

Projet de Recherche Doctoral SCAI – AAP 2025

EASY ELECTROSPINNING

F. De Vuyst, T. Baudequin,*

Laboratoire Biomécanique et Bioingénierie, UMR 7338, UTC, CNRS,
Équipes CBB et IFSB

Mots-clés – Electrospinning; electrospun fibers; multiphysics; deep neural networks; scarce data; physics-informed neural networks; AI assistant; MISTRAL

Contexte – L'électrospinning (ES) est un procédé de production de réseaux de fibres de polymère extrêmement versatile, et désormais exploité couramment dans de nombreux domaines. Il est utilisé au laboratoire Biomécanique – Bioingénierie BMBI de l'UTC pour produire des biomatériaux supports de culture (scaffolds) pour l'ingénierie tissulaire avec des résultats très prometteurs [1, 2]. Lors d'une production par ES, une solution de polymère est extrudée à travers une fine aiguille, en vis-à-vis d'un collecteur métallique. Une forte différence de potentiel (plusieurs dizaines de kV) est appliquée entre l'aiguille et le collecteur. Sous l'effet du champ ainsi créé, le polymère est immédiatement attiré par le collecteur sous forme d'une fibre d'épaisseur nanométrique. Le solvant s'évapore pendant le vol et un réseau solide se forme ainsi sur le collecteur, mimant la matrice des tissus biologiques. En conséquence, pour conserver ce procédé stable, un équilibre doit être trouvé entre un nombre très important de paramètres : nature du polymère, type de solvant, concentrations, débit, diamètre de l'aiguille, distance aiguille-collecteur, tension, humidité et température, etc [3]. Optimiser un nouveau matériau demande donc de nombreuses tentatives qui se font souvent simplement par essai/erreur. Nous cherchons à utiliser le Machine Learning (ML) pour accélérer cette optimisation en trouvant des combinaisons de paramètres fonctionnels.

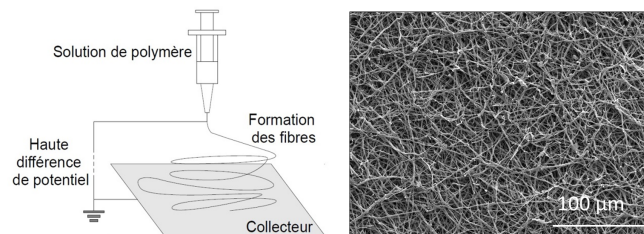


Figure 1: Montage standard d'électrospinning (gauche) et vue des fibres en microscopie électronique à balayage MEB (droite). Données BMBI.

Objectif scientifique – Des cas d'applications de l'IA et du ML à l'ES sont rapportés dans la littérature, mais présentent des limites dans le nombre de paramètres impliqués en entrée (optimisation pour un seul polymère donné), et surtout dans les paramètres de sortie : seul le diamètre des fibres est recherché [3]. Pourtant, une approche "inverse" serait la plus profitable aux expérimentateurs, c'est-à-dire entrer les propriétés recherchées des fibres pour obtenir de la part de l'algorithme les réglages du montage à appliquer. Un verrou scientifique est ici l'absence probable d'unicité d'une telle solution : plusieurs lots de paramètres peuvent aboutir aux mêmes propriétés de fibres. De plus, l'ES est un phénomène dynamique, le champ électrique étant modifié au fur et à mesure que les fibres s'accroissent sur le collecteur, mais ce caractère n'est pas pris en compte jusqu'ici [5]. Nous proposons donc l'approche suivante pour ce projet doctoral :

– Objectif 1 : à court terme, élaborer un modèle retrouvant les résultats de la littérature (sortie = diamètre des fibres) grâce à une base de données interne se basant sur des années d'expérimentation au laboratoire BMBI, incluant paramètres quantitatifs et images MEB des cas considérés acceptables ou non. Cette première étude doit permettre la prise en main du sujet par le doctorant, le nettoyage et la curation des données, et ensuite une étude sur les paramètres les plus influents. Nos propres serveurs NVIDIA Grace-Hopper à l'UTC seront utilisés pour la phase d'entraînement. La recherche de nombres adimensionnels clés pour simplifier le modèle sera aussi étudiée et pourra constituer un premier résultat novateur important.

*fdevuyst@utc.fr, timothee.baudequin@utc.fr

- Objectif 2 : cœur du projet, étude de la mise au point d’un modèle ”inverse” (entrée = classe et propriétés qualitatives finales de fibres, sortie = réglage des paramètres de la machine) sous conditions de température et d’humidité. Il s’agit de la partie la plus innovante du projet, mais aussi la plus complexe et risquée. L’existant en littérature, l’environnement scientifique du laboratoire ainsi que des résultats préliminaires internes générés dans le cadre d’un ancien stage faciliteront toutefois sa mise en œuvre. Formé à l’ES expérimental, le candidat pourra directement comparer le résultat des modèles prédictifs à des productions qu’il réalisera lui-même. Il aura à sa disposition montage d’électrospinning, consommables liés à la production des matériaux et ressources numériques.
- Perspectives : prise en compte du caractère dynamique du processus et/ou extension aux phénomènes multiphysiques connexes. En particulier, un dialogue pourra se faire avec une thèse en cours au laboratoire BMBI sur la modélisation numérique des écoulements non newtoniens en amont du jet électrospinné.

Justification de l’approche scientifique – Une simulation multiphysique complète et fidèle de l’ES est hors d’atteinte (raideurs liées aux rapports d’aspect spatiaux, temps caractéristiques, maillage adaptatif, incertitudes, caractère dynamique, instabilités, frontières libres, contact ...). Une approche par ML paraît beaucoup plus atteignable. Les avancées récentes sur les approches neuronales informées par la physique (PINNs) permettent d’entrevoir des étapes d’entraînement nécessitant moins de données. On pourra par exemple utiliser un modèle EDP reproduisant les instabilités hydrodynamiques [4], génératrices des différents types de fibres. Par ailleurs, l’usage final est destiné à des expérimentateurs non spécialistes en IA; il paraît judicieux d’inclure un assistant LLM (MISTRAL) proposant des solutions en langage naturel. Cette IA générative pourra être entraînée sur des données et résultats du modèle inverse.

Adéquation avec l’Institut SCAI et PostGenAI@Paris – Le projet doctoral adopte une approche pluridisciplinaire combinant dispositifs d’ES réels, modélisation multiphysique, acquisition de données expérimentales, modèles de ML informés par la physique et, possiblement, l’utilisation d’assistants AI. Il rentre parfaitement dans les domaines d’intérêt de PostGenAI@Paris : approches disruptives de calibration de dispositifs d’électrospinning, domaine de la santé, organes artificiels.

Rôle de chaque encadrant

- Florian De Vuyst est PU1 Section 26, rattaché au laboratoire de biomécanique et bioingénierie. Ses domaines d’expertise couvrent l’analyse numérique, les méthodes de discrétisation d’EDP et les méthodes numériques générales. Une partie de la recherche concerne les techniques de réduction d’ordre de modèle (ROM), et depuis récemment les synergies possibles entre méthodes ROM et le ML pour les problèmes de mécanique des fluides et d’interaction fluide-structure [6]. Il est aussi responsable de la Mention de Master ”Ingénierie des Systèmes Complexes” à l’UTC dans laquelle il y enseigne l’UE ”Scientific Machine Learning”. Pour la thèse, il apportera ses connaissances et compétences en DNN et PINNs et interagira étroitement avec T. Baudequin sur la modélisation du procédé d’ES, les expérimentations et les usages.
- Timothée Baudequin est MCF Section 65 au laboratoire Biomécanique et Bioingénierie. Il utilise l’ES dans ses projets de recherches depuis plus de 10 ans, de la mise au point des solutions de polymère jusqu’à l’utilisation des fibres pour des applications en santé, en particulier l’ingénierie tissulaire du système musculo-squelettique. Il apportera ainsi ses connaissances dans l’influence et l’importance respectives des paramètres du montage, les critères de sélection des fibres et la qualité des données d’entrée.

References

- [1] N. Rivoallan, et al., Comparison of hydroxyapatite and honeycomb micro-structure in bone tissue engineering using electrospun beads-on-string fibers. *Int. J. Artif. Organs* (2024). Doi: <https://doi.org/10.1177/03913988241268033>.
- [2] T. Baudequin, et al., The Osteogenic and Tenogenic Differentiation Potential of C3H10T1/2 (Mesenchymal Stem Cell Model) Cultured on PCL/PLA Electrospun Scaffolds in the Absence of Specific Differentiation Medium. *Materials* 10, 1387 (2017).
- [3] B. Subeshan, A. Atayo, and E. Asmatulu, Machine learning applications for electrospun nanofibers: a review, *J. Mater. Sci.* (2024), 59:14095–14140. Doi: <https://doi.org/10.1007/s10853-024-09994-7>.
- [4] D. Deshawar and P. Chokshi, Stability analysis of an electrospinning jet of polymeric fluids, *Polymer*, Vol 131, 34–49 (2017). Doi: <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.10.019>.
- [5] M. Augustine, M. Bhushan, S. Bhartiya, T. Baudequin and F. De Vuyst, Deep Learning In Process Modeling: A Survey, Preprint (2024), Doi: <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.27581.06881>.
- [6] A. Tiba, T. Dairay, F. De Vuyst, I. Mortazavi, J.-P. Berro Ramirez, Machine-Learning Enhanced Predictors for Accelerated Convergence of Partitioned Fluid-Structure Interaction Simulations, *Comp. Phys. Comm.*, Pre-proof, 109522 (2025). Doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2025.109522>.