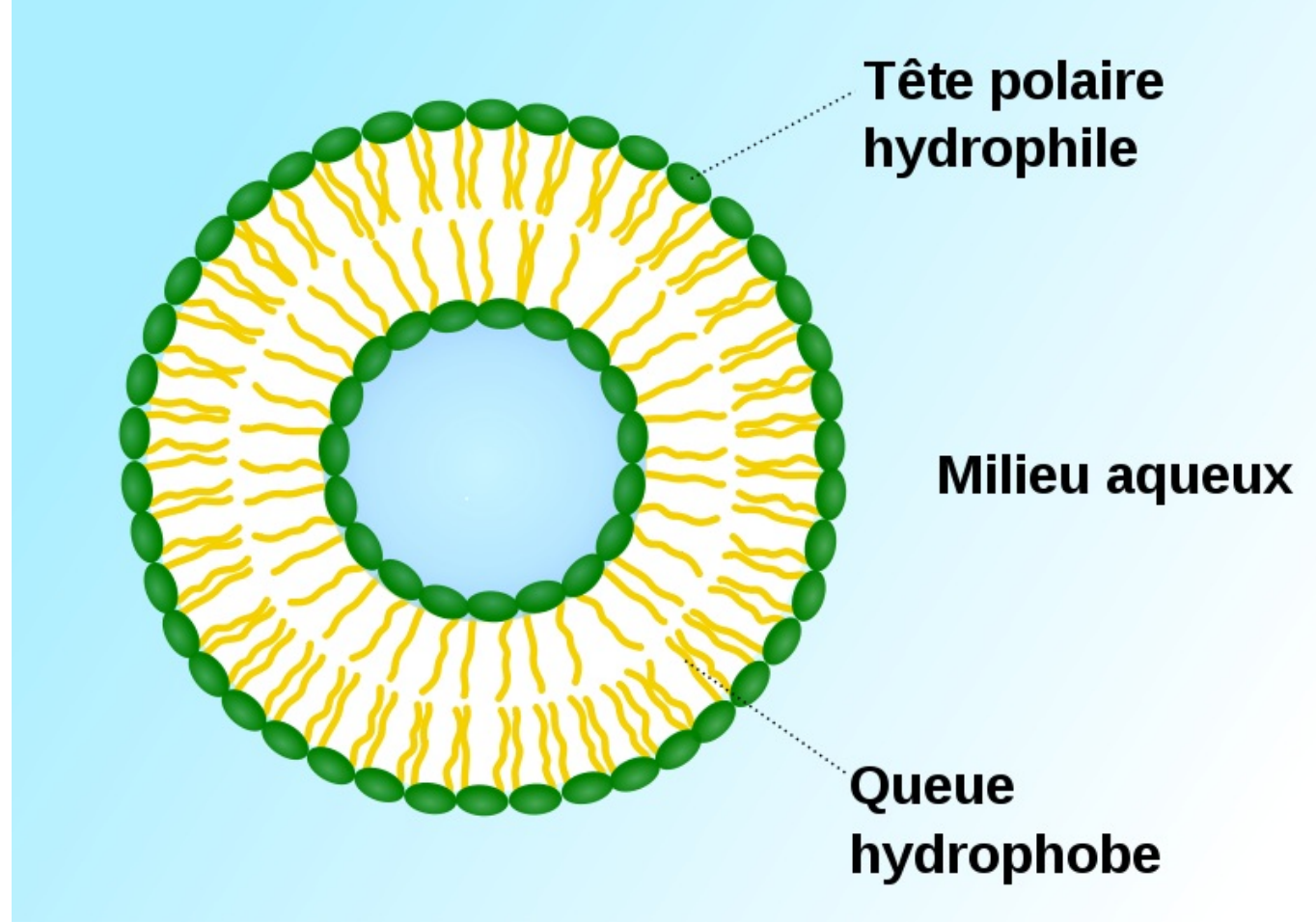


Jeremy.Dalphin@mines-nancy.org Doctorant au sein de l'équipe EDP sous la direction d'Antoine Henrot et Takéo Takahashi

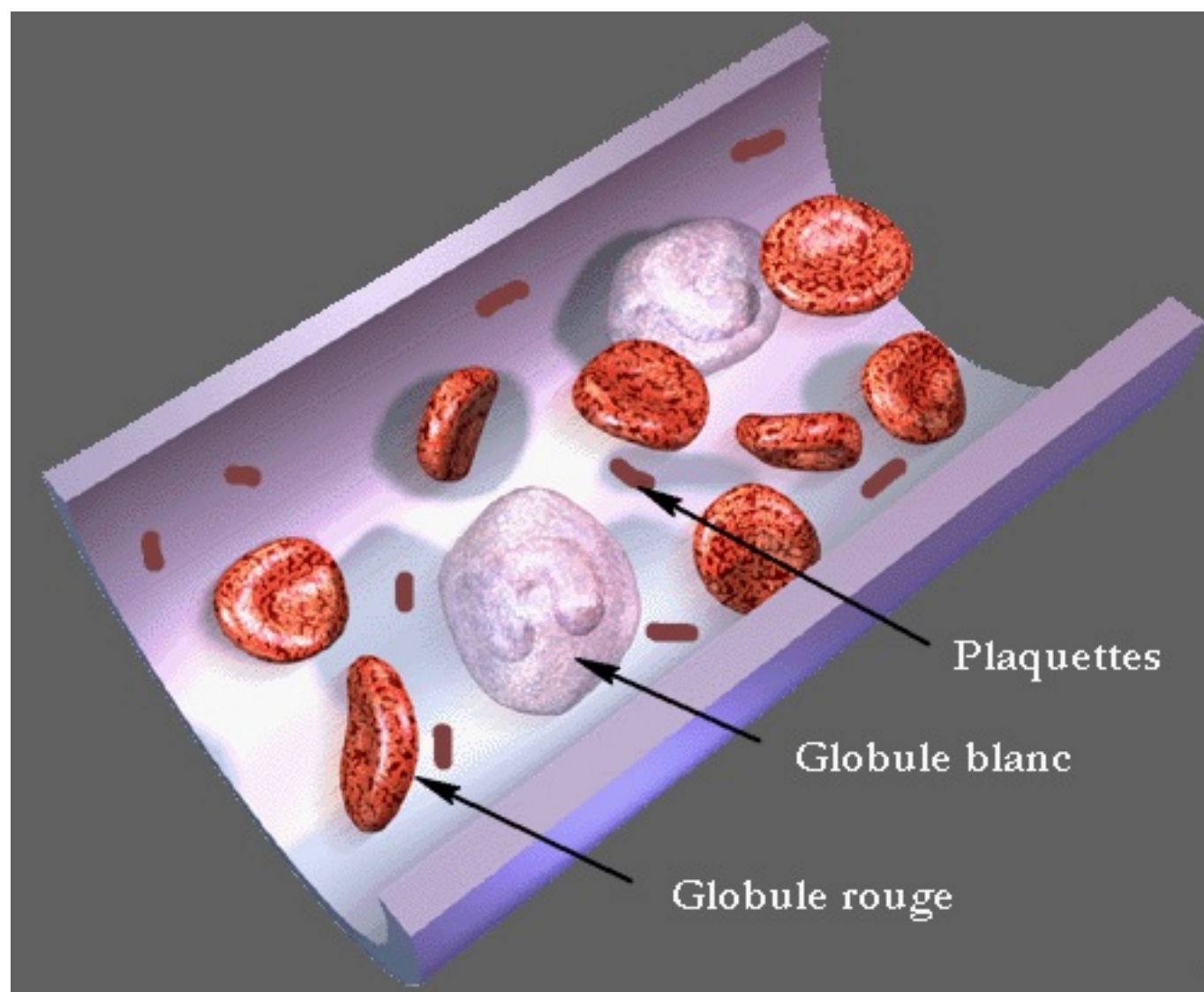
Institut Elie Cartan de Lorraine UMR CNRS 7502, Université de Lorraine BP 70239 54506 Vandœuvre-lès-Nancy Cedex, France

Introduction

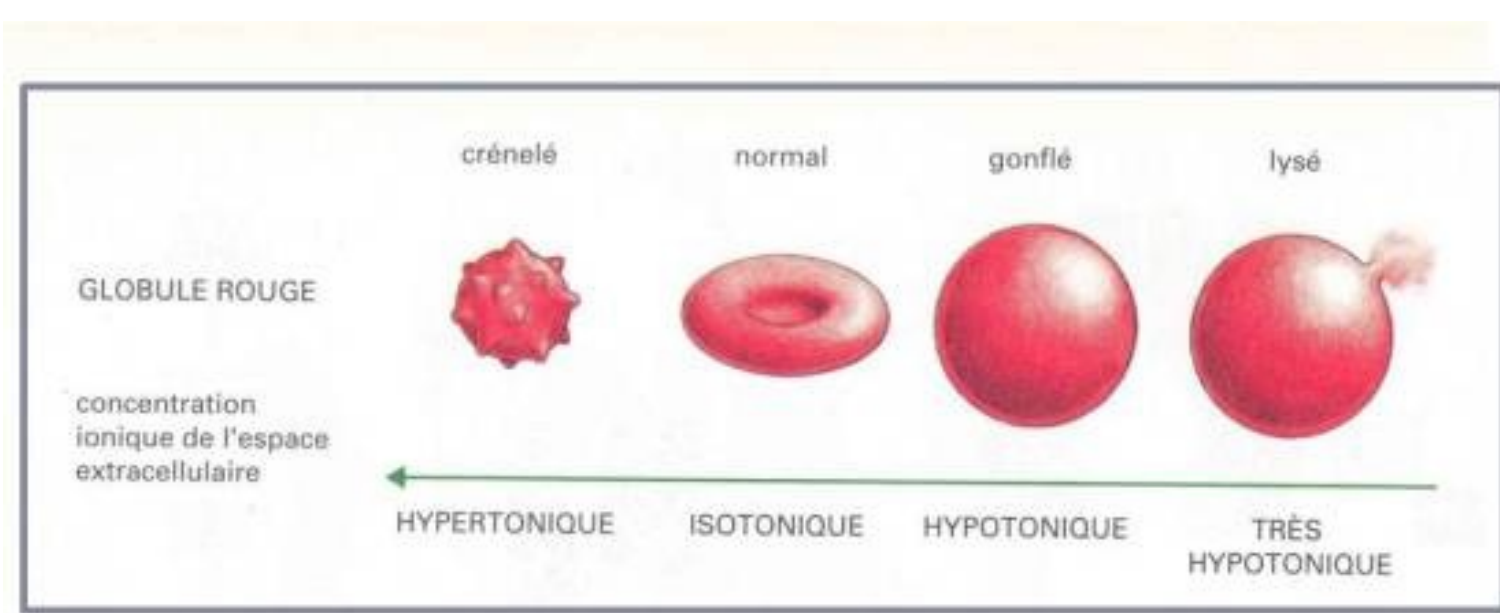
En biologie, lorsqu'un nombre suffisant de phospholipides est inséré dans un milieu aqueux, ces derniers s'assemblent alors par paires pour former une bicouche, aussi appelée vésicule. Une vésicule représente donc simplement un sac de fluide, lui-même plongé dans un fluide.



Dépourvu de noyau chez les mammifères, le globule rouge est un exemple de vésicule à laquelle est fixée un réseau de protéines jouant le rôle de squelette. Il est présent dans le sang et assure l'acheminement au sein de l'organisme des gaz respiratoires comme l'oxygène.



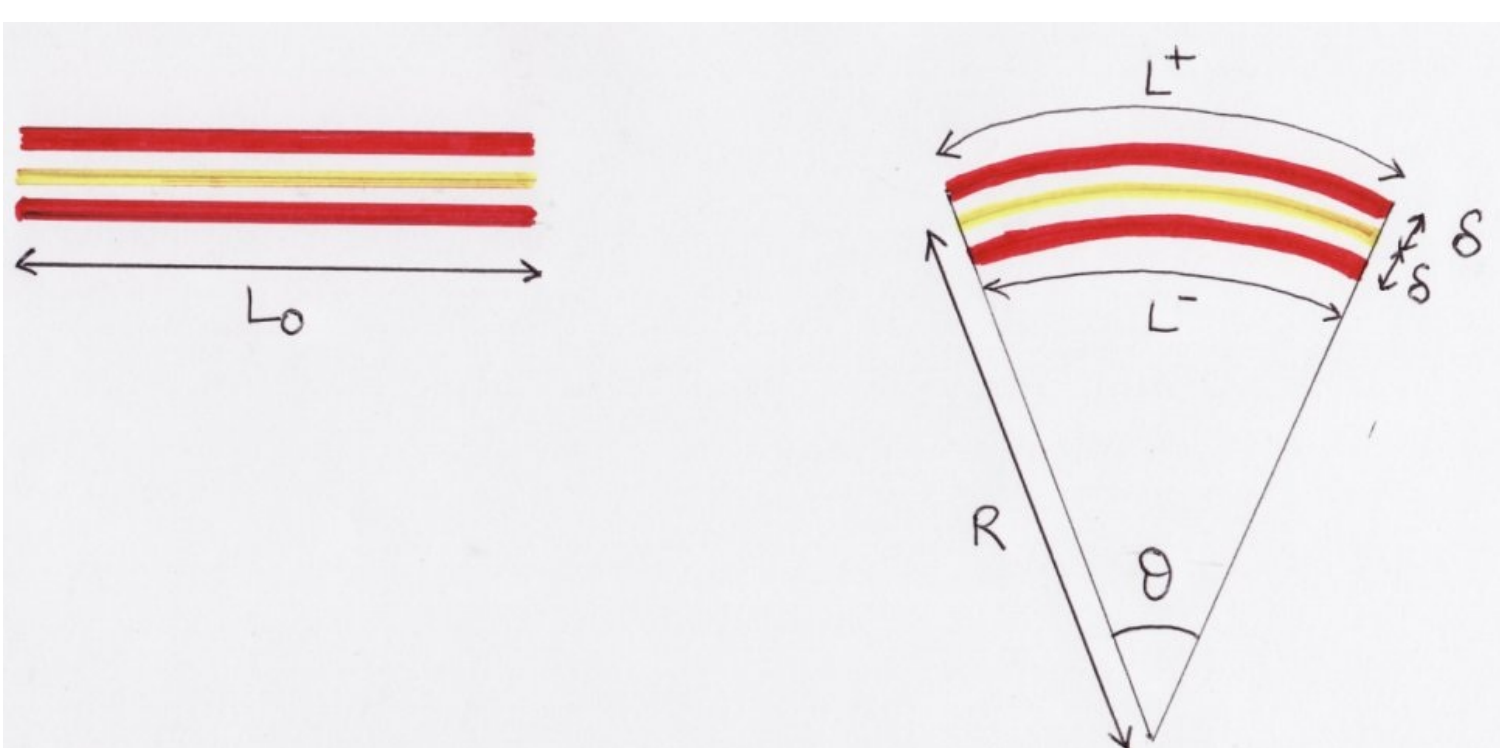
Cette thèse s'intéresse aux problèmes théoriques posés par la forme des vésicules : celle-ci est la solution d'un problème d'optimisation. Elle minimise une certaine énergie élastique sous diverses contraintes, la surface de la membrane et le volume de fluide qu'elle contient.



1 Le modèle physique

1.1 Présentation d'un modèle simplifié

On cherche à modéliser l'effet de la courbure sur l'énergie associée à une vésicule. La figure ci-dessous représente un morceau de membrane rectiligne et celui-ci une fois courbé, les segments rouges (resp. jaune) désignant la place disponible pour les têtes (queues) des molécules.



Si L_0 est assez petit, les segments deviennent trois arcs de cercle de même centre et angle θ . Sur la membrane courbée, il n'est alors plus possible de satisfaire tout le monde : les têtes disposent de la longueur $L^\pm = (R \pm \delta)\theta$ pour s'agencer tandis que les queues de $L_0 = R\theta$.

Si l'énergie mécanique $E^\pm$ de chaque couche varie comme celle d'un élastique, alors la force nécessaire pour allonger de $d^\pm$ un segment de longueur L_0 vaut $F^\pm = \frac{\kappa d^\pm}{L_0}$ où κ est une constante fixée. On a :

$$E^\pm = \frac{1}{2} F^\pm d^\pm = \frac{\kappa (d^\pm)^2}{2L_0} = \frac{\kappa (L^\pm - L_0)^2}{2L_0} = \frac{\kappa \delta^2 \theta}{2R} = \underbrace{\kappa \delta^2}_{=:k} \frac{L_0}{2R^2}.$$

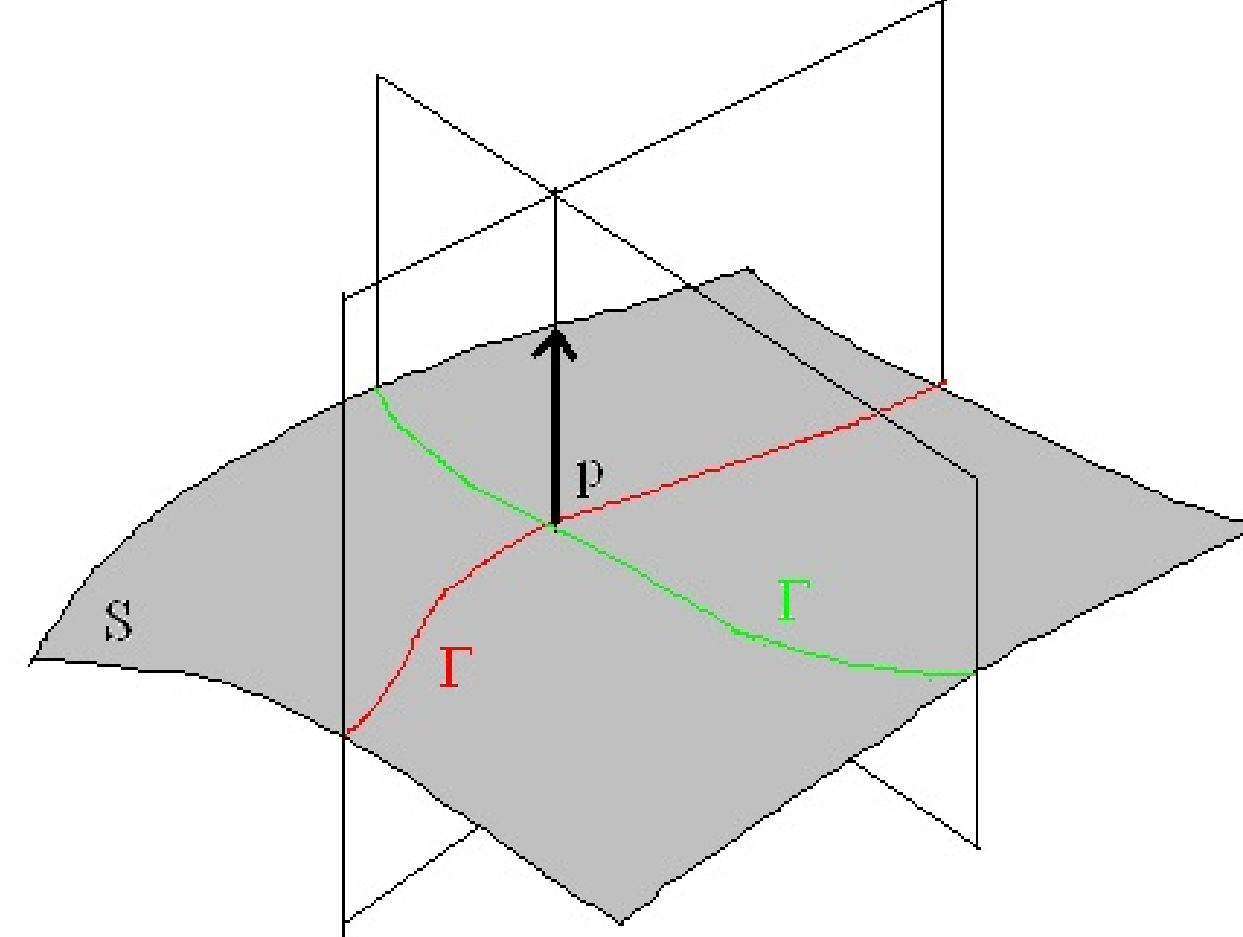
Ainsi, l'énergie d'une portion de membrane vaut $E^+ + E^- = \frac{kL_0}{R^2}$ et en sommant toutes les contributions de longueur infinitésimale L_0 , l'énergie totale de la vésicule s'exprime sous forme d'une intégrale :

$$\mathcal{E} = k \int_{\text{membrane}} \frac{L_0}{R^2}.$$

Le long de la courbe délimitant la vésicule, il s'agit donc d'intégrer l'inverse du carré du rayon de courbure R , ce dernier correspondant en chaque point au rayon du cercle qui approxime le mieux la courbe.

1.2 Le modèle de Helfrich

Le raisonnement précédent se généralise dans l'espace en remplaçant $\frac{1}{R}$ par la courbure moyenne $H = \frac{1}{2}(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2})$. Elle s'obtient à l'aide des rayons de courbure de deux courbes Γ , intersections de la surface S avec deux plans orthogonaux passant par le vecteur normal en P .



C'est Canham qui modélise ainsi les globules rouges en 1970 puis en 1973, Helfrich propose son modèle de vésicules. La surface ainsi que le volume de fluide qu'elle contient étant imposés, la forme prise par une vésicule minimise alors l'énergie élastique suivante :

$$\mathcal{E} = k_b \int_{\text{membrane}} (H - c_0)^2 dS + k_g \int_{\text{membrane}} K dS$$

où dS représente l'élément de surface infinitésimal, K la courbure gaussienne, c_0 une constante caractérisant l'asymétrie de la bicouche, k_b et k_g deux autres réels fixés. D'après le théorème de Gauss-Bonnet, le second terme est constant si la topologie (le genre g) est fixée :

$$\int K dS = 4\pi(1 - g).$$

2 Quand la boule est-elle optimale ?

2.1 Le cas sans contrainte : $\Omega \in \mathcal{A}$

Dans notre cas, la classe $\mathcal{A}$ des formes admissibles correspond à l'ensemble des ouverts Ω de l'espace $\mathbb{R}^3$ dont le bord $\partial\Omega$ est une surface régulière (de classe C^∞) ayant la même topologie que la sphère (sans bord, connexe, compacte, orientable et de genre nul).

Proposition	Inégalité ($c_0 > 0$)	Cas d'égalité
Alexandrov (1962)	$\int (H - c_0)^2 \geq 0$	boule de rayon $\frac{1}{c_0}$
Willmore (1982)	$\int H^2 \geq 4\pi$	n'importe quelle boule
Dalphin (2011)	$\int (H + c_0)^2 > 4\pi$	boule réduite à un point

2.2 Avec une contrainte d'aire : $|\partial\Omega| = A_0$

Si la boule d'aire A_0 minimise $\int H$, alors c'est également le cas pour l'énergie de Helfrich $\mathcal{E} = \int (H + c_0)^2$ avec $c_0 > 0$. On a aussi montré que la boule est l'unique point critique régulier de $\int H$ sous contrainte d'aire puis que c'est toujours un minimum local.

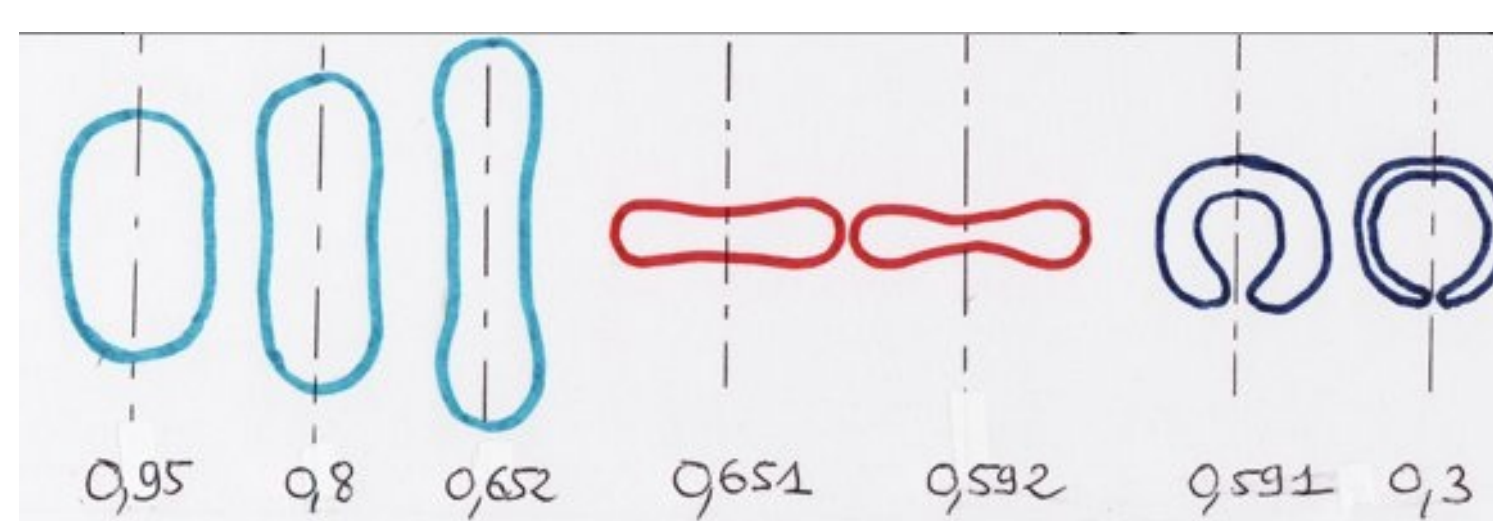
Proposition	Cas	Inégalité	Cas d'égalité
Minkowski	convexe	$\int H \geq \sqrt{4\pi A_0}$	boule d'aire A_0
Dalphin (2012)	axi. + conv.	$\int H \geq \sqrt{4\pi A_0}$	boule d'aire A_0
Conjecture	axisymétrique	$\int H > 0$	double-sphère
Dalphin (2012)	général	$\int H > -\infty$	boule trouée
Simon (1973)	général	$\int H \geq \sqrt{\frac{\pi A_0}{2}}$	non optimal
Conjecture	général	$\int H \geq \sqrt{4\pi A_0}$	boule d'aire A_0
Dalphin (2013)	axisymétrique	$\int H \geq \sqrt{4\pi A_0}$	boule d'aire A_0

Ensuite, on a effectué une étude approfondie sur l'optimalité de la boule pour l'énergie $\int (H - c_0)^2$ sous contrainte d'aire et le tableau suivant résume les différents résultats obtenus.

Paramètre $c_0 \sqrt{\frac{A_0}{4\pi}}$	$-\frac{1}{2}$	0	1	1,46	6
Minimum global	non	?	oui	?	non
Minimum local	oui	oui	oui	?	?
Point critique	oui	oui	oui	oui	oui

2.3 Avec une contrainte de volume : $|\Omega| = V_0$

Le minimum de $\int H^2$ est atteint pour la boule de volume V_0 qui minimise aussi $\int (H + c_0)^2$ avec $c_0 > 0$ parmi les convexes ou les ouverts axisymétriques et convexes en direction de l'axe ($z \nearrow$).



3 Sous contrainte d'aire et de volume

3.1 Stratégie pour démontrer l'existence

Si $A_0^3 > 36\pi V_0^2$, alors la boule ne peut plus satisfaire les contraintes. On veut donc ici montrer qu'il existe une forme admissible $\Omega^* \in \mathcal{A}$ qui vérifie les contraintes $\Omega^* \in \mathcal{C} = \{\Omega \in \mathcal{A}, |\partial\Omega| = A_0 \text{ et } |\Omega| = V_0\}$ et qui soit optimale pour l'énergie de Helfrich $\mathcal{E} = \int (H - c_0)^2$ soit :

$$\mathcal{E}(\Omega^*) = \inf_{\Omega \in \mathcal{A} \cap \mathcal{C}} \mathcal{E}(\Omega).$$

Il existe toujours une suite (Ω_i) d'éléments de $\mathcal{A} \cap \mathcal{C}$ telle que $\mathcal{E}(\Omega_i)$ converge vers $\inf_{\Omega \in \mathcal{A} \cap \mathcal{C}} \mathcal{E}(\Omega)$. Il faut alors munir $\mathcal{A}$ d'une topologie :

- qui ait beaucoup de compacts i.e. peu d'ouverts, ce qui permettra d'extraire une sous-suite $(\Omega_{\psi(i)})$ convergeant vers un certain Ω^* ;
- qui possède beaucoup d'ouverts, ce qui assurera à la suite $\mathcal{E}(\Omega_{\psi(i)})$ de bien converger vers $\mathcal{E}(\Omega^*)$. Il y a donc un compromis à trouver.

Il ne reste plus qu'à vérifier que $\Omega^* \in \mathcal{A} \cap \mathcal{C}$, ce qui est très difficile en pratique car le candidat Ω^* n'a souvent pas la régularité escomptée.

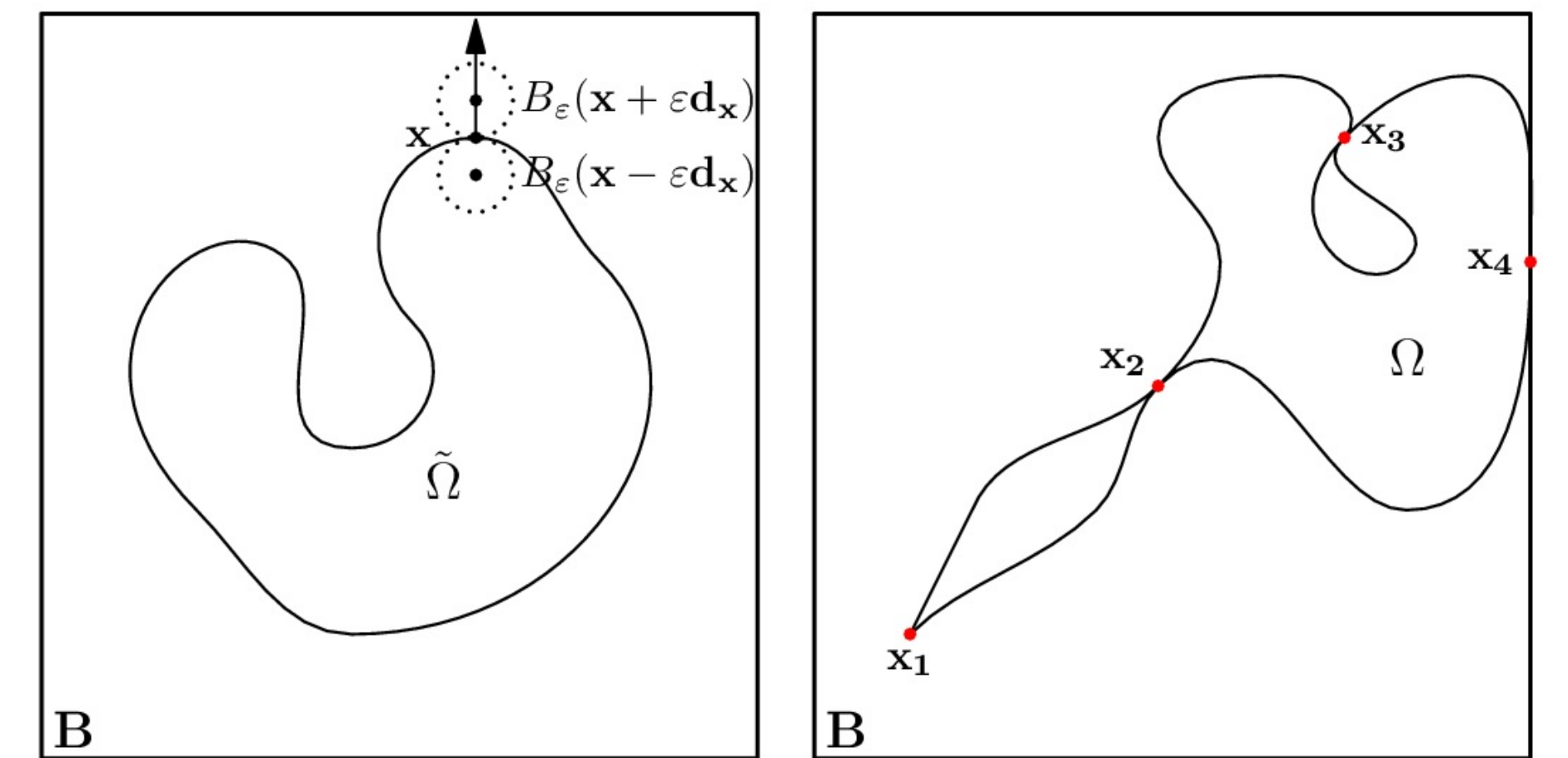
3.2 Ouverts vérifiant la condition d' ε -boule

Dans cette thèse, une classe plus raisonnable a été introduite pour assurer l'existence d'un minimum. Son choix peut aussi être justifié physiquement par le fait qu'un globule rouge est une vésicule dotée d'un squelette, ce qui interdit à cette dernière de trop se courber.

Soient un réel $\varepsilon > 0$ et un ouvert $B \in \mathcal{A}$. On écrit $\Omega \in \mathcal{O}_{B,\varepsilon}$ et on dit qu'il vérifie la condition d' ε -boule s'il est inclus dans B et si :

$$\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \exists \mathbf{d}_{\mathbf{x}} \in \mathbb{S}^2, \begin{cases} B_\varepsilon(\mathbf{x} - \varepsilon \mathbf{d}_{\mathbf{x}}) \subseteq \Omega \\ B_\varepsilon(\mathbf{x} + \varepsilon \mathbf{d}_{\mathbf{x}}) \subseteq B \setminus \bar{\Omega}. \end{cases}$$

Sur la figure ci-dessous est représenté à gauche un ouvert $\tilde{\Omega}$ vérifiant la condition d' ε -boule tandis qu'à droite, l'ouvert Ω ne la satisfait pas.



3.3 Caractérisations de la classe $\mathcal{O}_{B,\varepsilon}$

Soit $\mathcal{S}$ une hypersurface topologique de $\mathbb{R}^n$ sans bord et compacte, donc incluse dans un ouvert $B \in \mathcal{A}$. Grâce au théorème de séparation de Jordan-Brouwer, on montre qu'il existe toujours un ouvert $\Omega \subseteq B$ tel que $\partial\Omega = \mathcal{S}$. En 2013, on a établi les équivalences suivantes :

$$\begin{aligned} &\Omega \text{ vérifie la condition d}'\varepsilon\text{-boule pour un certain réel } \varepsilon > 0 ; \\ &\Updownarrow \\ &\partial\Omega \text{ est de reach positif } R(\varepsilon) > 0 \text{ au sens de Federer (1959) ;} \\ &\Updownarrow \\ &\partial\Omega \text{ est une hypersurface de } \mathbb{R}^n \text{ plus régulière, de classe } C^{1,1}. \end{aligned}$$

Concernant la régularité $C^{1,1}$, cela signifie plus précisément que :

- $\partial\Omega$ satisfait la propriété du $\alpha(\varepsilon)$ -cône au sens de Chenais (1975) ;
- $\mathbf{d}_{\mathbf{x}}$ n'est autre que la normale extérieure à $\partial\Omega$ en chaque point $\mathbf{x}$;
- l'application de Gauss $\mathbf{d} : \mathbf{x} \in \partial\Omega \mapsto \mathbf{d}_{\mathbf{x}}$ est $L(\varepsilon)$ -lipschitzienne.

3.4 Existence à aire et volume fixés

En 1998, Rivière étudie les points critiques de $\int H^2$ en développant le point de vue des déformations de la sphère (immersions). Il établit des théorèmes de régularité-compactité dans une classe très générale d'objets et classe les pathologies qui peuvent survenir pour $\int H^2$.

Proposition	Classe	Energie considérée
Belletini et al. (1993)	le cas 2-D	$\int \frac{1}{R^p}$ avec $p > 1$
Choksi et al. (2012)	axisymétrique	$k_b \int (H - c_0)^2 + k_g \int K$
Simon (1993)	genre $g \geq 1$	$\int H^2$
Schygulla (2011)	$\mathcal{A}$	$\int H^2$
Dalphin (2013)	$\mathcal{O}_{B,\varepsilon}$	$\int (H - c_0)^2$

4 Conclusion et perspectives

La classe $\mathcal{O}_{B,\varepsilon}$ permet de garantir l'existence d'un minimum pour des fonctionnelles de forme et des contraintes très générales, faisant intervenir les propriétés géométriques d'ordre deux des surfaces.

Cependant, l'existence d'un minimum pour l'énergie de Helfrich reste un problème ouvert dans le cas général. L'aspect numérique va aussi être développé afin de simuler des globules rouges dans le sang.