.2)

Alors que ϕ est continu à support compact inclus dans un intervalle de la forme [-M, M], où M > 0 est un entier, l'équation (2.2) donne un filtre δ_{Δ} dont le support est inclus dans l'intervalle compact $[-M\Delta, M\Delta]$.

Démonstration de l'ordre 2 dans le cas 1D (rappel) :

Lemme 4.2 de Beyer et Leveque : supposons que δ_{Δ} vérifie (cf. chapitre 2, éq. (1.16)-(1.17)) :

- Respect du moment ordinaire d'ordre 0 :

$$M_{0,o,\Delta}(X) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{i \in \mathbb{Z}} \delta_{\Delta}(s_i - X) = 1 ; \qquad (2.3)$$

Respect du moment ordinaire d'ordre 1 :

$$M_{1,o,\Delta}(X) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{i \in \mathbb{Z}} (s_i - X) \,\delta_{\Delta}(s_i - X) = 0 ; \qquad (2.4)$$

Respect du moment unilatéral d'ordre 1 :

$$M_{1,\mathbf{u},\Delta}\left(X\right) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{i \in \mathbb{Z}} H\left(s_i - X\right)\left(s_i - X\right) \delta_{\Delta}\left(s_i - X\right) = 0, \tag{2.5}$$

où *H* est la fonction échelon de Heaviside.

Soient $\alpha \in \mathbb{R}$ et f_1 une fonction continue sur \mathbb{R} , de classe C^2 sur $\mathbb{R} \setminus \{\alpha\}$ et dont la restriction à chacun des intervalles $]-\infty, \alpha[$ et $]\alpha, +\infty[$ est prolongeable par continuité en une fonction de classe C^2 , respectivement sur $]-\infty, \alpha]$ et $[\alpha, +\infty[$. Alors la fonction suivante approche f_1 à l'ordre 2 en Δ , et ce en tout point :

$$f_{1,\Delta}(X) = \Delta \sum_{i \in \mathbb{Z}} f_1(s_i) \,\delta_\Delta(s_i - X).$$
(2.6)

Cet ordre 2 en précision d'interpolation s'écrit :

$$f_{1,\Delta}(X) = f_1(X) + \mathcal{O}_{\Delta \to 0^+}(\Delta^2).$$
 (2.7)

Remarque : comme le filtre 1D canonique ϕ est à support compact, les moments discrets du filtre à tout ordre sont finis en tout point.

Preuve du Lemme 4.2 de Beyer and Leveque (1992) : commençons par le cas le plus simple : $X \neq \alpha$: en ce point, la fonction est dérivable. Donc, en utilisant la

Annexe C – Perte de précision des filtres produits à variables séparées lors du 156 passage de la 1D à la 2D ou à la 3D

formule de Taylor entre x et chaque s_i , on obtient :

$$f_1(s_i) = f_1(X) + (s_i - X) f'_1(X) + (s_i - X)^2 \mathcal{B}(s_i - X), \qquad (2.8)$$

où \mathcal{B} est une fonction continue. Donc, en multipliant par les $\delta_{\Delta}(s_i - X)$ correspondants puis par Δ , en sommant sur tous les indices $i \in \mathbb{Z}$ et en factorisant convenablement les termes, on obtient :

$$f_{1,\Delta}(X) = M_{0,o,\Delta}(X) f_1(X) + M_{1,o,\Delta} f_1'(X) + M_{2,o,\Delta,\mathcal{B}}(X), \qquad (2.9)$$

où :

$$M_{2,o,\Delta,\mathcal{B}}(X) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{i \in \mathbb{Z}} (s_i - X)^2 \,\delta_{\Delta} \left(s_i - X \right) \mathcal{B} \left(s_i - X \right)$$
(2.10)

Eu égard aux équations (2.3) et (2.4), il reste uniquement à prouver que $M_{2,o,\Delta,\mathcal{B}}(X) = \mathcal{O}(\Delta^2)$: le filtre δ_{Δ} est à support compact inclus dans $[-M\Delta, M\Delta]$, où $M \ge 1$ est un entier. Donc, vu le nombre de termes dans le support :

$$|M_{2,o,\Delta,\mathcal{B}}(X)|(X) \leq \Delta (2M+1) (M\Delta)^{2} || \delta_{\Delta}\mathcal{B} ||_{\infty} = (2M+1) (M\Delta)^{2} || \phi \mathcal{B} ||_{\infty} = \mathcal{O} (\Delta^{2})$$
(2.11)

Donc $f_{1,\Delta} = f_1(X) + \mathcal{O}(\Delta^2)$, CQFD. Le cas $X = \alpha$ est similaire mais il faut aussi utiliser les moments unilatéraux, en remplaçant, dans les calculs, $M_{1,o,\Delta}(X) f'_1(X)$ par $M_{1,o,\Delta}(X) f'_1(X^-) + M_{1,u,\Delta}(X) (f'_1(X^+) - f'_1(X^-))$.

Remarque importante : à aucun moment la démonstration ne nécessite que le maillage soit régulier. Elle reste donc valable en maillage irrégulier.

3 Cas 2D (nouveau)

3.1 Présentation du cas 2D

Cadre mathématique en 2D : on considère le plan euclidien usuel $P = \mathbb{R}^2$. On considère une droite *D* de *P*. On considère une fonction *f* à valeurs réelles, définie et continue sur *P* et de classe C^2 sur $P \setminus D$, prolongeable par continuité en une fonction de classe C^2 sur chacun des deux demi-plans fermés de part et d'autre de *D* dans *P* (cf. Figure 1.1b). On considère un vecteur directeur unitaire <u>t</u> de *D* et un vecteur unitaire <u>n</u> perpendiculaire à *D* tel que la famille (<u>t</u>, <u>n</u>) soit une base orthonormée directe de *P*. \mathcal{E}^2_{Δ} est une grille Eulérienne 2D exactement comme dans Basilisk (coordonnées demi-multiples entiers impairs de Δ) :

$$\mathcal{E}_{\Delta}^{2} = \left\{ \left(x_{i}, y_{j} \right) \stackrel{\triangle}{=} \left(\left(i + \frac{1}{2} \right) \Delta, \left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta \right), (i, j) \in \mathbb{Z}^{2} \right\}.$$
(3.1)

La fonction interpolée est

$$f_{\Delta}(X,Y) \stackrel{\triangle}{=} \Delta \sum_{(i,j)\in\mathbb{Z}^2} f(x_i, y_j) \,\delta_{\Delta,2\mathrm{D}}(x_i - X, y_j - Y), \tag{3.2}$$

où le filtre 2D remis à l'échelle $\delta_{\Delta,2D}$, de forme canonique 2D $\psi = \delta_{1,2D}$, est construit à partir du filtre 1D remis à l'échelle δ_{Δ} , de forme canonique $\phi = \delta_1$, selon la formule :

$$\delta_{\Delta,2\mathrm{D}}(x,y) = \delta_{\Delta}(x)\,\delta_{\Delta}(y)\,,\quad (x,y)\in P,\tag{3.3}$$

ce qui revient à l'équation suivante sur les formes canoniques $\psi = \delta_{1,2D}$ et $\phi = \delta_1$:

$$\psi(x,y) = \phi(x)\phi(y), \quad (x,y) \in P.$$
(3.4)

3.2 Apparition d'un terme parasite d'ordre 1 dans l'approximation

On suppose que δ_{Δ} vérifie les hypothèses (2.3)-(2.3) du Lemme 4.2 de Beyer et Leveque. Cette fois, on écrit directement le terme d'ordre 2 sous la forme $\mathcal{O}(\Delta^2)$ (la justification étant similaire à celle du cas 1D), mais on passe tout aussi directement au cas "pathologique" (X, Y) $\in D$ (dont l'homologue en 1D est $X = \alpha$). On a pour tous entiers i et j :

$$f(x_i, y_j) = f(X, Y) + \partial_t f(X, Y) c_t(x_i, y_j) + \partial_n^- f(X, Y) c_n(x_i, y_j) + (\partial_n^+ f(X, Y) - \partial_n^- f(X, Y)) c_n(x_i, y_j) H(c_n(x_i, y_j)) + \mathcal{O}(\Delta^2),$$
(3.5)

où l'on fait intervenir la coordonnée tangentielle $c_t(x_i, y_j)$ et la coordonnée normale $c_n(x_i, y_j)$, données par :

$$\begin{cases} c_t (x_i, y_j) \stackrel{\triangle}{=} t_x (x_i - X) + t_y (y_j - Y) \\ c_n (x_i, y_j) \stackrel{\triangle}{=} n_x (x_i - X) + n_y (y_j - Y) \end{cases}.$$
(3.6)

Soient *p* et *q* deux entiers naturels valant 0 ou 1, on définit le moment ordinaire 2D d'ordre (p,q) (*p* selon *Ox* et *q* selon *Oy*) au pas spatial eulérien Δ , par :

$$M_{p,q,\Delta}(X,Y) \stackrel{\triangle}{=} \Delta^2 \sum_{(i,j)\in\mathbb{Z}^2} (x_i - X)^p (y_j - Y)^q \delta_{\Delta,2D} (x_i - X, y_j - Y),$$

$$p,q \in \{0,1\}, (X,Y) \in P, \Delta > 0.$$
(3.7)



Figure 3.1 – Représentation de la situation étudiée dans le cas d'un filtre strictement positif sur l'intérieur de son support : un fluide bidimensionnel maillé par une grille eulérienne 2D \mathcal{E}^2_{Δ} est traversé par une droite solide *D* (à maillage lagrangien). Son vecteur normal unitaire <u>n</u> forme un angle θ avec l'axe *Ox*. On considère le vecteur unitaire <u>t</u> tel que la base ($\underline{t}, \underline{n}$) soit orthonormée directe. En un nœud (X, Y) de *D*, on calcule l'approximation f_{Δ} d'une fonction f à l'aide de ses valeurs sur \mathcal{E}^2_{Δ} . Le bord du support IBM centré en (X, Y) est représenté en rouge. La zone orange est la partie de l'intérieur du support sur laquelle $c_n \ge 0$: c'est la non-zero zone continue. Les "+" violets constituent la non-zero zone discrète.

En sommant les équations (3.5) sur tous les $(i, j) \in \mathbb{Z}^2$, en multipliant le tout par Δ^2 et en considérant les équations (3.6)-(3.7), on obtient :

$$\begin{aligned} f_{\Delta}\left(X,Y\right) &= f\left(X,Y\right) M_{0,0,\Delta}\left(X,Y\right) \\ &+ \partial_{t}f\left(X,Y\right) \left(t_{x}M_{1,0,\Delta}\left(X,Y\right) + t_{y}M_{0,1,\Delta}\left(X,Y\right)\right) \\ &+ \partial_{n}^{-}f\left(X,Y\right) \left(n_{x}M_{1,0,\Delta}\left(X,Y\right) + n_{y}M_{0,1,\Delta}\left(X,Y\right)\right) \\ &+ \Delta^{2}\left(\partial_{n}^{+}f\left(X,Y\right) - \partial_{n}^{-}f\left(X,Y\right)\right) \sum_{(i,j)\in\mathbb{Z}^{2}}c_{n}\left(x_{i},y_{j}\right) H\left(c_{n}\left(x_{i},y_{j}\right)\right) \delta_{\Delta,2\mathrm{D}}\left(x_{i}-X,y_{j}-Y\right) \\ &+ \mathcal{O}\left(\Delta^{2}\right) \end{aligned}$$

(3.8)

L'équation (3.8) peut être considérablement simplifiée : on montre que la majorité des termes s'annulent. Injectons (3.3) dans (3.7) et factorisons en séparant les variables selon O_x et O_y . On obtient une nouvelle forme séparée de (3.7) :

$$M_{p,q,\Delta}(X,Y) = M_{p,o,\Delta}(X) M_{q,o,\Delta}(Y).$$
(3.9)

L'équation (3.9), couplée aux hypothèses (2.3)-(2.5) du Lemme 4.2 de Beyer and Leveque (1992) supposées être vérifiées par δ_{Δ} , donne

$$\begin{cases}
M_{0,0,\Delta} (X, Y) = 1 \\
M_{1,0,\Delta} (X, Y) = 0 \\
M_{0,1,\Delta} (X, Y) = 0
\end{cases}$$
(3.10)

En injectant (2.2), (3.4) et (3.10) dans (3.8), on la simplifie considérablement :

$$f_{\Delta}(X,Y) = f(X,Y)$$

$$+ (\partial_n^+ f(X,Y) - \partial_n^- f(X,Y)) \sum_{(i,j) \in \mathbb{Z}^2} c_n(x_i, y_j) H(c_n(x_i, y_j)) \psi\left(\frac{x_i - X}{\Delta}, \frac{y_j - Y}{\Delta}\right)$$

$$+ \mathcal{O}(\Delta^2).$$
(3.11)

Dans (3.11), le terme d'erreur en $\underline{X} = (X, Y)$ est qualifié de **terme parasite**. Il est noté $\mathcal{T}_{p}(X, Y)$. On a $c_n(x_i, y_j) = \Delta c_n(X + (x_i - X) / \Delta, Y + (y_j - Y) / \Delta)$ et supp $(\psi) = [-M, M]^2$, donc $\mathcal{T}_{p}(X, Y) = \mathcal{O}(\Delta)$. Or, la propriété désirée est

$$f_{\Delta}(X,Y) = f(X,Y) + \mathcal{O}(\Delta^2). \qquad (3.12)$$

Au vu de (3.11), l'équation (3.12) équivaut à l'annulation du terme parasite :

$$\mathcal{T}_{\mathbf{p}}\left(X,Y\right) = 0. \tag{3.13}$$

Cette annulation est automatique pour $(X, Y) \in P \setminus D$, car alors $\partial_n^+ f(X, Y) = \partial_n^- f(X, Y)$. En revanche, $\partial_n^+ f(X, Y) \neq \partial_n^- f(X, Y)$ dans le cas $(X, Y) \in D$ dans lequel on s'est placé. Dans ce dernier cas, l'équation (3.13) équivaut donc à :

$$\sum_{(i,j)\in\mathbb{Z}^2} c_n\left(x_i, y_j\right) H\left(c_n\left(x_i, y_j\right)\right) \psi\left(\frac{x_i - X}{\Delta}, \frac{y_j - Y}{\Delta}\right) = 0.$$
(3.14)

3.3 Condition d'annulation du terme parasite en certains points

On va chercher à savoir s'il est possible de vérifier (3.14) pour tout point $\underline{X} = (X, Y) \in \mathcal{P}$ et pour toute droite *D* passant par \underline{X} , caractérisée par son angle θ (cf.

Figure 3.1). On va trouver (au moins) un point $\underline{X} = (X, Y)$ de *P* en lequel cette équation prend une forme équivalente bien particulière. Pour simplifier, on va prendre $\Delta = 1$ et ainsi ne considérer que les formes canoniques (les raisonnements purement algébriques sur les remises à l'échelle et sur les formes canoniques étant équivalents). L'équation (3.14) équivaut ainsi à :

$$\sum_{(i,j)\in\mathbb{Z}^2} c_n\left(x_i, y_j\right) H\left(c_n\left(x_i, y_j\right)\right) \psi\left(x_i - X, y_j - Y\right) = 0$$
(3.15)

où $x_i = i + 1/2$ et $y_j = j + 1/2$ dans notre cas, mais la démonstration est indépendante de ce détail. On paramètre alors <u>n</u> en polaires : $\underline{n} = \underline{n}(\theta) = (\cos\theta, \sin\theta)$.

On définit la **non-zero zone continue** par { $\underline{x} \in P \mid \psi(\underline{x} - \underline{X}) \neq 0, c_n(\underline{x}) \geq 0$ }; On définit une partie de cette zone, la **non-zero zone discrète**, par

$$NZ(X, Y, \theta) = \{(i, j) \in \mathbb{Z}^2, (x_i - X) n_x(\theta) + (y_j - Y) n_y(\theta) \ge 0, | \psi(x_i - X, y_j - Y) | > 0\}$$
(3.16)

Cette zone contient les indices antécédents des termes non nuls de (3.15). Ceuxci sont donc forcément en nombre fini : l'ensemble $\mathcal{V}_{\text{IBM}}(X, Y)$ (cf. chapitre 3, section 1) est fini et contient toutes les NZ (X, Y, θ) , $\theta \in \mathbb{R}$, donc il contient leur réunion $\bigcup_{\theta \in [0,2\pi[} \text{NZ}(X, Y, \theta)$, qui est donc finie. En injectant $\underline{n}(\theta)$ et (3.16) dans (3.15), puis en factorisant par cos θ et sin θ , on obtient la version polaire de (3.15) :

$$\cos\theta \sum_{(i,j)\in NZ(X,Y,\theta)} (x_i - X) \psi (x_i - X, y_j - Y) + \sin\theta \sum_{(i,j)\in NZ(X,Y,\theta)} (y_j - Y) \psi (x_i - X, y_j - Y) = 0.$$
(3.17)

Dans (3.17), les fonctions trigonométriques sin et cos sont infiniment dérivables et forment une famille libre. De plus, à (X, Y) donné, si (3.17) est respectée alors les deux sommes dont ces fonctions sont facteurs respectifs ne sont susceptibles de varier (par saut) que lorsque l'ensemble NZ (X, Y, θ) varie. Or, NZ (X, Y, θ) ne varie qu'en un nombre fini d'angles θ_0 , dits **problématiques**, correspondant à $D(\theta_0) \cap \mathcal{V}_{\text{IBM}} \neq \emptyset$. On note Θ l'ensemble des angles problématiques. Tout autre angle θ est dit **non problématique**, les sommes sont constantes à son voisinage et donc, eu égard à (3.17), nulles par liberté de la famille de fonctions (sin, cos). Si l'on trouve $\underline{X} = (X, Y) \in P$ tel que ces sommes soient continues à gauche ou à droite en fonction de $\theta \in \mathbb{R}$ (dont les $\theta_0 \in \Theta$), alors la vérification systématique de (3.17) en \underline{X} sera équivalente à l'annulation de ces deux sommes pour tout $\theta \in \mathbb{R}$. C'est le cas pour les points $\underline{X} = (X, Y) \in P$ par lesquels ne passe aucune droite reliant deux points distincts de \mathcal{E}_1^2 :

1. De tels points existent, ils sont même presque partout dans le plan. En effet, comme \mathcal{E}_1^2 est dénombrable, l'ensemble de ces droites l'est aussi. Chacune d'entre elle étant négligeable⁽²⁾, leur réunion l'est aussi. Donc les points qui n'y appartiennent pas son bel et bien presque partout dans *P*. Plaçons nous en un tel <u>X</u>;

2. Choisissons $\theta_0 \in \Theta$, de sorte que $D(\theta_0)$ passe par un unique $\underline{x} \in \mathcal{V}_{\text{IBM}}(X, Y)$. Si $\psi(\underline{x} - \underline{X}) = 0$, alors les sommes dans (3.17) sont constantes au voisinage de θ_0 . Sinon, ces sommes ne sont pas constantes au voisinage de θ_0 (elles comportent un saut), mais comme la fonction H est continue à droite en 0, ces sommes sont continues à droite en θ_0 ou bien à gauche en $\theta_0 \pm \pi$, selon le signe de $\underline{t}(\theta_0) \cdot (\underline{x} - \underline{X})$;

La Figure 3.2 représente un tel point $\underline{X} = (X, Y)$, où se coupent toutes les droites d'angle problématique. On voit que pour ce point, elles ne passent effectivement que par un seul point de $\mathcal{V}_{\text{IBM}}(X, Y)$ sur la grille eulérienne canonique \mathcal{E}_1^2 .



Figure 3.2 – Droites d'angles problématiques. Le point $\underline{X} = (X, Y)$ est choisi pour que ces droites passent toutes par un seul point de $\mathcal{V}_{\text{IBM}}(X, Y)$ sur la grille \mathcal{E}_1^2 .

^{2.} C'est-à-dire de mesure de Lebesgue nulle.

Pour un tel point, les sommes dans (3.17) sont continues à gauche ou à droite en tout angle, et donc sont identiquement nulles (car elles sont nulles pour les angles non problématiques). La condition d'annulation (3.17) équivaut alors à

$$\forall \theta \in \mathbb{R}, \begin{cases} \mathcal{S}_{(X,Y,1)}(\theta) \stackrel{\triangle}{=} \sum_{(i,j) \in \mathrm{NZ}(X,Y,\theta)} (x_i - X) \phi (x_i - X) \phi (y_j - Y) = 0\\ \mathcal{S}_{(X,Y,2)}(\theta) \stackrel{\triangle}{=} \sum_{(i,j) \in \mathrm{NZ}(x,y,\theta)} (y_j - Y) \phi (x_i - X) \phi (y_j - Y) = 0 \end{cases}$$

$$(3.18)$$

3.4 Non annulation systématique du terme parasite en ces points

On démontre que la condition (3.18) ne peut être toujours respectée. Choisissons indépendamment le filtre ϕ et un point \underline{X} par lequel ne passe aucune droite coupant deux points de \mathcal{E}_1^2 . Considérons une droite D qui coupe \underline{X} exactement un élément $\underline{x} = (x_i, y_j) \in \mathcal{E}_1^2$. On suppose que $\psi(\underline{x} - \underline{X}) \neq 0$. Un tel point existe, vu la première ligne de (3.10) appliquée au couple (X, Y). Notons θ_0 l'angle problématique tel que $\underline{t}(\theta_0)$ porte la droite D et vérifie $\underline{t}(\theta_0) . (\underline{x} - \underline{X}) = - || \underline{x} - \underline{X} || < 0$.

Dans (3.18), $S_{(X,Y,1)}$ et $S_{(X,Y,2)}$ sont continues à droite en θ_0 . On va montrer qu'elles ne sont pas continues. On fait légèrement varier l'angle θ pour obtenir deux angles très proches $\theta_1 < \theta_0$ et $\theta_2 > \theta_0$. La Figure 3.3 représente cette situation.

Dans cette figure, le vert très clair représente la différence symétrique d'ensembles entre les non-zero zones continues d'angles θ_1 et θ_2 . Le seul point de \mathcal{E}_1^2 y appartenant est $\underline{x} = (x_i, y_j)$, par lequel passe *D*. Le singleton $\{(i, j)\}$ est la différence symétrique entre les non-zero zones discrètes NZ (*X*, *Y*, θ_1) et NZ (*X*, *Y*, θ_2). Si l'on reprend les définitions de $\mathcal{S}_{(X,Y,1)}$ et $\mathcal{S}_{(X,Y,2)}$ données par (3.18), on obtient

$$\begin{cases} S_{(X,Y,1)}(\theta_2) = S_{(X,Y,1)}(\theta_1) + (x_i - X)\phi(x_i - X)\phi(y_j - Y) \\ S_{(X,Y,2)}(\theta_2) = S_{(X,Y,2)}(\theta_1) + (y_j - Y)\phi(x_i - X)\phi(y_j - Y) \end{cases} .$$
(3.19)

Si ϕ vérifiait la condition (3.18) en $\underline{X} = (X, Y)$, on aurait

$$S_{(X,Y,1)}(\theta_1) = S_{(X,Y,1)}(\theta_2) = S_{(X,Y,2)}(\theta_1) = S_{(X,Y,2)}(\theta_2) = 0.$$
(3.20)

En injectant (3.20) dans (3.19), on obtiendrait alors :

$$(x_i - X)\phi(x_i - X)\phi(y_j - Y) = 0 = (y_j - Y)\phi(x_i - X)\phi(y_j - Y).$$
(3.21)



Figure 3.3 – Représentation de la variation de la non-zero zone lorsque l'on fait varier très légèrement l'orientation d'une droite passant à la fois par (X, Y) et par un unique point (x_i, y_j) du support IBM centré en (X, Y). Partant d'un angle problématique θ_0 et de la normale correspondante $\underline{n}(\theta_0)$, on aboutit ainsi à un angle "très légèrement inférieur" θ_1 et à un angle "très légèrement supérieur" θ_2 . La partie commune des non-zero zones continues est représentée en vert un peu clair, tandis que leur différence symétrique est représentée en vert très clair.

Or, comme (eu égard à son choix) (*X*, *Y*) n'appartient pas à \mathcal{E}_1^2 , on a forcément $x_i \neq X$ ou $y_j \neq Y$ (en fait, on a même $x_i \neq X$ et $y_j \neq Y$), donc (3.21) donnerait

$$\phi\left(x_{i}-X\right)\phi\left(y_{j}-Y\right)=0,\tag{3.22}$$

c'est-à-dire

$$\psi\left(\underline{x} - \underline{X}\right) = 0. \tag{3.23}$$

Or, nous avons justement supposé le contraire de (3.23). Le filtre ϕ , quel qu'il soit, ne peut donc vérifier la condition (3.18) en <u>X</u> pour l'orientation θ_0 . Or, vu le choix de <u>X</u>, cette condition équivaut à l'annulation du terme parasite d'ordre 1 (3.13) et à l'approximation à l'ordre 2 (3.12), qui n'est donc pas systématiquement vérifiée.

4 Conclusion de l'annexe

Dans cette annexe, on a montré que le cas 2D diffère du cas 1D par le fait que le produit de variables séparées dégrade à l'ordre 1 en Δ l'erreur d'approximation. Après un bref rappel du cas 1D étudié dans Beyer and Leveque (1992), on a étendu ce raisonnement au cas 2D. On a alors montré l'apparition d'un terme parasite d'erreur à l'ordre 1.

On a ensuite réécrit ce terme en coordonnées polaires selon un angle θ d'orientation de la normale locale à la membrane (modélisée par une droite). Cette forme est une combinaison linéaire des fonctions trigonométriques sin et cos, dont les coefficients sont des sommes dépendant du nœud lagrangien considéré et de l'angle θ . On a montré que pour annuler le terme parasite, ces sommes devaient s'annuler sauf éventuellement en un nombre fini modulo 2π d'angles problématiques.

On a alors montré que pour presque tout point du plan, si la membrane y passe, alors la condition d'annulation du terme parasite équivaut à l'annulation de ces sommes pour n'importe quel angle θ , par continuité à gauche ou à droite en fonction de celui-ci. Enfin, on a montré par l'absurde que cette condition équivalente ne peut être vérifiée systématiquement, en montrant que les sommes en un tel point comportent toujours une discontinuité en certains angles problématiques.

Presque partout dans le plan *P*, terme parasite ne saurait donc être annulé pour toute orientation θ de la membrane. De plus, par continuité de celui-ci en fonction de θ , cela signifie que presque partout dans *P*, il y a des intervalles entiers d'orientations θ de la membrane pour lesquels le terme parasite n'est pas nul.

La démonstration a été faite en 2D, mais elle serait quasiment la même en 3D. Une membrane de capsule étant fermée, elle a toutes sortes d'orientations et a donc toutes les chances d'en croiser une posant ce problème.

Le terme parasite est omniprésent dans l'approximation par les filtres IBM.

Annexe D

Exploration généralisée de l'espace des filtres

Dans cette annexe, nous donnons étendons/élargissons l'ensemble des filtres 2D (démonstration similaire en 3D) compatibles avec les différentes conditions données par Peskin (2002) à l'exception du choix de leur construction par produit triple du même filtre 1D appliqué à une coordonnée de l'espace. L'idée finale est de créer de telles fonctions à la forme de support désirée et interpolant à l'ordre 2.

1 Notations

Les notations suivantes sont utilisées :

- $-\stackrel{\triangle}{=}$ ou $\stackrel{\text{def}}{=}$: égal par définition ;
- $[[n_1..n_2]], (n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$: tous les entiers entre n_1 et n_2 . Si $n_1 > n_2$, c'est le vide, par convention. Nous rappellons que, dans ce cas, nous avons également par convention : $\sum_{l=n_1}^{n_2} anything(l) = 0$ et $\prod_{l=n_1}^{n_2} anything(l) = 1$;
- − C^k ($k \in \mathbb{N} \cup \{+\infty\}$) : une fonction *k*-fois dérivable (/différentiable), dont la dérivée (/différentielle) *k*-ème est continue lorsque $k \in \mathbb{N}$;
- $C^k_{\mathcal{M}}$: pour une fonction C^k par morceaux ;
- L_1 : pour une fonction intégrable ;
- supp : support mathématique d'une fonction, qui est le plus petit ensemble fermé contenant l'ensemble des antécédents de ses valeurs non nulles;
- card : le cardinal d'un ensemble fini (ie. son nombre d'éléments);
- 0_n : zéro de \mathbb{R}^n ;
- $\mathbb{S}_{n-1}(a, R), n \in \mathbb{N}^*, a \in \mathbb{R}^n, R \in \mathbb{R}^{+*}$: (hyper-)sphère de centre *a* et de rayon

R dans \mathbb{R}^n ;

- $\mathcal{L}(E, F)$ (*E* et *F* étant deux espaces vectoriels) : espace vectoriel des applications linéaires de *E* dans *F*. Lorsque *E* = *F*, il est noté $\mathcal{L}(E)$;
- $\mathcal{GL}(E)$ (*E* étant un espace vectoriel) : ensemble des applications linéaires inversibles de *E* dans lui-même. Cet ensemble est un groupe multiplicatif;
- *M*_{p,q} (ℝ), *p*, *q* ∈ ℕ* : l'ensemble des matrices réelles à *p* lignes et *q* colonnes.
 Cet ensemble est un espace vectoriel réel de dimension finie *pq*. Lorsque *p* = *q*, il est juste noté *M*_p(ℝ). Finalement, lorsque *q* = 1, chaque matrice colonne sera allègrement (et volontairement) confondue avec un vecteur de ℝ^p, dont elle sera la matrice dans une certaine base (par exemple la base canonique), du moment qu'il n'y a aucune ambiguïté sur la base utilisée;
- . : produit scalaire euclidien sur un espace vectoriel préhilbertien, "produit matrice-vecteur" et plus généralement produit matriciel;
- ._q, $|| . ||_q$ et d_q ($q \in \mathbb{N}^*$) : sur \mathbb{R}^q , respectivement, produit scalaire euclidien usuel, la norme euclidienne induite et distance euclidienne ;
- $p_{\perp,F}$ (où *E* est un espace de Banach et *F* est un sous-espace vectoriel fermé de *E*) : projection orthogonale de *E* sur *F*;
- Si $p, q \in \mathbb{N}^*$ et $T_1 \subset \llbracket 1..p \rrbracket$, $T_2 \subset \llbracket 1..q \rrbracket$, alors on note $\mathcal{M}_{T_1,T_2} \stackrel{\triangle}{=} (M_{i,j})_{(i,j)\in T_1\times T_2}$ la matrice extraite à indices dans $T_1 \times T_2$. Si par exemple $T_1 = \llbracket 1..p \rrbracket$, alors on note cela $\mathcal{M}_{:,T_2}$, et ainsi de suite.

2 Construction historique du filtre de Peskin

Dans Peskin (2002), la mesure δ de Dirac sur \mathbb{R} (aussi appelée "fonction de Dirac") est approchée par une fonction "lissante" continue à support compact :

$$\delta_{\Delta,2D}\left(\underline{x}\right) = \frac{1}{\Lambda^2} \phi\left(\frac{x_1}{\Lambda}\right) \phi\left(\frac{x_2}{\Lambda}\right), \qquad (2.1)$$

où ϕ est le filtre 1D sous forme canonique. Dans la suite, pour des raisons de clarté, il sera fait usage des coordonnées $(\frac{x_1}{\Delta}, \frac{x_2}{\Delta})$, qui seront simplement notées (x_1, x_2) . De même, $\frac{x}{\Delta}$ sera juste noté <u>x</u> en tant que variable de ψ . La même réduction de notations sera appliquée aux valeurs des filtres ϕ et ψ . Autrement dit, tout comme dans Peskin (2002), on omet volontairement la remise à l'échelle afin

d'alléger les notations et parce que ce n'est pas nécessaire au raisonnement. Ainsi, la l'équation (2.1) se réduit à

$$\psi(\underline{x}) = \phi(x_1)\phi(x_2) \tag{2.2}$$

L'ensemble des filtres 2D sous forme canonique ψ sera noté Ψ .

Les conditions de compatibilité données et justifiées par Peskin (2002) sont

$$\phi \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}, \mathbb{R}), \tag{2.3}$$

$$\operatorname{supp}(\phi) \subset [-2,2], \tag{2.4}$$

$$\forall r \in \mathbb{R}, \qquad \sum_{j \in 2\mathbb{Z}} \phi(r-j) = \sum_{j \in 2\mathbb{Z}+1} \phi(r-j) = \frac{1}{2}, \tag{2.5}$$

$$\forall r \in \mathbb{R}, \sum_{j \in \mathbb{Z}} (r-j)\phi(r-j) = 0,$$
(2.6)

$$\exists C > 0, \forall r \in \mathbb{R}, \sum_{j \in \mathbb{Z}} \phi^2(r-j) = C.$$
(2.7)

La signification de ces équations est la suivante :

- L'équation (2.3) caractérise la continuité du filtre ϕ (et donc de ψ , vu (2.2));
- L'équation (2.4) et la somme de (2.5) signifient respectivement la compacité du support de ψ et le fait que ψ soit d'intégrale 1, et donc que la "fonction" δ est "approchée" par $\delta_{\Delta,2D}$;
- Les équations de (2.5) signifient l'équilibre des pondérations, entre la chaîne de nœuds d'indice pair et la chaîne de nœuds d'indices impair, lorsque l'on applique ϕ pour moyenner localement une fonction ;
- Les équations (2.6) et (2.7) garantissent partiellement une certaine invariance par translation (imparfaite) des effets du filtre sur la grille Eulérienne.

Voir Peskin (2002) pour plus de détails.

Ici, nous résumons tout d'abord comment Peskin (2002) résoud ces équations et nous approprions ensuite cette résolution à travers une vision différente, qui va dans le sens de la généralisation qui sera faite dans la sous-section 3. Le point clé de Peskin (2002) est de restreindre l'étude de ϕ à [0,1]. Alors, en raison de l'hypothèse sur le support de ϕ faite dans l'équation (2.4) (et en combinant (2.5) et (2.6)), on obtient les équations simplifiées suivantes :

$$\forall r \in [0,1], \phi(r-2) + \phi(r) = \frac{1}{2},$$
(2.8)

$$\forall r \in [0,1], \phi(r-1) + \phi(r+1) = \frac{1}{2},$$
(2.9)

$$\forall r \in [0,1], 2\phi(r-2) + \phi(r-1) - \phi(r+1) = r,$$
(2.10)

$$\forall r \in [0,1], \phi^2(r-2) + \phi^2(r-1) + \phi^2(r) + \phi^2(r+1) = C.$$
 (2.11)

Sans rentrer dans les détails, pour chaque $x \in]0,1]$ fixé, (2.8)-(2.11) constituent un système de 4 équations à 4 inconnues, qui admet une solution unique à la condition que *C* soit unique. Peskin le montre de la manière suivante :

- Premièrement, en exprimant le triplet ($\phi(r-2), \phi(r-1), \phi(r+1)$) en tant que fonction de $\phi(r)$;
- Deuxièmement, en exprimant à son tour *C* comme une fonction de $\phi(r)$;
- Troisièmement en rappelant que *C* est une constante et en considérant le cas particulier r = 0;
- Quatrièmement, en notant que $\phi(\pm 2) = 0$;
- Finalement, on trouve *C*, puis, pour tout *r* de [0,1], on trouve $\phi(r)$ puis $(\phi(r-2), \phi(r-1), \phi(r+1))$.

Au final, la solution est

$$\begin{cases} \forall r \in [-2, -1], \phi(r) = \frac{1}{8} \left(5 + 2r - \sqrt{-7 - 12r - 4r^2} \right) \\ \forall r \in [-1, 0], \phi(r) = \frac{1}{8} \left(3 + 2r + \sqrt{1 - 4r - 4r^2} \right) \\ \forall r \in [0, 1], \phi(r) = \frac{1}{8} \left(3 - 2r + \sqrt{1 + 4r - 4r^2} \right) \\ \forall r \in [1, 2], \phi(r) = \frac{1}{8} \left(5 - 2r - \sqrt{-7 + 12r - 4r^2} \right) \\ \forall r \in \mathbb{R} \setminus [-2, 2], \phi(r) = 0 \end{cases}$$

$$(2.12)$$

Nous abordons à présent une vision différente sur les équations (2.8)-(2.11), considérant cela comme deux équations dans \mathbb{R}^4 :

- Les équations (2.8)-(2.10) sont linéaires, elles donnent le système linéaire

$$A.Y = B, \tag{2.13}$$

où :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$
 (2.14)

$$Y = \begin{pmatrix} \phi(r-2) \\ \phi(r-1) \\ \phi(r) \\ \phi(r+1) \end{pmatrix}, \qquad (2.15)$$

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ r \end{pmatrix}.$$
 (2.16)

Dans ce système, *A* est évidemment de rang plein (rang 3). Ainsi, l'espace des solutions est une droite affine Δ de \mathbb{R}^4 . On va rechercher un vecteur unitaire de Δ en résolvant l'équation homogène associée à (2.13). Cette équation est :

$$A.U = 0,$$
 (2.17)

où $U = {}^t(\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4)$. Nous obtenons $\alpha_1 = -\alpha_2 = -\alpha_3 = \alpha_4$. Ainsi, on peut par exemple prendre le vecteur unitaire donné par

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$
 (2.18)

La première coordonnée de *U* n'étant pas nulle, on peut trouver une solution particulière de (2.13) en forçant $\phi(r-2) = Y_1(r) = 0$ (ce qui simplifie (2.13) en ôtant à *A* sa première colonne et à *Y* sa première coordonnée) et en interchangeant les rôles de $Y_2(r) = \phi(r-1)$ et $Y_3(r) = \phi(r)$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi(r) \\ \phi(r-1) \\ \phi(r+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ r \end{pmatrix}.$$
 (2.19)

L'équation (2.19) peut être résolue en considérant le fait que sa matrice carrée est diagonale par blocs, dont l'un des deux est trivial. L'inversion de l'autre bloc donne

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (2.20)

On trouve ainsi la solution de (2.19) :

$$\begin{pmatrix} \phi(r) \\ \phi(r-1) \\ \phi(r+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1+2r}{4} \\ \frac{1-2r}{4} \end{pmatrix}, \qquad (2.21)$$

qui donne ainsi une solution particulière de (2.13) :

$$\forall r \in [0,1], W(r) = \begin{pmatrix} 0\\\frac{1+2r}{4}\\\frac{1}{2}\\\frac{1-2r}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\\frac{1}{4}\\\frac{1}{2}\\\frac{1}{4} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 0\\\frac{1}{2}\\0\\-\frac{1}{2} \end{pmatrix} = Y_0 + rZ.$$
(2.22)

Finalement, en assemblant (2.18) et (2.21), on obtient l'ensemble des solutions de (2.13) :

$$\forall r \in [0,1], \exists \lambda \in \mathbb{R}, \begin{pmatrix} \phi(r-2) \\ \phi(r-1) \\ \phi(r) \\ \phi(r+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda}{2} \\ \frac{1+2r-2\lambda}{4} \\ \frac{1-\lambda}{2} \\ \frac{1-2r+2\lambda}{4} \end{pmatrix} = Y_0 + rZ + \lambda U. \quad (2.23)$$

— La solution de (2.8)-(2.11) est, parmi celles celle de (2.23), celle qui est sur la sphère $S_3\left(0_4, \sqrt{C}\right)$ dans \mathbb{R}^4 . Ainsi, en injectant (2.23) dans (2.11), on obtient

$$\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2 + \left(\frac{1+2r-2\lambda}{4}\right)^2 + \left(\frac{1-\lambda}{2}\right)^2 + \left(\frac{1-2r+2\lambda}{4}\right)^2 = C.$$
 (2.24)

En assemblant les termes par puissances de λ , on obtient

$$\lambda^2 - \lambda (r + \frac{1}{2}) + (\frac{1-2r}{4})^2 + (\frac{1+2r}{4})^2 + \frac{1}{4} - C = 0.$$
 (2.25)

Pour résoudre (2.25), on doit d'abord trouver la constante *C*. Pour cela, fixons r = 0. A cause de (2.4), on a alors $\phi(r - 2) = 0$. Ainsi, la première coordonnée de (2.23) donne $\lambda(0) = 0$ (et (2.23) devient (2.19)). Via (3.12),

on obtient aussi $\phi(0) = \frac{1}{2}$, tout comme dans Peskin (2002). Fixant ainsi $(\lambda, r) = (0, 0)$ dans (2.25), on obtient *C* :

$$C = \frac{3}{8},$$
 (2.26)

tout comme Peskin (2002). Finalement, (2.25) devient

$$\lambda^2 - \lambda \left(\frac{2r+1}{2}\right) + \left(\frac{1-2r}{4}\right)^2 + \left(\frac{1+2r}{4}\right)^2 - \frac{1}{8} = 0.$$
(2.27)

Le discriminant est

$$\Delta_r = \frac{1}{2} - (\frac{1-2r}{2})^2. \tag{2.28}$$

On voit d'abord que $\forall r \in [0,1], \Delta(r) > 0$. On obtient deux solutions distinctes :

$$\lambda_1(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{2r+1}{2} - \sqrt{\frac{1}{2} - \left(\frac{1-2r}{2}\right)^2} \right), \tag{2.29}$$

$$\lambda_2(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{2r+1}{2} + \sqrt{\frac{1}{2} - \left(\frac{1-2r}{2}\right)^2} \right).$$
(2.30)

En particulier, on a $\lambda_1(0) = 0$ et $\lambda_2(0) = 1/2$. En assemblant (2.23) et (2.29) d'une part, et (2.23) et (2.30) d'autre part, on voit que seule la solution $\lambda \equiv \lambda_1$ donne un filtre monodimensionnel continu, lequel est choisi comme solution du système (2.8)-(2.11) :

$$\forall r \in [0,1], \begin{pmatrix} \phi(r-2) \\ \phi(r-1) \\ \phi(r) \\ \phi(r+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \left(\frac{2r+1}{2} - \sqrt{\frac{1}{2} - \left(\frac{1-2r}{2}\right)^2} \right) \\ \frac{\frac{2r+1}{2} + \sqrt{\frac{1}{2} - \left(\frac{1-2r}{2}\right)^2}}{4} \\ \frac{1 + \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{1}{2} - \left(\frac{1-2r}{2}\right)^2} - \frac{2r+1}{2} \right)}{2} \\ \frac{1 - 2r + \left(\frac{2r+1}{2} - \sqrt{\frac{1}{2} - \left(\frac{1-2r}{2}\right)^2} \right)}{4} \end{pmatrix}.$$
(2.31)

L'équation (2.31) donne exactement la solution (2.12) trouvée par Peskin (2002), (illusrée au chapitre 2, section 3, Figure 3.1). L'article Peskin (2002) mentionne aussi que (2.12) "est <u>extrêmement</u> bien approchée par la formule simple" suivante :

$$\begin{cases} \forall r \in [-2,2], \phi(r) = \frac{1}{4} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi r}{2}\right) \right) \\ \forall r \in \mathbb{R} \setminus [-2,2], \phi(r) = 0 \end{cases}$$

$$(2.32)$$

Pour résumer, la présente sous-partie a rappelé la méthode de construction utilisée dans Peskin (2002) et a réécrit sous-forme matricielle la partie linéaire du système (2.5)-(2.6) qui y est résolu. Cette réécriture est plus synthétique et donc plus propice à une généralisation.

Finalement, nous illustrons le résultat et les hypothèses (2.2)-(2.7) :

- La Figure 2.1 illustre le lien entre $Y = (Y_1 Y_2 Y_3 Y_4)^T$ et ψ via la cartographie des valeurs de ψ ;
- La Figure 2.2 donne une représentation géométrique simplifiée de la solution Y(r) (pour un certain $r \in [0, 1]$) sur $\mathbb{S}_3(0, \sqrt{C})$ dans \mathbb{R}^4 .



Figure 2.1 – Cartographie shématique (qualitative) du filtre bidimensionnel ψ de Peskin (2002) sur la grille Eulérienne. Le filtre monodimensionnel ϕ est donné en 4 parties Y_1, Y_2, Y_3, Y_4 , qui forment un vecteur $Y \in \mathbb{R}^4$.

3 Extension de l'ensemble des solutions

Un choix initial arbitraire

On peut se demander pourquoi Peskin (2002) a choisi (2.1) comme forme de δ_h , ce qui est équivalent à assumer (2.2). Peskin donne pour argument que c'est plus simple, mais c'est aussi plus pauvre : il n'y a qu'une seule solution !

Généralisation des conditions



Figure 2.2 – Représentation géométrique simplifiée de la solution Y à (2.13) et (2.11) dans \mathbb{R}^4 .

Dans la suite, nous ne supposons plus (2.2). Ainsi, nous ne cherchons plus un certain $Y(r) \in \mathbb{R}^4 (r \in \mathbb{R})$ représentant ϕ , mais plutôt un certain $Y(x) \in \mathbb{R}^{16} (x \in \mathbb{R}^2)$ représentant $\psi(x)$, comme illustré par la représentation planaire de ψ dans la figure 3.1. Plus généralement, Peskin (2002) mentionne la possibilité d'élargir le support de ϕ , supp (ϕ) , à chaque [-N, N], $N \in \mathbb{N}^* \setminus \{1\}$, nous amenons ainsi à chercher un certain $Y(r) \in \mathbb{R}^{2N} (r \in \mathbb{R})$. De la même manière, nous allons élargir le support de ψ à $[-N, N]^2$, recherchant ainsi un certain $Y(x) \in \mathbb{R}^{4N^2} (x \in \mathbb{R}^2)$.

Extension progressive en 2D

Soit ψ une fonction réelle définie sur \mathbb{R}^2 . Essayons de vérifier les propriété suivantes, qui sont les conditions généralisées de compatibilité de Peskin :

$$\psi \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$$
 (en pratique $: \psi \in \mathcal{C}^0_{\mathcal{M}}(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$), (3.1)

$$\exists N \in \mathbb{N}^* \setminus \{1\}, \operatorname{supp}(\psi) = [-N, N]^2 \stackrel{\triangle}{=} K, \tag{3.2}$$

$$\forall (\underline{x}, \underline{q}) \in \mathbb{R}^2 \times \llbracket 0..1 \rrbracket^2, \sum_{\underline{j} \in (2\mathbb{Z})^2 + \underline{q}} \psi(\underline{x} - \underline{j}) = \frac{1}{4},$$
(3.3)

$$\forall \underline{x} \in \mathbb{R}^2, \sum_{\underline{j} \in \mathbb{Z}^2} \psi(\underline{x} - \underline{j}) \underline{j} = \underline{x},$$
(3.4)



Figure 3.1 – Représentation planaire du filtre ψ dans une voie générale 2*D* avec un support supp(ψ) = [-2,2] (support de demi-largeur 2). ψ est donnée par 16 morceaux continus, $Y_1, ..., Y_{16}$, qui forment une fonction vectorielle $Y \in \mathbb{R}^{16}$.

$$\exists C > 0, \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^2, \sum_{\underline{j} \in \mathbb{Z}^2} \psi^2(\underline{x} - \underline{j}) = C.$$
(3.5)

Les équations (3.1)-(3.5) généralisent les équations (2.3)-(2.7) au cas 2D. Analysons les à présent, tout comme nous l'avons fait sur les conditions de Peskin. Tout d'abord, même si ce n'est pas évident, nous allons montrer qu'à l'exception de l'étude de la continuité de l'hypothèse (3.1), nous pouvons restreindre l'étude de ψ à $Q \stackrel{\triangle}{=} [0,1]^2$, tout comme Peskin a restreint l'étude de ϕ à [0,1]. Afin de simplifier le problème, mettons en place quelques notations simplificatrices. Définissons trois fonctions réelles g_1 , g_2 et g_3 sur \mathbb{R}^2 par les formules suivantes :

$$\forall \underline{x} \in \mathbb{R}^2, g_1(\underline{x}) \stackrel{\triangle}{=} \sum_{\underline{j} \in (2\mathbb{Z})^2} \psi(\underline{x} - \underline{j}) \in \mathbb{R},$$
(3.6)

$$\forall \underline{x} \in \mathbb{R}^2, g_2(\underline{x}) \stackrel{\triangle}{=} \sum_{\underline{j} \in \mathbb{Z}^2} \psi(\underline{x} - \underline{j})(\underline{x} - \underline{j}) \in \mathbb{R}^2,$$
(3.7)

$$\forall \underline{x} \in \mathbb{R}^2, g_3(\underline{x}) \stackrel{\triangle}{=} \sum_{\underline{j} \in \mathbb{Z}^2} \psi^2(\underline{x} - \underline{j}) \in \mathbb{R}^+.$$
(3.8)

Nous avons alors

$$\forall (\underline{x}, \underline{q}, \underline{k}) \in Q \times [[0..1]]^2 \times (2\mathbb{Z})^2, g_1(\underline{x} + \underline{q} + \underline{k}) = g_1(\underline{x} + \underline{q}), \tag{3.9}$$

$$\forall (\underline{x}, \underline{k}) \in Q \times \mathbb{Z}^2, g_2(\underline{x} + \underline{k}) = g_2(\underline{x}), \tag{3.10}$$

$$\forall (\underline{x}, \underline{k}) \in Q \times \mathbb{Z}^2, g_3(\underline{x} + \underline{k}) = g_3(\underline{x}).$$
(3.11)

Les équations (3.9)-(3.11) montrent ce que nous voulions : l'étude de ψ peut être réduite à $Q = [0, 1]^2$. Les nouvelles conditions de compatibilité s'en trouvent donc simplifiées :

$$\forall (\underline{x}, \underline{q}) \in Q \times \llbracket 0..1 \rrbracket^2, g_1(\underline{x} + \underline{q}) = \frac{1}{4}, \tag{3.12}$$

$$\forall \underline{x} \in Q, g_2(\underline{x}) = \underline{0}, \tag{3.13}$$

$$\forall \underline{x} \in Q, g_3(\underline{x}) = g_3(\underline{0}) \stackrel{\triangle}{=} C.$$
(3.14)

Les équations (3.12)-(3.13) forment clairement un système de rang plein de 6 équations linéaires. Voyons à présent combien d'inconnues est-ce que ce système implique réellement :

$$\forall (\underline{x}, j) \in Q \times (\mathbb{Z}^2 \backslash K) , \psi(\underline{x} - j) = 0.$$
(3.15)

De plus, la continuité souhaitée $^{(1)}$ de ψ force $\psi_{|\partial K}\equiv 0$, de sorte que

$$\forall \underline{x} \in Q, \forall \underline{j} \in K \cap \mathbb{Z}^2, || \underline{x} - \underline{j} ||_2 = N \Rightarrow \psi(\underline{x} - \underline{j}) = 0.$$
(3.16)

En injectant (3.16) dans (3.15) et en posant $T \stackrel{\triangle}{=} [\![-N, N-1]\!]^2$, nous obtenons finalement

$$\forall (\underline{x}, \underline{j}) \in Q \times (\mathbb{Z}^2 \setminus T) , \psi(\underline{x} - \underline{j}) = 0.$$
(3.17)

Ainsi, le nombre d'inconnues est $card(T) = (2N)^2 = 4N^2$. Donc, les équations (3.12)-(3.13) constituent un système linéaire de 6 équations à $4N^2$ inconnues.

^{1.} Mais dont la recherche jusqu'au bout n'a pas été retranscrite dans le présent manuscrit.

Les équations (3.3) et (3.4) (ou, de manière équivalente, sous l'axiome (3.2), les équations (3.12) et (3.13)) sont résumées par le système matriciel suivant :

$$\forall \underline{x} = (x_1, x_2) \in Q, \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & \dots & \mathbb{I}_2 & \dots & \mathbb{O}_2 \\ \mathbb{O}_2 & \dots & \mathbb{O}_2 & \dots & \mathbb{I}_2 & \dots & \mathbb{I}_2 \\ N & \dots & N & \dots & 1 - N & \dots & 1 - N \\ N & \dots & 1 - N & \dots & N & \dots & 1 - N \end{pmatrix} . Y(\underline{x}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$\exists \psi \in \Psi, \forall \underline{x} \in Q, Y(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \psi(\underline{x} - (-N, -N)) \\ \vdots \\ \psi(\underline{x} - (-N, N - 1)) \\ \vdots \\ \psi(\underline{x} - (N - 1, -N)) \\ \vdots \\ \psi(\underline{x} - (N - 1, N - 1)) \end{pmatrix}$$

$$(3.18)$$

où \mathbb{I}_2 et \mathbb{O}_2 sont respectivement la matrice unité ("matrice identité") et la matrice nulle, carrées de taille 2. En fait, le système (3.18) est la généralisation de (2.13)-(2.16). Il est clair que le rang de ce système est maximum, c'est-à-dire égal à 6. Et puisqu'il y a $4N^2$ inconnues, l'espace des solutions, noté $H(\underline{x})$, est un sousespace affine de dimension $4N^2 - 6$ de \mathbb{R}^{4N^2} . En combinant cela avec (3.5), on voit que l'ensemble des solutions pour chaque $\underline{x} \in Q$ est $H(\underline{x}) \cap \mathbb{S}_{4N^2-1}(0_{4N^2}, \sqrt{C})$, où $\mathbb{S}_{p-1}(a, r)$ est la sphère de \mathbb{R}^p , de centre *a* et de rayon *r*. Il resterait ainsi à déterminer *C* pour que la résolution soit aussi complète que celle de Peskin (2002), mais c'est impossible : la seule façon de déterminer *C* serait de fixer $\underline{x} \in Q \cap \mathbb{Z}^2$ et d'espérer que le système (3.18) soit si simplifié qu'il aurait une unique solution. Cependant, ce n'est pas le cas, car seuls les 4N - 1 termes de bords seraient nuls, de sorte que le nombre d'inconnues ne tomberait qu'à $(2N - 1)^2$. Finalement, la dimension du sous-espace affine des solutions serait $(2N - 1)^2 - 6$, et $N \ge 2 \Rightarrow (2N - 1)^2 - 6 \ge 3$. On peut donc choisir n'importe quel *C* vérifiant

$$\forall \underline{x} \in Q, \sqrt{C} \ge d_{4N^2} \left(0_{4N^2}, H(\underline{x}) \right).$$
(3.19)

 $\{d_{4N^2}(0_{4N^2}, H(\underline{x})) \mid \underline{x} \in Q\}$ est compact donc (3.19) a une infinité de solutions.

Soit $C_{\min} \stackrel{\triangle}{=} \min \left\{ C > 0, \forall \underline{x} \in Q, \sqrt{C} \ge d_{4N^2} \left(0_{4N^2}, H(\underline{x}) \right) \right\} = \left(\max_{\underline{x} \in Q} d_{4N^2} \left(0_{4N^2}, H(\underline{x}) \right) \right)^2$. Alors, l'ensemble (pratique⁽²⁾) des solutions Y est :

$$S = \left\{ Y \in \mathcal{C}^{0}\left(Q, \mathbb{R}^{4N^{2}}\right), \exists C \geq C_{\min}, \forall \underline{x} \in Q, Y\left(\underline{x}\right) \in H(\underline{x}) \cap \mathbb{S}_{4N^{2}-1}(0_{4N^{2}}, \sqrt{C}) \right\}$$

$$(3.20)$$

L'étape suivante est l'étude de la famille $(H(\underline{x}))_{\underline{x}\in Q}$. Dans ce but, commençons par démontrer un théorème d'algèbre linéaire qui donne l'information à propos de ces sous-espaces affines.

Theorem 1. Soient $(m, p, q) \in (\mathbb{N}^*)^3$ tel que $m \le p \le q$ et $(l, a, b) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^p) \times \mathcal{L}(\mathbb{R}^q, \mathbb{R}^p) \times \mathbb{R}^p$ tel que rank(l) = m (l est injective) et rank(a) = p (a est surjective).

Soit $(H(\underline{x}))_{x \in \mathbb{R}^m}$ la famille des sous-espaces affines de \mathbb{R}^q définie par

$$\forall \underline{x} \in \mathbb{R}^m, H(\underline{x}) \stackrel{\triangle}{=} \{ y \in \mathbb{R}^q, a(y) = b + l(\underline{x}) \}.$$
(3.21)

Soit y_b une solution de a(y) = b.

Alors

$$\exists h \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^q), \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^m, H(\underline{x}) = \ker(a) + \{y_b + h(\underline{x})\}, \quad (3.22)$$

 $\operatorname{rank}(h) = m$ (h est de rang m, c'est-à-dire h est injective) et $l = a \circ h$.

Démonstration. Sans restreindre les généralités, nous supposons tout d'abord que $b = 0_{\mathbb{R}^p}$. En effet, si la preuve est juste pour b = 0, renommons H sous la notation H_0 pour b = 0 et H_b pour n'importe quel $b \in \mathbb{R}^p$, alors on peut prendre $y_0 = 0$ et nous obtenons :

$$\exists h_0 \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^q), \begin{cases} \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^m, H_0(\underline{x}) = \ker(a) + \{h_0(\underline{x})\} \\ \operatorname{rank}(h_0) = m \\ a \circ h_0 = l \end{cases}, \quad (3.23)$$

^{2.} c'est-à-dire en abandonnant provisoirement l'idée de la continuité au profit de celle d'une simple continuité par morceaux

De sorte que la cinquième des équivalences suivantes est valable :

$$\forall (\underline{x}, y) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^q, y \in H_b(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow a(y) = b + l(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow a(y) = a(y_b) + l(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow a(y - y_b) = l(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow y - y_b \in H_0(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow \exists z \in \ker(a), y - y_b = z + h_0(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow \exists z \in \ker(a), y = z + y_b + h_0(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow y \in \ker(a) + \{y_b + h_0(\underline{x})\}$$

$$(3.24)$$

Ce qui est le résultat (3.22) si nous prenons $h(\stackrel{\triangle}{=} h_b) = h_0$. De plus, avec ce choix, on a rank (h) = m et $a \circ h = l$. On se restreint donc à présent au cas b = 0.

Soit $(\underline{e}_1, ..., \underline{e}_m)$ une base de \mathbb{R}^m et définissons $(f_1, ..., f_m) \in (\mathbb{R}^p)^m$ par $\forall i \in [\![1..m]\!], f_i = l(\underline{e}_i)$. En raison de l'injectivité de l, $(f_1, ..., f_m)$ est une famille libre de \mathbb{R}^p . Elle peut donc être complétée en une base $(f_1, ..., f_p)$ de \mathbb{R}^p . Par le théorème du rang et la surjectivité de a, on voit que dim $(\ker(a)) = q - p$ et, par sa preuve, on voit ensuite qu'il y a un espace supplémentaire G de dimension p à $\ker(a)$ dans \mathbb{R}^q , de sorte que $a_{|G}$ est un isomorphisme d'espaces vectoriels. Soit $(g_1, ..., g_p)$ la base de G définie par $\forall k \in [\![1..p]\!], g_k = a_{|G}^{-1}(f_k)$.

Définissons $h_0 \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^q)$ par

$$\forall i \in \llbracket 1..m \rrbracket, h_0(\underline{e}_i) = g_i, \tag{3.25}$$

alors rank $(h_0) = m$ (par liberté de $(g_1, ..., g_p)$), $l = a \circ h_0$ et

$$\forall (\underline{x}, y) \in \mathbb{R}^{m} \times \mathbb{R}^{q},$$

$$y \in H(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow a(y) = l(\underline{x})$$

$$\Leftrightarrow a(y) = a(h_{0}(\underline{x}))$$

$$\Leftrightarrow y \in \ker(a) + \{h_{0}(\underline{x})\},$$

$$(3.26)$$

donc (3.23) est démontré, ce qui complète la preuve.

Appliquons à présent le Théorème 1 à notre problème : ici, nous avons m = 2, p = 6 et $q = 4N^2$. Nous voyons que (3.18) peut être réécrit sous la forme

$$\forall \underline{x} \in Q, A.Y(\underline{x}) = b + l(\underline{x}). \tag{3.27}$$

Le vecteur *b* est donné canoniquement par

$$b = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{6}.$$
 (3.28)

L'application *l* est donnée canoniquement par

$$\forall \underline{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2, l(\underline{x}) = \begin{pmatrix} 0\\0\\0\\0\\x1\\x2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^6.$$
(3.29)

Finallement, *A* est la matrice à laquelle l'application linéaire *a* (du théorème 1) est canoniquement associée, elle est donnée par

$$A = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2} & \dots & \mathbb{I}_{2} & \dots & \mathbb{O}_{2} & \dots & \mathbb{O}_{2} \\ \mathbb{O}_{2} & \dots & \mathbb{O}_{2} & \dots & \mathbb{I}_{2} & \dots & \mathbb{I}_{2} \\ N & \dots & N & \dots & 1 - N & \dots & 1 - N \\ N & \dots & 1 - N & \dots & N & \dots & 1 - N \end{pmatrix}.$$
 (3.30)

Le Théorème 1 dit dans notre cas qu'il existe une application linéaire $h \in \mathcal{L}\left(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^{4N^2}\right)$ telle que, quel que soit $y_b \in \mathbb{R}^{4N^2}$ vérifiant $a(y_b) = b$, et quel que soit $\underline{x} \in \mathbb{R}^2$, nous avons $H(\underline{x}) = \ker(a) + \{y_b + h(\underline{x})\}.$

4 Une forme plus précise des solutions

Nous allons à présent choisir l'application *h* de telle sorte que im $(h) \subset (\ker(a))^{\perp}$, de sorte qu'il soit aisé de construire une base orthonormée de \mathbb{R}^q qui soit bien
adaptée à *a*. À cette fin, rappelons nous la définition suivante (spécifiée à notre cas) et le résultat suivant d'algèbre linéaire dans un espace préhilbertien :

Définition 1 : soient $(E, ._E)$ et $(F, ._F)$ deux espaces préhilbertiens et $f \in \mathcal{L}(E, F)$, on appelle **adjoint** de *f* l'application $f^* \in \mathcal{L}(F, E)$ définie par

$$\forall (x,y) \in E \times F, f(x) \cdot Ey = x \cdot Ff^*(y).$$

$$(4.1)$$

Dans la suite, les produits scalaires $._E$ et $._F$ seront tous deux notés . par mesure de simplicité. Nous rappelons à présent un résultat numérique matriciel très pratique pour obtenir l'adjoint.

Lemme 1 : supposons que *E* et *F* soient de dimensions finies respectives *q* et *p*. Soient $B_E = (g_1, ..., g_q)$ et $B_F = (f_1, ..., f_p)$ des bases orthonormées, respectivement de *E* et *F*, alors $mat_{B_F, B_E}(f^*) = (mat_{B_E, B_F}(f))^T$.

Démonstration.

$$\forall (x, y, j, k) \in E \times F \times \llbracket 1..q \rrbracket \times \llbracket 1..p \rrbracket, (\operatorname{mat}_{B_F, B_E}(f^*))_{j,k}$$

$$= g_j \cdot f^*(f_k)$$

$$= f(g_j) \cdot f_k$$

$$= f_k \cdot f(g_j)$$

$$= (\operatorname{mat}_{B_E, B_F}(f))_{k,j}$$

$$= \left((\operatorname{mat}_{B_E, B_F}(f))^T \right)_{j,k}.$$

$$(4.2)$$

Lemme 2: $\underline{\text{on a } (f^*)^* = f, \ker(f) = (\operatorname{im}(f^*))^{\perp}}$ et finalement, sous les hypothèses du Lemme 1, $\operatorname{im}(f^*) = (\ker(f))^{\perp}$.

Démonstration. On a :

- pour le premier résultat : ∀(x, y) ∈ E × F, (f*)*(x).y = x.f*(y) = f(x).y, donc ∀(x, y) ∈ E × F, ((f*)* − f)(x).y = 0, donc ∀x ∈ E, ((f*)* − f)(x) = 0_F, donc (f*)* − f = 0_{E,F}, donc (f*)* = f;
- $\forall x \in E, x \in \ker(f) \Leftrightarrow f(x) = 0_F \Leftrightarrow \forall z \in F, f(x).z = 0 \Leftrightarrow \forall z \in F, x.f^*(z) = 0 \Leftrightarrow \forall y \in \operatorname{im}(f^*), x.y = 0 \Leftrightarrow x \in (\operatorname{im}(f^*))^{\perp}, \operatorname{donc} \ker(f) = (\operatorname{im}(f^*))^{\perp};$

— En prenant l'orthogonal du résultat précédent, on obtient $((\operatorname{im}(f^*))^{\perp})^{\perp} = (\operatorname{ker}(f))^{\perp}$. L'hypothèse du Lemme 1 garantit que $\operatorname{im}(f^*)$ est de dimension finie, de sorte que $((\operatorname{im}(f^*))^{\perp})^{\perp} = \operatorname{im}(f^*)$. Au final, on obtient $\operatorname{im}(f^*) = (\operatorname{ker}(f))^{\perp}$.

On applique à présent le Lemme 1 et le Lemme 2 à a : tout d'abord, le troisième résultat du Lemme 2 donne $\operatorname{im}(a^*) = (\operatorname{ker}(a))^{\perp}$. En tant qu'orthogonal, c'est un supplémentaire, et donc (cf. la preuve du théorème du rang), $a_{|\operatorname{im}(a^*)}$ est un isomorphisme d'espaces vectoriels (de $\operatorname{im}(a^*)$ dans $\mathbb{R}^p = \mathbb{R}^6$). Par conséquent, on a $a \circ a^* \in \mathcal{GL}(\mathbb{R}^6)$ (le groupe des automorphismes de \mathbb{R}^6). En termes matriciels, cela se traduit par $A.A^T \in \mathcal{GL}_n(\mathbb{R}^6)$ (matrice inversible). L'associativité du produit matriciel donne alors $A. \left(A^T. (A.A^T)^{-1}\right) = \mathbb{I}_6$. Soit $(g_1, ..., g_6) \in$ $(\mathbb{R}^q)^p = \left(\mathbb{R}^{4N^2}\right)^6$ la base de im $\left(a^* \circ (a \circ a^*)^{-1}\right) = \operatorname{im}(a^*) = (\operatorname{ker}(a))^{\perp}$, définie par $\forall k \in [[1..6]], g_k = \left(a^* \circ (a \circ a^*)^{-1}\right)(f_k)$, où $(f_1, ..., f_6)$ est la base canonique de \mathbb{R}^6 . Alors on a $\forall k \in [[1..6]], a(g_k) = f_k$. On peut alors, en se référant à (3.29), obtenir une expression explicite (d'une version commode) de h:

$$\forall \underline{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2, h(\underline{x}) = x_1 \cdot g_5 + x_2 \cdot g_6.$$

$$(4.3)$$

On peut aussi voir, via (3.28), que y_b est donné par

$$y_b = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 g_k. \tag{4.4}$$

On note au final (de manière redondante) que l'on a $im(h) \subset (ker(a))^{\perp}$. En combinant (3.22), (4.3)- (4.4) et le Lemme 2, on obtient

$$\forall \underline{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2, H(\underline{x}) = (\operatorname{vect}(g_1, \dots, g_6))^{\perp} + \left\{ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 g_k + x_1 g_5 + x_2 g_6 \right\}.$$
(4.5)

En prenant $(g_7, ..., g_{4N^2})$ comme étant une base orthonormée de ker $(a) = (\text{vect}(g_1, ..., g_6))^{\perp}$, l'expression de l'ensemble des solutions devient

$$\begin{cases} S = \left\{ \psi \in \mathcal{C}^{0}(\mathbb{R}^{2}, \mathbb{R}), \exists C \geq C_{\min}, \forall \underline{x} \in Q, Y(\underline{x}) = (\psi(\underline{x} - \underline{j}))_{\underline{j} \in T} \in H(\underline{x}) \cap \mathbb{S}_{4N^{2} - 1}(0_{4N^{2}}, \sqrt{C}) \right\} \\ \forall \underline{x} = (x_{1}, x_{2}) \in \mathbb{R}^{2}, H(\underline{x}) = \left\{ \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{4} g_{k} + x_{1} \cdot g_{5} + x_{2} \cdot g_{6} \right\} + \operatorname{vect}\left(g_{7}, \dots, g_{4N^{2}}\right). \end{cases}$$

$$(4.6)$$

Nous simplifions ensuite considérablement la situation par le bais du théorème suivant, qui fournit une information sur la forme des ensembles $H(\underline{x}) \cap \mathbb{S}_{4N^2-1}(0_{4N^2}, \sqrt{C})$. **Theorem 2.** Soit C > 0 et $(s,q) \in (\mathbb{N}^*)^2$ vérifiant $s \leq q$. Soit H un sous-espace affine de dimension s dans \mathbb{R}^q , vérifiant $d_q(0_q, H) < \sqrt{C}$. Alors $H \cap \mathbb{S}_{q-1}(0_q, \sqrt{C})$ est isométrique à $\mathbb{S}_{s-1}(0_s, \sqrt{C-d_q^2(0_q, H)})$.

Démonstration. Puisque dim(H) = s, H est isométrique à \mathbb{R}^s . Soit Φ une isométrie affine de \mathbb{R}^s dans H, telle que $\Phi(0_s) = p_{\perp,H}(0_q)$ (la projection orthogonale sur H de $0_q \in \mathbb{R}^q$). Alors, on a :

$$\begin{split} H \cap \mathbb{S}_{q-1} \left(0_{q}, \sqrt{C} \right) \\ &= \left\{ y \in H, || \ y \ ||_{q} = \sqrt{C} \right\} \\ &= \left\{ y \in \mathbb{R}^{q}, \exists ! z \in \mathbb{R}^{s}, y = \Phi(z), || \ y \ ||_{q} = \sqrt{C} \right\} \\ &= \left\{ y \in \mathbb{R}^{q}, \exists ! z \in \mathbb{R}^{s}, y = \Phi(z), || \ y \ ||_{q}^{2} = C \right\} \\ &= \left\{ y \in \mathbb{R}^{q}, \exists ! z \in \mathbb{R}^{s}, y = \Phi(z), || \ \Phi(0_{s}) + \Phi(z) - \Phi(0_{s}) \ ||_{q}^{2} = C \right\} \\ &= \left\{ y \in \mathbb{R}^{q}, \exists ! z \in \mathbb{R}^{s}, y = \Phi(z), || \ \Phi(0_{s}) \ ||_{q}^{2} + || \ \Phi(z) - \Phi(0_{s}) \ ||_{q}^{2} = C \right\} \\ &= \left\{ y \in \mathbb{R}^{q}, \exists ! z \in \mathbb{R}^{s}, y = \Phi(z), d_{q}^{2}(0_{q}, H) + || \ \Phi(z) - \Phi(0_{s}) \ ||_{q}^{2} = C \right\} \\ &= \left\{ y \in \mathbb{R}^{q}, \exists ! z \in \mathbb{R}^{s}, y = \Phi(z), || \ \Phi(z) - \Phi(0_{s}) \ ||_{q} = \sqrt{C - d_{q}^{2}(0_{q}, H)} \right\} \\ &= \Phi \left(\left\{ z \in \mathbb{R}^{s}, || \ \Phi(z) - \Phi(0_{s}) \ ||_{q} = \sqrt{C - d_{q}^{2}(0_{q}, H)} \right\} \right) \\ &= \Phi \left(\left\{ S_{s-1} \left(0_{s}, \sqrt{C - d_{q}^{2}(0_{q}, H)} \right) \right), \end{split} \right)$$

ce qui prouve le théorème.

Nous appliquons à présent le Théorème 2 à $H(\underline{x}), \underline{x} = (x_1, x_2) \in Q$ en prenant $p = 6, q = 4N^2 \Rightarrow s = q - p = 4N^2 - 6$. A partir de (4.5), on déduit qu'il existe une isométrie linéaire de \mathbb{R}^{4N^2-6} dans $vect(g_7, ..., g_{4N^2})$. Cette isométrie peut être étendue en une isométrie de \mathbb{R}^q . Nous avons déjà supposé que la famille $(g_7, ..., g_{4N^2})$ est orthonormée. Par le théorème de Gram-Shmidt, on peut prouver qu'il existe une base B_g complétant $(g_7, ..., g_{4N^2})$ et qui soit une base orthonormée directe de \mathbb{R}^q . Alors, la matrice de passage R_g de la base canonique B_0 de \mathbb{R}^q vers B_g est une matrice de rotation de \mathbb{R}^q .

Ensuite, on remarque par (4.5) que, dans le Théorème 2, on a

$$\forall \underline{x} = (x_1, x_2) \in Q, d_q(0_q, \sqrt{C}) = || \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 g_i + x_1 g_5 + x_2 g_6 ||_{4N^2}.$$
(4.8)

On voit ensuite que si $\Phi_{\underline{x}}$ est l'isométrie du Théorème 2 pour un certain $\underline{x} \in Q$,

alors

$$\forall \underline{x} \in Q, \Phi_{\underline{x}} = y_b + h(\underline{x}) + p_{\perp, \text{vect}(g_7, \dots, g_{4N^2})} \circ R_g.$$
(4.9)

En combinant le Théorème 2, les équations (4.3)-(4.4) et (4.8)-(4.9), on voit qu'il ne reste qu'à décrire $\bigcup_{\underline{x}\in Q} \mathbb{S}_{4N^2-7} \left(0, \sqrt{C-||\frac{1}{4}\sum_{i=1}^4 g_i + x_1g_5 + x_2g_6||^2_{4N^2}}\right)$. La description Θ doit être compatible avec la continuité par morceaux du filtre ψ . Donnons-en une traduction. Définissons l'application suivante :

$$Y: \frac{Q \to \mathbb{R}^{4N^2}}{\underline{x} \mapsto \left(\psi(\underline{x} - \underline{j})\right)_{j \in T}}.$$
(4.10)

Alors la description mentionnée ci-dessus doit être compatible avec la continuité (par morceaux) de ψ tout en respectant l'équation suivante (obtenue en combinant (4.9) et (4.10)) :

$$Y = y_b + h + p_{\perp,\text{vect}((g_7,\dots,g_{aN2})} \circ R_g \circ \Theta.$$
(4.11)

Nous utilisons juste une description générale Θ sans totalement rechercher la continuité et nous restreignons à la continuité par morceaux adaptée à la grille eulérienne (c'est-à-dire la continuité sur l'intérieur de chaque cellule de la grille eulérienne avec prolongement par continuité possible à ses bords). Nous allons juste donner les conditions de bonne définition et de continuité de Y mais sans chercher à les résoudre sur Θ . Tout d'abord, Θ est donné par la formule trigono-métrique suivante :

$$\exists (\theta_j)_{j \in [\![7..4N^2]\!]} \in (L_1(Q,\mathbb{R}))^{4N^2-7} \times \mathcal{F}(Q,\{0\}), \forall (\underline{x},j) \in Q \times [\![7..4N^2]\!], \\ \Theta_{j-6}(\underline{x}) = \sqrt{C - || \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 g_i + x_1 g_5 + x_2 g_6 ||_{4N^2}^2 \cos\left(\theta_j(\underline{x})\right) \prod_{l=7}^{j-1} \sin\left(\theta_l(\underline{x})\right). }$$
(4.12)

Pour la bonne définition et la continuité de *Y*, on devrait avoir :

— Bonne définition :

$$\begin{split} \forall (x_1, j) \in [0, 1] \times \cup_{k=1}^{2N} [\![2N(k-1) + 1..2Nk - 1]\!], Y_j(x_1, 1) &= Y_{j+1}(x_1, 0) \\ \forall (x_2, j) \in [0, 1] \times \cup_{k=1}^{2N-1} [\![2N(k-1) + 1..2Nk]\!], Y_j(1, x_2) &= Y_{j+2N}(0, x_2) \\ \forall (\underline{x}, k) \in Q \times [\![1..2N]\!], \begin{cases} Y_k(0, x_2) &= 0 \\ Y_{2N(2N-1)+k}(1, x_2) &= 0 \\ Y_{2N(k-1)+1}(x_1, 0) &= 0 \\ Y_{2Nk}(x_1, 1) &= 0 \end{cases} ; \end{split}$$

(4.13)



Figure 4.1 – Représentation géométrique de $Y(\underline{x}) \in \mathbb{R}^{4N^2}$ pour un certain $\underline{x} \in Q$.

- Continuité (sur chaque maille) :

$$\forall j \in \llbracket 1..4N^2 \rrbracket, Y_j \in \mathcal{C}^0(Q, \mathbb{R}).$$

$$(4.14)$$

On considère juste ici la condition de continuité sur chaque maille sans celle de bonne définition, ce qui signifie en réalité (si l'on ne fait pas trop attention aux valeurs au bord des cellules), que le filtre 2D à trouver sera continu par morceaux. Ces conditions, que sont les conditions (4.14), sont garanties par la continuité de $(\theta_j)_{j \in [\![1.4N^2]\!]}$. La figure 4.2 donne une représentation géométrique de la solution dans \mathbb{R}^{4N^2} pour un certain $\underline{x} \in Q$.

Par souci de concision, nous ne présentons pas les recherches effectuées durant cette thèse sur la continuité des filtres, car en l'état, elles sont plus compliquées à transcrire. Nous en donnons juste une illustration Figure 4.2 pour clore l'annexe.



Figure 4.2 – Exemple de filtre 2D continu trouvé lors de l'exploration généralisée.

Bibliographie

- Akchiche, M. (1987). Étude expérimentale du mouvement et de la déformation
 d'une capsule sous l'effet de l'écoulement d'un fluide visqueux. Application au
 globule rouge. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne.
- Angelidis, D., Chawdhary, S., and Sotiropoulos, F. (2016). Unstructured cartesian refinement with sharp interface immersed boundary method for 3d unsteady incompressible flows. Journal of Computational Physics, 325 :272–300.
- Bagchi, P. (2010). Front-tracking methods for capsules, vesicles and blood cells. Computational hydrodynamics of capsules and biological cells, pages 149–182.
- Bagchi, P. and Kalluri, R. M. (2011). Dynamic rheology of a dilute suspension of elastic capsules : effect of capsule tank-treading, swinging and tumbling. Journal of Fluid Mechanics, 669 :498–526.
- Bague, A. (2009). <u>Etude de l'atomisation en maillage adaptatif hiérachique</u>. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie.
- Barthès-Biesel, D. (1980). Motion of a spherical microcapsule freely suspended in a linear shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 100(4) :831–853.
- Barthès-Biesel, D. (1991). Role of interfacial properties on the motion and deformation of capsules in shear flow. <u>Physica A : Statistical Mechanics and its</u> Applications, 172(1) :103–124.

Barthès-Biesel, D. and Rallison, J. (1981). The time-dependent deformation of a

capsule freely suspended in a linear shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 113:251–267.

- Bayyuk, S. and Powell, K. (1993). A simulation technique for 2-D unsteady inviscid flows around arbitrarily moving and deforming bodies of arbitrary geometry. In 11th Computational Fluid Dynamics Conference, page 3391.
- Bell, J. B., Colella, P., and Glaz, H. M. (1989). A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. <u>Journal of Computational Physics</u>, 85(2):257–283.
- Bentley, B. and Leal, L. (1986a). A computer-controlled four-roll mill for investigations of particle and drop dynamics in two-dimensional linear shear flows. Journal of Fluid Mechanics, 167 :219–240.
- Bentley, B. and Leal, L. G. (1986b). An experimental investigation of drop deformation and breakup in steady, two-dimensional linear flows. <u>Journal of Fluid</u> Mechanics, 167 :241–283.
- Beyer, R. P. and Leveque, R. J. (1992). Analysis of a one-dimensional model for the immersed boundary method. <u>SIAM Journal on Numerical Analysis</u>, 29(2) :332– 364.
- Boycott, A. E. (1920). Sedimentation of Blood Corpuscles. Nature, 104(2621):532.
- Braunmüller, S., Schmid, L., and Franke, T. (2011). Dynamics of red blood cells and vesicles in microchannels of oscillating width. <u>Journal of Physics : Condensed</u> Matter, 23(18) :184116.
- Carin, M., Barthès-Biesel, D., Edwards-Lévy, F., Postel, C., and Andrei, D. C. (2003). Compression of biocompatible liquid-filled hsa-alginate capsules : Determination of the membrane mechanical properties. <u>Biotechnology and bioengineering</u>, 82(2) :207–212.
- Carroll, R. M. and Gupta, N. R. (2016). Inertial effects on the flow of capsules in cylindrical channels. International Journal of Multiphase Flow, 87 :114–123.
- Casquero, H., Zhang, Y. J., Bona-Casas, C., Dalcin, L., and Gomez, H. (2018). Non-body-fitted fluid-structure interaction : Divergence-conforming b-splines,

fully-implicit dynamics, and variational formulation. Journal of computational physics, 347 :625–653.

- Chabannes, V. (2006). <u>Vers la simulation des écoulements sanguins</u>. PhD thesis, Université de Grenoble.
- Chang, K. and Olbricht, W. (1993). Experimental studies of the deformation and breakup of a synthetic capsule in steady and unsteady simple shear flow. <u>J.</u> Fluid Mech., 250 :609—633.
- Charrier, J., Shrivastava, S., and Wu, R. (1989). Free and constrained inflation of elastic membranes in relation to thermoforming non-axisymmetric problems. The Journal of Strain Analysis for Engineering Design, 24(2) :55–74.
- Chien, S., Sung, K., Skalak, R., Usami, S., and Tözeren, A. (1978). Theoretical and experimental studies on viscoelastic properties of erythrocyte membrane. Biophys. J., 24 :463–487.
- Chorin, A. J. (1969). On the convergence of discrete approximations to the navierstokes equations. Mathematics of computation, 23(106) :341–353.
- Chu, T., Salsac, A.-V., Leclerc, E., Barthès-Biesel, D., Wurtz, H., and Edwards-Lévy,
 F. (2011). Comparison between measurements of elasticity and free amino group content of ovalbumin microcapsule membranes : discrimination of the cross-linking degree. Journal of colloid and interface science, 355(1) :81–88.
- Cui, X., Yao, X., Wang, Z., and Liu, M. (2017). A hybrid wavelet-based adaptive immersed boundary finite-difference lattice boltzmann method for twodimensional fluid–structure interaction. <u>Journal of Computational Physics</u>, 333 :24–48.
- Desai, S., Perkins, J., Harrison, B. S., and Sankar, J. (2010). Understanding release kinetics of biopolymer drug delivery microcapsules for biomedical applications. Materials Science and Engineering : B, 168(1-3) :127–131.
- Diaz, A., Barthès-Biesel, D., and Pelekasis, N. (2001). Effect of membrane viscosity on the dynamic response of an axisymmetric capsule. <u>Phys. Fluids</u>, 13 :3835– 3838.

- Diaz, A., Pelekasis, N., and Barthès-Biesel, D. (2000). Transient response of a capsule subjected to varying flow conditions : effect of internal fluid viscosity and membrane elasticity. Physics of Fluids, 12(5) :948–957.
- Doddi, S. K. and Bagchi, P. (2008). Lateral migration of a capsule in a plane poiseuille flow in a channel. <u>International Journal of Multiphase Flow</u>, 34(10) :966– 986.
- Doddi, S. K. and Bagchi, P. (2009). Three-dimensional computational modeling of multiple deformable cells flowing in microvessels. Physical Review E, 79(4).
- Dupont, C. (2014). <u>Biomécanique de capsules en écoulement</u>. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègn.
- Eggleton, C. D. and Popel, A. S. (1998). Large deformation of red blood cell ghosts in a simple shear flow. Physics of fluids, 10(8) :1834–1845.
- Fauci, L. J. and Peskin, C. S. (1988). A computational model of aquatic animal locomotion. Journal of Computational Physics, 77(1):85–108.
- Fery, A. and Weinkamer, R. (2007). Mechanical properties of micro- and nanocapsules : Single-capsule measurements. Polymer, 48 :7221–7235.
- Finkel, R. A. and Bentley, J. L. (1974). Quad trees a data structure for retrieval on composite keys. Acta informatica, 4(1) :1–9.
- Foessel, É., Walter, J., Salsac, A.-V., and Barthès-Biesel, D. (2011). Influence of internal viscosity on the large deformation and buckling of a spherical capsule in a simple shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 672 :477–486.
- Fogelson, A. L. and Peskin, C. S. (1988). A fast numerical method for solving the three-dimensional Stokes' equations in the presence of suspended particles. Journal of Computational Physics, 79(1) :50–69.
- Gibaud, E. (2015). <u>Numerical simulation of red blood cells flowing in a blood</u>
 <u>analyzer</u>. PhD Thesis, PhD thesis (Université de Montpellier, Montpellier, France).
- Gires, P.-Y., Barthès-Biesel, D., Leclerc, E., and Salsac, A.-V. (2016). Transient behavior and relaxation of microcapsules with a cross-linked human serum albumin

membrane. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials, 58 :2–10.

- Gounley, J., Draeger, E. W., and Randles, A. (2017). Numerical simulation of a compound capsule in a constricted microchannel. <u>Procedia computer science</u>, 108 :175–184.
- Griffith, B. E., Hornung, R. D., McQueen, D. M., and Peskin, C. S. (2007). An adaptive, formally second order accurate version of the immersed boundary method. Journal of Computational Physics, 223(1):10–49.
- Griffith, B. E., Luo, X., McQueen, D. M., and Peskin, C. S. (2009). Simulating the fluid dynamics of natural and prosthetic heart valves using the immersed boundary method. International Journal of Applied Mechanics, 1(01) :137–177.
- Griffith, B. E. and Peskin, C. S. (2005). On the order of accuracy of the immersed boundary method : Higher order convergence rates for sufficiently smooth problems. Journal of Computational Physics, 208(1) :75–105.
- Guckenberger, A., Schraml, M. P., Chen, P. G., Leonetti, M., and Gekle, S. (2016). On the bending algorithms for soft objects in flows. <u>Computer Physics</u> Communications, 207 :1–23.
- Hammer, P., Marlowe, O., and Stroud, A. (1956). Numerical integration over simplexes and cones. <u>Mathematical Tables and Other Aids to Computation</u>, 10(55) :130–137.
- Henning, S., Edelhoff, D., Ernst, B., Leick, S., Rehage, H., and Suter, D. (2012).
 Characterizing permeability and stability of microcapsules for controlled drug delivery by dynamic nmr microscopy. Journal of Magnetic Resonance, 221 :11–18.
- Hochmuth, R., Worthy, P., and Evans, E. (1979). Red cell extensional recovery and the determination of membrane viscosity. Biophys. J., 26 :101–114.
- Hochmuth, R. M. (2000). Micropipette aspiration of living cells. Journal of biomechanics, 33(1):15–22.

- Hu, X.-Q., Salsac, A.-V., and Barthès-Biesel, D. (2012). Flow of a spherical capsule in a pore with circular or square cross-section. <u>Journal of Fluid Mechanics</u>, 705 :176–194.
- Hu, X.-Q., Sévénié, B., Salsac, A.-V., Leclerc, E., and Barthès-Biesel, D. (2013). Characterizing the membrane properties of capsules flowing in a square-section microfluidic channel : effects of the membrane constitutive law. <u>Physical Review</u> E, 87(6) :063008.
- Huang, W.-X., Chang, C. B., and Sung, H. J. (2012). Three-dimensional simulation of elastic capsules in shear flow by the penalty immersed boundary method. Journal of Computational Physics, 231(8) :3340–3364.
- Hubans-Belkilani, V. (2001). <u>La transfusion sanguine chez les bovin</u>. PhD thesis, Ecolec Vet. M. Alfort.
- Husmann, M., Rehage, H., Dhenin, E., and Barthès-Biesel, D. (2005). Deformation and bursting of nonspherical polysiloxane microcapsules in a spinning-drop apparatus. Journal of colloid and interface science, 282(1) :109–119.
- Jund, S. (2007). <u>Méthodes d'éléments finis d'ordre élevé pour la simulation</u> numérique de la propagation d'ondes. PhD thesis, Université de Strasbourg.
- Kaoui, B. (2009). <u>Modélisation de vésicules en géométrie étendue et dans des</u> systemes micro-fluidiques. PhD thesis, Grenoble 1.
- Kessler, S., Finken, R., and Seifert, U. (2008). Swinging and tumbling of elastic capsules in shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 605 :207–226.
- Krogh, A. (1921). Studies on the physiology of capillaries : II. The reactions to local stimuli of the blood-vessels in the skin and web of the frog. <u>The Journal of</u> Physiology, 55(5-6) :412–422.
- Krogh, A., Harrop, G. A., and Rehberg, P. B. (1922). Studies on the physiology of capillaries : III. The innervation of the blood vessels in the hind legs of the frog. The Journal of Physiology, 56(3-4) :179–189.
- Krüger, T., Kaoui, B., and Harting, J. (2014). Interplay of inertia and deformability on rheological properties of a suspension of capsules. <u>Journal of Fluid</u> Mechanics, 751 :725–745.

- Krüger, T., Varnik, F., and Raabe, D. (2009). Shear stress in lattice boltzmann simulations. Physical Review E, 79(4) :046704.
- Kusters, R., Van der Heijden, T., Kaoui, B., Harting, J., and Storm, C. (2014). Forced transport of deformable containers through narrow constrictions. <u>Physical</u> Review E, 90(3) :033006.
- Lac, E. (2003). <u>Déformation et convection d'une capsule dans un écoulement de</u> Stokes tridimensionnel infini. PhD thesis, Compiègne.
- Lac, E., Barthès-Biesel, D., Pelekasis, N., and Tsamopoulos, J. (2004). Spherical capsules in three-dimensional unbounded stokes flows : effect of the membrane constitutive law and onset of buckling. Journal of Fluid Mechanics, 516 :303–334.
- Lac, E., Morel, A., and Barthès-Biesel, D. (2007). Hydrodynamic interaction between two identical capsules in simple shear flow. <u>Journal of Fluid Mechanics</u>, 573 :149–169.
- Ladyzhenskaya, O. A. (1969). <u>The mathematical theory of viscous incompressible</u> flow, volume 76. Gordon and Breach New York.
- Lee, P., Griffith, B. E., and Peskin, C. S. (2010). The immersed boundary method for advection–electrodiffusion with implicit timestepping and local mesh refinement. Journal of computational physics, 229(13) :5208–5227.
- Lefebvre, Y., Leclerc, E., Barthès-Biesel, D., Walter, J., and F., E.-L. (2008). Flow of artificial microcapsules in microfluidic channels : A method for determining the elastic properties of the membrane. Phys. Fluids, 20(12).
- Leveque, R. J. and Li, Z. (1994). The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. <u>SIAM Journal on</u> Numerical Analysis, 31(4) :1019–1044.
- Leveque, R. J. and Li, Z. (1997). Immersed interface methods for Stokes flow with elastic boundaries or surface tension. <u>SIAM Journal on Scientific Computing</u>, 18(3) :709–735.
- Li, X., Barthès-Biesel, D., and Helmy, A. (1988). Large deformations and burst of a capsule freely suspended in an elongational flow. Journal of fluid mechanics, 187 :179–196.

- Li, Z. (1994). The immersed interface method : a numerical approach for partial differential equations with interfaces. PhD thesis, University of Washington.
- Liska, S. and Colonius, T. (2017). A fast immersed boundary method for external incompressible viscous flows using lattice green's functions. <u>Journal of</u> Computational Physics, 331 :257–279.
- Liu, W. K., Jun, S., and Zhang, Y. F. (1995). Reproducing kernel particle methods. International journal for numerical methods in fluids, 20(8-9) :1081–1106.
- Mayo, A. A. and Peskin, C. S. (1992). An implicit numerical method for fluid dynamics problems with immersed elastic boundaries. <u>Contemporary Mathematics</u>, 141 :261–261.
- Mendez, S., Gibaud, E., and Nicoud, F. (2014). An unstructured solver for simulations of deformable particles in flows at arbitrary Reynolds numbers. <u>Journal</u> of computational physics, 256 :465–483.
- Milcent, T. and Maitre, E. (2014). Eulerian model of immersed elastic surfaces with full membrane elasticity. Communications in mathematical sciences.
- Misbah, C. (2014). Soft suspensions : inertia cooperates with flexibility. Journal of Fluid Mechanics, 760 :1–4.
- Mittal, R. and Iaccarino, G. (2005). Immersed boundary methods. <u>Annual Review</u> of Fluid Mechanics, 37 :239–261.
- Newren, E. P., Fogelson, A. L., Guy, R. D., and Kirby, R. M. (2007). Unconditionally stable discretizations of the immersed boundary equations. <u>Journal of</u> Computational Physics, 222(2) :702–719.
- Newren, P. E. (2007). <u>Enhancing the Immersed Boundary Method : Stability</u>, Volume Conservation and Implicit Solvers. PhD thesis, University of Utah.
- Noguchi, H. and Gompper, G. (2004). Fluid vesicles with viscous membranes in shear flow. Physical Review Letters, 93(25) :258102.
- Noguchi, H. and Gompper, G. (2005). Shape transitions of fluid vesicles and red blood cells in capillary flows. <u>Proceedings of the National Academy of Sciences</u>, 102(40) :14159–14164.

- Noguchi, H. and Gompper, G. (2007). Swinging and tumbling of fluid vesicles in shear flow. Physical Review Letters, 98(12) :128103.
- Pan, J.-H., Ni, M.-J., and Zhang, N.-M. (2018). A consistent and conservative immersed boundary method for mhd flows and moving boundary problems. Journal of Computational Physics.
- Peskin, C. S. (1972). Flow patterns around heart valves : a numerical method. Journal of computational physics, 10(2) :252–271.
- Peskin, C. S. (1977). Numerical analysis of blood flow in the heart. Journal of computational physics, 25(3) :220–252.
- Peskin, C. S. (2002). The immersed boundary method. Acta Numerica, 11:479–517.
- Peskin, C. S. and Printz, B. F. (1993). Improved volume conservation in the computation of flows with immersed elastic boundaries. <u>Journal of computational</u> physics, 105(1) :33–46.
- Pinelli, A., Naqavi, I., Piomelli, U., and Favier, J. (2010). Immersed-boundary methods for general finite-difference and finite-volume navier–stokes solvers. Journal of Computational Physics, 229(24) :9073–9091.
- Popinet, S. (2003). Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible euler equations in complex geometries. Journal of Computational Physics, 190(2) :572–600.
- Popinet, S. (2009). An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. Journal of Computational Physics, 228 :5838–5866.
- Posa, A., Vanella, M., and Balaras, E. (2017). An adaptive reconstruction for lagrangian, direct-forcing, immersed-boundary methods. <u>Journal of Computational</u> Physics, 351 :422–436.
- Pozrikidis, C. (1995). Finite deformation of liquid capsules enclosed by elastic membranes in simple shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 297 :123–152.
- Pozrikidis, C. (1998). Numerical computation in science and engineering, volume 6. Oxford university press New York.

- Putman, C. A., Van der Werf, K. O., De Grooth, B. G., Van Hulst, N. F., and Greve,
 J. (1994). Tapping mode atomic force microscopy in liquid. <u>Applied physics</u> letters, 64(18) :2454–2456.
- Rallison, J. and Acrivos, A. (1978). A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow. <u>Journal of Fluid Mechanics</u>, 89(1):191–200.
- Ramanujan, S. and Pozrikidis, C. (1998). Deformation of liquid capsules enclosed by elastic membranes in simple shear flow : Large deformations and the effect of capsule viscosity. J. Fluid Mech., 361 :117–143.
- Roma, A. M. (1996). <u>A multilevel self adaptive version of the Immersed Boundary</u> Method. PhD thesis, New York University.
- Roma, A. M., Peskin, C. S., and Berger, M. J. (1999). An adaptive version of the immersed boundary method. Journal of computational physics, 153(2):509–534.
- Salençon, J. (2005). <u>Mécanique des milieux continus : Concepts généraux</u>, volume 1. Editions Ecole Polytechnique.
- Sarkis, B., Salsac, A.-V., and Fullana, J.-M. (2017a). A fluid-structure solver for confined microcapsule flows. In Coupled Problems.
- Sarkis, B., Salsac, A.-V., and Fullana, J.-M. (2017b). A fluid-structure solver to study the relaxation of microcapsules in confined environments. In <u>Congrès Français</u> de Mécanique.
- Sato, K., Yoshida, K., Takahashi, S., and Anzai, J.-i. (2011). ph-and sugar-sensitive layer-by-layer films and microcapsules for drug delivery. <u>Advanced drug</u> delivery reviews, 63(9) :809–821.
- Shrivastava, S. and Tang, J. (1993). Large deformation finite element analysis of non-linear viscoelastic membranes with reference to thermoforming. <u>The</u> Journal of Strain Analysis for Engineering Design, 28(1):31–51.
- Sigüenza, J. (2016). <u>Fluid-structure interaction problems involving deformable</u> <u>membranes : application to blood flows at macroscopic and microscopic scales</u>. PhD thesis, Université de Montpellier.

- Singh, M., Hemant, K., Ram, M., and Shivakumar, H. (2010). Microencapsulation : A promising technique for controlled drug delivery. <u>Research in pharmaceutical</u> <u>sciences</u>, 5(2) :65.
- Stockie, J. M. (1997). Analysis and computation of the Immersed Boundaries, with application to pulp fibres. PhD thesis, University of Waterloo.
- Stockie, J. M. and Wetton, B. R. (1999). Analysis of stiffness in the immersed boundary method and implications for time-stepping schemes. <u>Journal of</u> Computational Physics, 154(1) :41–64.
- Stockie, J. M. and Wetton, B. T. (1995). Stability analysis for the immersed fiber problem. SIAM Journal on Applied Mathematics, 55(6) :1577–1591.
- Taylor, G. I. (1934). The Formation of Emulsions in Definable Fields of Flow. <u>Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering</u> Sciences, 146(858) :501–523.
- Tomaiuolo, G., Barra, M., Preziosi, V., Cassinese, A., Rotolid, B., and Guido, S. (2011). Microfluidics analysis of red blood cell membrane viscoelasticity. <u>Lab</u> Chip, 11 :449–454.
- Tran-Son-Tay, R., Sutera, S., and Rao, P. (1984). Determination of red blood cell membrane viscosity from rheoscopic observations of tank-treading motion. Biophys. J., 46 :65–72.
- Tu, C. and Peskin, C. S. (1992). Stability and instability in the computation of flows with moving immersed boundaries : a comparison of three methods. <u>SIAM</u> Journal on Scientific and Statistical Computing, 13(6) :1361–1376.
- Van Hooft, J. A., Popinet, S., van Heerwaarden, C. C., van der Linden, S. J., de Roode, S. R., and van de Wiel, B. J. (2018). Towards adaptive grids for atmospheric boundary-layer simulations. <u>Boundary-Layer Meteorology</u>, 167(3) :421– 443.
- Walter, J. (2009). <u>Couplage intégrales de frontières–éléments finis : application aux</u> <u>capsules sphériques et ellipsoïdales en écoulement</u>. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne.

- Walter, J., Salsac, A.-V., Barthès-Biesel, D., and Le Tallec, P. (2010). Coupling of finite element and boundary integral methods for a capsule in a Stokes flow. International Journal for Numerical Methods in Engineering, pages 829–850.
- Wang, Z., Sui, Y., Salsac, A.-V., Barthès-Biesel, D., and Wang, W. (2016). Motion of a spherical capsule in branched tube flow with finite inertia. <u>Journal of Fluid</u> Mechanics, 806 :603–626.
- Yan, S., Min, L., Ding, X., Chen, F., He, X., Xu, C., Zhou, H., Wang, Q., Hao, L., and Zou, J. (2016). Hematoporphyrin monomethyl ether polymer contrast agent for ultrasound/photoacoustic dual-modality imaging-guided synergistic high intensity focused ultrasound (hifu) therapy. Scientific reports, 6 :31833.
- Yazdani, A. and Bagchi, P. (2013a). Influence of membrane viscosity on capsule dynamics in shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 718 :569–595.
- Yazdani, A. and Bagchi, P. (2013b). Influence of membrane viscosity on capsule dynamics in shear flow. Journal of Fluid Mechanics, 718:569–595.
- Zhang, Y., Chan, H. F., and Leong, K. W. (2013). Advanced materials and processing for drug delivery : the past and the future. <u>Advanced drug delivery</u> reviews, 65(1) :104–120.