



Rapport de stage : Modélisation mixte pour l'étude de l'écoulement sanguin dans la microcirculation cérébrale

Effectué à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse du 02/2013 au 07/2013



Stage en vue de l'obtention du diplôme de master recherche
de l'université Paul Sabatier en dynamique des fluides

Stagiaire : Farah Yasmina HOUDROGE
Encadrants : Sylvie LORTHOIS (CR CNRS)
Michel QUINTARD (DR CNRS)
Co-encadrant : Yohan DAVIT (CR CNRS)

Résumé

Ce document constitue le rapport de stage mené dans le cadre du Master 2 Recherche en dynamique des fluides effectué à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT), au sein du Groupe d'Études sur les Milieux Poreux (GEMP) et sous la direction de Sylvie Lorthois, Michel Quintard et Yohan Davit. Les activités de ce groupe sont orientées vers l'analyse et la modélisation des comportements fluidiques (écoulements, transferts de matière ou de chaleur, changements de phase...) dans les milieux géologiques, manufacturés et biologiques. C'est dans ce dernier que le stage s'inscrit : le but du stage est de mettre en place un modèle couplé pour l'étude de l'écoulement du sang dans le cerveau et la quantification de la pression et du débit dans le milieu.

On parle de modèle couplé car les vaisseaux sanguins présentent des caractéristiques et des ordres de grandeurs différentes et la modélisation de l'écoulement du sang dans ce système requiert donc des descriptions variées. D'une part, les « gros vaisseaux » qui sont les artères, les veines, les artérioles et les veinules sont représentés par un réseau de pores où l'écoulement est régi par la loi de Poiseuille dans chaque branche, loi qui relie le débit à la différence de pression de part et d'autre d'une conduite cylindrique. D'autre part, le lit capillaire contenant les « petits vaisseaux » nommés les vaisseaux capillaires est considéré comme un continuum et homogénéisé à l'échelle de Darcy. L'écoulement du sang dans ce milieu est alors caractérisé par la loi de Darcy qui donne la relation entre la vitesse de filtration et le gradient de pression dans un milieu poreux.

Le couplage entre ces deux modèles est une tâche délicate puisqu'il fait appel à des problématiques de modélisation rencontrées en industrie pétrolière. Du calcul réseau, un débit est récupéré et ensuite injecté dans le milieu homogénéisé aux endroits où les artères rentrent dans le domaine de calcul et où les veines en sortent. Ce débit, placé au sein d'une « maille source », donne une valeur de la pression qui est variable en fonction de la taille de la maille et qui n'est pas représentative de la pression réelle figurant à l'extrémité du gros vaisseau. Pour corriger cela, nous avons mené, d'une part, une étude théorique qui donne accès à l'expression analytique de la pression aux alentours d'une source sphérique tridimensionnelle et, d'autre part, une étude du schéma de discrétisation numérique qui donne l'expression analytique de la pression numérique aux alentours de la source. Ces deux solutions nous ont permis d'établir une relation entre la pression au sein de la maille source, la pression réelle à l'extrémité du vaisseau et le débit, et de corriger ainsi l'erreur numérique due au couplage.

Le développement de ce modèle a ensuite été transcrit sous OpenFOAM®. Une analogie électrique du système d'étude permet de récupérer une approximation du champ de pression moyen et du débit dans le milieu, que nous utilisons ensuite pour initialiser le système afin de rendre la simulation moins gourmande en temps de calcul. En outre, le solveur linéaire multi-grille *GAMG* a prouvé être le plus adapté à ces simulations puisqu'il permet de réduire les temps de calcul par 8 en comparaison avec un autre solveur linéaire.

Abstract

This document presents the graduation internship undertaken for the Research Master in Fluid Dynamics title of the Paul Sabatier University of Toulouse. It took place within the Porous Media Study Group (Group d'Etudes sur les Milieux Poreux – GEMP) of the Fluid Mechanics Institute of Toulouse (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse – IMFT), under the supervision of Sylvie Lorthois, Michel Quintard and Yohan Davit. GEMP activities are directed towards analysing and modelling fluid behaviour within porous media such as geological media, manufactured media and biological media. This study aims at creating a coupled model to represent cerebral circulation and quantify its pressure and flow rates.

Since blood vessels in the brain are of varying diameters, two different models, based on two different characteristic dimensions, underpin our new model. On the one hand, big vessels like arteries, veins, arterioles and venules are represented as a porous network where the flow of blood answers to the Hagen–Poiseuille equation, which relates the flow rate to the differential pressure in a cylindrical pipe. On the other hand, the capillary bed is represented as a continuum, and is considered homogeneous on the Darcy scale. Blood flow in the capillary bed thus follows Darcy's law, which relates the instantaneous discharge rate to the differential pressure over a given distance.

The approach used for the coupling of these two models is similar to the one used in the oil industry. The porous network model, or vascular graph model (VGM), provides us with a throughput that is directly injected into the homogeneous medium at the junctions with the bigger vessels. However, the pressure computed following this injection varies with the mesh size and is not representative of the real “bottom hole pressure” imposed on the tip of the vessel. In order to account for this approximation error, the analytical expression of pressure in the vicinity of a spherical source was equated with the analytical expression of the pressure computed (using a numerical scheme) in the whereabouts of that same source. Therefore, an equation relating flow rate to bottom hole pressure and pressure within the grid cell was established, which allowed for the mesh pressure to accurately represent the real pressure at the tip of the vessel.

This coupled model was then coded in OpenFOAM®. An electrical network analogy allowed us to compute mean pressure and flow rate fields, which proved to be satisfactory initial conditions as they considerably reduced simulation time. Furthermore, the multigrid linear solver *GAMG* was also determined to be the most adequate solver for this computation as it outperformed the other solvers : the calculations are up to 8 times faster compared to other linear solvers like *PCG*, given the simple geometry of our study system.

Remerciements

J'adresse d'abord mes sincères remerciements à mes encadrants Sylvie Lorthois, Michel Quintard et Yohan Davit pour m'avoir donné l'opportunité de valoriser mon parcours universitaire par un premier projet de recherche sous leur direction. Ce stage fut très enrichissant d'un point de vue scientifique et personnel grâce à votre encadrement, votre expérience et votre soutien.

Je vois difficilement comment ce projet aurait vu le jour sans la formation *Initiation à la CFD open-source avec le code OpenFOAM®* dirigée par Cyprien Soulain à laquelle j'ai assisté. Cyprien, merci de m'avoir « lancé dans l'aventure OpenFOAM® », de m'avoir transmis une partie de ton savoir-faire et de tes connaissances dans le domaine et d'avoir contribué à l'avancement et à l'aboutissement de ce projet.

Aussi, un chaleureux merci à tous les enseignants qui ont suivi ma formation depuis mes premières années à l'Université Paul Sabatier, Toulouse III. C'est grâce à la qualité de votre enseignement et à votre dévouement que j'ai pu développer mon ambition pour les sciences, notamment pour les mathématiques, la dynamique des fluides, les transferts thermiques, les méthodes numériques et la biomécanique.

Enfin, je souhaite conclure en remerciant mes amis et ma famille, tout particulièrement mes parents et mon frère, pour leur soutien continu et inconditionnel. Mes parents, merci pour votre générosité, votre discernement, et de m'avoir transmis votre passion pour les mathématiques depuis mon plus jeune âge et, mon frère, un grand merci pour tes conseils, tes relectures et les corrections du présent mémoire.

Table des matières

1	Introduction	5
2	État de l'art	7
2.1	Introduction	7
2.2	Modélisation des gros vaisseaux sanguins	8
2.2.1	Identification du réseau vasculaire	8
2.2.2	Les équations du problème	9
2.2.3	Calcul de la pression et du débit	10
2.3	Modélisation des vaisseaux capillaires	11
2.3.1	Le cerveau comme un milieu poreux	11
2.3.2	Écoulements en milieux poreux	12
2.4	Conclusion	13
3	Mise en place du modèle couplé	14
3.1	Introduction	14
3.2	Positionnement du problème	15
3.3	Préliminaires	15
3.4	Étude analytique	16
3.4.1	Équations à résoudre	17
3.4.2	Résolution dans le cas d'un écoulement sphérique	17
3.4.3	Correction du rayon	18
3.5	Modèle de puits	20
3.5.1	Méthodologie	21
3.5.2	Discretisation des équations	21
3.5.3	Étude numérique	23
3.6	Récapitulatif	24
3.7	Validation du modèle	24
3.8	Interaction entre sources	25
3.9	Conclusion	25

4	Résolution numérique	27
4.1	Introduction	27
4.2	Outils numériques	27
4.2.1	Plateforme de calcul : OpenFOAM®	27
4.2.2	Géométrie et maillage	29
4.3	Résolution numérique du problème couplé	31
4.3.1	Procédure de résolution	31
4.3.2	Algorithme de résolution	31
4.4	Optimisation du code	32
4.4.1	Choix des solveurs linéaires de résolution	32
4.4.2	Analogie électrique	33
4.4.3	Comparaison entre les différentes méthodes	37
4.5	Conclusion	38
5	Conclusions et perspectives	40
	Appendices	42
A	Courbes de pressions à différents endroits	42
B	Schéma numérique	44
	Bibliographie	45

Table des figures

2.1	Représentation du système vasculaire	7
2.2	Schéma du graphe vasculaire	8
2.3	Représentation cylindrique des vaisseaux sanguins	9
2.4	Les différentes échelles du milieu cervical	12
2.5	Représentation schématique du modèle type réseau et du modèle homogénéisé	13
3.1	Représentation schématique du modèle couplé	14
3.2	Courbes de pression : analytique vs DNS	19
3.3	Courbes de pression après correction : analytique vs DNS	19
3.4	Géométrie de la DNS et du modèle point source	20
3.5	Comparaison entre la pression obtenue par DNS et la pression obtenue pour le cas point source pour différents maillages.	21
3.6	$(P(r_{i,j}) - P_0)/\frac{\mu Q}{4\pi K h}$ en fonction de $\frac{1}{n}$ pour différents maillages.	24
3.7	La pression prédite par le modèle de puits en fonction de la pression réelle	25
3.8	Erreur relative en fonction de la distance entre deux points sources	26
4.1	Maillage du cube	29
4.2	Maillage raffiné autour du cylindre	30
4.3	Convergence du maillage	30
4.4	Algorithme de résolution	32
4.5	Analogie électrique du système d'étude : circuit en série	33
4.6	Simulation pour 1 artère en entrée et 1 veine en sortie	35
4.7	Analogie électrique du système d'étude : circuit en parallèle	36
4.8	Simulation pour 2 artères en entrée et une veine en sortie	37

Introduction

La circulation sanguine présente des fonctions qui sont indispensables à l'activité d'un organisme vivant. Les artères fournissent l'oxygène, le glucose et d'autres nutriments tandis que les veines transportent le sang désoxygéné vers le cœur tout en éliminant le dioxyde de carbone, l'acide lactique et bien d'autres produits métaboliques. La jonction entre les artères et les veines se fait à travers un réseau de capillaires, c'est-à-dire un réseau de vaisseaux sanguins dont le diamètre est compris entre 4 et 10 millièmes de mètre. Au niveau du cerveau, la circulation du sang est un mécanisme essentiel pour l'activité neuronale. En effet, non seulement elle assure les échanges avec le tissu environnant, mais aussi elle alimente les neurones en oxygène et nutriments et régule le débit sanguin en fonction de l'activité neuronale. L'étude d'un tel système est complexe non seulement d'un point de vue mécanique, mais aussi biologique puisque énormément de facteurs rentrent en compte et contribuent chacun à l'écoulement du sang dans les vaisseaux. Ses applications se font surtout dans le domaine de la médecine notamment pour la compréhension et le diagnostic de certaines maladies de vieillissement (telle la maladie d'Alzheimer, qui est due à une perte progressive de neurones) et métaboliques (comme l'hypertension artérielle caractérisée par une pression artérielle trop élevée).

Une des complexités majeures dans la modélisation de ce système circulatoire figure dans ses géométries et échelles caractéristiques qui sont différentes que l'on considère les vaisseaux capillaires ou les plus gros vaisseaux (artères et artérioles, veines et veinules). En effet, ces dernières représentent un réseau de type arborescent (fractal) dont le diamètre est compris entre 9 et 100 μm tandis que l'ensemble des vaisseaux capillaires, de diamètre compris entre 4 et 9 μm , forme un réseau maillé complexe. Afin de réduire les coûts de calcul, on évite de modéliser tous les vaisseaux capillaires vu leur petite taille, leur complexité géométrique et leur abondance; on est donc ramené à décrire l'écoulement en utilisant deux modèles distincts. D'une part, une approche de type réseau de pores est dédiée aux gros vaisseaux et, d'autre part, le milieu capillaire est homogénéisé et modélisé à une échelle supérieure, l'échelle de Darcy. Ces deux modèles sont présentés et expliqués dans la partie 2 de ce mémoire.

Finalement, le but de ce stage étant de coupler les deux modèles, nous consacrerons la partie 3 à ce couplage tout en détaillant les démarches suivies et les résultats obtenus, et la partie 4 aux outils numériques utilisés et à la méthode suivie pour établir le code numérique.

Ce rapport présente donc une synthèse des développements théoriques et numériques effectués, des procédures de programmation utilisées, ainsi qu'une analyse des résultats obtenus et une étude d'optimisation du code développé.

2.1 Introduction

Diverses échelles vasculaires se distinguent dans le cerveau humain. D'une part, il y a les « gros vaisseaux » qui représentent les artères, les veines, les artérioles et les veinules (cf. figure 2.1). Leur diamètre varie entre quelques dizaines de micromètres jusqu'au millimètre. D'autre part, il y a les « petits vaisseaux » ou vaisseaux capillaires, qui sont les plus fins et plus petits vaisseaux sanguins et dont le diamètre est compris entre 4 et 10 μm .

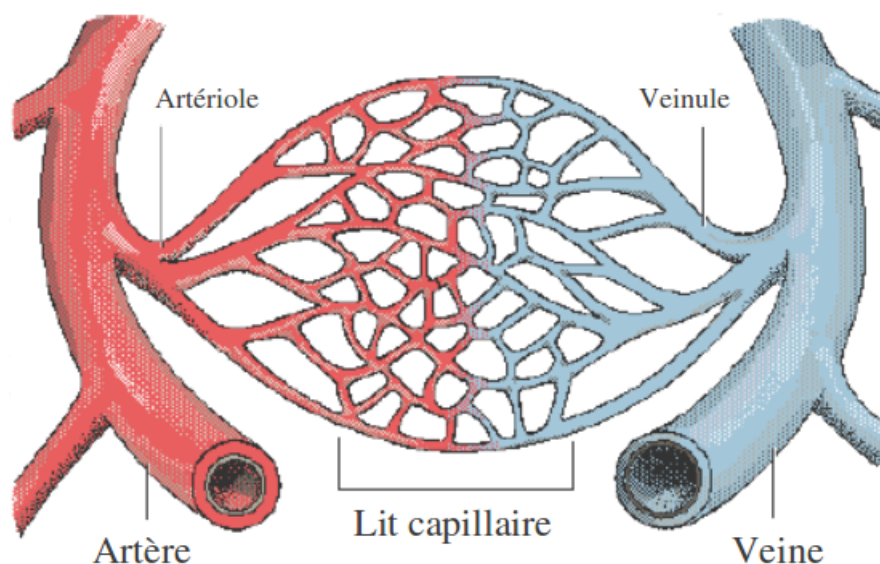


Figure 2.1 – Représentation du système vasculaire

Du fait de ces différences de tailles caractéristiques, il est en général très difficile de modéliser la vasculature en totalité. Pour réduire les coûts de calcul, il est donc préférable de considérer deux modèles distincts pour décrire l'écoulement du sang dans les vaisseaux,

chacun correspondant à une échelle différente. C'est ce dont va traiter cette première partie du rapport. Dans un premier temps, on voit comment on modélise les artères, les veines, les artérioles et les veinules comme un réseau de pores où l'écoulement est donné par application de la loi de Poiseuille dans chaque branche, et ensuite comment le lit capillaire est quant à lui considéré comme un milieu poreux dont l'écoulement est régi par la loi de Darcy.

2.2 Modélisation des gros vaisseaux sanguins

L'ensemble des gros vaisseaux sanguins représente un réseau de type arborescent (fractal). Dans cette section, on montre comment ce réseau et l'écoulement du sang à son niveau sont modélisés. On parle alors de modèle de graphe vasculaire (MGV) ou de réseau de pores.

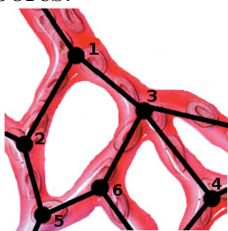


Figure 2.2 – Schéma du graphe vasculaire d'après [1]. *al.* [1].

Le réseau de pores décrit le flux dans le réseau vasculaire (artérioles et veinules comprises). L'idée est de représenter ces vaisseaux par un graphe, c'est-à-dire un ensemble de nœuds liés par des branches. Les nœuds sont les endroits où les vaisseaux bifurquent ou se terminent et les branches sont les vaisseaux-mêmes (illustration 2.2). Dans la suite, l'indice i indique le numéro nœud et ij désigne la branche allant du nœud i au nœud j . Cette section est inspirée des travaux de Reichold *et al.* [1].

2.2.1 Identification du réseau vasculaire

Afin d'identifier les différents types de vaisseaux présents dans le cerveau, il nous faut en premier effectuer une visualisation de l'organe. Celle-ci peut se faire par Tomographie par Émission de Positons (TEP), qui permet de mesurer en trois dimensions et à l'échelle macroscopique l'activité métabolique d'un organe (ici le cerveau) grâce aux émissions produites par les positons issus de la désintégration d'un produit radioactif injecté dans le patient.

Une fois l'image effectuée, on identifie les médianes de chaque vaisseau auxquelles on leur associe un rayon moyen : chaque vaisseau est donc représenté par un cylindre. A noter qu'en général, le diamètre des vaisseaux varie en fonction de la pression transmurale¹. Dans ce cas, se référer au paragraphe 2.2.3 pour voir comment ce phénomène peut être pris en compte dans le MGV. Ensuite, on identifie les vaisseaux larges (veines et artères) et on fixe des conditions aux limites sur la pression appropriées aux nœuds correspondants (table de références de Zweifach [2]). Aussi, il est judicieux de remarquer que l'approximation cylindrique ne change rien aux résultats. En effet, le nombre de Reynolds étant inférieur à 2 dans ce type d'écoulements, les effets inertiels sont donc négligeables et le profil de vitesse transversal est uniforme indépendamment du chemin suivi [1]. L'approximation cylindrique des vaisseaux est représentée dans la figure 2.3.

1. La pression transmurale est la différence entre la pression intravasculaire et extravasculaire.

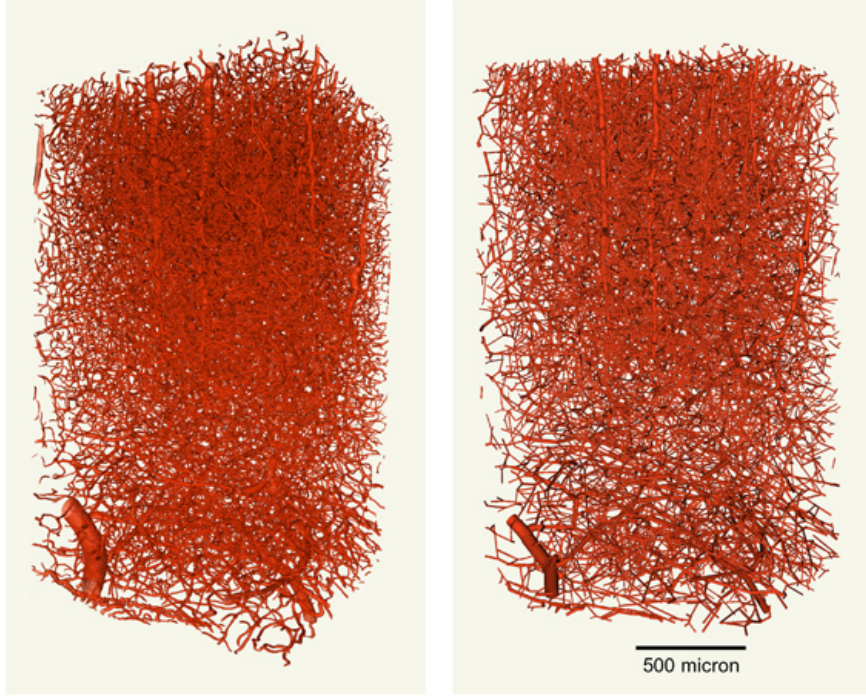


Figure 2.3 – Représentation cylindrique des vaisseaux sanguins

2.2.2 Les équations du problème

Conductance

On définit la conductance d'un vaisseau G comme étant l'inverse de sa résistance R à l'écoulement :

$$G = \frac{1}{R} = \alpha \frac{S^2}{8\pi\mu L} \quad (2.1)$$

où S , L sont la section (m^2) et la longueur (m) du vaisseau respectivement, μ est la viscosité dynamique du sang ($kg.m^{-1}.s^{-1}$) et α est la constante de Hagen-Poiseuille². Cependant, la viscosité dynamique du sang n'est généralement pas constante. En effet, 99% des cellules du sang sont composées de globules rouges (le reste étant des globules blancs, des plaquettes et un liquide physiologique nommé le plasma) et près des parois, la vitesse de translation et de rotation des particules est modifiée, ce qui crée une composante radiale de la vitesse. Par conséquent, les globules rouges migrent vers l'axe central du vaisseau, ce qui entraîne la formation d'un noyau central de concentration élevée en globules rouges et d'un manchon plasmatique qui en est presque totalement dépourvu. La viscosité dynamique du sang n'est donc pas constante sur une section droite du vaisseau, et varie en fonction de son diamètre et de l'hématocrite³ local. D'une part, une équation empirique sur la viscosité dynamique apparente comme fonction de l'hématocrite a été mise en place par Lipowsky *et al.* [3] et d'autre part, Pries *et al* [4] ont mesuré, pour de nombreux vaisseaux de diamètres variés, la valeur de l'hématocrite correspondant.

2. si $\alpha = 1$ alors l'équation (2.1) représente la conductance dans le cas d'un écoulement de Poiseuille dans une conduite parfaitement cylindrique.

3. Dans le cas général, on parle d'hématocrite pour désigner le pourcentage relatif du volume de globules rouges circulant dans le sang par rapport au volume total du sang.

Débit volumique

Le débit volumique Q ($m^3.s^{-1}$) à travers le vaisseau ij est le produit de sa conductance G_{ij} par la différence de pression $\Delta P_{ij} = P_i - P_j$ sur toute sa longueur :

$$Q_{ij} = G_{ij} \Delta P_{ij} = \alpha \frac{S_{ij}^2}{8\pi\mu L_{ij}} \Delta P_{ij} \quad (2.2)$$

Équation de continuité

À chaque nœud i , l'équation de continuité (qui dérive de l'équation de quantité de mouvement) s'écrit :

$$\frac{\partial V_i}{\partial t} + \sum_j Q_{ij} = q_i \quad (2.3)$$

avec V_i le volume associé au nœud i , Q_{ij} le débit volumique du nœud i au nœud adjacent j et q_i un terme source. Ce dernier terme est non nul aux endroits où les artères entrent ou les veines quittent le domaine de calcul, dans ce cas des conditions aux limites doivent être fixées soit sur le débit, soit sur la pression.

2.2.3 Calcul de la pression et du débit

En insérant l'équation (2.2) dans l'équation (2.3) on obtient :

$$\frac{\partial V_i}{\partial t} + \sum_j G_{ij} (P_i - P_j) = q_i \quad (2.4)$$

Or, en supposant dans un premier temps que les vaisseaux sanguins ne sont pas élastiques, le premier terme de l'équation (2.4) disparaît. Pour calculer les valeurs de la pression $P = (P_1, \dots, P_n)^T$ aux différents nœuds i on a donc le système matriciel linéaire suivant à résoudre :

$$\mathbf{M.P} = \mathbf{q} \quad (2.5)$$

Une fois la pression calculée, il suffit d'utiliser l'équation (2.2) pour en déduire le débit volumique.

Prise en compte de l'élasticité des vaisseaux

Nous avons abordé la possibilité de prendre en compte la variation du diamètre des vaisseaux en fonction de la pression transmurale. Le MGCV peut éventuellement prendre cet effet en compte en rendant la section droite des vaisseaux dépendante de la pression :

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{V_i^{n+1} - V_i^n}{\Delta t} = \frac{(V_i^n + dV_i) - V_i^n}{\Delta t} \quad (2.6)$$

avec

$$dV_i = \frac{1}{2} \sum_j \frac{L_{ij}}{2} \left(\left(\frac{\partial A_{ij}}{\partial P_i} \right) dP_i + \left(\frac{\partial A_{ij}}{\partial P_j} \right) dP_j \right)$$

L'indice n dénote le pas de temps. Dans ce cas, on ne peut pas se contenter de l'équation (2.4) valide aux nœuds du réseau, il nous faut avoir une équation tout le long

des vaisseaux. Pour les valeurs de $\frac{\partial A}{\partial P}$, la relation pression-volume proposée par Mandeville *et al.* [5] peut, entre autres, être utilisée. La prise en compte de cette dilatation est utile notamment pour l'étude de l'occlusion d'une artère par exemple (ce qui a été le cas dans l'article de J. Reichold *et al.* [1]).

2.3 Modélisation des vaisseaux capillaires

Le modèle de graphe vasculaire vu à la section 2.2 est utilisé par de nombreux groupes de recherche (Reichold *et al.* [1], Erbertseder *et al.* [6], groupe GEMP de l'IMFT [7], [8],...) puisque que c'est un modèle relativement simple à reproduire, conforme à la réalité et sur lequel de nombreuses études variées peuvent se faire. Pour ce qui est du lit capillaire, l'approche discrète utilisée par le MGv peut difficilement y être appliquée à cause de l'abondance et de la complexité géométrique des vaisseaux capillaires (temps de calcul très élevé dans ce cas).

Ainsi, une approximation continue (soit une homogénéisation) du réseau capillaire est effectuée, et le but est de trouver le lien entre le comportement à l'échelle des arborescences (artères, veines, artérioles et veinules) et les processus à l'échelle microscopique (capillaires). Pour ce faire, on considère le cerveau comme un milieu poreux où le tissu cérébral représente la matrice diffusive et le lit vasculaire intra-cortical, le réseau inter-connecté des pores. En effet, les milieux poreux ont souvent un comportement homogène dans leur ensemble (non pas à l'échelle des pores mais à l'échelle macroscopique) et l'intérêt de cette approche est d'appliquer les connaissances que l'on a en terme de comportement d'un fluide dans un milieu poreux au cerveau.

2.3.1 Le cerveau comme un milieu poreux

Comme on le voit sur la figure 2.4, trois échelles se distinguent à nous :

- **Échelle macroscopique** : de longueur caractéristique L , c'est l'échelle la plus grande et qui est de l'ordre de grandeur du système. Les mesures expérimentales effectuées en laboratoire correspondent le plus souvent à cette échelle (comme pour l'obtention des images TEP). Elle englobe tout le réseau vasculaire des artères aux veines en passant par les capillaires.
- **Échelle microscopique** : de longueur caractéristique l ($l \ll L$), c'est la plus petite échelle qui correspond à l'échelle du vaisseau capillaire formant le milieu poreux en question.
- **Échelle de Darcy** : elle représente l'échelle intermédiaire entre le macroscopique et le microscopique. Elle englobe tout le réseau capillaire et c'est donc à ce niveau là que s'effectue l'homogénéisation du milieu.

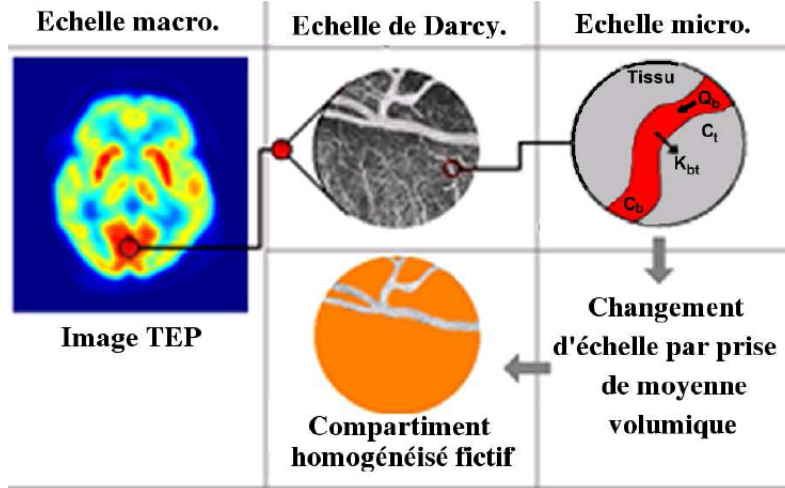


Figure 2.4 – Les différentes échelles du milieu cervical

2.3.2 Écoulements en milieux poreux

Historique

Henry Darcy est un hydraulicien français né en 1803 à Dijon. Suite à une série d'expériences effectuées sur l'écoulement de l'eau à travers des massifs de sable dans des conduites et des canaux avec surface libre, il publia en 1856 son célèbre livre « Les fontaines publiques de la ville de Dijon » [9], [10] dans lequel il énonce, pour la première fois, la fameuse loi de Darcy qui décrit l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux.

La loi de Darcy

La loi de Darcy, telle que formulée par Henry Darcy, traduit la relation entre le débit volumique Q d'un fluide, le coefficient de perméabilité K du milieu poreux, la surface S de la section étudiée et le gradient hydraulique $\frac{\Delta H}{L}$ et s'exprime par :

$$Q = KS \frac{\Delta H}{L} \quad (2.7)$$

Cette relation est globale et est valable pour un massif poreux homogène et un écoulement uniforme.

Variante de la loi de Darcy

La loi de Darcy initiale (2.7) peut aussi s'exprimer localement de la manière suivante :

$$\mathbf{U} = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \rho \mathbf{g}) \quad (2.8)$$

avec \mathbf{U} la vitesse de filtration du fluide, μ sa viscosité dynamique (supposée constante), ρ sa masse volumique et \mathbf{g} le vecteur accélération de la pesanteur. En posant $p^* = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$ et $P = p - p^*$ avec \mathbf{x} le vecteur position, on obtient l'équation suivante :

$$\begin{aligned}
\mathbf{U} &= -\frac{K}{\mu} [\nabla (p - p^*)] \\
&= -\frac{K}{\mu} \nabla P
\end{aligned} \tag{2.9}$$

qui est la variante de la loi de Darcy la plus utilisée de nos jours. Cette loi, valable à l'échelle macroscopique, peut être démontrée en effectuant un changement d'échelle par prise de moyenne volumique du problème de Stokes qui décrit l'écoulement à l'échelle du pore [11].

2.4 Conclusion

Cette première partie nous a permis de voir la démarche à suivre pour la modélisation du réseau vasculaire du cerveau. Pour les gros vaisseaux, ces derniers sont représentés par un graphe, c'est-à-dire un ensemble de points qui sont reliés par des liens, où les nœuds sont les bifurcations ou les extrémités des vaisseaux et les branches sont les vaisseaux-mêmes. L'échelle à laquelle se déroule l'écoulement du sang est assez grande pour nous permettre de définir, pour chaque vaisseau, des équations décrivant la quantité de mouvement et donc d'en déduire la pression ainsi que le débit à chaque nœud. Quant au milieu capillaire, ce dernier est homogénéisé et modélisé à une échelle supérieure, celle de Darcy, afin de simplifier le problème et de réduire les coûts de calculs. C'est donc la loi de Darcy qui décrit l'écoulement du sang dans ce milieu et qui donne accès au champ de pression dans tout le domaine (cf. figure 2.5).

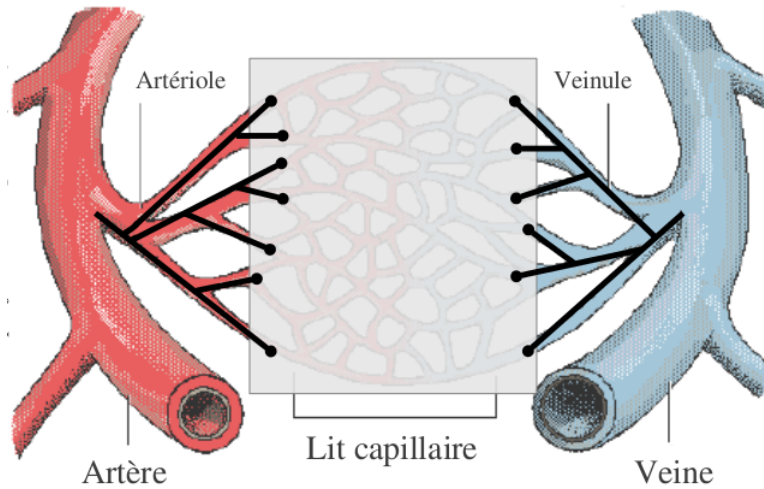


Figure 2.5 – Représentation schématique du modèle type réseau (en noir) et du modèle homogénéisé (en gris)

La difficulté à présent se trouve non pas dans la mise en application de ces modèles, mais plutôt dans le couplage entre les deux comme on le verra dans la partie qui suit.

Mise en place du modèle couplé

3.1 Introduction

Cette partie traite de la mise en place du modèle couplé que nous allons utiliser dans la suite pour simuler l'écoulement du sang dans les gros vaisseaux sanguins ainsi que dans les capillaires. Le principe, comme vu dans la partie précédente, est le suivant : on représente les artères, les veines, les artérioles et les veinules par un graphe ou un réseau de pores et on considère le milieu capillaire comme un milieu poreux que l'on homogénéise à l'échelle de Darcy. On suppose tout au long de cette partie que la viscosité dynamique du sang est constante et que les vaisseaux sanguins sont des cylindres rigides indéformables.

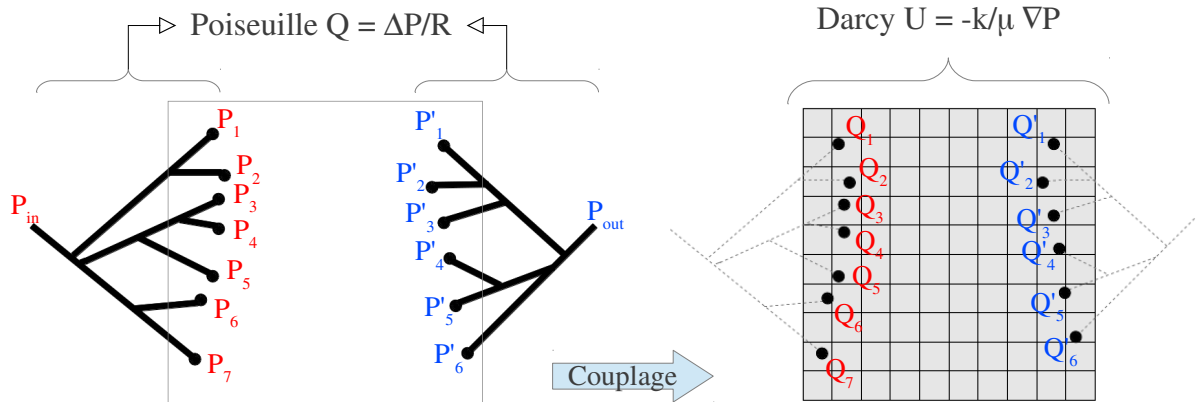


Figure 3.1 – Représentation schématique du modèle couplé. À gauche : calcul du débit à partir de l'équation de Poiseuille pour l'approche type réseau des gros vaisseaux. Des conditions à la limite sur la pression sont imposées aux extrémités de chaque vaisseau. À droite : le milieu capillaire homogénéisé. Le quadrillage représente le maillage et les points noirs au sein des mailles représentent les « points sources » auxquels on associe un débit provenant du calcul réseau effectué en premier lieu.

Dans le milieu homogène, l'arrivée (par les artères) ou la sortie (par les veines) du sang sont représentées par des points sources auxquels on associe un débit volumique (cf. figure

3.1) obtenu au préalable à partir du calcul réseau. Cependant, une étude approfondie est nécessaire quant au couplage puisque ce dernier rend la pression dépendante du maillage, ce qui contredit la réalité physique du phénomène. Ce genre de problème est surtout rencontré en industrie pétrolière quand il s'agit de simuler un réservoir, notamment pour la prévision de la production d'hydrocarbure et l'optimisation des plans d'exploitation. Bien que similaire dans la problématique, la prise en compte des « puits » en génie pétrolier est différente à cause de la géométrie de notre problème. En effet, dans le contexte pétrolier, la géométrie est bidimensionnelle¹ tandis que notre cas s'étend à une géométrie tridimensionnelle.

3.2 Positionnement du problème

Dans la simulation numérique des réservoirs, la taille des mailles est en général beaucoup plus grande que le rayon des puits [12]. Ces derniers sont donc considérés comme des termes sources au sein de la maille. Cependant, à cause des singularités que représente la pression aux alentours du puits, il est difficile de déterminer quelle pression (ou débit) il faut imposer au sein de la maille qui contient le terme source. En effet, pour un débit imposé, on constate que la pression calculée numériquement dans la maille contenant la source varie en fonction du maillage et de façon identique, pour une pression imposée, c'est le débit qui varie en fonction du maillage. Pour corriger cela, il est nécessaire d'effectuer une étude théorique et numérique afin de trouver la relation qui existe entre les différents paramètres, en particulier la relation débit/pression dans la maille/pression dans le puits.

Ce problème, aussi connu sous le nom de « modèle de puits », a été introduit par Peaceman en 1978 [13] dans le cadre d'une étude théorique sur la relation qui existe entre la pression de la maille, la pression du puits et le débit dans le cas d'un écoulement monophasique pour un maillage carré en 2 dimensions utilisant la méthode des différences finies centrées. Peaceman a défini ainsi un « rayon équivalent » qui est la distance à laquelle l'expression analytique de la pression correspondant à un écoulement autour d'un puits dans un milieu infini est égale à la pression dans la maille source. Depuis, le problème a été étendu afin de prendre en compte différents cas plus complexes (maillages non réguliers, non centrés, ...) [14], [15], [16].

3.3 Préliminaires

Modéliser un échantillon de vaisseaux sanguins en totalité s'avère être une tâche fastidieuse du fait de l'abondance des vaisseaux dans le réseau vasculaire et de leur taille caractéristique. En effet, la taille caractéristique d'une artère ou d'une veine étant de quelques dizaines de micromètres (diamètre) et celle d'un échantillon de cerveau étant de l'ordre du centimètre, le rapport entre les deux incite à avoir un maillage assez fin. De plus, le maillage doit être raffiné autour de chaque vaisseau afin de bien reproduire le comportement du sang à ses alentours. Par exemple, pour un cube de 1cm de côté et un

1. Les puits pétroliers sont des conduites à travers lesquels le fluide circule, leur géométrie peut donc se réduire à une géométrie bidimensionnelle en considérant une symétrie de translation par rapport à leur axe principal.

tube de $10\mu m$ de diamètre, il faudrait avoir au moins 1000 mailles de chaque côté soit un total de 1 milliard de mailles dans le domaine.

Tous ces éléments rendent la simulation numérique directe d'un échantillon de cerveau considérablement coûteuse en temps de calcul. Nous optons donc pour la modélisation de chaque gros vaisseau par un point source au sein des mailles et pour l'application d'un modèle « *correctif* » similaire (car la géométrie des puits est différente de celle de l'implantation d'un vaisseau) au modèle de puits utilisé dans les modélisations de réservoirs.

Pour cela, deux cas tests essentiels ont été mis en place. Le premier, une DNS et le second, un modèle point source :

- **DNS (a)** : la géométrie consiste en un cylindre qui représente un gros vaisseau (ici une artère) placé en plein milieu d'un domaine cubique qui, lui, représente le milieu homogénéisé. Des pressions constantes sont imposées sur une des faces du cube P_{cube} ainsi que sur la base circulaire du cylindre P_{cercle} (avec $P_{cercle} < P_{cube}$) tandis que les autres parois sont à flux nul. On en déduit ainsi un débit volumique correspondant. C'est le système d'équations (3.3) sans terme source qui est résolu dans ce cas.
- **Modèle point source (b)** : ce modèle représente le même cube maillé de façon cartésienne et régulière. Plusieurs tailles de mailles ont été étudiées dans le cas du modèle point source, en considérant toujours des mailles 2 fois plus grandes au minimum que le diamètre du cylindre (condition pour que le modèle de puits soit applicable). La même valeur pour la pression P_{cube} est imposée sur une des faces du cube que dans la DNS. On résout le système d'équations (3.3) avec un terme source placé dans la maille centrale et égal au débit volumique calculé par DNS divisé par le volume de la maille.

Dans la suite, toutes les simulations ont été faites en utilisant les propriétés suivantes :

Propriétés de simulation	
Perméabilité du milieu (m^2)	$K = 10^{-9}$
Viscosité du sang ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)	$\mu = 6 * 10^{-3}$
Taille du milieu homogénéisé (mm)	$L = 2$
Rayon du gros vaisseau (mm)	$R = 0.01$
Longueur du gros vaisseau (mm)	$l = 1$

3.4 Étude analytique

Il s'agit ici de déterminer le champ de pression aux alentours du vaisseau sanguin que l'on représente par un cylindre de rayon $r_{cylindre}$ constant. L'étude théorique se fera en 3 dimensions, et on considère, dans un premier temps, une source sphérique de rayon r_{sphere} qui est placée au centre d'un milieu poreux. Notons qu'à ce niveau là, on approxime la base circulaire du cylindre (là où s'effectue la jonction entre vaisseaux et capillaires) par une sphère. On verra plus loin que cette approximation ne modifie pas le résultat : au

loin, la pression agit de la même manière dans le cas d'une source sphérique et d'une source circulaire et pour des conditions à la limite identiques. Ce n'est qu'aux alentours proches de la source que la solution diffère, il faudra donc appliquer une correction à la solution trouvée pour que les deux cas soient équivalents.

3.4.1 Équations à résoudre

Équation de continuité

L'équation de conservation de la masse pour un fluide incompressible se résume à :

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = -q\delta_0 \quad (3.1)$$

avec \mathbf{U} la vitesse de filtration² du fluide ($m.s^{-1}$), ∇ l'opérateur divergent, q un terme source (s^{-1}) et δ_0 la fonction de distribution de Dirac au point 0.

La loi de Darcy

La loi de Darcy, qui décrit l'équation de quantité de mouvement dans un milieu poreux, s'écrit pour un milieu isotrope :

$$\mathbf{U} = -\frac{K}{\mu} \nabla P \quad (3.2)$$

avec K la perméabilité du milieu (m^2), μ la viscosité du fluide ($kg.m^{-1}.s^{-1}$) et P la pression ($kg.m^{-1}.s^{-2}$).

Système à résoudre

La combinaison de l'équation (3.1) avec l'équation (3.2) donne le système suivant à résoudre :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left(-\frac{K}{\mu} \nabla P \right) = -q\delta_0 \\ \mathbf{U} = -\frac{K}{\mu} \nabla P \end{cases} \quad (3.3)$$

3.4.2 Résolution dans le cas d'un écoulement sphérique

En coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) , l'équation (3.1) sans terme source (membre de droite) devient :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 U_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta U_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial U_\phi}{\partial \phi} = 0 \quad (3.4)$$

Cependant, la topologie du champ impose des invariances par rotation selon θ et ϕ aux alentours proches de la source (où on cherche à étudier le comportement du fluide), on

2. La vitesse de filtration est la vitesse macroscopique fictive d'un fluide en mouvement à travers un milieu poreux saturé. D'habitude, on adopte $\mathbf{U} = \epsilon \mathbf{V}$ avec \mathbf{U} la vitesse de filtration, \mathbf{V} la vitesse interstitielle moyenne et ϵ la porosité du milieu poreux.

en déduit que le champ ne dépend que de r : $U = U(r)$. L'équation (3.4) se simplifie et devient :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 U_r)}{\partial r} = 0 \quad (3.5)$$

Les étapes suivantes illustrent la résolution de l'équation (3.5) :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 U_r) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial r} (r^2 U_r) = 0 \Leftrightarrow r^2 U_r = \text{const.} = C$$

d'où :

$$U_r = \frac{C}{r^2} \quad (3.6)$$

Étant donné que Q représente le débit volumique à travers une sphère \mathcal{S}_e centrée à l'origine, on obtient la relation suivante :

$$\begin{aligned} Q &= - \int_{\mathcal{S}_e} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \, ds \\ &= - \int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi \int_{\theta=0}^{\pi} \frac{C}{r^2} r^2 \sin \theta \, d\theta \\ &= -4\pi C \end{aligned} \quad (3.7)$$

d'où :

$$C = -\frac{Q}{4\pi} \Rightarrow U_r = -\frac{Q}{4\pi} \frac{1}{r^2} \quad (3.8)$$

Ensuite, pour calculer la pression P dans le domaine, on résout l'équation (3.2) :

$$-\nabla P = \frac{\mu}{K} \mathbf{U} \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\mu}{K} \frac{Q}{4\pi} \frac{1}{r^2}$$

et en intégrant de r_0 à r (r_0 arbitraire) on obtient :

$$P(r) = P(r_0) - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right) \quad (3.9)$$

3.4.3 Correction du rayon

Pour corriger l'approximation de la source circulaire bidimensionnelle par une source sphérique tridimensionnelle faite ci-dessus, nous avons comparé les courbes de pression obtenues d'une part par DNS³ et d'autre part en traçant l'expression analytique de la pression (équation (3.9)). Les propriétés utilisées pendant la simulation sont les suivantes :

3. *Direct Numerical Simulation* : la DNS donne la solution de référence exacte du problème où un gros vaisseau émet un débit sanguin au sein du milieu homogénéisé. Pour plus de détails, voir la section 3.3 et la partie 4.

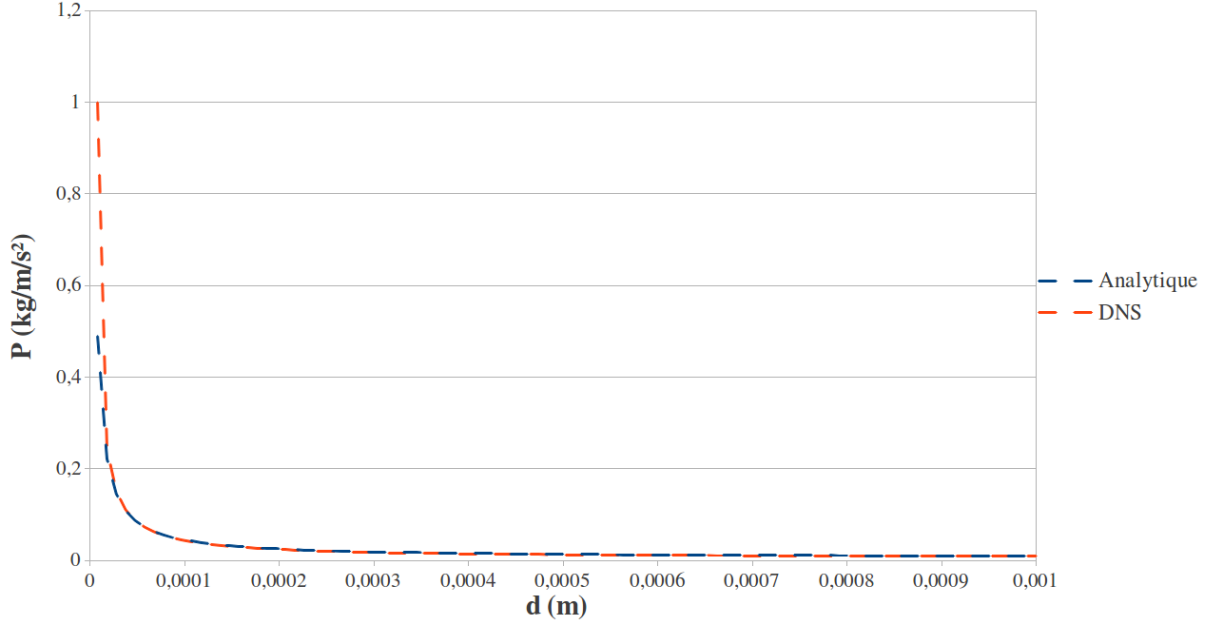


Figure 3.2 – Courbes de pression : analytique vs DNS

Pour tracer la courbe analytique de la pression, on prend comme référence la valeur de la pression DNS à l'infini (ici, l'infini représente le bord du domaine). La courbe analytique est donc la représentation graphique de l'équation :

$$P(r) = P_{\infty} - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_{\infty}} \right) \text{ avec } r \in [r_{sphere}, r_{\infty}] \quad (3.10)$$

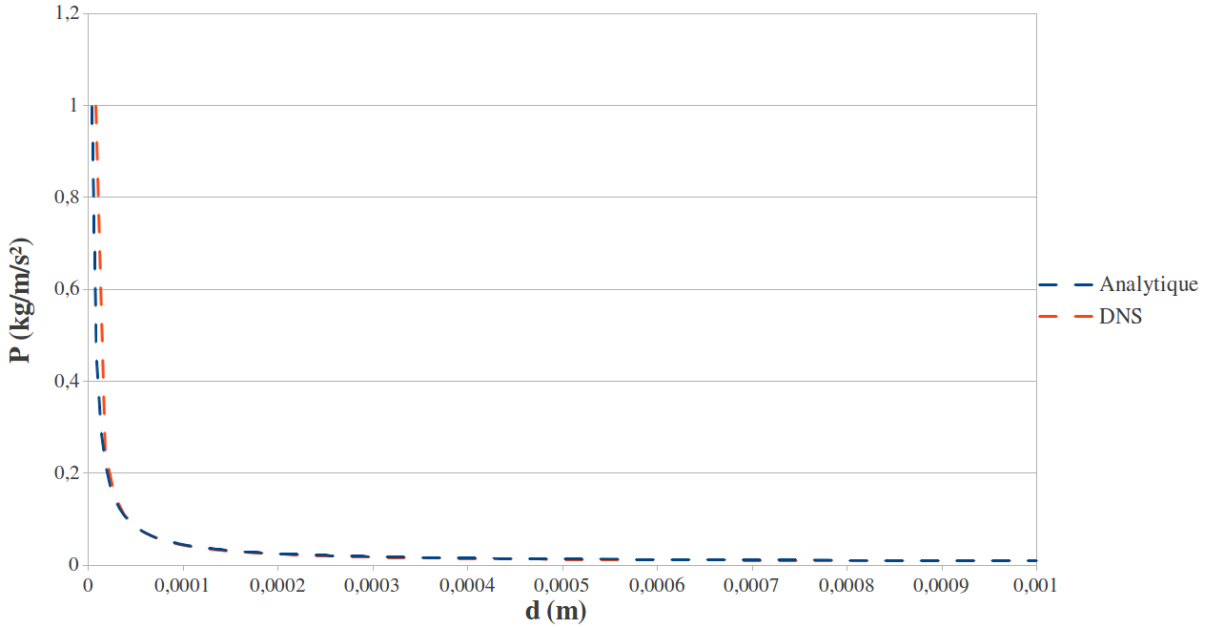


Figure 3.3 – Courbes de pression après correction : analytique vs DNS

On constate sur la figure 3.2 que la pression calculée analytiquement est proche de celle donnée par DNS (erreur relative allant de 0% à 1%) mais qu'au voisinage de la

source, l'approximation est erronée (erreur relative de 50%!). Pour un rayon identique, la pression prédite dans le cas du cylindre (DNS) est largement supérieure à celle prédite analytiquement. Pour corriger cela, il faut considérer que le débit à travers la surface doit être conservé dans les deux géométries. Ainsi, la surface de la sphère doit être égale à la surface du cercle, c'est-à-dire $r_{sphere} = 0.5r_{cylindre}$.

La figure 3.3 représente les mêmes courbes de pression mais après correction du rayon de la source dans l'expression analytique. On trouve que pour $r_{sphere} = 0.4875 r_{cylindre} \approx 0.5 r_{cylindre}$, la pression analytique et celle obtenue par DNS sont quasiment équivalentes. La valeur du coefficient numérique 0.4875 trouvé diffère légèrement de la théorie (0.5), ceci peut s'expliquer par la précision du maillage. En effet, vu qu'il s'agissait d'un cylindre de $20\mu m$ de diamètre placé dans un cube de $2mm$ de côté, la valeur du diamètre du cylindre a légèrement été modifiée lors du raffinement du maillage autour de ce dernier (tous les détails concernant le maillage se trouvent à la partie suivante).

3.5 Modèle de puits

Dans cette section, il s'agit de comparer la pression numérique prédite par la DNS d'une part et d'autre part la pression prédite en considérant un point source au sein d'une maille, situations illustrées dans la figure 3.4.

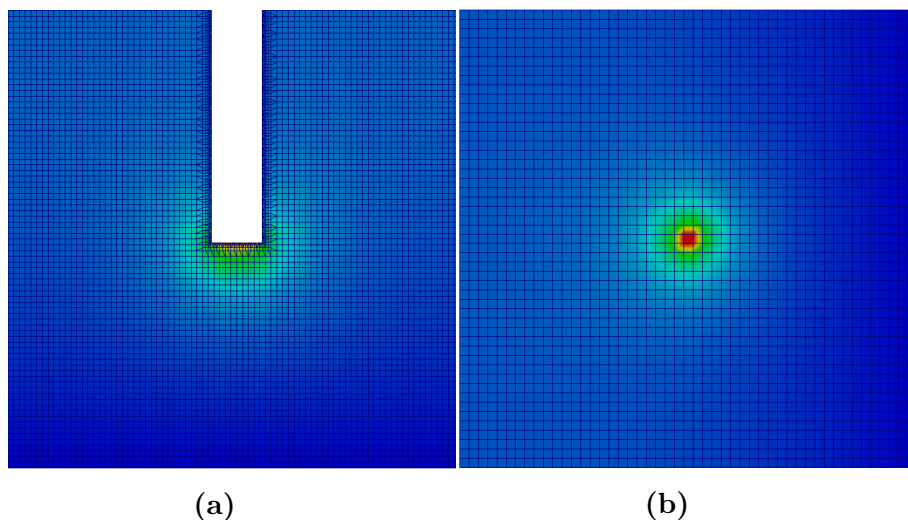


Figure 3.4 – Géométrie de la DNS (a) et du modèle point source (b). À noter que ces représentations sont bidimensionnelles (coupes transversales du cube) alors que la géométrie réelle utilisée est tridimensionnelle, et que les dimensions sont nettement agrandies pour une meilleure visibilité de la solution et du maillage.

La figure 3.5 montre que la pression varie en fonction du maillage et que dans la maille source, elle n'est pas égale à la pression réelle que l'on a imposé dans la DNS. L'annexe A montre les courbes de pressions pour les deux modèles (DNS et point source) à différentes coupes : à l'exception de la zone qui se trouve autour de la source, on voit que la pression est identique pour les deux modèles (l'erreur relative ne dépasse pas les 3%).

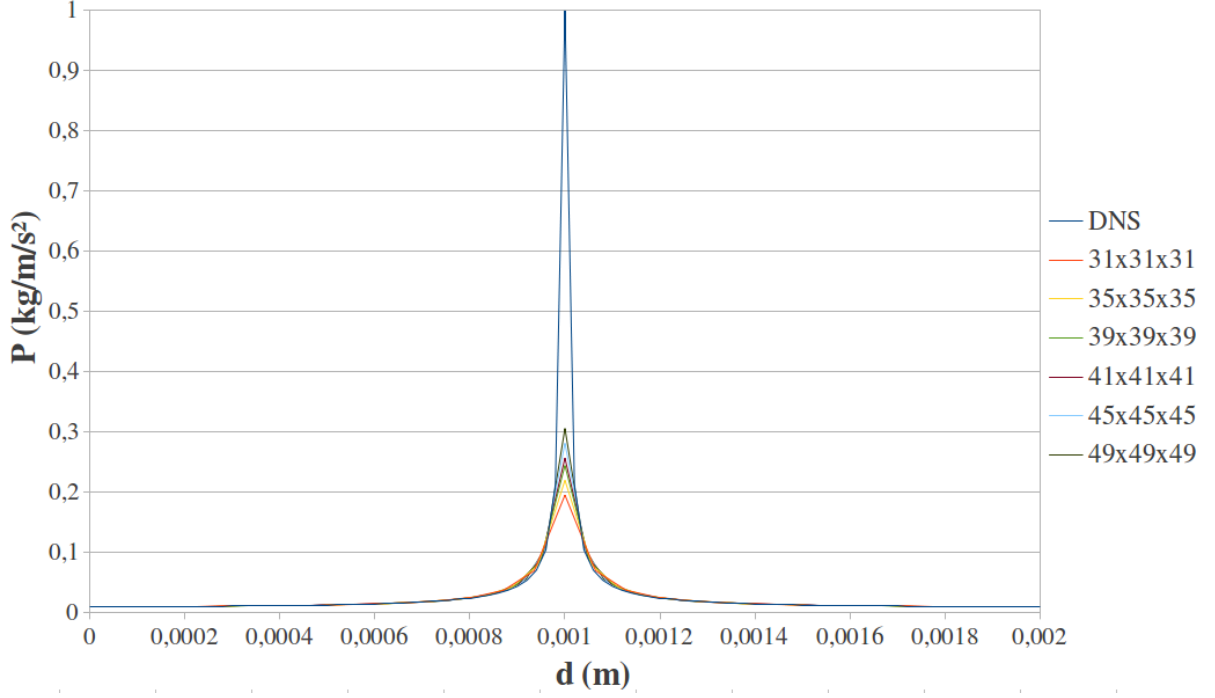


Figure 3.5 – Comparaison entre la pression obtenue par DNS et la pression obtenue pour le cas point source pour différents maillages.

3.5.1 Méthodologie

Il s'agit de trouver la valeur du rayon équivalent, qui est la distance à laquelle l'expression analytique de la pression est égale à la pression dans la maille source. Ainsi, une fois la valeur du rayon équivalent déterminée, on pourra aisément remonter à la valeur réelle de la pression dans la source en utilisant son expression analytique. La procédure suivie est expliquée dans les étapes suivantes :

- Une étude de la discrétisation des équations et donc du schéma numérique est faite dans un premier temps et, en s'appuyant sur l'expression analytique de la pression, on retrouve une valeur théorique du rayon équivalent r_{eq}^{th} .
- Une validation numérique est nécessaire à ce niveau. Pour ce faire, on commence par lancer la simulation DNS suivie par la simulation du modèle point source. Pour cette dernière, la distribution de pression et surtout la valeur de la pression dans la maille source sont données en sortie. On en déduit ainsi une valeur numérique du rayon équivalent r_{eq}^{num} .

3.5.2 Discrétisation des équations

Pour la résolution numérique, on considère que la source se trouve au centre de la maille 0 (cf. annexe B pour le schéma numérique). Le maillage est cartésien et régulier. En combinant l'équation de continuité (3.1) avec l'équation de Darcy (3.2), on obtient :

$$\nabla \cdot \left(-\frac{K}{\mu} \nabla P \right) = -q\delta_0 \quad (3.11)$$

en intégrant sur le volume V de la maille, on obtient :

$$\int_V \nabla \cdot \left(-\frac{K}{\mu} \nabla P \right) dV = - \int_V q \delta_0 dV \quad (3.12)$$

or, K et μ sont ici constantes et d'après le théorème de Green-Ostrogradski, l'intégrale de la divergence d'un champ vectoriel sur un volume dans \mathbb{R}^3 est égal au flux de ce champ à travers la frontière du volume, d'où :

$$\int_V \nabla \cdot \left(-\frac{K}{\mu} \nabla P \right) dV = -\frac{K}{\mu} \oint_{\partial V} \nabla P \cdot \mathbf{dS} \quad (3.13)$$

où ∂V représente la surface de la maille et \mathbf{dS} le vecteur normal à la surface, dirigé vers l'extérieur et de longueur égale à l'élément de surface qu'il représente. Et, sachant que le terme source q est constant dans la maille 0 et est nul partout ailleurs, l'équation (3.12) devient :

$$-\frac{K}{\mu} \oint_{\partial V} \nabla P \cdot \mathbf{dS} = -Q \quad (3.14)$$

où Q représente le débit volumique associé au terme source q_0 dans la maille 0.

Finalement, en utilisant la sommation par parties, la discrétisation de cette équation par la méthode des volumes finis ([17], [18]) donne :

$$- \sum_{\substack{\varepsilon_{0i} \\ i \in [1,6]}} \frac{K}{\mu} \frac{P_i - P_0}{h} h^2 = -Q \quad (3.15)$$

où i indique l'indice des cellules, h la taille de la maille et ε_{0i} la face entre les cellules 0 et i . La solution P est symétrique (c'est-à-dire $P_i = P_j$ pour $i, j \in [1, 6]$), on obtient donc :

$$\begin{aligned} -\frac{6Kh}{\mu} (P_1 - P_0) &= -Q \\ \text{soit } P_0 - P_1 &= -\frac{\mu Q}{6Kh} \end{aligned} \quad (3.16)$$

On suppose maintenant que l'expression analytique de P donne une bonne approximation de la pression dans la cellule 1. On a donc :

$$P_1 = P_s - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_s} \right) \quad (3.17)$$

où P_1 , P_s représentent la pression dans la cellule 1 et dans la source respectivement, r_1 la distance entre la cellule 1 et la cellule centrale et r_s le rayon de la source (remarque : $r_1 = h$ où h est la taille de la maille). En sommant l'équation (3.17) avec l'équation (3.16) on retrouve :

$$P_0 = P_s - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{r_s} + \frac{2\pi}{3h} \right) \quad (3.18)$$

Cette relation met en évidence le fait qu'aux alentours de la source, la pression numérique ne coïncide pas avec la pression analytique calculée. Il s'agit alors de trouver la valeur de r tel que $P_{\text{analytique}} = P_{\text{numérique}}$ dans la cellule où se trouve la source. Pour cela, on pose $r = r_{eq}^{th}$ et d'après l'équation 3.9 on obtient :

$$P(r_{eq}^{th}) = P_s - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{r_{eq}^{th}} - \frac{1}{r_s} \right) \quad (3.19)$$

qui doit être égal à l'équation 3.18 :

$$P_0 = P_s - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{r_s} + \frac{2\pi}{3h} \right)$$

soit :

$$\left(\frac{1}{r_{eq}^{th}} - \frac{1}{r_s} \right) = \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{r_s} + \frac{2\pi}{3h} \right) \quad (3.20)$$

et on trouve $\boxed{r_{eq}^{th} = \frac{3}{3 + 2\pi} h \approx 0.32h}$.

3.5.3 Étude numérique

Pour trouver la valeur du rayon équivalent r_{eq}^{num} de façon numérique, on s'appuie sur l'expression analytique de la pression. En considérant que la source se trouve toujours dans la maille 0 et en supposant que pour $r = r_{eq}^{num}$ on a $P_0 = P(r_{eq}^{num})$ (où P_0 est la pression dans la maille source), on obtient :

$$P(r_{i,j}) = P_0 - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{r_{i,j}} - \frac{1}{r_{eq}^{num}} \right) \quad (3.21)$$

Pour un maillage cartésien, $r_{i,j} = nh$ où n est un nombre entier et h est la taille du maillage. On a donc :

$$P(r_{i,j}) = P_0 - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{nh} - \frac{1}{r_{eq}^{num}} \right) = P_0 - \frac{\mu Q}{4\pi K h} \left(\frac{1}{n} - \frac{h}{r_{eq}^{num}} \right) \quad (3.22)$$

La figure 3.6 montre $\left(\frac{-\mu Q}{4\pi K h} \right)^{-1} (P(r_{i,j}) - P_0)$ en fonction de $\frac{1}{n}$ pour différents maillages. L'interpolation de ces résultats par une droite linéaire donne une pente égale à 1.09 (donc pratiquement égale à 1) et un coefficient directeur de -3.19. On en déduit donc :

$$-\frac{h}{r_{eq}^{num}} = -3.19 \text{ soit } \boxed{r_{eq}^{num} = \frac{h}{3.19} \approx 0.31h} \quad (3.23)$$

On retrouve bien la valeur trouvée analytiquement, c'est-à-dire $r_{eq} \approx 0.3h$.

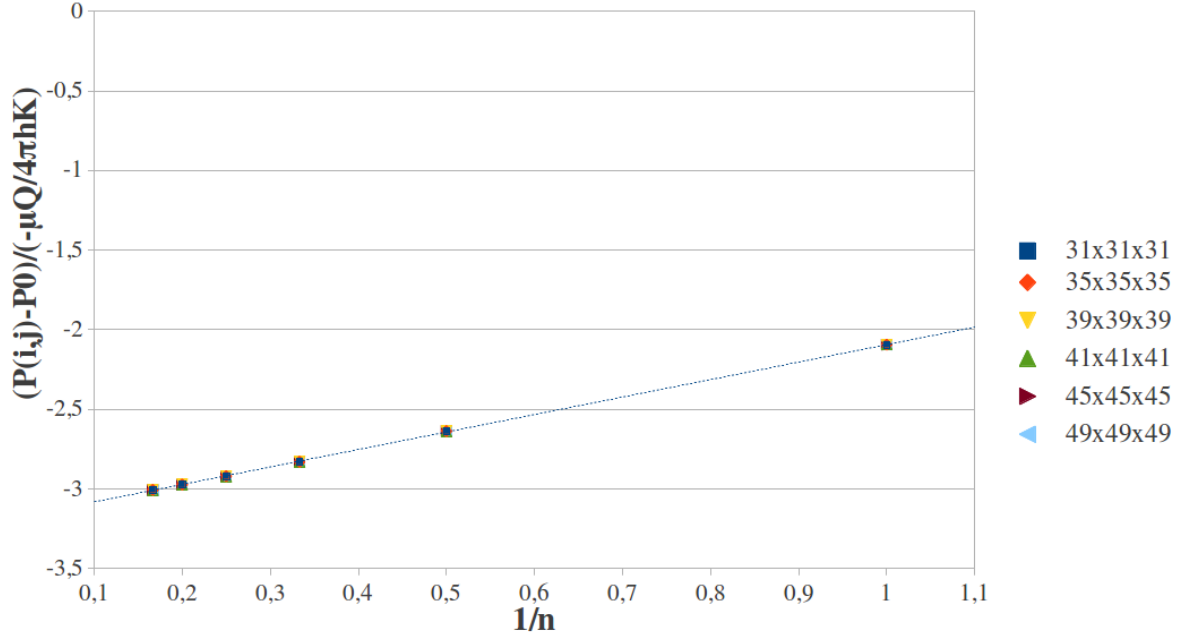


Figure 3.6 – $(P(r_{i,j}) - P_0) / \frac{-\mu Q}{4\pi K h}$ en fonction de $\frac{1}{n}$ pour différents maillages.

3.6 Récapitulatif

Par application de la correction sur le rayon et sur la pression que l'on a vu jusqu'à présent, nous pouvons retrouver la pression réelle en sortie (ou entrée) du vaisseau sanguin $P_{cylindre}$ en fonction de la pression dans la maille source calculée par simulation P_0 et du débit Q . On obtient donc au final l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
 P_{cylindre} &= P_0 - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{r_{sphere}} - \frac{1}{r_{eq}} \right) \\
 &= P_0 - \frac{\mu Q}{4\pi K} \left(\frac{1}{0.5r_{cylindre}} - \frac{1}{0.3h} \right)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

3.7 Validation du modèle

Pour valider le modèle établi jusqu'à présent, plusieurs cas ont été étudiés. Dans la DNS, nous avons imposé différentes valeurs de la pression sur la base circulaire du cylindre et déduit ainsi le débit correspondant à chaque pression. Ensuite, dans le modèle point source, nous avons injecté chaque débit dans la maille source, et ce pour différents maillages, puis appliqué le modèle de puits sur la pression P_0 afin de retrouver la pression réelle imposée dans la DNS. La figure 3.7, qui illustre la droite de la pression prédite par le modèle de puits en fonction de la pression réelle imposée dans le DNS, valide le modèle.

L'étude a été faite sur 6 maillages de taille différente, tous cartésiens et réguliers. Dans la légende, 31x31x31 indique que nous avons divisé le domaine en 31 mailles de chaque côté. On voit qu'avec toutes les étapes établies précédemment (correction du rayon de la sphère et application du « modèle de puits »), la pression devient complètement

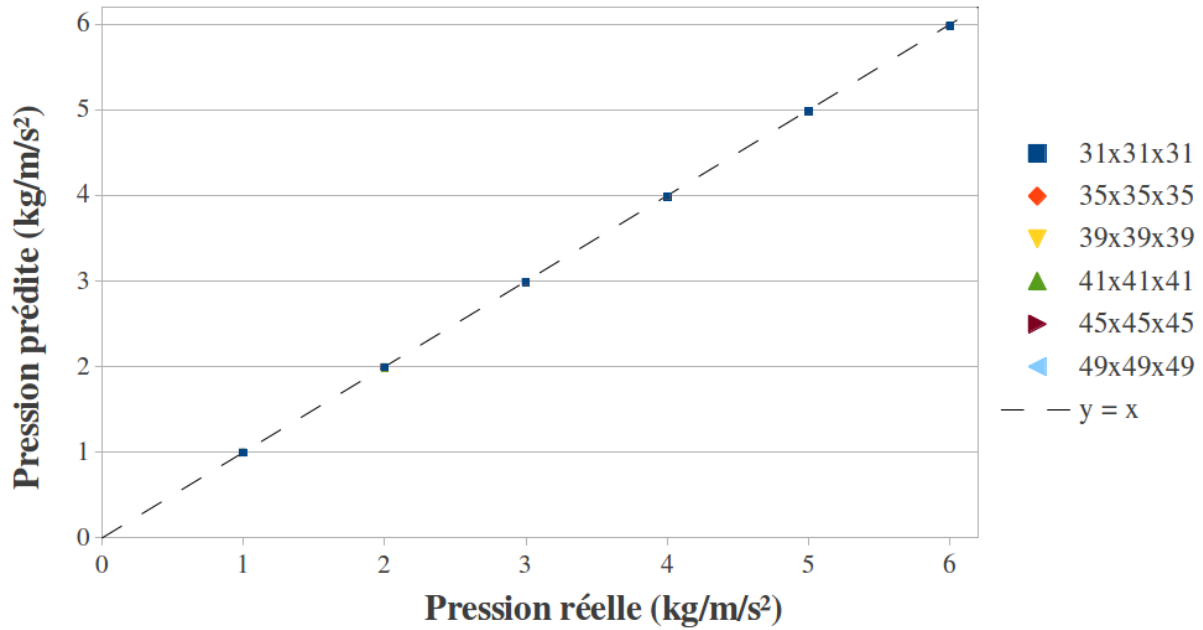


Figure 3.7 – La pression prédite par le modèle de puits en fonction de la pression réelle

indépendante du maillage et celle prédite par le modèle de puits est égale à celle qui est imposée sur la base du cylindre.

3.8 Interaction entre sources

Ici, le but est d'étudier quand les interactions entre différentes sources affluent les résultats du modèle couplé. Pour cela, pour les différentes tailles de maillage étudiés jusqu'à présent, deux points sources ont été initialement placés à une distance de $1mm$ que l'on a progressivement réduit jusqu'à atteindre une distance nulle entre les deux.

La figure 3.8 représente les erreurs relatives en fonction de la distance entre deux points sources. L'erreur a été calculée en se basant sur les valeurs de la pression obtenues après application du modèle de puits et en comparaison avec les valeurs réelles imposées dans la DNS. On observe que pour une distance inférieure à $400\mu m$, on a une erreur relative supérieure à 1% et ce indépendamment du maillage. Et, dans le cas où plusieurs points sources se trouvent dans la même maille, on considère que l'on a une source dont le débit est la somme des débits de chacune des sources.

3.9 Conclusion

Au cours de cette partie, nous avons mis au point les outils nécessaires pour modéliser l'écoulement du sang dans les vaisseaux sanguins et capillaires. L'écoulement dans les artères et les veines est caractérisé par l'équation de Poiseuille qui décrit l'écoulement laminaire d'un fluide dans une conduite cylindrique. Pour le lit capillaire, l'écoulement est décrit par l'équation de Darcy.

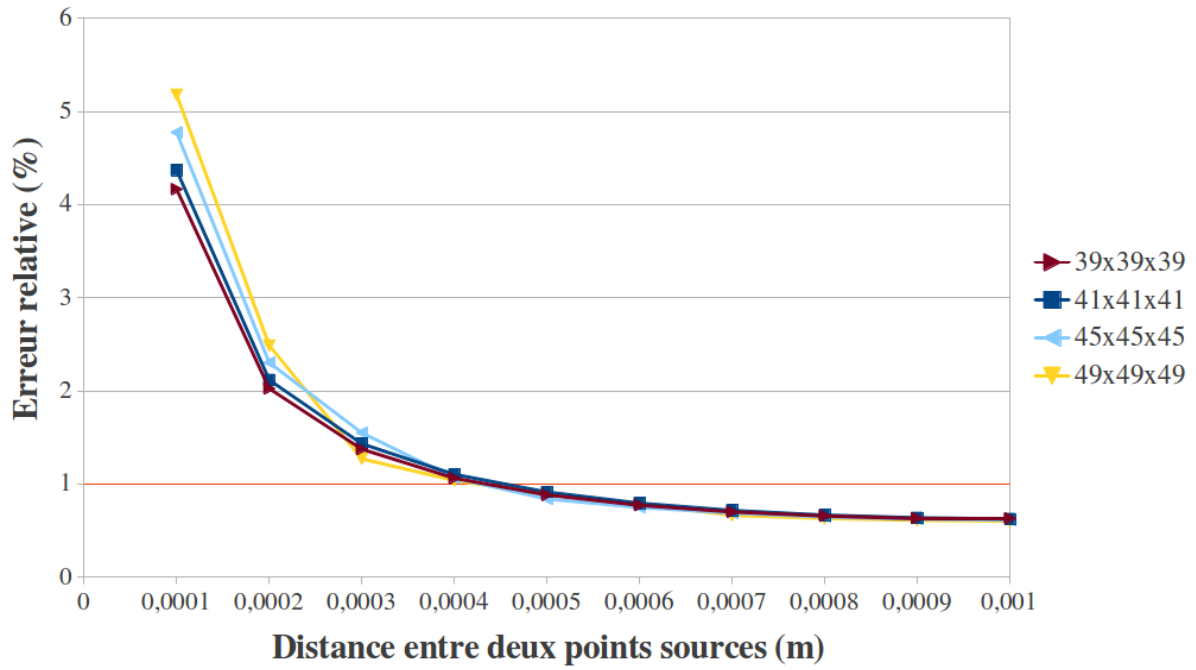


Figure 3.8 – Erreur relative en fonction de la distance entre deux points sources

En calculant le débit sanguin dans les vaisseaux, on peut ainsi représenter chaque vaisseau par un point source au sein du milieu capillaire. Cependant, étant donné que pour un débit imposé au sein d'une maille, la pression dans cette maille varie en fonction du maillage, il a été nécessaire de mettre au point un modèle qui annule cette dépendance. Pour cela, on a défini une distance r_{eq} , fonction de la taille du maillage, à laquelle l'expression analytique de la pression est égale à la pression dans la maille source ; on peut ainsi retrouver la pression réelle de la source et rendre la solution complètement indépendante du maillage. On a montré aussi que cette approximation est valable à la condition qu'aucune autre source ne soit présente à moins de $400 \mu m$.

4.1 Introduction

La modélisation numérique a été la seconde plus grande partie du travail effectué durant le stage. La résolution numérique du problème décrit dans la première partie a été réalisé entièrement dans le cadre de la plateforme de calcul OpenFOAM® que nous allons présenter dans les paragraphes suivants. Cette section est dédiée à tous les outils numériques qui ont été utilisés pour les maillages et les simulations, ainsi que de la démarche suivie pour la mise en place et l’optimisation du code.

4.2 Outils numériques

4.2.1 Plateforme de calcul : OpenFOAM®



OpenFOAM® (Open Field Operation and Manipulation) est une boîte à outils open-source de simulation numérique initialement développée à l’Imperial College London ([17], [19]) et désormais distribuée par la société britannique OpenCFD Ltd. Elle est principalement dédiée à la CFD (computation fluid dynamics), *ie.* la mécanique des fluides numérique.

Fonctionnement

OpenFOAM® résout des équations aux dérivée partielles par la méthode des volumes finis. Il s’agit en fait d’une librairie C++ à partir de laquelle de nombreux utilitaires ont été développés. Le package OpenFOAM® contient ainsi une multitude de programmes classés par fonctionnalité (méthodes numériques utilisées ou informations sur le maillage par exemple) et non pas un seul exécutable. On compte ainsi plus de 200 programmes répartis en outils de pré-traitement (génération et modification de maillage), solveurs de problèmes physiques (écoulement compressible, incompressible, multiphasique, transfert

de chaleur, :) et post-traitement (visualisation, intégration...). Un des points qui a motivé notre choix concernant l'utilisation de cette plateforme est la simplicité avec laquelle on peut développer de nouveaux programmes permettant la résolution de nos propres PDE (équations aux dérivées partielles).

Préprocesseurs : géométrie et maillage

Pour créer une géométrie et un maillage, on peut d'une part les générer directement avec des mailleurs externes comme GAMBIT ou Salomé par exemple. Une autre solution consiste à importer un objet de type surface STL généré par ailleurs, par CAO¹ ou par imagerie tomographie, de l'incorporer dans un espace maillable, puis de mailler automatiquement à l'aide de snappyHexMesh l'espace intérieur et/ou extérieur à cet objet.

Solveurs : équations

Un des avantages nets de OpenFOAM® est l'écriture des équations. Par exemple, considérons le problème suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \\ -\frac{K}{\mu} \nabla P = \mathbf{U} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left(-\frac{K}{\mu} \nabla P \right) = \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \\ -\frac{K}{\mu} \nabla P = \mathbf{U} \end{array} \right.$$

La résolution de ce système dans OpenFOAM® s'écrit :

```
{
    solve
    (
        fvm::laplacian(K/mu,P)
    )
}
U = -K/mu*fvc::grad(P);
```

On voit que cette écriture se rapproche beaucoup de l'écriture mathématique des équations. Les opérateurs `fvm::` et `fvc::` sont les moyens avec lesquels le programme stocke les informations dans les matrices. Pour `fvc::`, le calcul des dérivées se fait en utilisant les valeurs déjà existantes (cet opérateur génère un champ), tandis que `fvm::` discrétise directement les termes de l'équation matricielle (l'opérateur retour les coefficients matriciels). C'est la structure sous forme de classes qui permet de définir et d'utiliser directement dans le code les différents opérateurs mathématiques comme la divergence, le rotationnel ou le gradient d'une grandeur. À noter aussi que OpenFOAM® peut gérer des champs scalaires, vectoriels et mêmes tensoriels, intérêt si la perméabilité n'est pas isotrope par exemple.

1. CAO : Conception Assistée par Ordinateur

Post-traitement : visualisation des données

OpenFOAM® est distribué avec paraview, un logiciel libre de post-traitement multi-plateforme qui sert à visualiser et analyser les solutions. Bien évidemment, si l'utilisateur préfère utiliser un autre outil de visualisation, il existe des modules d'export pour Fluent, EnSight et Fieldview.

4.2.2 Géométrie et maillage

Nous présentons dans cette partie les divers géométries et maillages utilisés jusqu'à présent, mentionnés notamment dans la partie précédente qui traite de la mise en place du modèle couplé.

Modèle point source

Il s'agit d'un cube de $2mm$ de côté avec un maillage cartésien et régulier. Il suffit de préciser les coordonnées de chaque coin du cube et de donner le nombre de mailles souhaitées dans chaque direction pour créer le maillage plusieurs tailles de maillages ont été considérées : le domaine a été divisé en 31, 35, 39, 41, 45 et 49 mailles dans chaque direction, soit un total de 29791 de mailles de $6 \cdot 10^{-5}$ de côté pour le plus grossier maillage et 117649 mailles de côté égal à $4 \cdot 10^{-5}$ pour le plus raffiné (cf. figure 4.1).

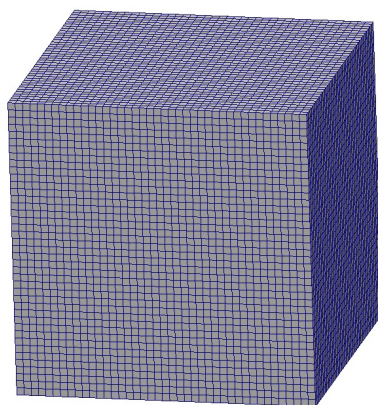


Figure 4.1 – Maillage du cube

Les parois de ce cube ont été fixées à flux nul, à l'exception de celle du bas où la pression imposée est constante. Un débit a été imposé, aussi, dans la maille centrale du cube et nous obtenons ainsi le champ de pression et de vitesse dans le milieu. Afin de comparer les résultats obtenus avec une situation de référence, une géométrie contenant un vrai tuyau a été créée avec les mêmes conditions à la limite : la DNS.

DNS

La DNS fait référence au cube au milieu duquel se trouve un cylindre. Le cube, de côté égal à $2mm$, a été généré sous OpenFOAM® de la même manière que pour le modèle point source, mais le cylindre (de diamètre égal à $20\mu m$) a été créé sous Salome puis importé vers OpenFOAM® sous le format STL (format utilisé dans les logiciels de

stéréolithographie). Le maillage autour du cylindre est ensuite automatiquement retravaillé et raffiné par le biais de l'utilitaire *snappyHexMesh* de OpenFOAM®.

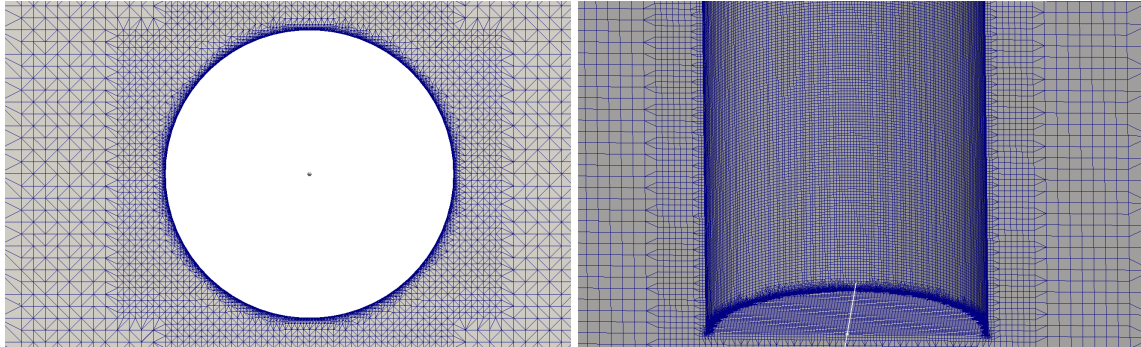


Figure 4.2 – Maillage raffiné autour du cylindre

Convergence du maillage

Préalablement à l'étude sur le modèle de puits présentée à la partie 3, une étude du maillage de la DNS a été établie afin de s'assurer que les résultats de la simulation convergent lorsqu'on augmente le raffinement. Pour ce faire, nous avons comparé les courbes de pression calculée numériquement pour deux maillages (3788459 mailles pour l'un contre 2835461 pour l'autre). La figure 4.3 illustre ces courbes. Le signe + désigne le maillage le plus raffiné, et le signe - celui le moins raffiné.

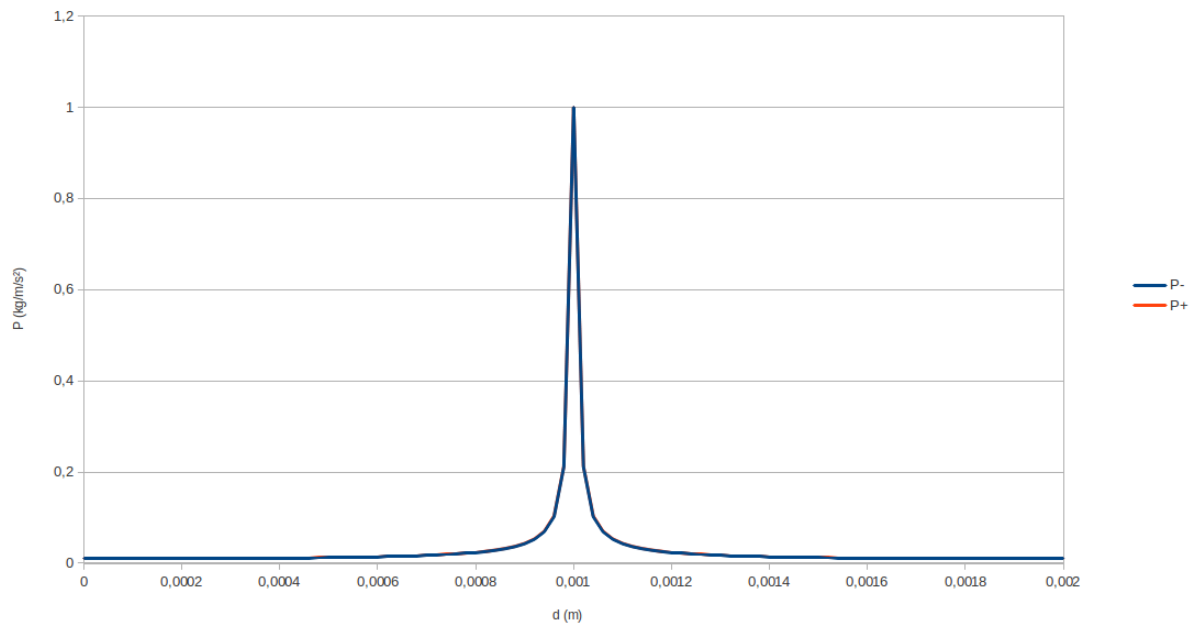


Figure 4.3 – Convergence du maillage : comparaison de la pression pour les deux maillages

Aussi, une comparaison de la valeur du débit a été faite pour les deux maillages. Les schémas numériques utilisés dans OpenFOAM® étant conservatifs, les valeurs du débit intégrées sur la base circulaire du cylindre ainsi que sur la face à pression constante du cube sont identiques (le reste des parois étant à flux nul). On trouve, en raffinant

le maillage, une différence inférieure à 0.13%. Suite à ces résultats sur les débit et les pressions, on en déduit que le maillage est assez fin.

4.3 Résolution numérique du problème couplé

On rappelle que l'on cherche à déterminer la distribution du champ de pression et de la vitesse dans le domaine, avec la présence de termes sources (cf. figure 3.1) issus du calcul réseau. Les simulations ont donc été étendues afin de prendre en compte une ou plusieurs artères et veines : on ne se trouve plus dans la situation « modèle » où une des faces du cube est à pression constante, mais plutôt dans le cas où toutes les parois sont à flux nul et les seules interactions existantes se passent entre les différents termes sources.

Ainsi, pour que l'utilisateur du code puisse ajouter ou extraire des vaisseaux sanguins à sa guise sans devoir changer le programme *main*, les vaisseaux ont été classés dans des listes où sont stockées leurs propriétés respectives, telles leur longueur, leur diamètre, leur position dans le domaine et les valeurs des pressions à leurs extrémités. Ensuite, le traitement de ces vaisseaux (application de l'équation de Poiseuille pour le calcul du débit et application du modèle de puits pour corriger la valeur de la pression) est défini dans une classe (classe « Vessels.C ») et est effectué de manière itérative sur la totalité des vaisseaux.

4.3.1 Procédure de résolution

Les termes sources sont issus de la résolution au préalable de l'équation de Poiseuille dans les gros vaisseaux sanguins, avec des pressions P_{in} imposées en entrée du réseau artériel et P_{out} en sortie du réseau veineux. Dans un premier temps, des débits issus de la résolution réseau sont imposés dans le milieu homogénéisé. Après la première itération, on obtient un nouveau champ de pression et on en déduit donc une nouvelle valeur du débit, on applique ensuite le modèle équivalent au modèle de puits puis finalement, en itérant jusqu'à convergence de la solution, la pression à l'extrémité du vaisseau est corrigée.

4.3.2 Algorithme de résolution

La figure 4.4 illustre l'algorithme de résolution proposé. Les quantités en entrée P_{in} et P_{out} désignent les pressions aux extrémités des vaisseaux sanguins, avec l'indice *in* pour les artères et l'indice *out* pour les veines.

On calcule dans un premier temps le débit volumique en utilisant l'équation de Hagen-Poiseuille que l'on utilise par la suite pour définir le terme source dans le milieu capillaire. Après application de l'équation de Darcy (avec le terme source), on déduit la nouvelle pression P_{in} par le modèle de puits et on itère jusqu'à convergence de la solution.

Bien que le système d'équations est stationnaire, un terme instationnaire sur la pression est inclus dans notre résolution numérique pour avoir une meilleure relaxation de la solution, notamment quand plusieurs gros vaisseaux rentrent en jeu.

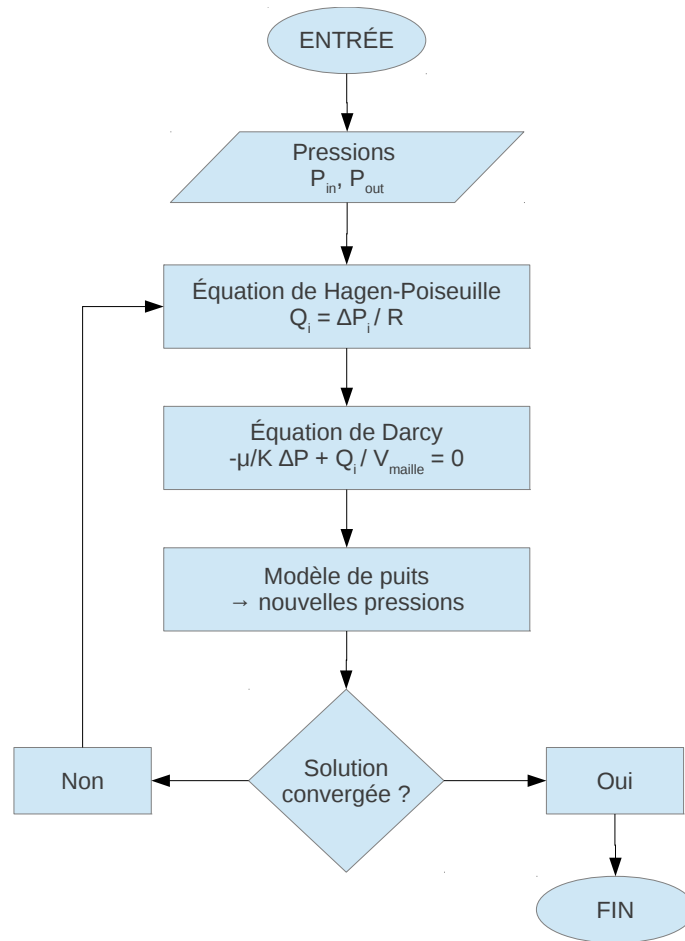


Figure 4.4 – Algorithme de résolution

4.4 Optimisation du code

Une telle méthode de résolution, même si elle présente l'intérêt de réduire de façon considérable le nombre de mailles nécessaires à la description du réseau capillaire, ne peut être envisagée que si le nombre d'itérations pour arriver à convergence est limité. Deux types d'amélioration peuvent être apportées : d'une part le choix d'un solveur linéaire adapté peut réduire de façon significative le temps de chaque boucle itérative et, d'autre part, une solution initiale trop éloignée de la solution finale peut entraîner un nombre considérable d'itérations (quelques milliers) avant convergence. Pour éviter des calculs extrêmement longs, l'idée est de partir d'un système initialisé qui se rapproche de la solution finale, qui elle peut être approximée en faisant une analogie électrique du système.

4.4.1 Choix des solveurs linéaires de résolution

OpenFOAM® comprend de nombreux solveurs linéaires de systèmes d'équations. La première méthode utilisée était le solveur linéaire *PCG* (Preconditioned Conjugate Gradient) qui résout le système linéaire avec la méthode du gradient conjugué préconditionné. Bien que cette méthode est efficace, elle requiert un grand nombre d'itérations qui rendent

la simulation très longue en temps de calcul. Pour remédier à cela, le choix a été fait d'utiliser le solveur *GAMG* (Geometric-Algebraic Multi-Grid). L'idée de base est de définir un maillage grossier à partir du maillage initialement défini. Une fois que la solution sur ce maillage grossier est obtenue, elle est projetée sur un maillage plus fin et sert ainsi de solution initiale au calcul. Plusieurs grilles grossières peuvent être envisagées avant la résolution sur le maillage voulu.

4.4.2 Analogie électrique

Comme l'ont montré Lorthois *et al.* [8] à l'aide d'une méthode de graphe vasculaire, un système où une artère en entrée et une veine en sortie sont placées dans un milieu capillaire homogénéisé peut se décrire simplement de façon unidimensionnelle en appliquant une équivalence de résistances en série soumises à une différence de pression ΔP constante.

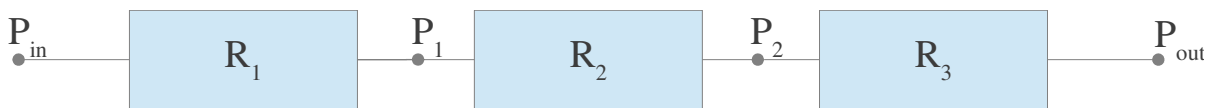


Figure 4.5 – Analogie électrique du système d'étude : circuit en série, avec une artère en entrée, une veine en sortie et le milieu homogénéisé entre les deux.

Considérons un système simple où l'on a une artère en entrée, une veine en sortie et le milieu poreux homogénéisé entre les deux. Comme on le voit sur la figure 4.5, la première et dernière résistance (R_1 , R_3 respectivement) correspondent à celle des gros vaisseaux tandis que la résistance intermédiaire R_2 correspond à celle du milieu poreux. Pour évaluer leurs valeurs, on s'appuie sur les lois qui décrivent l'écoulement dans chaque sous-système : R_1 et R_3 sont obtenues en appliquant la loi de Hagen-Poiseuille tandis que R_2 est dictée par la loi de Darcy.

Résistance des gros vaisseaux

La loi de Hagen-Poiseuille donne :

$$U_i = \frac{Q_i}{S_i} = \frac{S_i}{8\pi\mu L_i} \Delta P_i \equiv \frac{\Delta P_i}{R_i} \quad (4.1)$$

Les résistances R_1 et R_3 valent donc :

$$R_1 = \frac{8\pi\mu L_1}{S_1} \quad \text{avec} \quad \Delta P_1 = P_1 - P_{in} \quad (4.2)$$

$$R_3 = \frac{8\pi\mu L_3}{S_3} \quad \text{avec} \quad \Delta P_3 = P_{out} - P_2 \quad (4.3)$$

Remarque : ici, P_{in} et P_{out} sont connues. L_1 , S_1 et L_3 , S_3 représentent la longueur et la section de l'artère et de la veine respectivement.

Résistance du milieu homogénéisé

La loi de Darcy s'écrit :

$$U_i = -\frac{K}{\mu} \frac{\Delta P_{ij}}{L_i} \equiv \frac{\Delta P_i}{R_i} \quad (4.4)$$

on en déduit que la résistance R_2 s'écrit donc :

$$R_2 = \frac{\mu L_2}{K} \quad \text{avec} \quad \Delta P_2 = P_2 - P_1 \quad (4.5)$$

où L_2 est la distance entre les deux vaisseaux.

Résolution

On obtient ainsi le système suivant à résoudre :

$$\begin{cases} U_1 = \frac{\Delta P_1}{R_1} = \frac{S_1}{8\pi\mu L_1} (P_1 - P_{in}) \\ U_2 = \frac{\Delta P_2}{R_2} = -\frac{S_2}{\mu L_2} (P_2 - P_1) \\ U_3 = \frac{\Delta P_3}{R_3} = \frac{S_3}{8\pi\mu L_3} (P_{out} - P_2) \end{cases} \quad (4.6)$$

Initialisation de la pression

Les cas tests de simulations ont montré que cette méthode, utilisée seule, n'est pas efficace. L'idée est de lancer le calcul numérique à partir d'un champ de pression constant dans tout le domaine. Pour trouver la valeur de la pression à imposer, on pose $U_1 = U_2 = U_3 = U$ et on obtient ainsi un système bien posé (4.6) de trois équations à trois inconnues (U, P_1 et P_2). On peut ainsi évaluer une valeur moyenne pondérée de la pression \tilde{P} à imposer dans le milieu capillaire. Une méthode consiste à pondérer les pressions par les résistances :

$$\tilde{P} = \frac{R_1 P_1 + R_3 P_2}{R_1 + R_3} \quad (4.7)$$

avec :

$$U = \frac{P_{out} - P_{in}}{R_1 + R_2 + R_3} \quad (4.8)$$

Cependant, si le système présente des propriétés de symétrie (vaisseaux symétriques par rapport à leur position dans le milieu et par rapport à leur propriétés respectives telles leur longueur et leur rayon), cette façon de procéder est correcte et la convergence se fait en moins de dix itérations. Mais vu que la symétrie est un état idéal qui n'est probablement jamais atteint quand il s'agit de données anatomiques réelles, cette méthode n'est pas la plus optimale.

Initialisation du débit

Une autre façon de procéder serait d'initialiser le débit en premier. On impose alors un débit égal pour les deux vaisseaux, et vu que la résolution du problème numérique est linéaire, ceci n'aura aucune influence sur le résultat final. Ainsi, le débit est initialisé à partir de la valeur trouvée en résolvant le système d'équations (4.6). Malheureusement, cette méthode n'améliore pas le nombre d'itérations nécessaire pour converger, on se retrouve toujours avec plus de 1000 itérations avant que le système se stabilise et avec même des pressions négatives aux premières itérations..

Initialisation de la pression et du débit

Le dernier cas test a été effectué en initialisant et la pression et le débit dans le domaine avec les valeurs de Q (déduite de la valeur de U) et de \tilde{P} trouvées en résolvant (4.6). On constate une amélioration nette au niveau de la convergence : dès les premières itérations on arrive à des valeurs de la pression et du débit très proches de la solution finale. En effet, pour une artère et une veine dans un milieu homogénéisé, la pression aux deux points sources ainsi que le débit diffèrent d'environ 10^{-5} et au bout d'une centaine d'itérations on arrive à un système stabilisé dont les ordres de grandeurs du champ de pression ainsi que des débit diffèrent très légèrement de ceux obtenues aux toutes premières itérations.

Figures des simulations pour une artère et une veine

Les figures 4.6a et 4.6b illustrent une simulation effectuée avec une veine et une artère dans un milieu homogénéisé. Les propriétés utilisées se trouvent dans la section 4.4.3.

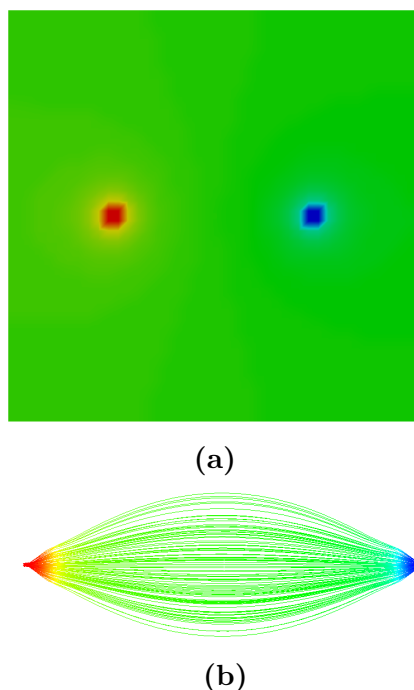


Figure 4.6 – Simulation pour 1 artère en entrée et 1 veine en sortie, coupe transversale du cube. **(a)** : champ de pression. En rouge la zone en surpression, et en bleu la zone en sous-pression. **(b)** : lignes de courant.

Extension à plusieurs vaisseaux

Dans le cas où plusieurs artères et veines sont présentes dans le milieu poreux, deux méthodes restent possibles. La première est d'étendre cette étude en incluant des résistances parallèles, et la deuxième serait d'associer une artère à la veine la plus proche et d'appliquer la même méthodologie vue juste auparavant (bien que cette méthode pourrait nécessiter, selon le nombre d'artères et de veines présentes dans le système, d'inclure des résistances parallèles).

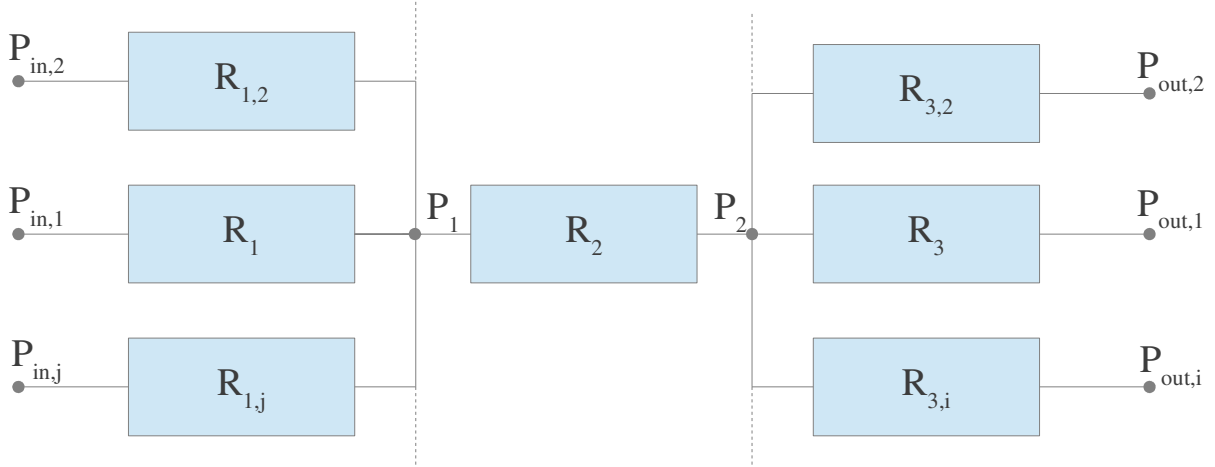


Figure 4.7 – Analogie électrique du système d'étude : circuit en parallèle, avec plusieurs artères et veines.

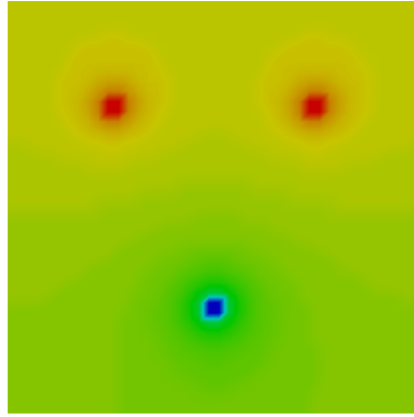
La différence notable serait dans la résolution du système d'équations. En effet, ce dernier serait de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{ll} U_1 = \sum_{j=1}^n \frac{P_1 - P_j}{R_{1,j}} & (a) \\ U_2 = \frac{P_2 - P_1}{R_2} & (b) \\ U_3 = \sum_{i=1}^N \frac{P_{out,i} - P_2}{R_{3,j}} & (b) \end{array} \right. \quad (4.9)$$

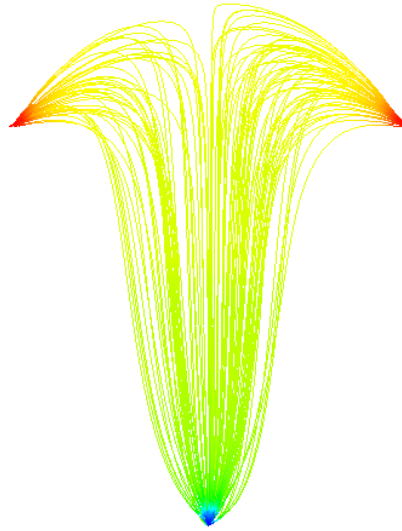
où j et n représentent l'indice des artères et leur nombre total respectivement (idem avec i et N pour les veines). La résistance R_2 peut être évaluée en considérant la moyenne des distances entre les vaisseaux par exemple. La résolution à la main d'un tel système peut être une tâche pénible. Pour cela, le début du programme *main* inclue une partie qui résout de tels systèmes, qui en déduit la valeur du débit ainsi que du champ de pression moyen et qui initialise ensuite le système pour lancer la simulation.

Figure des simulations pour deux artères et une veine

Les figures 4.8a et 4.8b illustrent une simulation effectuée avec une veine et deux artères dans un milieu homogénéisé. Les propriétés utilisées pour le calcul se trouvent dans la section 4.4.3.



(a)



(b)

Figure 4.8 – Simulation pour 2 artères en entrée et une veine en sortie, coupe transversale du cube. **(a)** : champ de pression, en rouge les zones de surpression et en bleu la zone de sous-pression ; **(b)** : lignes de courant.

4.4.3 Comparaison entre les différentes méthodes

Un cas test de simulation a été lancé avec chacune des méthodes d'optimisation évoquées dans la section précédente. La géométrie consiste en deux artères qui ont les mêmes propriétés (longueur, rayon et pression à l'extrémité) et une veine placés dans le milieu homogénéisé. Les propriétés utilisées pour les simulation sont les suivantes :

Propriétés de simulation	
Perméabilité du milieu (m^2)	$K = 10^{-9}$
Viscosité du sang ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)	$\mu = 6 * 10^{-3}$
Taille du milieu homogénéisé (mm)	$L = 2$
Nombre de mailles par direction ($x \times y \times z$)	41 x 41 x 41
Diamètre de l'artère (mm)	$d_a = 0.02$
Longueur de l'artère (mm)	$l_a = 1$
Position (x, y, z) de l'artère 1 (mm)	(0.5, 1.5, 1)
Position (x, y, z) de l'artère 2 (mm)	(1.5, 1.5, 1)
Diamètre de la veine (mm)	$d_v = 0.015$
Longueur de la veine (mm)	$l_v = 0.15$
Position (x, y, z) de la veine (mm)	(1, 0.5, 1)
Pression à l'extrémité de l'artère (Pa)	$P_{in} = 0.1$
Pression à l'extrémité de la veine (Pa)	$P_{out} = 0$

Comparaison entre les solveurs linéaires

Le tableau ci-dessous donne le nombre d'itérations avant convergence pour le solveur *PCG* et *GAMG*. Ici, aucune initialisation sur la pression ou le débit ont été effectuées (on part d'un système où la pression et le débit sont nuls partout) :

Solveur linéaire	Nombre d'itérations	Temps d'exécution
<i>PCG</i>	12130	2 heures 40 minutes 50 secondes
<i>GAMG</i>	3658	20 minutes

Le solveur linéaire *GAMG* est nettement plus efficace que le solveur *PCG* : en effet, le nombre d'itérations est diminué par 3.3 fois et le temps d'exécution est largement inférieur.

Comparaison entre les grandeurs à initialiser

Pour ces simulations, seul le solveur linéaire *GAMG* a été utilisé :

Initialisation	Nombre d'itérations	Temps d'exécution
<i>Pression</i>	2308	11 minutes
<i>Débit</i>	2537	13 minutes
<i>Pression & débit</i>	1286	6 minutes

Il est donc évident que la meilleure façon de procéder est en initialisant et la pression et le débit dans le milieu. Bien que les ordres de grandeurs ne varient pas énormément entre chaque initialisation, la différence pourrait devenir significative si encore plus de points sources (soit de gros vaisseaux) sont inclus dans la simulation.

4.5 Conclusion

Les outils numériques utilisés pendant le stage sont de nature différente. Les géométries et maillages ont été créés sous Salome et OpenFOAM®, le développement du code s'est

fait sous OpenFOAM® et la visualisation et le traitement des données avec ParaView™. La mise en place du code a donc été validée pour le couplage entre les deux modèles : nous avons ainsi développé un code qui couple deux modèles descriptifs à différentes échelles, celle des gros vaisseaux (avec une approche type réseau) et celle du milieu capillaire (avec une approche type milieu continu, homogénéisé).

Les principales difficultés rencontrées étaient sur la génération du maillage : étant donné que les ordres de grandeurs diffèrent énormément entre le diamètre du cylindre ($20\mu m$) et la taille du cube ($2mm$), le maillage raffiné autour du cylindre demandait des choix subtils et judicieux quant aux paramètres de maillage et de raffinement. Ensuite, une étape importante est l'optimisation du code : d'énormes paramètres rentrent en jeu quand il s'agit d'étudier le rapport entre la convergence de la solution et le nombre d'itérations nécessaires. Essentiellement, les solveurs de résolution ainsi que l'initialisation du système ont leur part à contribuer, on a vu qu'en choisissant un solveur linéaire multi-grid et en imposant une initialisation du système proche de son état final, on arrive à réduire le nombre d'itérations de quelques milliers d'itérations à quelques centaines.

Conclusions et perspectives

Nous avons débuté ce stage par une étude bibliographique concernant les modèles utilisés pour décrire l'écoulement du sang dans le cerveau. Pour les gros vaisseaux qui sont les artères, les artérioles, les veines et les veinules, un modèle de type réseau de pores (ou modèle de graphe vasculaire) est utilisé, dans lequel l'écoulement est régi par la loi de Poiseuille dans chaque branche : on récupère donc un débit. Quant au lit capillaire, qui est formé par les plus petits et fins vaisseaux qui assurent la jonction entre les artères et les veines, vu la complexité de sa géométrie et l'abondance de ses vaisseaux, ce dernier est considéré comme un continuum : le milieu est donc homogénéisé et modélisé à l'échelle de Darcy.

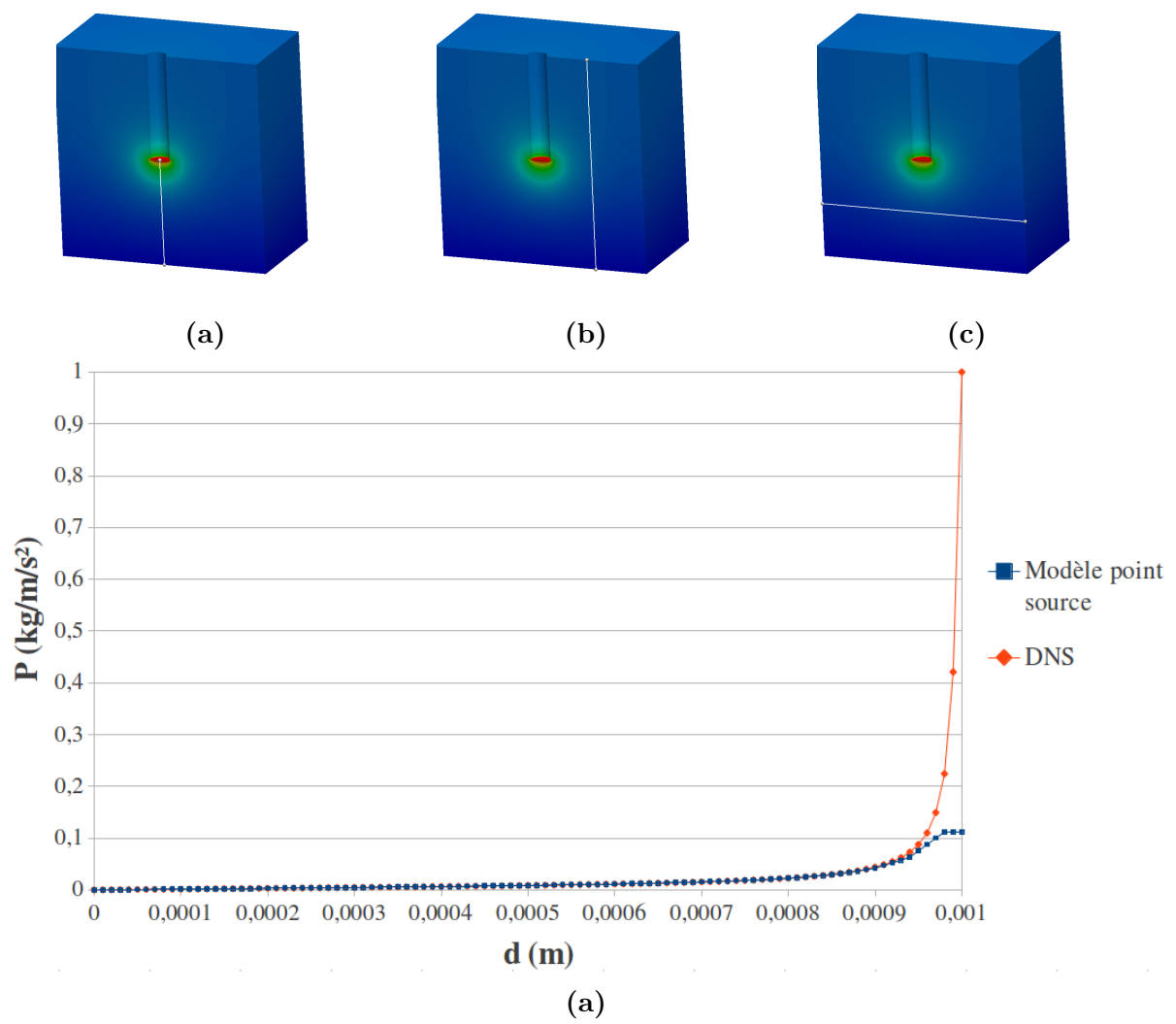
Ce stage s'est dédiée en grande partie au couplage entre les deux modèles. Du calcul réseau, nous récupérons un débit qui est ensuite injecté dans le modèle homogénéisé. Cependant, vu que la pression résultante dans la maille dans laquelle le débit a été injecté dépend du maillage, nous nous sommes inspirés des modèles de puits utilisés en génie pétrolier pour corriger cette erreur numérique. Les résultats ont été très promettant : en effet, nous n'obtenons plus aucune dépendance au maillage et par comparaison avec la DNS, nous arrivons à prédire la pression réelle qui figure à l'extrémité du gros vaisseau. Une des limitations de cette méthode repose dans l'interaction entre différentes sources, puisque le modèle n'est plus valable dès que deux sources sont à moins de $400\mu m$ de distance. La question reste ouverte quant aux interactions potentielles entre les sources et les parois du domaine aussi.

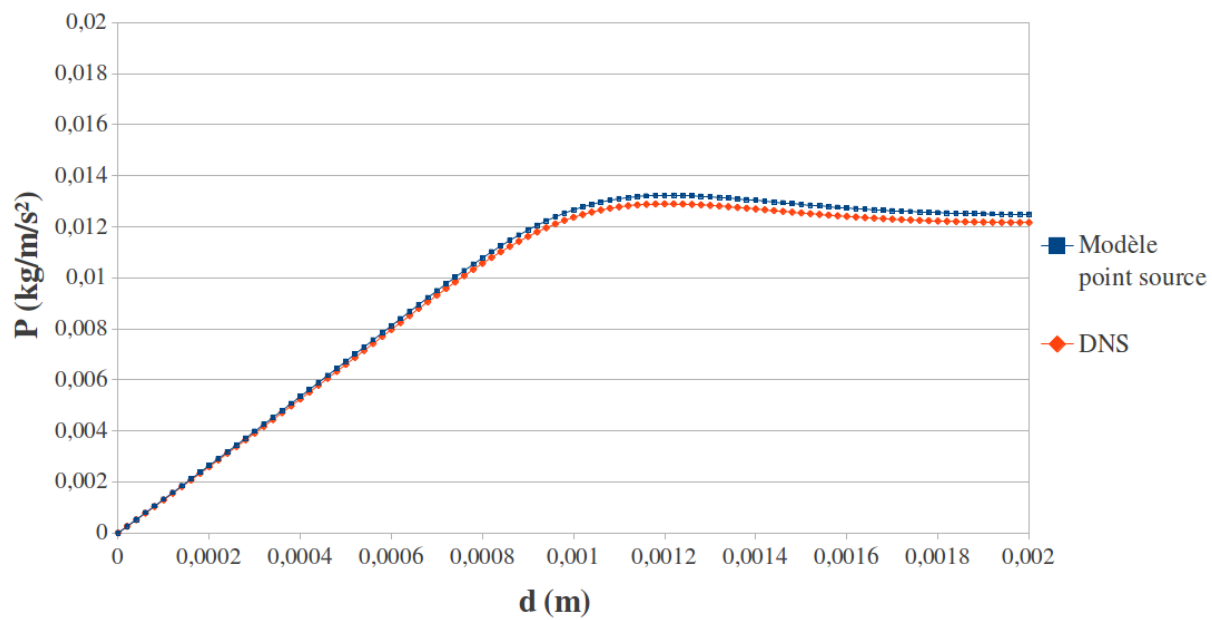
En outre, un temps conséquent a été passé sur l'apprentissage et la prise en main de l'outil open-source de simulations numériques OpenFOAM®, sur lequel la création du maillage, le développement du code et les simulations numériques se sont effectués. Un des avantages nets de cette plate-forme est dans son éventail de choix en ce qui concerne les solveurs linéaires de résolution. Une étude de l'optimisation du code nous a amené à choisir un solveur multi-grille qui réduit les temps de calcul de façon considérable. Aussi, nous avons montré que l'initialisation du champ de pression et du débit avec des

valeurs moyennes déterminées en effectuant une analogie électrique du système d'étude améliorerait d'autant plus le temps et le nombre d'itérations requis pour la convergence de la solution . Ainsi, une simulation peut durer 2 heures et 40 minutes sans application des paramètres d'optimisation, et 6 minutes avec...! Ceci dit, ces derniers n'ont pas été étudiés de façon approfondie. Il faudra donc mener cette étude et déterminer quels paramètres correspondent le mieux à ces simulations, et ainsi espérer obtenir un produit final encore plus optimal.

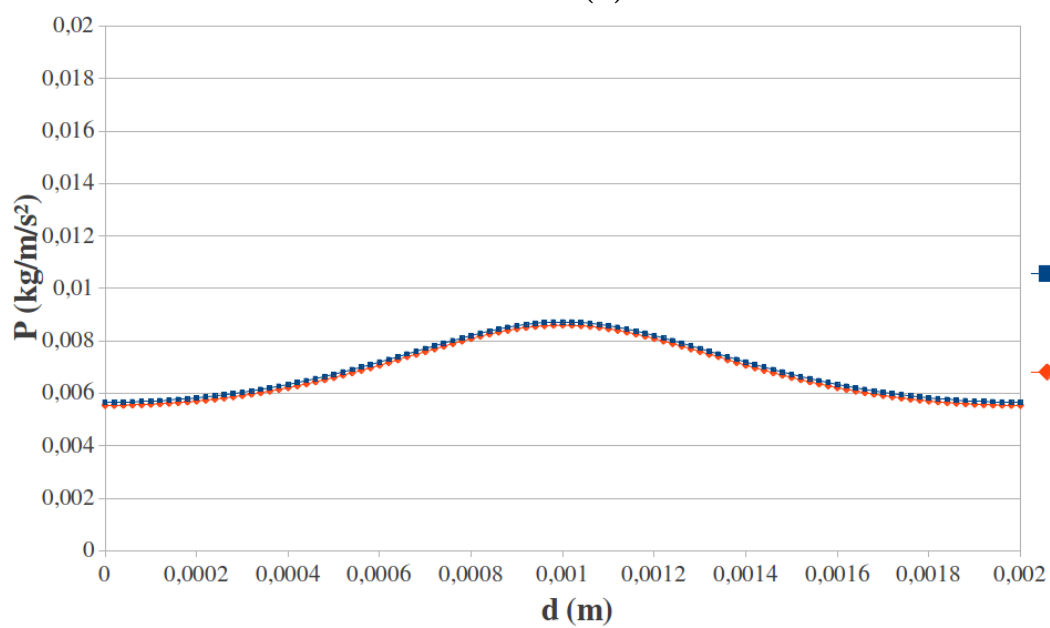
Ces modèles de description de l'écoulement du sang dans le système vasculaire sont bien connus et utilisés par la communauté de scientifiques spécialisés dans le domaine [1], [6], [20]. Bien que ce stage a permis d'améliorer la façon avec laquelle le couplage entre les deux modèles se fait et d'étendre ces études à une géométrie tridimensionnelle, de nombreuses perspectives sont encore envisageables pour le futur. Parmi elles se trouve l'étude des transferts de masse entre le sang et le tissu environnant. Dans ce cas, une homogénéisation des équations de conservation de la masse nécessitera une évaluation des paramètres effectifs tel le tenseur de diffusion effectif tout en prenant en compte des données anatomiques réelles et une densité capillaire variable avec la profondeur dans le cortex. Enfin, le modèle ne peut que s'améliorer avec le temps, nous pouvons ainsi imaginer d'inclure l'aspect non newtonien du sang (c'est-à-dire une viscosité qui dépend du taux d'hématocrite local) ou encore d'incorporer une variation des diamètres des vaisseaux pour l'étude des phénomènes d'occlusions ou de dilatations artérielles. Avec la technologie qui évolue et les supercalculateurs qui deviennent de plus en plus accessibles, tout devient possible..

Courbes de pressions à différents endroits



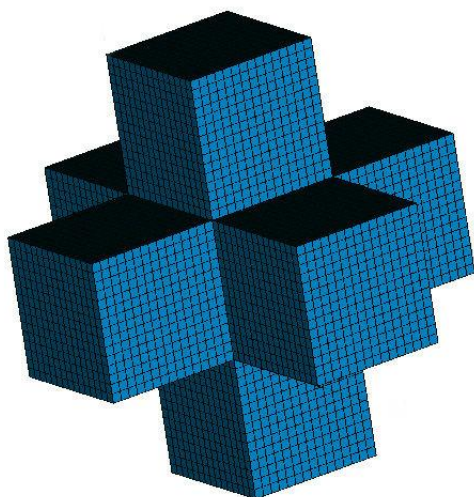


(b)

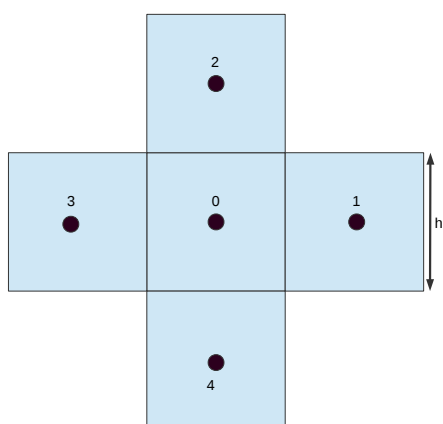


(c)

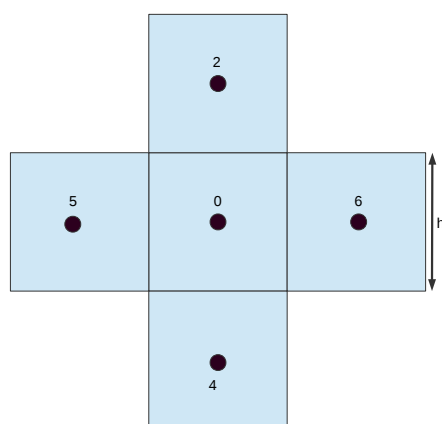
Schéma numérique



(a) Schéma numérique



(b) Vue de face



(c) Vue de profil

Bibliographie

- [1] J. Reichold, M. Stampanoni, A.L. Keller, A. Buck, P. Jenny, and B. Weber. Vascular graph model to simulate the cerebral blood flow in realistic vascular networks. *Journal of Cerebral Blood Flow and Metabolism*, 2009.
- [2] B.W. Zweifach. Quantitative studies of microcirculatory structure and function. i. analysis of pressure distribution in the terminal vascular bed in cat mesentery. *Circulation Research*, 1974.
- [3] H.H. Lipowsky, S. Usami, S. Chien, and R.N. Pittman. Hematocrit determination in small bowel bore tubes from optical density measurements under white light illumination. *Microvascular Research*, 1980.
- [4] A.R. Pries, D. Neuhaus, and P. Gaehtgens. Blood viscosity in tube flow : dependence on diameter and hematocrit. *American Journal of Physiology*, 1992.
- [5] J.B. Mandeville, J.J. Marota, C. Ayata, G. Zaharchuk, M.A. Moskowitz, B.R. Rosen, and Weisskoff R.M. Evidence of a cerebrovascular postarteriole windkessel with delayed compliance. *Journal of Cerebral Blood Flow and Metabolism*, 1999.
- [6] K. Erbertseder, J. Reichold, B. Flemisch, P. Jenny, and R. Helmig. A coupled discrete/continuum model for describing cancer-therapeutic transport in the lung. *PLoS ONE*, 2012.
- [7] S. Lorthois, F. Cassot, and F. Lauwers. Simulation study of brain blood flow regulation by intra-cortical arterioles in an anatomically accurate large human vascular network : Part i : Methodology and baseline flow. *Neuroimage*, 2010.
- [8] S. Lorthois, F. Cassot, and F. Lauwers. Simulation study of brain blood flow regulation by intra-cortical arterioles in an anatomically accurate large human vascular network. part ii : Flow variations induced by global or localized modifications of arteriolar diameters. *NeuroImage*, 54(2840-2853), 2010.
- [9] Henry Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon*. Librairie des Corps impériaux des ponts et chaussées et des mines, 1856.
- [10] C.M. Marle. Henry darcy et les écoulements de fluides en milieux poreux. *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, 61(5) :599–609, 2006.

- [11] S. Whitaker. Flow in porous media i : A theoretical derivation of darcy's law. *Transport in Porous Media*, 1(1) :3–25, 1986.
- [12] Didier-Yu Ding. Modélisation des écoulements en milieu poreux au voisinage des puits. Technical report, Avril 2004.
- [13] D.W. Peaceman. Interpretation of well-block pressure in numerical reservoir simulation. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 18 :183–194, 1978.
- [14] R.E. Ewing, R. Lazarov, S.L. Lyons, D.V. Papavassiliou, J. Pasciak, and G. Qin. Numerical well model for non-darcy flow through isotropic porous media. *Computational Geosciences*, 3 :185–204, 1998.
- [15] D.W. Peaceman. Interpretation of well-block pressure in numerical reservoir simulation with non-square grid blocks and anisotropic permeability. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 23 :531–543, 1983.
- [16] D.W. Peaceman, editor. *Interpretation of well-block pressure in numerical reservoir simulation - Part 3 : Some additional well geometries*, Dallas, TX, Septembre 1978. 62nd Annual Technical Conference and Exhibition of the Society of Petroleum Engineers.
- [17] Hrvoje Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Juin 1996.
- [18] The Open Source CFD Toolbox OpenFOAM. *Programmer's Guide*, Juillet 2009.
- [19] H.G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6), Novembre/Décembre 1998.
- [20] S. Lorthois and F. Cassot. Fractal analysis of vascular networks : insights from morphogenesis. *Journal of Theoretical Biology*, 2010.