

Titre en français : Modélisation numérique de particules élastiques biomimétiques : Dynamique, transport surfacique et séparation de phase

Titre en anglais : Numerical modeling of biomimetic elastic particles: Dynamics, surface transport and phase separation

Nom du directeur de thèse : Paul G. Chen / Marc Jaeger

Tel : 06 51 79 04 56

E-Mail : paul-gang.chen@cnr.fr; marc-jaeger@centrale-marseille.fr

Laboratoire : [M2P2](#), UMR 7340, CNRS/AMU/ECM

Financement : demandé

Type de financement : bourse ministérielle

Résumé en français :

Le sujet de thèse s'inscrit dans la continuité de notre activité de modélisation (mathématique, physique et numérique) portant sur des micro-objets déformables dont le comportement mécanique est piloté par les propriétés viscoélastiques de leur membrane. La structure de cette dernière peut être plus ou moins complexe, pouvant être une simple interface comme dans le cas d'une goutte, dont la rhéologie de surface est alors réglementée par les variations de sa tension en présence de surfactants. Les applications dans ce domaine sont nombreuses, telles que la stabilisation des émulsions et des mousses. Il peut également s'agir d'une membrane, milieu matériel surfacique à part entière, pouvant être de nature solide comme la membrane polymérisée d'une capsule ou principalement fluide dans le cas de la membrane lipidique auto-assemblée d'une vésicule. Dans le premier cas, une forte déformation de l'objet sous l'action d'un écoulement des fluides environnants peut s'accompagner d'instabilités mécaniques de la membrane avec l'apparition de plis de flambement. Dans le second cas, elle s'accompagne d'un écoulement surfacique des constituants de la membrane. Dans tous les cas, interface ou membrane (fluide ou solide), il est donc question de couplage entre le comportement global sous l'action des stress environnants et le transport surfacique. Dans le cas d'une surface fluide, ce transport surfacique peut présenter la même richesse que la mécanique des fluides classique (convection, viscosité, diffusion avec éventuellement séparation de phase). Il porte également la spécificité de devoir être formulé en géométrie Riemannienne en considérant le couplage avec la courbure. Les applications possibles sont également nombreuses, comme en agro-alimentaire et en cosmétique. Cependant, la complexité maximale se trouve dans la nature avec la membrane cellulaire constituée d'une membrane fluide (membrane plasmique) couplée à une membrane solide (cytosquelette). Ce dernier est en outre un milieu actif avec la capacité de remodelage par cinétique active de polymérisation/dépolymérisation. Considérant en plus la variété de protéines qui peuplent la membrane plasmique, l'ensemble forme un senseur du milieu environnant aux capacités de mécanotransduction incroyables.

Notre code maison s'est développé en considérant d'abord le comportement global de ces types d'objet déformable sous stress hydrodynamique. Utilisant la méthode des éléments finis de frontière,

seules les surfaces ont besoin d'être considérées. Leur géométrie est très précisément représentée via la subdivision de Loop. Comme tous les autres champs surfaciques du problème profitent de la même discrétisation, notre approche relève de l'analyse isogéométrique. La considération des hétérogénéités de surface et du transport de surface afférent est plus récente. Nos derniers travaux en date portent sur un phénomène de mécanotransduction membranaire intervenant dans l'activation d'un lymphocyte T en immunologie.

L'objectif de cette thèse est de consolider et exploiter le potentiel offert par ces derniers développements, tant sur le plan du développement numérique que sur l'exploitation des résultats numériques. Nous sommes à la recherche d'un(e) candidat(e) ayant une solide formation en mécanique des fluides, physique ou mathématiques appliquées et une expérience en modélisation numérique. Le/la candidat(e) aura accès au Mésocentre de l'Université Aix-Marseille et collaborera avec des chercheurs d'autres laboratoires. Le travail impliquera la réalisation de recherches bibliographiques, le travail avec notre code numérique, l'amélioration de l'approche numérique, la réalisation d'études paramétriques et l'analyse des résultats, ainsi que la rédaction scientifique.

Résumé en anglais :

The subject of this thesis is a continuation of our modeling activity (mathematical, physical, and numerical) on deformable micro-objects whose mechanistic behavior is controlled by the viscoelastic properties of their membrane. The structure of the latter can be more or less complex, being a simple interface as in the case of a drop, whose surface rheology is then regulated by the variations of its tension in the presence of surfactants. Applications in this field are numerous, such as the stabilization of emulsions and foams. It can also be a membrane, a surface material medium, which can be solid in nature such as the polymerized membrane of a capsule or mainly fluid in the case of the self-assembled lipid membrane of a vesicle. In the first case, a strong deformation of the object under the action of a flow of surrounding fluids can be accompanied by mechanical instabilities of the membrane with the appearance of wrinkling. In the second case, it is accompanied by a surface flow of the components of the membrane. In all cases, interface, or membrane (fluid or solid), it is thus a question of coupling between the global behavior under the action of the surrounding stresses and the surface transport. In the case of a fluid surface, this surface transport can present the same richness as the classical fluid mechanics (convection, viscosity, diffusion with possibly phase separation). It also has the specificity of having to be formulated in Riemannian geometry by considering the coupling with the curvature. The possible applications are also numerous, such as in food processing and cosmetics. However, the maximum complexity is found in the nature with the cell membrane made of a fluid membrane (plasma membrane) coupled to a solid membrane (cytoskeleton). The latter is also an active medium with the capacity of remodeling by active kinetics of polymerization/depolymerization. Also considering the variety of proteins that populate the plasma membrane, the ensemble forms a sensor of the surrounding environment with incredible mechanotransduction capabilities.

Our in-house code was developed by first considering the global behavior of these types of deformable objects under hydrodynamic stress. Using the boundary element method, only the surfaces need to be considered. Their geometry is very precisely represented via the Loop subdivision. As all other surface fields of the problem benefit from the same discretization, our approach is based on isogeometric analysis. The consideration of surface heterogeneities and the related surface transport is more recent. Our latest work concerns a membrane mechanotransduction phenomenon involved in the activation of a T lymphocyte in immunology.

The objective of this thesis is to consolidate and exploit the potential offered by these latest developments, both in terms of numerical development and exploitation of numerical results. We are seeking a candidate with a strong background in fluid mechanics, physics, or applied mathematics and experience in numerical modelling to work with our team. The candidate will have access to the Computing Facility of Aix-Marseille University and collaborate with researchers from other laboratories. The work will involve conducting bibliographic research and state-of-the-art analysis, working with our numerical code, improving the numerical approach, conducting parametric studies and analyzing results, as well as scientific writing.

Profil du candidat recherché :

Le(a) candidat(e) aura une formation solide en mécanique des fluides, physique ou mathématiques appliquées et une expérience en modélisation numérique. Il/elle sera motivé(e) par une approche couplant théorie et numérique et par les problématiques aux interfaces disciplinaires : mécanique, matière molle et biomécanique/physique.

Publications récentes sur le sujet (Recent publications of the group on the subject) :

1. G. Boedec, M. Leonetti and M. Jaeger, Isogeometric FEM-BEM simulations of drop, capsule, and vesicle dynamics in Stokes flow, *J. Comput. Phys.* **342**, 117-138 (2017).
2. J.M. Lyu, P.G. Chen, G. Boedec, M. Leonetti & M. Jaeger, Hybrid continuum-coarse-grained modeling of erythrocytes, *C. R. Mécanique* **346**, 439-448 (2018).
3. P.G. Chen, J.M. Lyu, M. Jaeger & M. Leonetti, Shape transition and hydrodynamics of vesicles in tube flow, *Phys. Rev. Fluids* **5**, 043602 (2020).
4. J.M. Lyu, P.G. Chen, G. Boedec, M. Leonetti & M. Jaeger, An isogeometric boundary element method for soft particles flowing in microfluidic channels, *Comput. Fluids* **214**, 104786 (2021).
5. J.M. Lyu, P.G. Chen, A. Farutin, M. Jaeger, C. Misbah & M. Leonetti, Swirling of vesicles: Shapes and dynamics in Poiseuille flow as a model of RBC microcirculation, *Phys. Rev. Fluids* **8**, L021602 (2023).

Insertion professionnelle après thèse : recherche publique et/ou privée

Ce domaine scientifique connaît un intérêt croissant, ces dernières années à la fois dans le monde académique et dans l'industrie. Le doctorant acquerra de larges compétences en simulations numériques des systèmes multiphasiques et une expertise dans la physico-chimie des membranes.