HAL
open science

Modélisation numérique de la dynamique des globules rouges par la méthode des fonctions de niveau

Aymen Laadhari

To cite this version:

Aymen Laadhari. Modélisation numérique de la dynamique des globules rouges par la méthode des fonctions de niveau. Mathématiques générales [math.GM]. Université de Grenoble, 2011. Français. NNT : 2011GRENM011 . tel-00598251v2

HAL Id: tel-00598251

https://theses.hal.science/tel-00598251v2

Submitted on 10 Apr 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Mathématiques Appliquées**

Arrêté ministériel : 07 août 2006

Présentée par

Aymen LAADHARI

Thèse dirigée par **Pierre** SARAMITO
et codirigée par **Chaouqi** MISBAH

préparée au ***Laboratoire Jean Kuntzmann*** **et au** ***Laboratoire Interdisciplinaire de Physique***
dans le cadre de l'**École Doctorale Mathématiques, Sciences et Technologies de l'Information, Informatique**

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE LA DYNAMIQUE DES GLOBULES ROUGES PAR LA MÉTHODE DES FONCTIONS DE NIVEAU

Thèse soutenue publiquement le **06 avril 2011**,
devant le jury composé de :

M. Jacques PROST
Directeur de recherche Classe Exceptionnelle CNRS et membre de l'Académie des Sciences, Paris, Président
M. Bertrand MAURY
Professeur à l'École Polytechnique, Paris, Rapporteur
M. Marco PICASSO
Professeur Titulaire à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne, La Suisse, Rapporteur
M. Christophe PRUDHOMME
Professeur de l'Université Joseph Fourier, Grenoble, Examinateur
M. Pierre SARAMITO
Directeur de recherche CNRS, Grenoble, Directeur de thèse
M. Chaouqi MISBAH
Directeur de recherche CNRS, Grenoble, Co-Directeur de thèse

Abstract

This work, at the interface between the Applied Mathematics and Physics is connected about the numerical modelisation of biological vesicles, a pattern for the red blood cells. For this reason, the pattern of Canham and Helfrich is adopted to describe the behaviour of the vesicles. The numerical modelisation uses the Level Set method in finite element framework.

A new algorithm of numerical resolution combining one technique of Lagrange multipliers with an automatic mesh adaptation ensures the accurate conservation of volumes and surfaces. Thus this algorithm enables to exceed an existing crucial restriction of the Level Set method, that's to say, the wastes of mass usually noticed in this kind of problems. Moreover, the proprieties of convergence of the Level Set method are thus much more improved, as shown in many numerical tests. Those tests chiefly include elementary problems of advection, motions by mean curvature just as motions by spread of surface.

Concerning the static equilibrum of the vesicles, a mechanical equilibrum equation (Euler-Lagrange equation) of a vesicle membrane under a generalized elastic bending energy is obtained and the approach is based on shape optimization tools. In dynamics, the motion of a vesicle under the effect of a shear flow is elaborated with high Reynolds numbers. The effect of confinement is respected, and the standard regimes of tank-treading and of tumbling motion are found again. Finally, for the first time, the effect of the inertia terms is elaborated and we show that beyond a critical value of Reynolds number the vesicle passes from a tumbling motion to a tank-treading motion.

Résumé

Ce travail, à l'interface entre les mathématiques appliquées et la physique, s'articule autour de la modélisation numérique des vésicules biologiques, un modèle pour les globules rouges du sang. Pour cela, le modèle de Canham et Helfrich est adopté pour décrire le comportement des vésicules. La modélisation numérique utilise la méthode des *fonctions de niveau* dans un cadre éléments finis.

Un nouvel algorithme de résolution numérique combinant une technique de multiplicateurs de Lagrange avec une adaptation automatique de maillages garantit la conservation exacte des volumes et des surfaces. Cet algorithme permet donc de dépasser une limitation cruciale actuelle de la méthode des *fonctions de niveau*, à savoir les pertes de masse couramment observées dans ce type de problèmes. De plus, les propriétés de convergence de la méthode des *fonctions de niveau* se trouvent ainsi grandement améliorées, comme l'indiquent de nombreux tests numériques. Ces tests comprennent notamment des problèmes d'advection élémentaires, des mouvements par courbure moyenne ainsi que des mouvements par diffusion de surface.

Concernant l'équilibre statique des vésicules, une condition générale d'équilibre d'Euler-Lagrange est obtenue à l'aide d'outils de dérivation de forme. En dynamique, le mouvement d'une vésicule sous l'action d'un écoulement de cisaillement est étudié dans le cadre des nombres de Reynolds élevés. L'effet du confinement est considéré, et les régimes classiques de chenille de char et de basculement sont retrouvés. Finalement, pour la première fois, l'effet des termes inertiels est étudié et on montre qu'au delà d'une valeur critique du nombre de Reynolds, la vésicule passe d'un mouvement de basculement à un mouvement de chenille de char.

Table des notations

Λ	domaine de l'écoulement ,
Γ	membrane de la vésicule ,
Ω	domaine intérieur de la vésicule ,
$\kappa_{1,2}$	courbures principales sur une surface ,
H	courbure moyenne ,
K	courbure de Gauss ,
$\mathbf{n}$	normale à la surface ,
γ	volume réduit de la vésicule ,
δ	excès de la surface de la vésicule ,
V	volume du domaine intérieur de la vésicule (aire en 2d) ,
A	surface de la vésicule (périmètre en 2d) ,
$\mathcal{J}$	fonctionnelle d'énergie à minimiser ,
$\mathcal{L}$	lagrangien ,
$\mathbf{u}$	vitesse de l'écoulement ,
p	pression : multiplicateur de Lagrange associé à l'incompressiblilité ,
λ	tension de surface : multiplicateur de Lagrange associé à l'inextensibilité ,
R_0, U	respectivement longueur et vitesse caractéristiques ,
Ca	nombre de capillarité ,
Re	nombre de Reynolds ,
Υ	rapport de viscosité dans un écoulement ,
ϖ	confinement de la vésicule ,
k_c	module de rigidité ,
k_g	module de courbure de Gauss ,
φ	fonction de niveau ,
ε	épaisseur de l'interface de régularisation ,
$\mathbb{H}_\varepsilon$	la fonction Heaviside régularisée ,
δ_ε	la mesure de Dirac régularisée ,
sgn_ε	la fonction signe régularisée ,
$\mathcal{T}_h$	triangulation ,
Δt	pas de temps ,
$\Delta\tau$	pseudo pas de temps ,
n	itération en temps .

Table des matières

Introduction **xi**

0.1 Motivation . . . xi

0.1.1 Généralités sur le sang . . . xi

0.1.2 Description mécanique des vésicules . . . xii

0.1.3 Énergie de courbure et mathématisation du problème : un bref état de l'art xii

0.2 Outils numériques pour les applications biologiques . . . xiv

0.2.1 Les méthodes lagrangiennes . . . xv

0.2.2 Les méthodes eulériennes . . . xvi

0.2.3 Pourquoi la méthode des fonctions de niveau ? . . . xviii

0.3 Contribution de cette thèse . . . xix

0.4 Plan de la thèse . . . xx

I Applications aux mouvements d'interfaces **1**

1 Méthode des fonctions de niveau **3**

1.1 Méthode des *lignes de niveau* . . . 4

1.1.1 Formalisme mathématique . . . 4

1.1.2 Régularisation . . . 6

1.1.3 Pertes de masse . . . 6

1.2 Corrections de masse . . . 7

1.3 Adaptation de maillage . . . 15

1.3.1 Principe d'adaptation de maillage . . . 15

1.3.2 Choix du critère d'adaptation . . . 16

1.4 Test de Zalesak . . . 16

1.4.1 Choix du pas de temps . . . 17

1.4.2 Évolution du maillage . . . 17

1.4.3 Évolution de l'erreur 18
1.5 Test de Leveque 21
1.5.1 Évolution du maillage 21
1.5.2 Évolution de l'erreur 22

2 Minimisation de l'énergie de courbure de Helfrich 25
2.1 Introduction 26
2.2 Position du problème 26
2.3 Formulation variationnelle 27
2.4 La discrétisation du problème 33
2.4.1 Discrétisation en temps par différences finies 34
2.4.2 Discrétisation en espace par éléments finis 34
2.5 Calcul du résidu 37
2.6 Simulations numériques 38
2.6.1 Évolution d'un cercle 38
2.6.2 Évolution d'un ellipsoide en axisymétrie 40
2.6.3 Évolution d'un tube en axisymétrie 40

3 Mouvements par courbure moyenne 43
3.1 Position du problème 44
3.2 Méthode explicite 45
3.2.1 Évaluation de la courbure moyenne 45
3.2.2 Simulation numérique 46
3.2.3 Simulations des mouvements par courbure moyenne sous contrainte de volume constant 47
3.3 Méthode semi implicite 49

4 Mouvement par diffusion de surface 53
4.1 Position du problème 54
4.2 Simulations numériques 56
4.2.1 Évolution d'une étoile 56
4.2.2 Mouvement oscillatoire 58
4.2.3 Instabilités de Rayleigh-Plateau d'un cylindre ondulé 59
4.2.4 Cas tridimensionnel 59
4.2.5 Cas bidimensionnel 60
4.2.6 Instabilités de Rayleigh-Plateau d'un cylindre attaché à une sphère 60

II Applications aux vésicules **63**

5 Équilibre des membranes biologiques **65**

5.1 Position du problème 66

5.2 Équation d'Euler-Lagrange 67

5.2.1 Outils de dérivation de forme 67

5.2.2 Résumé de l'article 67

5.3 Facteurs de dépendance de la forme 75

5.3.1 Cas tridimensionnel 75

5.3.2 Cas bidimensionnel 76

5.4 Conclusion 77

6 Configurations d'équilibre par résolution d'EDO **79**

6.1 Formulation du problème 80

6.2 Équilibre statique des membranes en dimension deux 82

6.2.1 Formulation du problème 83

6.2.2 Reformulation de l'équation différentielle 85

6.2.3 Autres approches pour résoudre le problème 87

6.2.4 Simulations numériques dans le cas bidimensionnel 90

6.3 Équilibre statique des vésicules axisymetriques 90

6.3.1 Formulation du problème 90

6.3.2 Sens physique des solutions 94

6.3.3 Simulations numériques 95

6.3.4 Profils tri-dimensionnels 97

6.4 Formes multiconcaves et diagramme de formes 101

7 Configurations d'équilibre par éléments finis **109**

7.1 Introduction et contexte 110

7.2 Formulation forte du problème 111

7.3 Formulation faible du problème 112

7.4 Discrétisation en temps 114

7.5 Algorithme de résolution 115

7.5.1 Algorithme : Uzawa à pas de descente fixe 115

7.5.2 Algorithme : Uzawa avec contrôle *a posteriori* du pas 116

7.5.3 Algorithme : Uzawa à pas optimaux 117

7.5.4 Calcul des pas optimaux 118

7.5.5 Discrétisation en espace 121
7.6 Conservation de l'aire 122
7.6.1 Position du problème 122
7.6.2 Calcul du pas optimal 125
7.6.3 Simulation numérique 125
7.6.4 Contrôle *a posteriori* du pas 125
7.6.5 Algorithme : Uzawa avec Contrôle *a posteriori* du pas 126
7.6.6 Validation numérique 127
7.7 Conservation du périmètre 127
7.7.1 Position du problème 127
7.7.2 Calcul du pas optimal 129
7.7.3 Simulation numérique 130
7.7.4 Contrôle *a posteriori* du pas 130
7.7.5 Algorithme : Uzawa avec Contrôle *a posteriori* du pas 131
7.7.6 Validation numérique 132
7.8 Conservation de l'aire et du périmètre 133
7.8.1 Contrôle *a posteriori* des pas 133
7.8.2 Test de validation numérique 135
7.8.3 Vésicule avec $\gamma = 0.75$ 136
7.8.4 Vésicule avec $\gamma = 0.85$ 139
7.8.5 Vésicule avec $\gamma = 0.65$ 141
7.8.6 Vésicule avec $\gamma = 0.6$ 141
7.8.7 Vésicule avec $\gamma = 0.55$ 144
7.8.8 Vésicule avec $\gamma = 0.49$ 144
7.9 Utilisation du lagrangien augmenté 147
7.9.1 Rappel de la méthode 147
7.9.2 Calcul des multipliateurs de Lagrange optimaux 149
7.9.3 Contrôle *a posteriori* des multiplicateurs de Lagrange 149
7.9.4 Algorithme avec le lagrangien augmenté 150
7.9.5 Validations numériques de l'algorithme du lagrangien augmenté 151

8 Dynamique des vésicules sous cisaillement 155
8.1 Dérivation du modèle 157
8.1.1 Inextensibilité de la membrane 157
8.1.2 Position du problème 158

8.1.3 Système complet d'équations en formulation *fonctions de niveau* 161
8.1.4 Problème sans dimension 161
8.2 Approximation en temps 163
8.3 Formulation faible 164
8.4 Approximation en espace 164
8.5 Problème d'advection 165
8.5.1 Non préservation des contraintes 165
8.5.2 Corrections des pertes 165
8.5.3 Validation numérique 167
8.6 Simulations numériques 168
8.6.1 Adaptation de maillage 168
8.6.2 Vésicule en mode de basculement 168
8.6.3 Vésicule en mode de chenille de char 174
8.6.4 Effet du nombre de Reynolds sur la dynamique du cisaillement 177

9 Conclusion et perspectives 181
9.1 Conclusion 182
9.2 Perspectives 183

A Équilibre statique des membranes en 3D axisymetrique 185

B Quelques rappels utiles 189
B.1 Formulaire 189
B.2 Formule de Green pour les opérateurs surfaciques 189

Introduction

0.1 Motivation

0.1.1 Généralités sur le sang

L'étude de l'écoulement du *sang* est au centre des préoccupations d'un grand nombre de mathématiciens, physiciens, biologistes ou industriels. En effet, l'engouement certain d'une large communauté scientifique pour le comportement sanguin tient dans une large mesure à une grande richesse de comportements dynamiques, même aux bas nombres de Reynolds.
Notre sang est composé de trois types de cellules sanguines : les globules blancs qui assurent la défense immunitaire, les plaquettes qui participent à la coagulation et *les globules rouges*, ou hématies, qui acheminent les gaz respiratoires entre les poumons et le plus enfoui des tissus. Parmi les cellules sanguines adultes, les globules rouges sont de loin les plus nombreux (environ 5 millions par mm^3 de sang et environ 43% du volume du sang chez l'homme). Par conséquent, l'étude de ces cellules est essentielle à la compréhension du comportement rhéologique du sang : voir la figure 1.

Pour remplir au mieux leur fonction, les globules rouges passent dans de très fins capillaires sanguins dont le diamètre est inférieur au leur et ils doivent donc être très déformables. Observé au microscope, un globule rouge révèle sa forme : un disque biconcave (disque où la zone centrale est plus fine que la périphérie) de 7.5 micromètres de diamètre et de 2 micromètres d'épaisseur. Chez les mammifères, le globule rouge est dépourvu de noyau, un élément qui réduirait sa

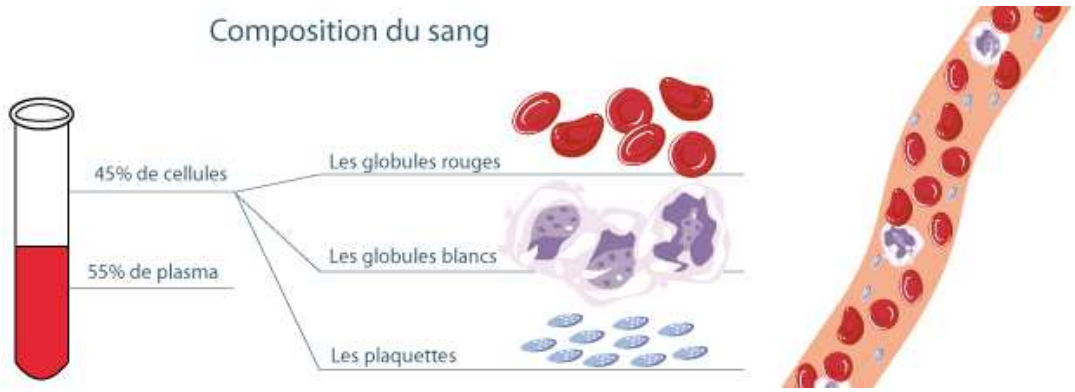

Fig. 1 – Illustration schématique de la composition du sang : image extraite de `www.donnersonsang.com`.

déformabilité : il est uniquement rempli d'une solution d'hémoglobine, la protéine qui s'associe à l'oxygène et au dioxyde de carbone lors du transport de ces gaz. Malgré son processus laborieux de fabrication et sa structure extrèmement complexe, la forme biconcave caractéristique des globules rouges peut s'expliquer uniquement par les propriétés de sa membrane.

0.1.2 Description mécanique des vésicules

Les *vésicules* constituent un système modèle pour les membranes biologiques des cellules réelles, et plus particulièrement les globules rouges. Pour cette raison, une suspension de vésicules peut être vue comme une représentation simplifiée pour l'étude de la rhéologie du sang.

Les vésicules sont des cellules fermées composées d'une bicouche phospholipidique. Les cellules sont entourées d'une paroi, la membrane cellulaire, qui évite la dispersion de l'intérieur de la cellule dans le milieu environnant. Une membrane similaire forme la paroi des compartiments internes de la cellule, permettant ainsi une organisation complexe. La membrane cellulaire est principalement formée de lipides, qui lui donnent ses propriétés mécaniques. C'est un milieu complexe et actif : la membrane peut être déformée par l'action des protéines et elle est constamment renouvelée par le transport de lipides dans la cellule.

Lorsqu'elle est plongée dans l'eau, cette bicouche, formée de phospholipides ayant une tête *hydrophile* et une queue *hydrophobe*, se referme sur elle même pour former une vésicule. Cette organisation spontanée est dûe au caractère amphiphile et à la forme cylindrique des lipides : voir la figure 2. Par ailleurs, les vésicules peuvent donc adopter de nombreuses formes : depuis celle d'une sphère à celle d'un tore en passant par une étoile, etc : voir la figure 3.

Nous verrons dans quelle mesure le taux de remplissage et la minimisation de l'énergie de courbure de la membrane cellulaire permettent de prédire ces formes à partir de modèles mathématiques.

0.1.3 Énergie de courbure et mathématisation du problème : un bref état de l'art

La plus grande motivation de cette thèse est d'arriver à la modélisation et l'analyse numérique des vésicules sous écoulement. Néanmoins, il est essentiel d'abord de commencer par rappeler l'essentiel de la description d'une vésicule à l'équilibre globale (formes d'équlibre). En outre, la force membranaire, qui dérive de l'énergie de la membrane, sera utile pour décrire la dynamique sous écoulement.

Les configurations d'équilibres des globules rouges minimisent l'énergie de courbure. La première proposition, purement géomérique, pour l'énergie de courbure est formulée par Canham [13] puis Helfrich [96]. En effet, les configurations d'équilibres des globules rouges et des membranes biologiques de manière générale sont fortement liées à la formation des bicouches phospholipidiques dans un milieu aquatique. En se basant sur ce volet, Canham [13] a proposé ce modèle en considérant que trois déformations élémentaires permettent de décrire la mécanique de la membrane : l'étirement, le cisaillement et la courbure.
Helfrich [96, 25, 26, 63] a proposé un modèle plus riche d'énergie de courbure qui introduit une courbure spontannée H_0 pour la membrane, représentant en quelque sorte une possible dissymetrie des deux feuillets de la bicouche, de sorte qu'une membrane ouverte aurait comme courbure naturelle H_0 et non 0. Par ailleurs, les configurations d'équilibre sont régis par une équation,

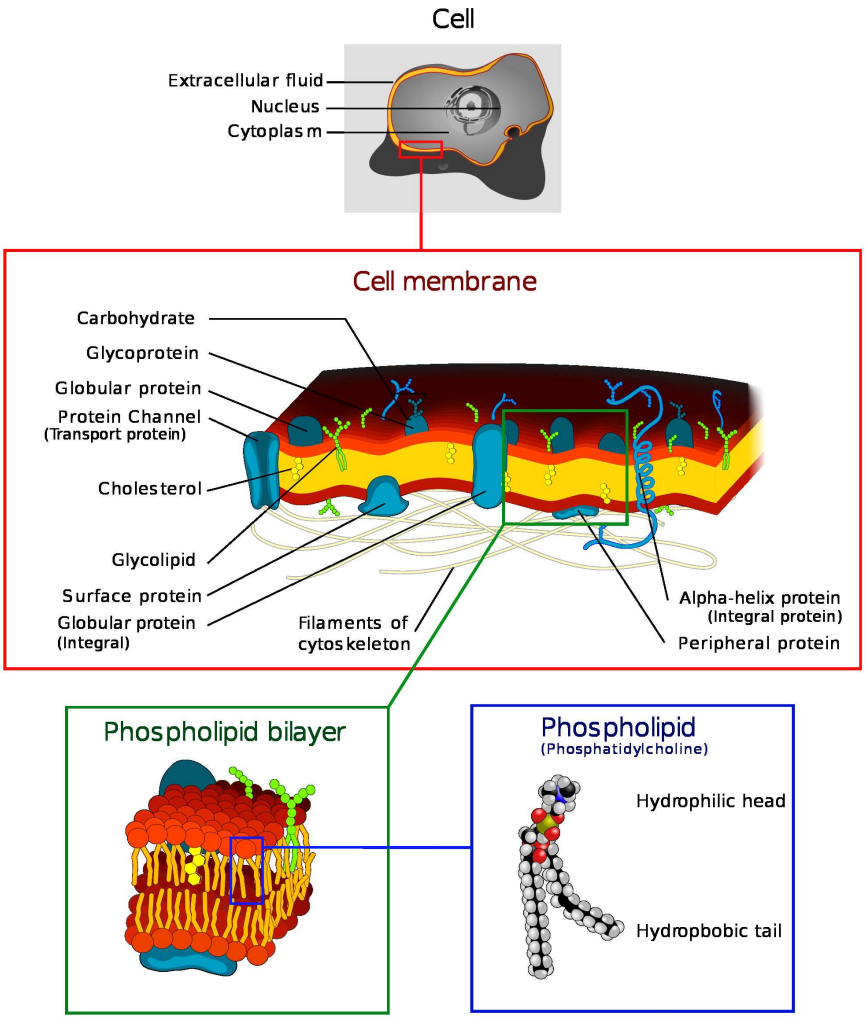

FIG. 2 – Illustration schématique de la membrane cellulaire : image extraite de `http ://en.wikipedia.org/wiki/Cell_membrane`.

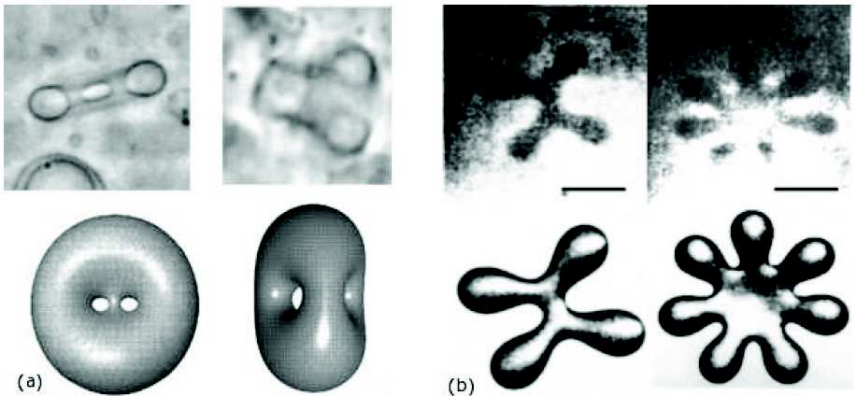

FIG. 3 – Différentes formes de vésicules. (a) Vésicules de genre topologique non sphérique ainsi que les formes numériques associées. Image extraite de `www.chem.ucla.edu/m̃ichalet/papers`. (b) Vésicules en *étoiles de mer* : la barre représente $5\mu m$ et formes extraite de [97] (figures du bas).

dite d'Euler-Lagrange, démontrée par Helfrich [100].
Le modèle proposé par Canham et Helfrich suppose que la membrane est formée tout simplement d'une seule couche. Cependant, ce modèle permet d'expliquer l'essentiel des propriétés physiques des vésicules. Toutefois, il existe d'autres modèles plus complexes élaborés pour mieux prendre en compte la structure en double couche de la membrane lipidique tels les travaux de Seifert [86]. En effet, les deux feuillets de la membrane n'ont pas forcément le même nombre de lipides, ce qui impose une différence d'aires à l'équilibre et force la membrane à se courber, avec le feuillet le plus large à l'extérieur (voir la figure 2). Ceci peut être décrit par un couplage entre la densité de lipides dans un feuillet et la courbure de la bicouche. L'énergie adaptée est plus complexe et elle est présentée dans [70].

Pour résumer le modèle de Canham et Helfrich qu'on adoptera dans cette thèse, une vésicule à l'équilibre a une forme qui minimise son énergie de courbure, en respectant des contraintes de surface constante (la membrane est un fluide bidimensionnel incompressible) et de volume interne constant (le fluide enclos par la membrane est incompressible).

Pour une surface fermée Γ représentant la membrane, cette énergie tient compte de certaines quantités géométriques et paramètres physiques. Les quantités géométriques sont le volume $V(\Gamma)$ enfermé par Γ, la surface $A(\Gamma)$ et les invariants du tenseur de courbure de la surface Γ : la coubure moyenne H et la courbure de Gauss K. Helfrich a introduit la fonctionnelle d'énergie suivante :

$$\mathscr{J}(\Omega) = \frac{k_c}{2}\int_\Gamma (H - H_0)^2 \,\mathrm{d}s + \frac{k_g}{2}\int_\Gamma K \,\mathrm{d}s,$$

où Ω est le domaine intérieur de la vésicule et $\Gamma = \partial\Omega$. La convention prise pour la courbure moyenne est $H = \kappa_1 + \kappa_2$, avec κ_1 et κ_2 les courbures pricipales. Quant à la courbure de Gauss, elle est donnée par $K = \kappa_1\kappa_2$. Les intégrales sont élaborées sur la surface de la membrane où $\mathrm{d}s$ représente un élément de surface et $\mathrm{d}x$ représente un élément de volume. Les constantes k_c et k_g ont la dimension d'une énergie et elle représentent respectivement le module de rigidité et le module de courbure de Gauss.

La contribution de la courbure de Gauss est un invariant topologique pour une vésicule homogène fermée, selon le théorème de Gauss-Bonnet :

$$k_g \int_\Gamma K \,\mathrm{d}s \;=\; 4\pi k_g(1-g)\,,$$

où g est le genre topologique de la vésicule qui peut être compris simplement comme le nombre de trous dans la vésicule. À titre d'exemple, $g = 0$ pour une sphère et $g = 1$ pour un tore. Le terme dépendant de la courbure de Gauss sera ignoré dans la suite en faisant l'hypothèse d'un genre topologique constant.
Les configurations d'équilibre des vésicules seront déterminées par la minimisation de l'énergie de courbure $\mathscr{J}(\Omega)$ sous contraintes : volume conservé (fluide incompressible à l'intérieur de la vésicule) et surface conservée (membrane inextensible).

0.2 Outils numériques pour les applications biologiques

Dans les applications biologiques qui nous intéressent, une interface, représentant la membrane, sépare deux compartiments formant le milieu intracellulaire et le milieu dans lequel baigne la cellule. Dans ce cas, il faut trouver des méthodes efficaces qui permettent de représenter l'interface qui va évoluer au cours du temps.

Pour les applications biologiques notamment concernant les écoulements sanguins, il existe deux classes de méthodes numériques couramment utilisées : les méthodes modélisant l'interface avec une paramétrisation explicite sont les méthodes lagrangiennes et celles modélisant l'interface avec une fonction implicite sont les méthodes eulériennes.
Il existe une autre catégorie, l'approche `ALE` où on fait la distinction entre un milieu solide et un milieu fluide : le domaine de la structure est considéré comme un milieu solide et on fait appel à une représentation lagrangienne. Quant au milieu extérieur, il représente le fluide et il est traité de manière eulérienne. On note qu'on inclut les méthodes ALE dans la classe des méthodes lagrangiennes dans la mesure où ils présentent en commun des maillages s'appuyant sur les vésicules.

On développe dans cette section quelques propriétés générales de ces méthodes en citant les avantages et inconvénients de chacune d'elles d'un point de vue numérique. Finalement, on opte pour une représentation implicite par la méthode des lignes de niveau pour modéliser les vésicules biologiques, cette méthode sera développée plus en détail dans la suite de cette thèse d'un point de vue théorique et numérique.

0.2.1 Les méthodes lagrangiennes

Pour des méthodes lagrangiennes, l'interface qui représente la membrane biologique est discrétisée par un ensemble de points à chaque instant t qui vont être déplacés à chaque pas de temps avec une vitesse dépendant du problème étudié. Dans les méthodes lagrangiennes, un volume discrétisé contient toujours les mêmes particules fuides, si bien qu'elles utilisent souvent des maillages mobiles non structurés dont les éléments épousent la forme de l'interface. En conséquence, elles peuvent intégrer très précisément les conditions aux limites au niveau de la frontière entre les deux milieux.

Dans un maillage de discrétisation régulier, le nombre de points servant à représenter l'interface reste le même au cours du temps. Lorsque l'interface subit de grandes déformations, il peut donc y avoir une perte d'information car les points de discrétisation se dispersent et se concentrent dans certaines régions. Les paramètres géométriques décrivant la géométrie de la courbe tels que la courbure moyenne, la courbure de Gauss et la normale subissent une perte de précision selon que les points de discrétisation sont de plus en plus éloignés. Ainsi, on a besoin d'un nombre important de points de discrétisation dans la configuration initiale pour assurer une certaine précision lors du calcul de certaines fonctions. Ceci fait appel à l'adaptation de maillage sur la géométrie de l'interface. Dans le cas bidimensionnel, ceci est réalisable et on a des mailleurs qui peuvent faire ce travail et les algorithmes de remaillage sont efficaces. On cite à titre d'exemple les mailleurs `Bamg` [42], `Gmsh` [35], `Grummp` [74], `Qmg` [93].

Dans l'étude de fluides séparés par une interface, on peut avoir des changements topologiques. Afin de gérer ces changements de topologie, on a aussi besoin de suprimer ou d'ajouter un certain nombre de points sur la membrane.
Concernant les surfaces tridimensionnelles, la situation est plus complexe. En fait, la surface est discrétisée par un ensemble de points et représentée à l'aide d'une triangulation. Ajouter ou enlever des points de discrétisation lors de grandes déformations devient alors complexe, sans parler des changements de topologie où la construction complète de la surface peut être laborieuse.
De plus, la plus grande contrainte dans les cas tridimensionnels est sans doute le coût des calculs numériques, ceci impose des contraintes supplémentaires sur l'adaptation de maillage sur

la géométrie de la membrane. Ceci s'ajoute aux problèmes d'efficacité des mailleurs en 3d.

On citera quelques exemples de méthodes lagrangiennes tel que celle de suivi volumétrique développée par Zaleski et al. (Volume of Fluid/Piecewise Linear Interface Construction ou VOF/PLIC en anglais). L'originalité de la méthode est de reconstruire l'interface par des segments de droite non-jointifs et de les propager de façon lagrangienne [59]. Ils ont par ailleurs développé une méthode de suivi en surface ou de marqueurs. L'interface est alors reconstruite comme une chaîne de splines joignant des particules virtuelles appelées marqueurs. Cette méthode permet une plus grande précision notamment dans le calcul des oscillations capillaires [80, 79].

Une autre méthode qu'il convient de citer est la méthode particulaire sans maillage `SPH` (Smooth Particle Hydrodynamics), introduite par Lucy [62] et Monaghan [37] [71]. On cite aussi les travaux de Morris et al. [72] qui porte une attention particulière sur le traitement de la tension de surface. On peut aussi mentionner les méthodes de type `Lattice Boltzmann` [44, 43, 95].

Par ailleurs, une autre grande classe d'approches fait intervenir des formulations intégrales où des intégrales volumiques sont transformées en des intégrales surfaciques à travers un noyau de Green, il s'agit des méthodes d'intégrales de frontières connues sous le nom de `Boundary Integral Methods`. Pour plus de détail sur cette méthode, on renvoit le lecteur aux [4, 55, 36, 7, 11, 9, 14]. Etant très précises, elles servent souvent de référence pour réaliser des comparaisons avec d'autres méthodes. On note qu'une des principales difficultés, à part celles des méthodes lagrangiennes en général, est la recherche du noyau de Green associé au problème physique traité. Pour plus de détail sur les techniques de détermination des noyaux de Green ainsi que des applications physiques concernant des globules rouges dans le sang, le lecteur peut consulter [81].

Les méthodes ALE

Les approches `ALE` (Arbitrary Lagrangian Eulerian) ont été introduites par Hirt et al. dans [45]. L'idée générale de cette méthode se compose de trois ingrédients. D'une part, une étape lagrangienne qui permet de déterminer les variables du problème dans un premier domaine, généralement le domaine solide. D'autre part, une phase implicite qui résout les équations de conservation de la quantité de mouvement dans un second domaine, généralement le domaine fluide. Enfin, une étape pour assurer la continuité des variables du problème entre les deux domaines. Le qualificatif arbitraire vient du fait que les points du maillage peuvent soit rester fixes (caractère eulérien) dans certaines zones (notamment loin de l'interface), soit être déplacés avec la structure (caractère lagrangien) dans d'autres zones (en particulier près de l'interface, où l'adaptation du maillage permet un gain naturel de précision). La méthode `ALE` introduit donc une flexibilité dans la gestion des grilles qui est en fait une approche très attractive pour simuler notamment des écoulements sanguins dans les artères. Néanmoins, la principale limitation de cette méthode est qu'elle se limite à des membranes pas trop déformées.
Pour plus de détail sur cette méthode, on invite le lecteur à consulter les travaux de Quateroni et al. [23, 82] ainsi que les travaux de Glowinski et al. [66, 65].

0.2.2 Les méthodes eulériennes

Contrairement aux méthodes lagrangiennes, les méthodes eulériennes sont caractérisées par l'utilisation d'un maillage fixe (souvent structuré) au travers duquel circulent les particules fluides. Ceci permet de traiter plus facilement des géométries très complexes et des géométries

présentant des changements topologiques. Néanmois, elles peuvent cependant donner des solutions présentant une diffusion artificielle et ont du mal à conserver la raideur des interfaces.

FIG. 4 – (a) : Vue d'une vague réalisée par `www.logiciel-freeware.net`. (b) : Vue artistique de la rupture d'un jet réalisée par `www.linvestigateur.files.wordpress.com`.

Les méthodes eulériennes ont connu un grand essor ces dernières années notamment pour traiter des surfaces à géométries complexes, dans ce cas les méthodes lagrangiennes exigent une adaptation de maillage très fine dans les zones de fortes variations de la courbure. Dans le suite, nous allons citer quelques exemples.

En premier lieu, on cite quelques applications en mécanique des fuides. Les écoulements à surface libre fortement déformable concernent des domaines d'activité aussi variés que le déferlement d'une vague [16] : voir Fig. 4(a), les rupture de Rayleigh-Plateau d'un jet [15] : voir Fig. 4(b), l'impact d'une goutte sur la surface d'eau [52, 41, 51] ou la confection de revêtement par dépôt et solidification. La caractérisation de tels phénomènes est difficile à mener non seulement expérimentalement car les échelles spatio-temporelles mises en jeu sont souvent difficiles à atteindre, mais aussi numériquement avec des méthodes lagrangiennes. En effet, parmi les difficultés majeures induites par le développement de modèles d'écoulements à surface libre, on peut citer le caractère tridimensionnel des phénomènes lorsque des déformations ou des instabilités apparaissent, ainsi que la dégradation des résultats lorsque le pas de discrétisation en espace est de l'ordre de celui des plus petites échelles d'interface. Il est donc nécessaire d'augmenter la densité de discrétisation en fonction de la complexité de la topologie de l'interface. Par conséquent, l'enjeu majeur est de contrôler la mémoire et le temps de calcul informatique tout en assurant l'accès à des échelles de plus en plus réduites.

Lorsqu'une interface est une frontière entre deux milieux physiques, il est justifié d'introduire une zone de transition. En effet, à l'échelle des molécules, il existe une petite zone de mélange entre les deux espèces. D'un point de vue numérique, ceci se traduit par une zone de transition rapide et continue, on parle d'*interface diffuse*. Ceci permet d'introduire une description riche de la physique près de l'interface des changements de phase et des processus de mélange. Les modèles de champ de phase, introduite par Allen et Cahn [6], connues sous le nom de *Phase Field*, utilisent

ainsi une énergie libre qui est définie via un potentiel à double puits caractérisant l'équilibre des deux phases en présence [6]. Pour des proprietés d'existence des solution de l'équation d'Allen-Cahn dans le cas des mouvements par courbure moyenne, on invite le lecteur à consulter [28]. Un exemple classique utilisant ces interfaces diffuses est constitué par les modèles de type Cahn-Hilliard [29]. Finalement, pour des applications physiques de cette méthode dans le domaine des applications biologiques, le lecteur pourra consulter [12].

Parmi les travaux qui ont été élaborés pour le repérage de l'interface entre les différents fluides en présence dans le cadre d'une formulation eulérienne biphasique non-miscible, on cite une autre méthode : la méthode de Volume de Fluide introduite par Hirt et Nichols [45].

Nous en arrivons enfin aux méthodes eulériennes qui *capturent l'interface* grâce à un champ scalaire qui la définit implicitement. Une équation de transport est alors utilisée pour mouvoir le champ scalaire et donc connaître l'évolution du front. La régularité de ce champ permet alors de distinguer les domaines intérieur et extérieur des membranes. C'est la méthode des courbes de niveau connue sous le nom de `Level Set` introduite par Osher et Sethian en 1988 [78], cette méthode sera développée dans le chapitre suivant.

0.2.3 Pourquoi la méthode des fonctions de niveau ?

Les méthodes numériques pour résoudre des problèmes à surfaces libres et des problèmes d'interfaces ont pris ces dernières années une importance croissante en physique et réalité virtuelle [88, 87]. Les applications recouvrent des domaines aussi variés que la lithographie [33, 2], les mousses et les émulsions, les tsunamis, les interfaces liquide-vapeur [69, 92, 77, 1] et le comportement d'un globule rouge dans une artère [19, 20, 21]. Pour consulter certaines applications de la méthode des fonctions de niveau, le lecteur pourra voir aussi [98, 34, 30, 78, 76, 75]. La méthode des fonctions de niveau (voir par exemple [76, 88]), s'appuyant sur un maillage fixe du milieu continu tridimensionnel, est devenue de plus en plus courante pour ce type de problèmes, car elle s'avère particulièrement souple lorsque les interfaces se déforment fortement ou présentent des changements topologiques (coalescence, etc).

Une autre approche très répandue est la méthode de suivi lagrangien de l'interface par un maillage surfacique variable : moins apte aux changements topologiques, elle a cependant l'avantage de conserver mieux la masse, c'est-à-dire le volume du fluide, particulièrement pour des interfaces à courbure discontinue ou très minces. Des tentatives pour améliorer la conservation de la masse dans la méthode des fonctions de niveau ont conduit à de nombreuses approches, telles qu'augmenter l'ordre des schémas [50]. Enright et al. [30], dans le cadre d'une méthode particulaire, ont proposé d'utiliser des marqueurs lagrangiens pour reconstruire la fonction de niveau dans les régions sous-résolues. Une autre approche, proposée par Sussman et Fatemi [92] dans le cadre de la méthode des différences finies, consiste à ajouter une contrainte à l'équation de redistanciation discrète afin de mieux conserver la masse.

Concernant les aspets théoriques d'existence des solutions de cette méthode, les résultats sont établis dans le cadre des solutions de viscosité [10, 22] pour des équations à dérivées partielles dépendant du temps [17, 32].

On s'est basé sur les aspets suivants pour choisir la méthode des courbes de niveaux pour la modélisation des vésicules biologiques :

La physique qui gouverne le phénomène : Les vésicules peuvent prendre des formes très complexes notamment dans le cas de déplacement dans des veines dont la section est du

même ordre de grandeur que le rayon moyen de la vesicule.

Le coût d'implémentation de la méthode : Pour localiser les géométries complexes, on doit avoir des grilles de calcul suffisamment fines dans certaines zones, ceci engendre un coût de calcul très élévé. Parmi les perspectives de ce travail, on envisage des simulations tridimensionnelles qui décrivent la vraie physique des membranes biologiques. Néanmoins, les mailleurs ne sont pas très sophistiqués en dimension trois, ainsi on aura moins besoin d'adapter le maillage avec les méthodes eulériennes qu'avec les méthodes lagrangiennes.

L'adaptation de maillage : Ajouter plus de précision et remédier aux problèmes de diffusions souvant observés en utilisant des méthodes eulériennes.

Les éléments finis : Contrairement aux différences finis, la méthode des éléments finis permet de localiser des géométries très complexes. Dans la poursuite de ce travail, on compte modéliser des globules rouges dans des veines présentant des ramifications.

0.3 Contribution de cette thèse

Cette thèse s'inscrit dans la problèmatique de la rhéologie des écoulements sanguins. Bien que nous nous limitons à la présence d'une seule vésicule, plusieurs contributions ont été apportées à ce domaine de recherche et elle représentent le premier noyau vers une description plus complexe du sang.

La première contribution de ce travail consiste en l'identification de sous problèmes élémentaires du problème initial modélisant la rhéologie d'une vésicule dans le sang. Il s'agit de primitives emboitées qui convergent vers le problème initial. Nous élaborons avec pertinence un algorithme de résolution optimal pour chaque sous problème. Traiter chaque sous problème à part permet de mettre en évidence plusieurs difficultés et d'effectuer par la suite une série d'opérations optimales et de simplifier grandement la mise en place de l'algorithme final.

La seconde contribution de cette thèse consiste à mettre en oeuvre les méthodes élaborées. Nous élaborons un logiciel approprié à la résolution des problèmes des vésicules et qui s'appuit sur la librairie de calcul `Rheolef`. En effet, ceci consiste à conçevoir, programmer et tourner les algorithmes correspondant aux sous problèmes identifiés. La validation du calcul numérique possède une importance primordiale à cette étape, elle englobe des comparaisons avec des solution exactes, des solutions semi-analytiques ainsi que des comparaisons avec des résultats figurant dans d'autres travaux.

La troisième contribution est l'analyse du comportement de l'erreur. Ceci permet d'avoir une idée préliminaire avant toute sorte de travail théorique sur des estimations d'erreur a priori pour les problèmes en question. Dès lors, ce qui accaparé notre attention, au point de prendre en priorité l'amélioration des taux de convergence de l'erreur, c'est certainement les pertes de masse évoquées amplement dans les travaux se basant les méthodes eulériennes y compris celle des lignes de niveau. Par ailleurs, nous abordons cette diffidulté en se basant sur deux volets. Premièrement, à travers une technique de multiplicateurs de Lagrange optimaux étendus aux éléments finis et ensuite à travers l'adaptation de maillage. L'efficacité de cette opération est prouvée à travers la quantification de l'erreur relative portée sur les pertes de masse ainsi que sur l'amélioration des taux de convergence de l'erreur.

La quatrième contribution concerne l'optimisation de formes géométriques qui consiste à trouver la surface minimale qui minimise une fonctionnelle d'énergie dépendant de la géométrie sous conditions de préservation de contraintes. Nous démontrons un résultat d'optimalité et nous

présentons une condition généralisée d'équilibre mécanique des membranes biologiques pour des fonctionnelles plus générales que celle dépendant du carré de la courbure moyenne de Canham et Helfrich.

L'objet principal de cette thèse est l'étude de la dynamique d'une vésicule dans le sang. Ainsi la cinquième contribution de ce travail consiste à la modélisation réaliste de la membrane cellulaire. L'originalité de ce travail réside dans la l'implémentation numérique rigoureuse en tenant compte de la vraie incompressibilité de la membrane sans introduire une pénalité, ceci n'a pas fait l'objet des travaux numériques précédents. Grâce à la contribution du développement du logiciel, on a pu faire des contributions au domaine de la physique, à savoir la modélisation des vésicules en écoulements confinés et non confinés et notamment la modélisation des écoulements avec des nombres de Reynolds élevés dans la mesure où nous ne pouvons pas négliger ce nombre dans les grands et moyens vaisseaux sanguins. Ce dernier point reflète la physique et représente un travail original dans ce domaine notamment en prévoyant certains comportements qui n'ont pas été observés dans la littérature. Ceci ouvrera des perspectives prometteuses dans le domaine des expériences physiques.

0.4 Plan de la thèse

Dans ce travail, nous allons nous intéresser à l'élaboration d'une méthode numérique permettant de décrire l'équilibre des vésicules biologiques et de mimer la dynamique des vésicules. Dans le cadre d'un écoulement instationnaire, nous prenons comme exemple un écoulement de cisaillement.
Ainsi, cette thèse est articulée en deux parties.

La première partie, découpée en quatre chapitres, est consacrée à la résolution numérique de problèmes mathématiques plus simples que le problème des vésicules dans le cadre de la méthode des lignes de niveau avec une approche éléments finis.
Dans un premier chapitre, nous présentons la méthode des lignes de niveau en mettant en évidence le problème des pertes de masse associées à cette méthode. Nous introduisons des multiplicateurs de Lagrange globaux qui permettent de contrôler ces pertes et nous terminons ce chapitre par des raffinements de maillage afin d'améliorer l'odre de convergence de la méthode.
Le deuxième chapitre porte sur le développement de méthodes numériques pour la simulation des mouvements par courbure moyenne. Ces derniers sont définis comme une évolution d'interface minimisant la surface (le périmètre dans le cas bidimensionnel) et dont l'intérêt est qu'elles apparaissent dans de nombreux systèmes physiques et biologiques et vont nous servir par la suite dans le problème des vésicules.
Nous abordons dans le troisième chapitre de problème de diffusion de surface et nous présentons une méthode numérique permettant de simuler certaines applications physiques de ce problème tels que les instabilités de Rayleigh Plateau lors de la rupture d'un jet.
Nous terminons cette partie par un chapitre qui porte sur la minimisation de l'énergie de courbure de Canham et Helfrich sans contraintes. Nous commençons ce chapitre par présenter une formulation variationnelle de ce problème et nous terminons par quelques simulations numériques permettant de valider ce travail. Cette formulation variationnelle représente un outil de base dans la modélisation du comportement des vésicules à l'équilibre.

La deuxième partie, décomposée en trois chapitres, concerne le volet physique de la thèse qui englobe le comportement des vésicules dans le sang.
Dans un premier chapitre, nous entammons le problème à travers une formulation en équations

différentielles ordinaires. Notre objectif est de déterminer des solutions qui serviront par la suite pour valider les résultats obtenus dans le cadre du formalisme éléments finis.
Ensuite, dans le deuxième chapitre, nous présentons une équation d'équilibre statique des vésicules en dimension quelconque en utilisant des outils de dérivation de forme.
L'objectif du troisième chapitre est de déterminer les positions d'équilibre des vésicules dans le cadre de la méthode des éléments finis. Nous mettons en évidence les problèmes de préservation des contraintes de volume et surface ainsi que les contrôles *a posteriori* que nous utiliserons afin de limiter ce problème. Ces résultats sont validés à travers des comparaisons avec les résultats des équations différentielles.
Finalement, le dernier chapitre est consacré aux simulations numériques instationnaires des vésicules sous écoulement de cisaillement. Nous présentons un algorithme général permettant de retrouver certains résultats connus de cette dynamique et nous finissons par élaborer certains résultats originaux sur le comportement de la vésicule en augmentant le nombre de Reynolds.

Première partie

Applications aux mouvements d'interfaces

Chapitre 1

Méthode des fonctions de niveau

Sommaire

1.1 Méthode des *lignes de niveau* **4**
1.2 Corrections de masse **7**
1.3 Adaptation de maillage **15**
1.4 Test de Zalesak **16**
1.5 Test de Leveque **21**

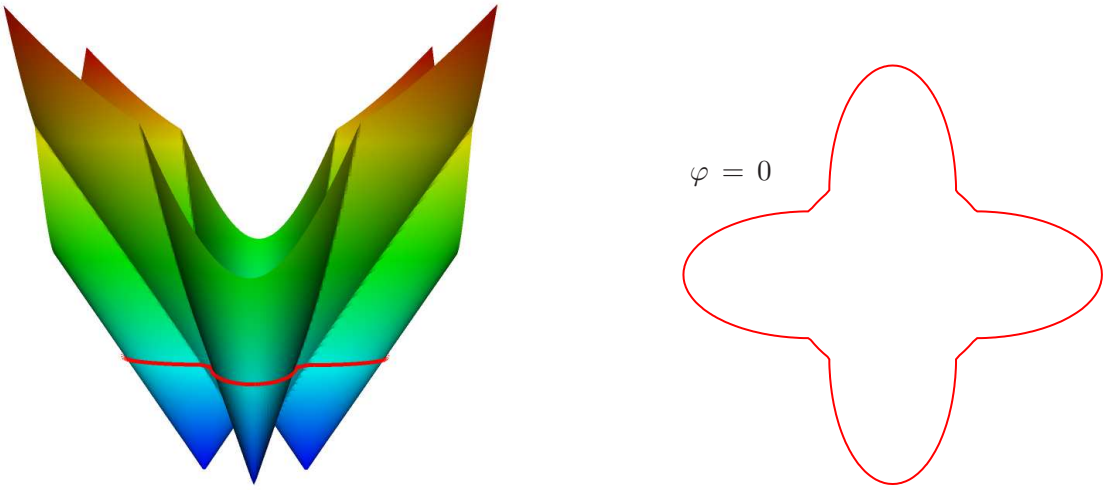

FIG. 1.1 – Illustration de *la méthode des lignes de niveaux*. (a) : La fonction φ et (b) : La courbe de niveau zéro.

Ce chapitre traite les différents aspets de la méthode des lignes de niveau connue sous le nom `Level Set`. Le premier point traité concerne le formalisme mathématique de la méthode et particulièremant le couplage avec un problème de renormalisation de la fonction de niveau. Par la suite, nous mettons le point sur les problèmes de pertes de masse résultant de la description eulérienne de cette méthode. Par ailleurs, nous proposons un nouvel algorithme pour améliorer la conservation de la masse dans un cadre éléments finis en utlisant une adaptation de maillage. Les performances de la méthode proposée sont testées avec le cas test du disque de Zalesak et celui du cercle de Leveque, et nous observons numériquement que le taux de convergence par rapport à la taille des éléments du maillage est amélioré.

1.1 Méthode des *lignes de niveau*

1.1.1 Formalisme mathématique

Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ un domaine borné, avec $d = 2$ ou 3, et $T \geq 0$. Pour tout $t \in [0, T]$, on considère la surface fermée orientable $\Gamma(t) \subset \Lambda$ donnée par :

$$\Gamma(t) = \{x \in [0, T] \times \Lambda : \varphi(t, x) = 0\} \ .$$

Autrement dit, $\Gamma(t)$ est une courbe particulière de niveau zéro d'une fonction $\varphi(t, .)$. On note $\Omega(t) \subset \Lambda$ le domaine où $\varphi(t, .)$ est négative, et par suite $\Gamma(t) = \partial\Omega(t)$. Soit $\mathbf{u}$ la vitesse de $\Gamma(t)$ et

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\varphi = 0, \tag{1.1}$$

avec $D\varphi/Dt$ désigne la dérivée matérielle. Cette équation de transport est complétée par une condition initiale $\varphi(t=0) = \varphi_0$, où $\forall x \in \Lambda$, la fonction $\varphi_0(x)$ est la distance signée à la surface

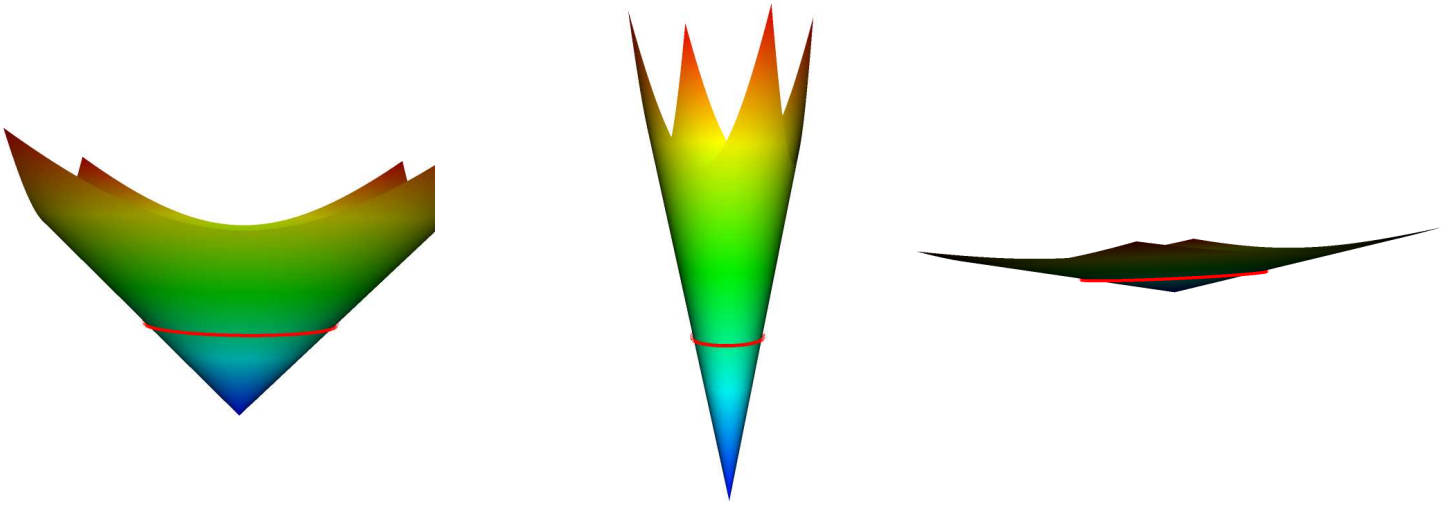

FIG. 1.2 – Illustration de trois *fonctions de niveaux* φ_1, φ_2, φ_3 tels que $\{x \in \Lambda; \varphi_1(x) = 0\} = \{x \in \Lambda; \varphi_2(x) = 0\} = \{x \in \Lambda; \varphi_3(x) = 0\}$ et (a) : $|\nabla\varphi_1| = 1$, (b) : $|\nabla\varphi_2| = 5$ et (c) : $|\nabla\varphi_3| = 0.2$.

$\Gamma(0)$:

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} \inf\{|y-x|;\ y \in \Gamma(0)\} & \text{when } x \notin \Omega(0), \\ \inf\{-|y-x|;\ y \in \Gamma(0)\} & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Néanmoins, le transport déforme la forme initiale de la fonction de niveau et on a une nouvelle fonction de niveau qui n'est plus une distance signée pour $t > 0$.

Le problème qui se pose à ce niveau est d'avoir soit une fonction de niveau qui possède un gradient très grand dans certaines zones du domaine Λ, ceci induit des singularités lors du calcul numérique, soit un gradient très petit dans un voisinage de Γ et on localise difficilement la courbe Γ qui finit éventuellement par dégénérer au cours des calculs : voir figure 1.2 pour une illustration. Pour palier à cela, on substitue la fonction de niveau φ par une seconde ayant un gradient unitaire (ou proche de 1) et qui possède la même ligne de niveau zéro que φ.

En effet, on effectue une ré-initialisation à une distance signée, appelée *redistanciation*, en calculant, à tout instant $t \in]0, T[$, la solution stationnaire du problème suivant, dépendant d'un pseudo-temps τ :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial d}{\partial \tau}(\tau, x; t) + \operatorname{sgn}(\varphi)\,(|\nabla d| - 1) &= 0 & \text{p.p. } (\tau, x) \in]0, +\infty[\times\Lambda\,, \\ d(0, x; t) &= \varphi(t, x) & \text{p.p. } x \in \Lambda\,. \end{cases} \tag{1.2}$$

Avec $\operatorname{sgn}(\varphi)$ représente la fonction signe qui prend des valeurs $0, -1, +1$ respectivement sur l'interface $\Gamma(t)$, à l'intérieur de $\Gamma(t)$ et dans le domaine extérieur à $\Gamma(t)$. La solution stationnaire vérifie $|\nabla d| = 1$ presque partout dans Λ, c'est à dire $d(\infty, .; t)$ est une distance signée et elle représente la nouvelle fonction de niveau $\varphi(t, .)$ à l'instant t. On note que la solution d du problème de redistancement (1.2) préserve $\Gamma(t)$ à la même position : pour tout $\tau > 0$, la courbe de niveau zéro de $d(\tau, .; t)$ est confondue à celle de $\varphi(t, .)$. Par conséquences, le volume $\operatorname{meas}(\Omega(t))$ est également conservé. Néanmoins, après discrétisation par la méthode des différences finis ou d'éléments finis, cette proprieté n'est pas conservé et on a des pertes de masse qui sont de plus en

plus importantes au cours du temps. On note que le problème (1.2) peut être interprété comme un problème de transport avec second membre (1.3) et on a :

$$\left\{\begin{array}{rll} \dfrac{\partial d}{\partial \tau}(\tau,x;t) + \left[\mathrm{sgn}(\varphi)\dfrac{\nabla d}{|\nabla d|}\right].\nabla d & = \mathrm{sgn}(\varphi) & \text{p.p. } (\tau,x) \in]0,+\infty[\,, \\ d(0,x;t) & = \varphi(t,x) & \text{p.p. } x \in \Lambda\,. \end{array}\right. \tag{1.3}$$

1.1.2 Régularisation

On introduit :
La fonction *Heaviside* $\mathbb{H}(\varphi)$, c'est la fonction indicatrice de $\Lambda \setminus \Omega$,
La mesure de *Dirac* $\delta(\varphi)$, elle localise l'interface Γ,
La fonction *Signe* $\mathrm{sgn}(\varphi)$, c'est la fonction qui donne le signe de la fonction φ.
Afin d'avoir une description implicite régulière de l'interface Γ, on introduit une zone de transition de largeur 2ε. Cette zone sert à régulariser les fonctions *Heaviside* et *signe* et la mesure de *Dirac* qui sont restituées respectivement par : $\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi)$, $\delta_\varepsilon(\varphi)$ et $\mathrm{sgn}_\varepsilon(\varphi)$ données par :

$$\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) = \left\{\begin{array}{ll} 0, & \text{si } \phi < -\varepsilon, \\ \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\varphi}{\varepsilon} + \dfrac{\sin(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon})}{\pi}\right), & \text{si } |\varphi| \leq \varepsilon, \\ 1, & \text{sinon }, \end{array}\right. \tag{1.4}$$

$$\delta_\varepsilon(\varphi) = \frac{\mathrm{d}\mathbb{H}_\varepsilon}{\mathrm{d}\varphi}(\varphi) = \left\{\begin{array}{ll} \dfrac{1}{2\varepsilon}\left(1 + \cos(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon})\right) & , \text{ si } |\varphi| \leq \varepsilon \\ 0 & , \text{ sinon} \end{array}\right. \tag{1.5}$$

$$\mathrm{sgn}_\varepsilon(\varphi) = 2\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - 1 \tag{1.6}$$

Numériquement, le paramètre de régularisation ε est choisit proportionnellement au pas de discrétisation h.

1.1.3 Pertes de masse

On considère le test classique du disque de Zalesak [98]. Le disque est supposé rigide et il fait un tour complet sous l'action d'un champ de rotation (vecteur à divregence nulle) avant de reprendre sa position initiale. Le disque possède une fente et deux zones de discontinuités qui sont difficiles à localiser au cours du transport. Ce test permet de décrire la robustesse et l'éfficacité d'une méthode numérique quant à la conservation du volume et notamment la localisation des zones de fortes discontinuités de la courbure.
Lors des simulations, on choisit le domaine $\Lambda = [0,1]^2$, le disque est centré en $(0.5, 0.7)$ et il a un rayon égale à 0.2, il possède une fente de longueur 0.3 et de largeur 0.1 : voir la figure 1.3. Le champs de rotation est donné par :

$$\mathbf{u}(x,y) = (0.5 - y, x - 0.5)\ .$$

On choisit la largeur de la bande de régularisation égale à $\varepsilon = 2h$ où h est le pas du maillage. On utilise un maillage régulier 400×400. Après un tour de rotation, on superpose dans la figure 1.3 la solution numérique avec la solution exacte. Ceci met en évidence visuellement qu'on ne conserve pas la masse. Quant à la forme du disque, la méthode ne préserve pas sa forme initiale et elle ne permet pas de localiser les zones de discontinuités de la courbure. Finalement, les propriétés de convergence sont données à la figure 1 du papier [58].

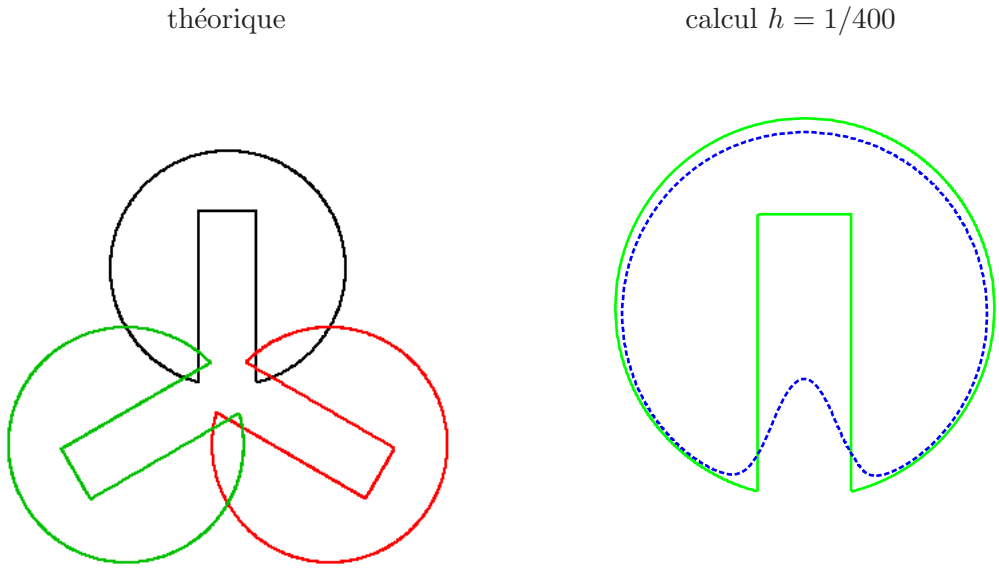

FIG. 1.3 – Illustration des pertes de masse dans le cadre de la méthode des fonctions de niveau.

1.2 Corrections de masse

Dans cette section, on présente une technique de multiplicateurs de Lagrange pour remédier aux pertes de masse évoquées précédemment, ces travaux ont fait l'objet du papier [58].

Résumé de l'article

On propose un nouvel algorithme pour améliorer la conservation de la masse dans la méthode des fonctions de niveau dans un cadre éléments finis.
Deux types de multiplicateurs de Lagrange sont introduits, associés respectivement à l'équation de transport et à celle de redistanciation. Le premier est localisé au voisinage de l'interface, tandis que le second est associé à une correction globale au domaine de calcul. Les performances de la méthode proposée sont ensuite testées avec le cas test du disque de Zalesak, et on observe numériquement que le taux de convergence par rapport à la taille des éléments du maillage est amélioré.

Le problème de transport

$\forall t \in]0, T[$, la conservation globale de la masse s'écrit :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{\Omega(t)} \mathrm{d}x\right) = 0 \tag{1.7}$$

Dans le cas d'un champs de transport à divergence nulle (la masse est conservée), on introduit un multiplicateur de Lagrange global $\zeta(t) \in \mathbb{R}$ associé à la contrainte (1.7), le problème de transport (1.1) est restitué par :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\phi + \zeta(t) = 0 \tag{1.8}$$

Le problème de redistancement

Lors de l'étape de redistanciation, on introduit un multiplicateur de Lagrange $\lambda(\tau, x; t)$ qui renforce localement la conservation de masse dans tous voisinage $\mathcal{V} \subset \Omega(t)$ de l'interface Γ :

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\int_{\mathcal{V}} H(d)\,\mathrm{d}x\right) = 0.$$

On note $\mathbf{v} = \mathrm{sgn}(\phi)\dfrac{\nabla d}{|\nabla d|}$ et $g(d) = \delta(d)\,|\nabla d|$, le problème de renormalisation (1.3) est restitué par la problème (1.9) :

$$\left\{\begin{array}{rll} \dfrac{\partial d}{\partial \tau}(\tau, x; t) + \mathbf{v}.\nabla d & = \mathrm{sgn}\left(\phi\left(t, x\right)\right) + \lambda(\tau, x : t)\, g(d) & \text{p.p. } (\tau, x) \in]0, +\infty[\,, \\ d(0, x; t) & = \varphi(t, x) & \text{p.p. } x \in \Lambda\,. \end{array}\right. \tag{1.9}$$

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 348 (2010) 535–540

Contents lists available at ScienceDirect

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I

www.sciencedirect.com

Partial Differential Equations/Numerical Analysis

Improving the mass conservation of the level set method in a finite element context

Amélioration de la conservation de la masse pour la méthode des fonctions de niveaux en éléments finis

Aymen Laadhari, Pierre Saramito, Chaouqi Misbah

Laboratoire J. Kuntzmann, CNRS, B.P. 53, 38041 Grenoble, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 6 January 2010
Accepted after revision 12 March 2010
Available online 13 April 2010

Presented by Olivier Pironneau

ABSTRACT

In this Note, a new algorithm is proposed for improving the mass conservation of the level set method in the finite element context. Two kinds of Lagrange multipliers are introduced, associated respectively to the redistancing and advection equations. The first one, is located at the vicinity of the interface, while the second one is associated to a correction that is global to the domain. The performances of the proposed method are tested on the Zalesak test case, and the convergence rate versus the element mesh size are founded to be improved.

© 2010 Académie des sciences. Published by Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

RÉSUMÉ

Dans cette Note, nous proposons un nouvel algorithme pour améliorer la conservation de la masse dans la méthode des fonctions de niveau dans un cadre éléments finis. Deux types de multiplicateurs de Lagrange sont introduits, associés respectivement à l'équation de redistanciation et à celle d'advection. Le premier est localisé au voisinage de l'interface, tandis que le second est associé à une correction globale au domaine de calcul. Les performances de la méthode proposée sont testées avec le cas test du disque de Zalesak, et nous observons que le taux de convergence par rapport au la taille des éléments du maillage est amélioré.

© 2010 Académie des sciences. Published by Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

Version française abrégée

Les méthodes numériques pour résoudre des problèmes à surface libres et des problèmes d'interfaces ont pris ces dernières années une importance croissante en physique et réalité virtuelle. Les applications recouvrent des domaines aussi variés que les interfaces liquide–vapeur, les mousses et les émulsions, les tsunamis ou le comportement d'un globule rouge dans une artère. La méthode des fonctions de niveau (voir par exemple [3,6]), s'appuyant sur un maillage fixe du milieu continu tridimensionnel, est devenue de plus en plus courante pour ce type de problème, car elle s'avère particulièrement souple lorsque les interfaces se déforment fortement ou présentent des changements topologiques (coalescence, etc.). Une autre approche très répandue est la méthode de suivi lagrangien de l'interface par un maillage surfacique variable : moins

E-mail addresses: Aymen.Laadhari@imag.fr (A. Laadhari), pierre.saramito@imag.fr (P. Saramito).

1631-073X/$ – see front matter © 2010 Académie des sciences. Published by Elsevier Masson SAS. All rights reserved.
doi:10.1016/j.crma.2010.03.011

apte aux changements topologiques, elle a cependant l'avantage de conserver mieux la masse, c'est à dire le volume du fluide, particulièrement pour des interfaces à courbure discontinue ou très minces. Des tentatives pour améliorer la conservation de la masse dans méthode des fonctions de niveau a a conduit à de nombreuses approches, telles que augmenter l'ordre des schémas [2]. Enright et al. [1], dans le cadre d'une méthode particulaire, a proposé d'utiliser des marqueurs lagrangiens pour reconstruire la fonction de niveau dans les régions sous-résolues. Une autre approche, proposée par Sussman et Fatemi [7] dans le cadre de la méthode des différences finies, consiste à ajouter une contrainte à l'équation de redistanciation discrète afin de mieux conserver la masse.

Dans cette Note, dans le cadre de la méthode des éléments fini, nous proposons deux améliorations indépendantes de la conservation de la masse discrète. La première amélioration concerne l'équation d'advection et introduit un multiplicateur de Lagrange scalaire, associé à la conservation globale de la masse. Ce multiplicateur peut être calculé explicitement et conduit à un coût négligeable en temps de calcul. La seconde amélioration est une extension aux éléments finis de la méthode proposée par Sussman et Fatemi : il s'agit d'introduire un multiplicateur de Lagrange local. Ce multiplicateur peut-être également explicité et est nul hors d'un voisinage de l'interface. La correction est ici également très peu coûteuse. Les performances de la méthode proposé sont testées avec le cas test du disque de Zalesak, et nous observons que le taux de convergence par rapport à la taille des éléments du maillage est amélioré.

Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^N$ un domaine borné, avec $N = 2$ ou 3, et $T > 0$. Pour tout $t \in]0, T[$, la surface fermée $\Gamma(t) \subset \Lambda$ s'écrit comme : $\Gamma(t) = \{(t, x) \in]0, T[\times\Lambda;\ \phi(t, x) = 0\}$, c'est-à-dire comme le zéro d'une fonction de niveau $\phi(t, .)$. Notons $\Omega(t) \subset \Lambda$ la région où $\phi(t, .)$ est négatif et $\Gamma(t) = \partial\Omega(t)$. Soit $\mathbf{u}$ la vitesse de $\Gamma(t)$ et

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\phi = 0 \tag{1}$$

où $D\phi/Dt$ désigne la dérivé matérielle. Le champs de vitesse $\mathbf{u}$ est supposé à divergence nulle. Cette équation de transport est complétée par une condition initiale $\phi(t = 0) = \phi_0$, où, pour tout $x \in \Lambda$, la fonction $\phi_0(x)$ est une distance signée entre x et la surface $\Gamma(0)$:

$$\phi_0(x) = \begin{cases} \inf\{|y - x|;\ y \in \Gamma(0)\} & \text{si } x \notin \Omega(0) \\ \inf\{-|y - x|;\ y \in \Gamma(0)\} & \text{sinon} \end{cases}$$

Cependant, le transport déforme la forme initiale de la fonction de niveau, qui n'est plus une distance signée pour $t > 0$. Pour palier à cela, nous effectuons une ré-initilisation à une distance signée, appelée *redistanciation*, en calculant, à tout instant $t \in]0, T[$, la solution stationnaire du problème suivant, utilisant le pseudo-temps τ :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial d}{\partial\tau}(\tau, x; t) + \operatorname{sgn}(\phi)\big(|\nabla d| - 1\big) = 0 & \text{p.p. } (\tau, x) \in]0, +\infty[\ \times \Lambda \\ d(0, x; t) = \phi(t, x) & \text{p.p. } x \in \Lambda \end{cases} \tag{2}$$

où $\operatorname{sgn}(\phi)$ est la fonction signe qui prend respectivement les valeurs $0, -1, +1$ sur l'interface $\Gamma(t)$, dans $\Gamma(t)$ et hors de $\Gamma(t)$. La solution stationnaire vérifie $|\nabla d| = 1$ presque partout dans Λ, c'est-à-dire que $d(\infty, .; t)$ est une distance signée, elle est prise comme la nouvelle fonction de niveau $\phi(t, .)$ à l'instant t. Remarquons que la solution d du problème de redistanciation (2) conserve la position de $\Gamma(t)$: pour tout $\tau > 0$, l'ensemble de niveau zéro de $d(\tau, .; t)$ est égal à l'ensemble de niveau zéro de $\phi(t, .)$. Il en résulte que le volume $\operatorname{meas}(\Omega(t))$ est également conservé, ce qui est de première importance pour de nombreuses applications. Cependant, après discrétisation par différences finies ou éléments finis, cette propriété n'est satisfaite que de façon approchée.

Nous proposons un nouvel algorithme pour améliorer la conservation de la masse dans la méthode des fonctions de niveau dans un cadre éléments finis. Deux types de multiplicateurs de Lagrange sont introduits, associés respectivement à l'équation d'advection et à celle de redistanciation. Le premier est localisé au voisinage de l'interface, tandis que le second est associé à une correction globale au domaine de calcul. Les performances de la méthode proposée sont ensuite testées avec le cas test du disque de Zalesak, et nous observons que le taux de convergence par rapport à la taille des éléments du maillage est amélioré.

1. Maintaining the volume constraint

Let us introduce the velocity field $\mathbf{v} = \operatorname{sgn}(\phi)\frac{\nabla d}{|\nabla d|}$. Then, problem (2) expresses equivalently as:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial d}{\partial\tau}(\tau, x; t) + \mathbf{v}.\nabla d = \operatorname{sgn}\big(\phi(t, x)\big) & \text{a.e. } (\tau, x) \in]0, +\infty[\ \times \Lambda \\ d(0, x; t) = \phi(x, t) & \text{a.e. } x \in \Lambda \end{cases} \tag{3}$$

1.1. The volume constraint for the advection problem

A new modification is introduced in the advection equation (1) related to the divergence free velocity field $\mathbf{u}$. At any time $t \in]0, T[$, the global volume conservation writes:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{\Omega(t)} \mathrm{d}x\right) = 0 \tag{4}$$

A global Lagrange multiplier $\zeta(t) \in \mathbb{R}$ is introduced and the advection equation (1) becomes

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\phi + \zeta(t) = 0 \tag{5}$$

The constraint (4) develops as:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{\Omega(t)} \mathrm{d}x\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_{\Lambda} H(\phi)\,\mathrm{d}x\right) = \int_{\Lambda} \delta(\phi)\frac{\partial \phi}{\partial t}\,\mathrm{d}x = 0 \tag{6}$$

Then, combining (5) and (6) leads to an explicit expression for $\zeta(t)$:

$$\zeta(t) = \frac{-\int_{\Lambda} \mathbf{u}.\nabla\phi\delta(\phi)\,\mathrm{d}x}{\int_{\Lambda} \delta(\phi)\,\mathrm{d}x} \tag{7}$$

Let us check that since $\mathbf{u}$ is divergence free, then ζ is equal to zero and that the global volume correction will act at the discrete level only. For any integrable function f on $\Gamma(t)$, let $\tilde{f}$ denote an extension of f in Λ. Then

$$\int_{\Gamma(t)} f\,\mathrm{d}s = \int_{\Lambda} \tilde{f}\delta(\phi)|\nabla\phi|\,\mathrm{d}x \tag{8}$$

Let $\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ denote the unit outward normal to $\Gamma(t)$. By using (8) with $f = \mathbf{u}.\mathbf{n}$ and then the Green formula:

$$\int_{\Lambda} \mathbf{u}.\nabla\phi\delta(\phi)\,\mathrm{d}x = \int_{\Gamma(t)} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s = \int_{\Lambda} \operatorname{div}\mathbf{u}\,\mathrm{d}x$$

1.2. The volume constraint for the redistancing problem

Let us consider the redistancing problem at any fixed time $t > 0$, while the pseudo-time τ is varying. Sussman and Fatemi [7] introduce the constraints that the volume remains constant in any $\mathcal{V} \subset \Omega(t)$ during the redistancing process:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\int_{\mathcal{V}} H(d)\,\mathrm{d}x\right) = 0. \tag{9}$$

These authors introduce also a Lagrange multiplier $\lambda(\tau, x; t)$ that enforces this constraint locally at $x \in \Lambda$. The evolution equation in (3) becomes:

$$\frac{\partial d}{\partial \tau}(\tau, x; t) + \mathbf{v}.\nabla d = \operatorname{sgn}\big(\phi(t,x)\big) + \lambda(\tau, x : t)g(d) \quad \text{a.e. } (\tau, x) \in]0, +\infty[\times \Lambda \tag{10}$$

In order to ensure the volume conservation while not perturbing the redistancing process, the authors propose $g(d) = \delta(d)|\nabla d|$. Notice that (9) leads to

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\int_{\mathcal{V}} H(d)\,\mathrm{d}x\right) = \int_{\mathcal{V}} \delta(d)\frac{\partial d}{\partial \tau}\,\mathrm{d}x = 0 \tag{11}$$

Combining (10) and (11), Sussman and Fatemi [7] proposed to exploit numerically an explicit average value $\lambda_{\mathcal{V}}$ over an arbitrary *finite volume* $\mathcal{V} \subset \Lambda$:

$$\lambda_{\mathcal{V}}(\tau; t) = \begin{cases} \frac{\int_{\mathcal{V}} \delta(d)(\mathbf{v}.\nabla d - \operatorname{sgn}(\phi))\,\mathrm{d}x}{\int_{\mathcal{V}} \delta(d)g(d)\,\mathrm{d}x}, & \text{when } \mathcal{V} \cap \Gamma(t) \neq \emptyset \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{12}$$

In the next section, based on the regularization procedure, a new local explicit expression of $\lambda(\tau, x; t)$ can be exhibited and that λ can be formally eliminated from the redistancing equation.

2. Regularization

Three sharp functions have been introduced: the Heaviside function $H(\phi)$, that acts as the indicator of $\Lambda - \Omega$, the Dirac function $\delta(\phi)$ that localizes the interface Γ, and the sign function $\mathrm{sgn}(\phi)$. In order to avoid the discretization of the interface Γ, a transition region with a width of 2ε is introduced and the Heaviside, the Dirac and the sign functions are replaced respectively by $H_\varepsilon(\phi)$, $\delta_\varepsilon(\phi)$ and $\mathrm{sgn}_\varepsilon(\phi)$ as:

$$H_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{if } \phi < -\varepsilon \\ \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{\sin(\frac{\pi\phi}{\varepsilon})}{\pi}\right), & \text{if } |\phi| \leqslant \varepsilon \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{13}$$

$$\delta_\varepsilon(\phi) = \frac{\mathrm{d}H_\varepsilon}{\mathrm{d}\phi}(\phi) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}(1 + \cos(\frac{\pi\phi}{\varepsilon})), & \text{if } |\phi| \leqslant \varepsilon \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{14}$$

$$\mathrm{sgn}_\varepsilon(\phi) = 2H_\varepsilon(\phi) - 1 \tag{15}$$

The regularization parameter is chosen as proportional to the mesh size h.

After regularization the evolution equation (10) becomes:

$$\frac{\partial d}{\partial \tau}(\tau, x; t) + \mathbf{v}_\varepsilon.\nabla d = \mathrm{sgn}_\varepsilon\big(\phi(t,x)\big) + \lambda(\tau, x; t) f_\varepsilon(d) \quad \text{a.e. } (\tau, x) \in]0, +\infty[\times \Lambda \tag{16}$$

where $\mathbf{v}_\varepsilon = \mathrm{sgn}_\varepsilon(\phi)\frac{\nabla d}{|\nabla d|}$ and $f_\varepsilon(d) = \delta_\varepsilon(d)|\nabla d|$. Conversely, the regularized version of the mass conservation (11) writes:

$$\int_{\mathcal{V}} \delta_\varepsilon(d)\frac{\partial d}{\partial \tau}\mathrm{d}x = 0, \quad \forall \mathcal{V} \subset \Lambda \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial d}{\partial \tau} = 0, \quad \text{when } |d| < \varepsilon \tag{17}$$

Combining the two previous equations leads to a local version of the explicit expression for λ:

$$\lambda = \begin{cases} \frac{\mathrm{sgn}_\varepsilon(\phi)(|\nabla d| - 1)}{\delta_\varepsilon(d)|\nabla d|}, & \text{when } |d| < \varepsilon \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{18}$$

Finally, the previous expression of λ can be replaced in (16) and the evolution equation becomes, for any $(\tau, x) \in]0, +\infty[\times \Lambda$:

$$\frac{\partial d}{\partial \tau}(\tau, x; t) = \begin{cases} 0, & \text{when } |\phi| < \varepsilon \\ -\mathbf{v}_\varepsilon.\nabla d + \mathrm{sgn}_\varepsilon(\phi), & \text{otherwise} \end{cases} \tag{19}$$

Notice that the set $\Gamma_\varepsilon(t) = \{x \in \Lambda; |\phi(t,x)| < \varepsilon\}$ represents a thin layer around the boundary $\Gamma(t)$. Then, with the mass correction, the redistancing process acts only around a thin layer outside the boundary.

3. Time discretization

This section presents the numerical approximation of the advection problem (5) together with the redistancing problem (19), where the Lagrange multipliers are expressed by (7) and (12). Let $t^n = n\Delta t$, $n \geqslant 0$, where $\Delta t > 0$ is the time step. Conversely, let $\tau^m = m\Delta\tau$, $m \geqslant 0$, where $\Delta\tau > 0$ is the pseudo-time step. Let ϕ^n, ζ^n be approximations of $\phi(t)$, $\zeta(t)$, respectively, at time t^n and d^m, $\mathbf{v}^m$ be approximations of $d(\tau), \mathbf{v}(\tau)$ respectively at τ^m. The time discretization is performed by using the method of characteristics: for any $t > 0$ and $x \in \Lambda$, the characteristic curve $X(., x, ; t)$ passing at time t through x is defined by the following ordinary differential equation:

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t}(s, x; t) = \mathbf{u}\big(X(s, x; t), t\big), & s > 0 \\ X(t, x; t) = x \end{cases} \tag{20}$$

For any function $f(t, x)$, the total derivative Df/Dt expresses:

$$\frac{Df}{Dt}(t, x) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla f\right)(t, x) = \frac{\partial}{\partial t}\big(f\big(X(t, x; t^{n+1}), t^{n+1}\big)\big)\big|_{\tau = t} \tag{21}$$

Following Pironneau [4], this derivative is approximated by a first-order backward Euler scheme:

$$\frac{Df}{Dt}\big(t^{n+1}, x\big) \approx \frac{f(t^{n+1}, x) - f(t^n, X^n(x))}{\Delta t} \tag{22}$$

where $X^n(x) = x - \Delta t\mathbf{u}^n(x)$ denotes the first-order forward Euler approximation of $X(t^n, x; t^{n+1})$. The n-th step of the discrete scheme for the transport problem (5) becomes an explicit computation of ϕ^{n+1}, where ϕ^n is known:

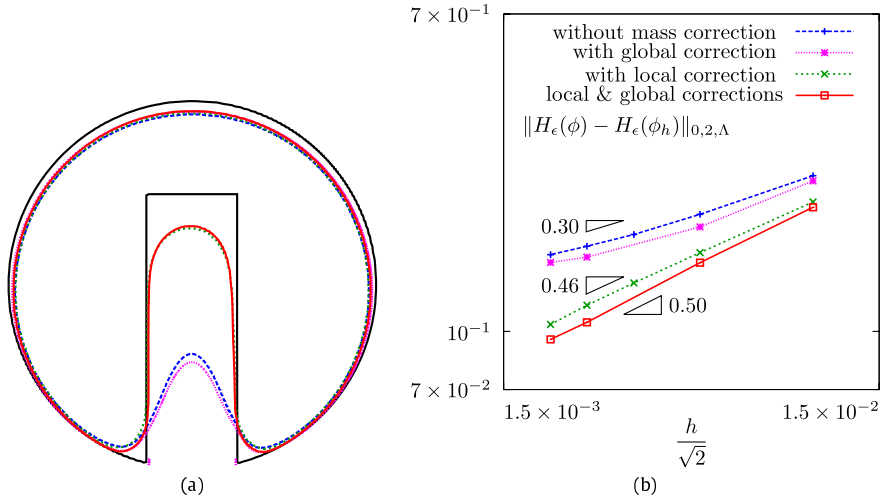

Fig. 1. The Zalesak disk: (a) initial position (black and dotted) and after one rotation: without correction (blue and dotted line), with global correction (magenta and dashed), with local correction (green and dashed), with local and global corrections (red and solid line); (b) convergence properties in log–log scale. (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

Fig. 1. Le disque de Zalesak : (a) position initiale (trait noir et pointillé) et apès une rotation : sans correction (bleu et pointillé), avec correction globale (violet et pointillé), avec correction locale (vert et pointillé), avec corrections locale et globale (rouge et continu) ; (b) propriétés de convergence en échelle log–log.

$$\phi^{n+1}(x) = \phi^n \circ X^n_{\mathbf{u}} + \Delta t \zeta^n \tag{23}$$

Conversely, the redistancing problem (19) is solved also explicitly:

$$d^{m+1} = \begin{cases} d^m, & \text{when } |\phi^n| < \varepsilon \\ d^m \circ X^m_{\mathbf{v}_\varepsilon} + \Delta\tau \operatorname{sgn}_\varepsilon(\phi^n), & \text{otherwise} \end{cases} \tag{24}$$

Here, the characteristic have subscripts $\mathbf{u}$ and $\mathbf{v}_\varepsilon$ in order to avoid confusion. These algorithms are implemented in the C++ finite element library Rheolef [5], where the localization of $X^n(x)$ in an unstructured mesh is performed by using a fast searching algorithm based on a quad-tree data structure.

4. Space discretization

Let $\mathcal{T}_h$ be the finite element triangulation of Λ, and V_h the space of continuous and piecewise linear functions on $\mathcal{T}_h$, where $h > 0$ denotes as usual the mesh size parameter. Conversely, let W_h be the space of piecewise constant functions on $\mathcal{T}_h$. At any step $n \geqslant 0$, the discrete version of the algorithm leads to a succession of explicit computations:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}^{n+1}_h &= \pi_h(\phi^n_h \circ X^n_{\mathbf{u}}) \\ \zeta^{n+1}_h &= \frac{-\int_\Lambda \mathbf{u}.\nabla\tilde{\phi}^{n+1}_h \delta_\varepsilon(\tilde{\phi}^{n+1}_h)\,\mathrm{d}x}{\int_\Lambda \delta_\varepsilon(\tilde{\phi}^{n+1}_h)\,\mathrm{d}x} \\ \hat{\phi}^{n+1}_h &= \tilde{\phi}^{n+1}_h + \Delta t \zeta^n_h \end{aligned}$$

where π_h denotes the Lagrange interpolation in V_h. Then, ϕ^{n+1}_h is obtained from $\hat{\phi}^{n+1}_h$ by the following discrete version of the redistancing algorithm. Let $d^0_h = \hat{\phi}^{n+1}_h$. At any step $m \geqslant 0$ of the redistancing algorithm, suppose $d^m_h \in V_h$ being known, and let $\mathbf{g}^m_h \in V^N_h$ be the approximation of $\nabla d^m_h \in W^N_h$ defined by the following linear system:

$$\int_\Lambda \mathbf{g}^m_h.\boldsymbol{\psi}_h\,\mathrm{d}x = \int_\Lambda \nabla d^m_h.\boldsymbol{\psi}_h\,\mathrm{d}x, \quad \forall \boldsymbol{\psi}_h \in V^N_h$$

A mass lumping procedure is used for this linear system: the integrals involved in the computation of the coefficients of the matrix associated to the L^2 scalar product are evaluated by using the trapeze quadrature formulae. By this way, the matrix of the linear system is replaced by a diagonal one, and the computation of $\mathbf{g}^m_h$ becomes explicit. Then, let

$$\mathbf{v}^m_{\varepsilon,h} = \pi_h\left(\operatorname{sgn}_\varepsilon(\hat{\phi}^{n+1}_h)\frac{\mathbf{g}^m_h}{|\mathbf{g}^m_h|}\right)$$

The discrete version of the redistancing algorithm writes also explicitly:

$$d_h^{m+1} = \begin{cases} d_h^m, & \text{when } |\phi_h^n| < \varepsilon \\ \pi_h\{d_h^m \circ X_{\mathbf{v}_\varepsilon}^m + \Delta\tau \operatorname{sgn}_\varepsilon(\phi_h^n)(1 - |\nabla d_h^m|)\}, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{25}$$

5. Numerical experiments

The improvement of the accuracy with the mass conservation schemes is demonstrated for a classical test case: the rigid body rotation of Zalesak's disk in a constant rotating velocity field [8]: $\mathbf{u}(x, y) = (1/2 - y, x - 1/2)$ in the domain $\Lambda =]0, 1[^2$. The initial data ϕ_0 is associated to a slotted circle centered at $(1/2, 7/10)$ with a radius $r = 1/5$, the slope depth is $3/10$ and the width is equal to $1/10$. The triangular mesh is based on a $N_h \times N_h$ grid, where each square is subdivided in two triangles. The mesh size is $h = \sqrt{2}/N_h$ and $\Delta t = 2\pi/N_h$ is chosen. Fig. 1b plots the error $\|H_\varepsilon(\phi) - H_\varepsilon(\phi_h)\|_{0,2,\Lambda}$ after N_h time steps, at $t = 2\pi$: notice that the disk has performed a full revolution. Observe that the error decreases versus the mesh size. The error is plotted for the following variants of the method: (a) without mass correction, (b) with local mass correction, (c) with local and global mass correction. The rate of convergence, i.e. the slope on the log–log graph, is respectively 0.30, 0.46 and 0.50. For $N_h = 400$, the mass lost is about 10% without any correction. It is improved to 4.9% the local correction and to 1.8% with both local and global corrections. Fig. 1a shows the solution for $N_h = 400$ with and without corrections: the corners become less rounded and the disk is more conserved.

References

[1] D. Enright, R. Fedkin, J. Ferziger, I. Mitchell, A hybrid particle level set method for improved interface capturing, J. Comput. Phys. 183 (2002) 83–116.
[2] G.-S. Jiang, D. Peng, Weighted ENO schemes for Hamilton–Jacobi equations, SIAM J. Sci. Comput. 21 (2000) 2126–2143.
[3] S. Osher, R. Fedkiw, The Level Set Method and Dynamic Implicit Surfaces, Springer-Verlag, New York, 2003.
[4] O. Pironneau, On the transport-diffusion algorithm and its applications to the Navier–Stokes equations, Numer. Math. 38 (3) (1982) 309–332.
[5] P. Saramito, N. Roquet, J. Étienne, RHEOLEF: A finite element environment, i.e. some C++ classes and Unix commands, http://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef, 2008.
[6] J. Sethian, Set Level, Methods and Fast Marching Methods, Cambridge University Press, 1999.
[7] M. Sussman, E. Fatemi, An efficient, interface preserving level set re-distancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow, SIAM J. Sci. Comput. 20 (4) (1998) 1165–1191.
[8] S. Zalesak, Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, J. Comput. Phys. 31 (1979) 335–362.

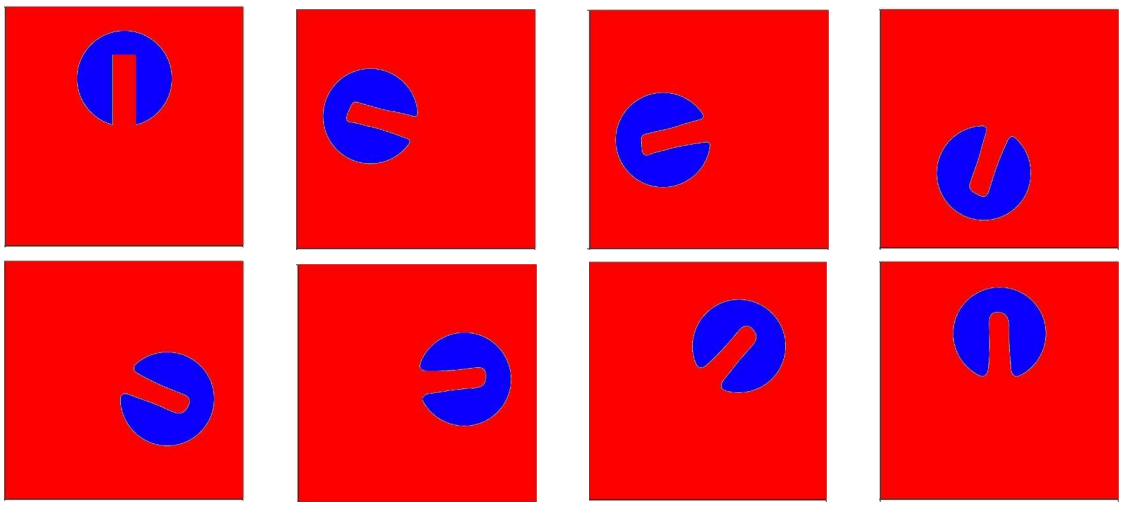

FIG. 1.4 – Disque de *Zalesak* en rotation avec corrections de masse avec un maillage régulier 400×400.

1.3 Adaptation de maillage

La méthode numérique présentée précédemment a l'avantage de mieux contrôler les pertes de masse engendrées par la méthode des fonctions de niveau et de la résolution du problème de redistanciation de φ. Néanmoins, on garde encore le problème de localisation avec précision les points anguleux du disque de Zalesak. Ceci reste possible en utilisant un maillage régulier très fin et par conséquences le temps de calcul devient très élevés. Afin de capturer avec précision les points où la topologie est complexe, mais aussi gagner en terme de précision et de temps de calcul, on propose d'utiliser le logiciel générateur de maillage adapté Bamg [42] et on raffine le maillage autour de la membrane Γ. Ce mailleur permet de construire un maillage adapté anisotrope à partir d'un critère fourni par l'utilisateur. On présente en premier lieu le principe d'adaptation de maillage utilisé par Bamg et on donne en deuxième lieu le critère d'adaptation choisit. Pour un formalisme plus détaillé de la méthode d'opération de Bamg, voir [47].

1.3.1 Principe d'adaptation de maillage

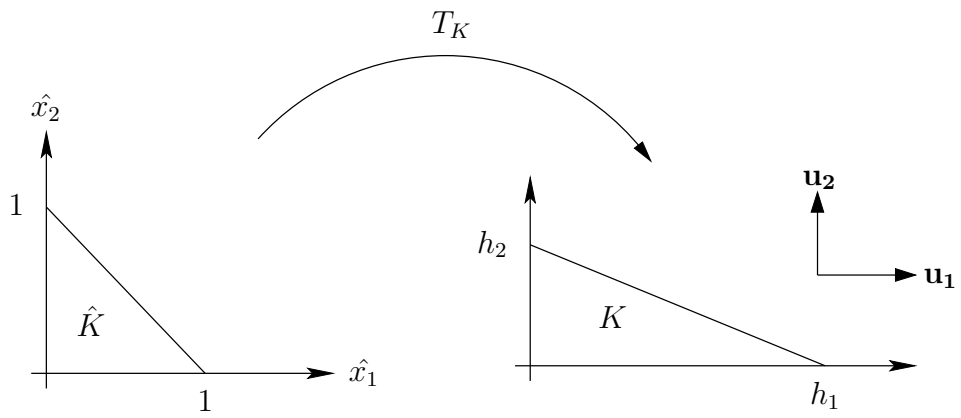

Fig. 1.5 – Transformation du triangle de référence.

Le but de l'adaptation de maillage est de construire une succession de triangulations afin de contrôler une certaine erreur. Il s'agit de distribuer de manière équitable un indicateur d'erreur dans les direction d'étirement maximal et minimal et d'alligner les directions d'étirement maximal et minimal avec les directions d'erreur maximale et minimale.

On considère un triangle K du maillage à un instant t qu'on note $\mathcal{T}_h$. On définit la transformation T_K qui transforme le triangle de référence $\hat{K}$ vers K : voir Fig. 1.3.1, et on note par M_K la matrice `jacobienne` de T_K tel que :

$$\begin{cases} T_K : & \hat{K} \to K \\ \mathbf{x} = & T_K(\hat{\mathbf{x}}) = M_K \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{t}_K \,. \end{cases}$$

Comme M_K est inversible, elle admet une décomposition en valeurs singulières SVD $M_K = R_K^T \Lambda_K P_K$. Avec R_K et P_K orthogonales et Λ_K est une matrice diagonale à valeurs positives. Soit un triangle de référence $\hat{K}$ et on considère l'ensemble des points situés sur le cercle circonscrit au triangle de référence, ainsi $\hat{x}^T \hat{x} = 1$. Comme $\hat{x} = M_K^{-1}(x - t_K)$, alors :

$$1 = (x - t_K)^T M_K^{-T} M_K^{-1} (x - t_K) = (x - t_K)^T R_K^T \Lambda_K^{-2} R_K (x - t_K)$$

L'objectif est de définir maintenant le choix à prendre pour la métrique. On se donne un champs c que l'on choisi comme critère d'adaptation de maillage. Le critère c est discritisé par c_h tel que $c_h|_K \in \mathbb{P}^1, \forall K \in \mathcal{T}_h$. L'erreur d'interpolation dans une direction $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$ est donnée par :

$$e_{K,\mathbf{v}} \;=\; h^2_{K,\mathbf{v}} \left\| \frac{\partial^2 c_h}{\partial \mathbf{v}^2} \right\| \;\text{sur} K\,,$$

avec $h_{K,\mathbf{v}}$ est la longueur de K dans la direction $\mathbf{v}$ et $\dfrac{\partial^2 c_h}{\partial \mathbf{v}^2} \;=\; \mathbf{v}^T \nabla\nabla c_h \,\mathbf{v}$, où $\nabla\nabla c_h$ est la matrice *Hessienne* de c_h donnée par :

$$\nabla\nabla c_h = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 c_h}{\partial x^2} & \dfrac{\partial^2 c_h}{\partial x \partial y} \\ \dfrac{\partial^2 c_h}{\partial x \partial y} & \dfrac{\partial^2 c_h}{\partial y^2} \end{pmatrix}.$$

L'adaptation de maillage permet d'équilibrer l'erreur sur l'ensemble des directions des triangles du maillages, ceci en diminuant $h_{K,\mathbf{v}}$ lorsque $\left\|\mathbf{v}^T \nabla\nabla c_h \,\mathbf{v}\right\|$ est grand et inversement. Par ailleurs, on s'intéresse aux vecteurs propres de $\nabla\nabla c_h$ qui représentent les directions d'étirement extrême du triangle. La racine carrée des valeurs propres donne le coefficient d'étirement. Le champ c_h pour lequel on souhaite adapter le maillage est une inconnue du problème. Ainsi, on utilise un algorithme de point fixe sur des approximations successives de c_h, calculées sur des triangles des maillages sous itérés à l'itération n à partir de le valeur de c_h initialement donnée.
On se donne une constante e_0 définissant l'erreur à commettre. Une façon d'adapter le maillage selon c_h est de fixer l'erreur en la rendant constante, indépendamment des triangles et dans toutes les directions. En effet, si on note par λ_i la valeur propre dans la direction propre notée $\mathbf{u}_i$, la longueur du triangle dans la direction du vecteur propre associé à λ_i est donnée par $h_i = \sqrt{\dfrac{e_0}{\|\lambda_i\|}}$.
Cependant, pour une métrique où les triangles n'ont pas de direction priviligée, on introduit le tenseur M_K dont les valeurs propres sont ceux de la Hessienne $\nabla\nabla c_h$.

1.3.2 Choix du critère d'adaptation

On choisit comme critère $\delta_\varepsilon(\varphi)$. Par conséquent, la métrique M_K est nulle en dehors de la bande de régularisation de largeur 2ε et elle est donnée dans la bande par :

$$M_K \;=\; \frac{-\pi}{2\varepsilon^2} \sin(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon}) \nabla\nabla\varphi \;-\; \frac{\pi^2}{2\varepsilon^3} \cos(\frac{\pi\varphi}{\varepsilon}) \nabla\varphi \otimes \nabla\varphi\,.$$

1.4 Test de Zalesak

On considère le test du disque de Zalesak avec adaptation de maillage et on étudie numériquement la convergence de l'erreur.

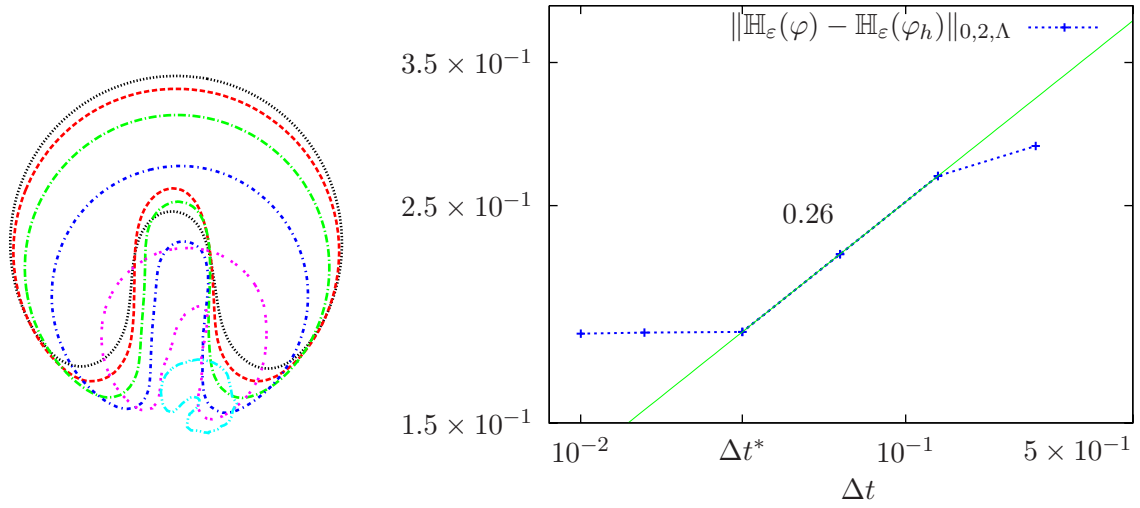

FIG. 1.6 – (a) : Disque de Zalesak après un tour de rotation $N = 400$ (noir et continu), $N = 200$ (rouge et pointillé), $N = 100$ (vert et pointillé), $N = 50$ (bleu foncé et pointillé), $N = 25$ (violet et pointillé), $N = 10$ (bleu clair et continu). (b) : Évolution de l'erreur.

1.4.1 Choix du pas de temps

Lors de l'adaptation de maillage, on fixe au mailleur les valeurs des arêtes maximale h_M et minimale h_m et on a choisi $h_M = 1/3$ et $h_m = 5\,10^{-3}$. Chaque simulation est précédée d'une étape de préparation du maillage initial de 50 itérations afin de lancer le calcul nuérique à partir d'un maillage bien adapté à la configuration initiale φ_0. On varie la valeur du nombre d'itérations N nécessaires pour faire un tour complet du disque, le pas de temps est ainsi donné par la formule $\Delta t = 2\pi/N$.
Cependant, on effectue, lors de chaque itération en temps, une boucle de point fixe jusqu'à la convergence du maillage, ceci correspond en moyenne à une dizaine d'itérations. En ce qui conserne la bande de régularisation $[-\varepsilon, \varepsilon]$, on choisit une largeur $4\Delta x$ avec Δx est le pas de discrétisation local. Par ailleurs, cette bande a une largeur $2\Delta x$ dans le cas des maillages réguliers lors des simulations du papier [58]. Afin de comparer la convergence de l'erreur, on refait les simulations dans le cas de maillages réguliers avec la même bande utilisée dans le cas adapté.
Dans la figure 1.6, on évalue l'erreur commise par rapport à la solution exacte en fonction du choix de Δt, ceci nous permet d'opter pour un pas de temps $\Delta t^* = 3\,10^{-2}$ pour lequel l'erreur en espace l'emporte par rapport à l'erreur en temps. C'est le choix qu'on prend ultérieurement dans ce chapitre pour Δt.

1.4.2 Évolution du maillage

On choisit de faire des sous itérations de maillage à chaque pas de temps jusqu'à la convergence du maillage. On visualise dans la figure 1.7(a) l'évolution des sommets et des mailles pour $t \in [3\Delta t, 10\Delta t]$. Dans un souci d'améliorer encore la qualité des résultats, on utilise une procédure de prévision de la position de la courbe de niveau zéro et on en tient compte dans le critère de raffinement de maillage.
En effet, la fonction φ_h^n est connue à l'itération n. On calcule en premier lieu une valeur approchée

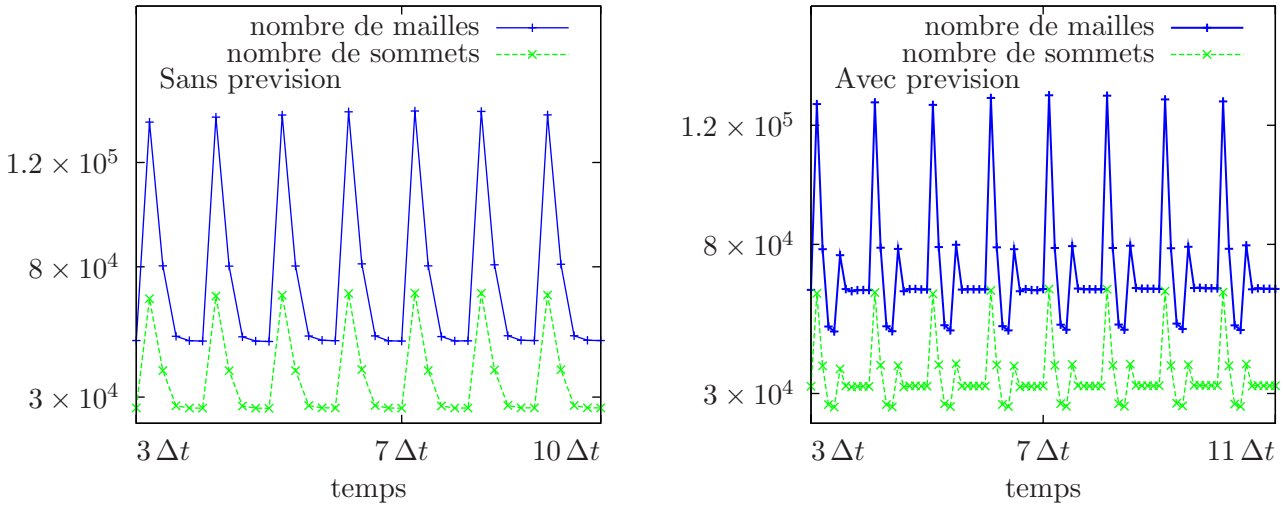

FIG. 1.7 – Zoom sur l'évolution du maillage. Le critère choisit est : (a) : $c_h^n = \delta_\varepsilon(\varphi_h^n)$ et (b) : $c_h^n = \delta_\varepsilon(\varphi_h^n) + \delta_\varepsilon(\varphi_h^{n+0.5})$.

de la solution $\varphi_h^{n+0.5}$ à l'itération $n+1$ sur le maillage élaboré à l'itération n. En deuxième lieu, on calcule le nouveau maillage en choisissant le critère $c_h^n = \delta_\varepsilon(\varphi_h^n) + \delta_\varepsilon(\varphi_h^{n+0.5})$. L'évolution des caractéristiques du maillage est tracée dans la figure 1.7(b). De plus, on traçe le maillage global initialement utilisé ainsi qu'un zoom sur certaine zones au cours du temps à la figure 1.8.

1.4.3 Évolution de l'erreur

On traçe l'évolution de l'erreur en norme L^2 par rapport à la solution exacte, les résultats sont présentés à la figure 1.9(b). On remarque qu'on réduit l'erreur commise et que l'adaptation de maillage nous fait gagner un facteur 2 dans l'ordre de convergence de la méthode par rapport à celui obtenu en utilisant un maillage régulier.
Les positions relatives du disque correspondant à un 1/8 d'un tour sont traçées à la figure 1.9(a), on s'apperçoit de l'utilité de l'adaptation du maillage notamment au niveau de la localisation des zones de discontinuités du disque.

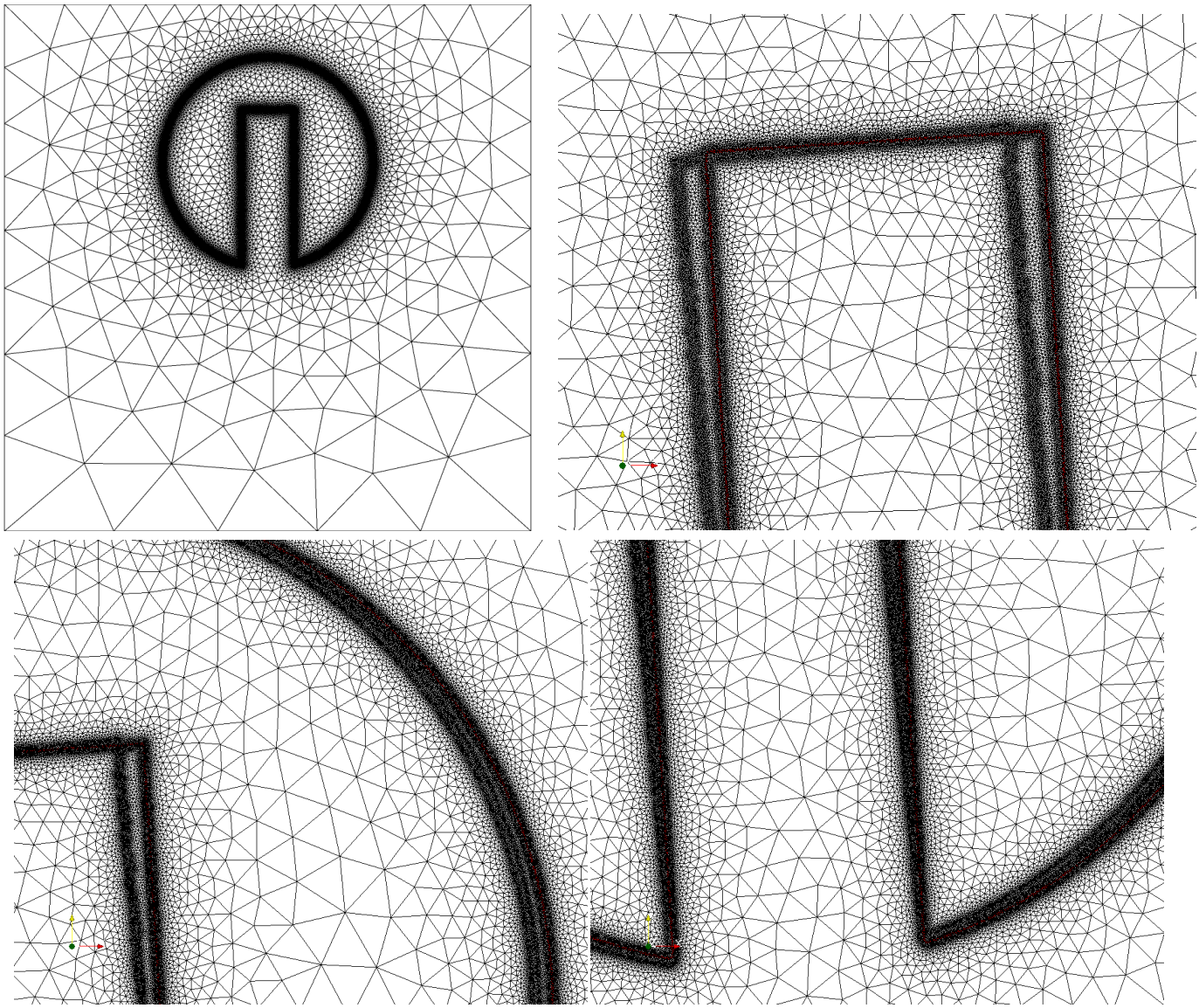

FIG. 1.8 – Maillage adapté.

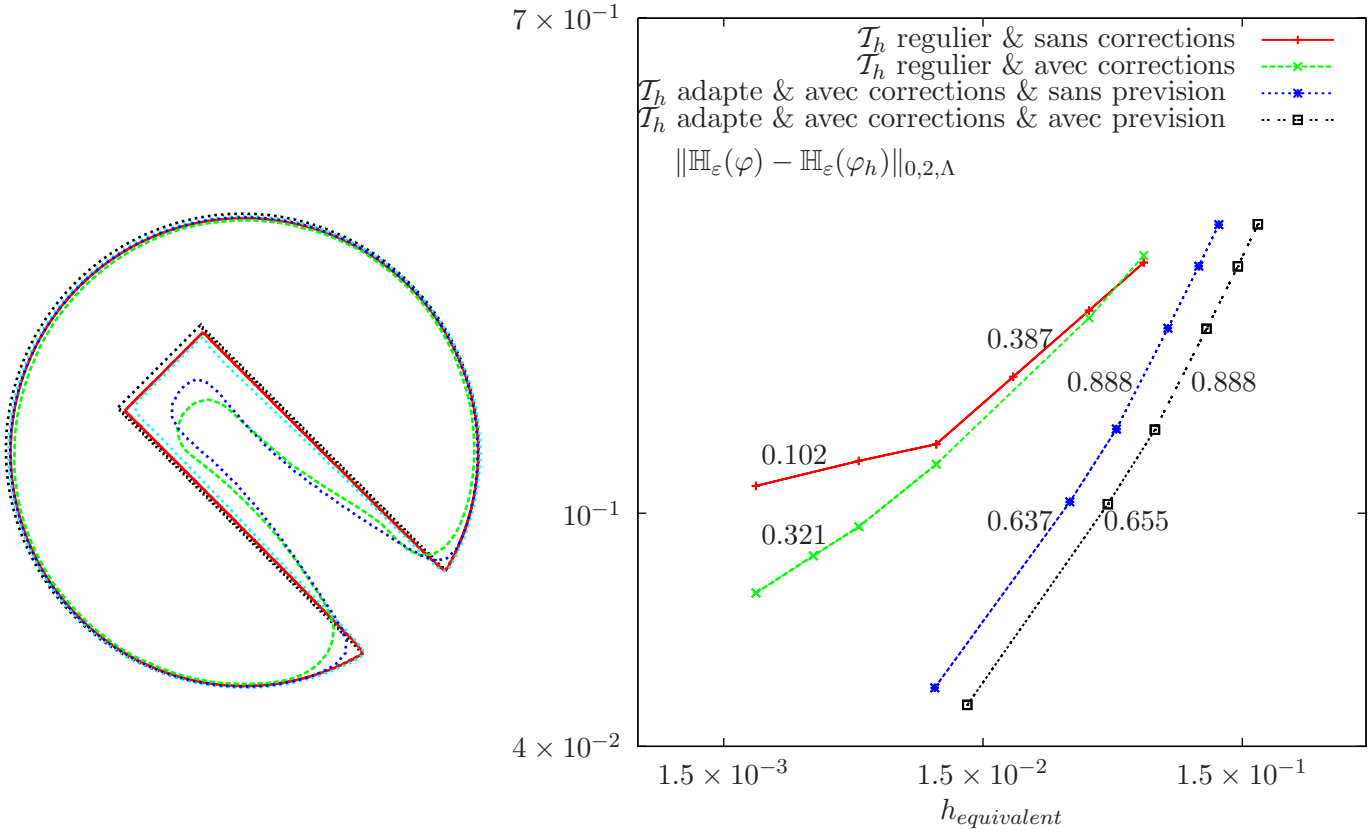

FIG. 1.9 – (a) : Le disque de Zalesaque pour $h_{\text{équivalent}} = 0.01$: solution exacte (noir et pointillé), maillage adapté, avec λ, ζ et avec prédiction (rouge et continu) : $|\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)|_{0,2,\Lambda} = 0.056$, maillage adapté, avec λ, ζ et sans prédiction (bleu clair et pointillé) : $|\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)| = 0.067$, maillage régulier et λ, ζ (bleu foncé et pointillé) : $|\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)| = 0.121$, maillage régulier sans corrections (vert et discontinu) : $|\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)| = 0.131$. (b) : Propriétés de convergence dans la norme $L^2(\Lambda)$.

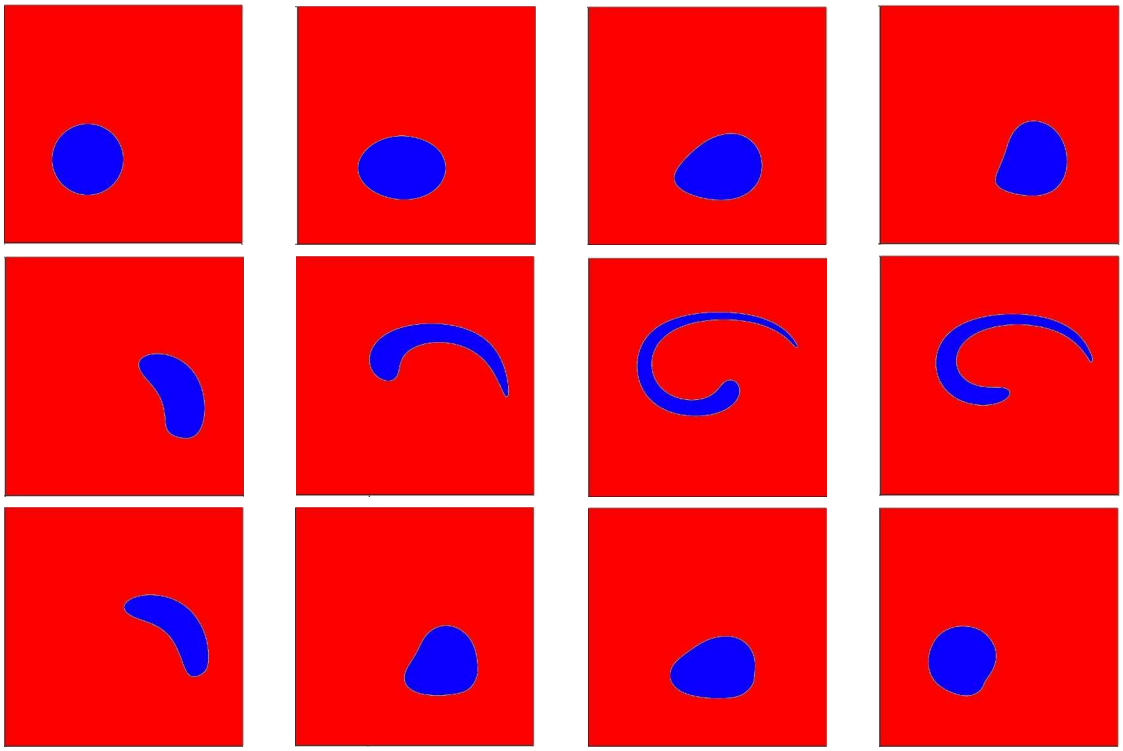

FIG. 1.10 – Visualisation de la déformation du cercle de `Leveque` pour un maillage régulier 400×400.

1.5 Test de Leveque

Ce test a été proposé par Leveque [60] et il a fait l'objet de plusieurs travaux notamment ceux dans le cadre des méthodes particulaires, on cite à titre d'exemple les travaux de Enright et al. [30] dans un domaine tridimensionnel. Le problème consiste à déformer un cercle sous l'action d'un champs de vitesse périodique au cours du temps. Le cercle se déforme lors du transport et il finit par retrouver sa position initiale après une période de déformation : voir Fig. 1.10. Ce test permet de tester la sensibilité de la méthode quant à la localisation des petits filaments qui apparaissent lors du mouvement et il permet de tester la conservation de masse lors du transport.
Numériquement, on considère un cercle de rayon 0.15, centré en $(0.35, 0.35)$ dans un domaine $[0, 1] \times [0, 1]$. Le cercle est soumis à l'action du champs de vitesse suivant :

$$\mathbf{u}(x, y) \;=\; \big(2(sin(\pi x))^2 sin(2\pi y) sin(\pi t), -(sin(\pi y))^2 sin(\pi t) sin(2\pi x)\big) \;.$$

1.5.1 Évolution du maillage

À partir d'un maillage initial, on effectue une série de raffinement de maillage autours de la courbe Γ_0 donnée par la condition initale φ_0. Le maillage initial est donnée par la figure 1.11. Au cours des itérations, on adapte la maillage afin de localiser finement la courbe Γ ainsi que la position prédite de la solution à l'itération suivante. L'évolution du nombre des mailles et

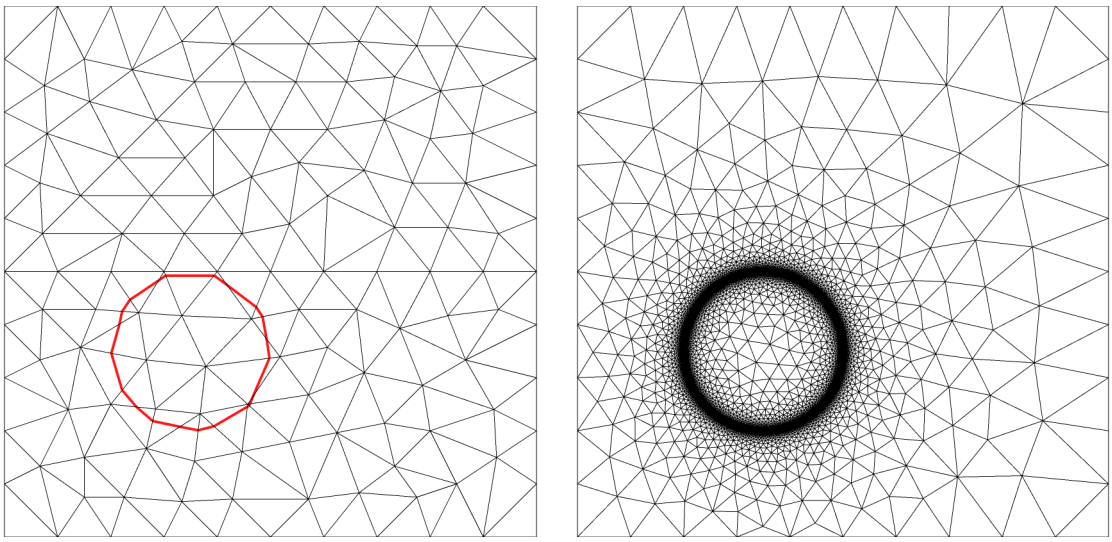

FIG. 1.11 – Préparation du maillage initial.

des sommets dépend nettement de l'étirement que subi la forme au cours de sa déformation, cette évolution est donnée à la figure 1.12 où on fixe les paramètres de l'adaptation du maillage $h_m = 10^{-3}$ et $h_M = 0.2$. On traçe à la figure Fig 1.14 l'évolution du maillage au cours d'une demi période ainsi que la courbe de niveau zéro Γ associée.

1.5.2 Évolution de l'erreur

On trçe l'évolution de l'erreur en fonction du pas de discrétisation pour une période de déformation à la figure 1.13. On remarque que la convergence est améliorée et on gagne un facteur 2 suite à l'adaptation de maillage.

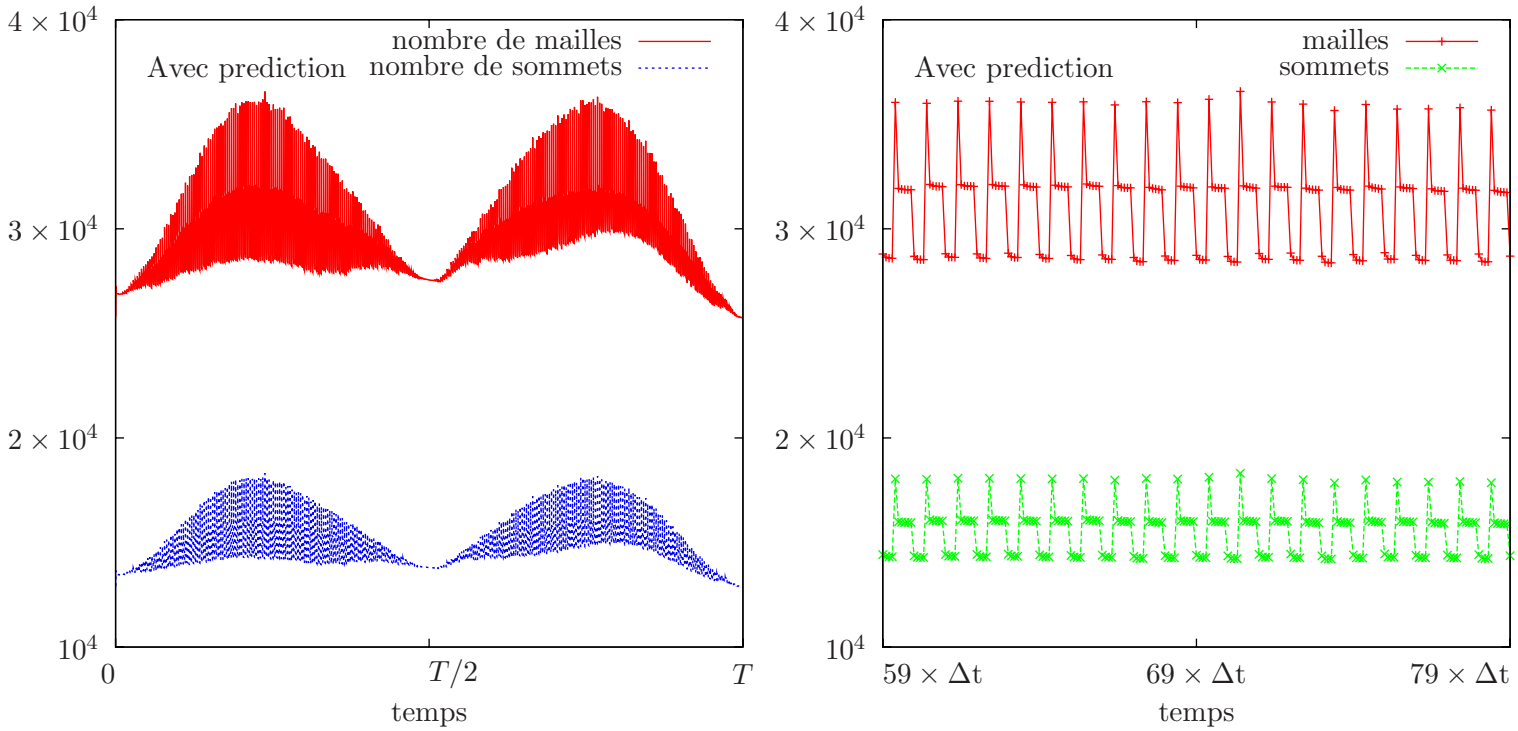

FIG. 1.12 – Évolution du nombre de mailles et de sommets du maillage au cours du temps.

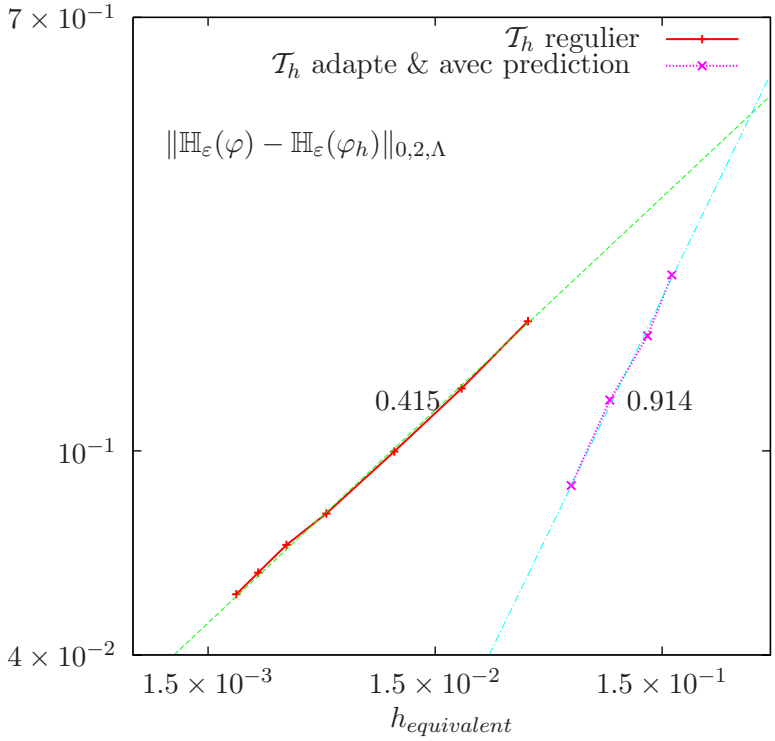

FIG. 1.13 – Convergence de l'erreur dans la norme $L^2(\Lambda)$ pour le test de Leveque.

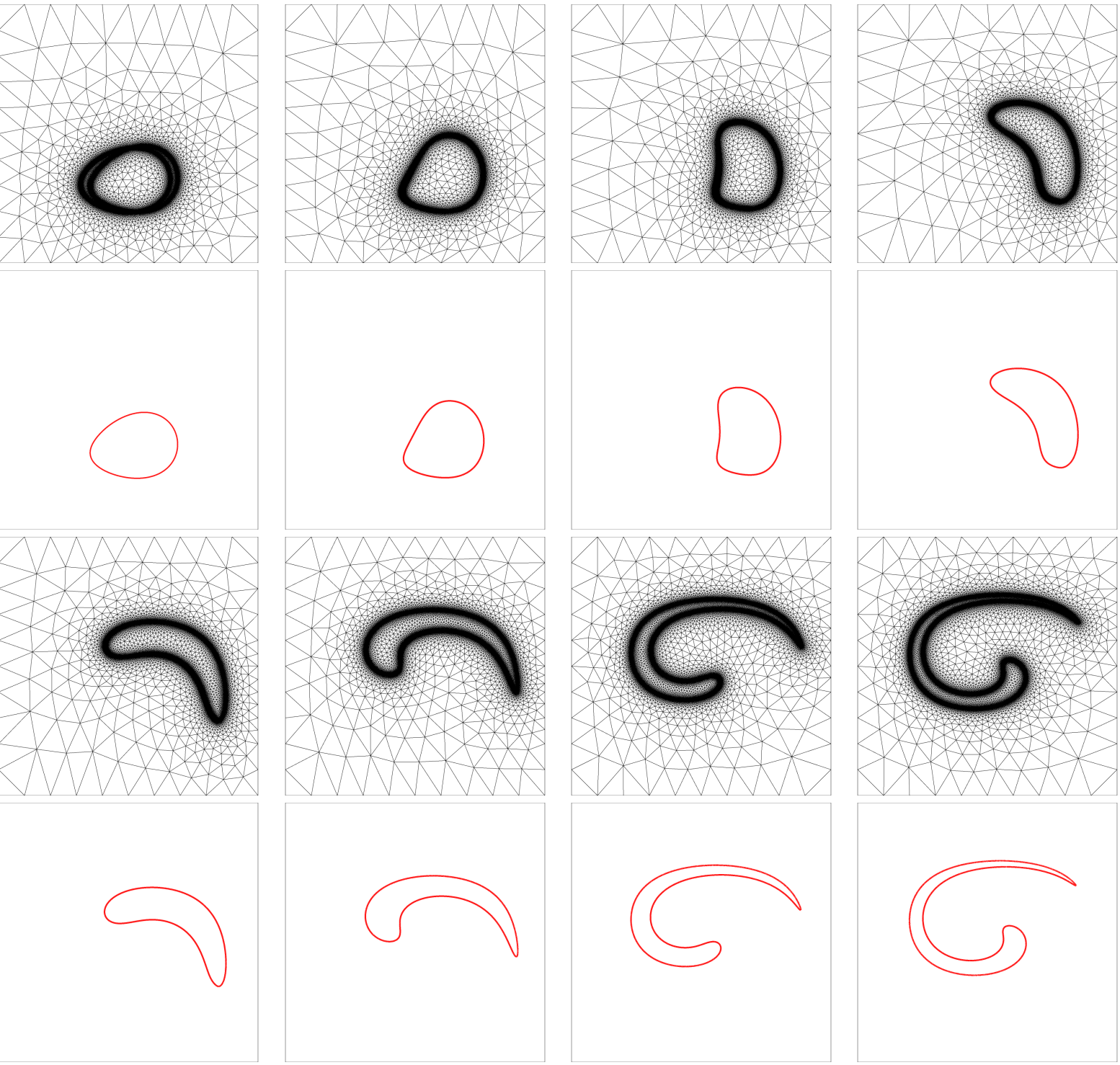

FIG. 1.14 – Évolution du maillage et de la courbe Γ correspondante.

Chapitre 2

Minimisation de l'énergie de courbure de Helfrich

Sommaire

2.1 Introduction **26**
2.2 Position du problème **26**
2.3 Formulation variationnelle **27**
2.4 La discrétisation du problème **33**
2.5 Calcul du résidu **37**
2.6 Simulations numériques **38**

L'objectif de ce chapitre est d'élaborer et valider un algorithme de minimisation de l'énergie de courbure de Canham et Helfrich sans les contraintes de conservation de volume et de surface. Nous écrivons en premier lieu le problème de minimisation d'énergie sous la forme d'un problème d'advection. Ensuite, nous écrivons une formulation variationnelle qu'on discrétise par éléments finis en espace. Finalement, nous présentons des simulations pour la validation numériques.

2.1 Introduction

Soit $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ un domaine borné, avec $d = 2$ ou 3, et $T > 0$. Pour tout $t \in]0, T[$, on définit une surface fermée orientable assez régulière $\Gamma(t) \subset \Lambda$ qu'on exprime sous la forme d'une courbe de niveau zéro d'une fonction $\varphi(t, .)$:

$$\Gamma(t) = \{(t, x) \in]0, T[\times\Lambda; \varphi(t, x) = 0\}\,.$$

On note $\Omega(t) \subset \Lambda$ le domaine où $\varphi(t, .)$ est négative, et par suite $\Gamma(t) = \partial\Omega(t)$. La courbe $\Gamma(t)$ est advectée par un champs de vitesse $\mathbf{u}$ et elle vérifie l'équation :

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\varphi = 0, \tag{2.1}$$

avec $D\varphi/Dt$ désigne la dérivée matérielle. Cette équation d'advection est complétée par une condition initiale $\varphi(t{=}0) = \varphi_0$ qu'on choisit une distance signée par rapport à $\Gamma(0)$. Le champs de vitesse $\mathbf{u}$ est minimise l'énergie de courbure de Canham et Helfrich :

$$\mathcal{J}(\Omega) = \int_\Gamma H^2 \mathrm{ds}\,. \tag{2.2}$$

Concernant les résultats théoriques établies concernant le problème de minimisation de l'énergie de Canham et Helfrich, on cite principalement les travaux de Simon en 1993 [90] et ceux de Kuwert et al. en 2001 [56]. Par ailleurs, Simonett a démontré en 2001 [91] l'existence d'une unique solution locale assez régulière pour toute surface initiale $\Gamma_0 \in \mathcal{C}^{2+\beta}$ avec $\beta > 0$. Il démontre aussi l'existence globale si la forme a été initialement proche d'une sphère avec une convergence exponentielle vers la sphère. Dans la seconde partie de ce manuscrit, on résolvera ce problème de minimisation sous contraintes de conservation de volume et de surface, ceci modélise physiquement les vésicules biologiques [101, 57]. Pour les approches numériques traitant ce problème, on cite principalement les travaux de Mayer et Simonett en 2002 [67]où ils proposent un schéma numérique dans le cadre de la méthode des différences finies pour des solutions axisymetriques.

2.2 Position du problème

Par des outils de dérivation de forme [89], on démontre dans [57], en supposant avoir assez de régularité sur Γ, que la dérivation de la fonctionnelle $\mathcal{J}(\Omega)$ (2.2) par rapport à la forme Ω dans une direction $\mathbf{u}$ est donnée par :

$$\mathcal{J}'(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left\{H\left(4K - H^2\right) - 2\,\Delta_s H\right\} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s\,. \tag{2.3}$$

On déduit que la direction de descente est définie par le vecteur :

$$\mathbf{u} = \left\{2\,\Delta_s H + H\left(H^2 - 4K\right)\right\} \mathbf{n}\,.$$

Ainsi, on déplace la forme :

$$\Omega_{\mathrm{t}} = (\mathbf{I} + \mathrm{t}\mathbf{u})(\Omega)\,,$$

avec $\mathrm{t} > 0$ est le pas de descente supposé infinétisimal. Par ailleurs, on obtient :

$$\mathcal{J}(\Omega_{\mathrm{t}}) = \mathcal{J}(\Omega) - \mathrm{t}\int_{\Gamma} \left\{2\,\Delta_s H + H\,(H^2 - 4K)\right\}^2 \,\mathrm{ds} + \mathcal{O}(\mathrm{t}^2)\,.$$

Ceci assure la minimisation de la fonction objective. Le champ $\mathbf{u}$ dépend des variables $\varphi, H, K, \mathbf{n}$ qui sont définies de mannière eulérienne dans le domaine Λ. Par conséquences, le vecteur $\mathbf{u} = \left[2\,\Delta_s H + H\,(H^2 - 4K)\right]\mathbf{n}$ représente la vitesse d'advection et on résoud le problème suivant :

$$\left\{\begin{array}{rll} \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} + \left[2\,\Delta_s H + H\,(H^2 - 4K)\right]|\nabla\varphi| & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\ \varphi(t,x) & = \varphi_{\partial\Lambda}(x) & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \partial_\nu\varphi(t,x) & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) & = \varphi_0(x) & \text{p.p. } x \in \Lambda\,, \end{array}\right. \tag{2.4}$$

où ν représente la normale définie sur le bord du domaine $\partial\Lambda$. Ainsi, en résolvant le problème (2.4), on advecte la surface Γ, qui est la courbe de niveau zéro de φ, dans la direction de descente $-\mathcal{J}'(\Omega)$.

Dans la section suivante, l'objectif est de trouver une formulation variationnelle associée à la formulation forte du problème (2.4). On donnera par la suite un algorithme de résolution numérique.

2.3 Formulation variationnelle

On commence par rappeler la formule du co-aire ainsi que la formule de Green pour des opérateurs surfaciques.

Formule du co-aire (voir [32], page 118) : On considère un fonction lipschitzienne $\varphi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ tel que inf-ess$|\nabla\varphi| > 0$ et soit un fonction intégrable $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$. $\forall\eta > 0$,

$$\int_{|\nabla\varphi|<\eta} g(x)\mathrm{dx} = \int_{-\eta}^{\eta}\int_{\varphi(x)=z} g(x)|\nabla\varphi|^{-1}\mathrm{dsdz}\,. \tag{2.5}$$

Formule de Green pour les opérateurs surfaciques : On considère une surface Γ régulière, orientable et fermée de dimension $(d-1)$ et soient deux fonctions $g \in H^1(\Gamma)$ et $\mathbf{v} \in H^1(\Gamma)^d$. On note $\mathbf{n}$ la normale sortante unitaire à Γ, alors :

$$\int_{\Gamma} \nabla_s g.\mathbf{v}ds + \int_{\Gamma} g\nabla_s.\mathbf{v}ds - \int_{\Gamma} g(\nabla.\mathbf{n})\mathbf{v}.\mathbf{n}ds = 0\,. \tag{2.6}$$

Cette formule a été démontrée dans l'annexe du papier [57]. Afin d'extraire la formulation variationnelle du problème qu'on résoud, on démontre, tout en supposant avoir assez de régularité sur la courbe Γ, le résultat suivant :

Résultat préliminaire :

$$H(H^2 - 4K) \;=\; 2H\nabla.\left(\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right) \;-\; \nabla.(H^2\mathbf{n})\,. \tag{2.7}$$

★ **Démonstration du résultat préliminaire** (2.7) **:** En utilisant la convention de sommation des indices répétés, on a :

$$\begin{aligned}
\nabla\mathbf{n} : \nabla\mathbf{n}^T &= \partial_j n_i\, \partial_i n_j = \partial_j\left(n_i \partial_i n_j\right) - n_i \partial_j \partial_i n_j \\
&= \partial_j\left(n_i \partial_i n_j\right) - n_i \partial_i\left(\partial_j n_j\right) \\
&= \nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - \mathbf{n}.\nabla H \\
&= \nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - \left[\nabla.(H\mathbf{n}) - H^2\right].
\end{aligned}$$

On a démontré dans le papier [57] que $2K = H^2 - \nabla\mathbf{n} : \nabla\mathbf{n}^T$. Par conséquent, on a :

$$\begin{aligned}
H(H^2 - 4K) &= H\left(-H^2 + 2\nabla\mathbf{n} : \nabla\mathbf{n}^T\right) \\
&= 2H\nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - H^3 - 2H\mathbf{n}.\nabla H \\
&= 2H\nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - H^3 - \left[\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) - H^3\right] \\
&= 2H\nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right). \qquad (2.8)
\end{aligned}$$

Il est aussi utile d'écrire le premier terme dans l'expression précédente, en fonction de la fonction de niveau φ, ce qui peut être utilisé dans l'élaboration de la formulation variationnelle. En utilisant la convention de la sommation des indices répétés, on a :

$$\partial_j|\nabla\varphi| = \partial_j\sqrt{\nabla\varphi.\nabla\varphi} = \partial_j\sqrt{\partial_k\varphi\;\partial_k\varphi} = \frac{\partial_j\partial_k\varphi\;\partial_k\varphi}{|\nabla\varphi|}.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
(\nabla\mathbf{n})_{ij} &= \partial_j\left(\frac{\partial_i\varphi}{|\nabla\varphi|}\right) = \frac{|\nabla\varphi|\partial_j\partial_i\varphi - \partial_i\varphi\partial_j|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|^2} \\
&= \frac{\partial_j\partial_i\varphi}{|\nabla\varphi|} - \frac{\partial_i\varphi\;\partial_j\partial_k\varphi\;\partial_k\varphi}{|\nabla\varphi|^3} \\
&= \frac{1}{|\nabla\varphi|}\left(\partial_j\partial_i\varphi - \frac{\partial_i\varphi}{|\nabla\varphi|}\,\frac{\partial_k\varphi}{|\nabla\varphi|}\,\partial_k\partial_j\varphi\right). \qquad (2.9)
\end{aligned}$$

La relation (2.9) est équivalente à :

$$\nabla\mathbf{n} = \frac{1}{|\nabla\varphi|}\left(\mathbf{I} - \mathbf{n}\otimes\mathbf{n}\right).\nabla\nabla\varphi. \qquad (2.10)$$

Par ailleurs, on a :

$$\nabla(\nabla\varphi.\nabla\varphi) = 2(\nabla\varphi.\nabla)\nabla\varphi + 2\nabla\varphi\wedge\mathbf{rot}(\nabla\varphi) = 2\nabla(\nabla\varphi).\nabla\varphi.$$

Ainsi,

$$\nabla\nabla\varphi.\mathbf{n} = \frac{\nabla(\nabla\varphi).\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} = \frac{1}{2}\frac{\nabla\left(|\nabla\varphi|^2\right)}{|\nabla\varphi|} = \nabla|\nabla\varphi|.$$

En utilisant (2.10), on obtient :

$$\begin{aligned}(\mathbf{n}.\nabla)\mathbf{n} &= (\nabla\mathbf{n}).\mathbf{n} = \frac{1}{|\nabla\varphi|}\left((\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}).\nabla\nabla\varphi\right).\mathbf{n} \\ &= \frac{1}{|\nabla\varphi|}\left(\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}\right)\left(\nabla\nabla\varphi.\mathbf{n}\right) = \frac{1}{|\nabla\varphi|}\left(\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}\right)\nabla|\nabla\varphi| = \frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}. \quad (2.11)\end{aligned}$$

En utilisant (2.8) et (2.11), on obtient le résultat (2.7). □

On s'intéresse maintenant à l'extraction de la formulation variationnelle du problème (2.4). Pour tout $\xi \in H_0^1(\Lambda)$, Le problème (2.4) implique :

$$\int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\xi \mathrm{dx} + \int_\Lambda \left[2\,\Delta_s H + H\left(H^2-4K\right)\right]|\nabla\varphi|\xi\mathrm{dx} = 0\,. \quad (2.12)$$

En utilisant les lemmes (2.5) et (2.6), on a :

$$\begin{aligned}\int_\Lambda |\nabla\varphi|\Delta_s H\ \xi\mathrm{dx} &= \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}}\int_{\varphi(x)=z}\Delta_s H\xi\,\mathrm{dsdz} \\ &= \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}}\left(-\int_{\varphi(x)=z}\nabla_s H.\nabla_s\xi\,\mathrm{ds} + \int_{\varphi(x)=z}\xi H\underbrace{\mathbf{n}.\nabla_s H}_{0}\,\mathrm{ds}\right)\mathrm{dz} \\ &= -\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla_s H.\nabla_s\xi\,\mathrm{dx}\,.\end{aligned}$$

Le projecteur surfacique $(\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n})$ vérifie :

$$(\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n})^2 = (\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n})^T = (\mathbf{I}-\mathbf{n}\otimes\mathbf{n})\ .$$

Par conséquent, on a :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\Delta_s H\ \xi\mathrm{dx} = -\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla_s H.\nabla\xi\,\mathrm{dx}\,. \quad (2.13)$$

En utilisant le résultat préliminaire (2.7), la formule de Green et la condition aux bords $\partial_\nu\varphi = 0$ de (2.4), on obtient :

$$\begin{aligned}\int_\Lambda |\nabla\varphi|H(H^2-4K)\ \xi\mathrm{dx} &= 2\int_\Lambda |\nabla\varphi|H\nabla.\left(\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right)\ \xi\mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla.(H^2\mathbf{n})\ \xi\mathrm{dx} \\ &= -2\int_\Lambda \frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}.\nabla\left(|\nabla\varphi|H\xi\right)\ \mathrm{dx} + \int_\Lambda H^2\mathbf{n}.\nabla(|\nabla\varphi|\xi)\ \mathrm{dx} \\ &= -2\int_\Lambda H\nabla_s|\nabla\varphi|.\nabla\xi\ \mathrm{dx} - 2\int_\Lambda \frac{\nabla|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}.\nabla_s\left(H|\nabla\varphi|\right)\ \xi\,\mathrm{dx} \\ &\quad + \int_\Lambda \frac{H^2}{|\nabla\varphi|}\nabla\varphi.\nabla(|\nabla\varphi|)\ \xi\ \mathrm{dx} + \int_\Lambda H^2\nabla\varphi.\nabla\xi\ \mathrm{dx}\,.\end{aligned}$$

Or, on a $|\nabla\varphi|\nabla_s H + H\nabla_s|\nabla\varphi| = \nabla_s(|\nabla\varphi|H)$. D'après (2.13), l'équation (2.12) est équivalente à :

$$\begin{aligned}&\int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\xi\mathrm{dx} - 2\int_\Lambda \nabla_s(H|\nabla\varphi|).\nabla\xi\,\mathrm{dx} + \int_\Lambda H^2\nabla\varphi.\nabla\xi\ \mathrm{dx} \\ &-2\int_\Lambda \frac{\nabla|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}.\nabla_s\left(H|\nabla\varphi|\right)\xi\ \mathrm{dx} + \int_\Lambda \frac{H^2}{|\nabla\varphi|}\nabla\varphi.\nabla(|\nabla\varphi|)\ \xi\ \mathrm{dx} = 0\,. \quad (2.14)\end{aligned}$$

Afin d'abaisser un ordre de dérivation par rapport à φ, on réécrit l'équation (2.14) en introduisant une variable mixte qu'on note $\psi = -H|\nabla\varphi|$. On obtient la formulation mixte suivante :

$$\int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\xi \mathrm{dx} + 2\int_\Lambda \nabla_s(\psi).\nabla\xi\,\mathrm{dx} + \int_\Lambda \frac{\psi^2}{|\nabla\varphi|^2}\nabla\varphi.\nabla\xi\,\mathrm{dx} \tag{2.15}$$

$$+2\int_\Lambda \frac{\nabla|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}.\nabla_s(\psi)\,\xi\,\mathrm{dx} + \int_\Lambda \frac{\psi^2}{|\nabla\varphi|^3}\nabla\varphi.\nabla(|\nabla\varphi|)\,\xi\,\mathrm{dx} = 0\,, \tag{2.16}$$

$$\int_\Lambda \frac{\psi}{|\nabla\varphi|}\zeta\,\mathrm{dx} - \int_\Lambda \frac{1}{|\nabla\varphi|}\nabla\varphi.\nabla\zeta\,\mathrm{dx} = 0\,,$$

ceci $\forall\xi \in H_0^1(\Lambda)\,,\ \forall\zeta \in H^1(\Lambda)$.

Cependant, ce qui a accaparé notre attention, pour l'implémentation numérique de la méthode des lignes de niveaux, est qu'il existe une zone particulière pour laquelle la normale extérieure sortante $\mathbf{n}$ est discontinue. On illustre cette zone pour trois formes différentes de Γ (voir figure 2.1). On note par $\{s_i, i \leq I\}$ l'ensemble des points appartenant à cette zone, les points s_i sont cartérisés par un gradient $|\nabla\varphi|(s_i)$ nul ou bien proche de l'erreur machine et cette zone, appelée le squelette de φ, est plus importante dans le cas des topologies complexes. La figure 2.1 montre que $|\nabla\varphi|$ est de l'ordre de 10^{-15} sur le squelette.
En conclusion, il s'agit donc d'une zone singulière numériquement et il faut absolument éviter toute division par $|\nabla\varphi|$ dans les formes trilinéaires de la formulation (2.15), (2.16).

Pour palier à cela, on introduit un couple d'entiers naturels $(m, n) \in \mathbb{N}^2$ et deux nouvelles fonctions tests $(\widetilde{\xi}, \widetilde{\zeta}) \in H_0^1(\Lambda) \times H^1(\Lambda)$ tels que $\xi = |\nabla\varphi|^n\widetilde{\xi}$ et $\zeta = |\nabla\varphi|^m\widetilde{\zeta}$. On obtient la formulation mixte suivante :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|^n\frac{\partial\varphi}{\partial t}\widetilde{\xi}\mathrm{dx} + 2\int_\Lambda |\nabla\varphi|^n\nabla_s(\psi).\nabla\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} + \int_\Lambda |\nabla\varphi|^{n-2}\psi^2\nabla\varphi.\nabla\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx}$$

$$+2\int_\Lambda (n+1)|\nabla\varphi|^{n-1}\nabla|\nabla\varphi|.\nabla_s(\psi)\,\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} + \int_\Lambda (n+1)|\nabla\varphi|^{n-3}\psi^2\nabla\varphi.\nabla(|\nabla\varphi|)\,\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} = 0\,,$$

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|^{m-1}\psi\widetilde{\zeta}\,\mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|^{m-1}\nabla\varphi.\nabla\widetilde{\zeta}\,\mathrm{dx} = \int_\Lambda m|\nabla\varphi|^{m-2}\nabla\varphi.\nabla|\nabla\varphi|\widetilde{\zeta}\,\mathrm{dx}\,. \tag{2.17}$$

Afin d'éliminer toute division par $|\nabla\varphi|$, un choix à prendre est $(n, m) = (3, 2)$, ceci permet d'éviter toute éventuelle division par zéro. Dans la suite de ce manuscrit, on omettra les symbôles tildes et on introduit une seconde variable mixte $\gamma = \nabla|\nabla\varphi| \in H_0(\mathrm{div}, \Lambda)$ afin d'abaisser encore le degré de dérivation de φ, avec :

$$H_0(\mathrm{div}, \Lambda) = \left\{\tau \in L^2(\Lambda)^d;\ \nabla.\tau \in L^2(\Lambda);\ \tau.\nu_{\partial\Lambda} = 0, \partial\Lambda\right\}\,.$$

Choix des espaces fonctionnels

Inégalité de Holder

En analyse, l'inégalité de Holder, du nom de Otto Holder, est une inégalité fondamentale relative aux espaces L^p : soit Λ un espace mesuré, soient $1 \leq p, q \leq \infty$ avec $1/p + 1/q \leq 1$, soit f et g deux fonctions définies sur Λ alors,

$$\int_\Lambda fg \leq \left(\int_\Lambda f^p\right)^{1/p}\left(\int_\Lambda g^q\right)^{1/q}\,.$$

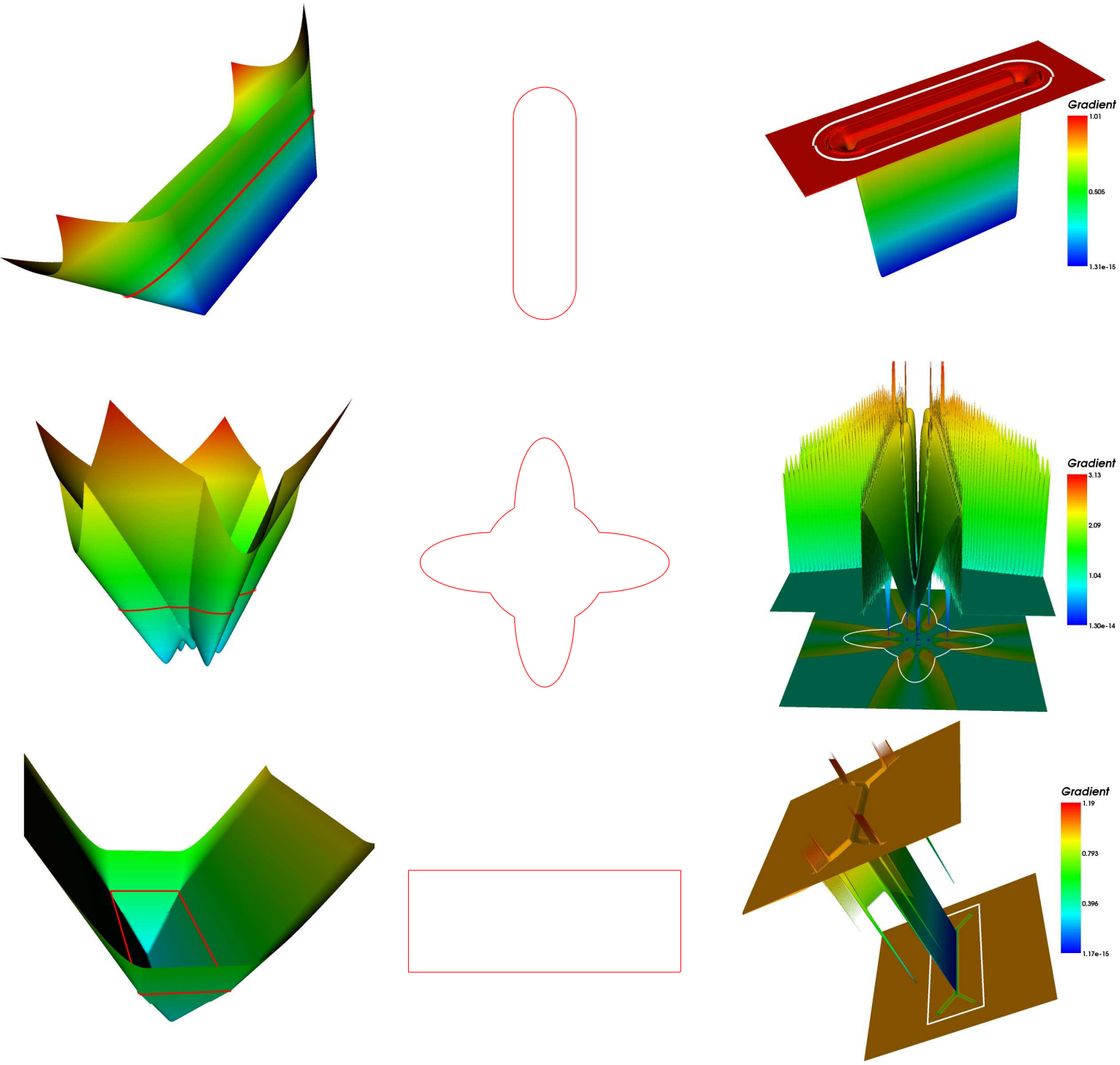

FIG. 2.1 – Illustration de la zone des singularités numériques pour trois formes différentes : (a) : la fonction de niveau φ , (b) : la fonction de niveau zéro Γ et (c) : la quantité $|\nabla\varphi|$.

Par conséquent, si f est une fonction de $L^p(\Lambda)$ et g appartient à $L^q(\Lambda)$, alors fg appartient à $L^1(\Lambda)$. Ainsi, pour $p = q = 2$, on obtient l'inégalité de Cauchy-Schwarz. Une autre combinaison souvent utilisée est pour $p = 1$ et $q = \infty$. Finalement, il y a une généralisation de cette inégalité : Soient les fonctions $f_k \in L^{p_k}(\Lambda)$ avec $\sum_{k=1}^{n} 1/p_k \leq 1$, alors on a :

$$f_1 ... f_n \in L^1(\Lambda) \text{ et } \int_\Lambda f_1 ... f_n \leq \left(\int_\Lambda f_1^{p_1}\right)^{1/p_1} ... \left(\int_\Lambda f_n^{p_n}\right)^{1/p_n} .$$

Régularités en espace

Étant donné la condition initiale et les conditions sur le bord à préciser par la suite, on cherche $\mathbf{n} \in L^\infty(\Lambda)^d$, $\gamma \in H_0(\text{div}, \Lambda) \cap L^\infty(\Lambda)^d$, $\psi \in H^1(\Lambda) \cap L^\infty(\Lambda)$ et φ avec $\varphi - \varphi_{\partial\Lambda} \in H_0^1(\Lambda) \cap W^{1,\infty}(\Lambda)$.

Ceci pour les fonctions tests $\varsigma \in (L^2(\Lambda))^d$, $\tau \in H_0(\text{div}, \Lambda)$, $\zeta \in H^1(\Lambda)$, $\xi \in H_0^1(\Lambda)$. Pour ce choix de fonctions, on a :

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi\xi \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\psi \in L^2(\Lambda)$, $\xi \in L^2(\Lambda)$.

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla\varphi.\nabla\xi \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\nabla\varphi \in L^2(\Lambda)^2$, $\nabla\xi \in L^2(\Lambda)^2$.

$\int_\Lambda (\nabla\varphi.\gamma)\xi \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $\nabla\varphi \in L^\infty(\Lambda)^2$, $\gamma \in L^2(\Lambda)^2$, $\xi \in L^2(\Lambda)$.

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|^3 \nabla_s\psi.\nabla\zeta \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\nabla\psi \in L^2(\Lambda)^2$, $\nabla\zeta \in L^2(\Lambda)^2$, $\mathbb{P} = \mathbb{I} - \mathbf{n} \times \mathbf{n} \in L^\infty(\Lambda)^{d^2}$.

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi^2 \nabla\varphi.\nabla\zeta \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\psi \in L^\infty(\Lambda)$, $\nabla\varphi \in L^\infty(\Lambda)^2$, $\nabla\zeta \in L^2(\Lambda)^2$. On a pu choisir $\psi \in L^4(\Lambda)$ mais le choix pris sera justifié par la suite.

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|^2 (\nabla_s\psi.\gamma)\zeta \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $\mathbb{P} = \mathbb{I} - \mathbf{n} \times \mathbf{n} \in L^\infty(\Lambda)^{d^2}$, $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\nabla\psi \in L^2(\Lambda)^2$, $\gamma \in L^\infty(\Lambda)^2$, $\zeta \in L^2(\Lambda)^2$.

$\int_\Lambda \psi^2 (\nabla\varphi.\gamma)\zeta \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $\nabla\varphi \in L^2(\Lambda)^2$, $\gamma \in L^\infty(\Lambda)^2$, $\zeta \in L^2(\Lambda)^2$. C'est à ce niveau qu'il faut choisir $\psi \in L^\infty(\Lambda)$ au lieu de $\psi \in L^4(\Lambda)$.
Par ailleurs, on a uniquement $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)^2$. Néanmoins, on a besoin d'imposer $1/|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)^2$. Pour éviter cette condition, on ajoute une nouvelle équation :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\mathbf{n}.\varsigma \text{dx} = \int_\Lambda \nabla\varphi.\varsigma \text{dx}, \ \forall \varsigma \in (L^2(\Lambda))^d .$$

Pour vérifier que le projecteur surfacique $\mathbb{P} \in L^\infty(\Lambda)^{d^2}$, on choisit $\mathbf{n} \in L^\infty(\Lambda)^2$ au lieu de $\mathbf{n} \in L^2(\Lambda)^2$. Alors :

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\mathbf{n}.\varsigma \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\mathbf{n} \in L^\infty(\Lambda)^2$, $\varsigma \in L^2(\Lambda)^2$.

$\int_\Lambda \nabla\varphi.\varsigma \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $\nabla\varphi \in L^\infty(\Lambda)^2$, $\varsigma \in L^2(\Lambda)^2$.

$\int_\Lambda \gamma.\tau \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $\gamma \in L^2(\Lambda)^2$, $\tau \in L^2(\Lambda)^2$.

$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla.\tau \mathbf{dx} \leq \infty$ **car :** $|\nabla\varphi| \in L^\infty(\Lambda)$, $\nabla.\tau \in L^2(\Lambda)$.

Quant à la condition aux bords, on choisit $\varphi_{\partial\Lambda} \in H^1(\Lambda) \cap W^{1,\infty}(\Lambda)$.

Régularités en temps

Il faut éviter une variation discontinue de φ à l'instant $t = 0^+$. Donc, pour donner un sens à la condition initiale, on choisit $\varphi \in \mathcal{C}^0\left(]0,T[\,;L^2(\Lambda)\right)$. Il faut également donner un sens à $\int_\Lambda |\nabla\varphi|^3\partial_t\varphi\zeta\mathrm{dx} \leq \infty$ avec $|\nabla\varphi|(t) \in L^\infty(\Lambda)$ et $\zeta \in L^2(\Lambda)$. Ce qui conduit au choix :

$$\varphi - \varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right) \cap L^2\left(]0,T[\,;H_0^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)\ .$$

Finalement, on a :

$$\psi \in L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)\right)\ ,\ \ \mathbf{n} \in L^2\left(]0,T[\,;L^\infty(\Lambda)^d\right)\ ,$$

$$\gamma \in L^2\left(]0,T[\,;H_0(\mathrm{div},\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)^d\right)\ ,\ \ \varphi_0 \in L^2(\Lambda)\,.$$

Par conséquences, on a la formulation variationnelle suivante :

Formulation faible

Étant donné $\varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right) \cap L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$ et $\varphi_0 \in L^2(\Lambda)$.
Trouver $\mathbf{n} \in L^2\left(]0,T[\,;L^\infty(\Lambda)^d\right)$, $\gamma \in L^2\left(]0,T[\,;H_0(\mathrm{div},\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)^d\right)$,
$\psi \in L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)\right)$ et φ avec $\varphi-\varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right)\cap L^2\left(]0,T[\,;H_0^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$ tels que :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\mathbf{n}.\varsigma\mathrm{dx} = \int_\Lambda \nabla\varphi.\varsigma\mathrm{dx}\,,\quad \forall\varsigma \in (L^2(\Lambda))^d\,, \tag{2.18}$$

$$\int_\Lambda \gamma.\tau\mathrm{dx} = -\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla.\tau\mathrm{dx}\,,\quad \forall\tau \in H_0(\mathrm{div},\Lambda)\,, \tag{2.19}$$

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi\xi\mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla\varphi.\nabla\xi\mathrm{dx} = 2\int_\Lambda (\nabla\varphi.\gamma)\xi\mathrm{dx}\,,\quad \forall\xi \in H^1(\Lambda)\,, \tag{2.20}$$

$$\begin{aligned} 2\int_\Lambda |\nabla\varphi|^3\nabla_s\psi.\nabla\zeta\mathrm{dx} + \int_\Lambda |\nabla\varphi|^3\partial_t\varphi\zeta\mathrm{dx} + \int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi^2\nabla\varphi.\nabla\zeta\mathrm{dx} \\ +8\int_\Lambda |\nabla\varphi|^2(\nabla_s\psi.\gamma)\zeta\mathrm{dx} + 4\int_\Lambda \psi^2(\nabla\varphi.\gamma)\zeta\mathrm{dx} = 0\,,\quad \forall\zeta \in H_0^1(\Lambda)\,. \end{aligned} \tag{2.21}$$

Cette formulation variationnelle fait appel naturellement à une méthode d'éléments finis mixte pour la résolution numérique.

2.4 La discrétisation du problème

Dans cette section, on s'intéresse à la discrétisation par la méthode des éléments finis. Concernant le problème de redistanciation de la fonction de niveau φ, sa discrétisation est donnée dans le papier [58] : voir le premier chapitre.

2.4.1 Discrétisation en temps par différences finies

Soit $0 = t^0 < t^1 < t^2 < ... < t^N = T$ la subdivision de l'intervalle de temps $[0, T]$, on note $\triangle t = t^{n+1} - t^n$ le $n^{\text{ième}}$ pas de temps, $n = 1, 2, .., N$. On utilise un schéma de discrétisation de second ordre en temps. Soit $y \in \mathcal{C}^1([0, T])$ et $y'(t)$ la dérivation en temps $\dfrac{\partial y}{\partial t}$, alors $\forall t \in]0, T[$, $\forall n > 1$,

$$y'(t) \;=\; \frac{3y(t) - 4y(t - \triangle t) + y(t - 2\triangle t)}{2\triangle t} \;+\; \triangle t^2\, \frac{y^{(3)}(t)}{3}\,.$$

On utilise le schéma suivant :

$$\begin{aligned} y'(t) \;&\approx\; \frac{y^{n+1} - y^n}{(2/3)\triangle t}\,, && \text{si } n \,=\, 1\,, \\ y'(t) \;&\approx\; \frac{3y^{n+1} - 4y^n + y^{n-1}}{2\triangle t}\,, && \text{sinon}\ . \end{aligned} \tag{2.22}$$

En utilisant la discrétisation (2.22), on a une erreur qui évolue en $\mathcal{O}\left(h^k\right) + \mathcal{O}\left(\triangle t^2\right)$, où k représente le degré de discrétisation spatiale de la méthode d'éléments finis. On introduit les formes trilinéaires suivantes $m(\,,\,,\,)$ et $a(\,,\,,\,)$ données par :

$$\begin{aligned} m(\omega, \xi, \zeta) \;&=\; \int_\Lambda \xi\, \zeta\, \omega\ \mathrm{dx}\,, && \text{avec } \omega \in L^\infty(\Lambda)^d,\ \xi \in L^2(\Lambda),\ \zeta \in L^2(\Lambda)\ , \\ a(\omega, \xi, \zeta) \;&=\; \int_\Lambda (\omega \nabla \xi)\,.\nabla \zeta\ \mathrm{dx}\,, && \text{avec } \omega \in L^\infty(\Lambda)^{d\times d},\ \xi \in H^1(\Lambda),\ \zeta \in H^1(\Lambda)\,. \end{aligned} \tag{2.23}$$

On utilise une discrétisation explicite des équations (2.19) et (2.18). Concernant les équations (2.20) et (2.21), on implicite le maximum de termes. On note par 1 la fonction unité et on a la formulation variationelle $(FV)_{\triangle t}$ suivante :

Étant donné $\varphi^n_{\partial\Lambda} \in H^1(\Lambda) \cap W^{1,\infty}(\Lambda)$, $\varphi^0_0 \,=\, \varphi^{-1}_0 \in L^2(\Lambda)$, $\mathbf{n}^n \in L^\infty(\Lambda)^d$, $\gamma^n \in H_0(\mathrm{div}, \Lambda) \cap L^\infty(\Lambda)^d$ et $(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$,
trouver $\psi^{n+1} \in H^1(\Lambda) \cap L^\infty(\Lambda)$ et φ^{n+1} avec $\varphi^{n+1} - \varphi^n_{\partial\Lambda} \in H^1_0(\Lambda) \cap W^{1,\infty}(\Lambda)$ tels que :

$$m\left(\,|\nabla\varphi^n|\,,\, \psi^{n+1}\,,\, \xi\,\right) \,-\, a\left(\,|\nabla\varphi^n|\,\mathbf{I}\,,\, \varphi^{n+1}\,,\, \xi\,\right) \,=\, 2\,m\left(\,\nabla\varphi^n.\gamma^n\,,\, 1\,,\, \xi\,\right)\,, \tag{2.24}$$

$$\begin{aligned} 2a\left(\,|\nabla\varphi^n|^3(\mathbf{I} - \mathbf{n}^n \otimes \mathbf{n}^n)\,,\, \psi^{n+1}\,,\, \zeta\,\right) \,+\, \frac{3}{2\triangle t} m\left(\,|\nabla\varphi^n|^3\,,\, \varphi^{n+1}\,,\, \zeta\,\right) \\ +\, a\left(\,|\nabla\varphi^n|\,(\psi^n)^2\ \mathbf{I}\,,\, \varphi^{n+1}\,,\, \zeta\,\right) \,=\, \frac{1}{2\triangle t} m\left(\,|\nabla\varphi^n|^3\left(4\varphi^n \,-\, \varphi^{n-1}\right)\,,\, 1\,,\, \zeta\,\right) \\ -\, m\left(\,8\,|\nabla\varphi^n|^2\,(\mathbf{I} - \mathbf{n}^n \otimes \mathbf{n}^n)\,\nabla\psi^n.\gamma^n \,+\, 4\,(\psi^n)^2\,(\nabla\varphi^n.\gamma^n)\,,\, 1\,,\, \zeta\,\right)\,, \end{aligned} \tag{2.25}$$

ceci, $\forall \zeta \in H^1_0(\Lambda)\,,\ \forall \xi \in H^1(\Lambda)\,.$

2.4.2 Discrétisation en espace par éléments finis

Soit Λ_h une approximation polygonale du domaine Λ et $\mathcal{T}_h$ une triangulation de Λ_h. On note par x_i , $i = 1, ..., N$ les noeuds de la triangulation et par ϕ_i , $i = 1, .., N$ les fonctions de base de

degré $\mathbb{P}_1$ continues construites dans $\mathcal{T}_h$. Afin de construire l'approximation par éléments finis de la formulation mixte (2.20, 2.19, 2.18, 2.21), on introduit les espaces de discrétisation suivants :

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}_h &= \left\{\zeta_h \in \mathcal{C}^0\left(\overline{\Lambda}\right) \mid \zeta_{h|K} \in \mathbb{P}^1(K)\,,\, \forall K \in \mathcal{T}_h\right\}\,, && (2.26)\\
\mathbb{V}_h(\xi_0) &= \mathbb{H}_h \cap H_0^1(\Lambda) + \pi_h\left(\widetilde{\xi_0}\right)\,, && (2.27)\\
\mathbb{N}_h &= \mathbb{H}_h^d\,, && (2.28)\\
\mathbb{G}_h &= \mathbb{N}_h \cap H_0(\mathrm{div}, \Lambda)\,, && (2.29)
\end{aligned}$$

où π_h représentant l'interpolant de Lagrange de type $\mathbb{P}_1$ sur la frontière $\partial\Lambda$. Étant donné $\xi_0 \in H^{1/2}(\partial\Lambda)$, $\widetilde{\xi_0}$ représente le relèvement harmonique dans $H^1(\Lambda)$ c.à.d il verifie le problème stationnaire :

$$\begin{cases} \triangle\widetilde{\xi_0} &= 0 \quad \text{p.p. } x \in \Lambda\,,\\ \widetilde{\xi_0} &= \xi_0 \quad \text{p.p. } x \in \partial\Lambda\,. \end{cases}$$

Discrétisation de l'équation (2.18)

On considère $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda})$ et on souhaite calculer $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}_h$ en discrétisant l'équation (2.18). Remarquons que $\nabla\varphi_h^n \in (\mathbb{P}^0)^d$, $\forall K \in \mathcal{T}_h$. On définit $\mathbf{g}_h^n$ comme étant la projection L^2 de $\nabla\varphi_h^n$ dans $\mathbb{N}_h$ par :

$$\int_\Lambda \mathbf{g}_h^n.\varsigma_h \mathrm{dx} = \int_\Lambda \nabla\varphi_h^n.\varsigma_h \mathrm{dx},\ \forall \varsigma_h \in \mathbb{N}_h\,. \tag{2.30}$$

Afin d'éviter de résoudre un nouveau système linéaire, on peux recourir au procédé de la condensation de masse qui vise à remplacer la matrice du membre de gauche de (2.30) par une matrice diagonale, et ainsi de calculer simplement $\mathbf{g}_h^n$ [85]. Enfin, on obtient l'approximation de la normale par :

$$\mathbf{n}_h^n(x_i) = \begin{cases} \dfrac{\mathbf{g}_h^n(x_i)}{|\mathbf{g}_h^n(x_i)|}\,, & \text{si } |\mathbf{g}_h^n(x_i)| \neq 0\,,\\ 0\,, & \text{sinon}\ . \end{cases} \tag{2.31}$$

Discrétisation de l'équation (2.19)

On utilise un schéma explicite pour discrétiser $\gamma^n \in \mathbb{G}_h$. Étant donné la fonction de niveau $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda})$, il s'agit de trouver γ_h^n tel que $\forall\tau \in \mathbb{G}h$, on a :

$$\int_{\Lambda_h} \gamma_h^n.\tau \mathrm{dx} = -\int_{\Lambda_h} |\nabla\varphi_h^n|\nabla.\tau \mathrm{dx}\,.$$

Discrétisation de la formulation $(FV)_{\triangle t}$

D'après la formulation variationelle $(FV)_{\triangle t}$ (2.25), on a la formulation variationelle $(\widetilde{FV})_{\triangle t,h}$ qui utilise un calcul exact des formes trilinéaires :

Pour $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda})$, $\psi_h^n \in \mathbb{H}_h$, $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}_h$ et $\gamma_h^n \in \mathbb{G}_h$ donnés,

trouver $\left(\varphi_h^{n+1}, \psi_h^{n+1}\right) \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}) \times \mathbb{H}_h$ tels que $\forall\,(\zeta,\xi) \in \mathbb{V}_h(0) \times \mathbb{H}_h$, on a :

$$m\left(|\nabla\varphi_h^n|\,,\,\psi_h^{n+1}\,,\,\xi\right) - a\left(|\nabla\varphi_h^n|\,\mathbf{I}\,,\,\varphi_h^{n+1}\,,\,\xi\right) = 2\,m\left(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\,,\,1\,,\,\xi\right), \tag{2.32}$$

$$\begin{aligned} 2\,a\left(|\nabla\varphi_h^n|^3(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\,,\,\psi_h^{n+1}\,,\,\zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t}m\left(|\nabla\varphi_h^n|^3\,,\,\varphi_h^{n+1}\,,\,\zeta\right) \\ + a\left(|\nabla\varphi_h^n|\,(\psi_h^n)^2\,\mathbf{I}\,,\,\varphi_h^{n+1}\,,\,\zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t}m\left(|\nabla\varphi_h^n|^3\left(4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right)\,,\,1\,,\,\zeta\right) \\ - m\left(8\,|\nabla\varphi_h^n|^2\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\,\nabla\psi_h^n.\gamma_h^n + 4\,(\psi_h^n)^2\,(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n)\,,\,1\,,\,\zeta\right). \end{aligned} \tag{2.33}$$

Formulation faible $(\widetilde{FV})_{\triangle t,h}$

Dans la formulation variationelle $(FV)_{\triangle t,h}$(2.32-2.33), on calcule exactement les intégrales dans les différentes formes trilinéaires. Néanmoins, on utilise l'environnement des éléments finis Rheolef [85] où un interpolant de Lagrange $\mathbb{P}^1$, noté π_h, est utilisé pour approcher les différents poids dans les formes bilinéaires avec poids. On obtient la formulation variationelle suivante $(FV)_{\triangle t,h}$ avec un calcul approché des formes trilinéaires : Pour $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda})$, $\psi_h^n \in \mathbb{H}_h$, $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}_h$ et $\gamma_h^n \in \mathbb{G}_h$ donnés,
trouver $\left(\varphi_h^{n+1}, \psi_h^{n+1}\right) \in \mathbb{V}_h(\varphi_0) \times \mathbb{H}_h$ tels que $\forall\,(\zeta,\xi) \in \mathbb{V}_h(0) \times \mathbb{H}_h$, on a :

$$m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\right]\,,\,\psi_h^{n+1}\,,\,\xi\right) - a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\,\mathbf{I}\right]\,,\,\varphi_h^{n+1}\,,\,\xi\right) = 2\,m\left(\pi_h\left[\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\right]\,,\,1\,,\,\xi\right), \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned} a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^3(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\right]\,,\,\psi_h^{n+1}\,,\,\zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t}m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^3\right]\,,\,\varphi_h^{n+1}\,,\,\zeta\right) \\ + \frac{1}{2}a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\,(\psi_h^n)^2\,\mathbf{I}\right]\,,\,\varphi_h^{n+1}\,,\,\zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t}m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^3\left(4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right)\right]\,,\,1\,,\,\zeta\right) \\ - m\left(\pi_h\left[8\,|\nabla\varphi_h^n|^2\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\,\nabla\psi_h^n.\gamma_h^n + 4\,(\psi_h^n)^2\,(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n)\right]\,,\,1\,,\,\zeta\right). \end{aligned} \tag{2.35}$$

Formulation par condensation de la matrice de masse

Soit π_h l'interpolateur de Lagrange par des éléments de type $\mathbb{P}^1$. Les notations suivantes seront utilisées dans la formulation variationnelle pour désigner les matrices de masse et de rigidité avec poids. Soient $\mathbb{X}_h$ et $\mathbb{Y}_h$ deux espaces de dimension finis. Soient $m : \mathbb{X}_h \times \mathbb{Y}_h \to \mathbb{R}$ et $a : \mathbb{X}_h \times \mathbb{Y}_h \to \mathbb{R}$ les deux formes bilinéaires suivantes :

$$\begin{aligned} m(u,v;w) &= \int_\Lambda \pi_h\,(w)\;uv\mathrm{dx}\,, \\ a(u,v;\mathbf{w}) &= \int_\Lambda \left(\pi_h\,(\mathbf{w})\,\nabla u\right).\nabla v\mathrm{dx}\,, \end{aligned}$$

où w est un poids scalaire et $\mathbf{w}$ est un poids tensoriel. Soient $(u_j)_{j=1,..,dim(\mathbb{X}_h)}$ et $(v_i)_{i=1,..,dim(\mathbb{Y}_h)}$ les bases respectives de $\mathbb{X}_h$ et $\mathbb{Y}_h$. Alors on note les matrices :

$$\begin{aligned} M(\mathbb{X}_h,\mathbb{Y}_h;w)_{i,j} &= m(u_j,v_i;w)\,, \\ A(\mathbb{X}_h,\mathbb{Y}_h;\mathbf{w})_{i,j} &= a(u_j,v_i;\mathbf{w})\,. \end{aligned}$$

Ainsi, on introduit les notations suivantes :

$$\begin{aligned}
A_1 &= A\left(\mathbb{H}_h, \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}); |\nabla\varphi_h|^n \mathbf{I}\right) , \\
M_1 &= M\left(\mathbb{H}_h, \mathbb{H}_h; 1\right) , \\
A_2 &= A\left(\mathbb{H}_h, \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}); (|\nabla\varphi_h|^n)^3 \left(\mathbf{I} - \mathbf{n}_h^n \otimes \mathbf{n}_h^n\right)\right) , \\
M_2 &= M\left(\mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}), \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}); (|\nabla\varphi_h|^n)^3\right) , \\
A_3 &= A\left(\mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}), \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}); |\nabla\varphi_h|^n (\psi_h^n)^2 \mathbf{I}\right) , \\
M_3 &= M\left(\mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}), \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}); 1\right) , \\
M_4 &= M\left(\mathbb{H}_h, \mathbb{H}_h; |\nabla\varphi_h|^n\right) .
\end{aligned}$$

Après initialisation et étant donné la solution à l'instant t^n, il s'agit de résoudre le système linéaire $A_h.\varphi_h^{n+1} = B_h^n$ avec

$$A_h = 2A_2.\left(M_4^{-1}.A_1^T\right) + (3/2\triangle t)M_2 + A_3 ,$$

$$\begin{aligned}
B_h^n = M_3 &\left[(1/2\triangle t).\left(|\nabla\varphi_h|\right)^3 \left(4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right) - 8\left(|\nabla\varphi_h|^n\right)^2 \left(\left(\mathbf{I} - \mathbf{n}_h^n \otimes \mathbf{n}_h^n\right) \nabla\psi_h^n.\gamma_h^n\right)\right] \\
&- 4M_3\left[(\psi_h^n)^2 \left(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\right)\right] - 4A_2.\left(M_4^{-1}.M_1.(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n)\right) .
\end{aligned}$$

On note M_4^{-1} l'inverse d'une matrice creuse qui est pleine et on utilise la condensation de la masse pour remplacer M_4 par une matrice diagonale. Cependant, le poids $|\nabla\varphi_h^n|$ possède des valeurs qui s'annulent ou qui sont proches de la précision machine au voisinage du squelette (voir figure 2.1) et par conséquent, la matrice de masse condensée est singulière. Pour remédier au cela, on omet les valeurs de $|\nabla\varphi_h^n|$ inférieures à 10^{-9} en les remplaçant par 10^{-9}. Ce procédé permet d'approcher facilement l'inverse de la matrice M_4. Néanmoins, la solution obtenue ne dépend du choix de 10^{-9} que dans le seul cas où le squelette intersecte la bande de largeur 2ε autour de Γ. Ceci pourrait avoir lieu, en particulier, lors de la rupture de la membrane ou des changements topologiques analogues. Ces cas n'ont pas été considérés lors des études numériques de ce travail.

2.5 Calcul du résidu

Il est important d'avoir un test d'arrêt dans les tests ayant des solutions stationnaires, ce test peut porter éventuellement sur le calcul de l'erreur relative. Néanmoins, ceci ne suffit pas pour affirmer que la solution converge et on décide de calculer le résidu du problème.
En effet, on considère le problème résolu à un instant t^n et on note le terme du résidu par $r_h^n := \mathbb{A}\left(\varphi_h^n\right)$. Dans le cas des solutions stationnaires $\lim_{n\to+\infty} \varphi_h^n = \varphi_h$, le résidu vérifie $\lim_{n\to+\infty} r_h^n = 0$, avec :

$$\begin{aligned}
\mathbb{A} = \quad H_{0,h}^1(\Lambda) &\to H_h^{-1}(\Lambda) \\
\varphi_h^n &\mapsto r_h^n = \mathbb{A}\left(\varphi_h^n\right) ,
\end{aligned}$$

où $H_{0,h}^1(\Lambda)$ et $H_h^{-1}(\Lambda)$ représentent des espaces de discrétisations respectivement de $H_0^1(\Lambda)$ et $H^{-1}(\Lambda)$.

On considère $v_h \in H^1_{0,h}(\Lambda)$, il s'agit de calculer la norme discrète du résidu $|r_h^n|_{H_h^{-1}(\Lambda)}$ et on a :

$$\begin{aligned} |r_h^n|_{H^{-1}(\Lambda),h} &= \sup_{v_h \in H^1_{0,h}(\Lambda)} \frac{< v_h, r_h^n >_{H^1_{0,h}(\Lambda), H_h^{-1}(\Lambda)}}{|v_h|_{H^1_0(\Lambda),h}} \\ &= \sup_{v_h \in H^1_{0,h}(\Lambda); |v_h|_{H^1_0(\Lambda),h}=1} < v_h, r_h^n >_{H^1_{0,h}(\Lambda), H_h^{-1}(\Lambda)} . \end{aligned}$$

On note $a_{j,h} = |\phi_{j,h}|_{H^1_{0,h}(\Lambda)}$ et $\overline{\phi_{j,h}} = \dfrac{\phi_{j,h}}{a_{j,h}}$ et par conséquent $|\overline{\phi_{j,h}}|_{H^1_{0,h}} = 1$. En écrit v_h dans la base de $H^1_{0,h}$, on obtient :

$$\begin{aligned} |r_h^n|_{H_h^{-1}(\Lambda)} &= \max_{i \in \{1..dim(H^1_{0,h}(\Lambda))\}} < \overline{\phi_{j,h}}, r_h^n >_{H^1_{0,h}(\Lambda), H_h^{-1}(\Lambda)} \\ &= \max_{x_i \in int(\mathcal{T}_h)} |r_h^n(x_i)| , \end{aligned}$$

où $int\,(\mathcal{T}_h)$ désigne l'ensemble des sommets internes du maillage $\mathcal{T}_h$ de Λ (c.à.d on omet les sommets situés sur $\partial\Lambda$). On s'intéresse à la solution du problème dans un voisinage de la surface Γ_h^n et comme on effectue régulièrement une étape de redistancement de la fonction de niveau dans tout le domaine de calcul alors il faut évaluer le résidu uniquement dans un voisinage de Γ_h^n. Par conséquent, on multiplie le résidu par la mesure de dirac régularisée $\delta^n_{\varepsilon,h}$.
Finalement, on définit un résidu global de la formulation mixte du problème pour les équations respectivement en φ et ψ et on calcule :

$$r_h^n = |r^n_{\psi,h}, r^n_{\varphi,h}|_{L^2(\Lambda),h} = \sqrt{\left(r^n_{\psi,h}\right)^2 + \left(r^n_{\varphi,h}\right)^2} .$$

Avec

$$r^n_{\psi,h} = M_4.\psi_h^n - A_1^T.\varphi_h^n - 2M_1.(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n) ,$$

et

$$r^n_{\varphi,h} = 2A_2.\psi_h^n + A_3.\varphi_h^n + M_3.\left[8\left(|\nabla\varphi_h|^n\right)^2\left(\left(\mathbf{I} - \mathbf{n}_h^n \otimes \mathbf{n}_h^n\right)\nabla\psi_h^n.\gamma_h^n\right)\right] + 4M_3\left[\left(\psi_h^n\right)^2\left(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\right)\right] .$$

2.6 Simulations numériques

2.6.1 Évolution d'un cercle

Ce test consiste à minimiser l'énergie de courbure de Canham et Helfrich d'un cercle de rayon R_0. L'intéret de cette condition initiale est que la loi d'évolution est explicite et la fonction de niveau $\varphi(t,x)$ à l'instant t décrit un cercle de rayon $R(t)$ vérifiant l'équation différentielle :

$$\begin{aligned} \frac{dR(t)}{dt} &= \frac{1}{R^3(t)} \\ R(0) &= R_0 . \end{aligned}$$

La solution de cette EDO est donnée par :

$$R(t) = [R^4(0) + 4t]^{1/4} . \tag{2.36}$$

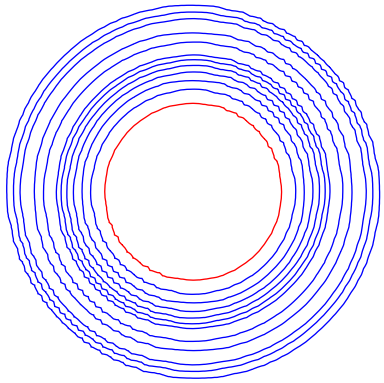

FIG. 2.2 – Minimiser l'énergie de Canham et Helfrich d'un cercle (condition initiale en rouge).

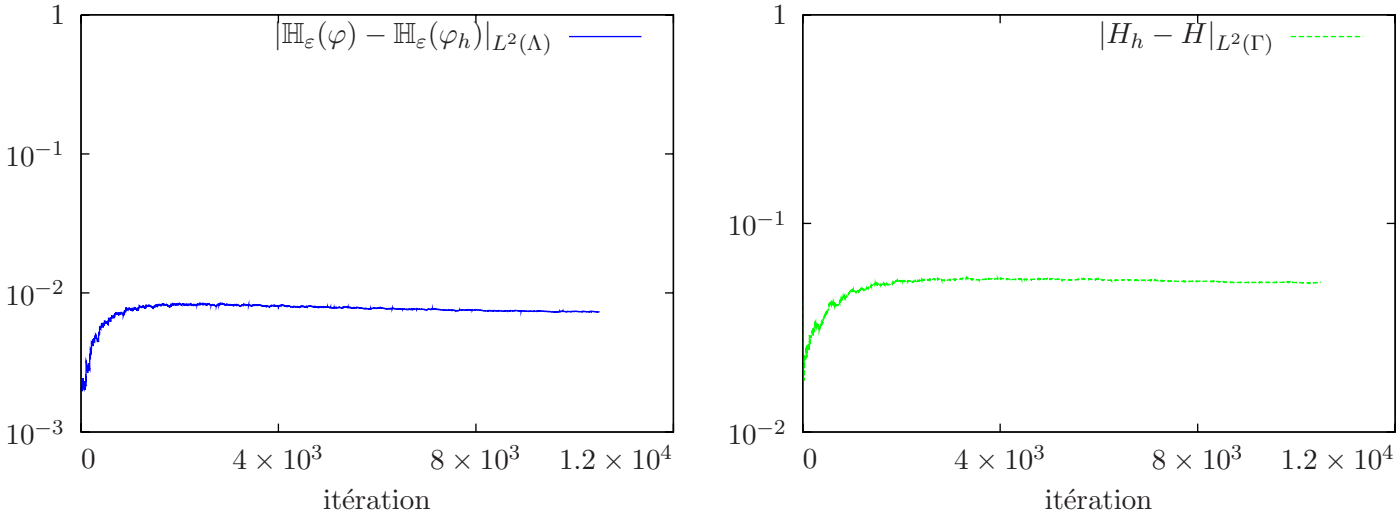

FIG. 2.3 – Traçé de l'erreur (échelle logarithmique en ordonnées) en : (a) : aire, (b) : courbure.

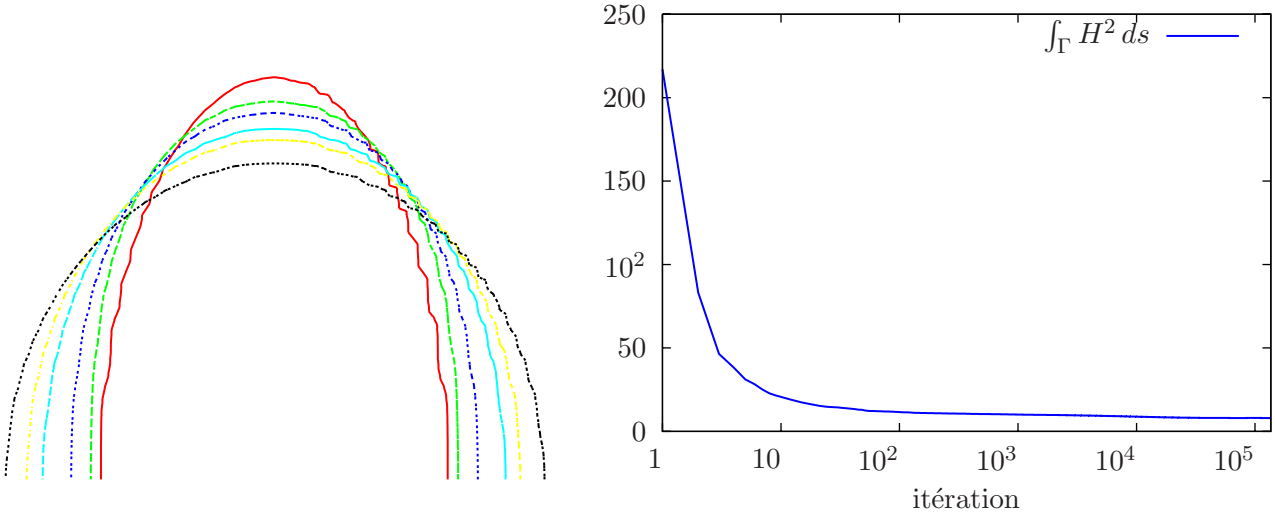

FIG. 2.4 – Minimiser l'énergie de Canham et Helfrich d'un éllipsoide en 3d avec des coordonnées axisymétriques (échelle logarithmique en abscisse).

On vérifie sur la figure 2.5 que le cercle garde sa forme circulaire et il évolue au cours du temps en augmentant son volume. On évalue sur la figure 2.3 l'erreur en norme L^2 en aire donnée par $|\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)|_{L^2(\Lambda)}$ ainsi que l'erreur en norme L^2 commise dans le calcul de la courbure moyenne $|H_h - H|_{L^2(\Gamma)}$.

2.6.2 Évolution d'un ellipsoide en axisymétrie

Simonett a démontré dans le papier [91] qu'une surface fermée $\Gamma_0 \in \mathbb{R}^3$, orientable et suffisament régulière ($\mathcal{C}^{2,\alpha}$, $0 < \alpha < 1$) évolue en une unique famille $\Gamma = \{\Gamma(t) : t \in [0, T]\}$ régulière et solution du problème de transport (2.4). De plus, si la surface initiale est proche d'une sphère, alors la solution converge rapidement vers une sphère.
On considère dans la figure 2.4 un éllipsoide et on fait des calculs numériques en coordonnées axisymétriques. Les résultats montrent que la forme converge vers une sphère et on vérifie qu'on minimise l'énergie de courbure de Canham et Helfrich. Ces résultats sont analogues à ceux trouvés dans le papier [67].

2.6.3 Évolution d'un tube en axisymétrie

On considère dans cette simulation l'évolution d'un tube en coordonnées axisymétriques. Ce test a été proposé dans le papier [67] et on montre numériquement qu'en minimisant l'énergie de Canham et Helfrich d'une forme convexe, cette dernière peut éventuellement évoluer en une forme intermédiaire non convexe afin de minimiser $\int_\Gamma H^2 \mathrm{ds}$, ceci se traduit par une augmentation du volume (voir figure 2.6) et le tube converge finalement vers une sphère. Ce résultat a été observé sur la figure 2.5 où on retrouve des formes similaires à celles observées dans le papier [67] et on vérifie aussi la minimisation de l'énergie de courbure de Canham et Helfrich.

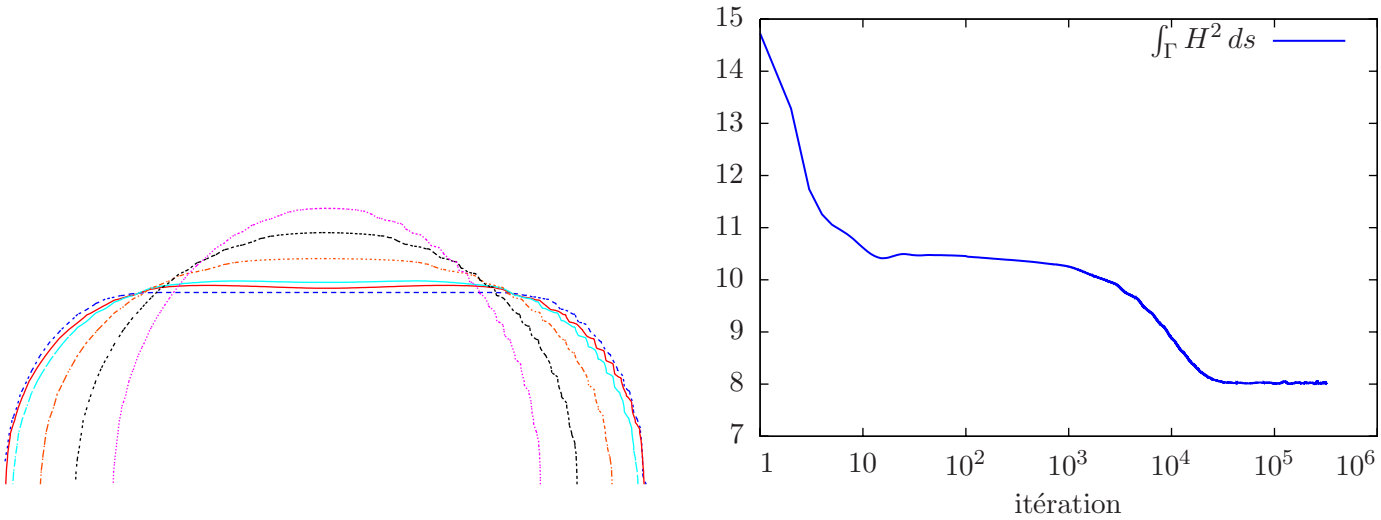

FIG. 2.5 – Minimiser l'énergie de courbure de Canham et Helfrich d'un tube en coordonnées 3d axisymétriques (échelle logarithmique en abscisse).

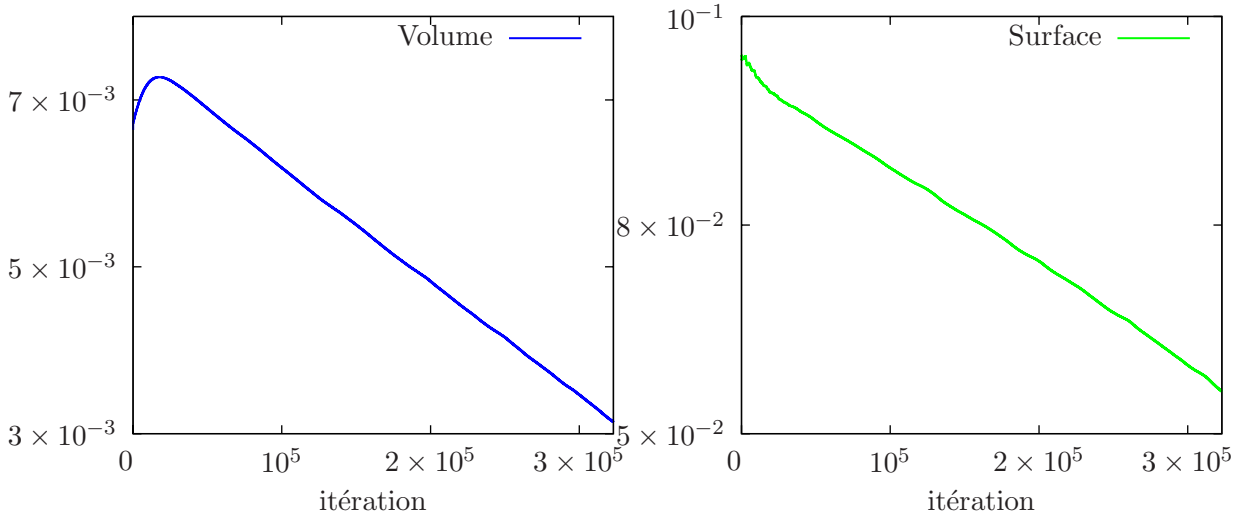

FIG. 2.6 – (a) : Évolution du volume du tube. (b) : Évolution de la surface du tube.

Chapitre 3

Mouvements par courbure moyenne

Sommaire

3.1 Position du problème **44**
3.2 Méthode explicite **45**
3.3 Méthode semi implicite **49**

Afin de mettre le point uniquement sur le calcul de la courbure, nous allégeons le problème qu'on résoud et nous nous intéressons aux mouvements par courbure moyenne. Nous présentons en premier lieu une méthode explicite pour calculer la courbure moyenne, permettant de mettre en évidence des problèmes d'instabilités numériques.
Dans la deuxième partie, nous proposons une méthode de discrétisation semi-implicite et nous étudions par la suite numériquement la convergence de l'erreur ainsi que l'effet de l'adaptation de maillage.

3.1 Position du problème

L'un des problèmes les plus importants des mouvements d'interfaces contrôlés par la courbure est le mouvement par courbure moyenne. Ce problème peut être formulé sous la forme d'un problème de minimisation de formes où la membrane $\Gamma = \partial\Omega$ évolue afin de minimiser sa surface (son périmètre dans le cas bidimensionnel). On introduit la fonctionnelle d'énergie :

$$\mathcal{J}(\Omega) = \int_\Gamma 1\mathrm{ds}\,.$$

En dérivant cette énergie par rapport à la forme Ω dans une direction $\mathbf{u}$, on obtient :

$$\mathcal{J}'(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma H\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s\,.$$

La direction de descente est donnée par le vecteur $\mathbf{u} = -H\mathbf{n}$ et on déplace la forme en $\Omega_\mathrm{t} = (\mathbf{I} + \mathrm{t}\mathbf{u})(\Omega)$ où $\mathrm{t} > 0$ représente un pas de descente infénitésimal. Par conséquent,

$$\mathcal{J}(\Omega_\mathrm{t}) = \mathcal{J}(\Omega) - \mathrm{t}\int_\Gamma H^2\,\mathrm{ds} + \mathcal{O}(\mathrm{t}^2)\,.$$

Ceci assure la décroissance de la fonction objective et on a le problème de transport suivant :

$$\left\{\begin{array}{rll} \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} - H\mathbf{n}.\nabla\varphi & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\ \partial_\nu\varphi(t,x) & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) & = \varphi_0(x) & \text{p.p. } x \in \Lambda\,. \end{array}\right. \tag{3.1}$$

Parmi les résultats théoriques concernant ce problème, on note ceux de Huisken [48] et Grayson [40] qui ont étudié principalement le comportement asymptotique des solutions. En effet, ils démontrent que les géométries initialement convexes restent convexes et évoluent en gardant une topologie sphériques vers un point en un temps fini. Quant aux résultats d'existence et d'unicité, on peut citer les travaux de Lions et al. [61] et Evans et al. [33].
D'un point de vue méthode numériques, on peut consulter [84, 83] : les auteurs ont utilisé une technique de diffusion et renormalisation de la fonction caractéristique pour traiter les mouvements par courbure moyenne. Cette idée a été introduite initialement par [69].

On s'intéresse dans la première partie de ce chapitre à la résolution du problème non-linéaire (3.1) par une méthode explicite afin de calculer la courbure moyenne. Toutefois, le choix d'un petit pas de temps $\triangle t$ est essentiel pour assurer la stabilité lors d'une méthode explicite et on a une condition de type CFL (Courant, Friedrichs et Lewy) donnée par $\triangle t < c(\triangle x)^2$, avec c désigne une constante positive et $\triangle x$ est le pas de discrétisation en espace.

3.2 Méthode explicite

L'objectif de cette partie est de mettre le point sur les problèmes de stabilités numériques qu'on peut avoir lors de cette approche ainsi que le traitement qu'on propose pour palier à ce problème. Par ailleurs, vu l'importance du terme de la courbure dans la modèlisation de la dynamique des vésicule, on opte ultérieurement pour l'utilisation des méthodes plus stables pour le calcul de ce terme.

3.2.1 Évaluation de la courbure moyenne

Soit $0 = t^0 < t^1 < t^2 < ... < t^N = T$ la subdivision de l'intervalle de temps $[0, T]$, on note $\triangle t = t^{n+1} - t^n$ le $n^{\text{ième}}$ pas de temps pour $n = 0, 2, ..., N-1$. Étant donné φ^{n+1}, les quantités à évaluer sont $\mathbf{n}^{n+1}$ et H^{n+1} : les approximations respectives de $\mathbf{n}$ et H au temps t^{n+1} dans tout le domaine Λ. On note $\mathcal{T}_h$ la triangulation éléments finis de Λ et par $x_{i,1\leq i\leq I}$ les noeuds de la triangulation. Le vecteur normal et la courbure moyenne sont obtenus à partir de la fonction de niveau φ dans Λ par :

$$\mathbf{n}^{n+1}(x) = \frac{\nabla\varphi^{n+1}(x)}{|\nabla\varphi^{n+1}(x)|}, \tag{3.2}$$

$$H^{n+1}(x) = \nabla.\left[\frac{\nabla\varphi^{n+1}(x)}{|\nabla\varphi^{n+1}(x)|}\right], \tag{3.3}$$

avec $|.|$ est la norme Euclidienne dans $\mathbb{R}^2$. On introduit le deux espaces d'approximation éléments finis $\mathbb{V}_h$ et $\mathbb{T}_h$:

$$\mathbb{V}_h = \left\{\varphi_h \in C^0(\bar{\Lambda})/\ \varphi_h|_K \in (\mathbb{P}^1), \forall K \in \mathcal{T}_h\right\}, \tag{3.4}$$

$$\mathbb{T}_h = \left\{\varphi_h \in L^2(\Lambda)/\ \varphi_h|_K \in (\mathbb{P}^0), \forall K \in \mathcal{T}_h\right\}, \tag{3.5}$$

tel que les éléments de $\mathbb{T}_h$ sont discontinues et constantes par morceaux sur $\mathbb{T}_h$. On considère $(\phi_i)_{1\leq i\leq \dim(\mathbb{V}_h)}$ une base de $\mathbb{V}_h$ et $(\psi_i)_{1\leq i\leq \dim(\mathbb{T}_h)}$ une base de $\mathbb{T}_h$. En utilisant (3.2), on obtient directement une approximation $\tilde{\mathbf{n}}_h^{n+1} \in \mathbb{T}_h$ de $\mathbf{n^{n+1}}$:

$$\tilde{\mathbf{n}}_h^{n+1}(x) = \frac{\nabla\varphi_h^{n+1}}{\left|\nabla\varphi_h^{n+1}\right|} \in \mathbb{T}_h\,.$$

Par contre, il n'est pas possible d'utiliser (3.3) pour définir la courbure à partir de φ_h^{n+1}. En effet, $\varphi_h^{n+1} \in C^0(\bar{\Lambda})$ et elle n'est pas deux fois dérivable. Pour contourner cette difficulté, nous introduisons la projection L^2, notée $\mathbf{n}_h^{n+1} = \left(\mathbf{n}_{h,1}^{n+1}, \mathbf{n}_{h,2}^{n+1}\right) \in \mathbb{V}_h$ de $\mathbf{n}_h^{n+1} = \left(\tilde{\mathbf{n}}_{h,1}^{n+1}, \tilde{\mathbf{n}}_{h,2}^{n+1}\right) \in \mathbb{T}_h$ et définie par :

$$\int_\Lambda \mathbf{n}_{h,k}^{n+1} v dx = \int_\Lambda \tilde{\mathbf{n}}_{h,k}^{n+1} v dx\ ,\ \forall v \in \mathbb{V}_h\,,\ \forall k, 1 \leq k \leq 2\,. \tag{3.6}$$

Comme $\mathbf{n}_h^{n+1} \in \mathbb{V}_h$ est dérivable, nous pouvons utiliser (3.3) pour définir la courbure approchée :

$$\tilde{H}_h^{n+1} = \nabla.\mathbf{n}_h^{n+1} \in \mathcal{T}_h\,.$$

De même, à partir de $\tilde{H}_h^{n+1}$, et en utilisant la projection L^2, nous pouvons définir une approximation continue $H_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h$ de la courbure :

$$\int_\Lambda H_h^{n+1} v dx = \int_\Lambda \tilde{H}_h^{n+1} v dx\ ,\ \forall v \in \mathbb{V}_h\,,\ \forall k, 1 \leq k \leq 2\,. \tag{3.7}$$

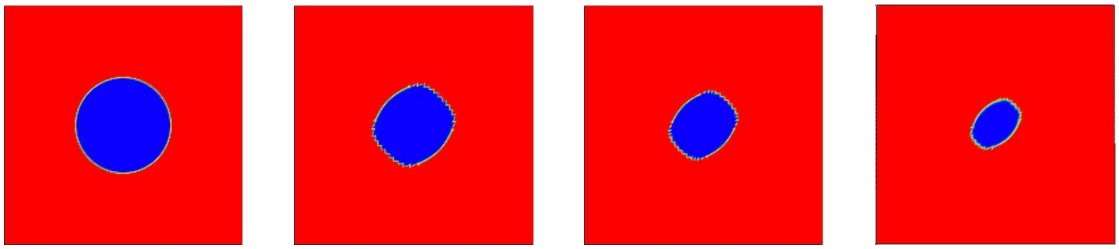

FIG. 3.1 – Évolution aux instants 0, 8×10^{-3}, 1.4×10^{-2}, t_f.

D'un point de vue pratique, les étapes de projection L^2 (3.6) et (3.7) conduisent à la résolution de systèmes linéaires dont la matrice se diagonalise en utilisant la formule d'intégration numérique des trapèzes pour évaluer les coefficients. Cette procédure est communément appelée `la condensation de masse`.

3.2.2 Simulation numérique

Afin de valider cette procédure explicite du calcul de la courbure moyenne, on s'intéresse à un problème dont on connait la solution exacte. On choisit une condition initiale φ_0 égale à la distance signée par rapport à un cercle centré en Λ et de rayon R_0.
L'intérêt de cette condition initiale est que le mouvement par courbure moyenne est explicite et la fonction de niveau $\varphi(t, x)$ à l'instant t est un cercle de rayon $R(t)$ vérifiant l'équation différentielle :

$$\begin{aligned} \frac{dR(t)}{dt} &= \frac{-1}{R(t)}, \\ R(0) &= R_0 . \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$R(t) = \sqrt{-2t + R_0^2} .$$

Un critère facile à mesurer est le temps d'extinction du domaine $t_f = R_0^2/2$ auquel la forme dégénère en un point.

Résultats numériques

On résoud le problème de transport (3.1) de φ_0 avec le champ de transport $\mathbf{u} = -\mathrm{H}\,\mathbf{n}$. On considère un cercle de centre $(0.5, 0.5)$ et de rayon $R_0 = 0.2$ dans une cavité $[0, 1] \times [0, 1]$. On utilise un maillage régulier 200×200 et on choisit le paramètre de régularisation $\varepsilon = h$. Quant au pas de temps, on prend $\Delta t = 10^{-4}$. Théoriquement, l'équation (2.36) assure une forme circulaire au cours du temps et le cercle doit dégénérer à $t = 0.02$.

On présente les résultats numériques sur la figure 3.1. Ceci met en évidence l'apparition d'oscillations sur la forme qui perd sa forme circulaire et elle ne suit pas la loi d'évolution théorique donnée par (2.36). Ces instabilités numériques sont dûes au calcul explicite de la courbure et on propose, en une première étape, d'utiliser une méthode de lissage et de comparer les résultats numériques au mouvement théorique.

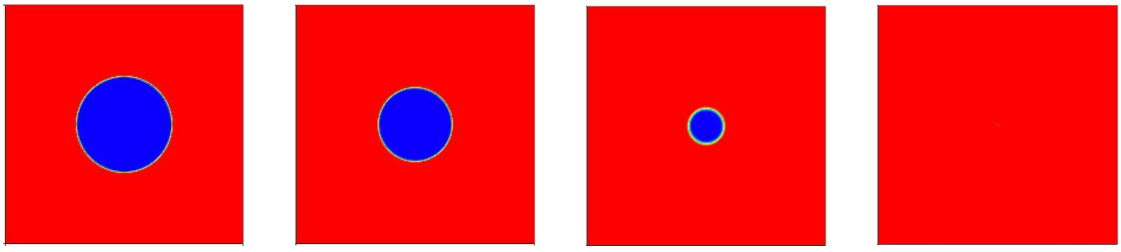

FIG. 3.2 – Évolution, suite au lissage, aux instants 0, 8×10^{-3}, 1.4×10^{-2}, t_f.

Procédure de lissage

On opte pour l'utilisation d'un opérateur de moyenne topologique local pour faire de la diffusion numérique. L'astuce consiste à utiliser la matrice de masse sous sa forme exacte qu'on note M et sous sa forme obtenue par la condensation de masse notée $\bar{M}$. On considère la base $(\phi_i)_{1\leq i\leq I}$ de l'espace $\mathbb{V}_h$ (3.4), la matrice de masse M est donnée dans $\mathbb{V}_h$ par :

$$M_{ij} = \int_\Lambda \phi_i \phi_j \, \mathrm{dx} \, .$$

La matrice de condensation de masse $\bar{M}$ est donnée par son terme général :

$$\bar{M}_{ij} = |C_i| \, \delta_{ij} \, ,$$

avec $|C_i| = \dfrac{1}{3} \displaystyle\sum_{K\in\mathcal{T}_h, x_i\in K} |K|$ et δ_{ij} est le symbole de Kronecker : il vaut 1 si $i = j$ sinon il est nul.
On considère un champ $V \in \mathbb{V}_h$ à lisser, ceci nous ramène à résoudre le système linéaire suivant où on note la solution lissé par $\tilde{V}$:

$$\bar{M}\tilde{V} \; = \; MV \, . \tag{3.8}$$

On note que, en appliquant la procèdure de lissage (3.8) `k` fois, ceci est équivalent à faire un lissage du champ V sur `k` couches autours de chaque noeud du maillage.
Dans nos simulations, on choisit `k`= 3 et on reprend le test du cercle. Ce dernier évolue ainsi en gardant sa forme circulaire au cours du temps et on remarque qu'il devient exactement un point à l'instant final théorique $t_f = 0.02$.

La figure 3.3 présente quelques résultats de simulations numériques de mouvement par courbure moyenne. Toutes ces simulations témoignent des grandes possibilités des méthodes de lignes de niveaux, notamment concernant la gestion des topologies singulières des formes.

3.2.3 Simulations des mouvements par courbure moyenne sous contrainte de volume constant

Dans cette partie , on s'intéresse aux mouvements par courbure moyenne en ajoutant une contrainte de conservation du volume (l'aire en 2d). La forme initiale évolue progressivement vers une forme circulaire ayant le même volume que la forme initiale. Il s'agit de résoudre le

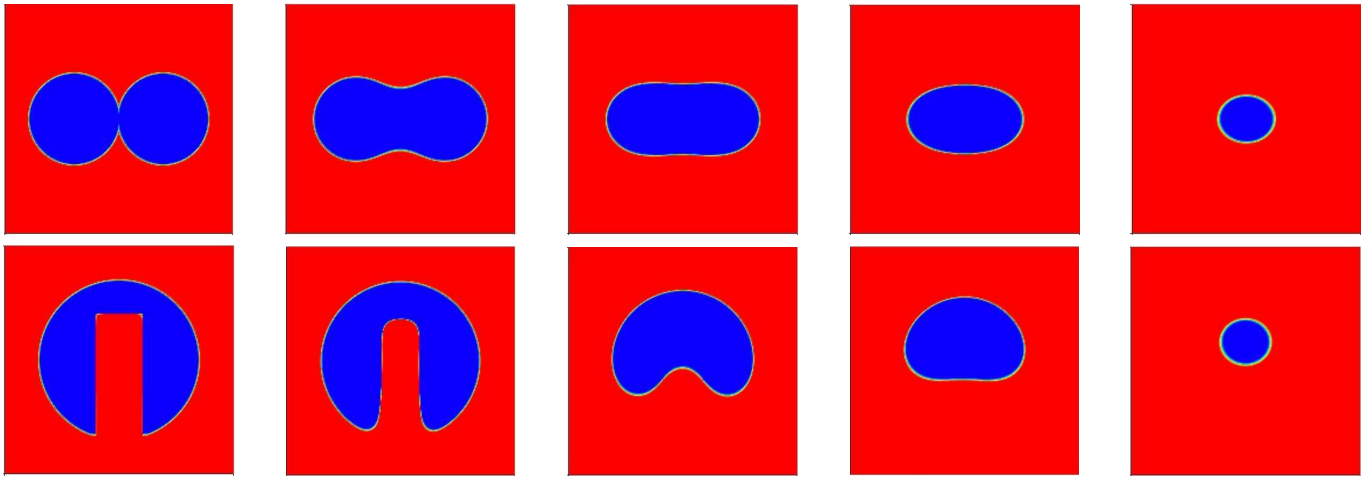

FIG. 3.3 – Quelques simulations de mouvement par courbure moyenne.

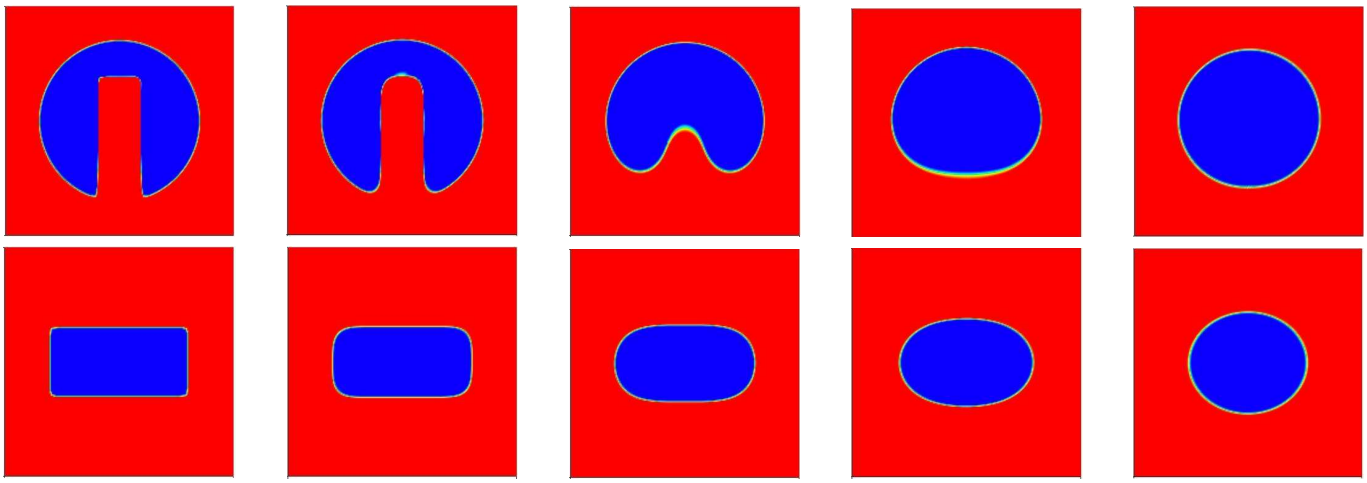

FIG. 3.4 – Quelques simulations de mouvement par courbure moyenne avec conservation du volume.

problème suivant :

$$\left\{\begin{array}{rll} \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} - H\,|\nabla\varphi| + \lambda(t) & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\ \dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_\Lambda \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi)dx & = 0 & \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \\ \varphi(t,x) & = \varphi_{\partial\Lambda}(x) & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \partial_\nu\varphi(t,x) & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) & = \varphi_0(x) & \text{p.p. } x \in \Lambda. \end{array}\right. \tag{3.9}$$

Où λ représente un multiplicateur de Lagrange global associé à la conservation du volume et il vérifie :

$$\int_\Lambda \delta_\varepsilon(\varphi)\partial_t\varphi dx = 0\,.$$

D'après (3.9), on a :

$$\int_\Lambda \delta_\varepsilon(\varphi)\left[-\mathbf{u}.\nabla\varphi - \lambda\right]dx = 0\,.$$

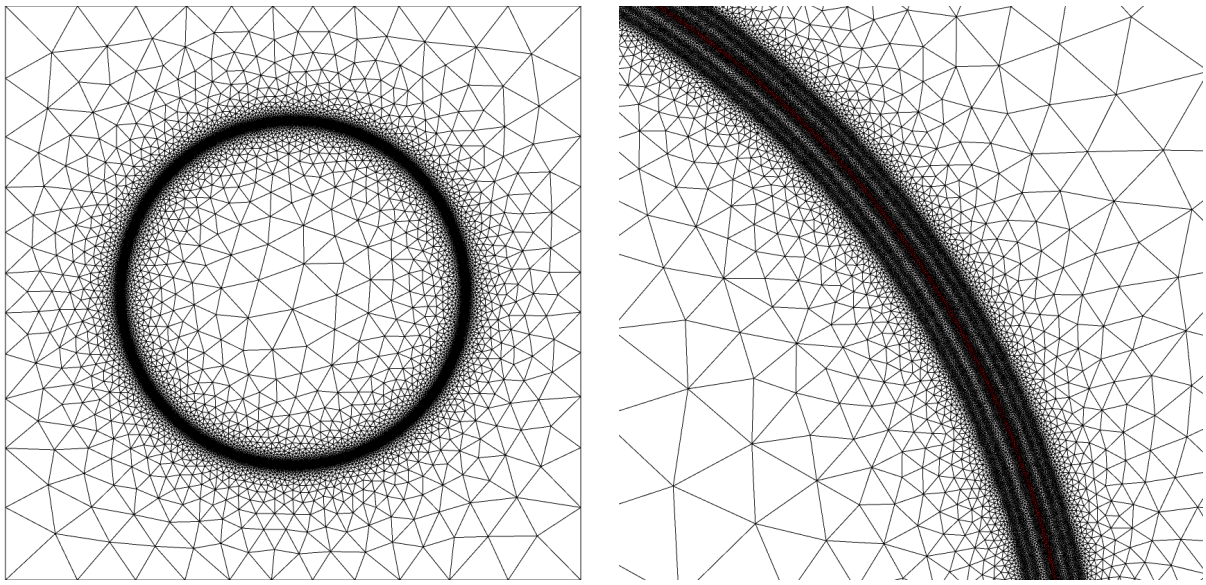

FIG. 3.5 – Maillage utilisé.

Par conséquences,

$$\lambda(t) = \frac{-\int_\Lambda \delta_\varepsilon(\varphi)\mathbf{u}.\nabla\varphi\, dx}{\int_\Lambda \delta_\varepsilon(\varphi)\, dx}\,. \tag{3.10}$$

Remarque : On vérifie que le terme de conservation de volume $\lambda(t)$ est nul si le champ qu'on applique est un champ de divergence nulle. En effet, on a :

$$\int_\Lambda \delta_\varepsilon(\varphi)\mathbf{u}.\nabla\varphi \mathrm{dx} = \int_\Gamma \mathbf{u}.\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}\,\mathrm{ds} = \int_\Gamma \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds} = \int_\Lambda \nabla.\mathbf{u}\,\mathrm{dx}\,.$$

Par conséquent, si le champ $\mathbf{u}$ conserve le volume, c'est à dire $\nabla.\mathbf{u} = 0$, alors le terme additif sera $\lambda = 0$. La figure 3.4 présente quelques résultats de simulations numériques de mouvement par courbure moyenne avec concervation du volume. On observe que la forme se convexifie en premier lieu (si elle a été concave) et elle converge vers une forme circulaire.

3.3 Méthode semi implicite

On utilise dans cette section une méthode semi implicite, sans et avec adaptation de maillage, et on étudie, par la suite, numériquement la convergence de la méthode. Similairement au chapitre précédent, on a la formulation faible suivante :

Étant donné $\varphi_0 \in L^2(\Lambda)$,
trouver $\mathbf{n} \in L^2\left(]0,T[\,;L^\infty(\Lambda)^d\right)$, $\gamma \in L^2\left(]0,T[\,;H_0(\mathrm{div},\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)^d\right)$,
$\psi \in L^2\left(]0,T[\,;L^2(\Lambda)\right)$ et $\varphi \in \mathcal{C}^0\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right) \cap L^2\left(]0,T[\,;W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$ tels que :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\mathbf{n}.\varsigma \mathrm{dx} = \int_\Lambda \nabla\varphi.\varsigma \mathrm{dx}\,, \qquad \forall \varsigma \in (L^2(\Lambda))^d\,, \tag{3.11}$$

$$\int_\Lambda \gamma.\tau \mathrm{dx} = -\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla.\tau \mathrm{dx}\,, \qquad \forall \tau \in H_0(\mathrm{div},\Lambda)\,, \tag{3.12}$$

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi\xi \mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla\varphi.\nabla\xi \mathrm{dx} = 2\int_\Lambda (\nabla\varphi.\gamma)\xi \mathrm{dx}\,, \qquad \forall \xi \in H^1(\Lambda)\,, \tag{3.13}$$

$$\int_\Lambda \partial_t\varphi\zeta \mathrm{dx} + \int_\Lambda \psi\zeta \mathrm{dx} = 0\,, \qquad \forall \zeta \in L^2(\Lambda)\,. \tag{3.14}$$

On utilise les mêmes notations du deuxième chapitre pour les espaces de discrétisation par éléments finis. Par conséquent, il s'agit de résoudre le problème variationnel suivant :

Étant donné $\varphi_h^n \in \mathbb{H}\mathrm{h}$, $\psi_h^n \in \mathbb{H}\mathrm{h}$, $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}\mathrm{h}$ et $\gamma_h^n \in \mathbb{G}\mathrm{h}$,
trouver $\left(\varphi_h^{n+1}, \psi_h^{n+1}\right) \in \mathbb{H}\mathrm{h} \times \mathbb{H}\mathrm{h}$ tels que $\forall\,(\zeta,\xi) \in \mathbb{H}\mathrm{h} \times \mathbb{H}\mathrm{h}$, on a :

$$m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\right], \psi_h^{n+1}, \xi\right) - a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\,\mathbf{I}\right], \varphi_h^{n+1}, \xi\right) = 2\,m\left(\pi_h\left[\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\right], 1, \xi\right), \tag{3.15}$$

$$m\left(1, \psi_h^{n+1}, \zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t} m\left(1, \varphi_h^{n+1}, \zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t} m\left(\pi_h\left[\left(4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right)\right], 1, \zeta\right). \tag{3.16}$$

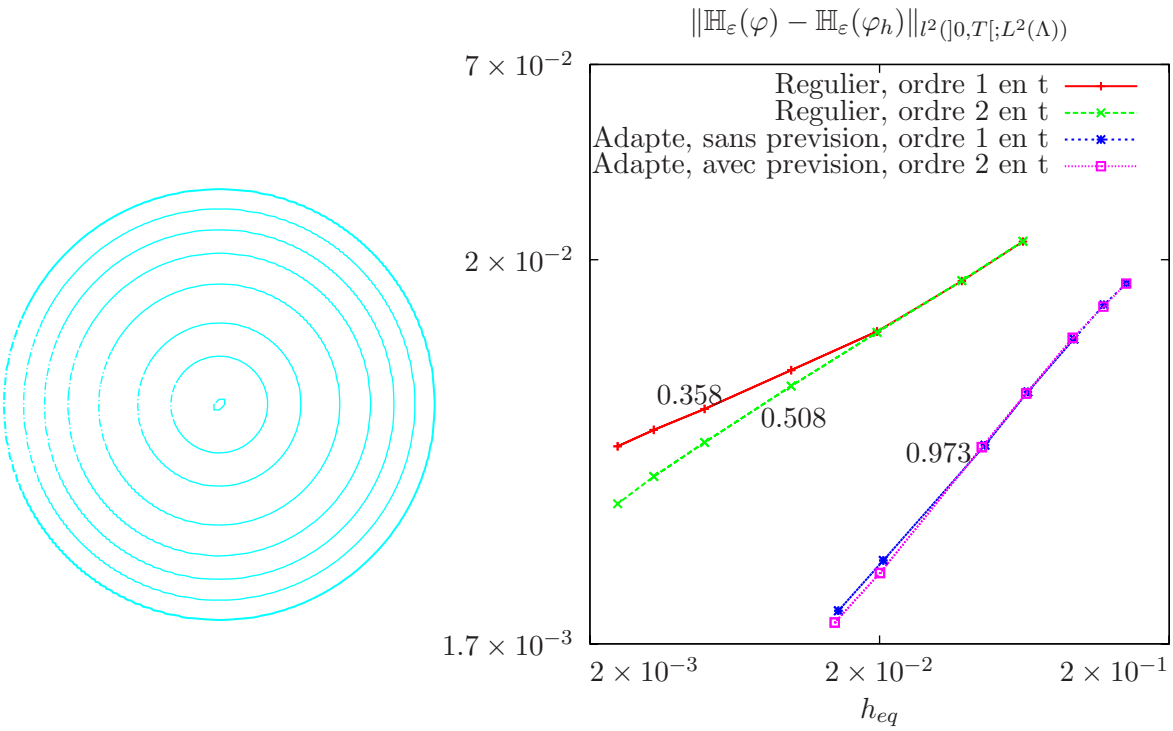

FIG. 3.6 – (a) : Évolution de la forme. (b) : Convergence de l'erreur dans la norme $l^2(]0,T[;L^2(\Lambda))$.

Évolution de l'erreur

On compare entre les résultats sans et avec adaptation de maillage. Le critère d'adaptation de maillage est celui utilisé dans le premier chapitre et il est donné pour un schéma rétrograde d'ordre 2 en temps par :

$$c_h^n \,=\, \delta_\varepsilon(\varphi_h^n) \,+\, \delta_\varepsilon(\varphi_h^{n+0.5}) \,+\, \delta_\varepsilon(\varphi_h^{n-1})\,,$$

où $\varphi_h^{n+0.5}$ est une prévision de la solution en utlisant le critère d'adaptation de maillage à l'instant t^{n-1} obtenu par le critère c_h^{n-1}. Le maillage utilisé dans le cas d'un schéma d'ordre 2 en temps est illustré sur la figure 3.5.
On trace sur la figure 3.6 l'évolution de l'erreur dans la norme $l^2(]0,T[;L^2(\Lambda))$ en fonction de $h_{eq} = 1/\sqrt{N_s}$, avec N_s est le nombre des sommets dans le maillage. On compare entre la convergence de l'erreur dans les cas des schémas d'ordres 1 et 2 en temps. Ceci met en évidence principalement qu'on gagne un facteur 2 dans la pente de la convergence de l'erreur suite à l'adaptation de maillage.

Chapitre 4

Mouvement par diffusion de surface

Sommaire

4.1 Position du problème **54**
4.2 Simulations numériques **56**

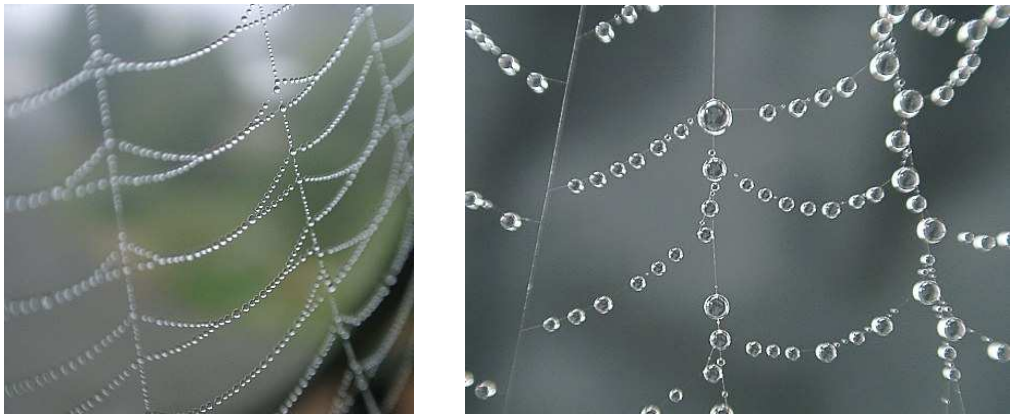

FIG. 4.1 – Illustration de quelques mouvements par diffusion de surface. Photos d'amateur disponible sur `http ://rondi.pagesperso-orange.fr/`.

On s'intéresse dans ce chapitre aux mouvements par diffusion de surface, on compare entre les schémas avec et sans la condensation de masse et on retrouve certains résultats physiques d'instabilités de Rayleigh-Plateau illustrés dans la figure 4.1.

4.1 Position du problème

Le mouvement par diffusion de surface est un model très connu pour les mouvements d'interface. Dans la physique, les atomes diffusent sur la surface d'une structure des zones de forte courbure moyenne vers les zones de faible courbure moyenne. Toutefois, les surfaces avec une courbure moyenne constante sont des solutions d'équilibre. On cite à titre d'exemple un cylindre infini, une sphère, un plan dans un espace tridimensionnel et dans le cas bidimensionnel, on cite le cas du cercle et celui d'une ligne infinie (voir les equations (4.6)-(4.7)).
Les applications physiques de ce modèle sont variées et sont présentes dans plusieurs phénomènes tels que le processus de littographie lors de la fabrication des circuits intégrés [2].
On observe sur la figure 4.1 une illustration de `l'instabilité de Plateau-Rayleigh`, parfois appelée `instabilité du tuyau d'arrosage` : cette dernière, qui se produit dans les jets de liquide, est due à la tension superficielle, qui tend à disperser un jet cylindrique en une projection de gouttelettes de même volume mais de surface spécifique moindre.
À la figure 4.1(a) : on voit des gouttelettes de rosée qui naissent sur les toiles d'araignées et se transforment en colliers de perles, elles laissent bien apparaître la structure de la toile et on perçoit la régularité dans les tailles et l'espacement des gouttelettes.
Quant à la figure 4.1(b) : l'état final de l'instabilité est parfois une succession de grosses et de petites gouttes `satellites`. Les satellites proviennent d'une instabilité secondaire du manchon de liquide qui relie deux gouttes en train de se former. On peut parfois, dans les instabilités de jet en particulier quand ils sont visqueux, distinguer toute une hiérarchie de satellites.

Pour les résultats d'existence et d'unicité des solutions du problème de diffusion de surface, le lecteur pourra consulter les travaux de Escher et al. [31]. Concernant la stabilité des objets cylindriques et les solutions auto-similaires pour le problème de rupture du jet en coordonnées axisymetriques ainsi que l'analyse de stabilité, on pourra voir les travaux suivants [18, 3].

Les schémas numériques utilisés pour modéliser les mouvements des surfaces et courbes sous

l'effet de la diffusion de surface sont difficiles. Ceci est principalment dû à la dérivation d'ordre 4 de la fonction de niveau φ. Par ailleurs, le choix d'un petit pas de temps est essentiel pour assurer la stabilité lors d'une méthode explicite et on a , dans ce cas, une condition de type CFL entre le pas de discrétisation en espace $\triangle x$ et le pas de temps $\triangle t$ donnée par $\triangle t < c(\triangle x)^4$ où c désigne une constante positive. Pour les simulations numériques avec un schéma implicite, le lecteur pourra consulter [68] dans le cadre d'une méthode de type différences finies.

Le problème de diffusion de surface est décri par une vitesse normale égale à $\triangle_s H$, il s'agit de résoudre le problème de transport suivant :

$$\left\{\begin{array}{rll} \dfrac{\partial\varphi}{\partial t} + \triangle_s H\,\mathbf{n}\,.\nabla\varphi & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\ \varphi(t,x) & = \varphi_{\partial\Lambda}(x) & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \partial_\nu\varphi(t,x) & = 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) & = \varphi_0(x) & \text{p.p. } x \in \Lambda. \end{array}\right. \tag{4.1}$$

La formulation variationnelle du problème (4.1) est un cas particulier de celle du problème de minimisation de l'énergie de Canham et Helfrich établie dans le deuxième chapitre. Pour des raisons de simplicité, on utilise ici la variable mixte $\psi = H$ et il s'agit de résoudre le problème suivant :

Étant donné $\varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right) \cap L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$ et $\varphi_0 \in L^2(\Lambda)$.

Trouver $\mathbf{n} \in L^2\left(]0,T[\,;L^\infty(\Lambda)^d\right)$, $\gamma \in L^2\left(]0,T[\,;H_0(\mathrm{div},\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)^d\right)$,
$\psi \in L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\right)$ et φ avec $\varphi - \varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right) \cap L^2\left(]0,T[\,;H_0^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$ tels que :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\mathbf{n}.\varsigma\mathrm{dx} = \int_\Lambda \nabla\varphi.\varsigma\mathrm{dx}, \quad \forall\varsigma \in (L^2(\Lambda))^d\,, \tag{4.2}$$

$$\int_\Lambda \gamma.\tau\mathrm{dx} = -\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla.\tau\mathrm{dx}, \quad \forall\tau \in H_0(\mathrm{div},\Lambda)\,, \tag{4.3}$$

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|^2\psi\xi\mathrm{dx} + \int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla\varphi.\nabla\xi\mathrm{dx} = -2\int_\Lambda (\nabla\varphi.\gamma)\xi\mathrm{dx}, \quad \forall\xi \in H^1(\Lambda)\,, \tag{4.4}$$

$$\int_\Lambda \partial_t\varphi\zeta\mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla_s\psi.\nabla\xi\mathrm{dx} = 0, \quad \forall\zeta \in H^1(\Lambda)\,. \tag{4.5}$$

En utilisant la formule de Reynolds, on montre que le mouvement par diffusion de surface conserve la masse et minimise la surface (il conserve l'aire et minimise le périmètre en dimension deux).

Par conséquences, les solutions stationnaires sont caractérisées par une courbure moyenne constante (c.à.d. $|\nabla_s H| = 0$ sur Γ) : voir les équations (4.6) et (4.7).

$$\begin{aligned} \frac{d\,(\text{volume})}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_\Omega 1\,\mathrm{dx} = \frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = \int_\Lambda \delta(\varphi)\frac{d\varphi}{dt}\,\mathrm{dx} \\ &= -\int_\Gamma \triangle_s H\,\mathrm{dx} = \int_\Gamma \nabla_s(1)\,.\,\nabla_s H\,\mathrm{dx} - \int_\Gamma H\mathbf{n}\,.\,\nabla_s H\,\mathrm{dx} = 0. \end{aligned} \tag{4.6}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\,(\text{surface})}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_\Gamma 1\,\mathrm{ds} = \int_\Gamma \frac{\partial\,1}{\partial\,t} + \nabla_s.\,(\triangle_s H\mathbf{n})\,\mathrm{ds} \\ &= \int_\Gamma \triangle_s H\,\mathbf{n}.\nabla_s(1)\,\mathrm{ds} + \int_\Gamma H\triangle_s H\,\mathrm{ds} = -\int_\Gamma |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds}\,. \end{aligned} \tag{4.7}$$

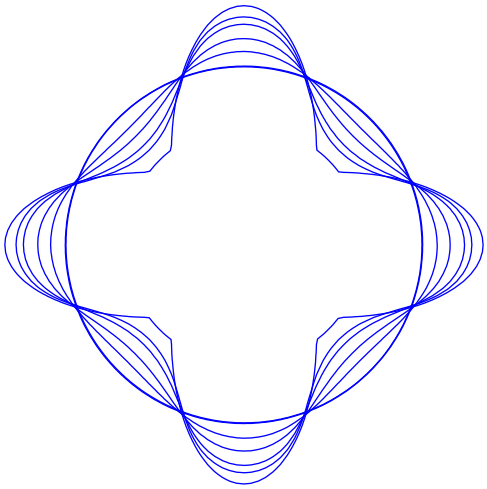

FIG. 4.2 – Simulation d'un mouvement avec la diffusion de surface d'une étoile sans la condensation de masse. Les formes correspondent respectivement aux itérations 0 , 5 , 10 , 20 , 30 , 150 , 1200 .

4.2 Simulations numériques

On présente dans cette section des simulations numériques en dimension deux et en dimension trois en coordonnées axisymetriques et on met par la suite en évidence les instabilités de type Rayleigh-Plateau. On utilise les mêmes notations du deuxième chapitre concernant les espaces d'approximation par éléments finis ainsi que les formes trilinéaires. En utilisant un schéma d'ordre deux en temps, il s'agit de résoudre le problème suivant :

Étant donnés $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda})$, $\psi_h^n \in \mathbb{H}_h$ et $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}_h$,
trouver $\left(\varphi_h^{n+1}, \psi_h^{n+1}\right) \in \mathbb{V}_h(\varphi_{\partial\Lambda}) \times \mathbb{H}_h$ tels que $\forall\,(\zeta,\xi) \in \mathbb{V}_h(0) \times \mathbb{H}_h$, on a :

$$m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^2\right], \psi_h^{n+1}, \xi\right) + a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\,\mathbf{I}\right], \varphi_h^{n+1}, \xi\right) = -2\,m\left(\pi_h\left[\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\right], 1, \xi\right), \tag{4.8}$$

$$-a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|(\mathbf{I} - \mathbf{n}_h^n \otimes \mathbf{n}_h^n)\right], \psi_h^{n+1}, \zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t} m\left(1, \varphi_h^{n+1}, \zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t} m\left(\pi_h\left[4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right], 1, \zeta\right). \tag{4.9}$$

Notations : Dans la suite, on note par `+cm` une simulation où on utilise la condensation de masse et par `-cm` une simulation sans utilisation de la condensation de masse.

4.2.1 Évolution d'une étoile

Dans cette simulation, nous effectuerons le mouvement par diffusion de surface d'une condition initiale φ_0 correspondant à une étoile. Cette forme possède un squelette complexe qui a été tracé dans le premier chapitre (voir page 31), d'où la difficulté qui réside derrière ce test. Nous effectuons les simulations avec et sans la condensation de masse. Nous choisissons $\triangle t = 10^{-6}$ et $\triangle x = 10^{-2}$ et nous observons que la forme converge vers un cercle qui a la même aire que celle de la forme initiale (voir les figures 4.2-4.4). On note par V_0 et A_0 respectivement l'aire et le

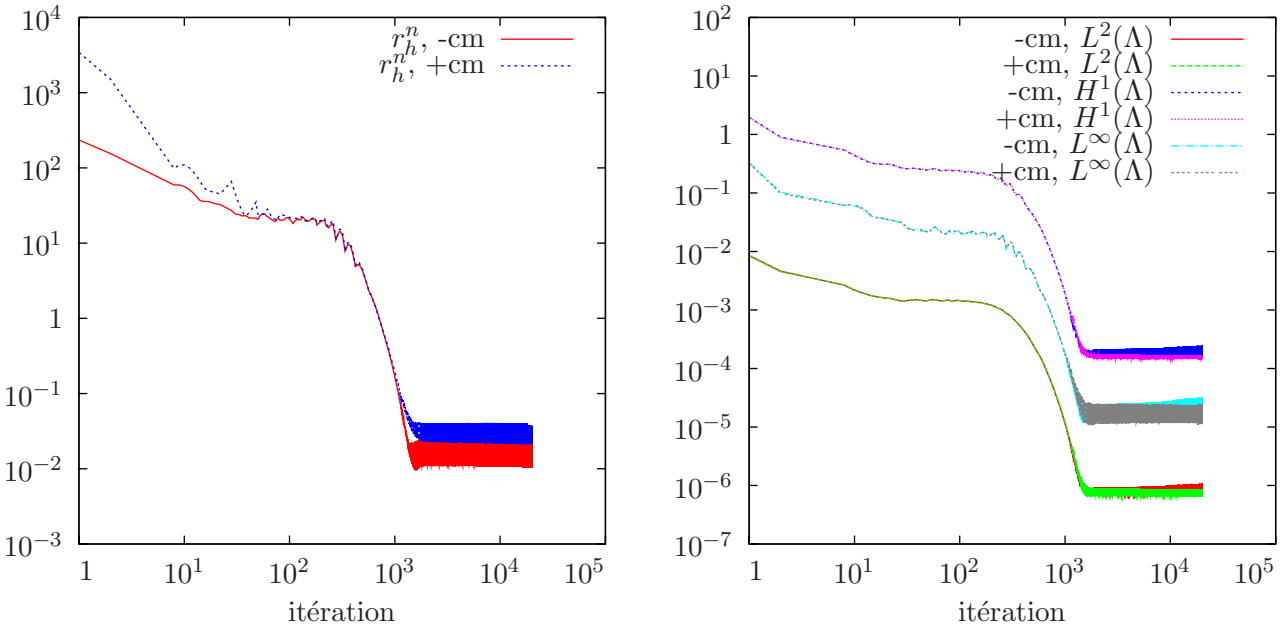

FIG. 4.3 – Tracé en échelle logarithmique de : (a) : Évolution des résidus. (b) : Évolution de l'erreur.

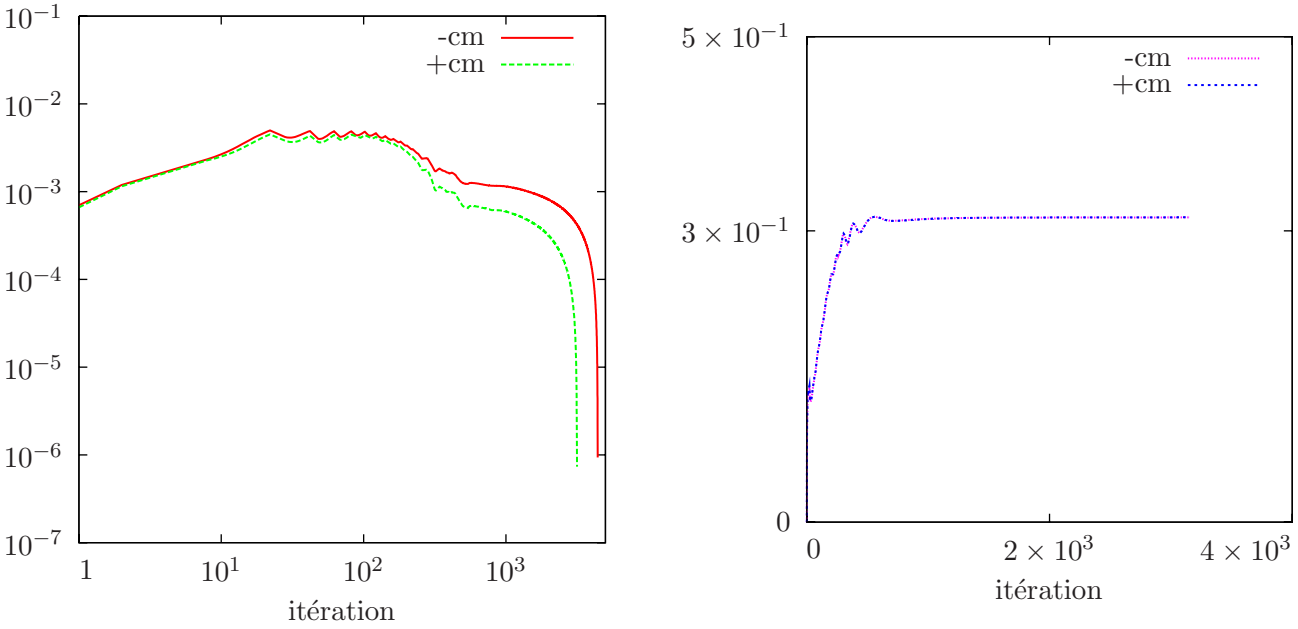

FIG. 4.4 – (a) : Évolution de $(V-V_0)/V_0$ en échelle logarithmique. (b) : Évolution de $(A-A_0)/A_0$.

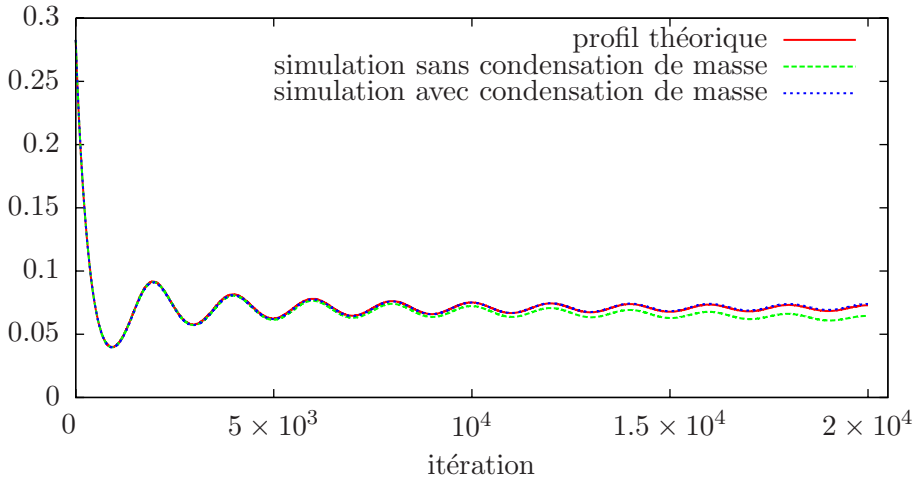

FIG. 4.5 – Mouvement par diffusion de surface avec second membre : évolution de l'aire.

périmètre de la forme initiale, les pertes d'aire sont inférieures à $10^{-3}\%$ de V_0. Numériquement, on vérifie la convergence du résidu r_h^n évalué dans la norme H^{-1} discrète et de l'erreur calculée en normes L^2 , H^1 et L^∞ (voir figure 4.3).

4.2.2 Mouvement oscillatoire

L'objectif de cette partie est de tester l'efficacité de la procédure de la condensation de masse. On résoud le problème (4.1) de diffusion de surface en ajoutant un second membre donné par :

$$\frac{10^5\, R_0\, \left(cos(10^5 t) \,+\, (1.0 \,+\, 10^5 t)\, sin(10^5 t)\right)}{(1 \,+\, 10^5 t)^2} \,.$$

On considère une condition initiale φ_0 égale à la distance signée à un cercle de rayon $2R_0$ donné. La forme reste circulaire au cours de son évolution en temps t et la solution exacte a un rayon :

$$R(t) \,=\, R_0 \left(1 \,+\, \frac{cos(10^5 t)}{1 \,+\, 10^5 t}\right) \,.$$

On trace l'évolution de l'aire au cours du temps dans la figure 4.5 et on superpose les solutions numériques obtenues avec et sans la condensation de masse avec le profil théorique. Les résultats montrent que la résolution avec la procédure de la condensation de masse est plus précise par rapport à celle sans la condensation de masse.
On trace sur la figure 4.6 l'évolution de l'erreur en normes $l^2(]0,T[;L^2(\Lambda))$ et $l^\infty(]0,T[;L^2(\Lambda))$, ceci permet d'estimer un ordre de convergence de la méthode donné par :

$$\begin{aligned} |\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)|_{l^2(]0,T[;L^2(\Lambda))} &\approx \mathcal{O}\,(\mathrm{h})\ , \\ |\mathbb{H}_\varepsilon(\varphi) - \mathbb{H}_\varepsilon(\varphi_h)|_{l^\infty(]0,T[;L^2(\Lambda))} &\approx \mathcal{O}\left(\mathrm{h}^{3/4}\right)\ . \end{aligned}$$

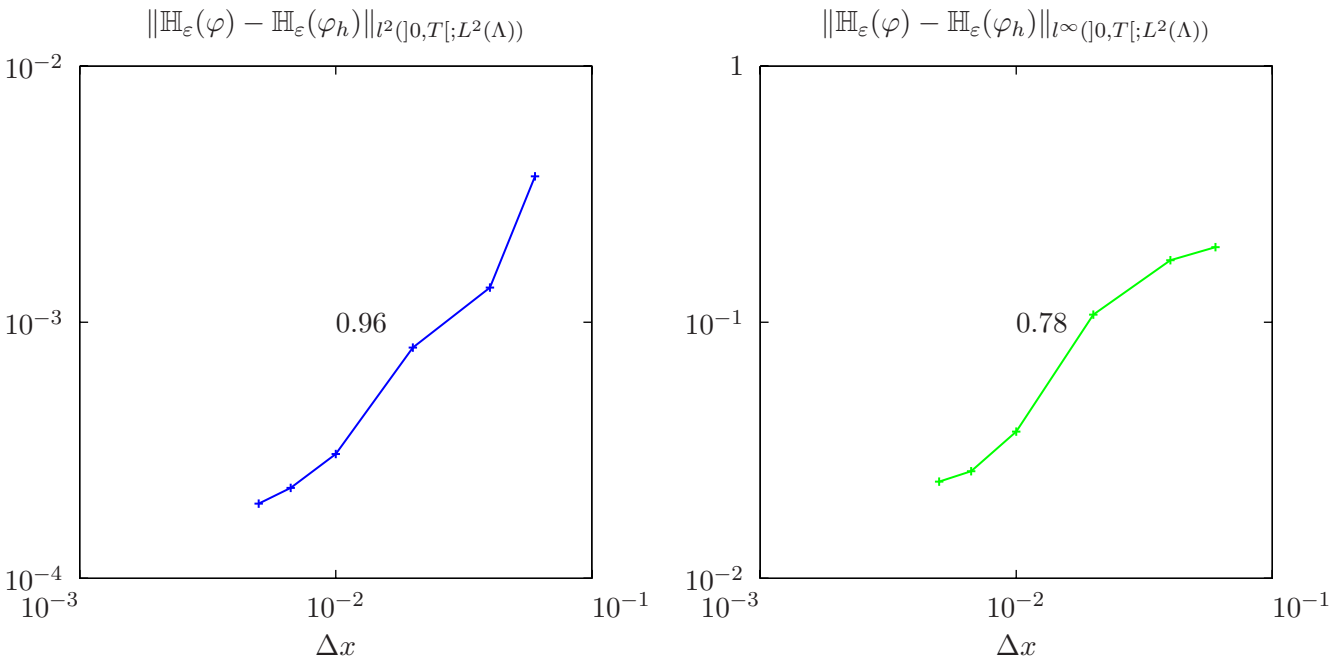

FIG. 4.6 – Évolution de l'erreur en normes $l^2(]0,T[;L^2(\Lambda))$ et $l^\infty(]0,T[;L^2(\Lambda))$.

4.2.3 Instabilités de Rayleigh-Plateau d'un cylindre ondulé

Les mouvements par diffusion de surface conservent le volume et minimisent la surface, il s'agit du même comportement observé lors de la rupture d'un jet. C'est un phénomène observé dans plusieurs phénomènes physiques ainsi que des procédés technologiques tel que le principe de fonctionnement des imprimantes à jet d'encre. C'est un phénomène connu sous le nom des effets de capillarités ou des instabilités de Rayleigh-Plateau, voir des illustrations dans la figure 4.1.

4.2.4 Cas tridimensionnel

On commence par le cas tridimensionnel. Coleman et al. démontrent dans le papier [18] qu'en appliquant une perturbation à un cylindre ondulé, le cylindre peut entrer dans un régime oscillatoire et finit par sa rupture si la période de la perturbation vérifie une certaine condition.
On considère un cylindre dont la composante radiale $r(t)$ s'exprime en fonction de sa composante verticale $z(t)$ par la relation suivante :

$$z(t) \;=\; 1 \;+\; 0.05\,(sin(\frac{2\pi}{P_1}r(t)) + sin(\frac{2\pi}{P_2}r(t)))\,.$$

Coleman et al. démontrent que si les périodes P_1 et P_2 vérifient la relation :

$$\frac{1}{|1/P_1 - 1/P_2|} \;>\; 2\pi\,,$$

alors il existe un temps critique t_c, au-delà duquel, il se crée un nouveau régime sinusoidale de période supérieure à 2π. Par ailleurs, la forme s'éloigne de la forme cylindrique et son amplitude continue à grandir et le cylindre finit par se rompre en un temps fini.

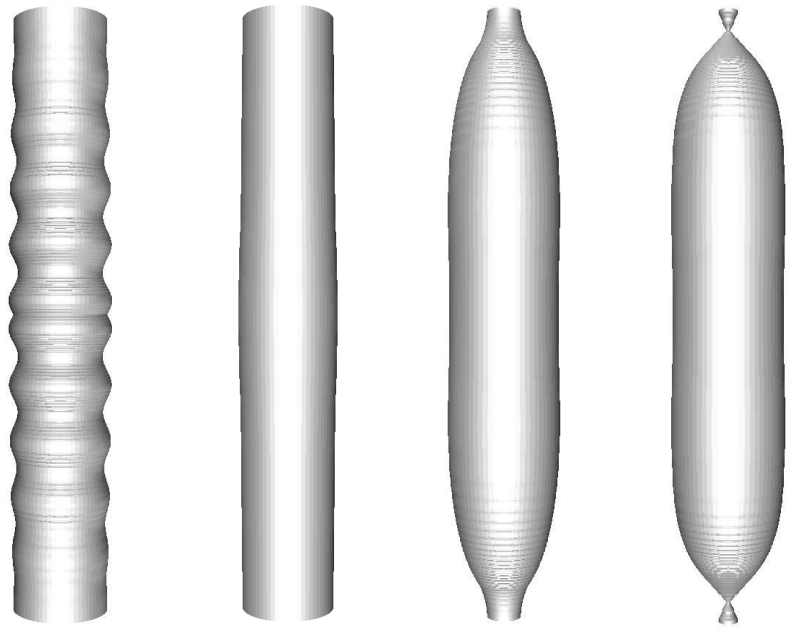

FIG. 4.7 – Instabilités de Rayleigh-Plateau pour un cylindre ondulé.

Dans cette simulation, on choisit $P_1 = 2\pi/5.5$ et $P_2 = 2\pi/5$ et on impose des conditions de Neumann de part et d'autre du cylindre, les calculs sont effectués en coordonnées axisymétriques avec $\triangle t = 10^{-4}$. L'évolution du profil du cylindre est tracée sur la figure 4.7 et on retrouve ainsi les résultats théoriquement prouvés.

4.2.5 Cas bidimensionnel

On vérifie, en considérant le même profil initial utilisé pour le cas axisymétrique, que la rupture du cylindre ondulé n'est pas possible dans le cas bidimensionnel, ceci est prouvé thériquement. En effet, on observe sur la figure 4.10 qu'on converge vers une forme stable. Par ailleurs, le résidu et l'erreur tracée dans les normes L^2 , H^1 et L^∞ montrent la convergence vers un état stationnaire (voir figure 4.8).

4.2.6 Instabilités de Rayleigh-Plateau d'un cylindre attaché à une sphère

Un second test illustrant les instabilités de Rayleigh-Plateau est proposé par [3]. On considère une sphère collée à un cylindre, les deux formes présentent chacune une courbure moyenne constante et lorsqu'ils sont collés ensembles, on finit par avoir une rupture dans la zone du raccord. Ceci est mis en évidence dans la figure 4.9 où on reconstruit aussi les profils tridimensionnels à partir des calculs numériques.

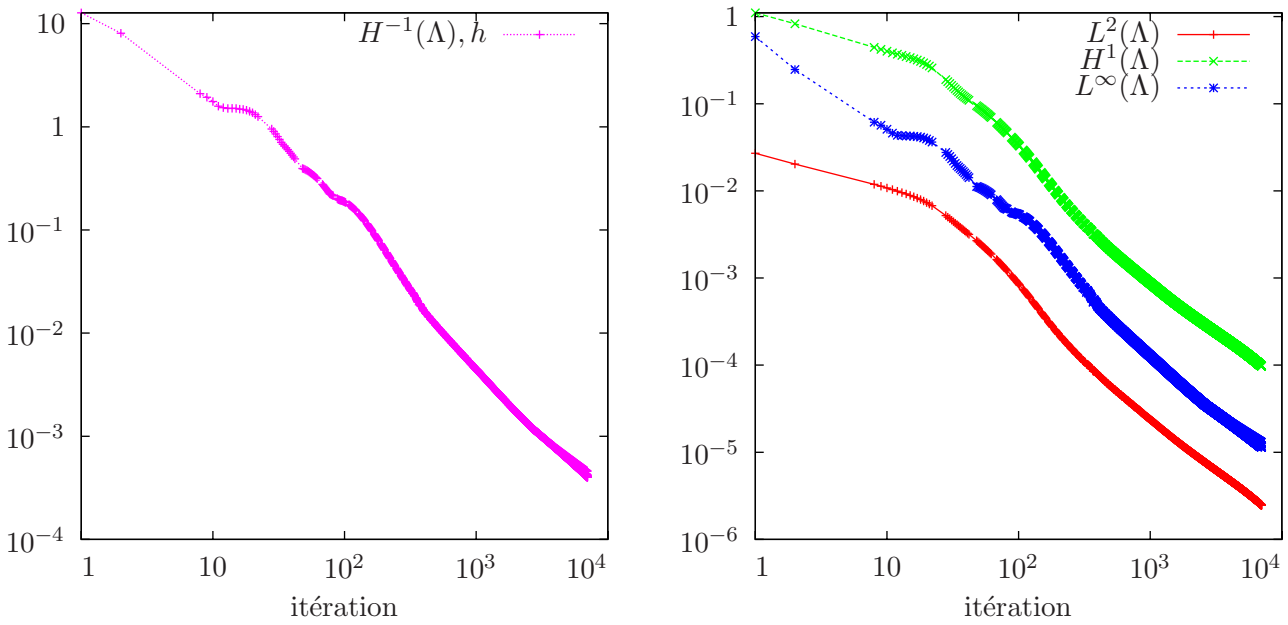

FIG. 4.8 – Tracé en échelle logarithmique : (a) : du résidu. (b) : de l'erreur.

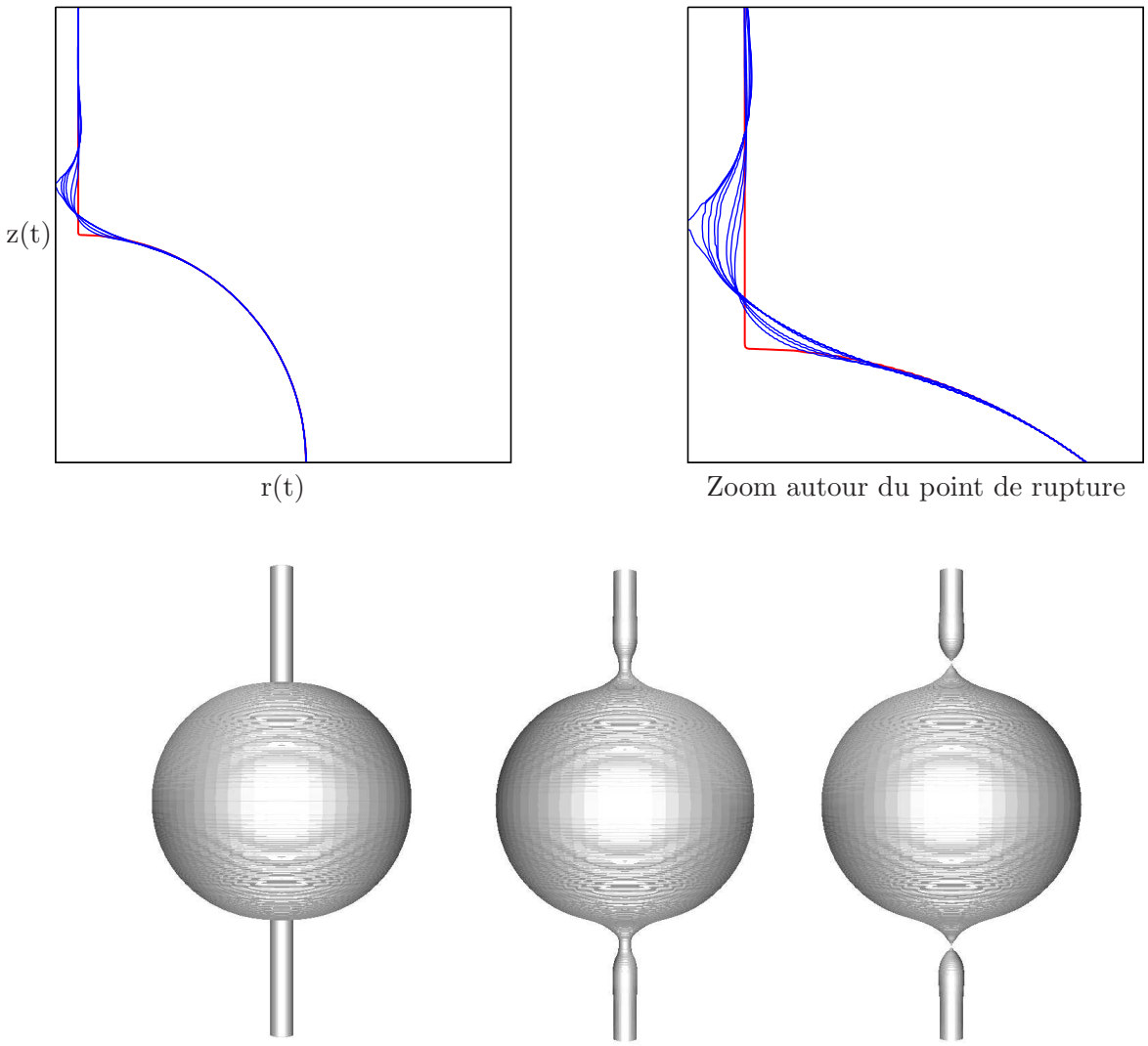

FIG. 4.9 – Un cylindre attaché à une sphère soumis à un mouvement par diffusion de surface.

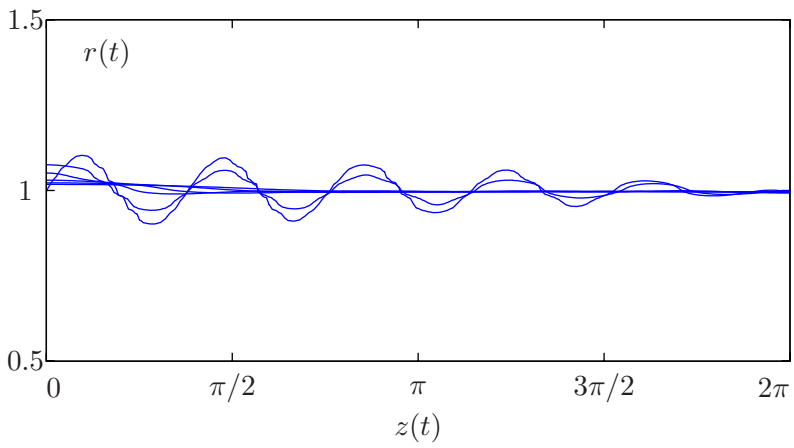

FIG. 4.10 – Évolution du cylindre ondulé en dimention 2.

Deuxième partie

Applications aux vésicules

Chapitre 5

Équilibre des membranes biologiques

Sommaire

5.1 Position du problème **66**
5.2 Équation d'Euler-Lagrange **67**
5.3 Facteurs de dépendance de la forme **75**
5.4 Conclusion **77**

Les applications visées dans cette thèse concernent les membranes biologiques. Par ailleurs, l'objectif de ce chapitre est de fournir une condition mécanique caractérisant les vésicules biologiques en équilibre. Nous formulons le problème en premier lieu mathématiquement sous la forme d'un problème d'optimisation de forme sous contraintes et nous dérivons par la suite l'équation d'Euler-Lagrange vérifiée par des membranes en équilibre.

5.1 Position du problème

On considère une surface fermée orientée assez régulière Γ de $\mathbb{R}^{d-1}$, $d = 2, 3$. On se place dans le cas d'une vésicule ayant un genre topologique constant, l'énergie de courbure de Canham et Helfrich est donnée par la fonctionnelle :

$$\mathscr{J}(\Omega) = \frac{k_c}{2} \int_\Gamma (H - H_0)^2 \, \mathrm{d}s \,, \tag{5.1}$$

où Ω représente le domaine intérieur de la vésicule et $\Gamma = \partial\Omega$. Les configurations d'équilibres des vésicules seront déterminées par la minimisation de l'énergie de courbure (5.1) sous contraintes : volume V_0 conservé (fluide incompressible à l'intérieur de la vésicule) et surface A_0 conservée (membrane inextensible).

Les vésicules peuvent être plus ou moins gonflées. Expérimentalement, leurs taux de dégonflement dépendent des additifs rajoutés dans la solution : le dégonflement est d'origine osmétique. Il peut également être d'origine thermique : l'expansion thermique des phospholipides est plus facile que celle de l'eau enclose sous la membrane. Ainsi, on peut augmenter la surface de la membrane plus rapidement que celle du volume intérieur. La quantité qui mesure le taux de dégonflement est appelée le *volume réduit* et elle représente le rapport entre le volume réel de la vésicule et celui d'une sphère ayant la même surface A_0 :

$$\gamma = \frac{3V_0}{4\pi} \times \left(\frac{4\pi}{A_0}\right)^{3/2} \in \,]0, 1] \,. \tag{5.2}$$

Par ailleurs, γ est un nombre sans dimension ; il vaut 1 pour une sphère et il est toujours inférieur à 1 pour toute autre forme. Pour le globule rouge humain, par exemple, il vaut environ 0.64. En faisant varier γ, la forme qui minimise l'énergie de courbure peut varier d'un ellipsoide allongé à une forme biconcave, vers des formes variées comme celle d'une cacahouette.
La forme peut être étudiée éventuellement en fonction d'un autre paramètre de forme : l'excès de la surface δ, c'est un paramètre qui quantifie l'écart de la forme par rapport à une sphère :

$$\delta = A_0 \times \left(\frac{4\pi}{3V_0}\right)^{2/3} - 4\pi \,. \tag{5.3}$$

Dans le cas bidimensionnel, V_0 et A_0 représentent respectivement l'aire et le périmètre. L'aire réduite γ représente le rapport entre l'aire de la vésicule V_0 et celle d'un cercle ayant le même périmètre A_0. Quant à l'excès du périmètre δ, il représente l'écart par rapport à un cercle. Les paramètres γ et δ sont donnés respectivement par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{V_0}{\pi} \times \left(\frac{2\pi}{A_0}\right)^2 && \in \,]0, 1] \,, \\ \delta &= A_0 \times \sqrt{\frac{\pi}{V_0}} - 2\pi && . \end{aligned} \tag{5.4}$$

Pour un cercle, le paramètre γ est maximal et vaut 1 alors que δ est nul.

5.2 Équation d'Euler-Lagrange

5.2.1 Outils de dérivation de forme

On commence par rappeler les outils et les théorèmes principaux de la dérivation par rapport à la forme qu'on utilise dans ce travail. Pour plus de détail ainsi que pour consulter les démonstrations, le lecteur peut consulter les travaux de Murat [73], Simon [89] et Allaire [5].

On considère un domaine ouvert assez régulier Ω de frontière $\Gamma = \partial\Omega$. On note un nouveau domaine $\Omega_{\mathbf{u}} = (\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega)$ où $\mathbf{I}$ représente l'application identité dans l'espace $\mathbb{R}^d$ et $\mathbf{u} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ est le déplacement associé.

Définition : La dérivation de $J(\Omega)$ par rapport à la forme Ω est la dérivée au sens de Fréchet dans $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ à $\mathbf{u} = 0$ de la fonction $\mathbf{u} \to J\left((\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega)\right)$, c.à.d.

$$J\left((\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega)\right) = J(\Omega) + \frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) + o(\mathbf{u}) \quad \text{avec} \quad \lim_{\mathbf{u} \to 0} \frac{\|o(\mathbf{u})\|}{\|\mathbf{u}\|} = 0,$$

où $\dfrac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u})$ représente une forme linéaire et continue dans $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ et $\|.\|$ représente la norme euclidienne classique dans $\mathbb{R}^3$.

Lemme 1 (Cas où l'intégrand ne dépend pas de la forme) : On considère un domaine ouvert assez régulier $\Omega \in \mathbb{R}^d$ et soit une fonction $f(x) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$. On définit

$$J_{vol}(\Omega) = \int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}x \quad \text{et} \quad J_{surf}(\Omega) = \int_\Gamma f(x)\,\mathrm{d}s.$$

Ces deux fonctions sont dérivables par arpport à la forme Ω et on a :

$$\frac{\partial J_{vol}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma f\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s \quad \text{et} \quad \frac{\partial J_{surf}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \mathbf{u}.\mathbf{n}\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}} + Hf\right)\mathrm{d}s,$$

pour tout $\mathbf{u} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$, où H représente la courbure moyenne Γ définit par $H = \nabla.\tilde{\mathbf{n}}$ et $\tilde{\mathbf{n}}$ est une extension locale de la normale $\mathbf{n}$ dans un voisinage de Γ.

Lemme 2 (Cas où l'intégrand dépend de la forme) : On considère un domaine ouvert assez régulier $\Omega \in \mathbb{R}^d$ et $f(\Omega, x)$ une fonction assez régulière de $\mathbb{R}^d$ qui dépend de la forme. On définit

$$\mathcal{J}(\Omega) = \int_\Gamma f(\Omega)\,\mathrm{d}s.$$

Cette fonction est dérivable par rapport à la forme Ω au sens de Fréchet. $\forall \mathbf{u} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$, on a :

$$\frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left(\frac{\partial f}{\partial \Omega}(\Omega) + \mathbf{u}.\mathbf{n}\left(\frac{\partial f(\Omega)}{\partial \mathbf{n}} + Hf(\Omega)\right)\right)\mathrm{d}s.$$

5.2.2 Résumé de l'article

L'objectif de cette partie est de dériver l'équation d'Euler-Lagrange relative à des vésicules en équilibre. On s'intéresse à un problème plus général que celui des vésicules et qui s'écrit sous la forme d'un problème de minimisation d'une fonctionnelle d'énergie sous les contraintes de

conservations du volume et de la surface (l'aire et le périmètre dans le cas bidimensionnel). Il s'agit de résoudre un problème d'optimisation de formes suivant :

$$\Omega = \underset{\Omega \in \mathbb{V}}{\arg\inf} \ \mathscr{J}(\Omega)\,, \tag{5.5}$$

où A_0 et V_0 sont respectivement la surface et le volume de référence et $\mathbb{V}$ représente l'espace des contraintes donné par :

$$\mathbb{V} = \left\{ \omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3 : \int_{\partial\omega} \mathrm{d}s = A_0 \text{ et } \int_{\omega} \mathrm{d}x = V_0 \right\}.$$

Par ailleurs, on considère l'énergie suivante :

$$\mathscr{J}(\Omega) = \int_{\Gamma} f(H)\,\mathrm{d}s\,. \tag{5.6}$$

Avec f une fonction quelconque qu'on suppose assez régulière dans nos calculs. Le problème (5.5) s'écrit sous la forme d'un problème de type point selle donné par :

$$(\Omega; \lambda, p) = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \sup_{\substack{\mu \in \mathbb{R} \\ q \in \mathbb{R}}} \mathscr{L}(\omega; \mu, q)\,, \tag{5.7}$$

où $\mathscr{L}(\Omega; \lambda, p)$ est le lagrangien qui s'exprime en fonction de la forme Ω associée à la membrane et des multiplicateurs de lagrange (λ, p) associés aux contraintes de conservation du volume et de la surface : ils représentent respectivement l'inextensibilité de la membrane et la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la vésicule. Le lagrangien est donné par :

$$\mathscr{L}(\omega; \lambda, p) = \mathscr{J}(\omega) + \lambda \left(\int_{\partial\omega} \mathrm{d}s - A_0 \right) + p \left(\int_{\omega} \mathrm{d}x - V_0 \right). \tag{5.8}$$

Par des outils d'optimisation de forme, on démontre dans [57] que la dérivation par rapport à la forme de l'équation (5.5) est donnée, particulièrement pour une fonction $f : x \to x^2$, par :

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Omega}(\Omega; \lambda, p).(\mathbf{u}) = \int_{\Gamma} \left\{ p + \lambda H + \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - \Delta_s H \right\} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s. \tag{5.9}$$

Par conséquent, l'équation d'Euler-Lagrange caractérisant les membranes biologiques en équilibre est donnée par :

$$p + \lambda H + \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - \Delta_s H = 0\,. \tag{5.10}$$

Physica D 239 (2010) 1567–1572

Contents lists available at ScienceDirect

Physica D

journal homepage: www.elsevier.com/locate/physd

On the equilibrium equation for a generalized biological membrane energy by using a shape optimization approach

A. Laadhari [a,b], C. Misbah [a,*], P. Saramito [b]

[a] Laboratoire de Spectrométrie Physique, 140 avenue de la physique, Université Joseph Fourier, and CNRS, 38402, Saint Martin d'Hères, France
[b] Laboratoire Jean Kuntzmann, Université Joseph Fourier and CNRS, B. P. 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France

ARTICLE INFO

Article history:
Received 16 June 2009
Received in revised form
9 March 2010
Accepted 6 April 2010
Available online 11 May 2010
Communicated by M. Vergassola

Keywords:
Vesicle shape
Red cell membrane
Helfrich energy
Shape optimization

ABSTRACT

A mechanical equilibrium equation of a vesicle membrane under a generalized elastic bending energy is obtained in this paper. Moreover, the derivation of this equilibrium equation is based on some shape optimization tools. This approach is new and more concise than the tensorial tools used previously for this problem.

© 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Phospholipid membranes are abundant in biology. They represent the major component of the cytoplasmic membrane of real cells. They are also present within the cell cytoplasm (e.g. Golgi apparatus, a complex assembly of phospholipid layers which serve to form small vesicles for protein transport). Phospholipid membranes are also used in many industrial applications (e.g. giant liposome emulsions for cosmetics). Pure phospholipid vesicles (a closed membrane suspended in an aqueous solution) constitute an attractive model system in order to describe mechanical and viscoelastic behaviors of many cells, like red blood cells. They are also regarded as promising drug carriers for a delivery at specific sites in the organisms. This explains the increasing interest for biological membranes from various communities ranging from biology to applied mathematics. This contribution is concerned with a certain aspect of mathematical modeling of vesicles, or more generally of phospholipid membranes.

Vesicles are formed by amphiphilic molecules self-assembled in water to build bilayers, in a certain range of concentration and temperature. Several experimental and theoretical studies have focused on the configuration and equilibrium shapes of vesicles (for a review on equilibrium shapes see [1,2]), and on the effect of flow see a recent review [3]).

At room, as well as at the physiological temperature, the membrane is fluid (a two dimensional incompressible fluid). Due to incompressibility, the main mode of deformation of a vesicle is bending. A basic ingredient for biomembranes is thus bending energy. Helfrich [4] introduced a model in which the cost in bending energy is given by

$$\frac{k_c}{2}\int_\Gamma (H-H_0)^2\,\mathrm{d}s+\frac{k_g}{2}\int_\Gamma K\,\mathrm{d}s, \tag{1}$$

where $H = \kappa_1+\kappa_2$ is the mean curvature of the membrane surface, κ_1 and κ_2 are the principle curvatures, $K = \kappa_1\kappa_2$ is the Gauss curvature and H_0 represents the spontaneous curvature that describes the asymmetry effect of the membrane or its environment. The membrane surface is denoted by Γ while Ω represents the inside volume of the vesicle, such that $\Gamma = \partial\Omega$. The integrals are performed along the membrane surface where $\mathrm{d}s$ denotes a surface area, while, in this paper, $\mathrm{d}x$ will represent a volume element. The constants k_c and k_g have the dimension of an energy and represent the bending modulus and the Gaussian curvature modulus, respectively. The second term in the Helfrich model is a topological invariant by the virtue of the Gauss–Bonnet theorem that says if one is not interested in change of topology, then this contribution is a constant and can be ignored. We shall disregard in the energy the contribution coming from Gauss curvature, since we do not account for topological changes.

* Corresponding author. Tel.: +33 476514876; fax: +33 476514544.
E-mail addresses: Aymen.Laadhari@imag.fr (A. Laadhari), cmisbah@ujf-grenoble.fr (C. Misbah), Pierre.Saramito@imag.fr (P. Saramito).

0167-2789/$ – see front matter © 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.
doi:10.1016/j.physd.2010.04.001

The equilibrium shape of vesicle membranes is determined by minimizing the bending energy subject to two constraints: fixed volume (incompressible enclosed fluid) and fixed area (inextensible membrane). It is a shape optimization problem that writes in the saddle point formulation[1] where the Lagrangian[2] L is

$$L(\Omega;\sigma,p) = \int_\Gamma f(H)\,\mathrm{d}s + \sigma\left(\int_\Gamma \mathrm{d}s - A_0\right) + p\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right). \tag{2}$$

The scalars σ and p are Lagrange multipliers, and can be viewed as an effective surface tension and pressure difference, respectively. They enforce constant area A_0 and constant volume V_0 of the vesicle, respectively. The Helfrich energy has been generalized by introducing f, an arbitrary smooth function defined in $\mathbb{R}$. Notice that the classical case corresponds to the choice $f(H) = \frac{k_c}{2}(H - H_0)^2$.

The notion of saddle point can be intuitively understood as follows. We would like the energy to be minimal (or L to be minimal with respect to shape variation) and that at the same time L should behave with respect to σ and p in a such a way to be maximum, so that to enforce constant volume and area (i.e. to suppress the terms proportional to σ and p in L).

Since L is differentiable, any saddle-point $(\Omega;\sigma,p)$ of L satisfies three conditions:

$$\frac{\partial L}{\partial \Omega}(\Omega;\sigma,p) = 0, \qquad \frac{\partial L}{\partial \sigma}(\Omega;\sigma,p) = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial L}{\partial p}(\Omega;\sigma,p) = 0. \tag{3}$$

The two last conditions leads directly to the area and volume constraints, respectively. Thus looking for zeros of derivatives with respect to Lagrange multipliers is equivalent to imposing the two constraints. The aim of this paper is to show that the first condition, that involves the shape derivative $\partial/\partial\Omega$, leads to:

$$p + \sigma H + f(H)H + (2K - H^2)f'(H) - \Delta_s(f'(H)) = 0. \tag{4}$$

Notice that the choice $f(H) = \frac{k_c}{2}(H - H_0)^2$ leads to the classical equilibrium condition:

$$p + \sigma H + k_c\left(\frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - \Delta_s H\right) = 0 \tag{5}$$

where Δ_s is the surface Laplacian (known also as the Laplace–Beltrami operator), and will be defined explicitly in this paper. The result (5) was first derived in [4], relation (31). Notice that these authors used the same notation H for $-(\kappa_1 + \kappa_2)/2$, i.e. minus half of the present definition of the mean curvature $H = \kappa_1 + \kappa_2$. In that paper use of several concepts of differential geometry were evoked (first and second fundamental forms) in order to arrive to the final result. Similar concepts were used (in a somewhat more general manner by using quite involved knowledge in differential geometry like the Gauss–Godazzi–Mainardi and Gauss–Weingarten equations) in Ref. [5] in order to derive the shape equation. The calculation was exemplified for the Helfrich energy and extended to a functional of the form H^n (where n is any integer).

The main objective of this paper is to provide a derivation which is concise and self-contained. Our derivation uses quite simple and classical notions. While we will, in passing, quote some known expressions and Lemma in the mathematical literature, we shall provide their direct derivation here. Our derivation can be made general without specifying the functional expression $f(H)$. We shall discuss in the conclusion when generalized functionals can be expected to arise.

The paper is organized as follow: the second section introduces some notations and preliminary results while the third one aim at obtaining the equilibrium condition for the generalized expression (2) of the Helfrich energy. The paper is completed by a mathematical Appendix.

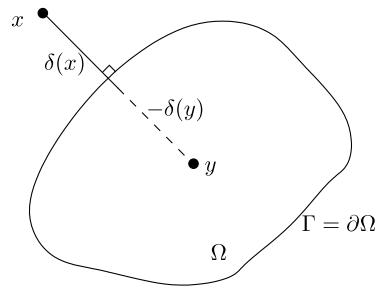

Fig. 1. Schematic view of the geometry. δ, the distance function, is positive for x outside Ω and negative inside. This is the signed distance.

2. Notations and preliminary results

All surface operators used in this paper are defined here. Let $\mathbf{n}$ denotes the unit outward normal vector to the shape Ω. Let f be any scalar function and $\mathbf{v}$ be any vector field. The surface gradient, the surface divergence and the Laplace–Beltrami operator are respectively expressed by:

$$\nabla_s f = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\otimes\mathbf{n})\nabla f = \nabla f - (\mathbf{n}.\nabla f)\mathbf{n}, \tag{6}$$

$$\nabla_s.\mathbf{v} = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\otimes\mathbf{n}) : \nabla\mathbf{v} = \nabla.\mathbf{v} - ((\nabla\mathbf{v}).\mathbf{n}).\mathbf{n}, \tag{7}$$

$$\Delta_s f = \nabla_s.(\nabla_s f). \tag{8}$$

The boundary Γ is then parametrized by a level set function δ, defined, for all $x \in \mathbb{R}^3$, as a signed distance (see Fig. 1):

$$\delta(x) = \begin{cases} \inf\limits_{y\in\Gamma} |y - x| & \text{when } x \notin \Omega, \\ -\inf\limits_{y\in\Gamma} |y - x| & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Then, the normal expresses as a gradient: $\mathbf{n} = \nabla\delta$ (since $|\nabla\delta| = 1$).

Let us now express the mean and the Gauss curvatures. Let $A = \nabla_s\mathbf{n}$. Its characteristic polynom writes:

$$\mathcal{P}_A(\lambda) = \det(A - \lambda\mathbf{I}) = -\lambda^3 + I_1\lambda^2 - I_2\lambda + \det(A),$$

where $I_1 = A_{ii}$ and $I_2 = (A_{ii}A_{jj} - A_{ij}A_{ji})/2$ (repeated indices convention is used), are two invariants; see below.

Let us first show that $A = \nabla_s\mathbf{n} = \nabla\mathbf{n}$. From the definition (6) of ∇_s, it is equivalent to show that $\mathbf{n}.\nabla\mathbf{n} = 0$. On the one hand, since $|\mathbf{n}|^2 = 1$, we have $\nabla(\mathbf{n}.\mathbf{n}) = 0$. On the other hand, by expansion we have $\nabla(\mathbf{n}.\mathbf{n}) = 2(\mathbf{n}.\nabla)\mathbf{n} + 2\mathbf{n}\wedge\mathbf{rot}(\mathbf{n})$. Then $(\mathbf{n}.\nabla)\mathbf{n} = -2\mathbf{n}\wedge\mathbf{rot}(\mathbf{n})$. Next, since $\mathbf{n} = \nabla\delta$, we have $\mathbf{rot}(\mathbf{n}) = \mathbf{rot}(\nabla\delta) = 0$. Finally $\mathbf{n}.\nabla\mathbf{n} = 0$ and then $A = \nabla\mathbf{n}$.

Moreover, from definition of A, it is also the Hessian of the level set function: $A = (\nabla\otimes\nabla)\delta$. Thus A is symmetric and admits three *real* eigenvalues. Since $\mathbf{n}.\nabla\mathbf{n} = \mathbf{n}.A = 0$, A has a zero eigenvalue, associated to the eigenvector $\mathbf{n}$. Let us denote κ_1, κ_2 the two others eigenvalues of A. There exists an orthonormal eigenvector system $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{n})$ associated to $(\kappa_1, \kappa_2, 0)$ such that $A = \kappa_1\mathbf{e}_1\otimes\mathbf{e}_1 + \kappa_2\mathbf{e}_2\otimes\mathbf{e}_2$. By definition [6, p. 47], the values κ_1 and κ_2 are called the principle curvatures and the vectors $\mathbf{e}_1$ and $\mathbf{e}_2$, the principle directions of curvature. The mean curvature

[1] For a mathematical point of view, the saddle point problem is written as: find (Ω,σ,p) such that

$$\inf_{\Omega\subset\mathbb{R}^3}\ \sup_{\sigma,p\in\mathbb{R}} L(\Omega;\sigma,p).$$

[2] Splitting the couple of variables (σ,p) from the variable Ω is a customary rule in mathematical literature in order to emphasize the fact that the two set of variable have different roles.

and the Gauss curvature are, by definition $H = \kappa_1 + \kappa_2$ and $K = \kappa_1\kappa_2$, respectively. Notice that as coefficients of the characteristic polynom, they are invariant by any change of basis, and thus in the eigensystem we find: $I_1 = H$ and $I_2 = K$. Going back to the definition of I_1 and I_2 in terms of $A = \nabla\mathbf{n}$ leads to the following expression of the mean and the Gauss curvatures:

$$H = \nabla_s.\mathbf{n} = \nabla.\mathbf{n} \quad \text{and} \quad 2K = H^2 - \nabla\mathbf{n} : \nabla\mathbf{n}^T. \tag{9}$$

Notice that the use of the level set function δ enables us to extend the quantities $\mathbf{n}, H$ and K in the whole $\mathbb{R}^3$ space while their original definitions was introduced only on the surface Γ.

3. Obtaining the equilibrium equation

For any sufficiently regular shape deformation $\mathbf{u}$, we denote $\Omega_{\mathbf{u}} = (\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega) = \{x + \mathbf{u}(x) \in \mathbb{R}^3; x \in \Omega\}$ the deformed shape (see Fig. 2).

Let us denote by $E(\Omega)$, $A(\Omega, \sigma)$ and $V(\Omega, p)$ the first, second and third terms of the right-hand side in (2), respectively. From Lemma A.1 derived in Appendix A, we get:

$$\frac{\partial V}{\partial \Omega}(\Omega, p)(\mathbf{u}) = p \int_\Gamma \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s. \tag{10}$$

Again, from Lemma A.1:

$$\frac{\partial A}{\partial \Omega}(\Omega, \sigma)(\mathbf{u}) = \sigma \int_\Gamma H\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s. \tag{11}$$

The rest of the paragraph deals with the $E(\Omega)$ term. From Lemma A.2 derived in the Appendix, we obtain:

$$\frac{\partial E}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \frac{\partial f(H)}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u})\, \mathrm{d}s + \int_\Gamma \left(f(H)(\Omega)\, H + \frac{\partial\, (f(H))\, (\Omega)}{\partial \mathbf{n}} \right) \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s, \tag{12}$$

where $\partial/\partial\mathbf{n} = \mathbf{n}.\nabla$ denotes the directional (or normal) derivative. The normal $\mathbf{n}$, which also depends on the shape Ω is differentiable and its shape derivative in any direction $\mathbf{u}$ writes [7]: $\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = -\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n})$. This expression can be derived by considering a particular elementary local displacement $\mathbf{u} = \mathbf{v}\mathrm{d}t$ of the interface Γ, where $\mathbf{v}$ is the velocity. Recall that the level set function satisfies at each time $\delta(t, x(t)) = 0$, so that $\delta(t + \mathrm{d}t, x(t + \mathrm{d}t)) = 0$, and the difference of δ between $t + \mathrm{d}t$ and t divided by $\mathrm{d}t$ (which defines the material derivative $\mathrm{D}/\mathrm{D}t$) is also zero, and this yields (upon a Taylor expansion with respect to $\mathrm{d}t$)

$$\frac{\mathrm{D}\delta}{\mathrm{D}t} = \frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}t} + \mathbf{v}.\nabla\delta = 0.$$

Then we get the following expression for $\mathrm{d}\delta$ (upon multiplication of the above equation by $\mathrm{d}t$ on both sides) of the level set function:

$$\mathrm{d}\delta = -\nabla\delta.\mathbf{u} \tag{13}$$

where $\mathrm{d}\delta$ represents an elementary local displacement of the shape.

The shape derivative of the normal is given by the Fréchet differentiation of $\mathbf{n} = \frac{\nabla\delta(x)}{|\nabla\delta(x)|}$, in the direction $\mathrm{d}\delta$, since the propriety $|\nabla\delta(x)| = 1$ for all position x in $\mathbb{R}^3$ is not preserved if the displacement $\mathrm{d}\delta$ is applied. Consequently, using (13), the shape derivative (see also foot note for the shape derivative along direction $\mathbf{u}$) of $\mathbf{n} = \frac{\nabla\delta(x)}{|\nabla\delta(x)|}$ is given by

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\mathbf{n}(\delta + \varepsilon\mathrm{d}\delta) - \mathbf{n}(\delta)}{\varepsilon} = \frac{\nabla(-\mathbf{u}.\nabla\delta)}{|\nabla\delta|} - \frac{[\nabla(-\mathbf{u}.\nabla\delta).\nabla\delta]\,\nabla\delta}{|\nabla\delta|^3}. \tag{14}$$

By considering the elementary local displacement $\mathrm{d}\delta$, we have $|\nabla\delta(x)| \to 1$ when $\varepsilon \to 0$, and hence

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = -\nabla(\mathbf{u}.\mathbf{n}) + [\mathbf{n}.\nabla(\mathbf{u}.\mathbf{n})]\mathbf{n}.$$

Then,

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = -\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n}). \tag{15}$$

This result can be shown otherwise (see [8, eq. A7]) by following a phase-field approach. Note at this point that an interesting derivation of the final result (4) has been given recently [9,10] without taking the limit $|\nabla\delta(x)| \to 1$. In [8] (see their Appendix A) only the Helfrich energy was considered and not the generalized one, as done in [9,10]. The same type of derivation as the phase field one has been given by using a level set approach [11]. Finally, another work is worth of mention [12] where a thermodynamical consistent derivation of a phase field approach arrived to the same conclusion.

From $H = \nabla.\mathbf{n}$, we obtain $\frac{\partial H}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = -\nabla.[\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n}(\Omega))]$ and then:

$$\frac{\partial f(H)}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = f'(H)\, \frac{\partial H}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = -f'(\nabla.\mathbf{n})\, \nabla.[\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n})].$$

Next, (12) leads to:

$$\frac{\partial E}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma f(H)(\Omega)\, H\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s + \int_\Gamma f'(H)\, \frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}}\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s - \int_\Gamma f'(H)\, \nabla.[\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n})]\, \mathrm{d}s. \tag{16}$$

Let us denote by T the last term of the right-hand side. Then,

$$T = -\int_\Gamma f'(H)\, \nabla.(\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n}))\, \mathrm{d}s = \int_\Gamma \nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n}).\nabla(f'(H))\, \mathrm{d}s - \int_\Gamma \nabla.\left(f'(H)\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n})\right)\, \mathrm{d}s. \tag{17}$$

• **Simplification 1.** Recall that, for any tangential vector field $\mathbf{v_T}$, the Stokes theorem over the closed surface Γ yields

$$\int_\Gamma \nabla_s.\mathbf{v_T}\, \mathrm{d}s = 0. \tag{18}$$

We chose $\mathbf{v_T} = f'(H)\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n})$. By (7) and (18), we have

$$\int_\Gamma \nabla.\mathbf{v_T}\, \mathrm{d}s - \int_\Gamma (\nabla\mathbf{v_T}.\mathbf{n}).\mathbf{n}\, \mathrm{d}s = 0. \tag{19}$$

Using the summation of repeated indices convention, we have:

$$(\nabla\mathbf{v_T}.\mathbf{n}).\mathbf{n} = \mathbf{n}_i\mathbf{n}_j\partial_j\mathbf{v}_{\mathbf{T}i} = \mathbf{n}_j\partial_j(\mathbf{n}_i\mathbf{v}_{\mathbf{T}i}) - \mathbf{v}_{\mathbf{T}i}\mathbf{n}_j\partial_j\mathbf{n}_i.$$

Since $\mathbf{n}.\nabla\mathbf{n} = 0$ (see Section 2) we get:

$$(\nabla\mathbf{v_T}.\mathbf{n}).\mathbf{n} = \mathbf{n}.\nabla(\mathbf{n}.\mathbf{v_T}) - \mathbf{v_T}.[(\mathbf{n}.\nabla)\mathbf{n}] = 0.$$

Consequently,

$$\int_\Gamma \nabla.\left(f'(H)\nabla_s(\mathbf{u}.\mathbf{n})\right)\, \mathrm{d}s = 0. \tag{20}$$

Recall that, for any scalar function g and any vector field $\mathbf{v}$ defined over the closed surface Γ, we have the following identity (see Appendix C):

$$\int_\Gamma \nabla_s g.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s = -\int_\Gamma g\, \nabla_s.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s + \int_\Gamma g\, \mathbf{v}.\mathbf{n}\, H\, \mathrm{d}s.$$

With $g = \mathbf{u}.\mathbf{n}$ and $\mathbf{v} = \nabla(f'(H))$, using (20), we get:

$$T = -\int_\Gamma \nabla_s.\left(\nabla(f'(H))\right)\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s + \int_\Gamma \frac{\partial(f'(H))}{\partial \mathbf{n}}\, H\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s. \tag{21}$$

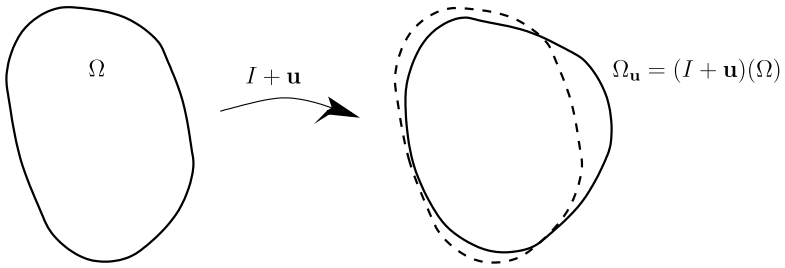

Fig. 2. Representation of the deformed domain $\Omega_{\mathbf{u}} = (\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega)$.

Then (16) becomes:

$$\frac{\partial E}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left(f(H)\, H + f'(H)\, \frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}} + \frac{\partial (f'(H))}{\partial \mathbf{n}} H \right.$$
$$\left. - \nabla_s . \left[\nabla (f'(H)) \right] \right) \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s. \tag{22}$$

This completes our derivation, in principle. However, some useful simplifications can be made, as shown below.

• **Simplification 2.** Using the summation of repeated indices convention, we have:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{n}.\nabla\, (\nabla.\mathbf{n}) = \mathbf{n}_i \partial_i \partial_j \mathbf{n}_j = \partial_j \left(\mathbf{n}_i \partial_i \mathbf{n}_j \right) - \partial_i \mathbf{n}_j \partial_j \mathbf{n}_i$$
$$= \nabla . \left((\mathbf{n}.\nabla)\, \mathbf{n} \right) - \nabla \mathbf{n} : \nabla \mathbf{n}^T.$$

Next, using expression (9) of the Gauss curvature K, we obtain:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}} = 2K - H^2 + \nabla . \left[(\mathbf{n}.\nabla)\, \mathbf{n} \right].$$

Finally, since $\mathbf{n}.\nabla \mathbf{n} = 0$ (see Section 2) we get:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{n}} = 2K - H^2. \tag{23}$$

• **Simplification 3.** From (6) we have:

$$-\nabla_s . \left\{ \nabla (f'(H)) \right\} = -\nabla_s . \left\{ \nabla_s (f'(H)) + \left(\mathbf{n}.\nabla (f'(H)) \right) \mathbf{n} \right\}$$
$$= -\Delta_s (f'(H)) - (\mathbf{n}.\nabla_s) \left\{ \mathbf{n}.\nabla (f'(H)) \right\} - (\mathbf{n}.\nabla)(f'(H))\, (\nabla.\mathbf{n}).$$

Notice that, from definition (6) of ∇_s, we have $\mathbf{n}.\nabla_s = 0$ and then:

$$-\nabla_s . (\nabla (f'(H))) = -\Delta_s (f'(H)) - \frac{\partial (f'(H))}{\partial \mathbf{n}} H. \tag{24}$$

Using the two simplifications (23) and (24), relation (22) becomes:

$$\frac{\partial E}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \{ f(H)\, H + f'(H)\, (2K - H^2) - \Delta_s (f'(H)) \}\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s.$$

Finally, using relation (10), (11), the previous relation leads to:

$$\frac{\partial L}{\partial \Omega}(\Omega; \sigma, p)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \{ f(H)\, H + f'(H)\, (2K - H^2)$$
$$- \Delta_s (f'(H)) + p + \sigma H \}\, \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s. \tag{25}$$

This last expression leads directly to the equilibrium condition (4).

4. Conclusion and discussion

We have provided a new and self-contained derivation of the force for a biological membrane. We have extended the derivation to a generalized expression of the functional $f(H)$. The Helfrich energy can be motivated by assuming that the stretching energy is of harmonic type (the energy is proportional to the square of change of distance from a certain configuration). In more complex situations, like red blood cells for example, this assumption is not obvious, in that a nonlinear constitutive law may constitute a better approximation. We must make a clear distinction between the bending modes and the in-plane shear modes. Bending modes arise both for vesicles and RBCs. When their membrane is bent this implies a small stretching of the membrane (say a change in the natural distance between molecules). For simplicity, consider a small infinitesimal portion of the membrane in two dimensions (the membrane is a line). The membrane has a width ϵ (distance between the internal and external layer of the membrane). The change in distance of that portion costs an energy (per unit area) $k_1(\ell_1 - \ell_{10})^2/2 + k_2(\ell_1 - \ell_{10})^2/2$ (harmonic approximation) were k_1 and k_2 are "spring" constants (per unit area) of the internal and external layers of the membrane, ℓ_1 and ℓ_2 are the actual length of the external and internal portion of the membrane, and ℓ_{10} and ℓ_{20} their natural equilibrium lengths. It is then a simple matter to show [13,2] that this energy can be rewritten as $\kappa(H - H_0)^2/2$ with $\kappa = (k_1 + k_2)(\ell\epsilon/2)^2$ where ℓ is the natural length of the neutral surface. It is then clear that the Helfrich energy follows from the local (i.e. at a given local region of the membrane) harmonic approximation. This type of reasoning is appropriate for pure vesicle membranes. In a more complex situations as is the case probably with a RBCs, and with other entities or tissues where the local constitutive law is not harmonic, the harmonic approximation may attain its limit of validity. For example if bending is limited by stretching of the cytoskeleton, or by a complex network the energy can exhibit non harmonic effects. In a network with macromolecules often entropic contribution of stretching of the network is important. In that case the force is a nonlinear function of change of distances (the energy is not harmonic) [14]. In that case, following the above type of analysis the effective bending energy will also exhibit terms which are not quadratic in H, which is the situation treated here.

The bending force is obtained upon variation of the effective energy with respect to shape, the topic of the present paper. Of course, in addition to bending modes, shear modes in the planes can be excited, and the bending energy must be supplemented with the corresponding contributions. The full force would be the sum of the force derived here plus a shear force arising from the variation of the energy with respect to the two variables representing the membrane in-plane displacement.

Another, perhaps more frequent, situation is that where macromolecules (like proteins) interact with a membrane [15]. The Helfrich energy $k_c/2 \int_\Gamma (H - H_0)^2 \mathrm{d}s$ should be supplemented with a term of the form $\int_\Gamma F(c)$ where F is certain function of protein concentration. In addition, H_0 (the spontaneous curvature) is generally a c-dependent function (see [15]). The total energy takes the form

$$J = \frac{k_c}{2} \int_\Gamma (H - H_0)^2 \mathrm{d}s + \int_\Gamma F(c) \mathrm{d}s. \tag{26}$$

Minimisation of the full energy with respect to c leads to

$$F'(c) - k_c (H - H_0) H_0'(c) = 0. \tag{27}$$

Solving for c yields, generically a nonlinear relation between c and H, and reporting the result into the original energy amounts to minimizing a generalized functional of the form $\int_\Gamma f(H)$, that is an expression of the form dealt with in this paper.

Suppose, as a way of example, that F is a quadratic function of $c, F = \alpha(c - c_0)^2/2$, where c_0 is some natural equilibrium concentration in the absence of coupling with bending modes and α is a positive parameter. Consider, in order to fix idea, the case where H_0 is a linear function of c, $H_0 = S_0(1 + \beta c)$, where S_0 is the natural spontaneous curvature in the absence of adsorbed molecules. From Eq. (27) one gets $c = a + bH$ with $a = c_0 - k_c S_0^2 \beta(1 + \beta c_0)/[\alpha + k_c(\beta S_0)^2]$ and $b = k_c S_0 \beta/[\alpha + k_c(\beta S_0)^2]$. Reporting into the energy (26) one obtains an effective energy (up to an additive constant, which is unimportant for our purposes) given by

$$J = \frac{\bar{k}_c}{2} \int_\Gamma (H - \bar{S}_0)^2 \mathrm{d}s \tag{28}$$

where the energy has the form of the Helfrich one with renormalized bending modulus and spontaneous curvature given by $\bar{k}_c = k_c(1 - S_0\beta b)^2 + \alpha b^2 > 0$ and $\bar{S}_0 = [\alpha b^2 S_0(1 + \beta c_0) + k_c S_0(1 + \beta a)(1 - S_0\beta b)]/\bar{k}_c$. This agrees with the result of Leibler [13]. The situation is different for more general functions $F(c)$. Typical examples are found in the study in biological membranes coupled with a concentration field (see [16] and references therein), where the functional $F(c)$ contains cubic and quartic terms in c. If the dependence with c were not quadratic (say if it contains quartic terms or terms of higher order) then by repeating the above example we would then have an effective energy (after elimination of c) that has the form $\int_\Gamma f(H)$. The derivation presented here can then be used to determine the effective bending force.

Acknowledgements

The authors acknowledge the financial support from ANR (Agence National de la Recherche), project MOSICOB. C.M. is grateful to CNES (Centre National d'Etudes Spatiales) for the financial support.

Appendix A. Some shape optimization tools

The notion and basic tools of shape derivative [17,7,18] is recalled in this Appendix. Starting from a smooth reference open set Ω, with boundary $\Gamma = \partial\Omega$, we consider domains of the type $\Omega_{\mathbf{u}} = (\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega)$ (see Fig. 2) with $\mathbf{I}$ denotes the identity in $\mathbb{R}^3$ and $\mathbf{u}$ is any sufficiently regular vector field.

Definition A.1. The shape derivative of $J(\Omega)$ versus Ω is defined as the Fréchet derivative at $\mathbf{u} = 0$ of $\mathbf{u} \to J((\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega))$, i.e.[3]

$$J((\mathbf{I} + \mathbf{u})(\Omega)) = J(\Omega) + \frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) + o(\mathbf{u})$$
$$\text{with } \lim_{\mathbf{u} \to 0} \frac{\|o(\mathbf{u})\|}{\|\mathbf{u}\|} = 0,$$

where $\frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u})$ is linear and continuous with respect to $\mathbf{u}$ and where $\|.\|$ denotes the usual Euclidean norm in $\mathbb{R}^3$.

Lemma A.1. *Considering a smooth bounded open set $\Omega \in \mathbb{R}^3$ and $f(x)$ a smooth function defined in $\mathbb{R}^3$. Define*

$$J_{vol}(\Omega) = \int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}x \quad \textit{and} \quad J_{surf}(\Omega) = \int_\Gamma f(x)\,\mathrm{d}s.$$

These two functions are shape differentiable at Ω and

$$\frac{\partial J_{vol}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma f\,(\mathbf{u}.\mathbf{n})\,\mathrm{d}s \quad \textit{and}$$
$$\frac{\partial J_{surf}}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \mathbf{u}.\mathbf{n}\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}} + Hf\right)\mathrm{d}s,$$

for any $\mathbf{u}$ smooth enough, where H is the mean curvature of Γ defined by $H = \nabla.\tilde{\mathbf{n}}$ and $\tilde{\mathbf{n}}$ is the local extension of the normal $\mathbf{n}$ near Γ.

Lemma A.2 (*When the Integrand Depends on the Shape*). *Let us consider a smooth bounded open set $\Omega \in \mathbb{R}^3$ and $f(\Omega, x)$ a smooth function defined in $\mathbb{R}^3$ depending also on the domain. Define*

$$J(\Omega) = \int_\Gamma f(\Omega)\,\mathrm{d}s.$$

This function is shape differentiable at Ω regarding Fréchet and, for any smooth function $\mathbf{u}$, we have:

$$\frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left(\frac{\partial f}{\partial \Omega}(\Omega) + \mathbf{u}.\mathbf{n}\left(\frac{\partial f(\Omega)}{\partial \mathbf{n}} + Hf(\Omega)\right)\right)\mathrm{d}s.$$

The next part is intended to give a simple derivation of the Murat–Simon expressions: Lemmas A.1 and A.2, in the two dimensional case.

Appendix B. On a simple derivation of the above announced lemma

Let us start with a two dimensional problem (the boundary is a line)

$$J(\Omega) = \int_\Gamma f(x)\mathrm{d}\ell$$

$\mathrm{d}\ell$ is the curvilinear coordinate, and f is a function which does not depend explicitly on the form, but only on x which is a 2D vector field. Of course x is evaluated at the boundary, since the integral is along the boundary. We have $\mathrm{d}\ell = \mathrm{d}\alpha\sqrt{g}$, where α is a parametrization of a curve (for example if $x(\alpha)$ is parametric representation of a curve, then $g = x'^2$, where prime denotes differentiation with respect to argument). We can thus write

$$J(\Omega) = \int_\Gamma f(x)\sqrt{g}\mathrm{d}\alpha. \tag{29}$$

Since now integration is performed on the parameter α which does not depend on the curve (think of time parametrizing a trajectory!), the variation of J with the shape acquires the simple Euler–Lagrange derivative

$$R \equiv \frac{\delta J}{\delta x} = \frac{\partial(f\sqrt{g})}{\partial x} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\partial(f\sqrt{g})}{\partial x'}. \tag{30}$$

R is nothing but the functional derivative of J (i.e. $\frac{\delta J}{\delta x}$),[4] but not yet the force (see below). Expliciting out R we have

$$R = \sqrt{g}\frac{\partial}{\partial x}f - f\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\partial}{\partial x'}\sqrt{g} - \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\partial\sqrt{g}}{\partial x'}.$$

We have $\partial\sqrt{g}/\partial x' = x'/\sqrt{g}$, $\mathrm{d}/\mathrm{d}\alpha(\sqrt{g}) = x'.x''/\sqrt{g}$, and $\mathrm{d}/\mathrm{d}\alpha(x'/\sqrt{g}) = [x''\sqrt{g} - x'(x'.x'')/\sqrt{g}]/g$. Using the result $r' = \sqrt{g}\mathbf{t}$ (coming from the very definition of the tangent vector $\mathbf{t}$), and $\mathbf{t}' = -H\mathbf{n}\sqrt{g}$, we easily find

$$R = \sqrt{g}\left[Hf\mathbf{n} - \mathbf{t}\frac{\partial f}{\partial \ell} + \frac{\partial f}{\partial x}\right].$$

[3] This is nothing but a Taylor expansion and where $\frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u})$ can also be alternatively written as $\mathbf{u}.\nabla_\Omega \mathbf{J}(\Omega)$ (this is the shape directional derivative along the displacement direction $\mathbf{u}$).

[4] Note that the relation between the shape derivative used previously and the functional derivative written in this Appendix is $\frac{\partial J}{\partial \Omega}(\Omega)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \mathbf{u}.\mathbf{n}\frac{\delta J}{\delta x}\mathrm{d}\alpha$.

By the definition of the functional derivative we have from (29) and (30)

$$\delta J = \int_\Gamma R\delta x \mathrm{d}\alpha = \int_\Gamma \frac{R}{\sqrt{g}}\delta x \mathrm{d}\ell$$

where δx designates a displacement (or variation) of the shape. The force applies to the real elementary material $\mathrm{d}\ell$ and not to the fictitious parametrization $\mathrm{d}\alpha$. This implies from the above relation that the total force is $R/\sqrt{g}$ (i.e. the quantity which multiplies $\mathrm{d}\ell$ (see also [19,20]). Note that since we confine ourselves to two dimensions, the force is defined per unit length (along the direction along which the membrane is supposed to be translationally invariant).

The force applied on the membrane reads thus (from (30) divided by $\sqrt{g}$ and by noting that $-\mathbf{t}\frac{\partial f}{\partial \ell} + \frac{\partial f}{\partial x}$ defines the normal derivative)

$$\left[Hf\mathbf{n} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}}\mathbf{n}\right]$$

since only the normal enters, this means that only normal motion matters. If $\mathbf{u}$ is displacement, the variation with respect to the form acquires the factor $\mathbf{u}.\mathbf{n}$. This is the so-called Murrat-Simon expression (see Lemma A.1). We can reconsider that f depends on shape (actually on x', x'' etc.), we find trivially the generalized expression which contains derivative with respect to form (see Lemma A.2). Extension to 3D is elementary.

Appendix C. The Green formula with surface operators

The Green formula with surface operators is derived in this Appendix. Let any scalar function g and any vector field $\mathbf{v}$ defined over the closed surface Γ, $\mathbf{n}$ is the unit outward normal vector defined as a signed distance function like in the part 2. By (6), we have

$$\int_\Gamma \nabla_s g.\mathbf{v}\mathrm{d}s = \int_\Gamma \nabla g.\mathbf{v}\mathrm{d}s - \int_\Gamma (\nabla g.\mathbf{n})\,(\mathbf{v}.\mathbf{n})\,\mathrm{d}s. \tag{31}$$

We have

$$\int_\Gamma \nabla g.\mathbf{v}\mathrm{d}s = -\int_\Gamma g\nabla.\mathbf{v}\mathrm{d}s + \int_\Gamma \nabla.(g\mathbf{v})\mathrm{d}s. \tag{32}$$

Using (7), (32) gives

$$\int_\Gamma \nabla g.\mathbf{v}\mathrm{d}s = -\int_\Gamma g\nabla_s.\mathbf{v}\mathrm{d}s - \int_\Gamma g\,(\nabla\mathbf{v}.\mathbf{n})\,.\mathbf{n}\mathrm{d}s + \int_\Gamma \nabla.(g\mathbf{v})\mathrm{d}s. \tag{33}$$

By (7), the last term in (33) can be written as

$$\int_\Gamma \nabla.(g\mathbf{v})\mathrm{d}s = \int_\Gamma \nabla_s.(g\mathbf{v})\mathrm{d}s + \int_\Gamma [\nabla(g\mathbf{v})\mathbf{n}]\,.\mathbf{n}\mathrm{d}s. \tag{34}$$

By the Stokes theorem over the closed surface Γ (18),

$$\int_\Gamma \nabla_s.(g\mathbf{v})\mathrm{d}s = \int_\Gamma \nabla_s.[g(\mathbf{v}.\mathbf{n})\mathbf{n}]\,\mathrm{d}s. \tag{35}$$

By (34) and (35)

$$\int_\Gamma \nabla.(g\mathbf{v})\mathrm{d}s = \int_\Gamma (\nabla.\mathbf{n})g\mathbf{v}.\mathbf{n}\mathrm{d}s + \int_\Gamma [\nabla(g\mathbf{v})\mathbf{n}]\,.\mathbf{n}\mathrm{d}s. \tag{36}$$

Using the summation of repeated indices convention, we have:

$$[\nabla(g\mathbf{v})\mathbf{n}]\,.\mathbf{n} = \mathbf{n}_i\mathbf{n}_j\partial_j(g\mathbf{v}_i) = \mathbf{n}_i\mathbf{n}_j g\partial_j\mathbf{v}_i + \mathbf{n}_i\mathbf{n}_j\mathbf{v}_i\partial_j g.$$

Thus,

$$[\nabla(g\mathbf{v})\mathbf{n}]\,.\mathbf{n} = g\,[\nabla\mathbf{v}.\mathbf{n}]\,.\mathbf{n} + (\mathbf{n}.\mathbf{v})(\mathbf{n}.\nabla g). \tag{37}$$

Combining the results (31)–(33), (36) and (37), we obtain

$$\int_\Gamma \nabla_s g.\mathbf{v}\mathrm{d}s + \int_\Gamma g\nabla_s.\mathbf{v}\mathrm{d}s - \int_\Gamma g(\nabla.\mathbf{n})\mathbf{v}.\mathbf{n}\mathrm{d}s = 0.$$

References

[1] U. Seifert, Configurations of fluid membranes and vesicles, Adv. Phys. 46 (1997) 13–137.
[2] S.A. Safran, Statistical Thermodynamics of Surfaces, Interfaces and Membranes, in: Frontier in Physics, vol 90, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA, 1994.
[3] P.M. Vlahovska, T. Podgorski, C. Misbah, Vesicles and red blood cells in flow: from individual dynamics to rheology, C. R. Physique 10 (2009) 775–789.
[4] O.-Y. Zhong-can, W. Helfrich, Bending energy of vesicle membranes: general expressions for the first, second and third variation of the shape energy and applications to spheres and cylinders, Phys. Rev. A 39 (10) (1989) 5280–5288.
[5] R. Capovilla, J. Guven, Stresses in lipid membranes, J. Phys. A: Math. Gen. 35 (2002) 6233–6247.
[6] D.A. Edwards, H. Brenner, D.T. Wasan, Interfacial Transport Processes and Rheology, Butterworth-Heinemann, Boston, MA, 1991.
[7] J. Simon, Differentiation with respect to the domain in boundary value problems, J. Numer. Funct. Anal. Optim. 2 (7–8) (1980) 649–687.
[8] T. Biben, K. Kassner, C. Misbah, Phase-field approach to three-dimensional vesicle dynamics, Phys. Rev. E 72 (2005) 041921.
[9] T. Milcent, Une approche eulérienne du couplage fluide-structure, analyse mathématique et applications en biomécanique, Ph.D. Thesis, Université J. Fourier, Grenoble, France, 2009.
[10] T. Milcent, Comparison between shape optimization and volumic level set approximation for geometrical functionals, arXiv:0806.1288.
[11] E. Maitre, C. Misbah, P. Peyla, A. Raoult, Comparison between advected-field and level-set methods in the study of vesicle dynamics, 2009 (unpublished), arXiv:1005.4120v1.
[12] D. Jamet, C. Misbah, Toward a thermodynamically consistent picture of the phase-field model of vesicles: Curvature energy, Phys. Rev. E 78 (2008) 031902.
[13] S. Leibler, in: D.R. Nelson, T. Piran, S. Weinberg (Eds.), Statistical Mechanics of Surfaces and Membranes, World Scientific, Singapore, 1989.
[14] R.G. Larson, The Structure and Rheology of Complex Fluids, Oxford University Press, Oxford, UK, 1999.
[15] F. Divet, G. Danker, C. Misbah, Fluctuations and instability of a biological membrane induced by interaction with macromolecules, Phys. Rev. E 73 (2002) 041901–041914.
[16] F. Campelo, A. Hernandez-Machado, Model for curvature-driven pearling instability in membranes, Phys. Rev. Lett. 99 (8) (2007) 088101.
[17] G. Allaire, F. Jouve, Minimum stress optimal design with the level set method, Int. J. Boundary Elements Appl. (in press).
[18] F. Murat, J. Simon, Quelques résultats sur le contrôle par un domaine géométrique, Tech. Rep. LA 189, Lab. d'Analyse Numérique, Univ. Paris VI, 1974.
[19] W. Cai, T.C. Lubensky, Hydrodynamics and dynamic fluctuations of fluid membranes, Phys. Rev. E 52 (4) (1995) 4251–4266.
[20] B. Kaoui, G. Ristow, I. Cantat, C. Misbah, W. Zimmermann, Lateral migration of a 2d vesicle in unbounded poiseuille flow, Phys. Rev. E 77 (2008) 021903.

5.3 Facteurs de dépendance de la forme

5.3.1 Cas tridimensionnel

Dans cette partie, on démontre que, pour une courbure spontannée $H_0 = 0$, les formes d'équilibres des vésicules dépendent uniquement du choix d'un facteur de forme γ ou δ. Par ailleurs, on adimensionalise le problème d'optimisation de forme pour mettre en évidence les paramètres dont dépend le problème. D'après (5.7), les formes d'équilibres des vésicules sont données par les points selles du lagrangien (5.8) :

$$\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p) = \frac{k_c}{2}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{d}s + \lambda\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right) + p\left(\int_{\Omega}\mathrm{d}x - V_0\right). \tag{5.11}$$

On adimensionalise le problème en utilisant le rayon caractéristique noté R_0, ce dernier est le rayon d'une sphère ayant la même aire A_0 que la vésicule. Les termes adimensionnés sont affectés d'une tilde et on a :

$$\widetilde{\mathscr{L}}(\widetilde{\Omega};\widetilde{\lambda},\widetilde{p}) = \frac{2}{k_c}\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p) = \int_{\partial\widetilde{\Omega}} \widetilde{H}^2\,\mathrm{d}\widetilde{s} + \widetilde{\lambda}\left(\int_{\partial\widetilde{\Omega}}\mathrm{d}\widetilde{s} - \widetilde{A}_0\right) + \widetilde{p}\left(\int_{\widetilde{\Omega}}\mathrm{d}\widetilde{x} - \widetilde{V}_0\right). \tag{5.12}$$

Les multiplicateurs adimensionnés sont donnés par :

$$\begin{aligned}\widetilde{\lambda} &= \frac{2}{k_c}\lambda R_0^2\,,\\ \widetilde{p} &= \frac{2}{k_c}pR_0^3\,.\end{aligned}$$

Or,

$$\gamma = \frac{3V_0}{4\pi}\times\left(\frac{4\pi}{A_0}\right)^{3/2} = \frac{V_0}{\frac{4}{3}\pi R_0^3}\,.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}\widetilde{V}_0 &= \frac{V_0}{R_0^3} = \frac{4\pi}{3}\gamma\,,\\ \widetilde{A}_0 &= \frac{A_0}{R_0^2} = 4\pi\,.\end{aligned}$$

Ainsi, $\widetilde{\lambda}$ et $\widetilde{p}$ dépendent uniquement du facteur de forme γ. Or, les formes d'équilibre dépendent uniquement de ces multiplicateurs donc le seul paramètre de contrôle est le volume réduit. Toutefois, on peut choisir l'excès de surface comme le facteur de dépendance de la forme. En effet, on a :

$$\gamma = \frac{1}{\left[1+\dfrac{\delta}{2\pi}\right]^2}\,.$$

En conclusion, la forme des vésicules en équilibre dépend uniquement du choix du facteur de forme et de la courbure spontannée.

5.3.2 Cas bidimensionnel

On garde les mêmes notations dans le cas bidimensionnel : on note le périmètre par A_0 et l'aire par V_0. On adimensionalise le problème en utilisant le rayon caractéristique noté R_0 : c'est le rayon d'un cercle ayant le même périmètre A_0 que la vésicule. On a :

$$\widetilde{\mathscr{L}}(\widetilde{\Omega};\widetilde{\lambda},\widetilde{p}) = \frac{2R_0}{k_c}\,\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p) = \int_{\partial\widetilde{\Omega}} \widetilde{H}^2\,\mathrm{d}\widetilde{s} + \widetilde{\lambda}\left(\int_{\partial\widetilde{\Omega}} \mathrm{d}\widetilde{s} - \widetilde{A}_0\right) + \widetilde{p}\left(\int_{\widetilde{\Omega}} \mathrm{d}\widetilde{x} - \widetilde{V}_0\right). \tag{5.13}$$

Les multiplicateurs adimensionnés sont donnés par :

$$\begin{aligned} \widetilde{\lambda} &= \frac{2}{k_c}\,\lambda R_0^2\,, \\ \widetilde{p} &= \frac{2}{k_c}\,p R_0^3\,. \end{aligned}$$

Or,

$$\gamma = \frac{V_0}{\pi} \times \left(\frac{2\pi}{A_0}\right)^2 = \frac{V_0}{\pi R_0^2}\,.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} \widetilde{V}_0 &= \frac{V_0}{R_0^2} = \pi\,\gamma\,, \\ \widetilde{A}_0 &= \frac{A_0}{R_0} = 2\pi\,. \end{aligned}$$

Ainsi, $\widetilde{\lambda}$ et $\widetilde{p}$ dépendent uniquement du facteur de forme γ. Or, les formes d'équilibre dépendent uniquement de ces multiplicateurs donc le seul paramètre de contrôle dans le cas bidimensionnel est l'aire réduite. Par ailleurs, on note que le facteur de forme peut être aussi l'excès du périmètre. En effet, on a :

$$\delta = A_0 \times \left(\frac{\pi}{V_0}\right)^{1/2} - 2\pi\,,$$

donc,

$$\gamma = \frac{1}{\left[1 + \dfrac{\delta}{2\pi}\right]^2}\,.$$

Contrairement au cas tridimensionnel, on montre que la forme d'équilibre des vésicules ne dépend pas de la courbure spontannée H_0. En effet, dans le cas d'une courbure spontannée non nulle, il s'agit de trouver un point selle du lagrangien :

$$\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p) = \frac{k_c}{2}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{d}s - k_c H_0 \int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{d}s + \lambda\left(\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s - A_0\right) + p\left(\int_{\Omega} \mathrm{d}x - V_0\right). \tag{5.14}$$

D'après le résultat principal de l'article [57] évalué pour $f : x \to x$, on a :

$$\frac{\partial \int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{d}s}{\partial\Omega}(\Omega).(\mathbf{u}) = \int_{\Gamma} 2K\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s. \tag{5.15}$$

Or, $K = 0$ en dimension deux et on conclut que, dans les cas bidimensionnel, les formes d'équilibre des vésicules ne dépendent que du facteur de forme qu'on peut choisir soit l'aire réduite γ, soit l'excès du périmètre δ.

5.4 Conclusion

Nous avons démontré dans ce chapitre que, pour une courbure spontannée fixée, les configurations d'équilibres des vésicules ne dépendent que du facteur de forme γ et nous avons prouvé que la minimisation de l'énergie de courbure de Canham et Helfrich implique une équation d'équilibre à vérifier. Ces résultats représentent un outil nécessire pour l'étude de l'équilibre des vésicules en régime statique et pour l'étude de leur dynamique dans le sang ; ces deux volets feront l'objet des prochains chapitres.

Chapitre 6

Configurations d'équilibre par résolution d'EDO

Sommaire

6.1 Formulation du problème **80**
6.2 Équilibre statique des membranes en dimension deux **82**
6.3 Équilibre statique des vésicules axisymetriques **90**
6.4 Formes multiconcaves et diagramme de formes **101**

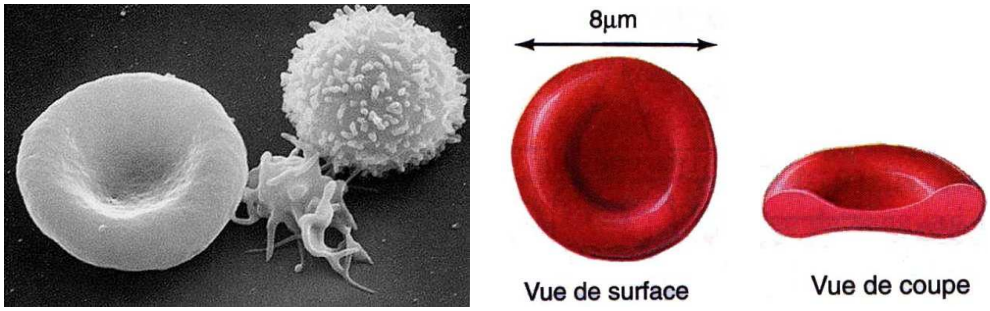

FIG. 6.1 – (gauche) : un globule rouge (érythrocyte), une plaquette sanguine (thrombocyte) et un globule blanc (leucocyte) : image extraite de `www.lookfordiagnosis.com`. (droite) :Vue schématique de dessus et en coupe d'un globule rouge.

L'objectif de ce chapitre est de présenter un spectre de formes d'équilibre pour des vésicules, un modèle simplifié des cellules, notament pour les globules rouges du sang. La paroi du globule rouge est modélisée à travers le modèle de Helfrich [100]. Afin de présenter ces formes le plus clairement possible, on écrit le problème sous la forme d'une équation différentielle ordinaire qu'on résoud par la suite à l'aide d'une méthode de tir, ceci dans les cas bidimensionnel et tridimensionnel axisymetrique. Les profils obtenus vont servir ultérieurement pour valider les solutions obtenues par la méthode des éléments finis.

6.1 Formulation du problème

Durant les dernières années, une attention particulière a été portée à l'exploitation des formes d'équilibres des vésicules biologiques, plus particulièrement celles des globules rouges dans le sang. Les globules rouges peuvent prendre plusieures formes dans le sang mais celles les plus connues sont les formes biconcaves. On s'intéresse dans ce chapitre aux formes géométriques biconcaves présentant un plan de reflexion dans les cas bidimensionnel et tridimensionel axisymetrique.
Les méthodes analytiques représentent les premières méthodes numériques permettant de décrire l'équilibre des globules rouges. En effet, il s'agit de formuler le problème sous la forme d'une équation différentielle ordinaire que l'on désignera par ses initiales EDO. Depuis les premiers travaux apparus, cette méthode a suscité l'intérêt de plusieurs chercheurs, méanmoins les manières avec lesquelles a été abordé le problème étaient variées et elles diffèrent suivant le choix de l'inconnue principale dans les EDOs.
Comme ça a été précédemment introduit, il est connu que les configurations d'équilibres des globules rouges et des membranes biologiques de manière générales sont fortement liées à la formation des bicouches phospholipidiques dans un milieu aquatique. En se basant sur ce volet et en considérant le caractère d'élasticité de la membrane, Canham [13] et Helfrich [96] ont proposé un modèle d'énergie de courbure : voir aussi [100, 25, 26, 63].
Selon cette théorie, les configurations d'équilibres des globules rouges minimisent cette énergie de courbure. On considère une surface fermée Γ dont Ω représente le domaine intérieur et on se place dans le cadre d'un genre topologique constant, l'énergie de courbure de Canham et Helfrich est donnée par la fonctionnelle suivante :

$$\mathscr{J}(\Omega) = \frac{k_c}{2} \int_\Gamma (H - H_0)^2 \, \mathrm{d}s \,, \tag{6.1}$$

où H est la courbure moyenne et H_0 est la courbure spontannée décrivant les éffets d'asymetrie de la membrane. La constante k_c a la dimension d'une énergie et représente le module de régidité de la membrane.
Les configurations d'équilibres des vésicules seront déterminées par la minimisation de l'énergie de courbure sous les contraintes : volume conservé (fluide incompressible à l'intérieur de la vésicule) et surface conservée (membrane inextensible). Par conséquent, on résoud le problème d'optimisation de forme suivant :

$$\Omega = \underset{\Omega \in \mathbb{V}}{\arg\inf} \ \mathscr{J}(\Omega)\,, \tag{6.2}$$

où $\mathbb{V}$ représente l'espace des contraintes donné par :

$$\mathbb{V} = \left\{ \omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2,3 : \int_{\partial\omega} \mathrm{d}s = A_0 \text{ et } \int_{\partial\omega} \mathrm{d}x = V_0 \right\}\,,$$

avec A_0 et V_0 représentent respectivement la surface et le volume de référence (en dimension deux, il s'agit respectivement du périmètre et de l'aire).
On écrit le problème de minimisation sous contraintes de la fonctionnelle $\mathscr{J}(\Omega)$ sous la forme d'un problème de type point selle. Afin de relaxer les contraintes, on introduit le lagrangien :

$$\mathscr{L}(\omega;\sigma,q) = \mathscr{J}(\omega) + \sigma\left(\int_{\partial\omega} \mathrm{d}s - A_0\right) + q\left(\int_{\omega} \mathrm{d}x - V_0\right). \tag{6.3}$$

La solution $(\Omega;p,\lambda) \in \left(\mathbb{R}^d;\mathbb{R},\mathbb{R}\right)$ est un point de selle du lagrangien et elle vérifie la proprieté suivante :

$$\mathscr{L}(\Omega;\sigma,q) \ \leq \ \mathscr{L}(\Omega;\lambda,p) \ \leq \ \mathscr{L}(\omega;\lambda,p), \ \ \forall(\omega;\sigma,q) \in \left(\mathbb{R}^d;\mathbb{R},\mathbb{R}\right)\,.$$

On note que $(\Omega;p,\lambda)$ est un point selle de $\mathscr{L}$ si et seulement si on a :

$$\sup_{\substack{q\in\mathbb{R}\\ \sigma\in\mathbb{R}}} \mathscr{L}(\Omega;\sigma,q) = \inf_{\omega\in\mathbb{R}^d} \sup_{\substack{q\in\mathbb{R}\\ \sigma\in\mathbb{R}}} \mathscr{L}(\omega;\sigma,q) = \mathscr{L}(\Omega;p,\lambda) = \sup_{\substack{q\in\mathbb{R}\\ \sigma\in\mathbb{R}}} \inf_{\omega\in\mathbb{R}^d} \mathscr{L}(\omega;\sigma,q) = \inf_{\omega\in\mathbb{R}^d} \mathscr{L}(\omega;p,\lambda)\,. \tag{6.4}$$

En utilisant (6.4), le problème (6.2) s'écrit sous la forme suivante :

$$(\Omega;\lambda,p) = \underset{\omega\in\mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \sup_{\substack{\mu\in\mathbb{R}\\ q\in\mathbb{R}}} \mathscr{L}(\omega;\nu,q)\,.$$

On écrit $\dfrac{\partial\mathscr{L}}{\partial a}(a)(b)$ pour désigner la dérivée de Fréchet de $\mathscr{L}$ par rapport à la variable a évaluée en a dans la direction b. Par conséquent, la solution $(\Omega;\lambda,p) \in \left(\mathbb{R}^d;\mathbb{R},\mathbb{R}\right)$ vérifie les conditions d'optimalités suivantes :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\mathscr{L}}{\partial\Omega}(\Omega;\lambda,p)(\mathbf{u}) &= 0\,, \quad \forall\mathbf{u} \in W^{1,\infty}\left(\mathbb{R}^d\right)^d\,, \\ \dfrac{\partial\mathscr{L}}{\partial p}(\Omega;\lambda,p)(q) &= 0\,, \quad \forall q \in \mathbb{R}\,, \\ \dfrac{\partial\mathscr{L}}{\partial\lambda}(\Omega;\lambda,p)(\mu) &= 0 \quad \forall\mu \in \mathbb{R}\,. \end{cases} \tag{6.5}$$

Remarque :
Un point selle du lagrangien (6.3) est aussi un point selle de la fonctionnelle :

$$\mathscr{F}(\omega;\mu,q) = \frac{1}{2}\int_{\partial\omega}(H-H_0)^2\,\mathrm{d}s + \tilde{\sigma}\int_{\partial\omega}\mathrm{d}s + \tilde{p}\int_{\omega}\mathrm{d}x\,, \tag{6.6}$$

avec H_0, $\tilde{\sigma} = \dfrac{\sigma}{k_c}$ et $\tilde{p} = \dfrac{p}{k_c}$ sont les paramètres physiques du problème, où σ et p représentent respectivement la tension de surface et la différence de pression osmétique entre le domaine extérieur et le domaine intérieur de la vésicule. Afin de simplifier les notations, on omettra les tildes ultérieurement. Dans les papiers des physiciens, la fonctionnelle $\mathscr{F}(\Omega;\lambda,p)$ est appelée souvent *la fonctionnelle de Helfrich*.

Notations : On considère une fonctionnelle f dépendant d'une fonction $\varphi(x)$ et on introduit les notations suivantes :

$$f'(x) = \frac{df}{dx}(x)\,, \tag{6.7}$$

$$f'_\psi(\varphi) = \frac{df}{d\varphi}(\varphi)(\psi)\,. \tag{6.8}$$

6.2 Équilibre statique des membranes en dimension deux

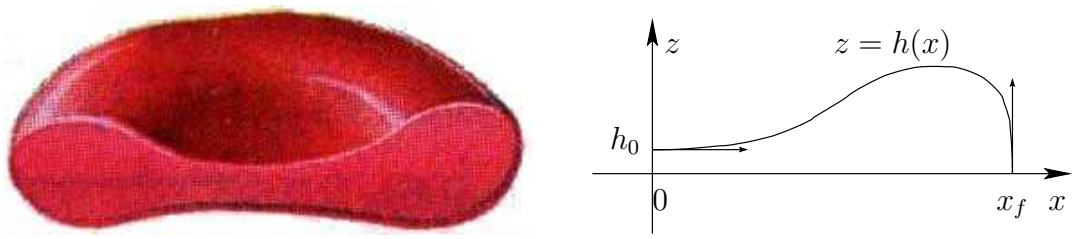

FIG. 6.2 – Modélisation d'une vésicule en coordonnées carthésiennes.

Dans cette partie, on s'intéresse à l'équilibre mécanique des vésicules dans le cas bidimensionnel plan et on se restreint à des vésicules présentant deux axes de symétrie. On note que le but de cette étude n'est pas d'exploiter toutes les formes possibles mais plutôt de fournir des solutions *semi-explicites* afin de valider ultérieurement les algorithmes de calcul par les éléments finis.
Les vésicules en équilibre sont décrites à travers une courbe $z = h(x)$ (voir Fig. 6.2). L'objectif est de fournir en premier lieu une équation différentielle ordinaire décrivant l'état d'équilibre et de résoudre par la suite numériquement cette équation afin de trouver la fonction $h(x)$. On note par x_f le rayon final de la vésicule donné par $h(x_f) = 0$. L'équation de la membrane de la vésicule s'exprime sous la forme paramétrique :

$$\Gamma = \{\mathbf{X}(x,z) \;=\; (x\,,z(x));\; (x,z)\in[0,x_f]\times[0,+\infty]\}\,.$$

Posons $\phi(x,z) = z - h(x)$, la membrane de la vésicule s'exprime aussi sous la forme d'une courbe de niveaux :

$$\Gamma = \{x\in[0,x_f]\times[0,+\infty];\;\phi(x,z)=0\}\,.$$

Un élément de longueur sur la courbe Γ est donné par : $\mathrm{dl} = \left(1 + (h'(x))^2\right)^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{d}x$. Par conséquent, l'aire V_0 et le périmètre A_0 de la vésicule sont donnés par :

$$V_0 = 4\int_0^{x_f} h(x)\,\mathrm{d}x\,, \tag{6.9}$$

$$A_0 = 4\int_0^{x_f} \left(1 + (h'(x))^2\right)^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{d}x\,. \tag{6.10}$$

La normale sortante $\mathbf{n}$ à la vésicule et la courbure moyenne H sont données par :

$$\mathbf{n}(x,z) = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = \frac{1}{(1+(h'(x))^2)^{\frac{1}{2}}}\begin{pmatrix} -h'(x) \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{6.11}$$

$$H(x,z) = \kappa_1 + \kappa_2 = \nabla.\,\mathbf{n} = \partial_x(n_x) + \partial_z n_z\,. \tag{6.12}$$

6.2.1 Formulation du problème

Dans la suite, on fait le changement de variable $w(x) = h'(x)$. Par une intégration par partie et sachant que $z(x_f) = 0$, on obtient :

$$V_0 = -4\int_0^{x_f} w(x)\,x\,\mathrm{d}x\,. \tag{6.13}$$

Le lagrangien (6.3) s'écrit ainsi sous la forme suivante :

$$\frac{\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p)}{2} = \int_0^{x_f} \left[(H-H_0)^2 + \lambda\right]\left(1 + w^2(x)\right)^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{d}x - 2p\int_0^{x_f} x w(x)\,\mathrm{d}x. \tag{6.14}$$

Il s'agit de trouver une équation d'Euler-Lagrange décrivant les positions d'équilibres des vésicules bidimensionelles en utilisant des outils de calcul différentiel (ou infinitésimal). Soit $\psi(x)$ une fonction régulière à support compact. Par conséquent, les points selles sont donnés par la différentiation du lagrangien $\mathscr{L}$ (6.5). On calcule les dérivées fonctionnelles par rapport à w et on a :

$$\left[(H-H_0)^2\right]_\psi(w) = 2\,H_\psi(w)\,(H-H_0)\,,$$

$$\left[\left(1+w^2(x)\right)^{\frac{1}{2}}\right]_\psi(w) = \frac{w(x)\psi}{(1+w^2(x))^{\frac{1}{2}}}.$$

Donc

$$\begin{aligned}\frac{\mathscr{L}'(w;\lambda,p)_\psi(w)}{2} &= 2\int_0^{x_f} H_\psi(w)\,(H-H_0)\,\left(1+w^2(x)\right)^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{d}x \\ &+ \int_0^{x_f}\left[(H-H_0)^2+\lambda\right]\frac{w\psi}{(1+w^2(x))^{\frac{1}{2}}}\,\mathrm{d}x - 2p\int_0^{x_f} x\psi\,\mathrm{d}x\,.\end{aligned} \tag{6.15}$$

La normale est donnée par (6.11) :

$$\mathbf{n}(x,z) = \frac{1}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}}\begin{pmatrix} -w(x) \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.16}$$

Calcul de la courbure $H(x)$

D'après (6.12), la courbure est donnée par :

$$H(x,z) \;=\; \nabla_s.\mathbf{n} \;=\; -\,\frac{w'(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{3}{2}}}\,. \tag{6.17}$$

Calcul de la dérivé $H'(x)$

$$\begin{aligned} H'(x) &= -\,\frac{w''(x)\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{3}{2}} - 3w(x)w'^2(x)\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{1}{2}}}{(1+w(x)^2)^3} \\ &= -\,\frac{1}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}}\left[\left(1+w(x)^2\right)w''(x) - 3w(x)w'^2(x)\right]\,. \end{aligned} \tag{6.18}$$

Calcul de la différentiation $H'_\psi(w)$

$$\begin{aligned} H'_\psi(w) &= -\,\frac{\psi'\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{3}{2}} - 3w(x)\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{1}{2}}w'(x)\psi}{(1+w(x)^2)^3} \\ &= -\,\frac{\psi'\left(1+w(x)^2\right) - 3w(x)w'(x)\psi}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}}\,. \end{aligned} \tag{6.19}$$

Extraction de l'EDO en $w(x)$

On note respectivement par T_1, T_2 et T_3 les trois termes de la différentiation du lagrangien (6.15). Par la suite, on se propose de simplifier chaque terme à part.

$$\begin{aligned} T_1 &= -\int_0^{x_f}\frac{2\,(H-H_0)}{(1+w(x)^2)^2}\left[\left(1+w(x)^2\right)\psi' - 3w(x)w'(x)\psi\right]\,\mathrm{d}x \\ &= -\left[\frac{2\,(H-H_0)}{(1+w(x)^2)}\,\psi\right]_0^{x_f} + \int_0^{x_f}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{2\,(H-H_0)}{(1+w(x)^2)}\right]\psi\,\mathrm{d}x + \int_0^{x_f}\frac{6w(x)w'(x)\,(H-H_0)}{(1+w(x)^2)^2}\,\psi\,\mathrm{d}x\,. \end{aligned}$$

Le premier terme dans l'équation précédente s'annule car $w(x_f) = -\infty$. De plus,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{2\,(H(x)-H_0)}{(1+w(x)^2)}\right] &= \frac{2\,H'(x)\,\left(1+w(x)^2\right) - 2(H(x)-H_0)\,2w(x)w'(x)}{(1+w(x)^2)^2} \\ &= \frac{2H'(x)}{(1+w(x)^2)} - \frac{4(H(x)-H_0)\,w(x)w'(x)}{(1+w(x)^2)^2}\,. \end{aligned}$$

Donc

$$T_1 \;=\; \int_0^{x_f}\frac{2H'(x)}{(1+w(x)^2)}\psi\,\mathrm{d}x + \int_0^{x_f}\frac{2w(x)w'(x)\,(H(x)-H_0)}{(1+w(x)^2)^2}\,\psi\,\mathrm{d}x\,. \tag{6.20}$$

Il reste à évaluer l'intégrant de T_1 (6.20) en utilisant l'expréssion de $H'(x)$ (6.18) :

$$\frac{2H'(x)}{(1+w(x)^2)} + \frac{2w(x)w'(x)\,(H(x)-H_0)}{(1+w(x)^2)^2} = -\frac{2w''(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}} + \frac{4w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} - \frac{2w(x)w'(x)H_0}{(1+w(x)^2)^2}.$$

En utilisant l'expression de $H(x)$ (6.17), on a :

$$(H(x)-H_0)^2+\lambda = \frac{w'(x)^2}{(1+w(x)^2)^3} + \frac{2H_0w'(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{3}{2}}} + \left(H_0^2+\lambda\right).$$

Par conséquent, on peut évaluer T_2 :

$$T_2 = \int_0^{x_f}\left[\frac{w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} + \frac{2H_0w'(x)w(x)}{(1+w(x)^2)^2} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]\psi\,\mathrm{d}x. \tag{6.21}$$

En utilisant les expressions respectives de T_1 (6.20) et T_2 (6.21), l'équation (6.15) est équivalente à :

$$\frac{\mathscr{L}'(w;\lambda,p)_\psi(w)}{2} = \int_0^{x_f}\left[-\frac{2w''(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}} + \frac{5w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}} - 2\,px\right]\psi\,\mathrm{d}x.$$

Les points selles du problème vérifient l'équation suivante :

$$-\frac{2w''(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}} + \frac{5w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}} - 2\,px = 0.$$

Par conséquences, une condition nécessaire de l'équilibre mécanique des membranes est donnée par l'équation d'Euler-Lagrange suivante :

$$\frac{2w''(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}} = \frac{5w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}} - 2\,px. \tag{6.22}$$

En conclusion de cette partie, on résoud un problème en $w(x)$ avec les conditions nécessaires appropriées. Comme on s'intéresse à des solutions ayant un sens physique alors on impose une condition $w_0' > 0$ afin de chercher des solutions biconcaves.

$$\begin{cases} \dfrac{2w''(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}} = \dfrac{5w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} + \dfrac{\left(H_0^2+\lambda\right)w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}} - 2\,px, \quad 0<x<x_f, \\ w(0) = 0, \\ w'(0) = w_0' > 0. \end{cases} \tag{6.23}$$

6.2.2 Reformulation de l'équation différentielle

Il s'agit de résoudre l'équation différentielle (6.23) du second ordre en $w(x)$. Afin de simplifier son expression et notamment diminuer les puissances élevées aux dénominateurs, on fait un changement de variable $\kappa(x) = -\mathbf{n}_x(x)$ qui correspond à la première composante du vecteur normal et on réécrit le problème (6.23) en fonction de la variable auxiliaire κ donnée par :

$$\kappa(x) = \frac{w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}}. \tag{6.24}$$

Quant à la condition initiale, elle est donnée par :

$$\kappa(0) = 0. \tag{6.25}$$

Calcul de la dérivé $\kappa'(x)$

D'après (6.24), la dérivée de $\kappa(x)$ est donnée par :

$$\begin{aligned}\kappa'(x) &= \frac{w'(x)\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{1}{2}} - \dfrac{w^2(x)w'(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}}}{(1+w(x)^2)} \\ &= \frac{w'(x)}{(1+w^2(x))^{3/2}}\,. \end{aligned} \tag{6.26}$$

En zéro, on a :

$$\kappa'(0) = w'(0)\,. \tag{6.27}$$

Calcul de $\kappa''(x)$

D'après (6.26), la dérivée seconde de κ est donnée par :

$$\begin{aligned}\kappa''(x) &= \frac{w''(x)\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{3}{2}} - 3w(x)w'^2(x)\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{1}{2}}}{(1+w(x)^2)^3} \\ &= \frac{w''(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{3w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}}\,. \end{aligned} \tag{6.28}$$

Problème exprimé en fonction de $\kappa(x)$

On remplace dans l'équation (6.28) $w''(x)$ par l'expression donnée par (6.22) et on utilise l'équation (6.26) pour exprimer $\kappa'(x)$, on obtient l'équation différentielle suivante :

$$\frac{2\kappa''(x)}{(1+w(x)^2)} = \frac{5w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} - \frac{6w(x)w'^2(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)w(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}} - 2px. \tag{6.29}$$

D'après (6.24), $\kappa(x)$ et $w(x)$ ont le même signe et on a :

$$w(x) = \frac{\kappa(x)}{(1-\kappa^2(x))^{\frac{1}{2}}}\,. \tag{6.30}$$

On introduit le polynôme affine suivant :

$$P(\xi) = \left(H_0^2+\lambda\right)\xi - 2px\,.$$

On remplace $w(x)$ par son expression en fonction de $\kappa(x)$ (6.30) dans l'équation (6.29), on obtient le problème suivant :

$$\left\{\begin{aligned} \kappa'' &= \frac{P(\kappa)(x) - \kappa(x)\kappa'^2(x)}{2(1-\kappa^2)}, \quad 0 < x < x_f\,, \\ \kappa(0) &= 0\,, \\ \kappa'(0) &= w'(0)\,. \end{aligned}\right. \tag{6.31}$$

On note que la courbure moyenne (6.17) s'exprime en fonction des nouvelles variables du problème par :

$$H(x) = -\kappa'(x)\,. \tag{6.32}$$

Autre formulation de l'EDO en $w(x)$

L'équation différentielle (6.22) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\left[\frac{w'^2(x)}{(1+w^2(x))^{5/2}}\right]' = \frac{2w''(x)w'(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{5}{2}}} - \frac{5w(x)w'^3(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{7}{2}}}\,.$$

Par conséquences, le problème (6.23) est équivalent à :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \left[\dfrac{w'^2(x)}{(1+w^2(x))^{5/2}}\right]' & = & w'(x)P\left(\kappa(x)\right), \quad 0 < x < x_f\,, \\ w(0) & = & 0\,, \\ w'(0) & = & w'_0\,. \end{array}\right. \tag{6.33}$$

Résolution numérique

On résoud le problème (6.31). Afin de réduire un ordre de dérivation dans ce problème, on pose $y(x) = (y_1, y_2) = (\kappa(x), \kappa'(x))$, $y_0 = (0, w'(0))$ et

$$f(y) = \left(\begin{array}{c} y_2 \\ \dfrac{P(y_1) - y_1 y_2^2}{2(1-y_1^2)} \end{array}\right).$$

Le problème (6.31) se réduit à une EDO du premier ordre en fonction de y :

$$y' = f(y), \quad 0 < r < x_f\,, \tag{6.34}$$

$$y(0) = y_0\,. \tag{6.35}$$

Il faut résoudre sur $[0, x_f]$ avec x_f assez grand pour avoir tout l'intervalle tel que $1 - \kappa^2(x)$ change de signe et devient négatif pour $x \in]x_c, x_f[$. On effectue une méthode de tir pour avoir x_c, et ensuite on utilise $x_f = x_c$. Finalement, on a :

$$w(x) = \frac{\kappa}{(1-\kappa^2)^{1/2}}, \quad 0 < x < x_f\,, \tag{6.36}$$

$$h(x) = \int_{x_f}^{x} w(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{6.37}$$

6.2.3 Autres approches pour résoudre le problème

D'autres approches sont possibles pour résoudre ce problème et notamment pour exploiter un spectre plus large des solutions. On citera principalement celles les plus importantes dans cette section. La première consiste à résoudre un problème en fonction de la cordonnée curviligne s, ensuite on en déduit la position de la vésicule en cordonnées carthésiennes. On cite comme référence de ce travail la thèse de Cantat [14]. La seconde méthode consiste à considèrer l'angle θ établi entre la normale sortante en chaque point et l'axe des abscisses comme étant l'inconnue principale du problème. On renvoie le lecteur aux travaux suivants [46, 24, 49, 53, 99] où l'équation de la forme a été déterminée dans le cas axisymetrique. Concernant le cas carthésien,

on n'a pas trouvé des références bibliographiques qui le traite. La troisième approche consiste à considèrer l'équation d'équilibre d'Euler-Lagrange donnée dans [57] et de dériver par la suite l'équation différentielle correspondante. On explicite dans cette partie le problème obtenu et on met en évidence les difficultés observées. La courbure est donnée par la formule (6.11), quant à la courbure de Gauss, elle est donnée par :

$$2K(x,z) = (\nabla.\mathbf{n})^2 - \nabla\mathbf{n} : \nabla\mathbf{n} \;=\; 0\,.$$

L'équation d'Euler-Lagrange est donnée par :

$$p \;+\sigma H(x) \;-H(x)(H^2(x) - H_0^2) \;-\Delta_s H = 0\,. \tag{6.38}$$

On note par s l'abscisse curviligne et on a :

$$\frac{d}{ds} \;=\; \frac{1}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}}\,\frac{d}{dx}\,. \tag{6.39}$$

Par définition, la courbure moyenne est donnée par :

$$H \;=\; \frac{d\,\theta}{ds}\,. \tag{6.40}$$

On peut exprimer donc le bilaplacien en fonction de $w(x)$:

$$\begin{aligned}
\Delta_s H(x) \;&=\; \frac{d^2\,H}{ds^2}\\
&=\; \frac{1}{(1+w(x)^2)^{\frac{1}{2}}}\,\frac{d}{dx}\left[\left(1+w(x)^2\right)^{\frac{1}{2}}\,\frac{d}{dx}\left(\frac{-w'(x)}{(1+w(x)^2)^{\frac{3}{2}}}\right)\right]\\
&=\; \frac{w'''(x)(1+w^2(x)) \;-\; 3w'(x) - 11w(x)w'(x)w''(x)(1+w^2(x)) \;+\; 18w^2(x)w'^3(x)}{(1+w(x)^2)^5}\,.
\end{aligned}$$

On obtient finalement l'équation différentielle suivante :

$$\left\{\begin{aligned}
\frac{w'''(x)}{(1+w(x)^2)^4} \;&=\; -\frac{3w'^3(x)(6w^2(x)-1) \;-11w(x)w'(x)w''(x)\left(1+w(x)^2\right)}{(1+w(x)^2)^5}\\
&\quad +\frac{w'^3(x)}{2\,(1+w(x)^2)^{\frac{9}{2}}} - \frac{\lambda w'(x)}{2\,(1+w(x)^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{p}{2},\quad 0<x<x_f\,,\\
w(0) \;&=\; 0\\
w'(0) \;&=\; w_0' > 0\,,\\
w''(0) \;&=\; w_0''\,.
\end{aligned}\right. \tag{6.41}$$

La difficulté trouvée dans la dernière formulation du problème réside dans le choix de la valeur de $w''(0)$ qui est important pour assurer l'existence des solutions biconcaves. Quant à la résolution numérique, on peux utiliser la même méthode précédemment prescrite en choisissant $y(x) = (y_1, y_2) = (w(x), w'(x), w''(x))$, $y_0 = (0, w'(0), w''(0))$. Le problème (6.41) implique une équation différentielle du premier ordre en y donnée par :

$$y' \;=\; f(y,x),\quad 0<x<x_f\,, \tag{6.42}$$

$$y(0) \;=\; y_0\,. \tag{6.43}$$

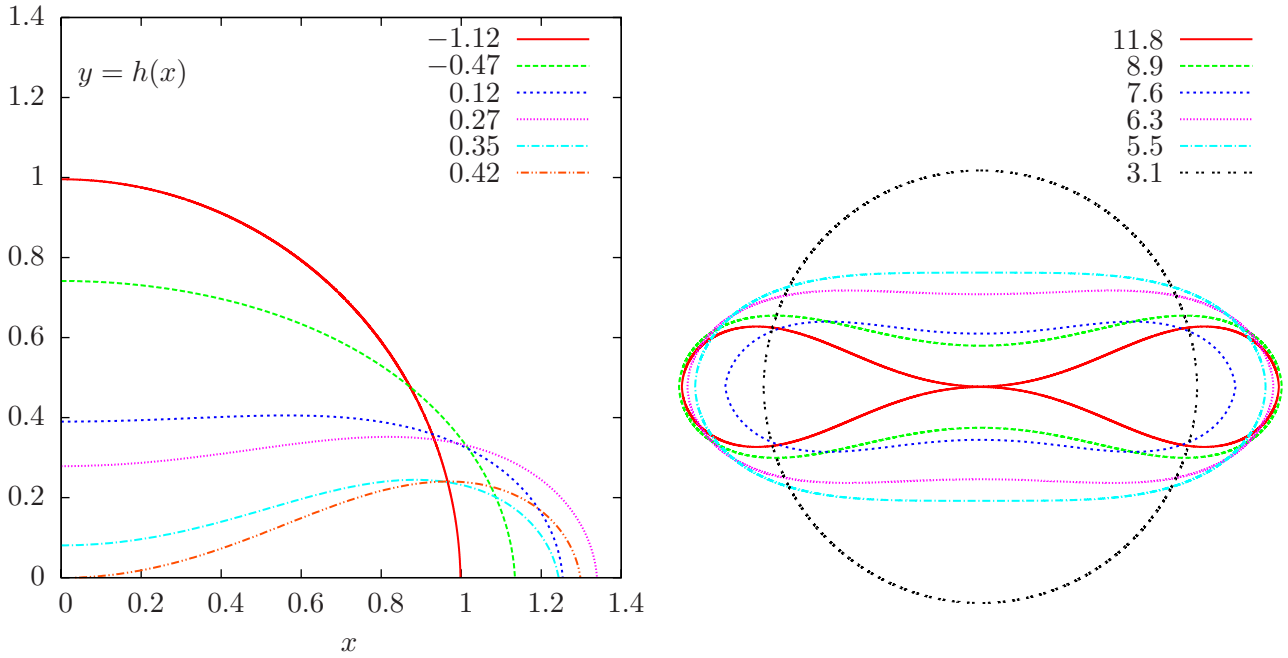

FIG. 6.3 – Tracé de la solution $h(x)$ selon le choix de w_0' pour $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$: (a) : calcul et (b) : profil plan reconstruit et l'énergie de Helfrich correspondante.

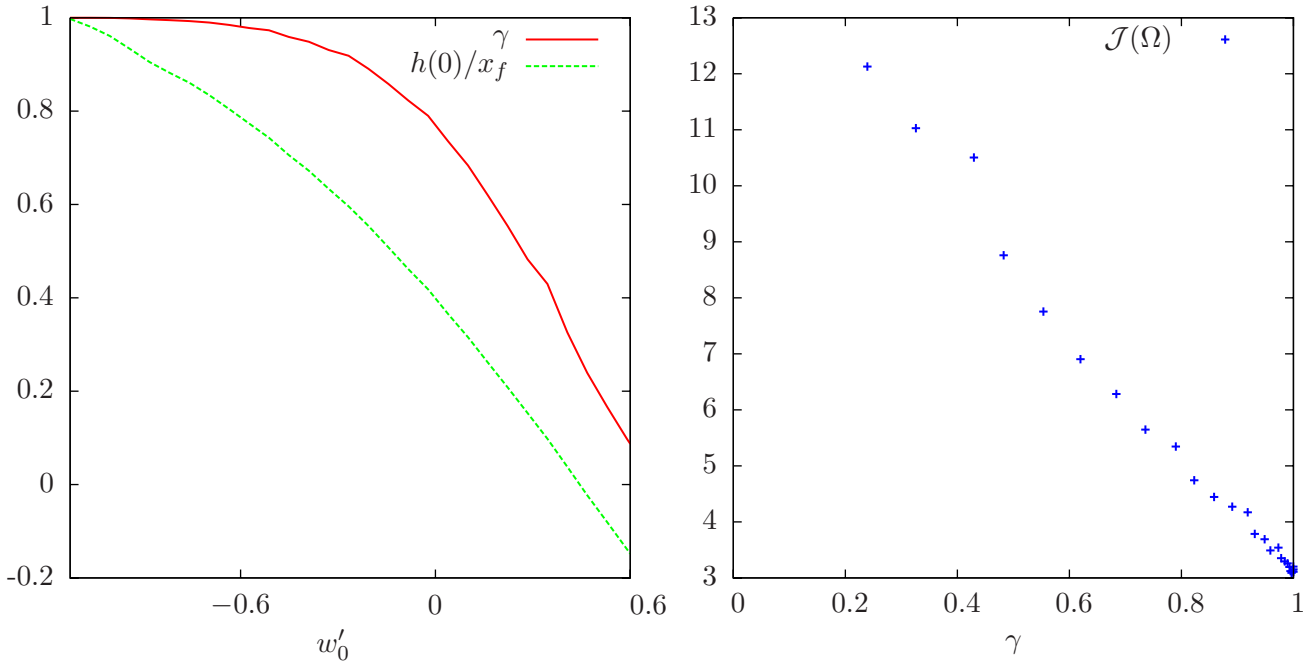

FIG. 6.4 – Tracé de la solution pour $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$: (a) : γ et $h(0)/x_f$ en fonction de w_0' , (b) : $\mathcal{J}(\Omega)$ en fonction de γ.

6.2.4 Simulations numériques dans le cas bidimensionnel

On s'intéresse à l'évolution de la forme en fonction du choix de la condition initiale w_0' et on fixe les paramètres physiques $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$, $p = 0.5$. On varie w_0' dans l'intervalle $[-1.2, 0.85]$ et on trace quelques solutions trouvées sur la figure 6.3. Les membranes évolue d'une forme circulaire à aire réduite $\gamma = 1$ et ayant un excès de périmètre $\delta = 0$ à une forme très applatie au delà de laquelle la solution n'a plus un sens physique. On a respectivement :

1. Pour $w_0' = 0.445$, $\gamma = 0.27$, $\delta = 5.68$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 11.84$;
2. Pour $w_0' = 0.3$, $\gamma = 0.45$, $\delta = 3$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 8.9$;
3. Pour $w_0' = 0.2$, $\gamma = 0.59$, $\delta = 1.92$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 7.65$;
4. Pour $w_0' = 0.1$, $\gamma = 0.68$, $\delta = 1.31$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 6.28$;
5. Pour $w_0' = 0$, $\gamma = 0.77$, $\delta = 0.87$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 5.47$;
6. Pour $w_0' = -0.03$, $\gamma = 0.79$, $\delta = 0.79$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 5.1$;
7. Pour $w_0' = -1.125$, $\gamma = 0.999$, $\delta = 2.7 \times 10^{-4}$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 3.11$.

Afin de vérifier que la solution obtenue est admissible physiquement, on évalue un facteur de forme qui donne la rapport entre les deux dimensions de la membrane $h(0)/x_f$, ce paramètre doit être positif pour que la solution ait un sens physique. On trace l'évolution du volume réduit γ ainsi que de $h(0)/x_f$ en fonction de w_0' sur la figure 6.4(a) et on trace dans la figure 6.4(b) l'évolution de l'énergie de courbure de Canham et Helfrich en fonction de γ pour ce spectre de solutions.

6.3 Équilibre statique des vésicules axisymetriques

6.3.1 Formulation du problème

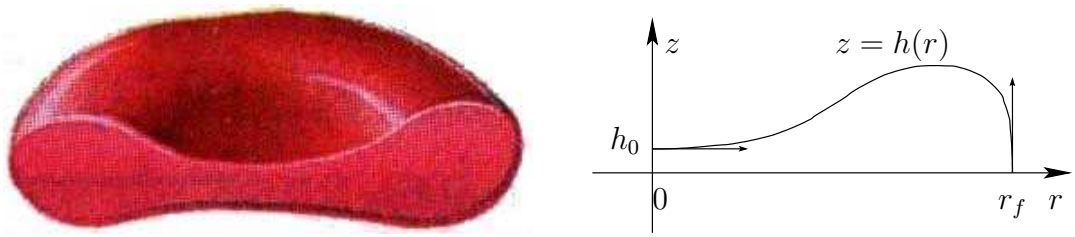

FIG. 6.5 – Modélisation d'une vésicule en coordonnées axisymetriques.

Dans cette partie, on cherche la forme au repos $z = h(r)$ d'une vésicule axisymétrique (voir Fig. 6.5), connaissant son volume et sa surface :

$$V_0 = 4\pi \int_0^{r_f} h(r)\, r\, \mathrm{d}r\,, \tag{6.44}$$

$$A_0 = 4\pi \int_0^{r_f} \left(1 + (h'(r))^2\right)^{\frac{1}{2}}\, r\, \mathrm{d}r\,. \tag{6.45}$$

En effet, un élément de surface est donné par : $\mathrm{d}s = \left(1 + (h'(r))^2\right)^{\frac{1}{2}}\, r\, \mathrm{d}r\, \mathrm{d}\theta$. Dans ce qui précède, r_f est le rayon final : il vérifie $h(r_f) = 0$ et il n'est pas connu a priori. On pose $\phi(r, z) = z - h(r)$,

l'équation de la membrane de la vésicule s'exprime sous la forme paramétrique :

$$\Gamma = \{\mathbf{X}(r,\theta,z) \;=\; (r\cos(\theta), r\sin(\theta), z(r));\; (r,\theta,z) \in [0,r_f]\times[0,+2\pi]\times[0,+\infty]\}\,.$$

La membrane de la vésicule s'exprime aussi sous la forme d'une courbe de niveaux :

$$\Gamma = \{r \in [0,r_f]\times[0,+\infty];\;\; \phi(r,z) = 0\}\,.$$

La normale sortante à la vésicule et les courbures moyennes et de Gauss sont données par :

$$\mathbf{n}(r,z) \;=\; \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = \frac{1}{(1+(h'(r))^2)^{\frac{1}{2}}}\begin{pmatrix} -h'(r) \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{6.46}$$

$$H(r,z) \;=\; \kappa_1+\kappa_2 = \operatorname{div}\mathbf{n} = \frac{1}{r}\partial_r(r\,n_r) + \partial_z n_z\,, \tag{6.47}$$

$$2K(r,z) \;=\; \kappa_1\kappa_2 = (\operatorname{div}\mathbf{n})^2 - \nabla\,\mathbf{n} : \nabla\,\mathbf{n}\,. \tag{6.48}$$

Similairement au cas plan, on fait le changement de variable $w(r) = h'(r)$. Sachant que $z(r_f) = 0$, par une intégration par partie, l'équation (6.45) implique :

$$V_0 \;=\; -2\pi\int_0^{r_f} w(r)\,r^2\,\mathrm{d}r\,. \tag{6.49}$$

Le lagrangien (6.3) s'écrit ainsi sous la forme suivante :

$$\frac{\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p)}{2\,\pi} = \int_0^{r_f}\left[(H-H_0)^2+\lambda\right]\left(1+w^2(r)\right)^{\frac{1}{2}}\,r\,\mathrm{d}r - p\int_0^{r_f} r^2 w(r)\,\mathrm{d}r\,. \tag{6.50}$$

Dans l'annexe A, on se base sur les travaux de Wan et al. [8] afin de dériver une équation différentielle du second ordre en $w(r)$. Le résultat est donné par l'équation (6.51) :

$$\begin{aligned}\frac{2rw''(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}} \;=\; & \frac{5rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}} - \frac{2w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}} + \frac{2w(r)\;+w^3(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}} \\ & + \frac{2H_0w^2(r)}{(1+w(r)^2)} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)rw(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}} - pr^2\,.\end{aligned} \tag{6.51}$$

Dans le cas des membranes axisymetriques, la courbure principale dans la direction méridinale est le terme basique dans l'analyse du caractère biconcave de la solution obtenue. Cette courbure est donnée par :

$$\kappa(r) \;=\; \frac{w(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}. \tag{6.52}$$

Il est donc important d'écrire le problème en fonction de $\kappa(r)$ au lieu de $w(r)$. En outre, ils existent deux autres écritures de l'équation différentielle (6.51) qu'on trouve souvent dans la bibliographie, ils servent principalement pour faire une étude qualitative des solutions de ce problème. On introduit un polynôme cubique $Q(\xi)$ ainsi que sa partie quadratique $R(\xi)$ et ils sont donnés respectivement par :

$$Q(\xi) \;=\; \xi^3 + 2H_0\xi^2 + (H_0^2+\lambda)\xi\; - p\,, \tag{6.53}$$

$$R(\xi) \;=\; Q(\xi) - \xi^3 \;=\; 2H_0\xi^2 + (H_0^2+\lambda)\xi - \;p\,. \tag{6.54}$$

On multiplie de l'équation (6.51) par $rw'(r)$ et on obtient :

$$\left[\frac{r^2 w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\right]' = \left[\frac{w^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]' + r^3 w'(r) R\left(\kappa(r)\right), \tag{6.55}$$

$$\left[\frac{r^2 w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\right]' = \left[\frac{-2}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]' + r^3 w'(r) Q\left(\kappa(r)\right). \tag{6.56}$$

Finalement, on a un problème en $w(r)$ à résoudre avec les conditions nécessaires appropriées :

$$\begin{cases} -\left(\dfrac{r^2 w'^2}{(1+w^2)^{5/2}}\right)' = \left(\dfrac{2}{(1+w^2)^{1/2}}\right)' - r^3 w' Q\left(\dfrac{w}{r\,(1+w^2)^{1/2}}\right), \quad 0 < r < r_f\,, \\ w(0) = 0\,, \\ w'(0) = w'_0 > 0\,. \end{cases} \tag{6.57}$$

La condition $w'_0 > 0$ n'a de sens que si on cherche une solution biconcave. On montre que pour $w'_0 > 0$ et assez petit, la solution existe dans $[0, r_f]$ avec $w(r_f) = -\infty$, ceci a fait l'objet des travaux de Au et al. [8]. On peut donc résoudre ce problème d'EDO jusqu'à ce que la solution $w(r)$ atteigne r_f. Ensuite, on intègre $h' = w$ de $r = r_f$ à $r = 0$ avec la condition finale $h(r_f) = 0$. Cela marche à p et λ fixés et par la suite, les facteurs de formes γ et δ sont déterminer *a posteriori*.
Par ailleurs, la question du calcul du point de selle reste : il faudra faire un algorithme de type Uzawa pour une aire et un volume fixés. On peut par exemple fixer l'aire et diminuer le volume comme paramètre, car seul le volume rd́uit compte.

Éxtraction de l'EDO en $\kappa(r)$

On s'intéresse dans cette partie à une EDO en fonction de la courbure dans la direction méridienne κ_θ. Considérons le dévelopement limité au voisinage de $r = 0$, on a :

$$w(\varepsilon) \approx w(0) + \varepsilon w'(0) = \varepsilon w'_0\,, \tag{6.58}$$

$$w'(\varepsilon) \approx w'_0\,, \tag{6.59}$$

$$\kappa(\varepsilon) = \frac{w(\varepsilon)}{\varepsilon\,(1+w^2(\varepsilon))^{1/2}} \approx \frac{\varepsilon w'_0}{\varepsilon\,(1+\varepsilon^2 w_0'^2)^{1/2}} \approx w'_0\,. \tag{6.60}$$

Calcul de la dérivé $\kappa'(r)$

D'après (6.52), la dérivée de la courbure méridienne est donnée par :

$$\begin{aligned} \kappa'(r) &= -\frac{r w'(r)\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}} - w(r)\left[\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}} + \dfrac{r w(r) w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]}{r^2\,(1+w(r)^2)} \\ &= \frac{w'(r)}{r\,(1+w^2(r))^{3/2}} - \frac{w(r)}{r^2\,(1+w^2(r))^{1/2}} \\ &= \frac{w'(r)}{r\,(1+w^2(r))^{3/2}} - \frac{\kappa(r)}{r}. \end{aligned} \tag{6.61}$$

Au voisinage de zéro, on effectue un developpement limité :

$$\begin{aligned}\kappa'(\varepsilon) &= \frac{w'(\varepsilon)}{\varepsilon\,(1+w^2(\varepsilon))^{3/2}} - \frac{w(\varepsilon)}{\varepsilon^2\,(1+w^2(\varepsilon))^{1/2}} \approx \frac{w_0'}{\varepsilon\,(1+\varepsilon^2 w_0'^2)^{3/2}} - \frac{\varepsilon w_0'}{\varepsilon^2\,(1+\varepsilon^2 w_0'^2)^{1/2}} \\ &\approx \frac{w_0'}{\varepsilon}\left(1-\frac{3\varepsilon^2 w_0'^2}{2}\right) - \frac{w_0'}{\varepsilon}\left(1-\frac{\varepsilon^2 w_0'^2}{2}\right) = -\varepsilon w_0'^3\,. \end{aligned} \tag{6.62}$$

Calcul de $\kappa''(r)$

D'après (6.61), la dérivée seconde de la courbure méridienne est donnée par :

$$\begin{aligned}\kappa''(r) &= \frac{w''(r)r\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{3}{2}} - w'(r)\left[\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{3}{2}} + 3rw(r)w'(r)\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}}\right]}{r^2\left(1+w(r)^2\right)^3} \\ &\quad - \frac{w'(r)r^2\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}} - w(r)\left[2r\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}} + r^2\dfrac{w(r)w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]}{r^4\left(1+w(r)^2\right)} \\ &= \frac{w''(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2\kappa'(r)}{r} - \frac{3w(r)w'^2(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\,. \end{aligned} \tag{6.63}$$

Problème exprimé en fonction de $\kappa(r)$

On remplace dans l'équation (6.63) $w''(r)$ par son expression donnée par (6.51) et on utilise l'équation (6.62) pour exprimer $\kappa'(r)$, on obtient l'équation différentielle du second ordre suivante :

$$\begin{aligned}\frac{2r^2\kappa''(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}} &= -\frac{-rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}} - 6\frac{r\kappa'(r)}{(1+w(r)^2)} + \frac{w^3(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}} \\ &\quad + \frac{2H_0 w^2(r)}{(1+w(r)^2)} + \frac{\left(H_0^2+\lambda\right)rw(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}} - pr^2\,. \end{aligned} \tag{6.64}$$

On note que $\kappa(r)$ est donnée par (6.52). D'après (6.60), $\kappa(0)$ est donnée par $w'(0) \geq 0$ qui est une condition nécessaire de la biconcavité de la vésicule. Par conséquent, $\kappa(r)$ et $rw(r)$ sont du même signe et on a :

$$w(r) = \frac{r\kappa(r)}{(1-r^2\kappa^2(r))^{\frac{1}{2}}}\,.$$

On remplace $w(r)$ par cette expression dans l'équation (6.64), on se ramène au problème suivant :

$$\begin{cases} \kappa'' = \dfrac{Q(\kappa)-\kappa(r\kappa'+\kappa)^2}{2(1-r^2\kappa^2)} - \dfrac{3\kappa'}{r}, \quad 0<r<r_f\,, \\ \kappa(0) = w_0' > 0\,, \\ \kappa'(0) = 0\,. \end{cases} \tag{6.65}$$

Par ailleurs, la courbure moyenne s'exprime en fonction des nouvelles variables du problème par :

$$H(r) = -2\kappa(r) - r\kappa'(r)\,. \tag{6.66}$$

Résolution numérique

Afin de réduire l'ordre de dérivation par rapport à κ, on pose $y(r) = (y_1, y_2) = (\kappa(r), \kappa'(r))$, $y_0 = (w_0', 0)$ et

$$f(y,r) = \begin{pmatrix} y_2 \\ \dfrac{Q(y_1) - y_1(ry_2 + y_1)^2}{2(1 - r^2 y_1^2)} - \dfrac{3y_2}{r} \end{pmatrix}.$$

Le problème se réduit à une équation différentielle du premier ordre en $y(r)$. Elle est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y' & = & f(y,r), \quad 0 < r < r_f\,, \\ y(0) & = & y_0\,. \end{array} \right. \tag{6.67}$$

Le problème est singulier en $r = 0$ car on divise par r dans l'expression de f. Pour cela, on le résoud numériquement sur un intervalle $[\varepsilon, r_f]$. On pose $y_\varepsilon = (w_0', -\varepsilon w_0'^3)$, le problème devient :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y' & = & f(y,r), \quad \varepsilon < r < r_f\,, \\ y(\varepsilon) & = & y_\varepsilon\,. \end{array} \right. \tag{6.68}$$

Numériquement, il faut résoudre sur $[\varepsilon, r_f]$ avec r_f assez grand pour avoir tout l'intervalle tel que $1 - r^2\kappa^2(r)$ change de signe et devient négatif pour $r \in]r_c, r_f[$. On effectue une méthode de tir pour avoir r_c, et par la suite, on utilise $r_f = r_c$. Finalement,

$$w(r) = \frac{r\kappa}{(1 - r^2\kappa^2)^{1/2}}, \quad \varepsilon < r < r_f\,, \tag{6.69}$$

$$h(r) = \int_{r_f}^{r} w(r)\,\mathrm{d}r\,. \tag{6.70}$$

6.3.2 Sens physique des solutions

L'existence des solutions de l'équation différentielle (6.65) est un problème mathématique classique qui est bien étudié. Ce qui nous intéresse dans ce problème est le caractère physique de la solution et la conformeté de la solution aux résultats physiques connus. Le point essentiel est de montrer que la forme de la solution est admissible de point de vue physique, ceci implique qu'on a une surface fermée qui ne présente pas des intersections d'origines purement mathématiques. Ceci induit la connaissance du premier zéro de la solution $h(r)$, le nombre des zéros, le nombre des points critiques, etc.
La membrane est décrite par la courbe :

$$\Gamma = \{\mathbf{X}(r,z) \,=\, (r\,, z(r));\ (r,z) \in [0, r_f] \times [0, +\infty]\}\,.$$

Afin d'assurer le *caractère biconcave de la solution* de (6.65), on cherche une solution $z = h(r)$ tel que $h(r) \geq 0$ pour $r \in [0, r_f]$ et $h(r_f) = 0$. Les conditions précédentes se traduisent par :

1. $w(0) = 0$;
2. $w(r) \to -\infty$, lorsque $r \to r_f$;
3. Il existe $r_M \leq r_f$ tel que $w'(r) \geq 0$ si et seulement si $r \in]0, r_M[$.

La dernière condition implique que $w(r)$ possède un unique maximum et un unique point d'inflexion atteint en r_I et qu'il n'y a pas d'autres points critiques. Ceci veux dire que la fonction $h(r)$ possède aussi un unique maximum pour $r \in [0, r_f]$ atteint en r_M et qu'il n'y a pas d'autres

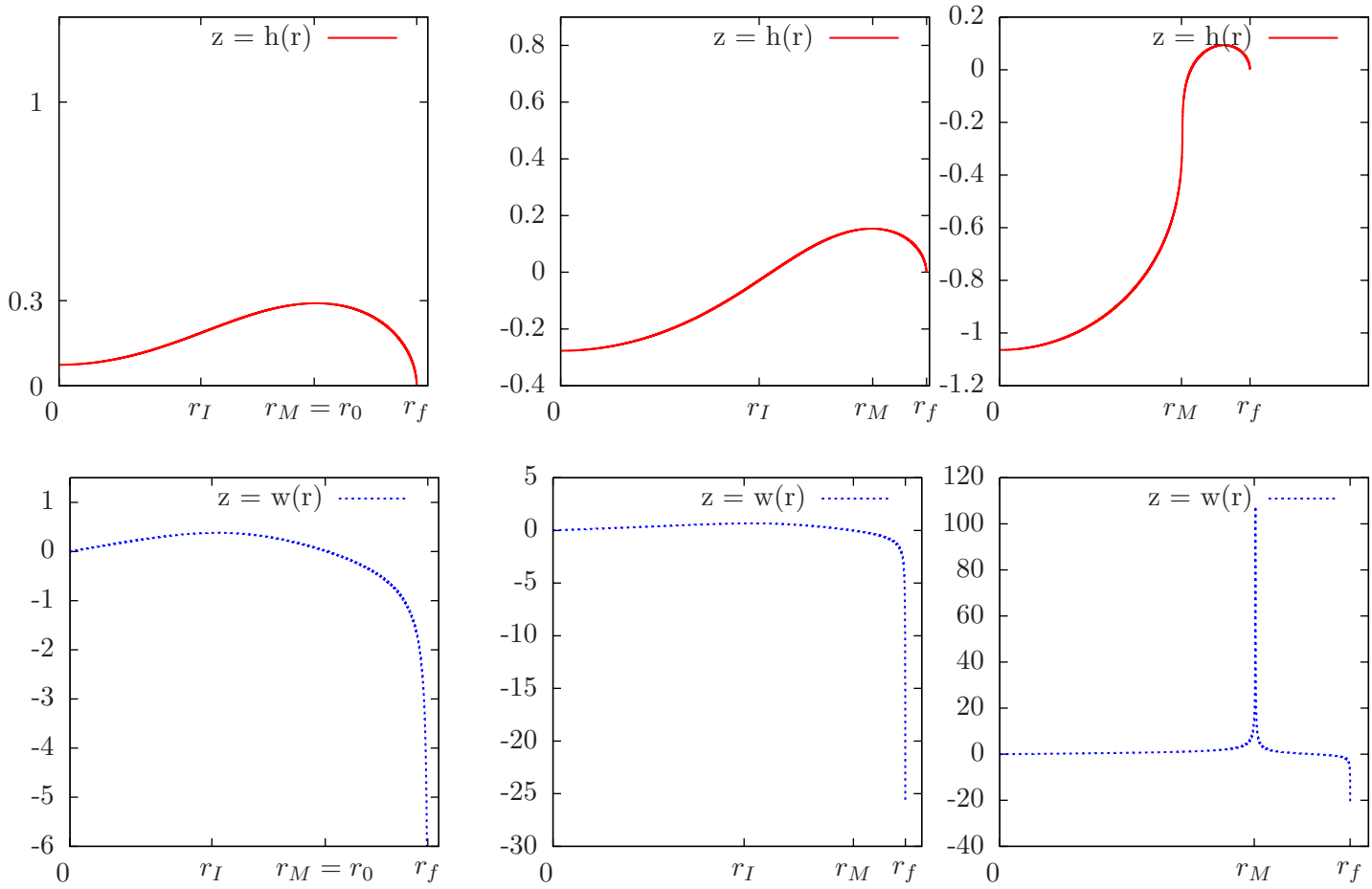

FIG. 6.6 – Tracé de la solution pour $H_0 = 1$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$: (a) : $H_0 = 1$, $\lambda = 0.25$, $p = 0.5$ et $w_0' = 0.2765$, (b) : $H_0 = 1$, $\lambda = 0.25$, $p = 0.5$ et $w_0' = 0.25$, (c) : $H_0 = 0.5$, $\lambda = -1$, $p = 0.5$ et $w_0' = 0.4$.

points critiques. Conformément à ces conditions, on en déduit que la condition initiale doit vérifier $w'(0) = w_0'(r) \geq 0$. On peut obtenir plusieures configurations d'une solution biconcave. Sur la figure 6.6, on trace les configurations biconcaves possibles. La première colonne correspond à la solution biconcave physiquement admissible, elle satisfait les conditions portées sur $w(r)$. La seconde possède une forme biconcave mais elle présente des croisements et elle n'est pas admissible du point de vue physique. Par ailleurs, la dernière colonne présente un cas limite où la solution présente une dérivée très grande : il s'agit d'une limitation de la formulation du problème sous la forme (6.68).
En effet, cette formulation ne permet de traiter que des applications en fonction de la coordonnée radiale r et par conséquent elle ne permet pas d'avoir des rebroussements dans les profils des solutions.

6.3.3 Simulations numériques

On présente dans cette partie des tests numériques permettant d'exploiter le code et de voir la dépendance de la forme des vésicules des paramètres physiques du problème. Quant aux

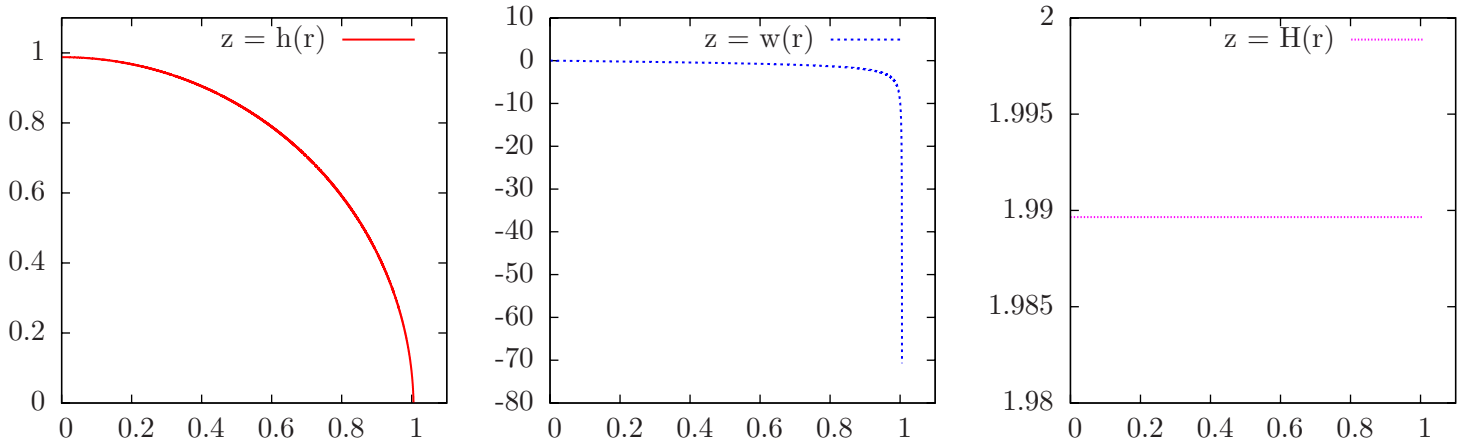

FIG. 6.7 – Tracé de la solution pour $w_0' = 1$ et $\lambda = p = H_0 = 0$: (a) $h(r)$ et (b) : $w(r)$ et (c) $H(r)$.

paramètres numériques, on choisit $\varepsilon = 10^{-7}$ et $N = 10^4$ (N est le nombre des points de discrétisation). Toutefois, on note que toutes les courbes correspondent à une representation adimensionnée pour une aire=4π constante.

Cas particulier

Dans le cas particulier $\lambda = p = H_0 = 0$, la solution est une sphère. En effet, $R(\xi) = 0, \forall \xi$. L'équation (6.55) implique :

$$\left[\frac{r^2 w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\right]' = \left[\frac{w^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]'.$$

Par une intégration, en faisant $r \to 0$, on en déduit que la constante est nulle et on a :

$$\frac{r^2 w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}} = \frac{w^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}.$$

D'après (6.61),

$$\kappa'(r) = \frac{w'(r)}{r\,(1+w^2(r))^{3/2}} - \frac{w(r)}{r^2\,(1+w^2(r))^{1/2}} = 0\,.$$

On en déduit que $\kappa(r) = \kappa(\varepsilon) = w_0'$. Il s'agit donc d'une sphère de rayon $1/w_0'$. Dans la figure. 6.7, on choisit $\lambda = p = H_0 = 0$ et $w_0' = 1$ et on trace l'évolution du profil adimensionné $h(r)$, la fonction $w(r)$ ainsi que la courbure $H(r)$. On obtient les valeurs suivantes : $\gamma = 0.999$, $\delta = 3.37 \times 10^{-4}$, $A_0 = 12.57$, $V_0 = 4.189$, $\mathcal{J}(\Omega) = 24.87$. Ceci est conforme aux valeurs théoriques égales respectivement à 1 ; 0 ; 4π ; $4\pi/3$; 8π. Finalement, on a $H(r) =$ constante $= 1.99$ et est proche de la valeur théorique égale à 2.

Évolution en fonction de w_0'

On s'intéresse dans un pemier lieu à l'évolution de la forme en fonction du choix de la condition initiale w_0'. On fixe les paramètres physiques $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$, $p = 0.5$, on varie w_0' dans

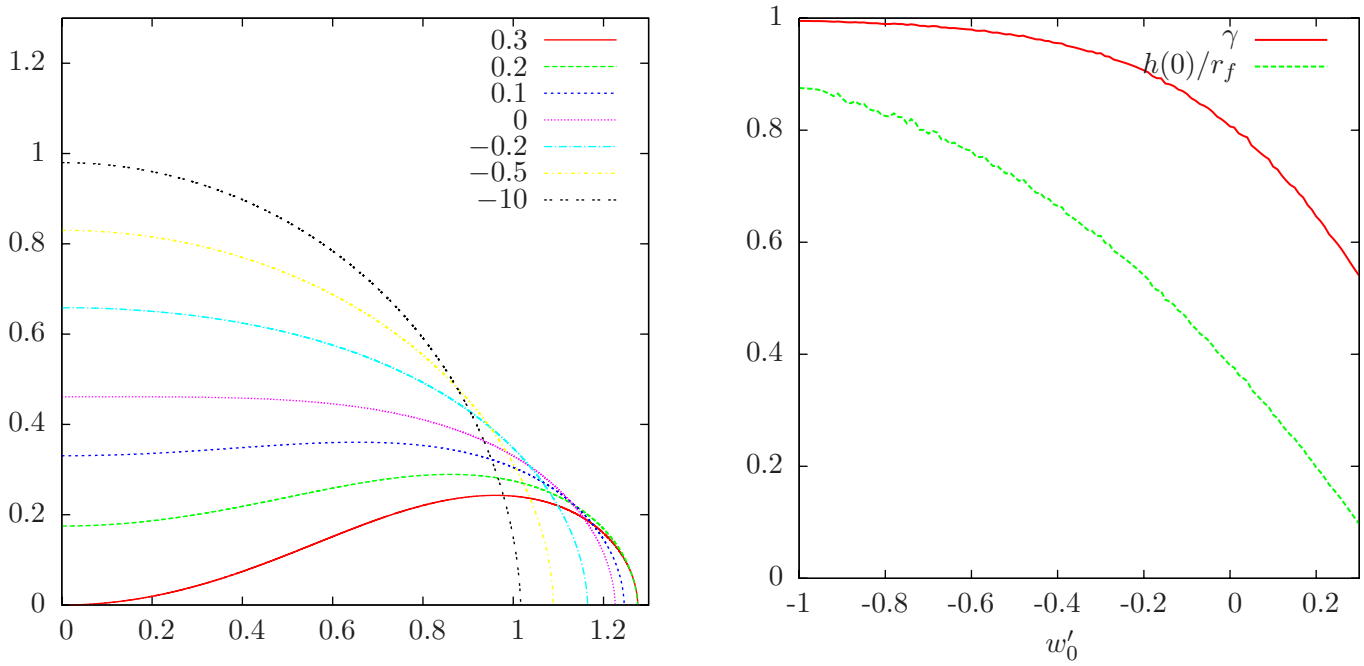

FIG. 6.8 – Tracé de la solution pour $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$ (a) : $h(r)$ selon w_0', (b) : γ et $h(0)/r_f$.

l'intervalle $[-1, 0.3]$ et on trace les profils des solutions sur la figure 6.8. Les solutions évoluent de la forme sphériques vers une forme biconcave très applatie, au delà de laquelle la solution n'est plus admissible physiquement. L'admissibilité physique est assurée si le signe du facteur de forme $h(0)/r_f$ est positif, ce paramètre est tracé sur la figure 6.8(b). La dépendance de l'énergie de Helfrich en fonction du paramètre numérique w_0' est tracée sur la figure 6.9(a). On a démontré dans le chapitre 5 que, pour une courbure spontannée fixé, la forme de la vésicule ne dépend que d'un seul paramètre qui peut être γ ou δ, ainsi on trace dans les figures 6.9(b) et 6.9(c) l'évolution de l'énergie de courbure de Helfrich en fonction de ces paramètres. On remarque que $\mathcal{J}$ augmente en fonction de l'écart à la forme sphérique.

Évolution en fonction de H_0

On s'intéresse à l'évolution de la forme en fonction du choix de la courbure spontannée H_0, on fixe les paramètres physiques $\lambda = 0.25$, $p = 0.5$ et on trace sur la figure 6.10 l'évolution de la forme en fonction de H_0 pour $w_0' = 0$. On trace aussi l'évolution du volume réduit γ ainsi que le facteur de forme $h(0)/r_f$. L'évolution de l'énergie de Helfrich en fonction de w_0', γ et δ sont tracées sur la figure 6.12. Ceci met en évidence l'influence de la courbure spontannée dans le cas tridimensionnel sur la forme de la membrane. Finalement, on trace sur la figure 6.11 un spectre de solutions pour une valeur de w_0' non nulle.

6.3.4 Profils tri-dimensionnels

Dans cette partie, on reconstruit à l'aide de `geomview` certains profils tridimensionnels des membranes obtenues dans cette section.

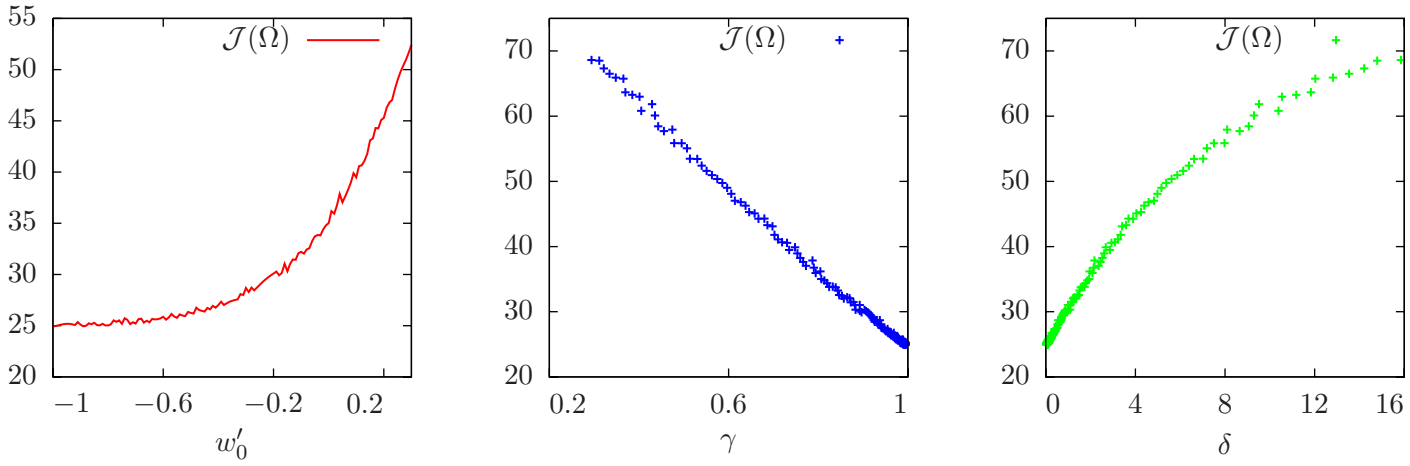

FIG. 6.9 – Évolution de $\mathcal{J}(\Omega)$ pour $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$ selon : (a) : w_0' , (b) : γ et (c) : δ.

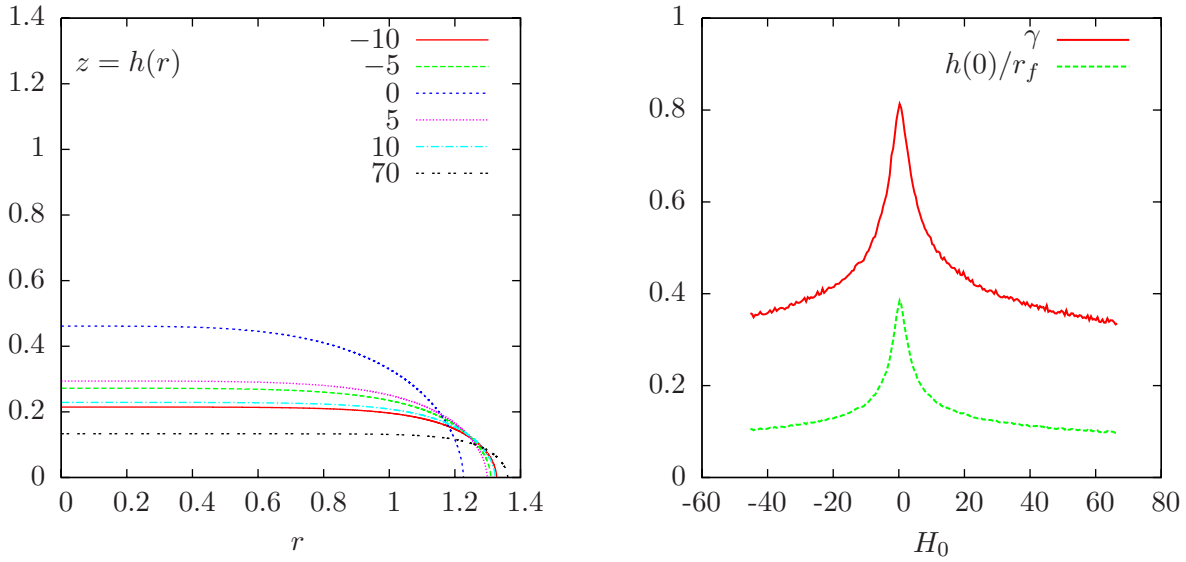

FIG. 6.10 – Tracé selon H_0 pour $w_0' = 0$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$: (a) $h(r)$ et (b) : γ et $h(0)/r_f$.

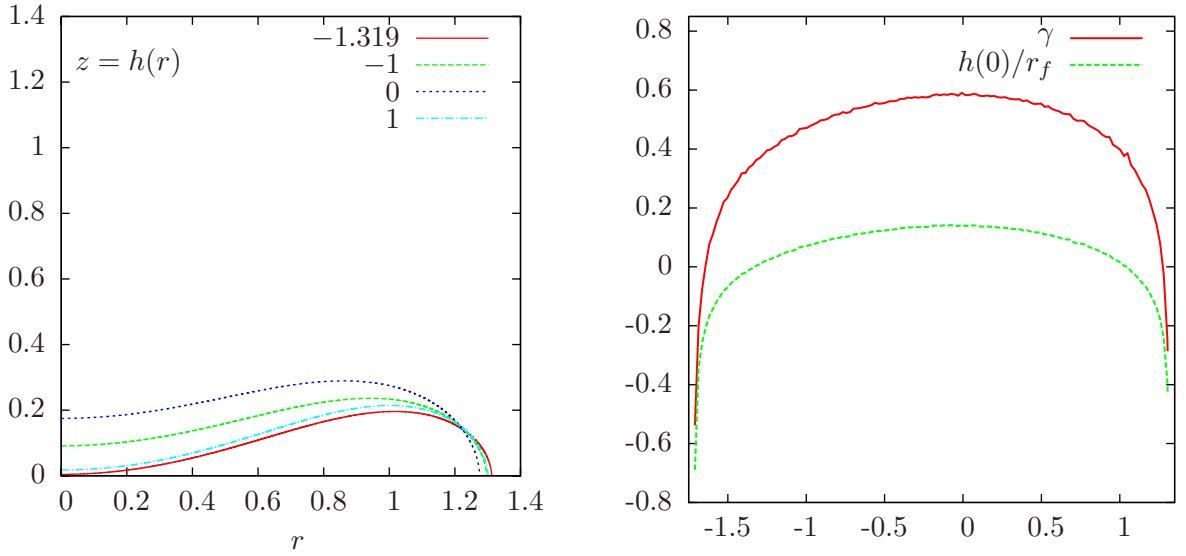

FIG. 6.11 – Tracé selon H_0 pour $w_0' = 0.2$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$: (a) $h(r)$ et (b) : γ et $h(0)/r_f$.

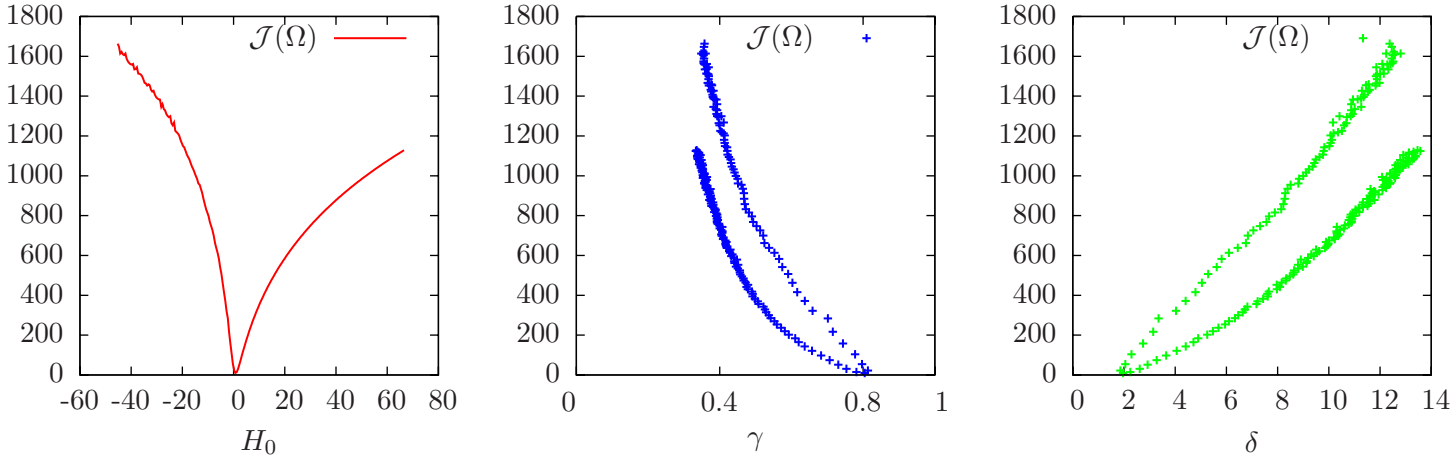

FIG. 6.12 – Évolution de $\mathcal{J}(\Omega)$ pour $w_0' = 0$, $\lambda = 0.25$ et $p = 0.5$ selon : (a) : H_0 , (b) : γ et (c) : δ.

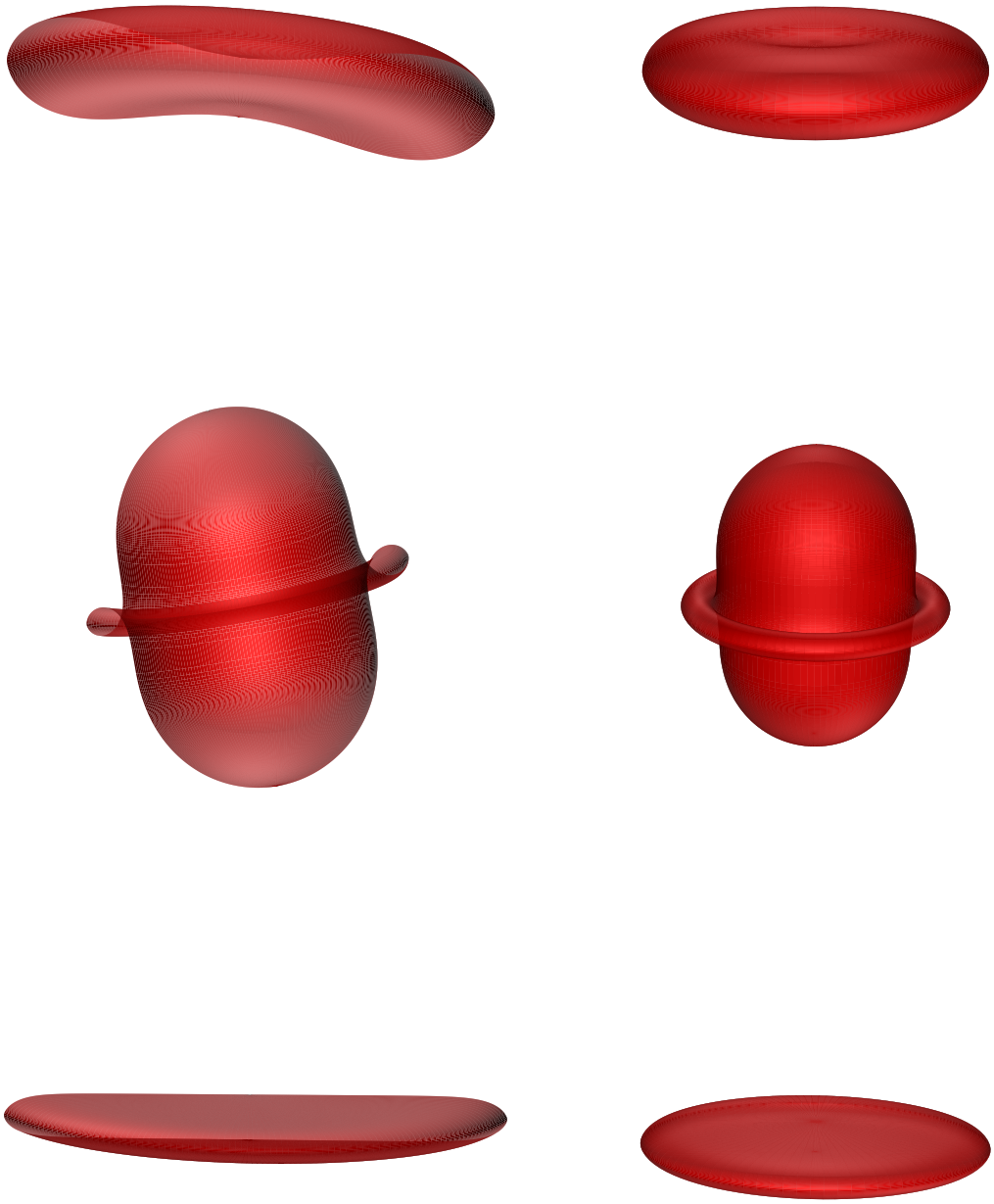

FIG. 6.13 – Formes correspondants à : (a) : $H_0 = 0$, $\mathcal{J}(\Omega) = 49.96$ et $\gamma = 0.58$: solution biconcave , (b) : $H_0 = 1$ et $\mathcal{J}(\Omega) = 177.31$: solution non physique , (c) : $H_0 = 70$, $w_0' = 0$ $\mathcal{J}(\Omega) = 2\,10^4$ et $\gamma = 0.41$.

6.4 Formes multiconcaves et diagramme de formes

Dans cette partie, on exploite le code élaboré et on obtient certaines formes axisymetriques qui n'ont pas été observées dans la littérature. On classe ces formes en comptant le nombre des points d'inflexion, qu'on note dorénavant i^*, sur la courbe calculée dans le domaine de calcul (un quart de plan).
Étant donné que, à une courbure spontannée donnée, les formes d'équilibre des vésicules dépendent uniquement du facteur de forme : le volume réduit γ ou l'excès de surface δ, on décide de fixer la courbure spontannée $H_0 = 0$ et on étudie les formes obtenues.
Ainsi, on trace un diagramme qui représente le facteur de forme en fonction de l'énergie et qui permet de localiser les branches occupées par ces formes et notamment leurs niveaux d'énergies. Cependant, on note qu'il est éventuellement possible d'avoir d'autres branches pour d'autres valeurs du facteur de forme qui décrivent les mêmes formes citées dans cette section. Le raisonnement qu'on suit lors de l'expérimentation numérique afin de tracer le diagramme de formes est le suivant :

1. On fixe le nombre des points d'inflexions dans le domaine de calcul (le quart du plan), on commence par un seul point d'inflexion ;
2. On balaye toute une plage de paramètres en variant p, λ et $w'(0)$ entre les différentes positions extrêmes correspondants à $w(r) = \infty$, tout en vaillant à garder le nombre des points d'inflexions fixes ;
3. On incrémente le nombre des points d'inflexion. Généralement, on remarque que les cas $w(r) = \infty$ représentent un seuil au delà duquel on passe, de manière discontinue, d'une famille de forme à une autre.

Dans ce qui suit, une attention toute particulière a été portée sur l'existence de familles de formes correspondantes à plusieurs valeurs de i^*. Par ailleurs, on donne à chaque fois un jeu de paramètres permettant de trouver la famille correspondante des formes des membranes.

Cas de $i^* = 0$ ou $i^* = 1$

Il s'agit des formes biconcaves ou celles sans points d'inflexion tracées précédemment dans figures Fig. 6.8 et Fig. 6.9. En effet, on a $H_0 = 0$, $\lambda = 0.25$, $p = 0.5$ et on varie la condition à l'origine $w'_0 \in [-10, 0.3]$:

Cas de $i^* = 2$

Il est possible d'avoir des formes à deux points d'inflexion, on fixe $\lambda = -1.8$ et $p = 0.51$ et on varie $w'_0 \in [-1.313\,,\,0]$. Quelques profils obtenus sont tracés sur la figure 6.14(a).

Cas de $i^* = 3$

On fixe $\lambda = -2.5$ et $p = 0.51$ et on varie $w'_0 \in [0\,,\,1.8762]$. Quelques profils obtenus sont tracés sur la figure 6.14(b).

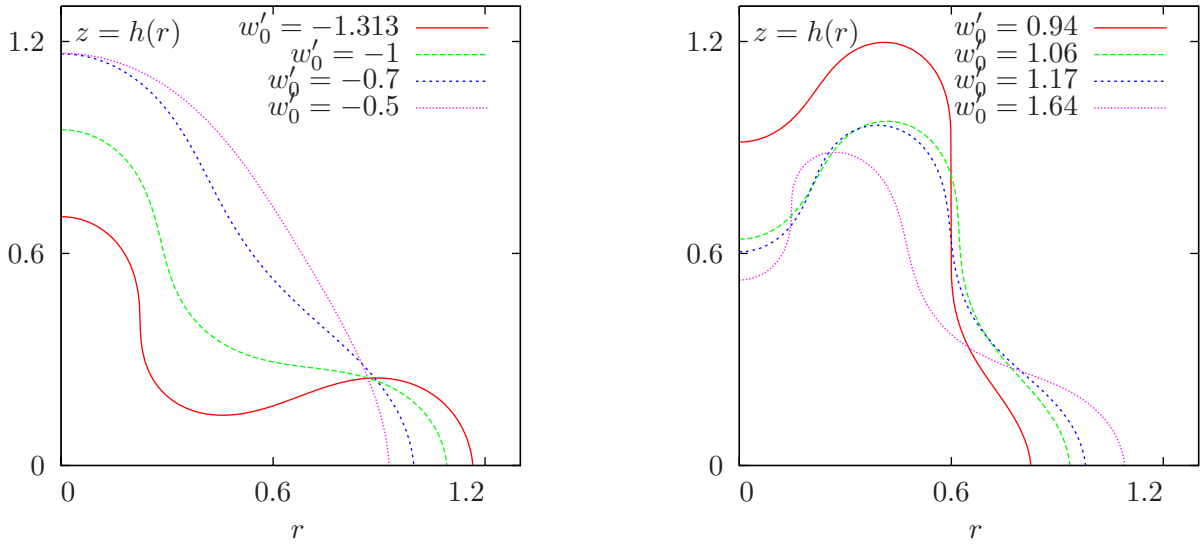

FIG. 6.14 – Tracé de la solution pour : (a) : $i^* = 2$, (b) : $i^* = 3$.

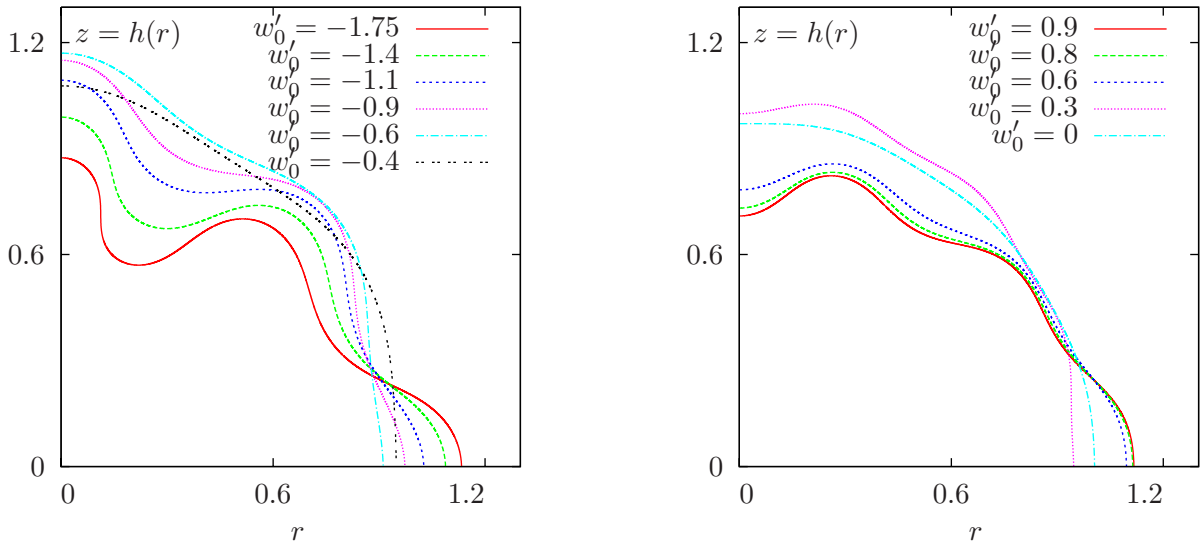

FIG. 6.15 – Tracé de la solution pour : (a) : $i^* = 4$, (b) : $i^* = 5$.

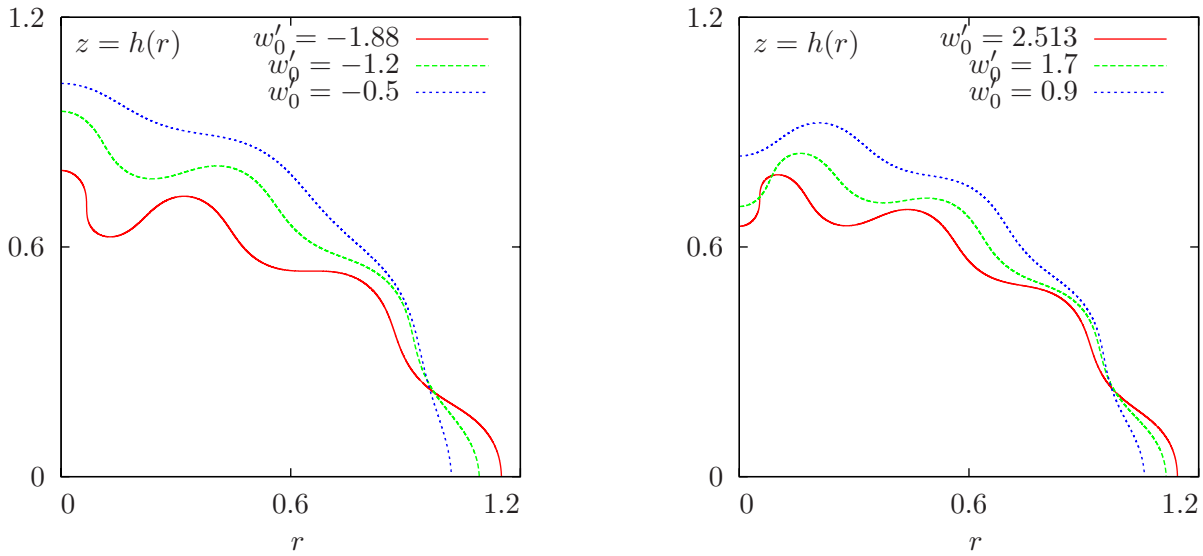

FIG. 6.16 – Tracé de la solution pour : (a) : $i^* = 6$, (b) : $i^* = 7$.

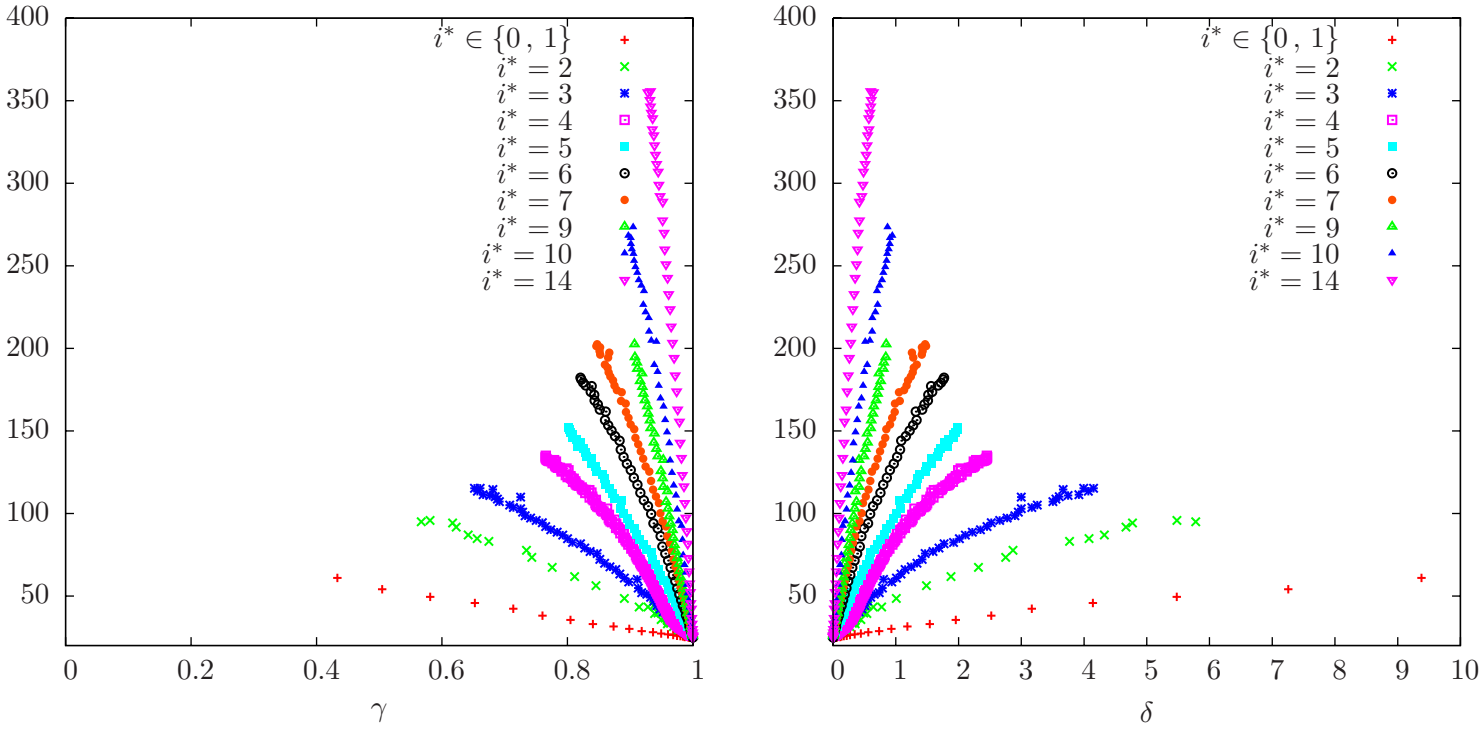

FIG. 6.17 – Diagramme d'évolution de $\mathcal{J}(\Omega)$, pour $H_0 = 0$, en fonction de : (a) : γ et (b) : δ .

Cas de $i^* = 4$

Pour obtenir des formes à quatres points d'inflexion, on choisit $\lambda = -2.8$ et $p = 0.51$ et on varie $w_0' \in [-1.75\,,\,-0.3]$. Quelques profils obtenus sont tracés sur la figure 6.15(a).

Cas de $i^* = 5$

On fixe $\lambda = -4$ et $p = 0.51$ et on varie $w_0' \in [0\,,\,2.05]$. Quelques profils obtenus sont tracés sur la figure 6.15(b).

Cas de $i^* = 6$

On fixe $\lambda = -3$, $H_0 = 0$, $p = 0.3$ et on varie $w_0' \in [-1.88\,,\,0]$. Les résultats sont donnés sur la figure 6.16(a).

Cas de $i^* = 7$

On fixe $\lambda = -4.8$, $p = 0.51$, $H_0 = 0$ et on varie $w_0' \in [0\,,\,2.513]$. Les résultats sont donnés sur la figure 6.16(b).

Cas de $i^* = 9$

On fixe $\lambda = -6$, $p = 0.51$, $H_0 = 0$ et on varie $w_0' \in [0\,,\,1.95]$.

Cas de $i^* = 10$

On fixe $\lambda = -4$, $p = 0.275$, $H_0 = 0$ et on varie $w_0' \in [-2.2037\,,\,0]$.

Cas de $i^* = 14$

On fixe $\lambda = -5$, $p = 0.275$, $H_0 = 0$ et on varie $w_0' \in [-2.45\,,\,0]$.

Récapitulatif du diagramme des formes pour $H_0 = 0$

Le diagramme des formes est donné sur la figure 6.17. On remarque que les niveaux d'énergies augmentent en fonction de i^*, ceci est attendu dans la mesure où l'énergie de Canham et Helfrich augmente proportionnellement aux nombres de *plis* sur la courbes et c'est ainsi que la forme tend vers une forme sphérique donc γ tend vers 1.
Néanmoins, on note que les formes obtenues peuvent représenter des maximums locaux de l'énergie de Canham et Helfrich et on peut ne pas les observer dans la nature. Afin de connaître le type de l'extrémum, il faut calculer la dérivée seconde de l'énergie et étudier son signe pour les formes observées, ceci ne fait pas l'objet de ce travail.

Reconstructions de certaines formes obtenues

Parmi les nouvelles familles de formes obtenues dans cette section, on reconstruit certains profils tridimensionnels.

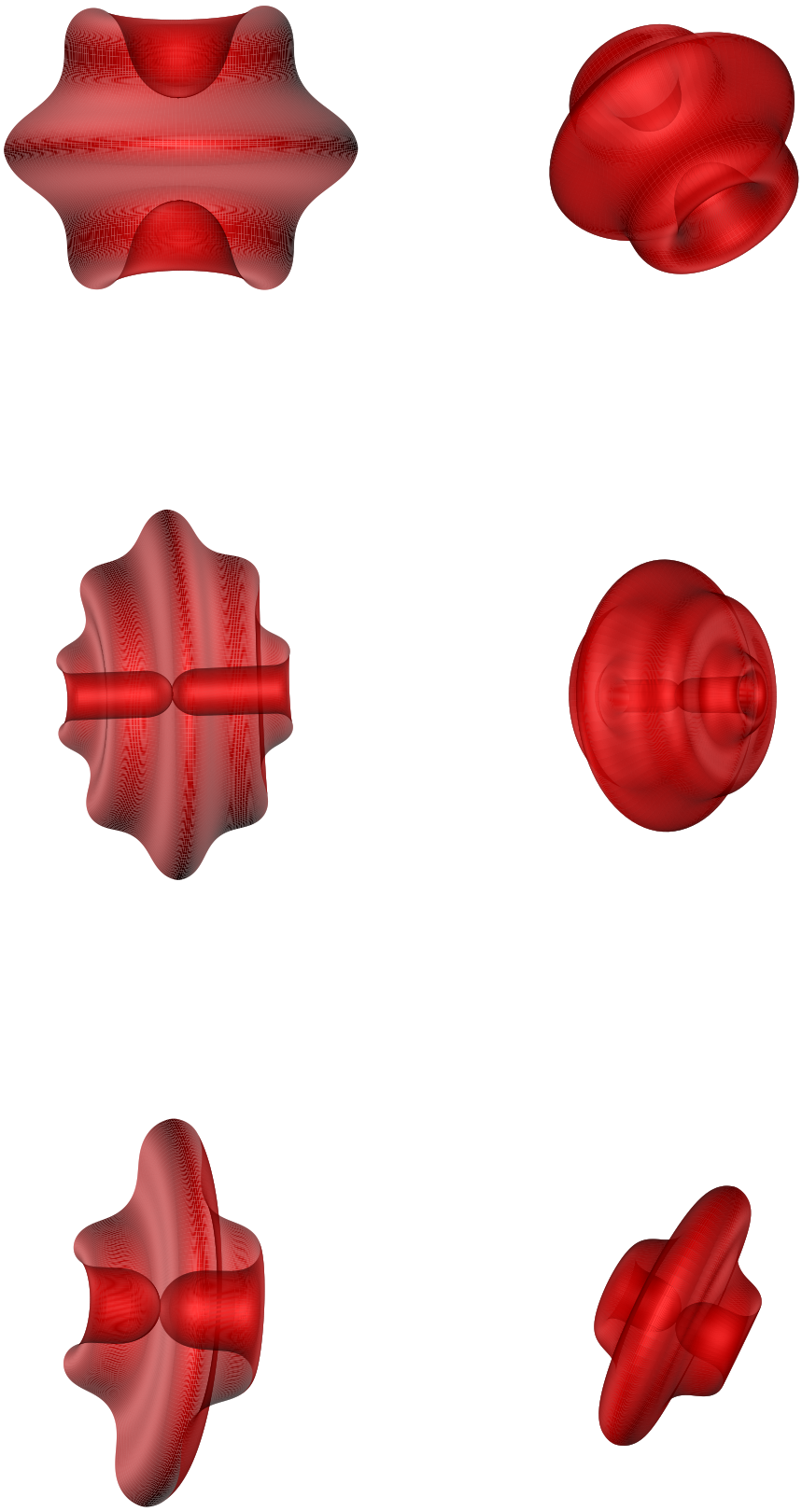

FIG. 6.18 – Formes correspondant à : (a) : $\mathcal{J}(\Omega) = 104.07$ et $\gamma = 0.71$, (b) : $\mathcal{J}(\Omega) = 208.76$ et $\gamma = 0.74$, (c) : $\mathcal{J}(\Omega) = 152.46$ et $\gamma = 0.71268$.

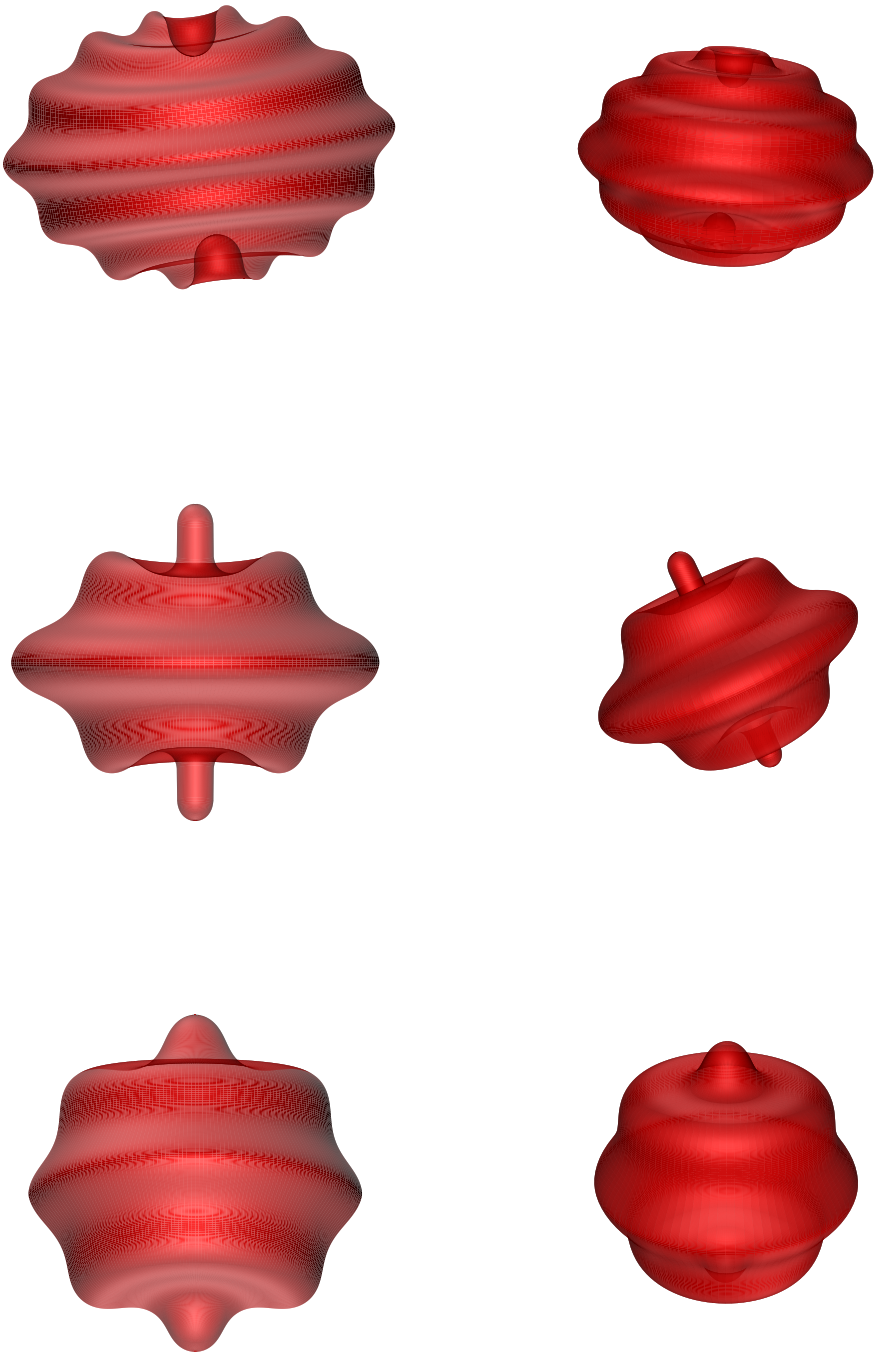

FIG. 6.19 – Formes correspondant à : (a) : $\mathcal{J}(\Omega) = 310.23$ et $\gamma = 0.89$, (b) : $\mathcal{J}(\Omega) = 147.6$ et $\gamma = 0.77577$, (c) : $\mathcal{J}(\Omega) = 91.9$ et $\gamma = 0.9$.

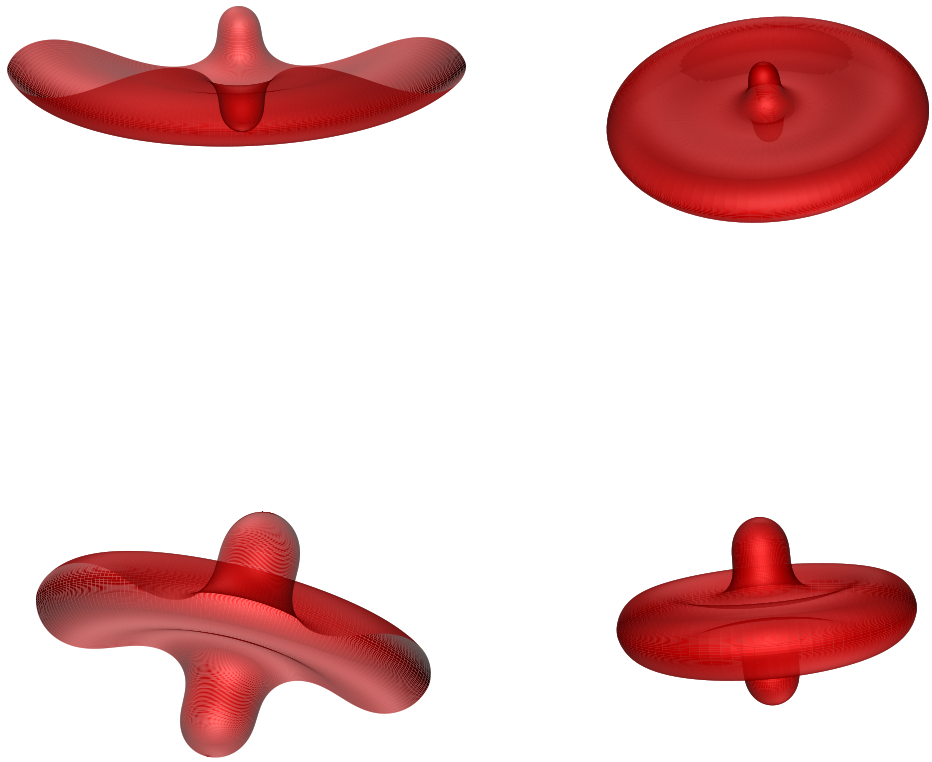

FIG. 6.20 – Formes correspondant à : (a) : $\mathcal{J}(\Omega) = 85.68$ et $\gamma = 0.4$, (b) :$\mathcal{J}(\Omega) = 100.61$ et $\gamma = 0.61$.

Chapitre 7

Configurations d'équilibre par éléments finis

Sommaire

7.1 Introduction et contexte **110**
7.2 Formulation forte du problème **111**
7.3 Formulation faible du problème **112**
7.4 Discrétisation en temps **114**
7.5 Algorithme de résolution **115**
7.6 Conservation de l'aire **122**
7.7 Conservation du périmètre **127**
7.8 Conservation de l'aire et du périmètre **133**
7.9 Utilisation du lagrangien augmenté **147**

FIG. 7.1 – Vue schématique des globules rouges dans le sang réalisée par `www.maxisciences.com`.

L'objectif de ce chapitre est de présenter un algorithme permettant d'avoir les formes d'équilibre des vésicules dans le cadre de la méthode des éléments finis. Les vésicules sont modélisées en utilisant le modèle de Canham et Helfrich [100]. On développe une formulation variationelle en utilisant une description eulérienne du problème à résoudre. Les solutions numériques obtenues sont comparées à celles obtenues par la résolution d'équation différentielle présentée dans un chapitre précédent.

7.1 Introduction et contexte

Dans ce chapitre, une attention particulière est portée à l'exploitation des formes d'équilibres des membranes biologiques, plus particulièrement celles des globules rouges dans le sang, dans le cadre de la méthode des éléments finis.
Ce chapitre est organisé comme suit : dans la partie 2, on présente le problème sous une formulation forte en introduisant une approche de multiplicateurs de Lagrange ; ceci est différent de la méthode de pénalisation introduite par exemple dans [27]. Dans la section 3, on présente une formulation faible du problème. L'objet des sections 4 et 5 est de faire une discrétisation en temps et en espace du problème et d'élaborer un algorithme de résolution. À la fin de la section 5, on met en évidence la nécessité d'un contrôle *a posteriori* des multiplicateurs de Lagrange. Dans les sections 6 et 7, on simplifie le problème en traitant chaque contrainte à part. On s'intéresse dans la section 8 à la résolution du problème initial des vésicules et les simulations numériques sont validées par des comparaisons avec les solutions obtenues par la résolution des équations différentielles présentée dans le chapitre précédent. Finalement, la dernière section est consacrée aux simulations numériques avec un algorithme du type Lagrangien Augmenté.

7.2 Formulation forte du problème

Il s'agit d'un problème d'optimisation de formes suivant :

$$\Omega = \underset{\Omega \in \mathbb{V}}{\arg\inf} \ \mathscr{J}(\Omega)\,. \tag{7.1}$$

$\mathbb{V}$ représente l'espace des contraintes :

$$\mathbb{V} = \left\{ \omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3; \int_{\partial\omega} \mathrm{d}s = A_0 \text{ et } \int_{\omega} \mathrm{d}x = V_0 \right\},$$

où A_0 et V_0 représentent respectivement la surface et le volume de référence (dans le cas bidimensionnel, ils représentent respectivement le périmètre et l'aire de référence). C'est un problème de minimisation sous contraintes de l'énergie de courbure de Canham-Helfrich donnée, pour une courbure spontannée nulle, par :

$$\mathscr{J}(\Omega) = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^2 \,\mathrm{d}s\,. \tag{7.2}$$

Le problème (7.1) s'écrit sous la forme d'un problème sans contraintes de type point selle. Afin de relaxer les contraintes, on introduit le lagrangien :

$$\mathscr{L}(\omega; \sigma, q) = \mathscr{J}(\omega) + \sigma \left(\int_{\partial\omega} \mathrm{d}s - A_0 \right) + p \left(\int_{\omega} \mathrm{d}x - V_0 \right), \quad \text{pour } (\omega; \sigma, q) \in (\Lambda; \mathbb{R}, \mathbb{R})\ , \tag{7.3}$$

où σ et q sont les multiplicateurs de Lagrange qui servent à conserver le volume et la surface. La solution $(\Omega; p, \lambda) \in (\Lambda; \mathbb{R}, \mathbb{R})$ est un point de selle du lagrangien et elle vérifie :

$$\mathscr{L}(\Omega; \sigma, q) \ \leq \ \mathscr{L}(\Omega; \lambda, p) \ \leq \ \mathscr{L}(\omega; \lambda, p), \quad \forall (\omega; \sigma, q) \in (\Lambda; \mathbb{R}, \mathbb{R})\ .$$

Par conséquent, le problème (7.1) s'écrit sous la forme d'un point selle :

$$(\Omega; \lambda, p) = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \sup_{\substack{\sigma \in \mathbb{R} \\ q \in \mathbb{R}}} \mathscr{L}(\omega; \sigma, q).$$

Il s'agit de trouver $(\Omega; p, \lambda) \in \left(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}, \mathbb{R}\right)$ vérifiant les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Omega}(\Omega; \lambda, p)(\mathbf{u}) & = 0\,, \quad \text{pour tout } \mathbf{u} \text{ défini dans } \mathbb{R}^d\,, \\[2ex] \dfrac{\partial \mathscr{L}}{\partial p}(\Omega; \lambda, p)(q) & = 0\,, \quad \forall q \in \mathbb{R}\,, \\[2ex] \dfrac{\partial \mathscr{L}}{\partial \lambda}(\Omega; \lambda, p)(\mu) & = 0\,, \quad \forall \mu \in \mathbb{R}\,. \end{cases} \tag{7.4}$$

Afin de chercher un point selle de $\mathscr{L}(\omega; \sigma, q)$, on a besoin de dériver la lagrangien par rapport à la forme. Ceci a fait l'objet du papier [57] et du chapitre 5 où on donne une equation mécanique général décrivant l'équilibre des membrane biologiques. Dans le cas particuler de l'énergie de Canham et Helfrich (7.2), on a :

$$p + \lambda H + \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - \Delta_s H = 0. \tag{7.5}$$

On a démontré aussi dans [57] que la dérivation de forme de l'équation(7.1) est donnée par :

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \omega}(\omega;\lambda,p)(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left\{ p + \lambda H + \frac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - \Delta_s H \right\} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s\,. \tag{7.6}$$

En supposant que la forme Γ est suffisamment régilière, la direction de descente est défini par :

$$\mathbf{u} = \left\{ \Delta_s H - \frac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - p - \lambda H \right\} \mathbf{n}\,. \tag{7.7}$$

Ainsi, on déplace la forme Ω vers Ω_t tel que :

$$\Omega_{\mathrm{t}} = (\mathbf{I} + \mathrm{t}\mathbf{u})(\Omega)\,, \tag{7.8}$$

avec $\mathrm{t} > 0$ est un pas de descente infinétisémalement petit. Formellement, on obtient :

$$\mathscr{L}(\Omega_{\mathrm{t}};\lambda,p) = \mathscr{L}(\Omega;\lambda,p) - \mathrm{t}\int_\Gamma \left\{ \Delta_s H - \frac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - p - \lambda H \right\}^2 \mathrm{ds} + \mathcal{O}(\mathrm{t}^2)\,. \tag{7.9}$$

Ceci assure la minimisation de la fonctionnelle objective. La fonction $\mathbf{u}$ dépend de $\varphi, H, K, \mathbf{n}$ qui sont définis, par le formalisme *Level Set*, dans tout le domaine Λ par extention de ceux définis sur Γ. Par conséquent, on transporte la fonction de niveau par le vecteur :

$$\mathbf{u} = \left(\Delta_s H - \frac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - p - \lambda H \right) \mathbf{n}\,.$$

En conclusion, il s'agit de résoudre le problème de transport suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \varphi}{\partial t} + \Big[\Delta_s H - \dfrac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] \\ \qquad\qquad -p - \lambda H\Big]\, \mathbf{n}.\nabla\varphi &= 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,, \\ \int_\Omega 1\,\mathrm{d}x &= V_0 & \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \\ \int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{d}s &= A_0 & \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \\ \varphi(t,x) &= \varphi_{\partial\Lambda}(x) & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \partial_\nu \varphi(t,x) &= 0 & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) &= \varphi_0(x) & \text{p.p. } x \in \Lambda\,, \end{cases} \tag{7.10}$$

où ν est la normale à la frontière du domaine $\partial\Lambda$. La partie suivante est dédiée à extraire une formulation variationnelle du problème (7.10).

7.3 Formulation faible du problème

Dans ce chapitre, les simulations numériques sont dans le cas bidimensionnel (les formes d'équilibre ne dépendent pas de H_0), on choisit donc $H_0 = 0$. On suit la même démarche que le chapitre 2 et on introduit une variable mixte $\psi = -H|\nabla\varphi|$. Pour des fonctions tests $\xi \in H_0^1(\Lambda)$ et $\zeta \in H^1(\Lambda)$

, on obtient la formulation mixte suivante :

$$\begin{aligned}
&\int_\Lambda \frac{\partial \varphi}{\partial t}\xi \mathrm{dx} + \int_\Lambda \nabla_s(\psi).\nabla\xi \,\mathrm{dx} + \frac{1}{2}\int_\Lambda \frac{\psi^2}{|\nabla\varphi|^2}\nabla\varphi.\nabla\xi \,\mathrm{dx} + \int_\Lambda \frac{\nabla|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}.\nabla_s(\psi)\,\xi \,\mathrm{dx} \\
&+\frac{1}{2}\int_\Lambda \frac{\psi^2}{|\nabla\varphi|^3}\nabla\varphi.\nabla(|\nabla\varphi|)\,\xi \,\mathrm{dx} - \int_\Lambda p\,|\nabla\varphi|\,\xi \,\mathrm{dx} + \int_\Lambda \lambda\,\psi\,\xi \,\mathrm{dx} = 0\,, \qquad (7.11)\\
&\int_\Lambda \frac{\psi}{|\nabla\varphi|}\zeta \,\mathrm{dx} - \int_\Lambda \frac{1}{|\nabla\varphi|}\nabla\varphi.\nabla\zeta \,\mathrm{dx} = 0\,.
\end{aligned}$$

La division par $|\nabla\varphi|$ dans les formes bilinéaires peut induire des problèmes de stabilités numériques dans la mesure où ce terme est nul ou proche de l'erreur machine sur *le squelette de la fonction de niveaux* φ (voir chapitre 2). Par conséquent, il important d'éviter toute division par $|\nabla\varphi|$ et on introduit deux paramètres $(m,n) \in \mathbb{N}^2$ et les deux fonctions tests $(\widetilde{\xi},\widetilde{\zeta}) \in H_0^1(\Lambda)\times H^1(\Lambda)$ tels que $\xi = |\nabla\varphi|^n\widetilde{\xi}$ et $\zeta = |\nabla\varphi|^m\widetilde{\zeta}$. On obtient la formulation variationelle suivante :

$$\begin{aligned}
&\int_\Lambda |\nabla\varphi|^n\frac{\partial\varphi}{\partial t}\widetilde{\xi}\mathrm{dx} + \int_\Lambda |\nabla\varphi|^n\nabla_s(\psi).\nabla\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} + \frac{1}{2}\int_\Lambda |\nabla\varphi|^{n-2}\psi^2\nabla\varphi.\nabla\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} \\
&+\int_\Lambda (n+1)|\nabla\varphi|^{n-1}\nabla|\nabla\varphi|.\nabla_s(\psi)\,\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} + \frac{1}{2}\int_\Lambda (n+1)|\nabla\varphi|^{n-3}\psi^2\nabla\varphi.\nabla(|\nabla\varphi|)\,\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} \\
&-\int_\Lambda p\,|\nabla\varphi|^{n+1}\,\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} + \int_\Lambda \lambda\,\psi\,|\nabla\varphi|^n\widetilde{\xi}\,\mathrm{dx} = 0\,, \qquad (7.12)\\
&\int_\Lambda |\nabla\varphi|^{m-1}\psi\widetilde{\zeta}\,\mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|^{m-1}\nabla\varphi.\nabla\widetilde{\zeta}\,\mathrm{dx} = \int_\Lambda m|\nabla\varphi|^{m-2}\nabla\varphi.\nabla|\nabla\varphi|\widetilde{\zeta}\,\mathrm{dx}\,.
\end{aligned}$$

Le choix $(n,m) = (3,2)$ permet d'éviter la division par $|\nabla\varphi|$ dans le problème variationnel. Dans la suite, on omet les tildes et on introduit la variable mixte γ donnée par :

$$\gamma = \nabla|\nabla\varphi| \in H_0(\mathrm{div},\Lambda) = \Big\{\tau \in L^2(\Lambda)^d;\ \nabla.\tau \in L^2(\Lambda);\ \tau.\sigma_{\partial\Lambda} = 0, \partial\Lambda\Big\}$$

Finalement, on obtient la formulation variationelle suivante :

♦ **Formulation faible**
Étant donné $\varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right) \cap L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$ et $\varphi_0 \in L^2(\Lambda)$,
trouver $\mathbf{n} \in L^2\left(]0,T[\,;L^\infty(\Lambda)^d\right)$, $\gamma \in L^2\left(]0,T[\,;H_0(\mathrm{div},\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)^d\right)$,
$\psi \in L^2\left(]0,T[\,;H^1(\Lambda)\cap L^\infty(\Lambda)\right)$ et φ avec $\varphi-\varphi_{\partial\Lambda} \in \mathcal{C}^1\left([0,T]\,;L^2(\Lambda)\right)\cap L^2\left(]0,T[\,;H_0^1(\Lambda)\cap W^{1,\infty}(\Lambda)\right)$
tels que :

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\mathbf{n}.\varsigma \mathrm{dx} = \int_\Lambda \nabla\varphi.\varsigma \mathrm{dx}, \quad \forall \varsigma \in (L^2(\Lambda))^d\,, \tag{7.13}$$

$$\int_\Lambda \gamma.\tau \mathrm{dx} = -\int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla.\tau \mathrm{dx}, \quad \forall \tau \in H_0(\mathrm{div},\Lambda), \tag{7.14}$$

$$\int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi\xi \mathrm{dx} - \int_\Lambda |\nabla\varphi|\nabla\varphi.\nabla\xi \mathrm{dx} = 2\int_\Lambda (\nabla\varphi.\gamma)\xi \mathrm{dx}, \quad \forall \xi \in H^1(\Lambda)\,, \tag{7.15}$$

$$\begin{aligned}\int_\Lambda |\nabla\varphi|^3\nabla_s\psi.\nabla\zeta \mathrm{dx} + \int_\Lambda |\nabla\varphi|^3\partial_t\varphi\zeta \mathrm{dx} + \frac{1}{2}\int_\Lambda |\nabla\varphi|\psi^2\nabla\varphi.\nabla\zeta \mathrm{dx}\\ - \int_\Lambda p\,|\nabla\varphi|^4\,\zeta\ \mathrm{dx} + 4\int_\Lambda |\nabla\varphi|^2(\nabla_s\psi.\gamma)\zeta \mathrm{dx} + 2\int_\Lambda \psi^2(\nabla\varphi.\gamma)\zeta \mathrm{dx}\\ + \int_\Lambda \lambda\,\psi\,|\nabla\varphi|^3\zeta\ \mathrm{dx} = 0, \quad \forall \zeta \in H_0^1(\Lambda)\,.\end{aligned} \tag{7.16}$$

7.4 Discrétisation en temps

Dans cette partie, on s'intéresse à la discrétisation en temps du problème (7.13-7.14-7.15-7.16). Quant au problème de renormalisation de la fonction de niveaux φ, on utilise le schéma de discrétisation présenté dans le chapitre 2 et dans le papier [58].
Soit $0 = t^0 < t^1 < t^2 < .. < t^N = T$ la subdivision de l'intervalle de temps $[0,T]$, on note $\triangle t = t^{n+1} - t^n$ le $n^{\text{ième}}$ pas de temps avec $n = 1, 2, .., N$. On utilise un schéma de discrétisation de second ordre en temps. Soit $y \in \mathcal{C}^1([0,T])$ et $y'(t)$ la dérivation en temps $\dfrac{\partial y}{\partial t}$, alors $\forall t \in]0,T[$, $\forall n > 1$,

$$y'(t) = \frac{3y(t) - 4y(t-\triangle t) + y(t-2\triangle t)}{2\triangle t} + \triangle t^2\,\frac{y^{(3)}(t)}{3}\,.$$

On utilise le schéma suivant :

$$\begin{aligned} y'(t) &\approx \frac{y^{n+1} - y^n}{(2/3)\triangle t}\,, && \text{si } n = 1\,,\\ y'(t) &\approx \frac{3y^{n+1} - 4y^n + y^{n-1}}{2\triangle t}\,, && \text{sinon}\ . \end{aligned} \tag{7.17}$$

En utilisant la discrétisation (7.17) d'ordre deux en temps, on a une erreur qui évolue en $\mathcal{O}\left(h^k\right) + \mathcal{O}\left(\triangle t^2\right)$, où k est le degré de discrétisation spatiale de la méthode d'éléments finis. On introduit les formes trilinéaires suivantes $m(\,,\,,\,)$ et $a(\,,\,,\,)$ données par :

$$\begin{aligned} m(\omega,\xi,\zeta) &= \int_\Lambda \xi\,\zeta\,\omega\ \mathrm{dx} && \text{, avec } \omega \in L^\infty(\Lambda)^d,\ \xi \in L^2(\Lambda),\ \zeta \in L^2(\Lambda)\ ,\\ a(\omega,\xi,\zeta) &= \int_\Lambda (\omega\nabla\xi)\,.\nabla\zeta\ \mathrm{dx} && \text{, avec } \omega \in L^\infty(\Lambda)^{d\times d},\ \xi \in H^1(\Lambda),\ \zeta \in H^1(\Lambda)\,. \end{aligned} \tag{7.18}$$

On utilise une discrétisation explicite des équations (7.13) and (7.14) : voir chapitre 2. Concernant les équations (7.15) et (7.16), on implicite le maximum de termes et on a la formulation variationelle $(FV)_{\triangle t}$ suivante :

Étant donné $\varphi^n_{\partial\Lambda} \in H^1(\Lambda) \cap W^{1,\infty}(\Lambda)$, $\varphi^0_0 = \varphi^{-1}_0 \in L^2(\Lambda)$, $\mathbf{n}^n \in L^\infty(\Lambda)^d$, $\gamma^n \in H_0(\mathrm{div},\Lambda) \cap L^\infty(\Lambda)^d$ et $(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$,

trouver $\psi^{n+1} \in H^1(\Lambda) \cap L^\infty(\Lambda)$ et φ^{n+1} avec $\varphi^{n+1} - \varphi^n_{\partial\Lambda} \in H^1_0(\Lambda) \cap W^{1,\infty}(\Lambda)$ tels que :

$$\left\{\begin{array}{r} m\left(|\nabla\varphi^n|\,,\,\psi^{n+1}\,,\,\xi\right) - a\left(|\nabla\varphi^n|\,\mathbf{I}\,,\,\varphi^{n+1}\,,\,\xi\right) = 2\,m\left(\nabla\varphi^n.\gamma^n\,,\,1\,,\,\xi\right), \\ a\left(|\nabla\varphi^n|^3(\mathbf{I}-\mathbf{n}^n\otimes\mathbf{n}^n)\,,\,\psi^{n+1}\,,\,\zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t}m\left(|\nabla\varphi^n|^3\,,\,\varphi^{n+1}\,,\,\zeta\right) \\ +\frac{1}{2}a\left(|\nabla\varphi^n|\,(\psi^n)^2\,\mathbf{I}\,,\,\varphi^{n+1}\,,\,\zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t}m\left(|\nabla\varphi^n|^3\left(4\varphi^n - \varphi^{n-1}\right)\,,\,1\,,\,\zeta\right) \\ -m\left(4\,|\nabla\varphi^n|^2\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}^n\otimes\mathbf{n}^n)\,\nabla\psi^n.\gamma^n + 2\,(\psi^n)^2\,(\nabla\varphi^n.\gamma^n) - p^n|\nabla\varphi^n|^4 + \lambda^n\psi^n|\nabla\varphi^n|^3\,,\,1\,,\,\zeta\right). \end{array}\right. \tag{7.19}$$

Ceci, $\forall\zeta \in H^1(\Lambda)\,,\ \forall\xi \in H^1_0(\Lambda)\,.$

7.5 Algorithme de résolution

Les algorithmes utilisés pour calculer les points selles du lagrangien $\mathscr{L}(\Omega; p, \lambda)$ (7.3) sont connus sous le nom d'algorithmes d'Uzawa et sont dûs à Arrow, Harwicz et Uzawa [Arrow et al., 1958] et à Glowinski, Lions et Trimolières [Glowinski et al. 1976]. Les plus utilisés sont donnés dans [Fortin et Glowinski, 1982] et [Glowinski et Le Tallec, 1989]. Dans le cadre de ce travail, on commence par présenter l'algorithme le plus élémentaire et on finit par donner l'algorithme qu'on utilisera dans les simulations numériques.

7.5.1 Algorithme : Uzawa à pas de descente fixe

L'algorithme se décompose de deux parties :

1. On calcule la fonctionelle d'énergie duale :

$$\mathscr{E}^*(p,\lambda) \approx -\sup_{\Omega\in\mathbb{R}^d} \mathscr{L}(\Omega; p, \lambda)\,,$$

2. On minimise l'énergie duale, avec un pas de descente fixe ρ :

$$(p,\lambda) \approx \underset{(q,\sigma)\,\in\,\mathbb{R}^2}{\arg\inf} \mathscr{E}^*(q,\sigma)\,.$$

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0, \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}^2$ arbitrairement donnés,
Soit $n \geq 0$

1. $(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$ connus, on calcule $\Omega^{n+1} \subset \Lambda$ par :

$$\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p^n, \lambda^n) \leq \mathscr{L}(\Omega; p^n, \lambda^n)\,,\ \forall\Omega \subset \Lambda\,.$$

2. Soit $\mathscr{E}^*(p,\lambda) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p, \lambda)$, on calcule :
$(p^{n+1}, \lambda^{n+1}) \approx (p^n, \lambda^n) - \rho\nabla_{p,\lambda}\mathscr{E}^*(p^n, \lambda^n)$.

7.5.2 Algorithme : Uzawa avec contrôle *a posteriori* du pas

On donne ici un algorithme plus complexe, on utilise une boucle de point fixe lors de l'étape de minimisation par rapport à la forme. Le critère d'arrêt est porté sur le résidu des équations. Par ailleurs, on utilise une boucle de prédiction correction lors de la minimisation de la fonctionelle duale. Ceci revient à effectuer les deux étapes suivantes :

1. On calcule la fonctionelle d'énergie duale :

$$\Omega = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \mathscr{L}(\omega; p, \lambda)\,,$$

$$\mathscr{E}^*(p, \lambda) = -\mathscr{L}(\Omega; p, \lambda)\,.$$

2. On minimise l'énergie duale, avec un pas de descente variable ρ^n :

$$(p, \lambda) \approx \underset{(q,\sigma) \in \mathbb{R}^2}{\arg\inf} \ \mathscr{E}^*(q, \sigma)$$

À chaque temps t^n, on note par r^n_ψ et r^n_φ les résidus respectifs des équations (7.19) et on calcule un résidu global $r^n = \sqrt{(r^n_\psi)^2 + (r^n_\varphi)^2}$. On fixe le critère de convergence par rapport au résidu en fixant une valeur seuil du résidu ε et on choisit la valeur minimale ε_{min} de la variation de λ et p pour arrêter l'algorithme.

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0, \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}^2$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
$(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$ connus,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.19) ;
   (b) Calculer r^{k+1} ;
   (c) k = k+1 ;

   fin de la boucle
   $k_{max} = k$;
   $\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
   $\mathscr{E}^*(p, \lambda) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p, \lambda)$

2. On calcule p^{n+1} et λ^{n+1} :

étape de prédiction
$(\delta p, \delta\lambda) = (p^{n+1} - p^n, \lambda^{n+1} - \lambda^n)$ arbitrairement choisis ;
tant que $\{\mathscr{E}^*(p^{n+1}, \lambda^{n+1}) > \mathscr{E}^*(p^n, \lambda^n)\}$ **faire**

(a) $(\delta p, \delta\lambda) = (\frac{\delta p}{2}, \frac{\delta\lambda}{2})$;
(b) Si $\delta p < \varepsilon_{min}$ ou $\delta\lambda < \varepsilon_{min}$, alors **erreur** ;
(c) $(p^{n+1}, \lambda^{n+1}) = (p^n + \delta p, \lambda^n + \delta\lambda)$;

fin de l'algorithme.

On note que le choix $k_{max} = 1$ revient à ne pas faire la boucle du point fixe lors de la variation de forme et que ceci peut éventuellement être plus rapide en terme de convergence de l'algrithme dans la mesure où les variations de volume et de surface sont faibles lors de chaque itération.

7.5.3 Algorithme : Uzawa à pas optimaux

L'atout d'un algorithme à pas optimaux est qu'on conserve le volume et la surface à chaque temps t^n, alors que pour les algorithmes définis précédemment, le volume est la surface ne sont conserservés qu'uniquement à la convergence. De plus, cet algorithme assure des petites variations de la forme à chaque t^n et donc un algorithme qui est plus stable.
On donne l'algorithme et dans la section suivante ainsi le calcul explicite des multiplicateurs de Lagrange optimaux. Ceci revient à effectuer les deux étapes suivantes :

1. On effectue un point fixe pour minimiser le lagrangien par rapport à la forme :

$$\Omega = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \mathscr{L}(\omega; p, \lambda)\,,$$

$$\mathscr{E}^*(p, \lambda) = -\mathscr{L}(\Omega; p, \lambda)\,.$$

2. On calcule exactement les multiplicateurs de Lagrange p et λ :

$$(p^*, \lambda^*) = \underset{(q,\sigma) \in \mathbb{R}^2}{\arg\inf} \ \mathscr{E}^*(q, \sigma)\,.$$

Similairement à la partie précédente, on note à chaque instant t^n par r^n_ψ et r^n_φ les résidus des équation (7.19) et on calcule un résidu global $r^n = \sqrt{(r^n_\psi)^2 + (r^n_\varphi)^2}$. On fixe le critère de convergence par rapport au résidu global en fixant un résidu limite ε à partir duquelle on suppose qu'on atteind la convergence. L'algorithme est le suivant :

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0, \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}^2$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$

$(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$ connus,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation

   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.19) ;

   (b) Calculer r^{k+1} ;

   (c) k = k+1 ;

   fin de la boucle

   $k_{max} = k$;

   $\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;

   $\mathscr{E}^*(p, \lambda) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p, \lambda)$

2. On calcule p^{n+1} et λ^{n+1} :

   $(p^{n+1}, \lambda^{n+1}) = (p^*, \lambda^*)$

fin de l'algorithme.

7.5.4 Calcul des pas optimaux

On reprend le problème (7.10) à résoudre :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H - \frac{1}{2}H[4K - H^2] - p - \lambda H\right] |\nabla\varphi| &= 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,, \\ \frac{d}{dt}\int_\Omega 1\,\mathrm{dx} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \\ \frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,. \end{aligned} \tag{7.20}$$

On a démontré dans le deuxième chapitre que $(\mathbf{n}.\nabla)\mathbf{n} = \dfrac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}$. Donc

$$\begin{aligned} H(H^2 - 4K) &= H\left(-H^2 + 2\nabla\mathbf{n} : \nabla\mathbf{n}^T\right) \\ &= 2H\nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - H^3 - 2H\mathbf{n}.\nabla H \\ &= 2H\nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - H^3 - \left[\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) - H^3\right] \\ &= 2H\nabla.\left[(\mathbf{n}.\nabla)\,\mathbf{n}\right] - \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,. \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$\frac{1}{2}H(H^2 - 4K) = H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right] - \frac{1}{2}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,. \tag{7.21}$$

Le système (7.20) s'écrit :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H + H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right] - \frac{1}{2}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) - p - \lambda H\right]|\nabla\varphi| &= 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,, \\
\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \qquad (7.22)\\
\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,.
\end{aligned}$$

On rappelle les formules de Reynolds et de Green sur les surfaces :

Formule de Reynolds : Soit une surface assez régulière, fermée et orientable Γ en dimension $(d-1)$ et soit une fonction $f \in L^2(]0,T[\,,H^1(\Gamma))$ advectée par un champs $\mathbf{u} \in L^2(]0,T[\,,H^1(\Gamma))^d$. Le vecteur $\mathbf{n}$ représente la normale unitaire sortante définie sur Γ, alors

$$\frac{d}{dt}\int_\Gamma f\,ds = \int_\Gamma \frac{d\,f}{dt} + \nabla.(f\,\mathbf{u}) - f(\nabla\mathbf{u}.\mathbf{n}).\mathbf{n}\,ds\,. \qquad (7.23)$$

Formule de Green : Soit une surface assez régulière, fermée et orientable Γ en dimension $(d-1)$ et soient deux fonctions $g \in H^1(\Gamma)$ and $\mathbf{v} \in H^1(\Gamma)^d$. Le vecteur $\mathbf{n}$ représente la normale unitaire sortante définie sur Γ, alors

$$\int_\Gamma \nabla_s g.\mathbf{v}ds + \int_\Gamma g\nabla_s.\mathbf{v}ds - \int_\Gamma g(\nabla.\mathbf{n})\mathbf{v}.\mathbf{n}ds = 0\,. \qquad (7.24)$$

En utilisant la formule de Reynolds (7.23), on a :

$$\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} = 0 \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} \nabla_s.\mathbf{u}\,\mathrm{ds} = 0 \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} H\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds} = 0 \;\Leftrightarrow$$

$$p\int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} = \int_{\partial\Omega} H\,\Delta_s H\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.$$

L'équation (7.22) implique :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = 0 \;\Leftrightarrow\; \int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\delta(\varphi)\,\mathrm{dx} = 0 \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} \frac{\partial\varphi}{\partial t}\frac{1}{|\nabla\varphi|}\,\mathrm{ds} = 0 \;\Leftrightarrow$$

$$p\int_{\partial\Omega} 1\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} = \int_{\partial\Omega} \Delta_s H\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.$$

D'après la formule de Green surfacique (7.24), on a :

$$\int_{\partial\Omega} \Delta_s H\,\mathrm{ds} = = -\int_{\partial\Omega} \nabla_s(1)\,.\,\nabla_s H\,\mathrm{dx} + \int_{\partial\Omega} H\mathbf{n}\,.\,\nabla_s H\,\mathrm{dx} = 0.$$

En utilisant (7.24), on réduit un ordre de dérivation dans :

$$\int_{\partial\Omega} H\,\Delta_s H\,\mathrm{ds} = -\int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\mathbf{n}\,.\,\nabla_s H\,\mathrm{dx} = -\int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds}\,.$$

Ainsi, on résoud le système suivant :

$$\begin{aligned}
p\int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} &= -\int_{\partial\Omega}|\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,,\\
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} &= \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.
\end{aligned}$$

Il est équivalent à :

$$\begin{aligned}
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds\int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2 &= \int_{\partial\Omega} H\,ds\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds}\\
&\quad -\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,ds\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,,\\
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds\int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} &= \int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(\int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds}\right.\\
&\quad \left.-\int_{\partial\Omega}|\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\right).
\end{aligned}$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
\lambda\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right] &= \int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(-\int_{\partial\Omega}|\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds}\right.\\
&\quad \left.-\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\right)\\
&\quad -\int_{\partial\Omega} H\,ds\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds}\\
&\quad +\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,ds\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,,\\
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds = \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} &- \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} - \lambda\int_{\partial\Omega} H\,ds\,.
\end{aligned}$$

Finalement, les multiplicateurs de Lagrange optimaux, notés p^* et λ^*, sont donnés par :

$$\begin{aligned}
\lambda^* &= \frac{\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(-\int_{\partial\Omega}|\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}\\
&\quad - \frac{\int_{\partial\Omega} H\,ds\left(\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}\,, \qquad (7.25)\\
p^* &= \frac{\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} - \lambda\int_{\partial\Omega} H\,ds}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds}\,. \qquad (7.26)
\end{aligned}$$

Remarque :
Si la fonction de niveaux φ est exactement une distance signée alors certains termes figurant dans les expressions des multiplicaters de Lagrange optimaux pourront être simplifiés et on aura :

$$\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} = \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} = 0\,.$$

Ceci montre que ces termes, très délicats lors de l'implémentation numérique, sont négligeables par rapport aux autres termes figurant dans les expressions de p^* et λ^*. Néanmoins, on remarque lors des simulations que, faute de ces deux termes, la forme ne converge pas vers la forme biconcave des vésicules.
On remarque aussi que la division par $|\nabla\varphi|$ dans les expressions de p^* (7.26) et λ^* (7.25) ne pose pas de problèmes numériques car ce terme est évalué uniquement sur la courbe Γ qui est loin du squelette de φ dans les topologies des membranes simulées.

7.5.5 Discrétisation en espace

Soit Λ_h une approximation polygonale du domaine Λ et $\mathcal{T}_h$ une triangulation de Λ_h. Soient x_i , $i = 1, .., N$ les noeuds de la triangulation et ϕ_i , $i = 1, .., N$ les fonctions de base de degré P_1 construit dans $\mathcal{T}_h$. Afin de construire l'approximation par des éléments finis de la formulation mixte (7.13-7.14-7.15-7.16), on introduit les espaces de discrétisation suivants :

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}_h &= \left\{\zeta_h \in \mathcal{C}^0\left(\overline{\Lambda}\right) \mid \zeta_{h|K} \in P_1(K)\,, \forall K \in \mathcal{T}_h\right\}\,,\\
\mathbb{V}_h(\xi_0) &= \mathbb{H}_h \cap H_0^1(\Lambda) + \pi_h\left(\widetilde{\xi_0}\right)\,,\\
\mathbb{N}_h &= \mathbb{H}_h^d\,,\\
\mathbb{G}_h &= \mathbb{N}_h \cap H_0(\mathrm{div}, \Lambda)\,,
\end{aligned}$$

Où π_h représente l'interpolant de Lagrange de type P_1 sur la frontière $\partial\Lambda$. Étant donné $\xi_0 \in H^{1/2}(\partial\Lambda)$, $\widetilde{\xi_0}$ représente le relèvement harmonique dans $H^1(\Lambda)$ et il verifie le problème stationnaire :

$$\begin{cases}
\triangle\widetilde{\xi_0} &= 0 \quad \text{p.p. } x \in \Lambda,\\
\widetilde{\xi_0} &= \xi_0 \quad \text{p.p. } x \in \partial\Lambda.
\end{cases}$$

Discrétisation des équations (7.14) **et** (7.13)

On utilise les mêmes shémas de discrétisation que ceux présentés dans le chapitre 2.

Discrétisation en espace de $(FV)_{\triangle t}$

À partir de la formulation variationelle $(FV)_{\triangle t}$ (7.19), on obtient la formulation variationelle suivante $(\widetilde{FV})_{\triangle t,h}$, où le calcul des formes trilinéaires est exact :

Étant donnés $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_0)$, $\psi_h^n \in \mathbb{H}_h$, $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}_h$ et $\gamma_h^n \in \mathbb{G}_h$,
trouver $\left(\varphi_h^{n+1}, \psi_h^{n+1}\right) \in \mathbb{V}_h(\varphi_0) \times \mathbb{H}_h$ tels que $\forall\,(\zeta, \xi) \in \mathbb{V}_h(0) \times \mathbb{H}_h$, on a :

$$m\left(|\nabla\varphi_h^n|\,,\, \psi_h^{n+1}\,,\, \xi\right) - a\left(|\nabla\varphi_h^n|\,\mathbf{I}\,,\, \varphi_h^{n+1}\,,\, \xi\right) = 2\,m\left(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\,,\, 1\,,\, \xi\right)\,, \quad (7.27)$$

$$\begin{aligned}
&a\left(|\nabla\varphi_h^n|^3(\mathbf{I} - \mathbf{n}_h^n \otimes \mathbf{n}_h^n)\,,\, \psi_h^{n+1}\,,\, \zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t}m\left(|\nabla\varphi_h^n|^3\,,\, \varphi_h^{n+1}\,,\, \zeta\right)\\
&+\frac{1}{2}a\left(|\nabla\varphi_h^n|\,(\psi_h^n)^2\,\mathbf{I}\,,\, \varphi_h^{n+1}\,,\, \zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t}m\left(|\nabla\varphi_h^n|^3\left(4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right)\,,\, 1\,,\, \zeta\right)\\
&-m\left(4\,|\nabla\varphi_h^n|^2\,(\mathbf{I} - \mathbf{n}_h^n \otimes \mathbf{n}_h^n)\,\nabla\psi_h^n.\gamma_h^n + 2\,(\psi_h^n)^2\,(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n) - p^n|\nabla\varphi_h^n|^4 + \lambda^n\psi_h^n|\nabla\varphi_h^n|^3\,,\, 1\,,\, \zeta\right)\,. \quad (7.28)
\end{aligned}$$

Formulation variationnelle $(\widetilde{FV})_{\triangle t,h}$

Dans la formulation variationelle $(FV)_{\triangle t,h}$ (7.28), on suppose qu'on calcule exactement les intégrales dans les différentes formes trilinéaires. Néanmoins, on utilise l'environnement des éléments finis Rheolef [85] où l'interpolant de Lagrange P_1, noté π_h, est utilisé pour approcher les différents poids qu'on note ω. On obtient la formulation variationnelle suivante $(FV)_{\triangle t,h}$ avec un calcul approché des formes trilinéaires :
Étant donnés $\varphi_h^n \in \mathbb{V}_h(\varphi_0)$, $\psi_h^n \in \mathbb{H}_h$, $\mathbf{n}_h^n \in \mathbb{N}_h$ et $\gamma_h^n \in \mathbb{G}_h$,
trouver $\left(\varphi_h^{n+1}, \psi_h^{n+1}\right) \in \mathbb{V}_h(\varphi_0) \times \mathbb{H}_h$ tels que $\forall\,(\zeta,\xi) \in \mathbb{V}_h(0) \times \mathbb{H}_h$, on a :

$$m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\right], \psi_h^{n+1}, \xi\right) - a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\,\mathbf{I}\right], \varphi_h^{n+1}, \xi\right) = 2\,m\left(\pi_h\left[\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n\right], 1, \xi\right) \tag{7.29}$$

$$\begin{aligned} a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^3(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\right], \psi_h^{n+1}, \zeta\right) + \frac{3}{2\triangle t}m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^3\right], \varphi_h^{n+1}, \zeta\right) + \\ \frac{1}{2}a\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|\,(\psi_h^n)^2\,\mathbf{I}\right], \varphi_h^{n+1}, \zeta\right) = \frac{1}{2\triangle t}m\left(\pi_h\left[|\nabla\varphi_h^n|^3\left(4\varphi_h^n - \varphi_h^{n-1}\right)\right], 1, \zeta\right) - \\ m\left(\pi_h\left[4\,|\nabla\varphi_h^n|^2\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\,\nabla\psi_h^n.\gamma_h^n + 2\,(\psi_h^n)^2\,(\nabla\varphi_h^n.\gamma_h^n) - p^n|\nabla\varphi_h^n|^4 + \lambda^n\psi_h^n|\nabla\varphi_h^n|^3\right], 1, \zeta\right) \end{aligned} \tag{7.30}$$

Tests numériques : Problèmes de conservation des contraintes

On utilise l'algorithme donné précédemment et on lance une simulation pour une particule ayant un volume réduit $\gamma = 0.75$. On remarque que l'algorithme proposé induit des pertes de masse dûes à l'accumulation des erreurs numériques. Les multiplicateurs de Lagrange p^* (7.25) et λ^* (7.26) ne traduisent pas les contraintes exactement, ceci est mis en évidence à la figure 7.2 où on vérifie que l'algorithme minimise $\mathscr{J}$ mais ne préserve pas les contraintes.
En effet, la condition $\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_\Omega 1\,\mathrm{dx} = 0$ ne traduit pas exactement la contrainte de volume $\int_\Omega 1\,\mathrm{dx} = V_0$ mais elle traduit plutôt la contrainte à une constante près, cette constante représente les erreurs d'origines numériques telles que les interpolations d'espaces et les erreurs d'arrondissements. Le même raisonnement peut expliquer la non préservation de la deuxième contrainte. Vu ces problèmes de conservation de la masse, on se propose de simplifier le problème qu'on résoud et on traite dans un premier lieu la minimisation de l'énergie de Canham et Helfrich uniquement sous la contrainte de conservation de volume puis en second lieu la minimisation de l'énergie de Canham et Helfrich sous la contrainte de conservation de la surface, avant de reprendre de nouveau le problème initial des vésicules. Ceci est l'objet des deux sections suivantes. Dans la suite de ce chapitre, les fonctions et les intégrations sont prises dans un sens formel.

7.6 Conservation de l'aire

7.6.1 Position du problème

Il s'agit de résoudre le problème suivant :

$$\Omega = \underset{\Omega\in\mathbb{V}}{\arg\inf}\ \mathscr{J}(\Omega)\,, \tag{7.31}$$

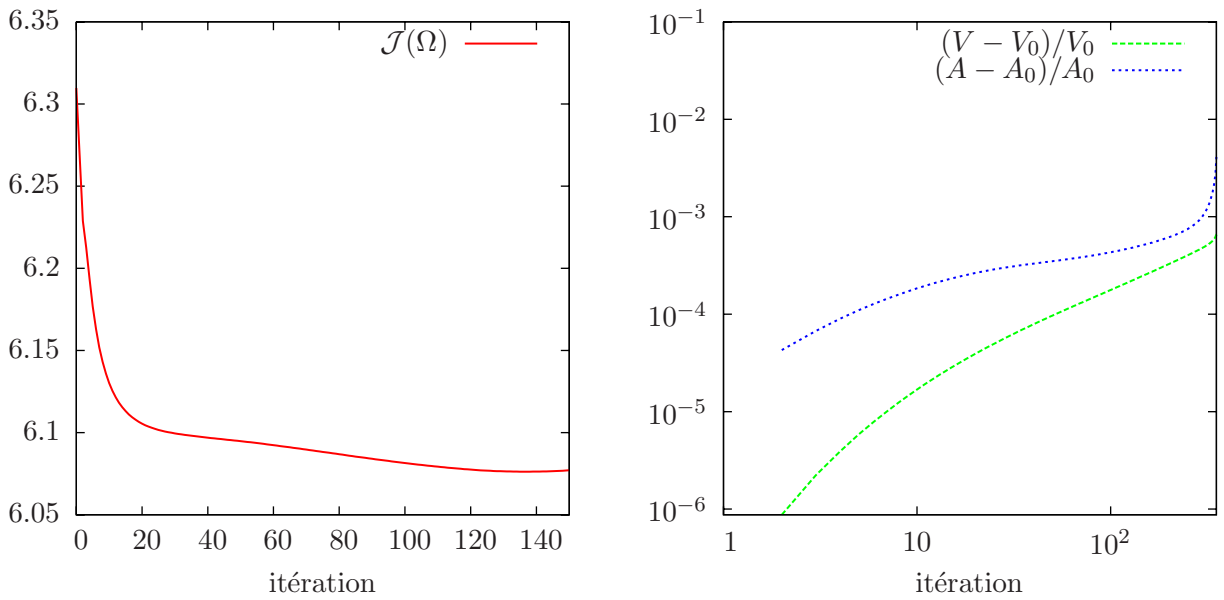

FIG. 7.2 – Tracé pour $\delta x = 2 \times 10^{-2}$, $\delta t = 2 \times 10^{-7}$ et $\gamma = 0.75$: (a) : L'énergie de Canham et Helfrich et (b) : L'aire relative (en valeur absolue) et le périmètre relatif (en valeur absolue), en échelle logarithmique.

où $\mathbb{V}$ représente l'espace des contraintes :

$$\mathbb{V} = \left\{ \Lambda \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3; \int_\Omega \mathrm{d}x = V_0 \right\} .$$

Ce problème contraint s'écrit sous la forme d'un problème de type point selle. Afin de relaxer les contraintes, introduisons le lagrangien :

$$\mathscr{L}(\omega; q) = \mathscr{J}(\omega) + p \left(\int_\omega \mathrm{d}x - V_0 \right) . \tag{7.32}$$

La solution $(\Omega; p)$ est un point de selle du lagrangien :

$$(\Omega; p) = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \sup_{q \in \mathbb{R}} \mathscr{L}(\omega; q) ,$$

et elle vérifie les conditions d'optimalité :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Omega}(\Omega; p)(\mathbf{u}) &= 0, \quad \text{pour tout } \mathbf{u} \text{ défini dans } \mathbb{R}^d , \\ \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial p}(\Omega; p)(q) &= 0, \qquad \forall q \in \mathbb{R} . \end{aligned}$$

On dérive par rapport à la forme le lagrangien (7.32) et on obtient :

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Omega}(\Omega; p).(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left\{ p + \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - \Delta_s H \right\} \mathbf{u}.\mathbf{n} \, \mathrm{d}s. \tag{7.33}$$

En supposant qu'on a la régularité suffisante, une direction de descente est définie par :

$$\mathbf{u} = \left\{ \Delta_s H - \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - p \right\} \mathbf{n}\,, \tag{7.34}$$

Ceci assure la minimisation de la fonctionnelle objective et on résoud le problème de transport suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rll} \dfrac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H - \dfrac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - p \right] |\nabla \varphi| & = 0, & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\ \int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{d}x & = V_0, & \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \\ \varphi(t,x) & = \varphi_{\partial\Lambda}(x), & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \partial_\nu \varphi(t,x) & = 0, & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) & = \varphi_0(x), & \text{p.p. } x \in \Lambda. \end{array} \right. \tag{7.35}$$

On utilise un algorithme d'Uzawa à pas optimal pour résoudre le problème :

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
$p^n \in \mathbb{R}$ connu,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.35) ;

   (b) Calculer r^{k+1} ;

   (c) k = k+1 ;

   fin de la boucle
   $k_{max} = k$;
   $\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
   $\mathscr{E}^*(p) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p)$

2. On calcule p^{n+1} :
   $p^{n+1} = p^*$

fin de l'algorithme.

7.6.2 Calcul du pas optimal

D'après (7.21), le système (7.35) s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H + H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right] - \frac{1}{2}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) - p\right]|\nabla\varphi| &= 0, \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,, \\ \frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} &= 0, \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,. \end{aligned} \tag{7.36}$$

L'équation (7.36) implique :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = 0 \Leftrightarrow \int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\delta(\varphi)\,\mathrm{dx} = 0 \Leftrightarrow \int_{\partial\Omega}\frac{\partial\varphi}{\partial t}\frac{1}{|\nabla\varphi|}\,\mathrm{ds} = 0 \Leftrightarrow$$

$$p\int_{\partial\Omega} 1\,ds = \int_{\partial\Omega}\Delta_s H\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} \tag{7.37}$$

Par conséquent, le multiplicateur de Lagrange optimal, noté p^*, est donné par :

$$p^* = \frac{\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds}\,. \tag{7.38}$$

7.6.3 Simulation numérique

La condition (7.36) ne traduit pas la contrainte $\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s = V_0$. En effet, sous forme discrète, ceci traduit que l'aire au temps t^n est égale à l'aire au temps t^{n-1}. Au cours des discrétisation, on a une accumulation d'erreurs numériques observées en traçant l'évolution de l'aire relative $\frac{V-V_0}{V_0}$ en échelle logarithmique.
On considère une particule présentant une aire réduite $\gamma = 1$. Minimiser l'énergie de Canham-Helfrich sous la contrainte de conservation de l'aire exige que la particule conserve sa forme circulaire. Néanmoins, on remarque que l'aire relative est assez élevée pour la forme qui est supposée en état stationnaire et on a une pente croissante à partir d'une certaine itération (voir Fig 7.3). Afin d'imposer la contrainte $\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s = V_0$ fortement, on effectue un contrôle *a posteriori* du multiplicateur de Lagrange (7.38). On remarque que ceci revient à restituer à l'itération $n+1$ les pertes de l'aire entre les deux itrations $n-1$ et n. Dans la partie suivante, l'objectif est d'ajuster le multiplicateur de Lagrange afin d'assurer la conservation de l'aire.

7.6.4 Contrôle *a posteriori* du pas

Il s'agit d'ajuster à chaque itération le multiplicateur de Lagrange de manière à restituer l'écart par rapport au volume de rérérence V_0 induit par l'itération précédente. On remplace l'équation (7.36) par l'équation :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda 1 - \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = -\varepsilon_V\ ,\ \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \tag{7.39}$$

avec ε_V est un paramètre dépendant du temps. À l'itération n, on note par Ω^n l'intérieur de la vésicule et on a :

$$\varepsilon_V = \frac{\int_{\Omega^n} 1\,\mathrm{dx} - V_0}{\Delta t}\,.$$

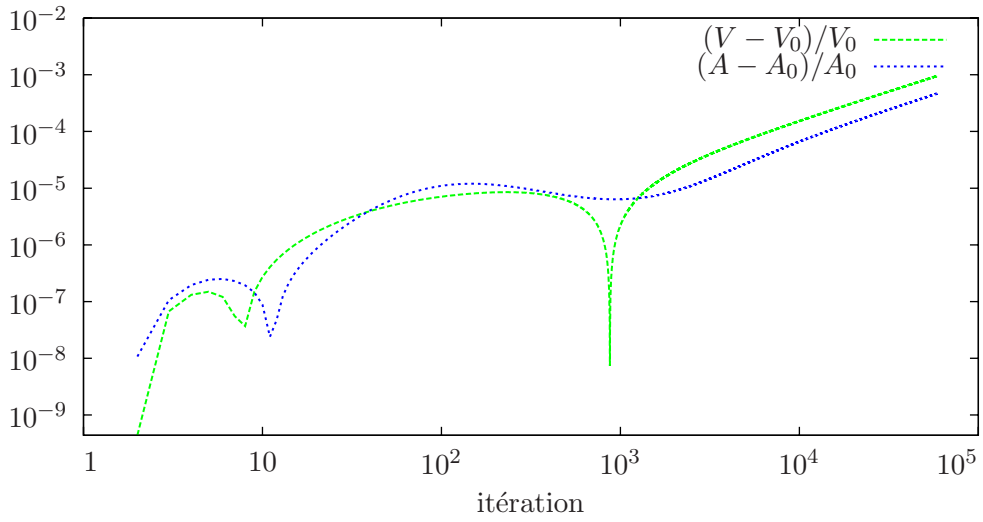

FIG. 7.3 – Évolution pour $\delta x = 2 \times 10^{-2}$, $\delta t = 10^{-7}$ et $\gamma = 1$ de l'aire relative (en valeur absolue) et du périmètre relatif (en valeur absolue), en échelle logarithmique.

L'équation (7.39) est équivalente à :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} \;=\; \varepsilon_V \;,\; \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \tag{7.40}$$

L'équation (7.40) implique :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} \;=\; \varepsilon_V \;\Leftrightarrow\; \int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\delta(\varphi)\,\mathrm{dx} \;=\; \varepsilon_V \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} \frac{\partial\varphi}{\partial t}\frac{1}{|\nabla\varphi|}\,\mathrm{ds} \;=\; \varepsilon_V \;\Leftrightarrow$$

$$p\int_{\partial\Omega} 1\,ds - \varepsilon_V \;=\; \int_{\partial\Omega}\Delta_s H\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.$$

Par conséquent, le multiplicateur de Lagrange optimal est donné par :

$$p \;=\; \frac{\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} + \varepsilon_V}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds} \;=\; p^* + \frac{\varepsilon_V}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds}\,. \tag{7.41}$$

D'après (7.41), la correction apportée au multiplicateur de Lagrange peut être interprétée comme un contrôle *a posteriori* de p^* (7.38) et on a :

$$p \;=\; p^* + \delta p^n \tag{7.42}$$

Faute des pertes numériques de surface, le contrôle *a posteriori* δp^n (7.42) est nul.

7.6.5 Algorithme : Uzawa avec Contrôle *a posteriori* du pas

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
$p^n \in \mathbb{R}$ connu,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.35) ;
   (b) Calculer r^{k+1} ;
   (c) k = k+1 ;

   fin de la boucle
   $k_{max} = k$;
   $\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
   $\mathscr{E}^*(p) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p)$

2. On calcule p^{n+1} (7.41) :
   $p^{n+1} = p^* + \delta p^n$

fin de l'algorithme.

7.6.6 Validation numérique

On applique le contrôle *a posteriori* du multiplicateur de Lagrange p^* et on considère une particule présentant une aire réduite $\gamma = 1$. On trace sur la figure 7.4 l'évolution de l'aire relative, en échelle logarithmique au cours des itérations. Par conséquences, les pertes de l'aire sont contrôlées et elles sont de l'ordre de $10^{-6}\%$ de l'aire initiale.

7.7 Conservation du périmètre

7.7.1 Position du problème

Il s'agit de résoudre le problème suivant :

$$\Omega = \underset{\Omega \in \mathbb{V}}{\arg\inf} \ \mathscr{J}(\Omega)\,, \tag{7.43}$$

où $\mathbb{V}$ représente l'espace des contraintes :

$$\mathbb{V} = \left\{ \Lambda \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3; \int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s = A_0 \right\} .$$

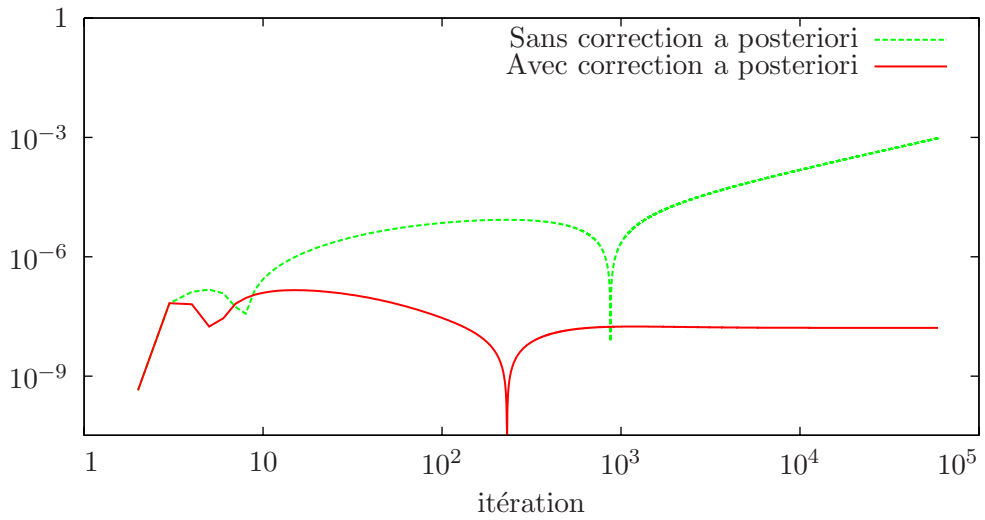

FIG. 7.4 – Évolution de l'aire relative (en valeur absolue) pour la même simulation (Fig 7.3) sans et avec correction *a posteriori* du multiplicateur de Lagrange p, en échelle logarithmique.

Ce problème contraint s'écrit sous la forme d'un problème de point selle. Afin de relaxer les contraintes, on introduit le lagrangien :

$$\mathscr{L}(\omega;\sigma) = \mathscr{J}(\omega) + \lambda \left(\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s - A_0 \right) . \tag{7.44}$$

La solution $(\Omega;\lambda)$ est un point de selle du lagrangien :

$$(\Omega;\lambda) = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \ \sup_{\sigma\in\mathbb{R}} \mathscr{L}(\omega;\sigma) ,$$

et elle vérifie :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Omega}(\Omega;\lambda)(\mathbf{u}) = 0, && \text{pour tout } \mathbf{u} \text{ défini dans } \mathbb{R}^d , \\ &\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial p}(\Omega;\lambda)(\sigma) = 0, && \forall \sigma \in \mathbb{R} . \end{aligned}$$

La dérivation par rapport à la forme de lagrangien (7.44) est donnée par :

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \Omega}(\Omega;\lambda).(\mathbf{u}) = \int_\Gamma \left\{ \lambda H + \frac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - \Delta_s H \right\} \mathbf{u}.\mathbf{n}\, \mathrm{d}s . \tag{7.45}$$

La direction de descente est donnée par :

$$\mathbf{u} = \left\{ \Delta_s H - \frac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - \lambda H \right\} \mathbf{n} . \tag{7.46}$$

Par conséquences, il s'agit de résoudre le problème suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rll} \dfrac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H - \dfrac{1}{2}(H-H_0)[4K - H(H+H_0)] - \lambda H \right] |\nabla \varphi| & = 0, & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\ \int_{\partial\Omega} 1\, \mathrm{d}s & = A_0, & \text{p.p. } t \in]0,+\infty[, \\ \varphi(t,x) & = \varphi_{\partial\Lambda}(x), & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \partial_\nu \varphi(t,x) & = 0, & \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\partial\Lambda, \\ \varphi(0,x) & = \varphi_0(x), & \text{p.p. } x \in \Lambda. \end{array} \right. \tag{7.47}$$

Toutefois, on utilise un algorithme d'Uzawa à pas optimal :

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
$p^n \in \mathbb{R}$ connu,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.47) ;
   (b) Calculer r^{k+1} ;
   (c) k = k+1 ;

   fin de la boucle
   $k_{max} = k$;
   $\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
   $\mathscr{E}^*(\lambda) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; \lambda)$

2. On calcule λ^{n+1} :
   $\lambda^{n+1} = \lambda^*$

fin de l'algorithme.

7.7.2 Calcul du pas optimal

D'après (7.21), le système (7.47) s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H + H \nabla . \left[\frac{\nabla_s |\nabla \varphi|}{|\nabla \varphi|} \right] - \frac{1}{2} \nabla . \left(H^2 \mathbf{n} \right) - \lambda H \right] |\nabla \varphi| &= 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0, +\infty[\times \Lambda \,, \\ \frac{d}{dt} \int_{\partial\Omega} 1 \, \mathrm{ds} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0, +\infty[\,. \end{aligned} \tag{7.48}$$

En utilisant (7.48) et la formule de Reynolds (7.23), on a :

$$\frac{d}{dt} \int_{\partial\Omega} 1 \, \mathrm{ds} = 0 \Leftrightarrow \int_{\partial\Omega} \nabla_s . \mathbf{u} \, \mathrm{ds} = 0 \Leftrightarrow \int_{\partial\Omega} H \mathbf{u} . \mathbf{n} \, \mathrm{ds} = 0 \Leftrightarrow$$

$$\lambda \int_{\partial\Omega} H^2 \, \mathrm{ds} = \int_{\partial\Omega} H \, \Delta_s H \, \mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2 \nabla . \left[\frac{\nabla_s |\nabla \varphi|}{|\nabla \varphi|} \right] \mathrm{ds} - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} H \, \nabla . \left(H^2 \mathbf{n} \right) \mathrm{ds}.$$

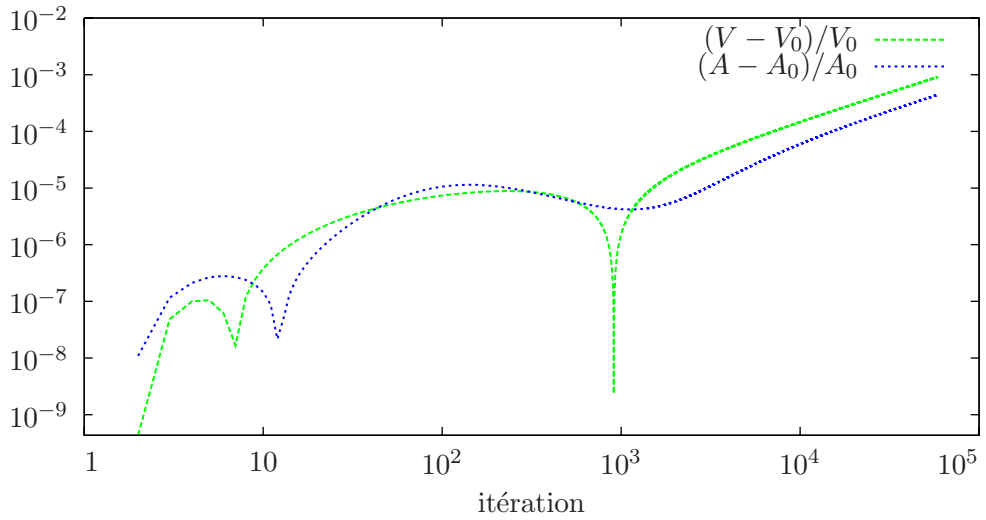

FIG. 7.5 – Évolution pour $\delta x = 2\,10^{-2}$, $\delta t = 10^{-7}$, $\gamma = 1$ et $\varepsilon = 2.5\,\delta x$du volume relatif (en valeur absolue) et la surface relative (en valeur absolue), en échelle logarithmique.

Par conséquent, le multiplicateur de Lagrange optimal, noté λ^*, est donné par :

$$\lambda^* \;=\; \frac{-\int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2 \,\mathrm{ds} \,+\, \int_{\partial\Omega} H^2 \nabla.\left[\dfrac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right] \mathrm{ds} \,-\, \dfrac{1}{2}\displaystyle\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) \mathrm{ds}}{\int_{\partial\Omega} H^2\, ds}\,. \tag{7.49}$$

7.7.3 Simulation numérique

On reprend le test de la section précédente et on considère une particule ayant une aire réduite $\gamma = 1$. Minimiser l'énergie de courbure de Canham et Helfrich sous la contrainte de conservation du périmètre exige que la particule conserve sa forme circulaire. Néanmoins, on remarque que le périmètre relatif est assez élevé et on a une pente croissante à partir d'une certaine itération (voir Fig 7.5). La condition (7.48) ne traduit pas la contrainte $\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s = A_0$. En effet, sous forme discrète, ceci traduit que le périmètre au temps t^n est égal au périmètre au temps t^{n-1}. Néanmoins, on a une accumulation des erreurs numériques au cours des itérations (voir Fig. 7.5) et on doit restituer à l'itération $n+1$ les pertes de l'itération précédente.

7.7.4 Contrôle *a posteriori* du pas

On restitue l'équation (7.48) par l'équation :

$$\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} \;=\; \varepsilon_A \;,\;\; \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \tag{7.50}$$

avec ε_A est un paramètre dépendant du temps et il est donné à l'itération n par :

$$\varepsilon_A \;=\; \frac{-\int_{\partial\Omega^n} 1\,\mathrm{ds} \,+\, A_0}{\Delta t}\,.$$

Le système (7.47) se restitue par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H - H \nabla . \left[\frac{\nabla_s |\nabla \varphi|}{|\nabla \varphi|} \right] - \frac{1}{2} \nabla . \left(H^2 \mathbf{n} \right) - \lambda H \right] |\nabla \varphi| &= 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times \Lambda \,, \\ \frac{d}{dt} \int_{\partial\Omega} 1 \, \mathrm{ds} &= \varepsilon_A \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,. \end{aligned} \tag{7.51}$$

En utilisant (7.51) et la formule de Reynolds (7.23), on a :

$$\frac{d}{dt} \int_{\partial\Omega} 1 \, \mathrm{ds} = \varepsilon_A \Leftrightarrow \int_{\partial\Omega} \nabla_s . \mathbf{u} \, \mathrm{ds} = \varepsilon_A \Leftrightarrow \int_{\partial\Omega} H \mathbf{u}.\mathbf{n} \, \mathrm{ds} = \varepsilon_A \Leftrightarrow$$

$$\lambda \int_{\partial\Omega} H^2 \, \mathrm{ds} + \varepsilon_A = \int_{\partial\Omega} H \, \Delta_s H \, \mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2 \nabla . \left[\frac{\nabla_s |\nabla \varphi|}{|\nabla \varphi|} \right] \mathrm{ds} - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} H \, \nabla . \left(H^2 \mathbf{n} \right) \mathrm{ds} \,.$$

Par conséquent, le multiplicateur de Lagrange optimal λ est donné par :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{- \int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2 \, \mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2 \nabla . \left[\frac{\nabla_s |\nabla \varphi|}{|\nabla \varphi|} \right] \mathrm{ds} - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} H \, \nabla . \left(H^2 \mathbf{n} \right) \mathrm{ds} - \varepsilon_A}{\int_{\partial\Omega} H^2 \, ds} \\ &= \lambda^* - \frac{\varepsilon_A}{\int_{\partial\Omega} H^2 \, ds} \,. \end{aligned} \tag{7.52}$$

D'après (7.52), la correction apportée au multiplicateur de Lagrange peut être interprétée comme un contrôle *a posteriori* de λ^* (7.49) et on a :

$$\lambda = \lambda^* + \delta \lambda^n \,. \tag{7.53}$$

Similairement à la partie précédente, on remarque que, faute des pertes numériques du périmètre, le contrôle *a posteriori* $\delta\lambda^n$ (7.53) est nul.

7.7.5 Algorithme : Uzawa avec Contrôle *a posteriori* du pas

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
  $(\Omega^0; \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
  $\lambda^n \in \mathbb{R}$ connu,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.47) ;
   (b) Calculer r^{k+1} ;

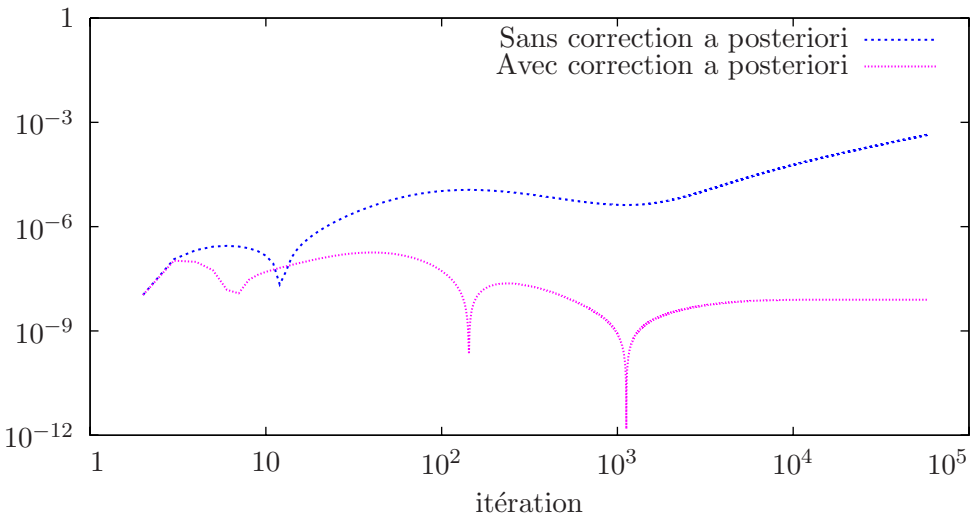

FIG. 7.6 – Évolution du périmètre relatif (en valeur absolue) sans et avec correction *a posteriori* du multiplicateur de Lagrange λ^*, en échelle logarithmique.

(c) k = k+1 ;

fin de la boucle

$k_{max} = k$;
$\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
$\mathscr{E}^*(\lambda) \; = \; -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; \lambda)$

2. On calcule λ^{n+1} (7.52) :
$\lambda^{n+1} \; = \; \lambda^* + \delta\lambda^n$

fin de l'algorithme.

7.7.6 Validation numérique

On considère la particule ayant une aire réduite $\gamma = 1$ et on trace sur la figure 7.5 l'évolution du périmètre relatif, en échelle logarithmique, au cours des itérations. Par conséquences, les pertes du périmètre sont de l'ordre de $10^{-7}\%$ du périmètre initial.

7.8 Conservation de l'aire et du périmètre

7.8.1 Contrôle *a posteriori* des pas

Calcul des corrections *a posteriori* des multiplicateurs de Lagrange

On reprend le problème (7.10) à résoudre :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H - \frac{1}{2}H[4K - H^2] - p - \lambda H\right]|\nabla\varphi| &= 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,,\\
\frac{d}{dt}\int_\Omega 1\,\mathrm{dx} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,,\\
\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} &= 0 \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,.
\end{aligned} \tag{7.54}$$

Il sera restituer, de manière analogue aux sections précédentes, par :

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \left[\Delta_s H - H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right] - \frac{1}{2}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) - p - \lambda H\right]|\nabla\varphi| = 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,, \tag{7.55}$$

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = \varepsilon_V \qquad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \tag{7.56}$$

$$\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} = \varepsilon_A \qquad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,. \tag{7.57}$$

Avec ε_A et ε_V dépendent du temps et ils sont donnés à l'itération n, respectivement, par :

$$\varepsilon_A = \frac{-\int_{\partial\Omega^n} 1\,\mathrm{ds} + A_0}{\Delta t}\,, \varepsilon_V = \frac{\int_{\Omega^n} 1\,\mathrm{dx} - V_0}{\Delta t}\,.$$

En utilisant (7.57) et la formule de Reynolds (7.23), on a :

$$\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} = \varepsilon_A \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} \nabla_s.\mathbf{u}\,\mathrm{ds} = \varepsilon_A \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} H\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds} = \varepsilon_A \;\Leftrightarrow$$

$$p\int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} + \varepsilon_A = \int_{\partial\Omega} H\,\Delta_s H\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.$$

L'équation (7.69) implique :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = \varepsilon_V \;\Leftrightarrow\; \int_\Lambda \frac{\partial\varphi}{\partial t}\delta(\varphi)\,\mathrm{dx} = \varepsilon_V \;\Leftrightarrow\; \int_{\partial\Omega} \frac{\partial\varphi}{\partial t}\frac{1}{|\nabla\varphi|}\,\mathrm{ds} = \varepsilon_V \;\Leftrightarrow$$

$$p\int_{\partial\Omega} 1\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} - \varepsilon_V = \int_{\partial\Omega} \Delta_s H\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.$$

Ainsi, il s'agit de résoudre le système suivant :

$$\begin{aligned}
p\int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} + \varepsilon_A &= -\int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds}\\
&\quad -\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,,\\
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} - \varepsilon_V &= \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\,.
\end{aligned}$$

Il est équivalent à :

$$\begin{aligned}
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds \int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2 &= \int_{\partial\Omega} H\,ds \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} \\
&\quad -\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,ds \int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} + \varepsilon_V \int_{\partial\Omega} H\,ds, \\
p\int_{\partial\Omega} 1\,ds \int_{\partial\Omega} H\,ds + \lambda\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} &= \int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(\int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \varepsilon_A\right. \\
&\quad \left. -\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} - \int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds}\right).
\end{aligned}$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
\lambda\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right] &= \int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(-\int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds}\right. \\
&\quad \left. -\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} - \varepsilon_A\right) \\
&\quad -\int_{\partial\Omega} H\,ds \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} \\
&\quad +\frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,ds \int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} - \varepsilon_V\int_{\partial\Omega} H\,ds\,,
\end{aligned}$$

$$p\int_{\partial\Omega} 1\,ds = \int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} - \lambda\int_{\partial\Omega} H\,ds + \varepsilon_V\,.$$

Finalement, les multiplicateurs de Lagrange optimaux sont donnés par :

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(-\int_{\partial\Omega} |\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} - \varepsilon_A\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]} \\
&\quad - \frac{\int_{\partial\Omega} H\,ds\left(\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} + \varepsilon_V\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}\,, \qquad (7.58)
\end{aligned}$$

$$p = \frac{\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} \nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\,\mathrm{ds} - \lambda\int_{\partial\Omega} H\,ds + \varepsilon_V}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds}\,. \qquad (7.59)$$

D'après (7.59), les corrections apportées aux multiplicateurs de Lagrange représentent un contrôle *a posteriori* de λ^* (7.25) et p^* (7.26) et on a :

$$\lambda = \lambda^* + \delta\lambda^n\,, \qquad (7.60)$$

$$p = p^* + \delta p^n\,, \qquad (7.61)$$

où

$$\delta\lambda^n = \frac{-\varepsilon_A\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} - \varepsilon_V\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}\,, \qquad (7.62)$$

$$\delta p^n = \frac{\varepsilon_A\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} + \varepsilon_V\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds}}{\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}\,. \qquad (7.63)$$

Faute des pertes numériques de surface et de volume, les contrôles *a posteriori* $\delta\lambda^n$ (7.62) et δp^n (7.63) sont nuls.

Algorithme

On note à chaque temps t^n par r_ψ^n et r_φ^n les résidus du système (7.19) et on calcule un résidu global $r^n = \sqrt{(r_\psi^n)^2 + (r_\varphi^n)^2}$. On fixe le critère de convergence par rapport au résidu global en fixant une valeur seuil du résidu ε à partir duquelle on suppose qu'on atteind la convergence. Toutefois, les corrections $(\delta p^n, \delta\lambda^n)$ apportées aux multiplicateurs de Lagrange p et λ peuvent être interprétées comme une étape de correction optimale dans un algorithme d'Uzawa avec contrôle *a posteriori* du pas de descente (voir algorithme Alg. 7.5.3).

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0, \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}^2$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
$(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$ connus,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

   tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

   (a) Résoudre le système (7.17)- (7.19) ;
   (b) Calculer r^{k+1} ;
   (c) k = k+1 ;

   fin de la boucle
   $k_{max} = k$;
   $\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
   $\mathscr{E}^*(p, \lambda) = -\mathscr{L}(\Omega^{n+1}; p, \lambda)$

2. On calcule p^{n+1} (7.58) et λ^{n+1} (7.59) :
   $(p^{n+1}, \lambda^{n+1}) = (p^* + \delta p^n, \lambda^* + \delta\lambda^n)$

fin de l'algorithme.

7.8.2 Test de validation numérique

Dans cette partie, on choisit les paramètres numériques suivants : $\delta t = 5\,10^{-7}$, $\Delta x = 2 \times 10^{-2}$ et $\varepsilon = 2.5 \times \delta x$. On varie l'aire réduite de la vésicule et compare les solutions trouvées à celles obtenues par la résolution d'équations différentielles. On vérifie aussi la préservation des contraintes ainsi que la convergence des résidus et des erreurs relatives.

7.8.3 Vésicule avec $\gamma = 0.75$

On fixe une aire réduite $\gamma = 0.75$. La solution des équations différentielles ayant $\gamma = 0.75$ est obtenue pour les paramètres suivants : $N = 10^4$, $\lambda = -0.95$, $p = 3.3$ et $w_0' = 0.296$. Dans la figure 7.7(a), on superpose la solution obtenue par les éléments finis avec celle de l'EDO. Sur la figure 7.7(b), on trace l'évolution de l'énergie de Canham et Helfrich au cours des itérations et on vérifie qu'on minimise effectivement cette énergie.
Afin de vérifier la préservation des contraintes au cours des itérations ainsi que l'effet du choix de pas de temps, on choisit plusieurs pas de temps et on trace à la figure 7.8 l'erreur relative en aire et périmètre, les résultats montrent que pour des pas de temps inférieurs à 10^{-7}, l'erreur est inférieure à $10^{-5}\%$. Quant aux multiplicateurs de Lagrange, ils convergent à l'équilibre vers $(p, \lambda) = (3.3, -0.95)$ (voir Fig 7.9(a)).

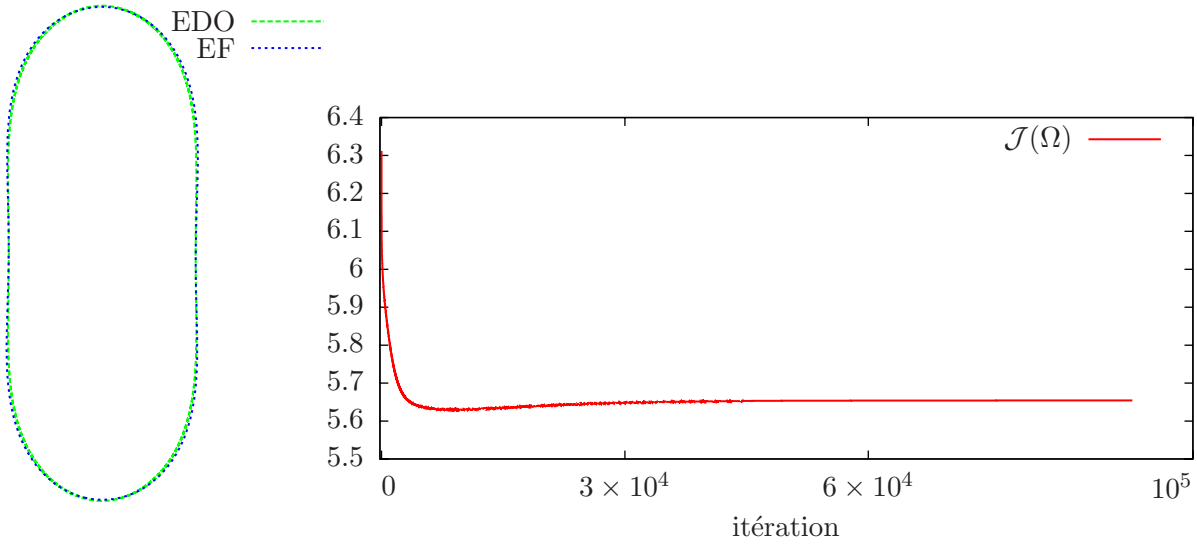

FIG. 7.7 – Vésicule à aire réduite $\gamma = 0.75$: (a) : Comparaison entre la solution par éléments finis (EF) et la solution *semi explicite* (EDO). (b) : Évolution de l'énergie de courbure de Canham et de Helfrich au cours des d'itérations.

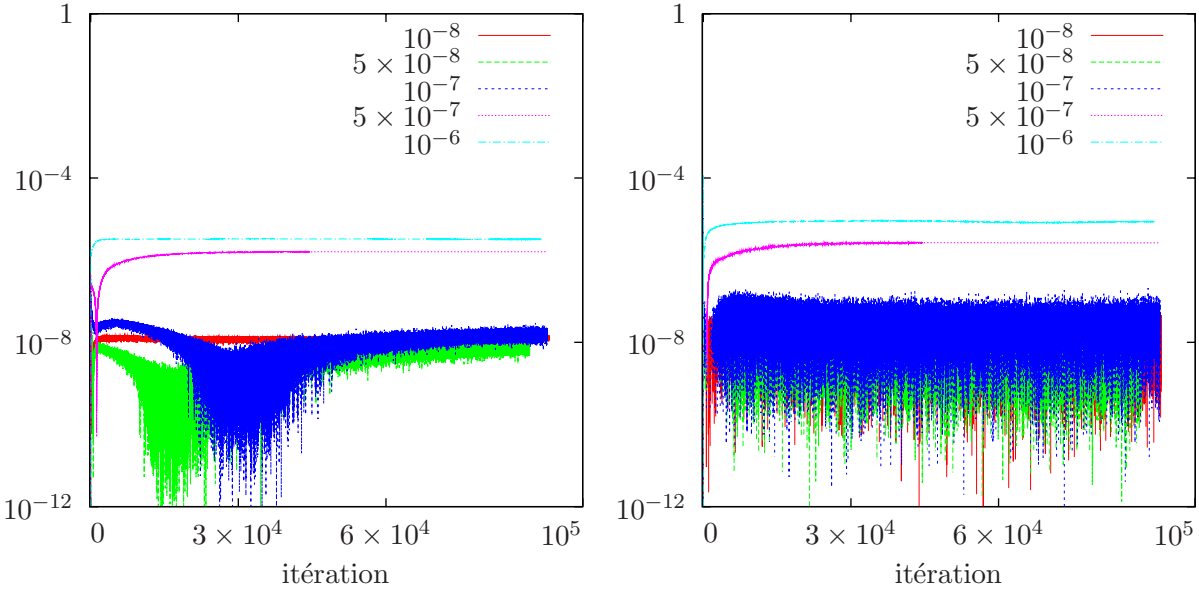

FIG. 7.8 – Éffet du choix du pas de temps δt sur l'évolution (en échelle logarithmique en ordonnées) du : (a) : aire relative (en valeur absolue) et (b) : périmètre relatif (en valeur absolue).

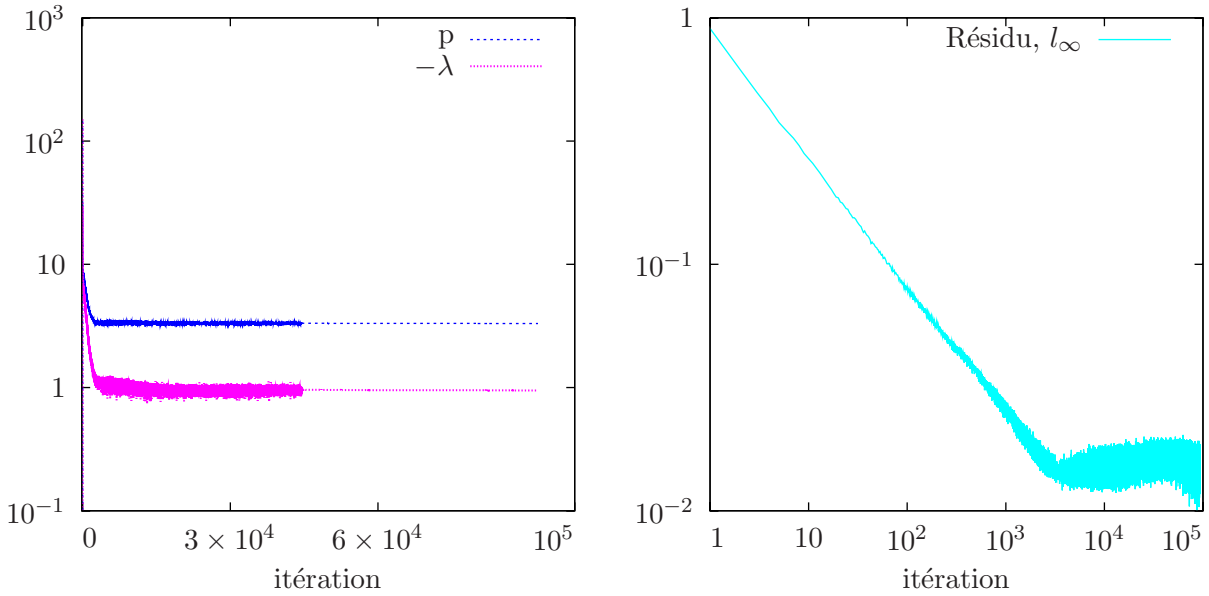

FIG. 7.9 – (a) : Évolution des multiplicateurs de Lagranges (échelle logarithmique en ordonnées), (b) : Évolution du résidu évaluée dans la norme l_∞ pour $\delta t = 10^{-8}$ en `log-log`.

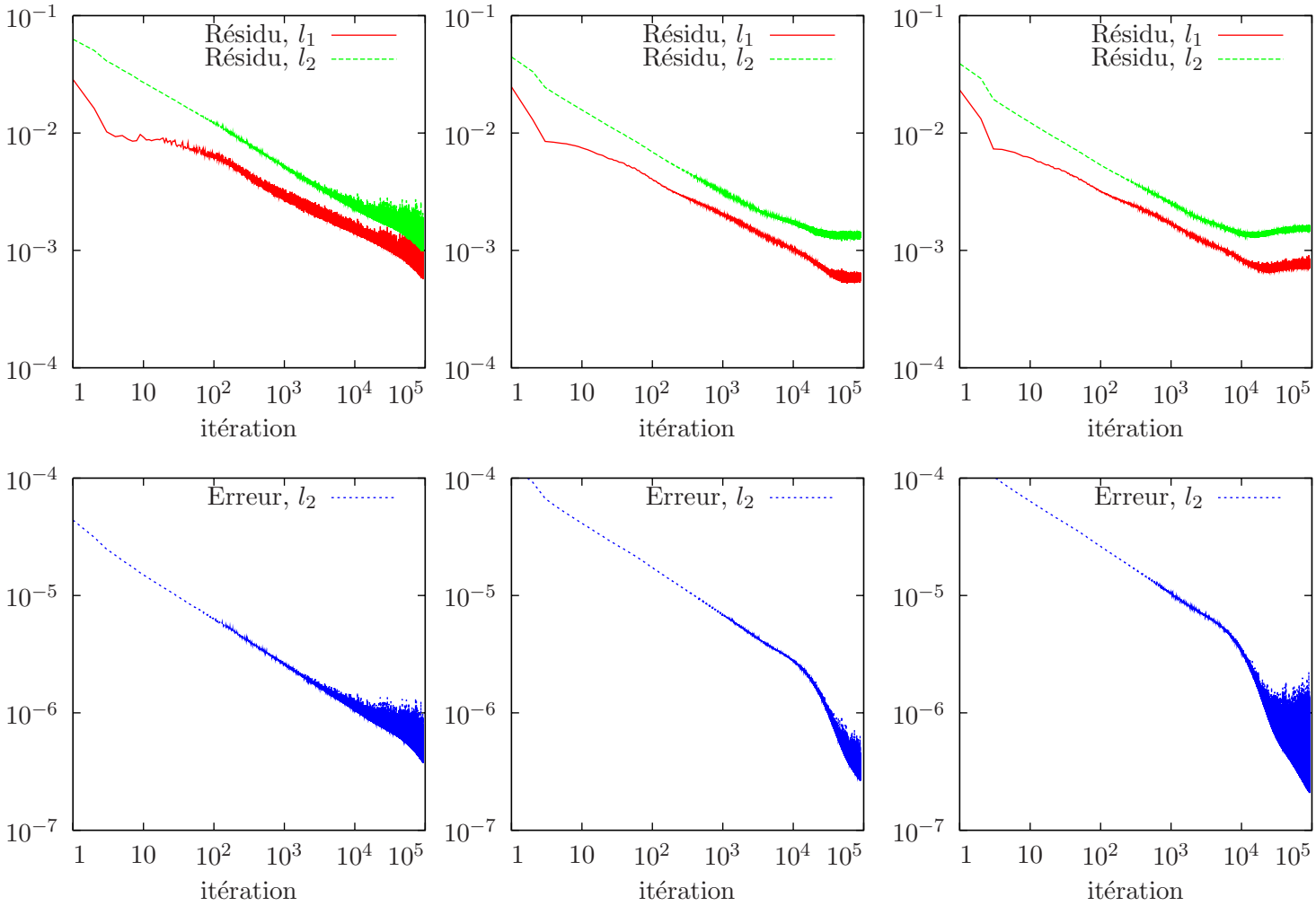

FIG. 7.10 – Convergence du résidu et de l'erreur respectivement en colonnes pour $\delta t = 10^{-8}$, $\delta t = 5 \times 10^{-8}$ et $\delta t = 10^{-7}$, en `log-log`. (haut) : le résidu évaluée dans les normes l_1 et l_2 et (bas) : l'erreur relative en norme l_2.

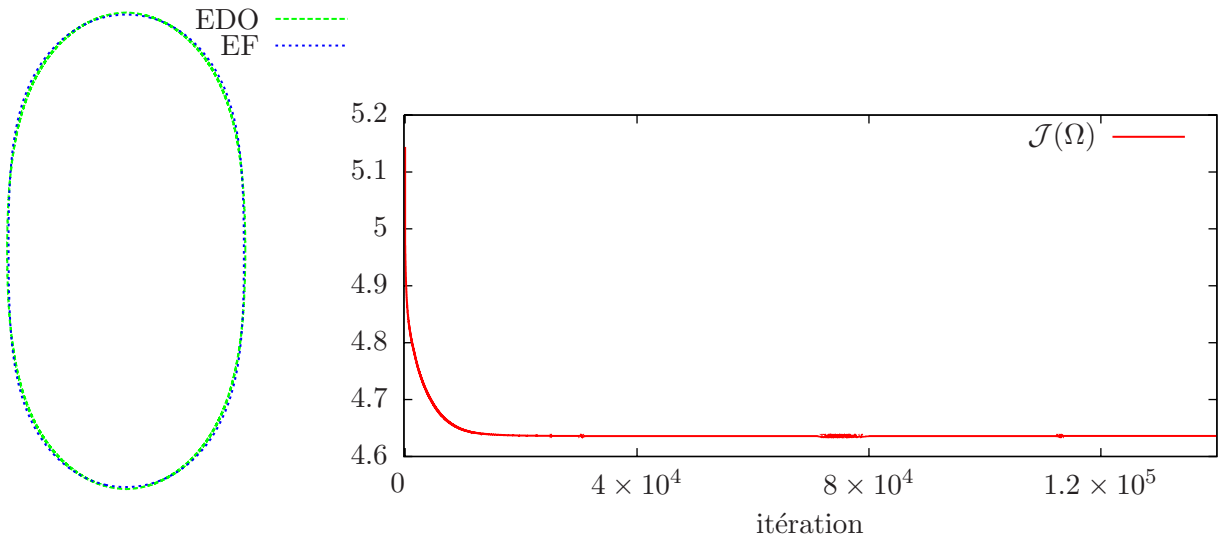

FIG. 7.11 – Vésicule à aire réduite $\gamma = 0.85$ (a) : Comparaison par rapport à la solution *semi explicite*. (b) : Évolution de l'énergie de Canham et Helfrich au cours des d'itérations.

Pour vérifier la convergence numérique de l'algorithme, on trace l'évolution au cours des itérations (en échelle logarithmique) du résidu et de l'erreur relative dans les normes l^1 et l^2 pour différents choix du pas de temps. La figure 7.10 montre que l'algorithme converge et que les résidus finissent par se stabiliser lorsque l'erreur machine l'emporte. Quant au résidu évalué en norme l^∞, on en montre la convergence à la figure 7.9(b) pour un pas de temps $\delta t = 10^{-8}$.

7.8.4 Vésicule avec $\gamma = 0.85$

On fixe une aire relative $\gamma = 0.85$. La solution de l'équation différentielle ayant $\gamma = 0.85$ est obtenue pour les paramètres suivants : $N = 10^4$, $\lambda = -0.95$, $p = 3.3$ et $w_0' = 0.48$. Dans la figure 7.11(a), on vérifie que la solution obtenue par éléments finis se superpose avec celle de l'EDO. Par ailleurs, on vérifie la minimisation de l'énergie de Helfrich au cours des itérations à la figure 7.7(b). On vérifie la préservation des contraintes au cours des itérations en traçant à la figure 7.12(a) l'erreur relative en aire et périmètre : les résultats montrent que l'erreur commise est inférieur à 10^{-6}. L'évolution des multiplicateurs de Lagrange est tracée sur la figure 7.12(b). Finalement, on vérifie la convergence au cours des itérations, en échelle logarithmique, du résidu et de l'erreur relative (voir Fig 7.14).

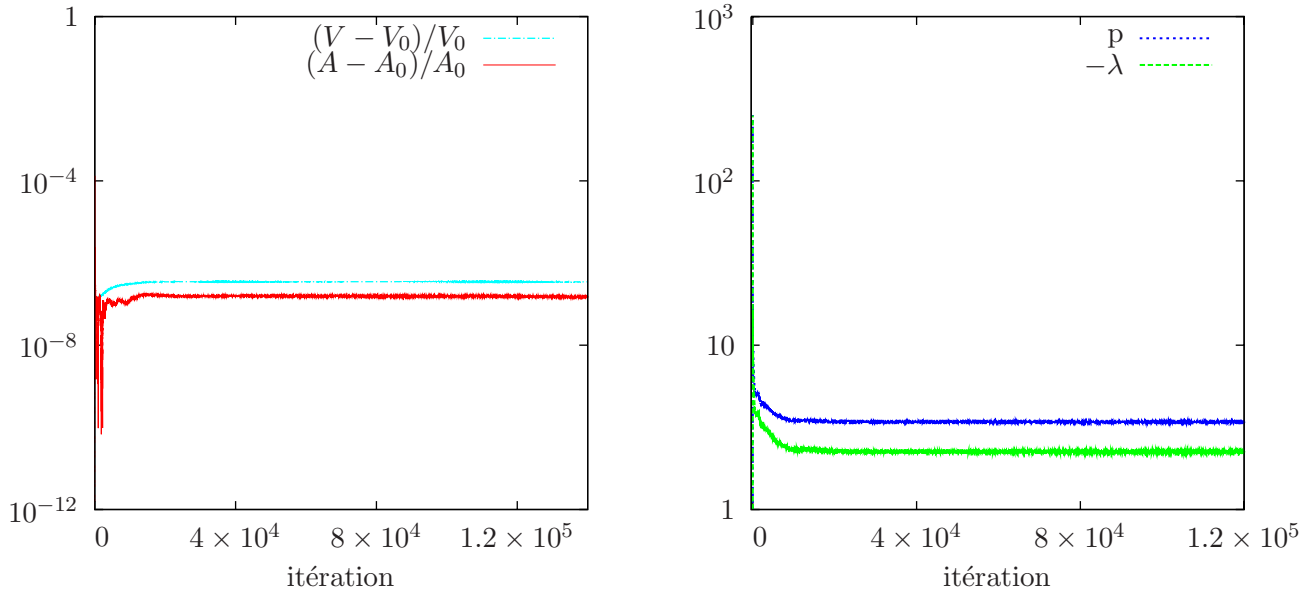

FIG. 7.12 – (a) : Évolution de l'aire relative (en valeur absolue) et du périmètre relatif (en valeur absolue), en échelle logarithmique en ordonnées. (b) : Évolution des multiplicateurs de Lagranges (échelle logarithmique en ordonnées).

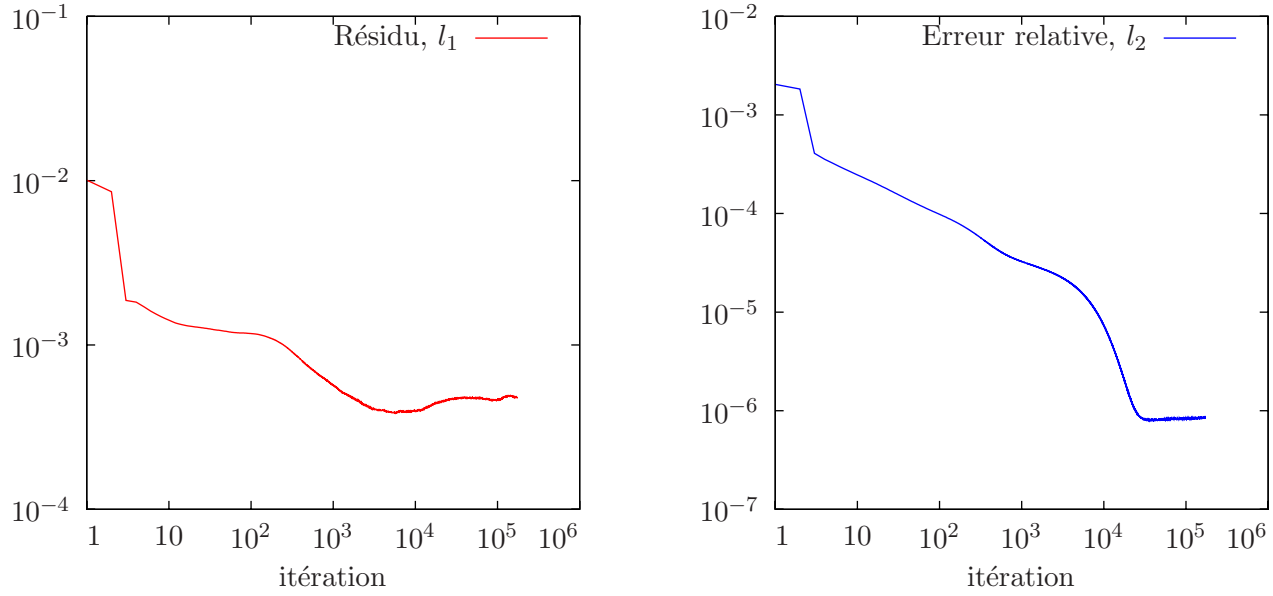

FIG. 7.13 – Évolution en échelle `log-log` : (a) : le résidu évaluée en norme l_1 et (b) : l'erreur relative en norme l_2.

7.8.5 Vésicule avec $\gamma = 0.65$

On cherche la forme d'équilibre d'une vésicule ayant une aire relative $\gamma = 0.65$. La solution obtenue par la résolution d'équations différentielles ayant $\gamma = 0.65$ est obtenue pour les paramètres suivants : $N = 10^4$, $\lambda = -0.9$, $p = 3.2$ et $w_0' = 0.296$. Dans la figure 7.14(a), on vérifie que la solution obtenue par les éléments finis se superpose avec celle de l'EDO et on trace l'évolution de l'énergie de Canham-Helfrich au cours des itérations (voir Fig 7.14(b)). La convergence de l'erreur et du résidu sont tracées sur la figure 7.15(b) et l'erreur commise sur les contraintes est tracée sur la figure 7.15(a).

7.8.6 Vésicule avec $\gamma = 0.6$

On s'intéresse maintenant à la forme d'équilibre d'une vésicule ayant une aire réduite $\gamma = 0.6$. La solution obtenue par résolution d'EDO et ayant $\gamma = 0.6$ est obtenue pour les paramètres suivants : $N = 10^4$, $\lambda = -0.9$, $p = 3.2$ et $w_0' = 0.4$. Dans la figure 7.16(a), on vérifie que la solution obtenue par les éléments finis se superpose avec celle de l'EDO et on trace l'évolution de l'énergie de Helfrich au cours des itérations dans la figure 7.16(b). La convergence de l'erreur et du résidu sont tracées sur la figure 7.18 et l'erreur commise sur les contraintes ainsi que les multiplicateurs de Lagrange sont tracées sur la figure 7.17.

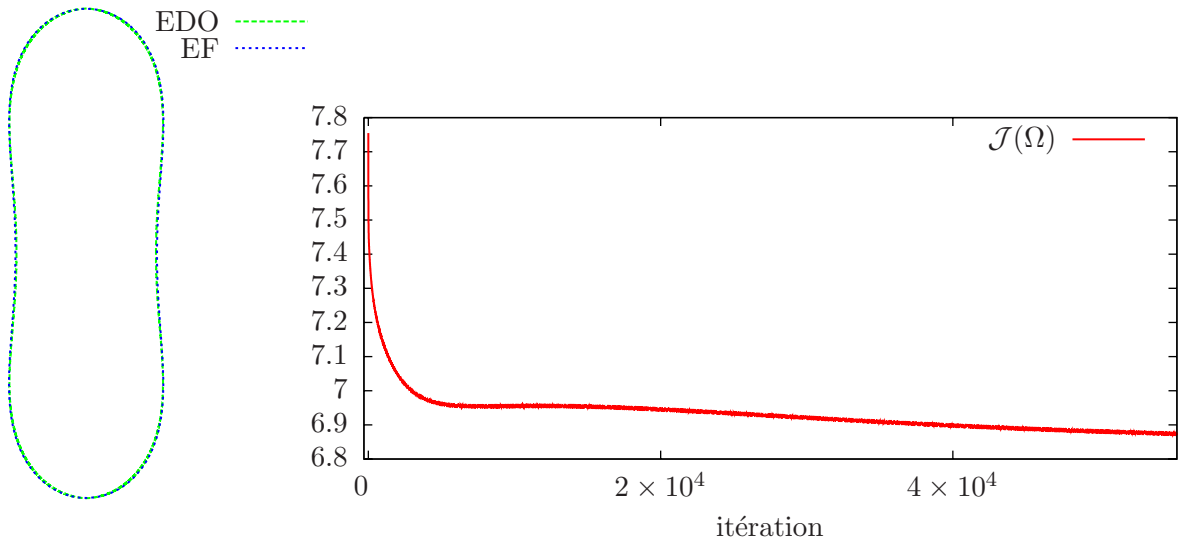

FIG. 7.14 – Vésicule à aire réduite $\gamma = 0.65$: (a) : Comparaison par rapport à la solution d'EDO. (b) : Évolution de l'énergie de courbure de Helfrich.

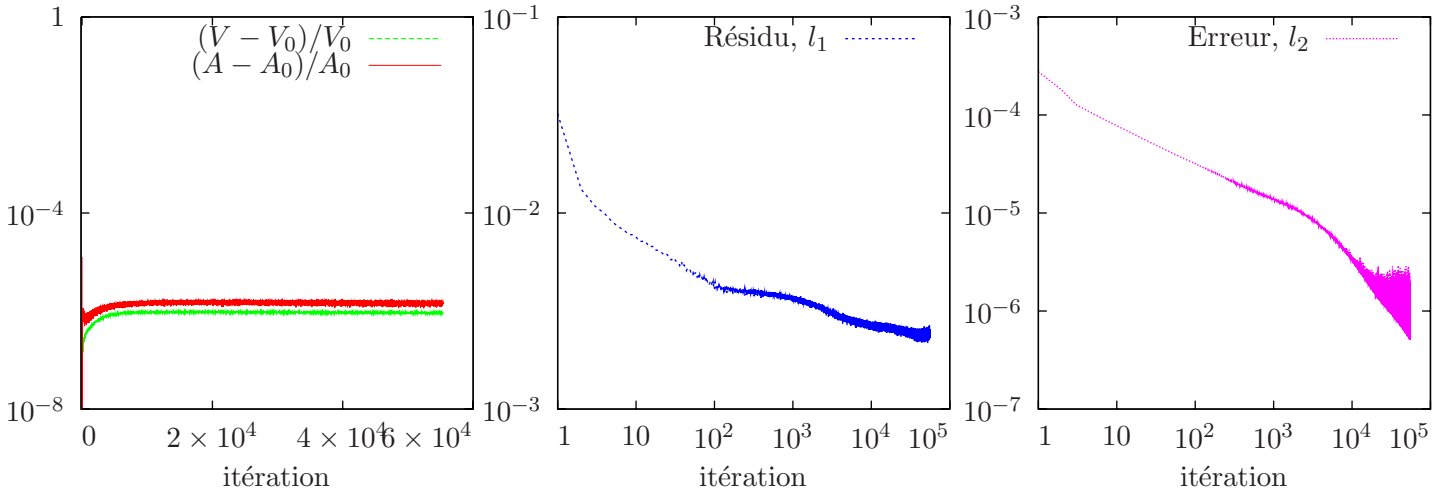

FIG. 7.15 – (a) : Évolution de l'aire relative (en valeur absolue) et du périmètre relatif (en valeur absolue), en échelle logarithmique en ordonnées. (b) : Évolution du résidu et de l'erreur, tracés en échelle `log-log`.

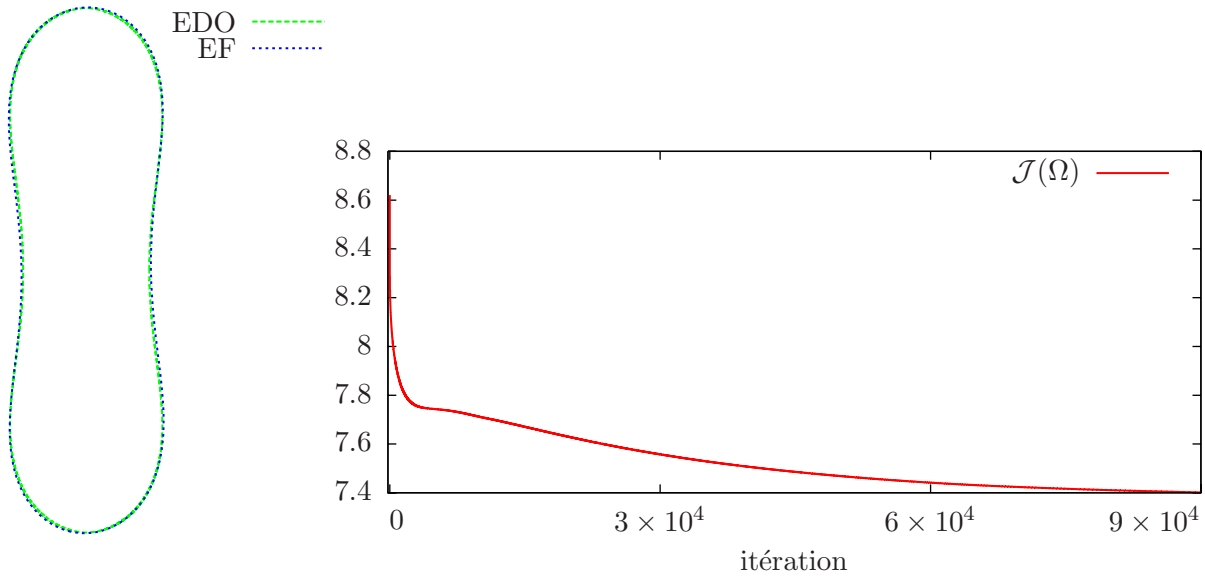

FIG. 7.16 – Vésicule à aire réduite $\gamma = 0.60$.

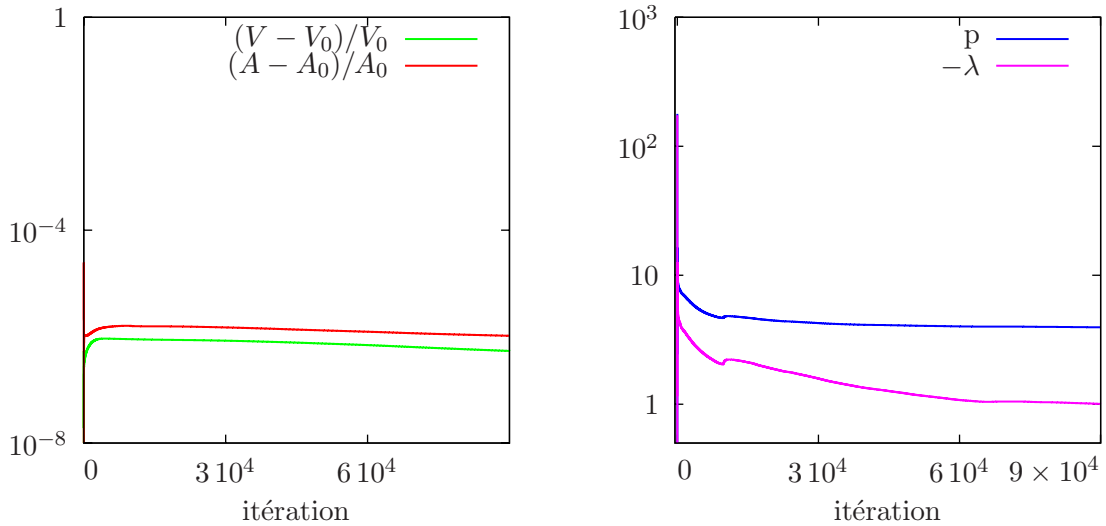

FIG. 7.17 – (a) : Erreur sur la préservation des contraintes (log en ordonnées). (b) : Évolution des multiplicateurs de Lagranges (log en ordonnées).

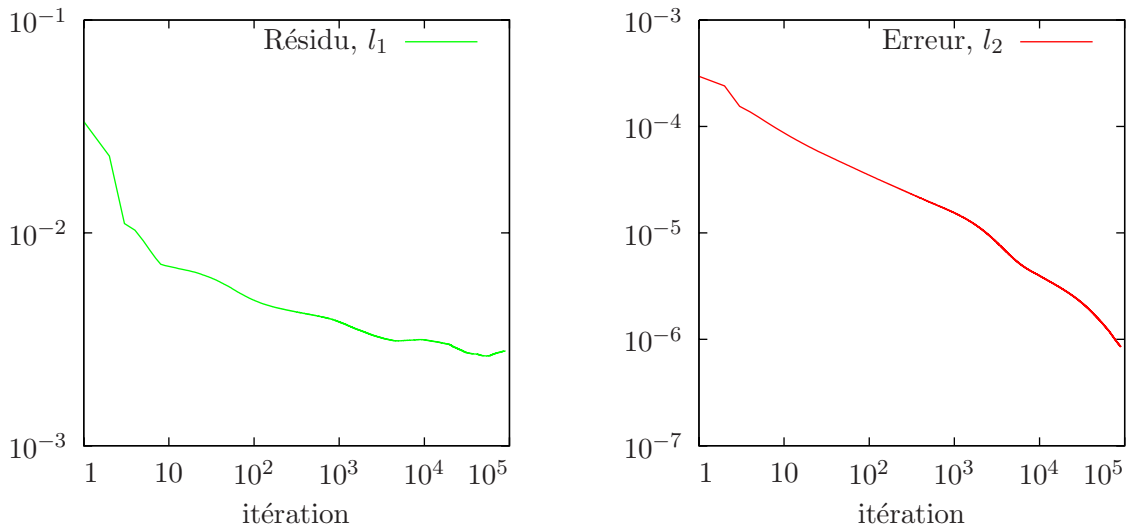

FIG. 7.18 – Évolution du résidu et de l'erreur en échelle logarithmique.

7.8.7 Vésicule avec $\gamma = 0.55$

On considère une vésicule ayant une aire réduite $\gamma = 0.55$. La solution correspondante par la résolution d'équations différentielles est obtenue pour $\lambda = -0.95$, $p = 3.3$ et $w_0' = 0.48$. Dans la figure 7.19(a), on vérifie que la solution obtenue par les éléments finis se superpose avec celle de l'EDO et on trace l'évolution de l'énergie de Canham-Helfrich au cours des itérations sur la figure 7.19(b). La convergence de l'erreur et du résidu sont tracées sur la figure 7.21 et l'erreur commise sur les contraintes ainsi que les multiplicateurs de Lagrange sont tracées sur la figure 7.20.

7.8.8 Vésicule avec $\gamma = 0.49$

Pour une vésicule ayant une aire réduite $\gamma = 0.49$, on superpose la solution obtenue par résolution d'équations différentielles pour $\lambda = 0$, $p = 3.3$ et $w_0' = 0.55$ et la solution obtenue par les éléments finis dans la figure 7.22(a). On vérifie la minimisation de l'énergie de Canham et Helfrich à la figure 7.22(b). La convergence de l'erreur et du résidu sont tracées dans la figure 7.23 et l'erreur commise sur les contraintes est tracées dans la figure 7.23.

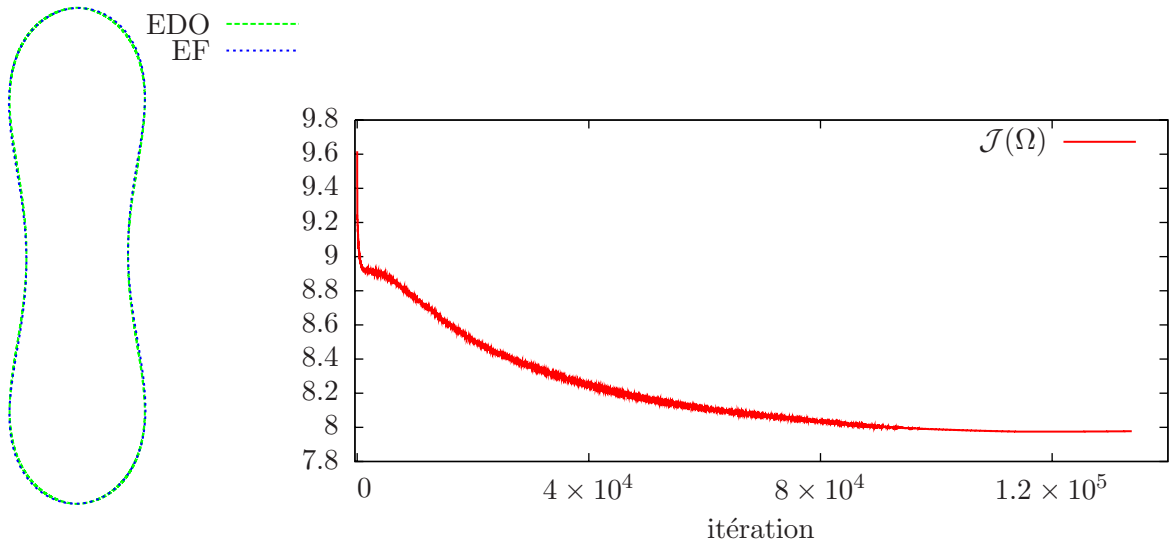

FIG. 7.19 – Vésicule à aire réduite $\gamma = 0.55$.

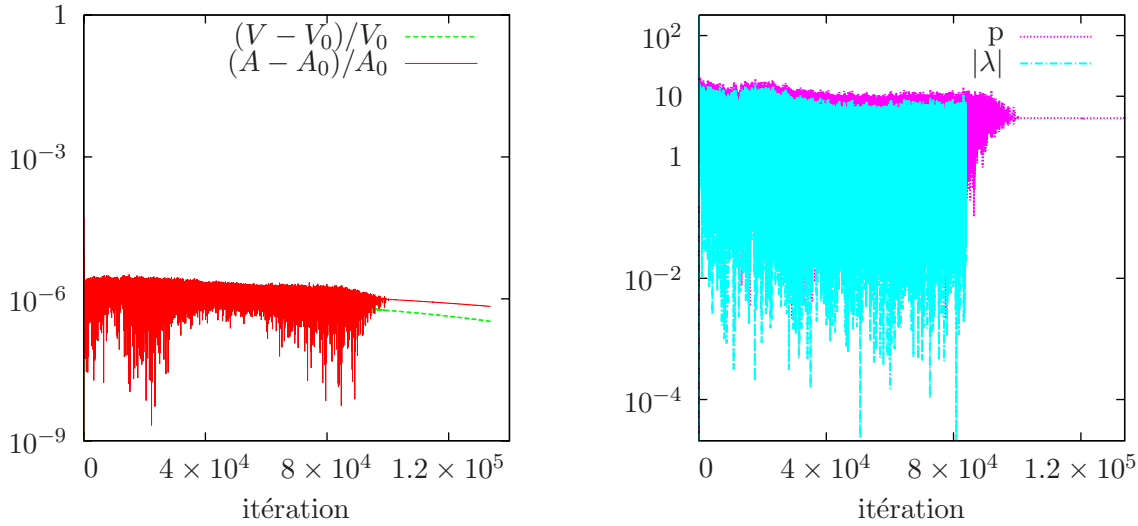

FIG. 7.20 – (a) : Erreur sur la préservation des contraintes (log en ordonnées). (b) : Évolution des multiplicateurs de Lagranges (log en ordonnées).

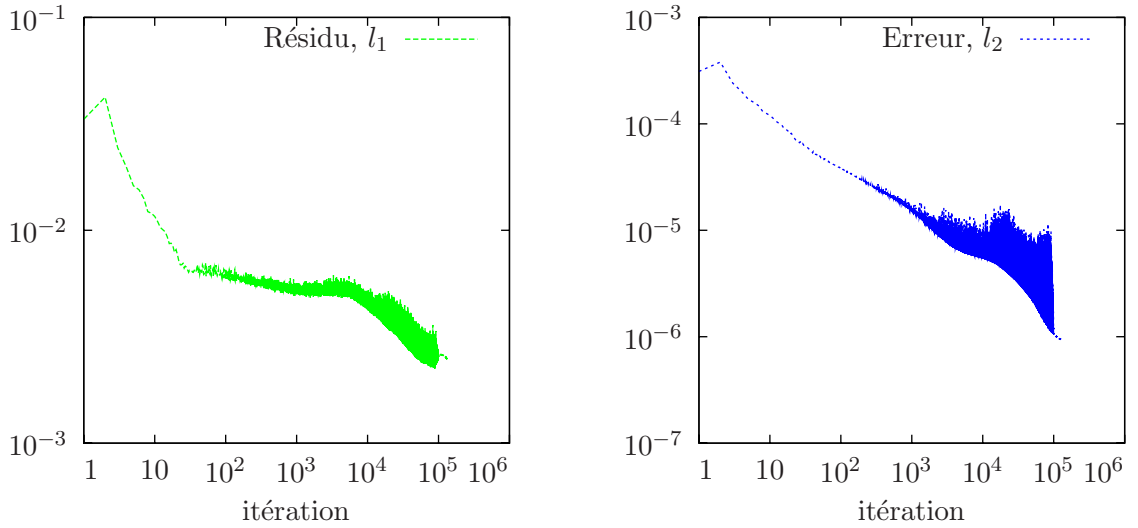

FIG. 7.21 – Évolution du résidu et de l'erreur en échelle logarithmique.

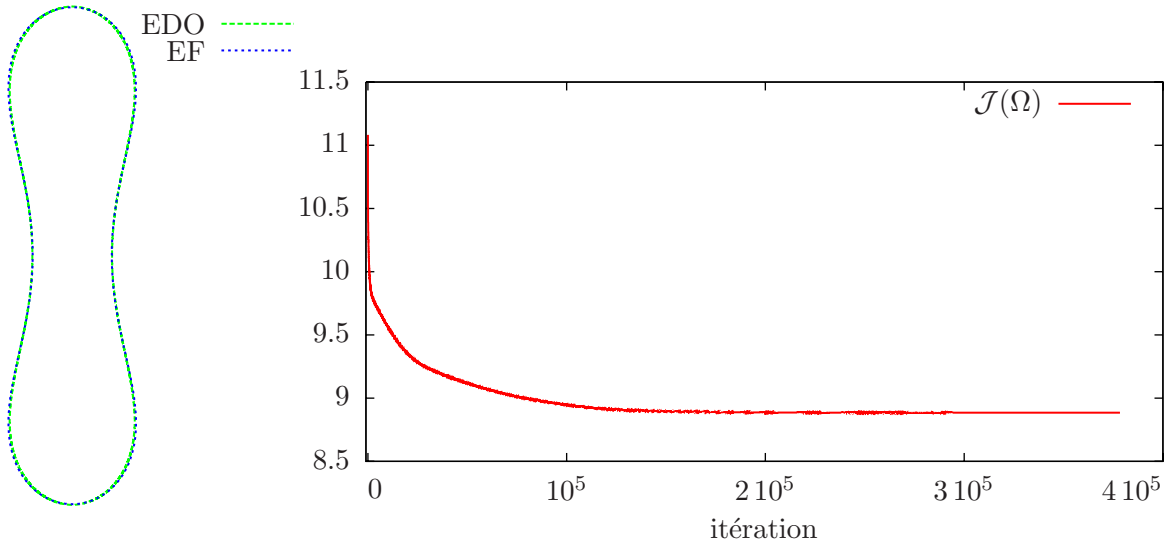

FIG. 7.22 – Tracé de la solution pour $\gamma = 0.49$: (a) : Comparaison par rapport à la solution analytique. (b) : Évolution de l'énergie de courbure de Canham et Helfrich.

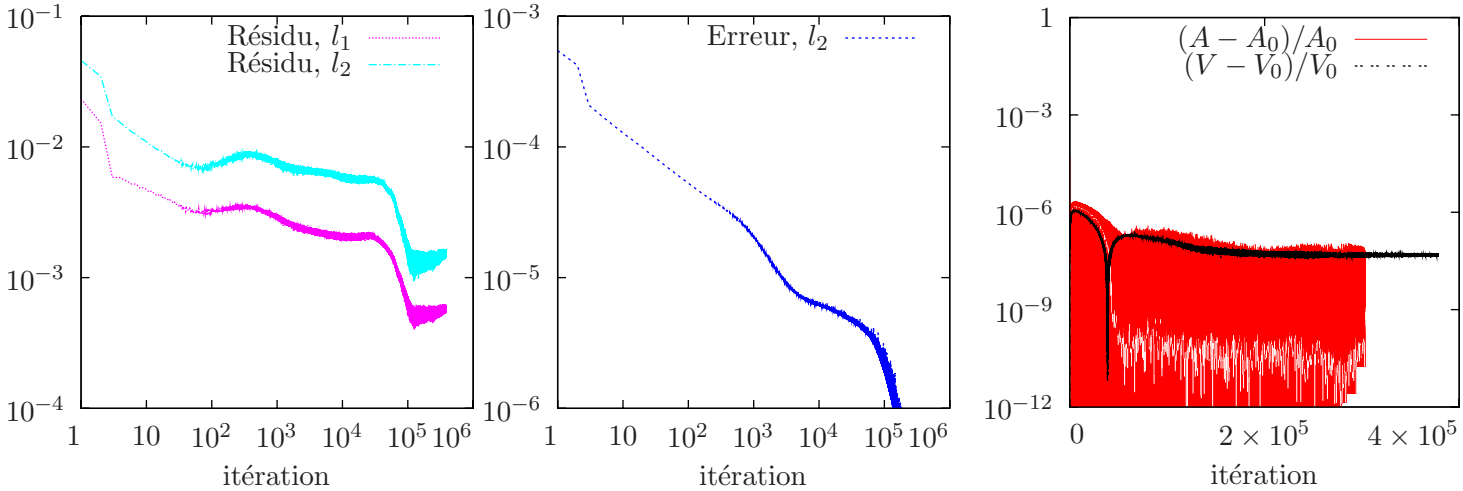

FIG. 7.23 – (a) : Le résidu en `log-log`. (b) : L'erreur en `log-log`. (c) : L'erreur sur le périmètre et l'aire, `log en ordonnées`.

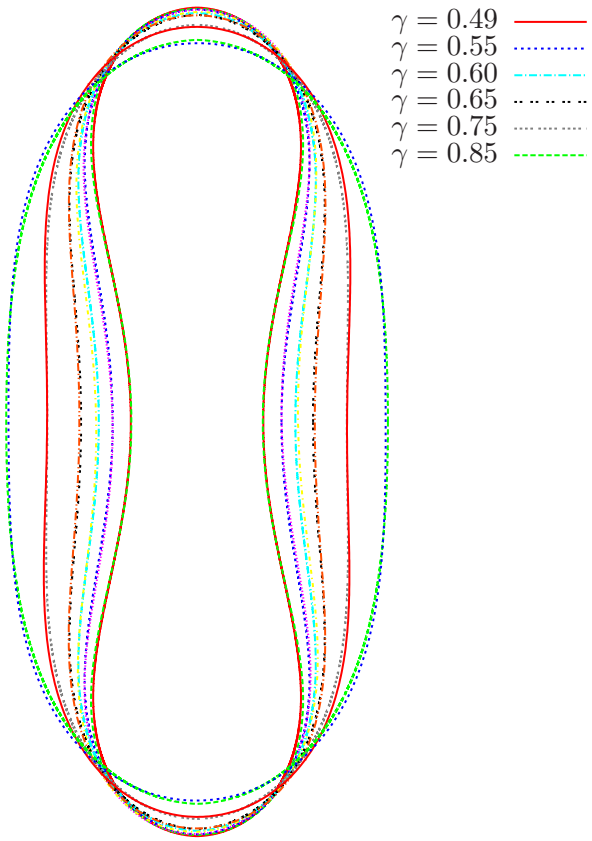

FIG. 7.24 – Récapitulatif des formes obtenues par la méthode des éléments finis et superposition avec les solutions `semi explicites` (représentation adimensionnée pour un périmètre $A_0 = 2\pi$ constante).

Figure de synthèse On trace les différentes formes dans la même figure (Fig 7.24).

7.9 Utilisation du lagrangien augmenté

7.9.1 Rappel de la méthode

On introduit deux constantes de pénalisation positives r_A et r_V. Le lagrangien associé au problème (7.1) est donné par (7.3) et on définit le lagrangien augmenté par :

$$\begin{aligned}
\mathscr{L}_r(\omega;\sigma,q) &= \mathscr{L}(\omega;\sigma,q) + \frac{r_A}{2}\left(\int_{\partial\omega} \mathrm{d}s - A_0\right)^2 + \frac{r_V}{2}\left(\int_{\omega} \mathrm{d}x - V_0\right)^2, \\
&= \mathscr{J}(\omega) + \sigma\left(\int_{\partial\omega} \mathrm{d}s - A_0\right) + q\left(\int_{\omega} \mathrm{d}x - V_0\right) \\
&\quad + \frac{r_A}{2}\left(\int_{\partial\omega} \mathrm{d}s - A_0\right)^2 + \frac{r_V}{2}\left(\int_{\omega} \mathrm{d}x - V_0\right)^2. \qquad (7.64)
\end{aligned}$$

Les derniers termes de la fonctionnelle $\mathscr{L}_r$ est le terme *augmenté* ou *pénaliseur* ; il permet en fait, de retrouver la solution exacte du problème, quand elle existe, sans faire tendre les coefficients r_A et r_V vers l'infini, contrairement aux méthodes de pénalisation où on doit tendre les constantes de pénalisation vers l'infini afin de vérifier les contraintes le plus possible. L'approche du lagrangien augmenté est détaillé dans [38] , [39] et [Fortin et Glowinski, 1982]. Il est démontré dans [Fortin et Glowinski, 1982] que les fonctionnelles $\mathscr{L}_r$ et $\mathscr{L}$ ont les mêmes points selles. Par conséquences, la solution $(\Omega; p, \lambda)$ est un point selle donné par :

$$(\Omega; \lambda, p) = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \sup_{\substack{\sigma\in\mathbb{R}\\ q\in\mathbb{R}}} \mathscr{L}(\omega; \sigma, q) = \underset{\omega \in \mathbb{R}^d}{\arg\inf} \sup_{\substack{\sigma\in\mathbb{R}\\ q\in\mathbb{R}}} \mathscr{L}_r(\omega; \sigma, q)\,.$$

Par des outils d'optimisation de forme, on a :

$$\frac{r_V}{2}\frac{\partial\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right)^2}{\partial\Omega}(\Omega, p)(\mathbf{u}) = r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right)\int_{\partial\Omega}\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s\,, \tag{7.65}$$

$$\frac{r_A}{2}\frac{\partial\left(\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s - A_0\right)^2}{\partial\Omega}(\Omega, \sigma)(\mathbf{u}) = r_A\left(\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s - A_0\right)\int_{\partial\Omega} H\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s. \tag{7.66}$$

Ainsi, la dérivation par rapport à la forme de l'équation (7.64) est donnée par :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathscr{L}_r}{\partial\Omega}(\Omega; \lambda, p).(\mathbf{u}) = \int_{\partial\Omega}\Bigg\{&p + r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right) + \lambda H + r_A\,H\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\\ &+\frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - \Delta_s H\Bigg\}\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}s\,.\end{aligned}$$

En supposant avoir la régularité suffisante, une direction de descente est donnée par :

$$\mathbf{u_r} = \left\{\Delta_s H - \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - p - r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right) - \lambda H - r_A\,H\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\right\}\mathbf{n}\,.$$

On déplace la forme par :

$$\Omega_{\mathrm{t}} = (\mathbf{I} + \mathrm{t}\mathbf{u_r})(\Omega)\,, \tag{7.67}$$

avec $\mathrm{t} > 0$ est un pas de descente infinétisémalement petit. Formellement, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_r(\Omega_{\mathrm{t}}; \lambda, p) = \mathscr{L}_r(\Omega; \lambda, p) - \mathrm{t}\int_{\partial\Omega}\Bigg\{&\Delta_s H - \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - p\\ &- r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right) - \lambda H - r_A\,H\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\Bigg\}^2\,\mathrm{d}s + \mathcal{O}(\mathrm{t}^2)\,,\end{aligned}$$

ceci assure la minimisation de la fonctionnelle objective et il s'agit donc de résoudre le problème de transport suivant :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \Bigg[\Delta_s H - \frac{1}{2}(H - H_0)[4K - H(H + H_0)] - p - \lambda H&\\ -r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right) - r_A\,H\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\Bigg]\,|\nabla\varphi| &= 0\,,\ \text{p.p. } (t, x) \in]0, +\infty[\times\Lambda,\\ \int_\Omega 1\,\mathrm{d}x &= V_0\,,\ \text{p.p. } t \in]0, +\infty[\,,\\ \int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{d}s &= A_0\,,\ \text{p.p. } t \in]0, +\infty[\,,\\ \varphi(t, x) &= \varphi_{\partial\Lambda}(x)\,,\ \text{p.p. } (t, x) \in]0, +\infty[\times\partial\Lambda,\\ \partial_\sigma\varphi(t, x) &= 0\,,\ \text{p.p. } (t, x) \in]0, +\infty[\times\partial\Lambda,\\ \varphi(0, x) &= \varphi_0(x)\,,\ \text{p.p. } x \in \Lambda\,.\end{aligned} \tag{7.68}$$

7.9.2 Calcul des multipliateurs de Lagrange optimaux

Il s'agit de trouver les multiplicateurs de Lagrange optimaux p_r^* et λ_r^* qui vérifient le problème (7.68). Ceci consiste à restituer p^* et λ^* par $p^* + r_V \left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right)$ et $\lambda^* + \left(\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}s - A_0\right)$ respectivement dans les expressions (7.26) et (7.25). Finalement, on obtient :

$$
\begin{aligned}
\lambda_r^* &= \frac{\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(-\int_{\partial\Omega}|\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]} \\
&- \frac{\int_{\partial\Omega} H\,ds\left(\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds}\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]} - r_A\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right), \\
p_r^* &= \frac{\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} - \lambda\int_{\partial\Omega} H\,ds}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds} \\
&- r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right) - r_A\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\frac{\int_{\partial\Omega} H\,ds}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds}.
\end{aligned}
$$

7.9.3 Contrôle *a posteriori* des multiplicateurs de Lagrange

On reprend le problème (7.68). Il sera restituer, de manière analogue aux sections précédentes, par :

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \Bigg[\Delta_s H + H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right] - \frac{1}{2}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right) - p_r - \lambda_r H \\
-r_V\left(\int_\Omega \mathrm{d}x - V_0\right) - r_A H\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\Bigg]|\nabla\varphi| &= 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda, \\
\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} &= \varepsilon_V \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[, \\
\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} &= \varepsilon_A \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[.
\end{aligned}
$$

Avec ε_A et ε_V dépendent du temps et il sont donnés à t^n par :

$$
\varepsilon_A = \frac{-\int_{\partial\Omega^n} 1\,\mathrm{ds} + A_0}{\Delta t} \quad \text{et} \quad \varepsilon_V = \frac{\int_{\Omega^n} 1\,\mathrm{dx} - V_0}{\Delta t}.
$$

On obtient les multiplicateur de Lagrange suivants :

$$\begin{aligned}
\lambda_r &= \frac{\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left(-\int_{\partial\Omega}|\nabla_s H|^2\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} H^2\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} H\,\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} - \varepsilon_A\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]} \\
&- \frac{\int_{\partial\Omega} H\,ds\left(\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} + \varepsilon_V\right)}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]} \\
&-r_A\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right), \qquad (7.69)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_r &= \frac{\int_{\partial\Omega} H\nabla.\left[\frac{\nabla_s|\nabla\varphi|}{|\nabla\varphi|}\right]\mathrm{ds} - \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega}\nabla.\left(H^2\mathbf{n}\right)\mathrm{ds} - \lambda\int_{\partial\Omega} H\,ds + \varepsilon_V}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds} \\
&- r_V\left(\int_{\Omega}\mathrm{d}x - V_0\right) - r_A\left(\int_{\partial\Omega}\mathrm{d}s - A_0\right)\frac{\int_{\partial\Omega} H\,ds}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds}. \qquad (7.70)
\end{aligned}$$

On a donc :

$$\lambda_r = \lambda_r^* + \delta\lambda_r^n, \qquad (7.71)$$

$$p_r = p_r^* + \delta p_r^n. \qquad (7.72)$$

Avec,

$$\delta\lambda_r^n = \frac{-\varepsilon_A\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} - \varepsilon_V\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}}{\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}, \qquad (7.73)$$

$$\delta p_r^n = \frac{\varepsilon_A\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} + \varepsilon_V\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds}}{\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\left[\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds}\int_{\partial\Omega} H^2\,\mathrm{ds} - \left(\int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}\right)^2\right]}. \qquad (7.74)$$

Faute des pertes numériques de surface et de volume, les contrôles *a posteriori* $\delta\lambda_r^n$ (7.73) et δp^n (7.74) s'annulent.

7.9.4 Algorithme avec le lagrangien augmenté

Algorithme :

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; p^0, \lambda^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}^2$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
$(p^n, \lambda^n) \in \mathbb{R}^2$ connus,

1. On calcule Ω^{n+1} :

   initialisation
   $k = 0$, $\Omega^0 = \Omega^n$ et $r^0 = +\infty$;

tant que $\{r^k > \varepsilon\}$ **faire**

(a) Résoudre le système (7.68) ;

(b) Calculer r^{k+1} ;

(c) k = k+1 ;

fin de la boucle

$k_{max} = k$;
$\Omega^{n+1} = \Omega^{k_{max}}$;
$\mathscr{E}_r^*(p, \lambda) = -\mathscr{L}_r(\Omega^{n+1}; p, \lambda)$

2. On calcule p_r^{n+1} (7.70) et λ_r^{n+1} (7.69) :
$(p_r^{n+1}, \lambda_r^{n+1}) = (p_r^* + \delta p_r^n, \lambda_r^* + \delta\lambda_r^n)$

fin de l'algorithme.

7.9.5 Validations numériques de l'algorithme du lagrangien augmenté

On prend le cas d'une vésicule ayant une aire réduite $\gamma = 0.75$ pour tester l'algorithme du lagrangien augmenté.

Test 1

On choisit les paramètres du lagrangien augmenté suivants $r_A = r_V = 10^8$ et $k_{max} = 1$. Dans la figure 7.25(a), on vérifie que la solution obtenue par éléments finis avec le lagrangien augmenté se superpose avec la solution de l'EDO et celle obtenue sans le lagrangien augmenté. L'évolution de l'énergie de Helfrich au cours des itérations est tracée à la figure 7.25(b). La convergence de l'erreur et du résidu sont tracées à la figure 7.27. À la figure 7.26, on trace l'erreur commise sur les contraintes ainsi que l'évolution des multiplicateurs de Lagrange.

Test 2

On choisit de faire deux sous itérations lors de l'étape du lagrangien augmenté $r_A = r_V = 10^5$ et $k_{max} = 2$. Dans la figure 7.28(a), on vérifie que la solution obtenue par les éléments finis avec le lagrangien augmenté se superpose avec celle de l'EDO et celle obtenue sans le lagrangien augmenté. L'évolution de l'énergie de Helfrich au cours des itérations est tracée sur la figure 7.28(b). La convergence de l'erreur est tracées sur la figure 7.29(c).

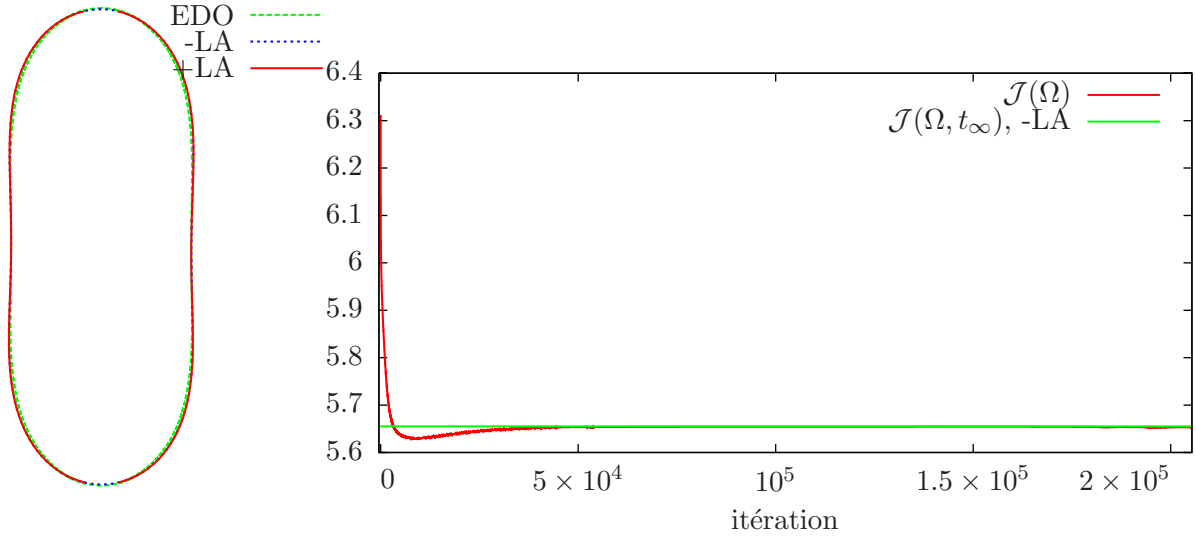

FIG. 7.25 – Tracé de la solution `+LA` pour $r_A = r_V = 10^8$ et $k_{max} = 1$: Comparaison par rapport à la solution `semi-analytique (EDO)` et la solution calculée sans lagrangien augmenté `-LA`.

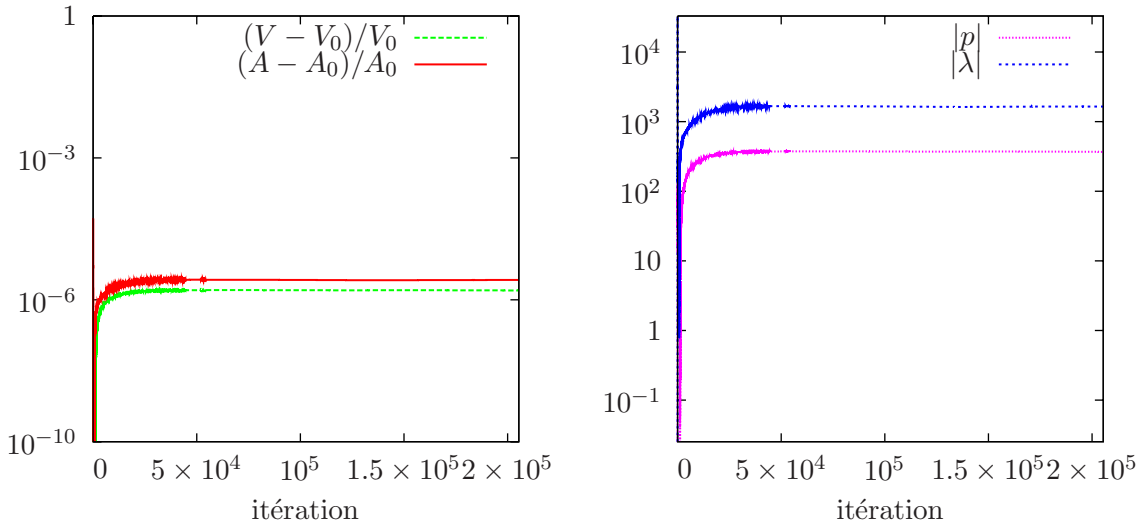

FIG. 7.26 – (a) : Évolution de l'aire relative (en valeur absolue) et du périmètre relatif (en valeur absolue), en échelle logarithmique en ordonnées. (b) : Évolution de p et λ.

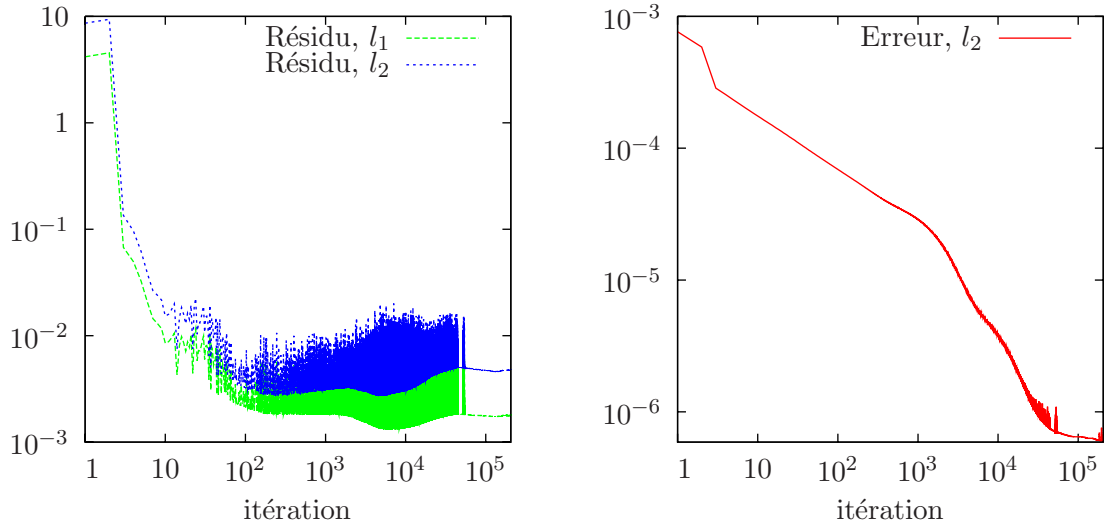

FIG. 7.27 – Évolution du résidu et de l'erreur relative.

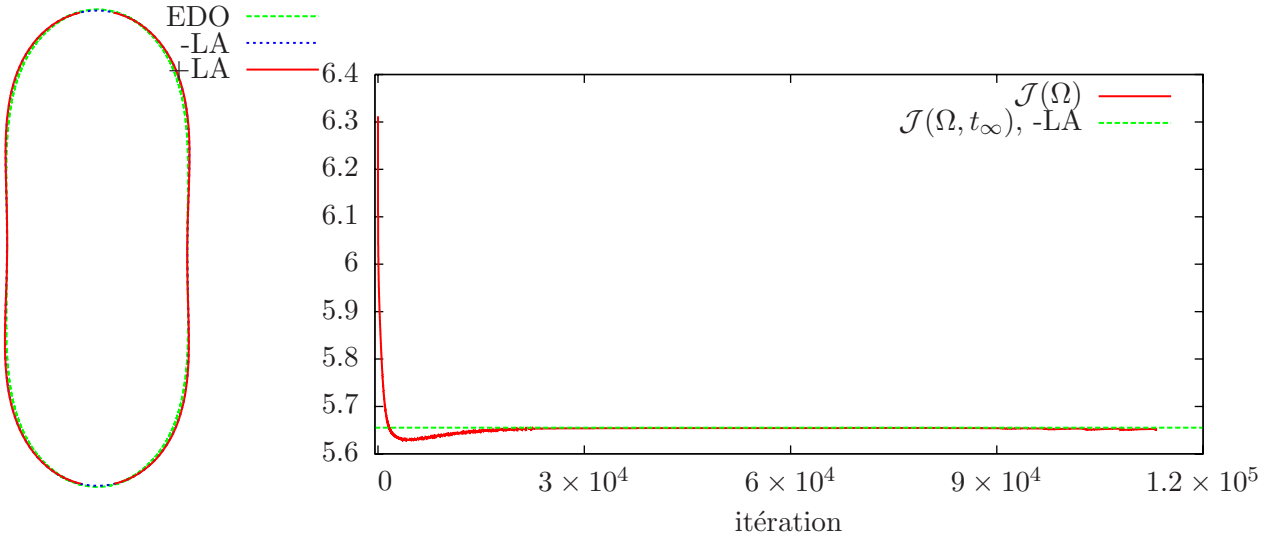

FIG. 7.28 – Tracé de la solution `+LA` pour $r_A = r_V = 10^5$ et $k_{max} = 2$: (a) : Comparaison par rapport à la solution `semi-analytique (EDO)` et la solution calculée sans lagrangien augmenté `-LA`. (b) : Évolution de l'énergie de courbure de Helfrich en fonction des itérations.

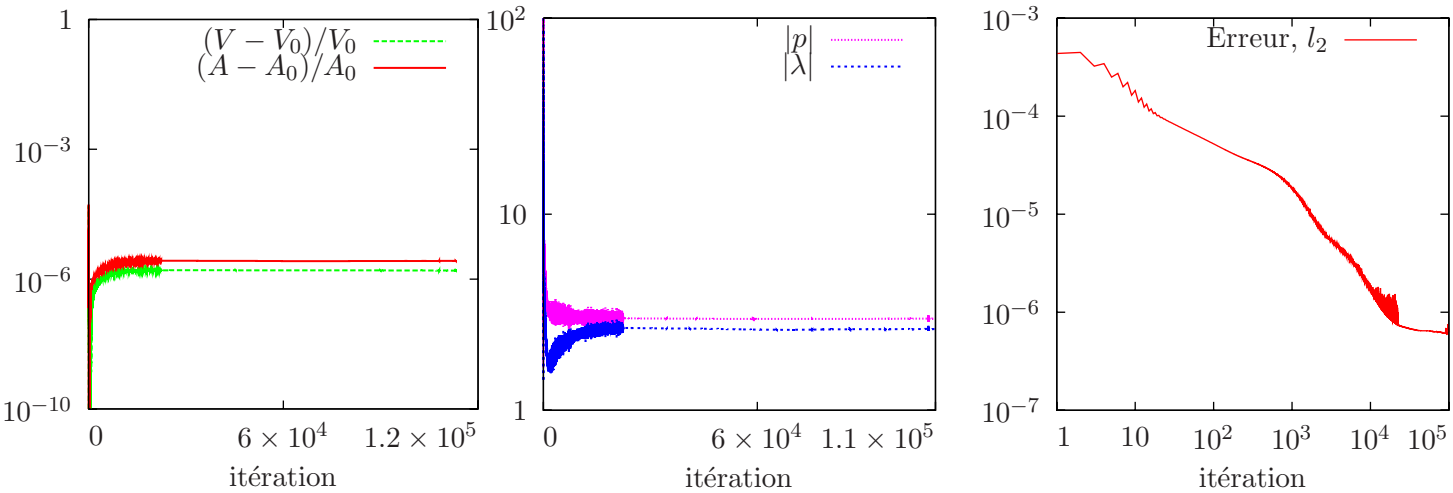

FIG. 7.29 – (a) : Évolution du périmètre relatif (en valeur absolue) et de l'aire relative (en valeur absolue), échelle `logarithmique` en ordonnées. (b) : Évolution de p et λ. (c) : Évolution de l'erreur relative en norme l_2, échelle `log-log`.

Chapitre 8

Dynamique des vésicules sous cisaillement

Sommaire

8.1 Dérivation du modèle **157**
8.2 Approximation en temps **163**
8.3 Formulation faible **164**
8.4 Approximation en espace **164**
8.5 Problème d'advection **165**
8.6 Simulations numériques **168**

L'objectif de ce chapitre est de présenter un algorithme permettant de décrire la dynamique des vésicules dans le cadre de la méthode des éléments finis. On s'intéresse à un écoulement de cisaillement et on développe une formulation variationnelle en utilisant une description eulérienne du problème. Les solutions numériques obtenues sont comparées à certains résultats obtenues dans la littérature.

Introduction et contexte

Dans les chapitres précédents, nous nous sommes intéressés à l'étude du comportement des vésicules biologiques en régime statique, nous avons focalisé notre intérêt sur les études numériques dans le cadre des équations différentielles et dans le cadre de la méthode des éléments finis utilisés avec une approche des lignes de niveaux.
Dans ce chapitre, une attention particulière est portée à l'étude de la dynamique des vésicules en présence d'un fluide : ceci est plus proche de la physique et beaucoup plus riche. Par ailleurs, nous allons restreindre notre étude à la dynamique des vésicules sous cisaillement, dans une modélisation purement bidimensionnelle qui nous donnera une plus grande aisance en terme des coûts de calculs, sans restreindre la richesse ni la pertinence du système.

Ce dernier chapitre comporte deux partie. Une première concerne le formalisme mathématique du problème ainsi que le schema numérique utilisé et les multiplicateurs de Lagrange à posteriori nécessaires pour s'assurer de la préservation des contraintes d'incompressibilité du fluide et d'inextensibilité de la membrane de la vésicule lors de l'étape du transport. Ensuite, la deuxième partie est consacrée à quelques applications numériques : on met en évidence les modes de basculement et de chenille de char pour les vésicules en cisaillement et on étudie l'effet du confinement sur la dynamique dans un souci de se rapprocher des systèmes expérimentaux réels.

Dynamique sous cisaillement constant

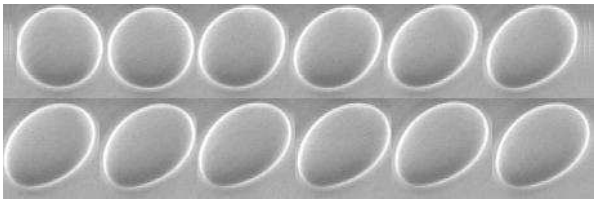

Fig. 8.1 – Figure expérimentale d'une vésicule sous cisaillement en mouvement de chenille de char.

Une des contraintes hydrodynamiques les plus simples est l'application d'un cisaillement constant au liquide externe à la vésicule. Un tel écoulement est caractérisé par une fréquence de cisaillement $\dot{\gamma}$ qui servira à décrire une échelle de temps caractéristique de nos simulations. Quant au champ de vitesse en un point $x \in \Lambda$, il s'écrit :

$$\mathbf{u}(x) = \dot{\gamma}\mathbf{M}x = \dot{\gamma}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} x = \frac{\dot{\gamma}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} x + \frac{\dot{\gamma}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} x\,.$$

La matrice de cisaillement $\dot{\gamma}\mathbf{M}$ se décompose en deux parties et elle apparait comme la somme d'une composante élongationnelle dont l'axe principal est orienté de $\pi/4$ par rapport à l'ori-

zontale et d'une composante rotationnelle deux fois plus faible que la fréquence de cisaillement. Soumise à un cisaillement simple, différents comportements dynamiques de la vésicule isolée ont été observés et ils sont pilotés par deux paramètres : le dégonflement et le constraste de viscosité entre les solutions internes et externes Υ, ceci en accord avec les prédictions théoriques.
Toutefois, si le taux de cisaillement n'est pas trop élevé, l'élasticité de courbure est suffisante pour maintenir la vésicule dans une forme constante, quasiment ellipsoidale. On note par θ l'angle d'inclinaison de la vésicule par rapport à l'axe des abscisses et on distingue entre deux régimes dynamiques :

Le mouvement de chenille de char (`tank-treading`) : À faible contraste de viscosité ou à faible dégonflement (par rapport à une sphère), il est peu coûteux de cisailler le fluide interne : la vésicule adopte alors une orientation stationnaire θ par rapport à l'écoulement, et sa membrane tourne sans modifier sa forme générale, tout en entrainant le fluide interne. On observe sur la figure 8.1, réalisée au Laboratoire Interdisciplinaire de Physique, une succession d'images présentant l'évolution de la vésicule depuis l'arrêt (1ere image) jusqu'à l'établissement de l'état final de chenille de char (la vésicule garde une orientation fixe au cours du temps, tandis que la membrane tourne comme une chenille de char).

Le mouvement de bascule (`tumbling`) : Si la vésicule devient plus dégonflée et plus visqueuse, le mouvement de tank-treading devient trop coûteux, et la vésicule se comporte alors comme un objet solide, en tournant sur elle même : voir la figure 8.2 réalisée par Mader et al. [64].

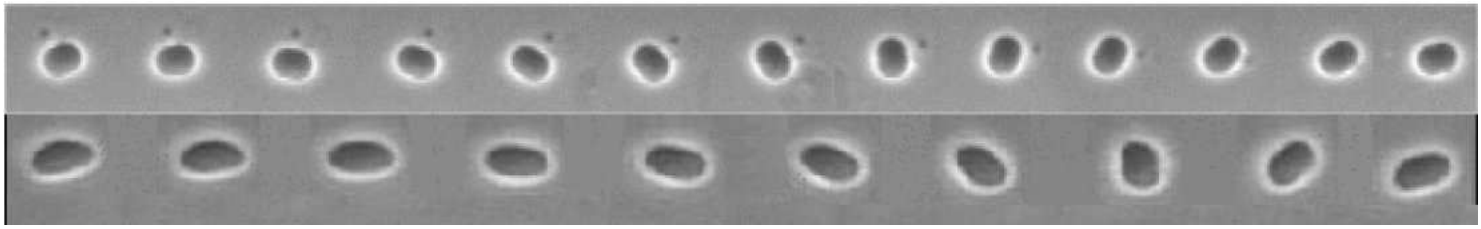

FIG. 8.2 – Figure expérimentale d'une vésicule sous cisaillement en mouvement de bascule. Haut : vésicule avec un volume réduit égal à 0.993 et un rapport de viscosité égal à 22.5. Bas : volume réduit égal à 0.9 et un rapport de viscosité égal à 8.

8.1 Dérivation du modèle

On considère une vésicule modélisée par une membrane Γ, l'intérieur de la membrane est noté par Ω et il est constitué par un fluide newtonien de viscosité μ_1 et de masse volumique ρ_1. La vésicule est plongée dans un fluide newtonien de viscosité μ_2 et de masse volumique ρ_2. Le domaine englobant la vésicule et le fluide l'entourant est noté Λ. Toutefois, on suppose que les fluides à l'intérieur et à l'extérieur de la vésicule sont incompressibles.

8.1.1 Inextensibilité de la membrane

La loi de conservation de la matière sur une géométrie courbe (la membrane) bordée par deux domaines fluides est moins classique que celle au sein d'un volume fluide, aussi, il nous a semblé utile de présenter succinctement sa dérivation. En effet, les membranes biologiques sont caractérisées par des membranes inextensibles, ce qui se traduit par une conservation de la surface

dans le cas tridimensionnel et du périmètre dans le cas bidimensionnel.
Soit $\mathcal{O}_0$ un ouvert de Λ, il est transporté par le fluide à une vitesse $\mathbf{u}$ et le nouveau domaine est noté $\mathcal{O}(t)$. On note $\mathcal{O}_1(t) = \mathcal{O}(t) \cap \Omega(t)$, $\mathcal{O}_2(t) = \mathcal{O}(t) \backslash \mathcal{O}_1(t)$ et $\Gamma_{12}(t)$ l'interface entre $\mathcal{O}_1(t)$ et $\mathcal{O}_2(t)$. On note $\rho_m(t)$ la masse linéique de la membrane $\Gamma(t)$ et $\rho(t) = \rho_1 \chi_{\Omega(t)} + \rho_2 \chi_{\Lambda \backslash \Omega(t)}$ où χ est la fonction caractéristique. Par conséquent, la densité totale est $\rho(t) + \rho_m(t)\delta_\Gamma$ et la conservation de masse au sein de $\mathcal{O}(t)$ se traduit par :

$$\frac{d}{dt} \left\langle \rho(t) + \rho_m(t)\delta_\Gamma, \chi_{\mathcal{O}(t)} \right\rangle = 0 \,,$$

avec $<>$ le crochet de dualité, d'où :

$$\frac{d}{dt} \left(|\mathcal{O}_1(t)| + |\mathcal{O}_2(t)| \right) + \frac{d}{dt} \int_{\Gamma_{12}(t)} \rho_m(t) d\sigma = 0 \,,$$

où $|.|$ désigne la mesure d'un ensemble. Le premier terme s'annule en considérant un fluide incompressible. En appliquant la formule de Reynolds, on obtient :

$$\int_{\Gamma_{12}(t)} \left\{ \frac{D\rho_m}{Dt} + \rho_m \nabla_s . \mathbf{u} \right\} d\sigma = 0 \,.$$

Le choix de $\mathcal{O}(t)$ est arbitraire donc

$$\frac{D\rho_m}{Dt} + \rho_m \nabla_s . \mathbf{u} = 0 \quad \text{p.p. sur } \Gamma(t) \,.$$

En supposant que ρ_m est constante au cours du temps, on obtient :

$$\nabla_s . \mathbf{u} = 0 \quad , \quad \text{p.p. sur } \Gamma(t) \,. \tag{8.1}$$

On associe un multiplicateur de Lagrange λ à cette contrainte, il s'interprète comme une pression s'exerçant tout au long de la membrane et elle décrit sa rigidité.

8.1.2 Position du problème

Nous supposerons ici que le domaine englobant $\Lambda =]-L, L[^2$ est un carré de longueur de côté $2L$. Le fluide est caractérisé par une vitesse $\mathbf{u}$. On désigne par ρ sa densité et elle prend la valeur constante ρ_1 dans Ω (i.e. fluide interne) et ρ_2 dans $\Lambda \backslash \Omega$. De même, μ est la viscosité du fluide, elle est égale à la constante μ_1 dans Ω et μ_2 dans $\Lambda \backslash \Omega$. On note le tenseur symetrique des déformations par :

$$\mathcal{D}(\mathbf{u}) = \frac{\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t}{2} \,.$$

La loi constitutive dans chacun des fluides (interne et externe) est donnée par le tenseur des contraintes de Cauchy :

$$\sigma = 2\mu \mathcal{D}\left(\mathbf{u}\right) - p \, \mathrm{I} \,,$$

où I représente le tenseur identité. La dérivée totale de $\mathbf{u}$ est donnée par :

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} \,.$$

On définit l'espace $\mathcal{C}$ pour les membranes Γ :

$$\mathcal{C} = \left\{ \Gamma \text{ fermée orientable de } \mathbb{R}^d : \int_\Gamma H^2 ds < \infty, \text{ où } H = \nabla . \mathbf{n} \text{ et } \mathbf{n} \text{ est le normale sortante unitaire à } \Gamma \right\} .$$

Il est possible d'écrire l'ensemble des équations de l'hydrodynamique couplées à la présence de la membrane sous la forme lagrangienne. Soit $V \in \mathbb{R}$ la vitesse du cisaillement au bord du domaine et on introduit l'espace suivant :

$$\mathbb{V}(V) = \left\{ \mathbf{u} \in H^1(\Lambda)^d \,;\, \mathbf{u}(x, y = L) = V \text{ et } \mathbf{u}(x, y = -L) = -V,\ -L < x < L \right\}.$$

On cherche un champ de vitesse $\mathbf{u} \in C^1\left(]0, T[, L^2(\Lambda)^d\right) \cap L^2\left(]0, T[, \mathbb{V}(V)\right)$. Soit $\omega \in \Lambda$ tel que $\partial\omega \in \mathcal{C}$, on définit la fonctionnelle d'énergie $\mathscr{J}$: somme de la dissipation visqueuse, l'énergie cinétique et l'énergie de courbure de Canham et Helfrich :

$$\mathscr{J}(\mathbf{u}) = \frac{d}{dt}\int_\Lambda \rho\|\mathbf{u}\|^2 dx + \int_\Lambda \mu\|\mathcal{D}(\mathbf{u})\|^2 dx + \frac{\kappa}{2}\int_{\partial\omega} (H - H_0)^2 \,\mathrm{d}s\,.$$

La dépendance de l'énergie de Helfrich par rapport à la vitesse $\mathbf{u}$ est implicite, elle se traduit à travers l'effet de la la force de courbure dérivée dans le papier [57] suite à l'advection de Γ par le champ de vitesse du fluide $\mathbf{u}$. La force associée à l'énergie de Helfrich est donnée dans la direction normale sortante à Γ par :

$$\mathbf{F_H} = \frac{\kappa}{2}\left(2\,\Delta_s H + (H - H_0)[H(H + H_0) - 4K]\right)\mathbf{n}\,. \tag{8.2}$$

On note que dans le cas bidimensionnel et pour $H_0 = 0$, la force s'écrit :

$$\mathbf{F_H} = \frac{\kappa}{2}\left(2\,\Delta_s H + H^3\right)\mathbf{n}\,. \tag{8.3}$$

Il s'agit de résoudre un problème $\mathcal{P}$ de minimisation sous contraintes. En effet, on minimise l'énergie $\mathscr{J}$ sous les contraintes de l'incompressibilité du fluide et de l'inextensibilité de la menbrane :

$$\mathcal{P} : \mathbf{u} = \underset{\mathbf{v} \in \mathbb{U}}{\arg\inf}\ \mathscr{J}(\mathbf{v})\,, \tag{8.4}$$

avec,

$$\mathbb{U} = \left\{ \mathbf{v} \in H_0^1(\Lambda)\,;\, \nabla.\mathbf{v} = 0 \text{ dans } \Lambda; \nabla_s.\mathbf{v} = 0 \text{ sur } \Gamma \right\}.$$

Soient $(\mathbf{u}; p, \lambda) \in C^1\left(]0, T[, L^2(\Lambda)^d\right) \cap L^2\left(]0, T[, \mathbb{V}(V)\right) \times L^2\left(]0, T[, L_0^2(\Omega)\right) \times L^2\left(]0, T[, H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)\right)$, On introduit le lagrangien $\mathscr{L}$ donné par :

$$\mathscr{L}(\mathbf{u}; p, \lambda) = \mathscr{J}(\mathbf{u}) - \int_\Omega p\,\nabla.\mathbf{v}\,\mathrm{d}x - \int_\Gamma \lambda\,\nabla_s.\mathbf{v}\,\mathrm{d}s\,. \tag{8.5}$$

On transforme le problème $\mathcal{P}$ de minimisation sous contraintes à un problème $\mathcal{Q}$ de type point selle et on résoud :

$$\mathcal{Q} : (\mathbf{u}, p, \lambda) = \underset{\mathbf{v} \in H_0^1(\Omega)}{\arg\inf}\ \sup_{\substack{q \in L_0^2(\Omega) \\ \nu \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)}} \mathscr{L}(\mathbf{v}; q, \nu)\,. \tag{8.6}$$

Caractérisation du point selle $(\mathbf{u}, p, \lambda)$:

Le point selle $(\mathbf{u}; p, \lambda)$ vérifie le système suivant :

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{v}}\mathscr{L}(\mathbf{u}, p, \lambda)(\mathbf{v}) = 0, & \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}(0)\,, \\ \partial_q\mathscr{L}(\mathbf{u}, p, \lambda)(q) = 0, & \forall q \in L^2_0(\Lambda)\,, \\ \partial_\nu\mathscr{L}(\mathbf{u}, p, \lambda)(\nu) = 0, & \forall \nu \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)\,. \end{cases} \tag{8.7}$$

Étant donné la force de courbure donnée par la formule (8.2) et en supposant que la courbe Γ est assez régulière, le système (8.7) implique :

Trouver $(\mathbf{u}; p, \lambda) \in C^1\left(]0, T[, L^2(\Lambda)^d\right) \cap L^2\left(]0, T[, \mathbb{V}(V)\right) \times L^2\left(]0, T[, L^2_0(\Omega)\right) \times L^2\left(]0, T[, H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)\right)$ tels que :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \rho\, \mathbf{u}.\mathbf{v}\, \mathrm{d}x + \int_\Lambda 2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u}) : \mathcal{D}(\mathbf{v})\, \mathrm{d}x - \int_\Lambda p\, \nabla.\mathbf{v}\, \mathrm{d}x - \int_\Gamma \lambda\, \nabla_s.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s = \int_\Gamma \mathbf{F_H}.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s\ , \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}(0)\,,$$

$$\int_\Lambda q\, \nabla.\mathbf{u}\, \mathrm{d}x = 0\ , \forall q \in L^2(\Lambda)\,, \tag{8.8}$$

$$\int_\Gamma \nu\, \nabla_{\mathrm{S}}.\mathbf{u}\, \mathrm{d}s = 0\ , \forall \nu \in H^{1/2}(\Gamma)\,.$$

Formulation forte du problème

Pour traiter le terme de tension de surface $\int_\Gamma \lambda\, \nabla_s.\mathbf{u}\, \mathrm{d}s$, on utilise la formule de Green surfacique. Étant donné une fonction scalaire f et un champ vectoriel $\mathbf{u}$ définis sur Γ, on note $d\sigma$ une mesure sur le bord de Γ et ν la normale à $\partial\Gamma$. On a :

$$\int_\Gamma \nabla_s f.\mathbf{u} d\sigma + \int_\Gamma f \nabla_s.\mathbf{u} d\sigma - \int_\Gamma f H \mathbf{u}.\mathbf{n} d\sigma = \int_{\partial\Gamma} f \mathbf{u}.\nu d\sigma\,. \tag{8.9}$$

Dans la suite, on suppose que la surface Γ est fermée. On écrit le système (8.8) indépendamment dans Ω et dans $\Lambda - \Omega$, on applique la formule de Green et on somme les deux équations trouvées. Ceci permet de mettre en évidence le terme de saut des contraintes normales à la traversée de Γ et on a :

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \rho\, \mathbf{u}.\mathbf{v}\, \mathrm{d}x - \int_\Lambda \nabla.(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u})).\mathbf{v}\, \mathrm{d}x + \int_\Gamma [2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u}).\mathbf{n}].\mathbf{v}\, \mathrm{d}s + \int_\Lambda \nabla p.\mathbf{v}\, \mathrm{d}x - \int_\Gamma [p\mathbf{n}].\mathbf{v}\, \mathrm{d}s$$

$$+ \int_\Gamma \nabla_s\lambda.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s - \int_\Gamma \lambda H \mathbf{n}.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s = \int_\Gamma \mathbf{F_H}.\mathbf{v}\, \mathrm{d}s\ , \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}(0)\,,$$

$$\int_\Lambda q\, \nabla.\mathbf{u}\, \mathrm{d}x = 0\ , \forall q \in L^2(\Lambda)\,, \tag{8.10}$$

$$\int_\Gamma \nu\, \nabla_{\mathrm{S}}.\mathbf{u}\, \mathrm{d}s = 0\ , \forall \nu \in H^{1/2}(\Gamma)\,.$$

On obtient au sens des distributions :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho\,\mathbf{u}}{dt} - \nabla.(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u})) + \nabla p &= 0, && \text{dans } \Lambda\times]0,T[\,, \\ [(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}).\mathbf{n}] &= \mathbf{F_H} - \nabla_s\lambda + H\lambda\mathbf{n}, && \text{sur } \Gamma\times]0,T[\,, \\ \nabla.\mathbf{u} &= 0, && \text{dans } \Lambda\times]0,T[\,, \\ \nabla_s.\mathbf{u} &= 0, && \text{sur } \Gamma\times]0,T[\,. \end{aligned} \tag{8.11}$$

Le terme du saut des contraintes normales met en évidence les forces membranaires. En effet, le premier terme normal est directement lié à l'énergie de courbure de Canham et Helfrich. Cette énergie étant une quantité purement géométrique et elle ne peut donner lieu à une force tangentielle, cet aspect est tout à fait normal dans la mesure où tout déplacement tangentiel des points sur une surface ne fait que modifier leurs positions sans affecter la forme de la surface et par la suite son énergie de courbure.
Les deux autres termes fond intervenir le multiplicateur de Lagrange surfacique λ. Le terme $\nabla_s\lambda$ est tangentiel et il traduit un effet connu chez les physiciens sous le nom de `Marangoni` associé à la variation de ce paramètre sur la surface Γ. Néanmoins, le dernier terme est normal et il est analogue aux forces de capillarités engendrées par la tension de surface lors de la modélisation de la dynamique des gouttes.

8.1.3 Système complet d'équations en formulation *fonctions de niveau*

En ajoutant le terme non linéaire de Navier-Stokes ainsi que le problème d'advection qui décrit la dynamique de Γ dans le contexte de la méthode des fonctions de niveau, on obtient le système suivant :

Étant donné $\mathbf{u_0} \in \mathbb{V}(V)$ et φ_0,trouver $\mathbf{u}$, p et λ tels que :

$$\begin{aligned} \frac{D\,\rho\mathbf{u}}{Dt} - \nabla.(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u})) + \nabla p &= 0, && \text{pp dans } \Lambda\times]0,T[, \\ \nabla.\mathbf{u} &= 0, && \text{pp dans } \Lambda\times]0,T[, \\ \nabla_s.\mathbf{u} &= 0, && \text{pp sur } \Gamma\times]0,T[, \\ [\mathbf{u}.\mathbf{n}] &= 0, && \text{pp sur } \Gamma\times]0,T[, \\ [(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}).\mathbf{n}] &= \mathbf{F_H} - \nabla_s\lambda + H\lambda\mathbf{n}, && \text{pp sur } \partial\Lambda\times]0,T[, \\ \tfrac{D\varphi}{Dt} = \tfrac{\partial\varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\varphi &= 0, && \text{dans } \Lambda\times]0,T[, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u_0}, && \text{dans } \Lambda\times\{0\}\,, \\ \varphi &= \varphi_0, && \text{dans } \Lambda\times\{0\}\,. \end{aligned} \tag{8.12}$$

8.1.4 Problème sans dimension

Dans ce paragraphe, on procède à une adimensionalisation des équations (8.12). Elle permet de faire ressortir des paramètres adimensionnés qui contrôlent le comportement des solutions pour des paramètres physiques très différents. On introduit les dimensions caractéristiques suivantes :

- R_0 : la longueur caractéristique, on la choisit égale au rayon d'une sphère ayant la même surface que Γ en dimension trois. Dans le cas bidimensionnel, c'est le rayon d'un cercle ayant le même périmètre que Γ ;
- $U = VR_0/L$: la vitesse caractéristique de l'écoulement de cisaillement au niveau de la paroi de la vésicule.
- ρ_2 : la densité caractéristique, on la choisit égale à la densité du fluide à l'extérieur de la membrane ;

– μ_2 : la viscosité caractéristique, on la choisit égale à la viscosité du fluide à l'extérieur de la membrane ;

Les quantités adimensionelles seront notées en utlisant des tildes et on a : $x = R_0\tilde{x}$, $u = U\tilde{u}$, $\rho = \rho_2\tilde{\rho}$ et $\mu = \mu_2\tilde{\mu}$. On choisit une pression caractéristique $P = \frac{\mu_2 U}{R_0}$, un temps caractéristique $T = R_0/U$. Quant à *la tension de surface*, elle est adimensionalisée par $\lambda = \mu_2 U\tilde{\lambda}$. On définit le confinement ϖ par le rapport R_0/L. Remarquons que le taux de cisaillement dimensionné est donné par V/L, si bien que le taux de cisaillement sans dimension vaut 1. Dans la suite de ce chapitre, on note le rapport de viscosité par $\Upsilon = \mu_1/\mu_2$.

Soit $\mathbf{u_0} \in \mathbb{V}(1/\varpi)$, le problème (8.12) se réécrit en omettant les tildes :

$$\begin{array}{rcll}
Re\,\dfrac{D\,\rho\mathbf{u}}{Dt} - \nabla.(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u})) + \nabla p & = & 0, & \text{pp dans } \Lambda\times]0,T[, \\
\nabla.\mathbf{u} & = & 0, & \text{pp dans } \Lambda\times]0,T[, \\
\nabla_s.\mathbf{u} & = & 0, & \text{pp sur } \Gamma\times]0,T[, \\
[\mathbf{u}.\mathbf{n}] & = & 0, & \text{pp sur } \Gamma\times]0,T[, \\
[(2\mu\mathcal{D}(\mathbf{u}) - p\mathbf{I}).\mathbf{n}] & = & \dfrac{1}{Ca}\,\mathbf{F_H} - \nabla_s\lambda + H\lambda\mathbf{n}, & \text{pp sur } \partial\Lambda\times]0,T[, \\
\frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla\varphi & = & 0, & \text{dans } \Lambda\times]0,T[, \\
\mathbf{u} & = & \mathbf{u_0}, & \text{dans } \Lambda\times\{0\}\,, \\
\varphi & = & \varphi_0, & \text{dans } \Lambda\times\{0\}\,.
\end{array} \tag{8.13}$$

Avec $\mathbf{F_H}$ est la force adimensionnée donnée par :

$$\mathbf{F_H} = \frac{1}{2}\left(2\,\Delta_s H + (H - H_0)[H(H + H_0) - 4K]\right)\mathbf{n}\,. \tag{8.14}$$

En conclusion, le problème adimensionné (8.13) est piloté par les paramètres suivants :

$$Re = \frac{\rho_2 R_0 U}{\mu_2}\,, Ca = \frac{\mu_2 R_0^2 U}{\kappa}\,, \varpi = \frac{R_0}{L}\,, \Upsilon = \frac{\mu_1}{\mu_2}\,, \Xi = \frac{\rho_1}{\rho_2}\,,$$

auxquels il faut ajouter l'aire réduite γ donnée par la condition initiale φ_0. Le nombre de Reynolds Re mesure l'importance des termes inertiels comparés aux termes visqueux et le nombre de capillarité Ca mesure l'importance des contraintes appliquées par l'écoulement externe $\mu_2 U/R_0$ par rapport à la déformabilité de la membrane κ/R_0^3.

Les applications visées concernent la biophysique et plus particulièrement l'étude du comportement de vésicules dans des petits vaisseaux sanguins. En se basant sur les travaux expérimentaux de Vitkova et al. [94] qui étudient le comportement des vésicules sous écoulement de cisaillement, on considère les dimensions caractéristiques suivantes (USI) :

$$\begin{array}{rl}
\mu_2 & \text{est de l'ordre de } 10^{-3}\,, \\
R_0 & \text{est de l'ordre de } 5\times 10^{-5}\,, \\
L & \text{est de l'ordre de } 10^{-3}\,, \\
\rho_1 = \rho_2 & \text{est de l'ordre de } 10^{3}\,, \\
V & \text{varie entre 1 et 12 }.
\end{array}$$

Enfin, κ est estimé par les auteurs de [94], si bien que :

$$\begin{array}{rcl}
Ca & \in & \left[3\times 10^3\,,\, 3\times 10^6\right]\,, \\
Re & \in & \left[10^{-4}\,,\, 10^{-3}\right]\,, \\
\varpi & = & 1/20\,,\ \ \Xi = 1\,.
\end{array}$$

Quant à Υ, il sera choisi de façon à explorer les différents régimes de l'écoulement.
Afin d'explorer l'effet du confinement, on varie ϖ entre 1/2 et 1/5 pour des maillages réguliers et jusqu'à 1/12 pour des maillages adaptés. On note aussi qu'on prend $\Xi = 1$ pour toutes les simulations numériques dans ce chapitre.

8.2 Approximation en temps

Soit $0 = t^0 < t^1 < t^2 < .. < t^N = T$ la subdivision de l'intervalle de temps $[0, T]$, on note $\triangle t = t^{n+1} - t^n$ le $n^{\text{ième}}$ pas de temps, $n = 1, 2, .., N$. On utilise un schéma de discrétisation rétrograde de second ordre en temps ainsi que la méthode des caractéristiques [85, Chap 5] :

$$\begin{aligned} y'(t) &\approx \frac{y^{n+1} - y^n}{(2/3)\triangle t} &&, \text{ si } n = 1\,, \\ y'(t) &\approx \frac{3y^{n+1} - 4y^n + y^{n-1}}{2\triangle t} &&, \text{ sinon }. \end{aligned}$$

Quitte à prendre des conditions au bord $\partial\Lambda$ adaptées à un écoulement de cisaillement, on résoud le problème suivant :

$$\begin{aligned} Re\,\rho^n \frac{3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n o\chi^n + \mathbf{u}^{n-1} o\chi^{n-1}}{2\triangle t} - \nabla.(2\mu^n \mathcal{D}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right)) + \nabla p^{n+1} &= 0\,, \text{ dans } \Lambda, \\ \nabla.\mathbf{u}^{n+1} &= 0\,, \text{ dans } \Lambda, \\ \nabla_s^n.\mathbf{u}^{n+1} &= 0\,, \text{ sur } \Gamma^n, \\ \left[\mathbf{u}^{n+1}.\mathbf{n}^{n+1}\right] &= 0\,, && \text{sur } \Gamma^n, \\ \left[(2\mu^n \mathcal{D}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) - p^{n+1}\mathbf{I}).\mathbf{n^{n+1}}\right] &= \frac{1}{Ca}\,\mathbf{F_H}^n - \nabla_s^n \lambda + H^n \lambda^{n+1}\mathbf{n}^n && \text{sur } \partial\Lambda, \\ \varphi^{n+1} &= \varphi^n o Y^n\,, && \text{dans } \Lambda, \\ \mathbf{u}^{n+1} &= 1/\varpi\,, && \text{sur }]-L, L[\times\{L\}\,, \\ \mathbf{u}^{n+1} &= -1/\varpi\,, && \text{sur }]-L, L[\times\{-L\}\,, \\ \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial \mathbf{n}} &= 0\,, && \text{sur } \{-L, L\}\times]-L, L[, \\ \varphi^0 &= \varphi_0\,, && \text{dans } \Lambda. \end{aligned} \tag{8.15}$$

Où

$$\begin{aligned} \chi^n(x) &= x - \triangle t\,\mathbf{u}^*(\mathbf{x})\,, \\ \chi^{n-1}(x) &= x - 2\triangle t\,\mathbf{u}^*(\mathbf{x})\,, \\ \mathbf{u}^* &= 2\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}\,, \\ Y^n(x) &= x - \triangle t\,\mathbf{u}^n(x)\,. \end{aligned}$$

Le schema précédent définit une récurrence d'ordre deux de la suite $(\mathbf{u}^n)_{n\geq -1}$ qui commence par $\mathbf{u}^{-1} = \mathbf{u}^0 = 0$.

8.3 Formulation faible

On introduit les formes trilinéaires suivantes $a(\,,\,,\,)$, $b(\,,\,,\,)$ et $m(\,,\,,\,)$ données par :

$$\begin{aligned}
m(\omega;\mathbf{u},\mathbf{v}) &= \int_\Lambda \mathbf{u}\,.\,\mathbf{v}\,\omega\;\mathrm{dx} \qquad\qquad , \text{ avec } \omega\in L^\infty(\Lambda)^d,\ \mathbf{u}\in L^2(\Lambda)^d,\ \mathbf{v}\in L^2(\Lambda)^d\,,\\
a(\omega;\mathbf{u},\mathbf{v}) &= \int_\Lambda 2\,\omega\mathcal{D}(\mathbf{u}):\mathcal{D}(\mathbf{v})\;\mathrm{dx} \quad , \text{ avec } \omega\in L^\infty(\Lambda)^{d\times d},\ \mathbf{u}\in H^1(\Lambda)^d,\ \mathbf{v}\in H^1(\Lambda)^d\,,\\
b(\omega;\mathbf{u},\zeta) &= -\int_\Lambda (\omega\,\nabla)\,\mathbf{u}\,\zeta\;\mathrm{dx} \quad , \text{ avec } \omega\in L^\infty(\Lambda)^{d\times d},\ \mathbf{u}\in H^1(\Lambda)^d,\ \zeta\in L^2(\Lambda)\,.
\end{aligned}$$

La formulation variationnelle du problème est :
$(NS_{\triangle t})$: Trouver $\mathbf{u}^{n+1}\in\mathbb{V}(V)$, $p^{n+1}\in L^2_0(\Lambda)$ et $\lambda^{n+1}\in L^2_0(\Lambda)$ tels que :

$$\begin{aligned}
\frac{3Re}{\triangle t}m\left(\rho_\varepsilon(\varphi^n)\,;\,\mathbf{u}^{n+1},\mathbf{v}\right) + a\left(\mu_\varepsilon(\varphi^n)\,;\,\mathbf{u}^{n+1},\mathbf{v}\right) + b\left(\mathbf{I};\,\mathbf{v},\,p^{n+1}\right)&\\
+\,b\left(\delta_\varepsilon(\varphi^n)\,|\nabla\varphi^n|\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}^n\otimes\mathbf{n}^n)\,;\,\mathbf{v},\,\lambda^{n+1}\right) &=\\
\frac{1}{Ca}m\left(1\,;\,\mathbf{F_H}^n,\,\mathbf{v}\right) + \frac{Re}{2\triangle t}m\left(\rho_\varepsilon(\varphi^n)\,;\,4\mathbf{u}^n o\chi^n-\mathbf{u}^{n-1}o\chi^{n-1},\,\mathbf{v}\right) &\quad ,\forall\mathbf{v}\in\mathbb{V}(0)\,,\\
b\left(\mathbf{I};\,\mathbf{u}^{n+1},\,q\right) = 0 &\quad ,\forall q\in L^2(\Lambda)\,,\\
b\left(\delta_\varepsilon(\varphi^n)\,|\nabla\varphi^n|\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}^n\otimes\mathbf{n}^n)\,;\,\mathbf{u}^{n+1},\,\nu\right) = 0 &\quad ,\forall\nu\in L^2(\Lambda)\,. \qquad (8.16)
\end{aligned}$$

Quant à $\rho_\varepsilon(\varphi^n)$ et $\mu_\varepsilon(\varphi^n)$, elles sont données par les expressions suivantes :

$$\rho_\varepsilon(\varphi^n) = H_\varepsilon(\varphi^n) + \Xi\,(1-H_\varepsilon(\varphi^n))\,, \qquad (8.17)$$
$$\mu_\varepsilon(\varphi^n) = H_\varepsilon(\varphi^n) + \Upsilon\,(1-H_\varepsilon(\varphi^n))\,. \qquad (8.18)$$

8.4 Approximation en espace

Soient Λ_h une approximation polygonale du domaine Λ et $\mathcal{T}_h$ une triangulation de Λ_h. L'approximation par les éléments finis de Taylor-Hood est considérée et on introduit les espaces de discrétisation suivant :

$$\begin{aligned}
\mathbb{X}_h &= \left\{\mathbf{u}\in H^1(\Lambda)^d\,|\,\mathbf{u}_{|K}\in\mathbb{P}_2(K)^d\,,\,\forall K\in\mathcal{T}_h\right\}\,,\\
\mathbb{V}_h(V) &= \mathbb{X}_h\cap\mathbb{V}(V)\,,\\
\mathbb{Q}_h &= \left\{q\in L^2(\Lambda)\cap\mathcal{C}^0\left(\overline{\Lambda}\right)\,|\,q_{|K}\in\mathbb{P}_1(K)\,,\,\forall K\in\mathcal{T}_h\right\}\,.
\end{aligned}$$

Le problème (8.16) se discrétise de la manière suivante :
$(NS_{\triangle t,h})$: Trouver $\mathbf{u}_h^{n+1}\in\mathbb{V}_h(\gamma)$, $p_h^{n+1}\in\mathbb{Q}_h$ et $\lambda_h^{n+1}\in\mathbb{Q}_h$ tels que :

$$\begin{aligned}
\frac{3Re}{\triangle t}m\left(\rho_\varepsilon(\varphi_h^n)\,;\,\mathbf{u}_h^{n+1},\mathbf{v}\right) + a\left(\mu_\varepsilon(\varphi_h^n)\,;\,\mathbf{u}_h^{n+1},\mathbf{v}\right) + b\left(\mathbf{I};\,\mathbf{v},\,p_h^{n+1}\right)&\\
+\,b\left(\delta_\varepsilon(\varphi_h^n)\,|\nabla\varphi_h^n|\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\,;\,\mathbf{v},\,\lambda_h^{n+1}\right) &=\\
\frac{1}{Ca}m\left(1\,;\,\mathbf{F_H}_h^n,\,\mathbf{v}\right) + \frac{Re}{2\triangle t}m\left(\rho_\varepsilon(\varphi_h^n)\,;\,4\mathbf{u}_h^n o\chi^n-\mathbf{u}_h^{n-1}o\chi^{n-1},\,\mathbf{v}\right) &\quad ,\forall\mathbf{v}\in\mathbb{V}_h(0)\,,\\
b\left(\mathbf{I};\,\mathbf{u}_h^{n+1},\,q\right) = 0 &\quad ,\forall q\in\mathbb{Q}_h\,,\\
b\left(\delta_\varepsilon(\varphi_h^n)\,|\nabla\varphi_h^n|\,(\mathbf{I}-\mathbf{n}_h^n\otimes\mathbf{n}_h^n)\,;\,\mathbf{u}_h^{n+1},\,\nu\right) = 0 &\quad ,\forall\nu\in\mathbb{Q}_h\,. \qquad (8.19)
\end{aligned}$$

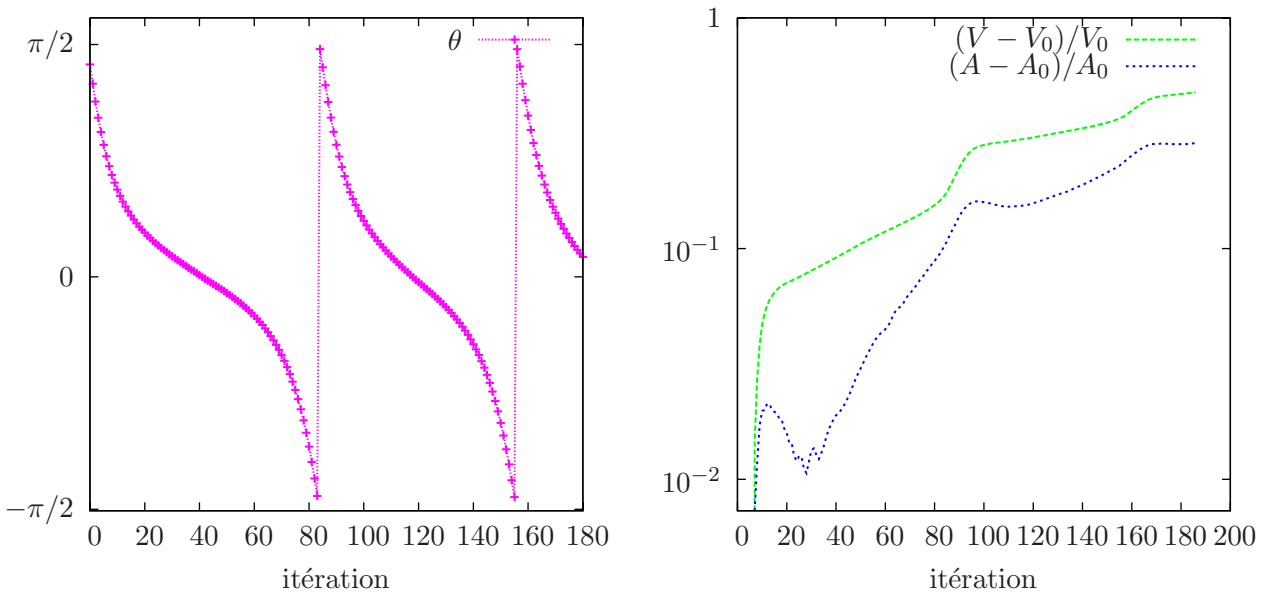

FIG. 8.3 – Tracé pour $\delta x = 5.3 \times 10^{-2}$, $\delta t = 3 \times 10^{-2}$, $\tau = 0.81$ et $\varepsilon = 2.5\,\delta x$: (a) : L'angle d'inclinaison de la vésicule et (b) : Le périmètre relatif (en valeur absolue) et l'aire relative (en valeur absolue), en échelle logarithmique en ordonnées.

8.5 Problème d'advection

8.5.1 Non préservation des contraintes

On note que, similairement au chapitre précédent, des pertes de volume et de surface (aire et périmètre en 2d) proviennent de l'étape d'advection et la vésicule finit par avoir une forme sphèrique (circulaire en 2d).
Dans la figure 8.3, on trace l'évolution des pertes relatives en périmètre et en aire pour une vésicule sous un écoulement de cisaillement simple ayant $Re = 10^{-3}$, $Ca = 10^3$, $\varpi = \frac{1}{10}$, $\tau = 0.81$ et un rapport de viscosité $\Upsilon = 50$. On remarque que, après un tour de rotation, les pertes dépassent 10% du périmètre et de l'aire de la vésicule de référence.

8.5.2 Corrections des pertes

Vu les problèmes de la conservation du volume et de la surface, on introduit deux multiplicateurs de Lagrange globaux qui permettent de contrôler les pertes de la masse lors de l'étape de transport de la fonction de niveau φ. En effet, on introduit deux multiplicateurs de Lagrange, notés p^* et λ^*, pour contrôler respectivement les contraintes de l'incompressibilté et de l'inextensibilité lors de l'étape de transport. Le problème de transport est substitué par le problème suivant :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + [\mathbf{u} + (p^* + \lambda^* f)\,\mathbf{n}]\,.\nabla\varphi = 0 \quad \text{p.p. } (t,x) \in]0,+\infty[\times\Lambda\,, \tag{8.20}$$

$$\frac{d}{dt}\int_\Lambda \mathbb{H}(\varphi)\,\mathrm{dx} = \varepsilon_V \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,, \tag{8.21}$$

$$\frac{d}{dt}\int_{\partial\Omega} 1\,\mathrm{ds} = \varepsilon_A \quad \text{p.p. } t \in]0,+\infty[\,. \tag{8.22}$$

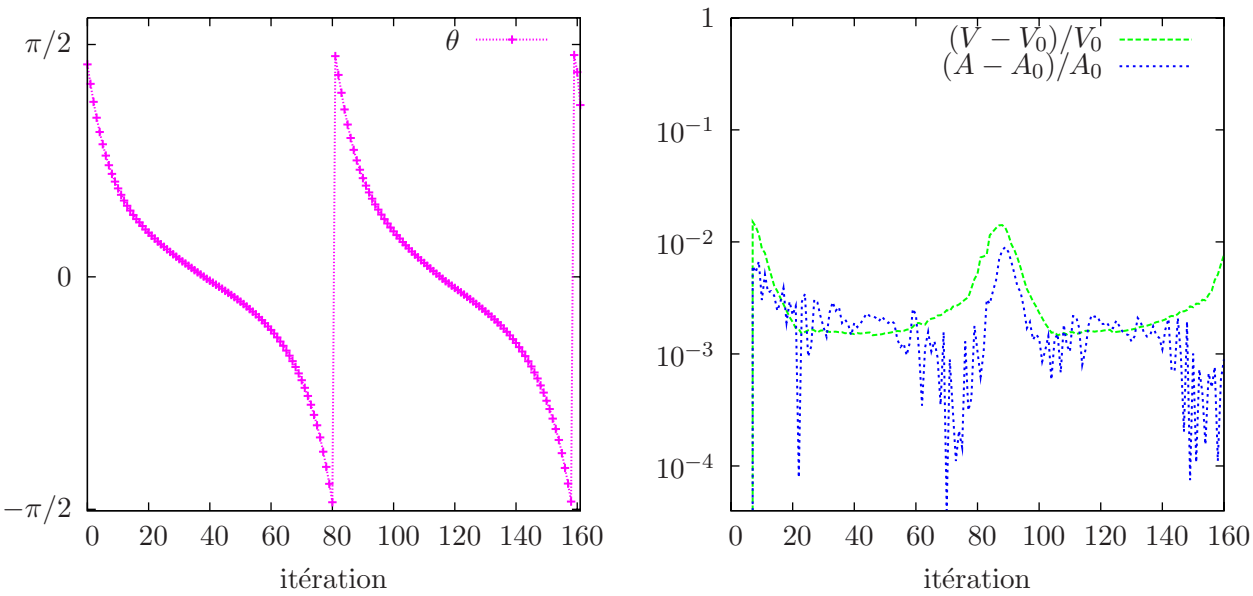

FIG. 8.4 – Tracé de la solution en appliquant les corrections au problème d'advection pour $\delta x = 5.3 \times 10^{-2}$, $\delta t = 3 \times 10^{-2}$, $\tau = 0.81$ et $\varepsilon = 2.5 \times \delta x$: (a) : L'angle d'inclinaison de la vésicule en fonction des itérations et (b) : Le périmètre relatif (en valeur absolue) et l'aire relative (en valeur absolue), en échelle logarithmique en ordonnées.

Avec ε_A et ε_V sont deux paramètres qui dépendent du temps et ils sont donnés à l'itération n par :

$$\varepsilon_A = \frac{-\int_{\partial\Omega^n} 1\,\mathrm{ds} + A_0}{\Delta t} \quad \text{et} \quad \varepsilon_V = \frac{\int_{\Omega^n} 1\,\mathrm{dx} - V_0}{\Delta t}.$$

Dans l'équation (8.20), on utilise une fonction suffisamment régulière f définie dans le domaine Λ. Dans nos simulations, on choisit f une fonction ploynômiale de second degré. En utilisant la formule de Reynolds, l'équation (8.22) est équivalente à :

$$\varepsilon_A - p^* \int_{\partial\Omega} H\,ds - \lambda^* \int_{\partial\Omega} H\,f\,\mathrm{ds} - \int_{\partial\Omega} H\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds} = 0. \tag{8.23}$$

Les équations (8.20) et (8.21) sont équivalentes à :

$$\varepsilon_V + p^* \int_{\partial\Omega} 1\,ds + \lambda^* \int_{\partial\Omega} f\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds} = 0. \tag{8.24}$$

D'après les équations (8.23) et (8.24), les multiplicateurs de Lagrange optimaux sont donnés par :

$$\lambda^* = \frac{\varepsilon_A \int_{\partial\Omega} 1\,ds + \varepsilon_V \int_{\partial\Omega} H\,ds + \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds} \int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds} - \int_{\partial\Omega} 1\,ds \int_{\partial\Omega} H\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds}}{\int_{\partial\Omega} 1\,ds \int_{\partial\Omega} H\,f\,\mathrm{ds} - \int_{\partial\Omega} f\,ds \int_{\partial\Omega} H\,\mathrm{ds}}, \tag{8.25}$$

$$p^* = \frac{\varepsilon_V + \lambda^* \int_{\partial\Omega} f\,\mathrm{ds} + \int_{\partial\Omega} \mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{ds}}{-\int_{\partial\Omega} 1\,ds}. \tag{8.26}$$

Remarquons que la fonction f sert à éviter d'avoir un dénominateur nul dans l'expression de λ^* (8.25).

8.5.3 Validation numérique

La même simulation que celle de la figure 8.3 est lancée en restituant les pertes de masse lors de l'étape du transport de φ. Les résultats sont tracés dans la figure 8.4 et on observe que les pertes sont contrôlées suite aux corrections introduites.

Algorithme de découplage

---

initialisation $n = 0$
$(\Omega^0; \mathbf{u}^0) \in \Lambda \times \mathbb{R}^2$ arbitrairement donnés,

Soit $n \geq 0$
Étant donnés $(\mathbf{u}^n\,,\,\mathbf{u}^{n-1}\,,\,\varphi^n)$,

1. On calcule $\mathbf{u}^{n+1}$, p^{n+1} , λ^{n+1} en résolvant (8.19) ,
2. On calcule φ^{n+1} en résolvant [8.20,8.21,8.22] .

fin de l'algorithme.

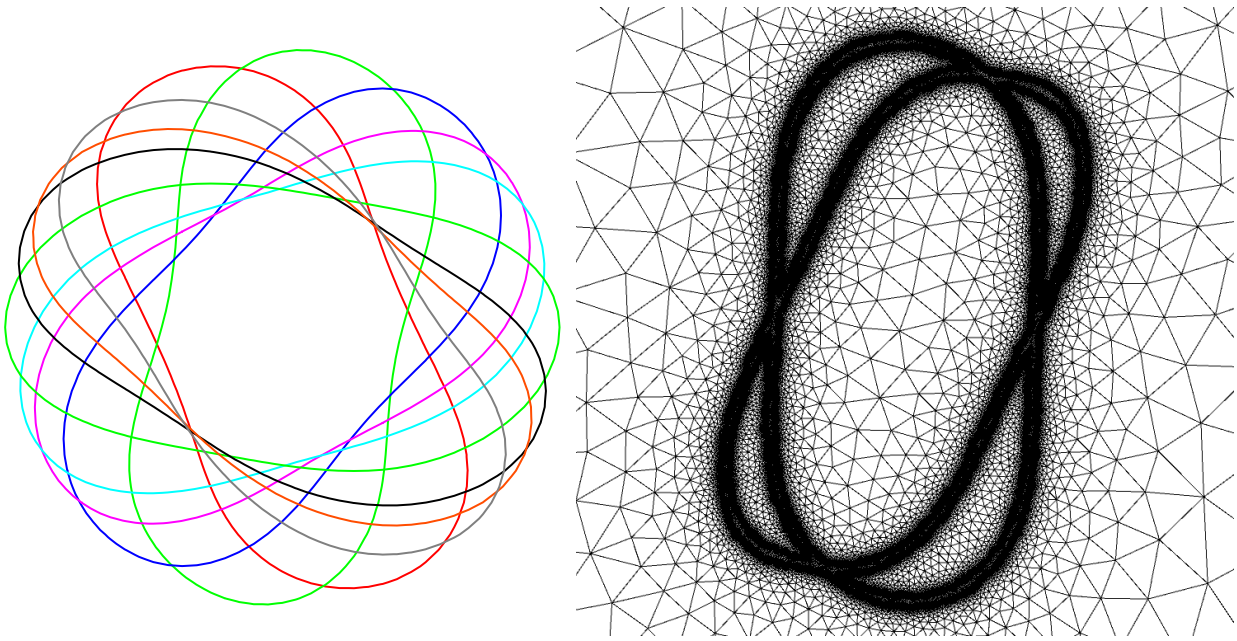

FIG. 8.5 – (a) : Vésicule sous cisaillement pour $\varpi = 1/4$, $\Upsilon = 20$, $Ca = 10^4$ et $Re = 10^{-3}$. (b) : Zoom sur l'adaptation du maillage.

8.6 Simulations numériques

8.6.1 Adaptation de maillage

Le critère de raffinement de maillage est le même que celui utilisé précédemment dans ce manuscrit. On choisit à l'itération n un critère $c_h^n = \delta_\varepsilon(\varphi^n) + \delta_\varepsilon(\phi^{n+1})$ et par la suite la métrique est donnée par la matrice `Hessienne` $\nabla\nabla c_h^n$. On note que ϕ^{n+1} prévoit une position approchée de φ^{n+1} calculée avec le maillage de l'itération précédente.
D'autre part, à chaque itération n, on effectue une boucle de sous itérations jusqu'à atteindre la convergence du maillage pour le critère c_h^n donné. Dans la figure 8.5, on donne un zoom du maillage autour de la membrane.
Quant aux paramètres d'adaptation de maillage donnés à `BAMG`, on choisit $h_{min} = 10^{-2}$ et $h_{coef} = 1.1$. Ces derniers représenttent respectivement la longueur de l'arête minimale dans le maillage $\mathcal{T}_h$ adapté ainsi que le coefficient de subdivision des mailles lors du raffinement.

8.6.2 Vésicule en mode de basculement

On choisit les paramètres physiques suivants : $Re = 10^{-4}$, $Ca = 10^3$, $\Upsilon = 20$, ceci pour une vésicule ayant une aire réduite $\gamma = 0.89$ et pour un pas de temps $\delta t = 2.5 \times 10^{-3}$.
Dans leur processus expérimental, Vitkova et al. [94] utilisent des vésicules de diamètre $50\mu m$ dans un canal de hauteur $1mm$, ceci correspond à un confinement $\varpi = 1/20$.

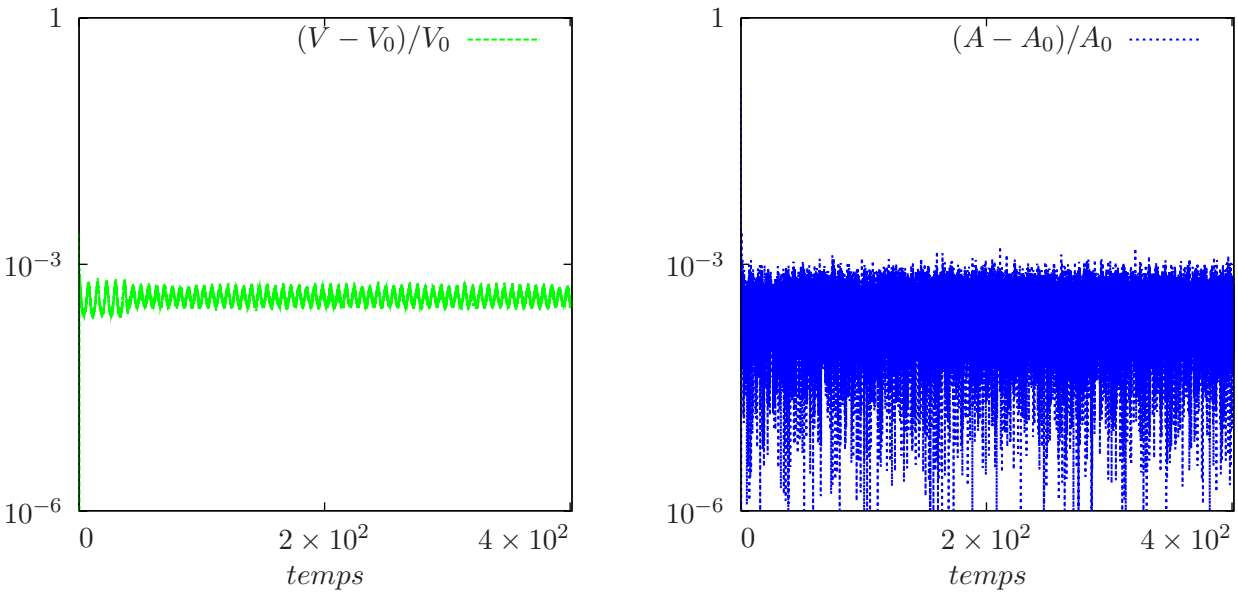

FIG. 8.6 – Erreure relative commise sur les contraintes en fonction du temps (échelle logarithmique en ordonnées) : (a) : L'aire relative (en valeur absolue) et (b) : Le périmètre relatif (en valeur absolue).

Dans cette partie, on choisit ϖ tel que la vésicule suit un mouvement de basculement. Pour les simulations utilisant un maillage régulier, on varie le confinement entre 1/2 et 1/5 alors que lors de l'adaptation de maillage, on a utilisé jusqu'à un confinement $\varpi = 1/12$.

Préservation des contraintes

On trace l'erreur commise sur les contraintes du problème au cours du temps. En effet, on trace $(V - V_0)/V_0$ et $(A - A_0)/A_0$ dans la figure 8.6 pour un confinement $\varpi = 1/9$. On remarque que l'erreur relative est inférieure à 10^{-3} par rapport à A_0 et V_0 après 80 tours de basculement de la vésicule.

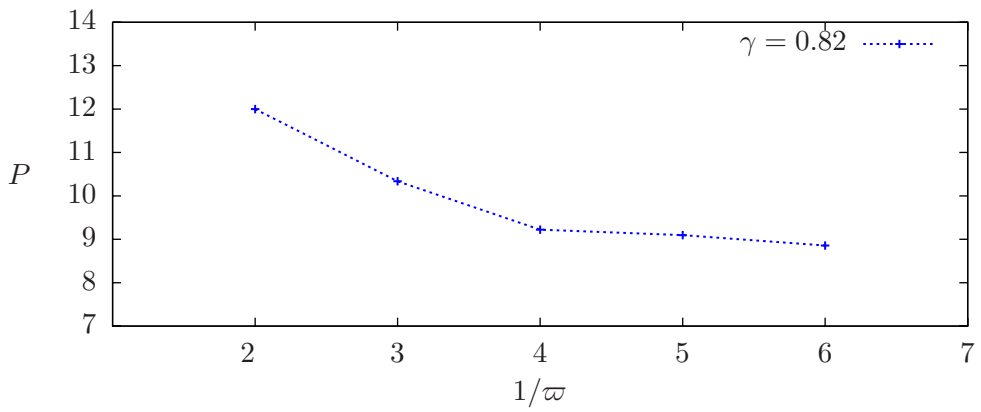

FIG. 8.7 – Évolution de la période du basculement P en fonction de $1/\varpi$ pour $\gamma = 0.82$.

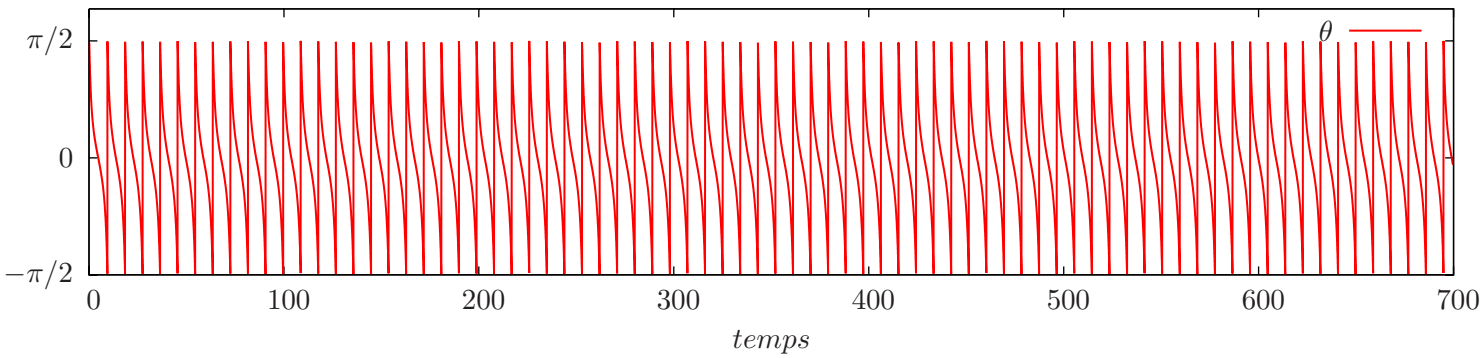

FIG. 8.8 – Évolution de l'angle de rotation de la vésicule au cours du temps.

Effet du confinement sur la période de basculement

La période de basculement de la vésicule dans un écoulement de cisaillement dépend du choix du confinement. Par ailleurs, on trace dans la figure 8.7 la période de temps P en fonction de ϖ. On en déduit qu'à partir de $\varpi = 1/4$, le résultat devient légèrement dépendant du confinement. Par conséquent, on opte pour ce choix pour modéliser la dynamique des vésicules sans confinement.

Évolution de θ

L'évolution de l'angle de rotation θ autour de l'axe de la vésicule est tracée dans la figure 8.8. On remarque que le régime stationnaire s'établie après dix tours de rotation et au delà de ce régime transitoire, on a une période de rotation constante.

Énergie de Canham et Helfrich

On trace l'évolution de l'énergie de Canham et Helfrich en fonction du temps dans la figure 8.10. Quelques positions occupées par la vésicule lors de son basculement, lorsque le régime stationnaire est établie, sont tracées dans la figure 8.5.

Courbes de Lissajous

À partir de la dixième période, le régime stationnaire s'établie et on peut tracer deux courbes de Lissajous. La première consiste à tracer la vitesse angulaire $\frac{d\theta}{dt}$ en fonction de l'angle θ (voir Fig 8.9(a)). Sur la figure 8.9(b), on trace l'énergie de Canham et Helfrich en fonction de θ. On observe que les courbes se superposent exactement pour plus que 80 périodes et on peux affirmer que la figure ontenue est caractéristique de la dynamique simulée.
Dans les figures 8.11, on trace les maillages utilisés pour différentes valeurs de confinements ainsi que la courbe Γ correspondante.

Comparaison par rapport à la théorie de Keller et Skalak

Keller et Skalak [54] ont élaboré une approche analytique pour analyser la dynamique d'ellipsoides rigides ayant une membrane fluide dans un écoulement de cisaillement. Néanmoins,

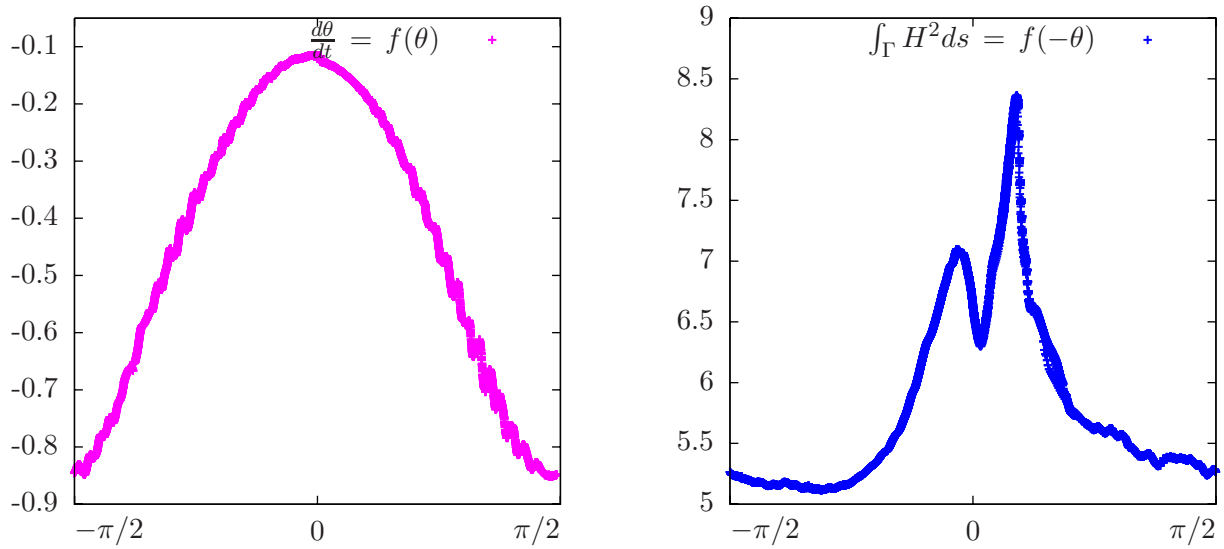

FIG. 8.9 – Courbes de `Lissajous` : (a) : la vitesse angulaire $\frac{d\theta}{dt}$ en fonction de θ et (b) : l'énergie de Canham et Helfrich en fonction de $-\theta$.

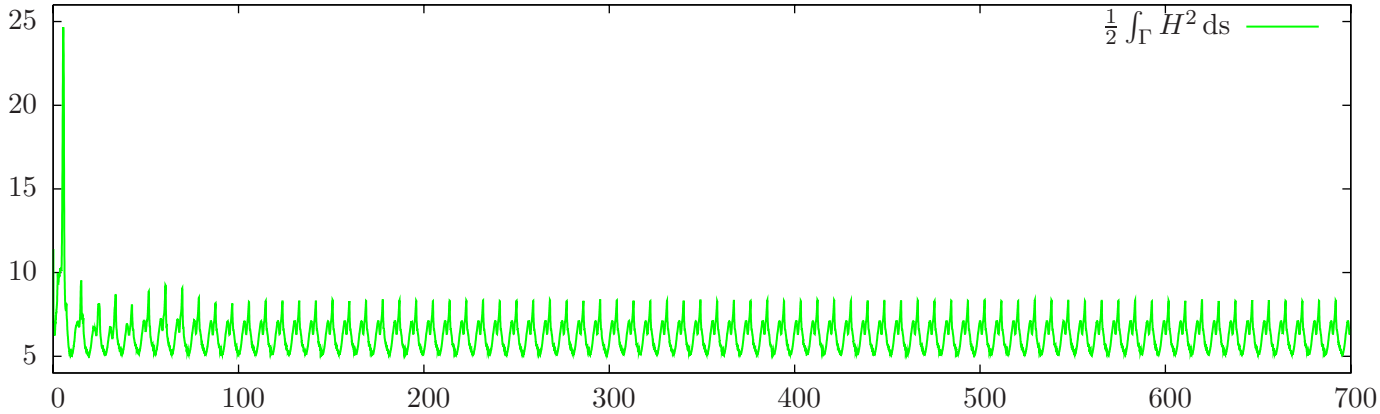

FIG. 8.10 – Évolution de l'énergie de Canham et Helfrich au cours du temps.

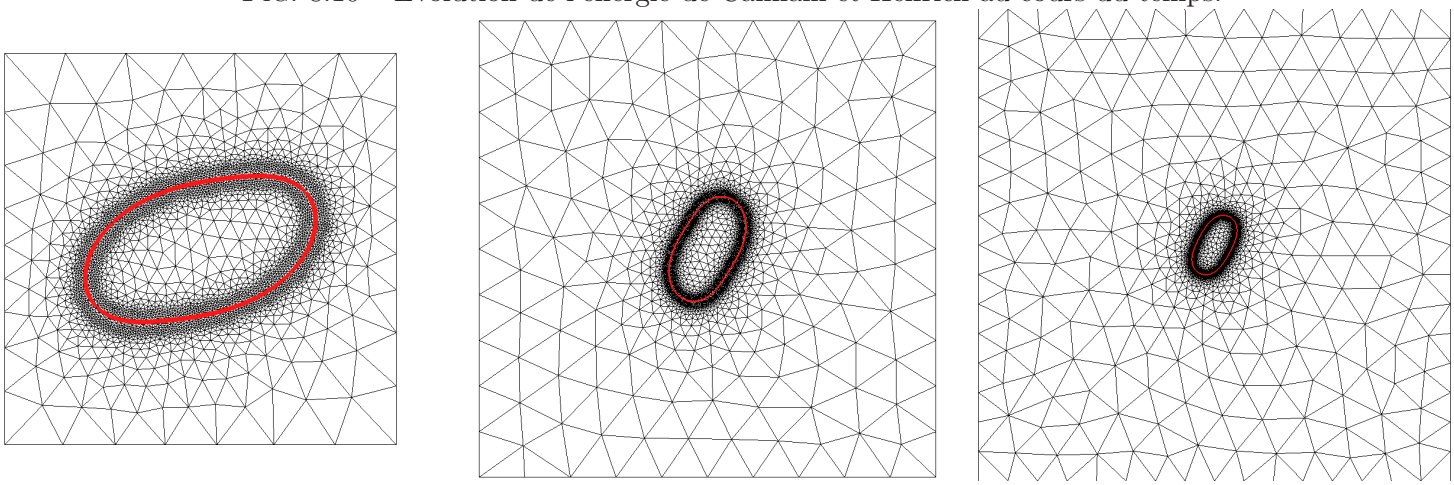

FIG. 8.11 – Gauche : $\varpi = 1/2$. Milieu : $\varpi = 1/5$. Droite : $\varpi = 1/9$.

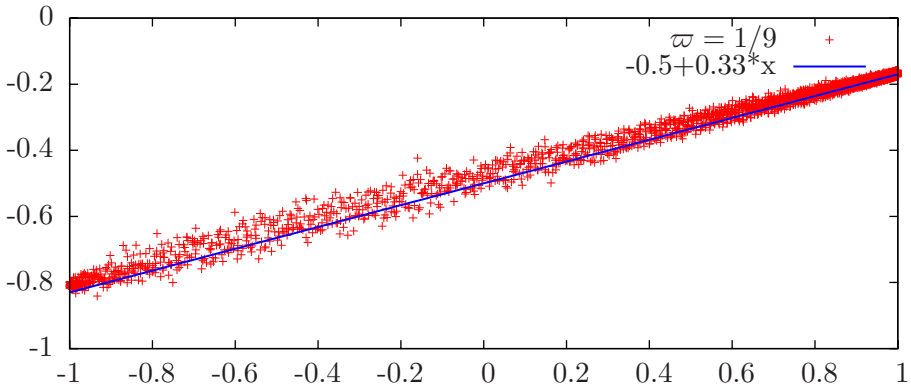

FIG. 8.12 – Représentation de $\frac{d\theta}{dt}$ en fonction de $cos(2\theta)$.

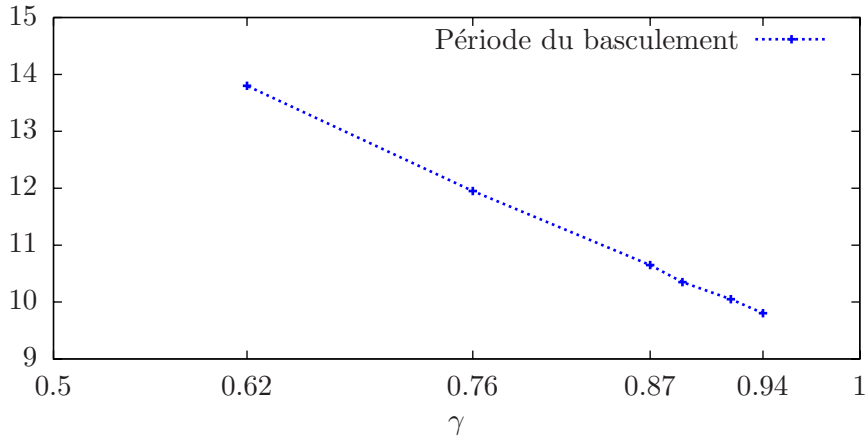

FIG. 8.13 – Période du basculement P d'une vésicule en fonction du volume réduit γ.

on note que le modèle proposé est tridimensionnel et il ne respecte pas la proprieté de l'inextensibilité de la membrane. Toutefois, il continue à décrire la dynamique notament pour des volumes réduits très proches de 1 où l'écart à l'inextensibilité est faible. D'après [54], l'équation du mouvement de l'ellipsoide est donnée par :

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{-1}{2} + \alpha(\Gamma\,,\,\Upsilon)cos(2\theta)\,.$$

Où $\alpha(\Gamma\,,\,\Upsilon)$ est un paramètre qui dépend du rapport d'aspect de l'éllipsoide et du rapport de viscosités.
Pour les paramètres physiques suivants : $\gamma = 0.84\,, \Upsilon = 50\,, Re = 10^{-4}\,, Ca = 10^4$ et pour un confinement $\varpi = \frac{1}{9}$, on trace $\frac{d\theta}{dt}$ en fonction de $cos(2\theta)$ sur la figure 8.12. On retrouve le profil de dépendance linéaire prédit par la théorie de Keller et Skalak ainsi qu'une valeur de l'ordonnée à l'origine égale à -0.5.

Effet du volume réduit

On considère une vésicule dans un écoulement de cisaillement avec un rapport de viscosité $\Upsilon = 50$ et on choisit un nombre de Reynolds $Re = 10^{-4}$ et un nombre de Capillarité $Ca = 10^3$. On évalue la priode du basculement de la vésicule en fonction du volume réduit γ, les résultats sont affichés sur la figure 8.13(a).

Évolution de la pression

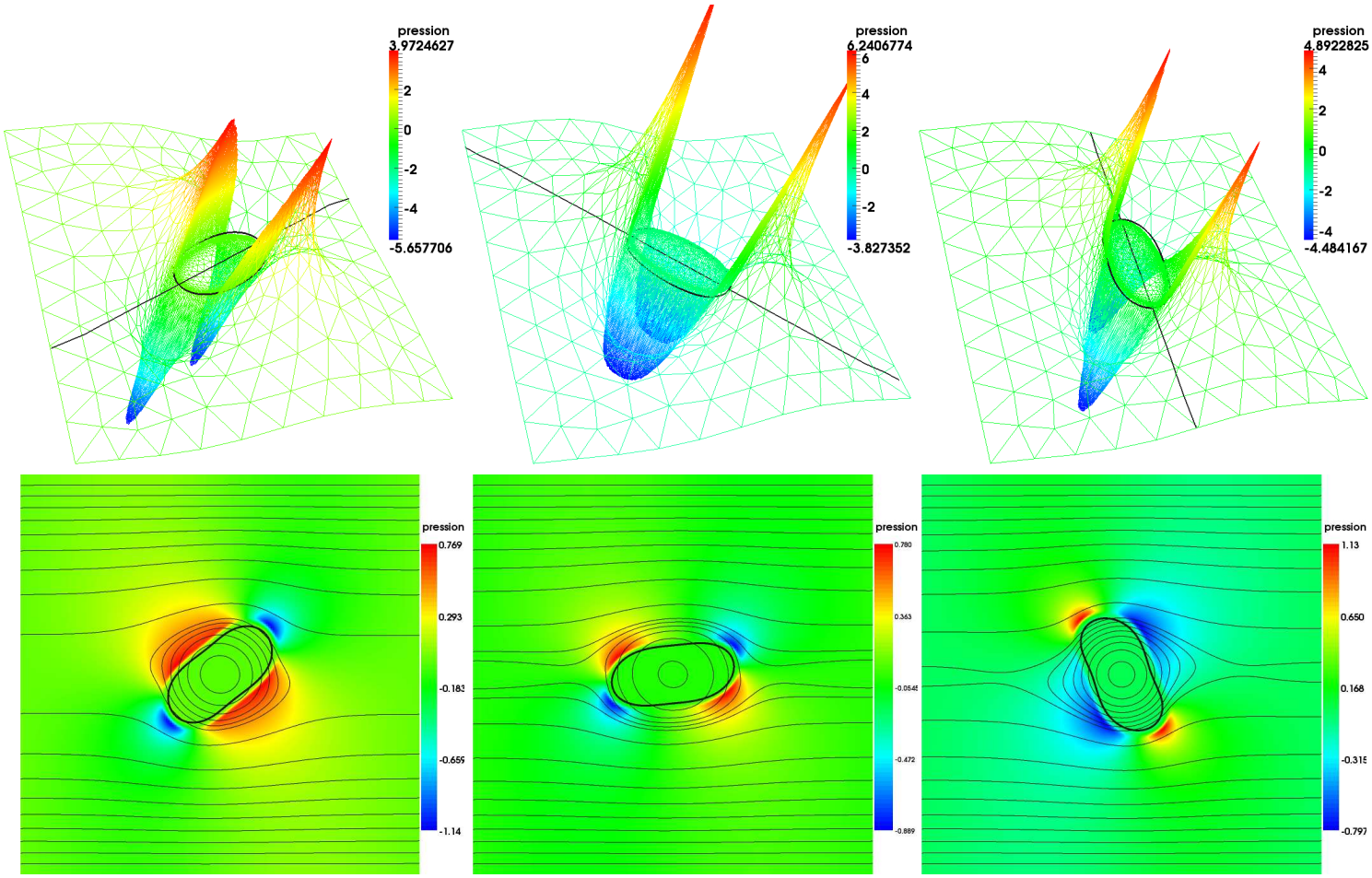

FIG. 8.14 – Lignes de courant pour la vésicule en basculement et champ de pression pour un confinement $\varpi = \frac{1}{4}$ et $\gamma = 0.82$.

Dans les figures Fig. 8.14(a), on trace l'évolution du champ de pression en élévation ainsi que le maillage associé. On trace aussi la courbe Γ ainsi que la droite indiquant l'orientation de la vésicule. Ceci met en évidence le saut de pression à la traversée de Γ. Dans les figures Fig. 8.14(b), on trace le champ de pression ainsi que les lignes de courant pour le même confinement $\varpi = 1/4$.

Évolution de la tension de surface

Dans les figures Fig. 8.15(a), on trace l'évolution de la tension de surface en élévation ainsi que le maillage associé. On trace également la courbe Γ ainsi que la droite indiquant l'orientation de la vésicule. Dans les figures 8.15(b), on trace le champ λ ainsi que les lignes de vorticité pour le même confinement $\varpi = 1/4$.

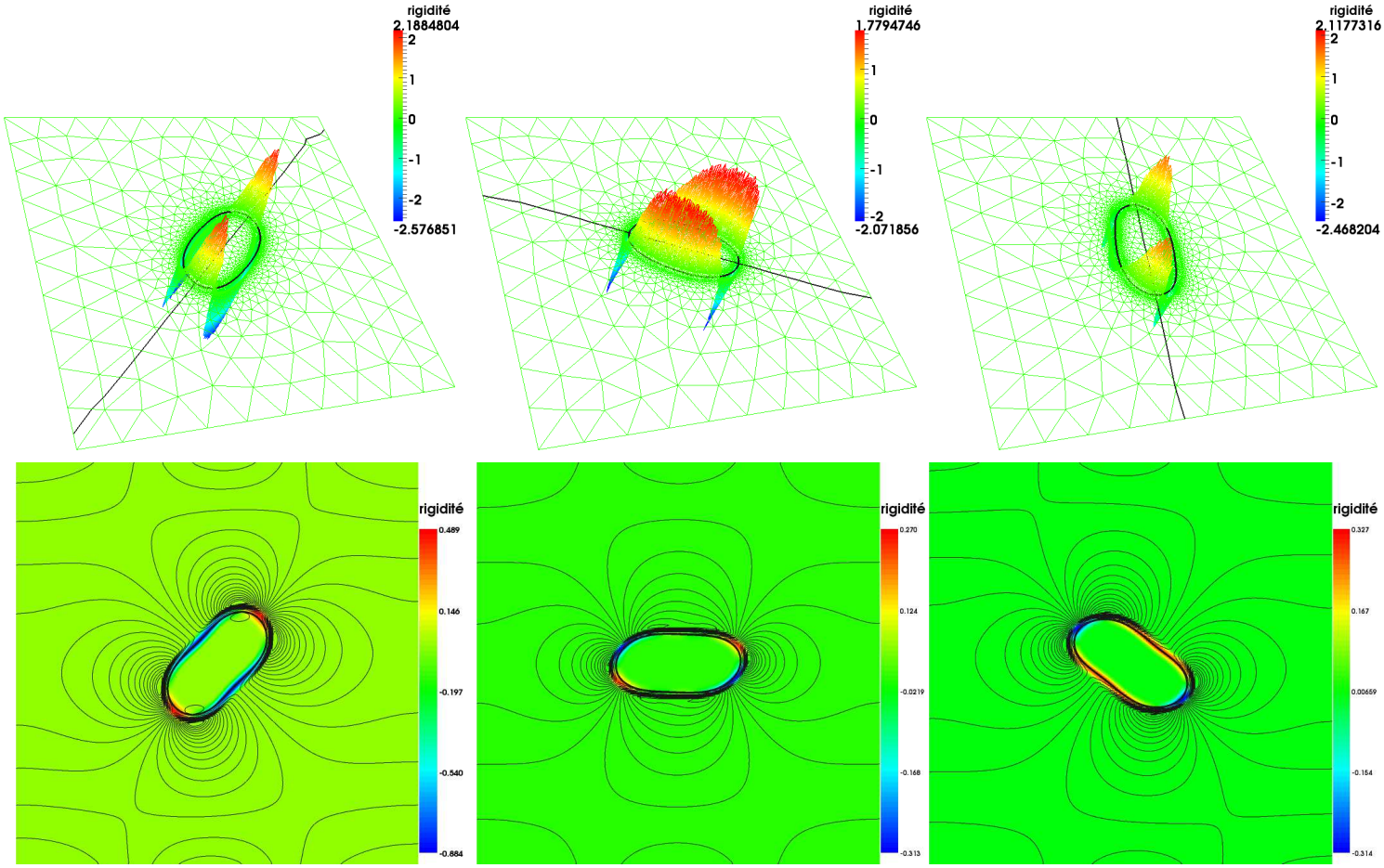

FIG. 8.15 – Lignes de vorticité pour la vésicule en basculement et champ de rigidité λ pour un confinement $\varpi = \frac{1}{4}$ et $\gamma = 0.82$.

8.6.3 Vésicule en mode de chenille de char

A faible contraste de viscosité, il est peu coûteux de cisailler le fluide interne : la vésicule adopte alors une orientation stationnaire par rapport à l'écoulement, et sa membrane tourne sans modifier sa forme générale, tout en entrainant le fluide interne.
Pour les paramètres physiques suivants : $\gamma = 0.84\,, \Upsilon = 1\,, Re = 10^{-4}\,, Ca = 10^4$, on trace l'évolution de l'angle d'inclinaison de la vésicule pour deux confinements $\varpi = 1/2$ et $\varpi = 1/4$ (voir Fig 8.16). On trace sur la figure 8.18 les lignes de courant ainsi que le champ de vitesse sur la membrane pour $\varpi = 1/2$. Lorsque le régime stationnaire est établie, on vérifie que ce champ devient parfaitement tangentiel à Γ.

On trace aussi sur la figure 8.18 l'angle du régime stationnaire θ_∞ en fonction de l'aire réduite de la vésicule et on remarque que l'angle augmente en fonction de l'aire réduite.

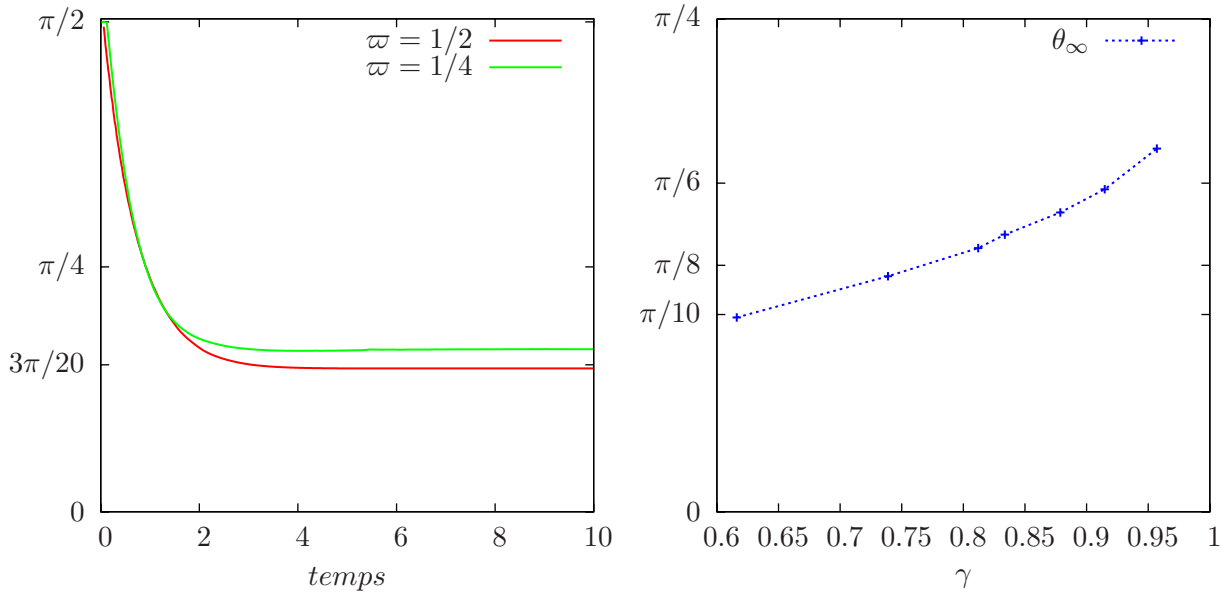

FIG. 8.16 – (a) : Évolution de θ en mode confiné et non confiné pour $\gamma = 0.84$. (b) : Évolution de l'angle de `chenille de char` en fonction du volume réduit.

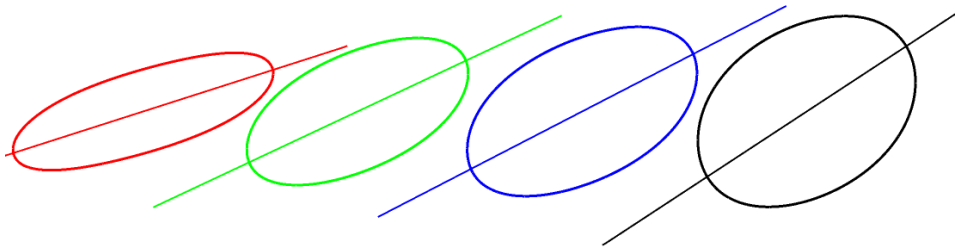

FIG. 8.17 – Inclinaison par rapport à l'horizontale de la vésicule dans le régime stationnaire, respectivement de gauche à droite, pour $\gamma = 0.616$, 0.825, 0.879, 0.957.

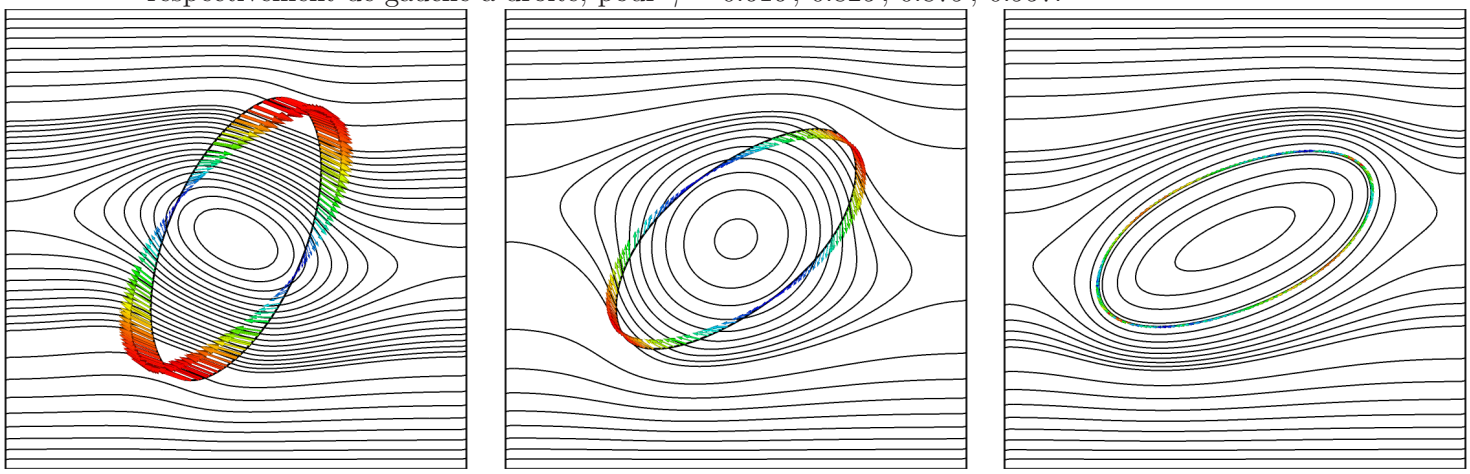

FIG. 8.18 – Lignes de courant pour la vésicule en mouvement de chenille de char et champ de vitesse sur Γ pour $\varpi = \frac{1}{2}$ et $\gamma = 0.84$.

8.6.4 Effet du nombre de Reynolds sur la dynamique du cisaillement

Ce qui a accaparé notre attention, au point de nous pousser à exploiter le code pour des nombres de Reynolds considérables, c'est que les nombres de Reynolds peuvent prendre des valeurs supérieures à 1 dans certains vaisseaux sanguins. En effet, pour des globules rouges dans le sang, R_0 est de l'ordre de 3×10^{-6} (USI), μ_2 est de l'ordre de 10^{-3} (USI) et ρ_2 est de l'ordre de 10^3 (USI). Pour une vitesse moyenne dans le canal de l'ordre de 1, Re est de l'ordre de 3 (ce qui est rencontré dans les grosses veines humaines). Par ailleurs, on a R_0 de l'ordre de 5×10^{-5} (USI) pour des vésicules dans le laboratoire et on peut suivre des vésicules à l'aide d'une caméra très rapide jusqu'à des vitesses d'environ 0.1. Par conséquent, on obtient un nombre de Reynolds de l'ordre de 5. Or, comme on va le voir, un nombre de cet ordre va boulverser le comportement sous cisaillement. On se propose donc de considérer dans cette partie des nombres Re non négligeables.
On trace à la figure 8.19 l'évolution de la forme pour une vésicule d'aire réduite $\gamma = 0.62$ dans un écoulement confiné pour $\varpi = 1/2\,, \Upsilon = 10\,, Ca = 10^4$ et $Re = 0.4$. Les résultats montrent que la vésicule subit des déformations plus importantes que celles observées à la figure 8.5(a) pour un nombre Re très faible. D'autre part, on s'apperçoit qu'il est possible de changer la dynamique de la vésicule en agissant uniquement sur la valeur du nombre de Reynolds. En effet, on peux voir dans les figures 8.20 et 8.21 que pour $Re < 3.5$, la vésicule d'aire réduite $\gamma = 0.82$ suit un mouvement de basculement et que sa période augmente avec le nombre de Reynolds. En outre, à partir d'une valeur critique de Re légèrement supérieur à 3.5, elle suit un mouvement de chenille de char et l'angle de son orientation à l'équilibre croit avec le nombre de Reynolds avant de se stabiliser autours d'une certaine valeur inférieure à $\pi/4$.
À notre connaissance, il s'agit là d'un résultat qui n'est pas connue de la litérature, où le mouvement de bascule est inhibé par les effets inertiels. Une origine physique simple de ce résultat reste à trouver.

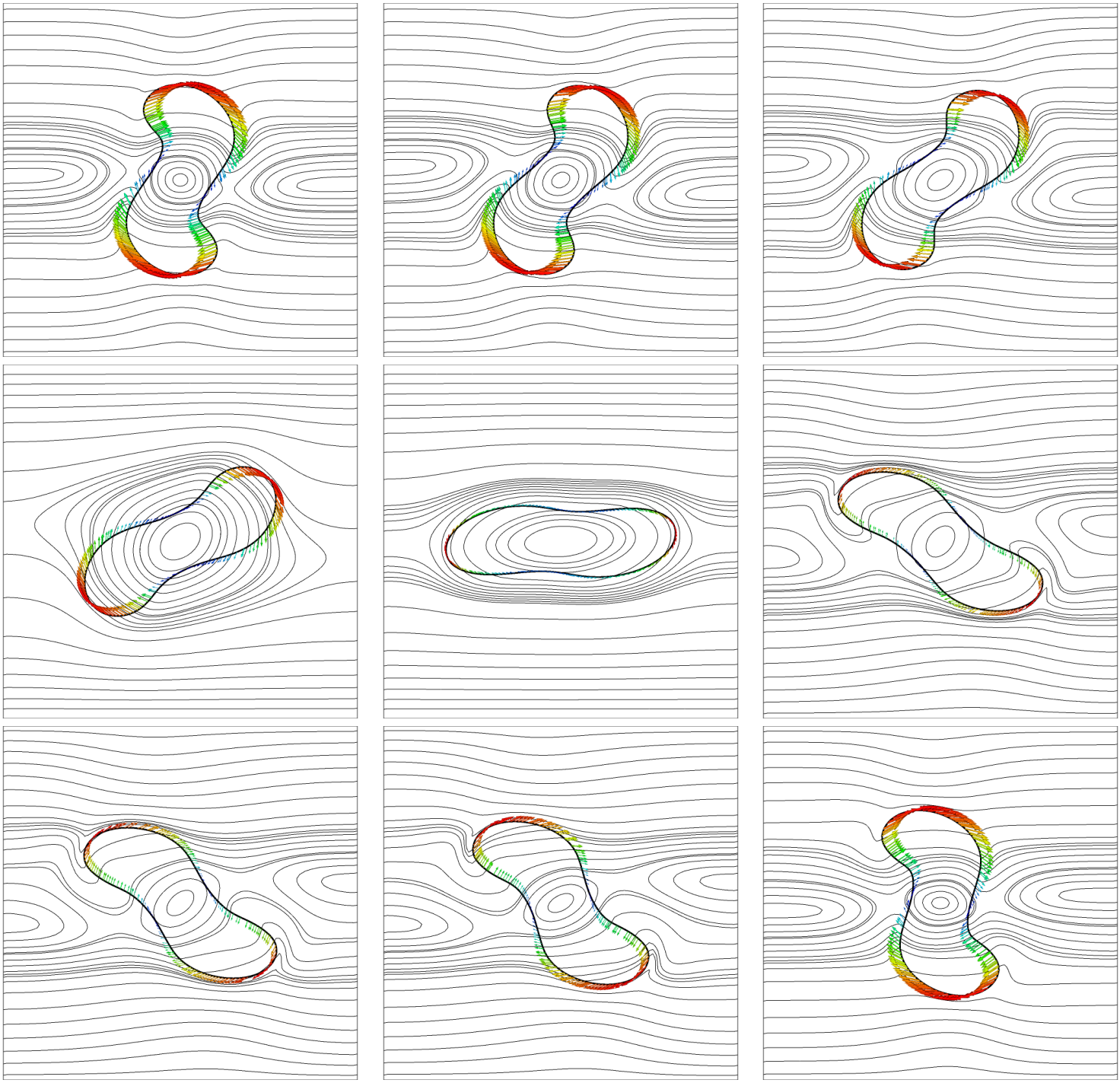

FIG. 8.19 – Lignes de courant pour la vésicule en mouvement de basculement et champ de vitesse sur Γ pour $\varpi = 1/2$, $\gamma = 0.62$, $\Upsilon = 10$ et $Re = 0.4$.

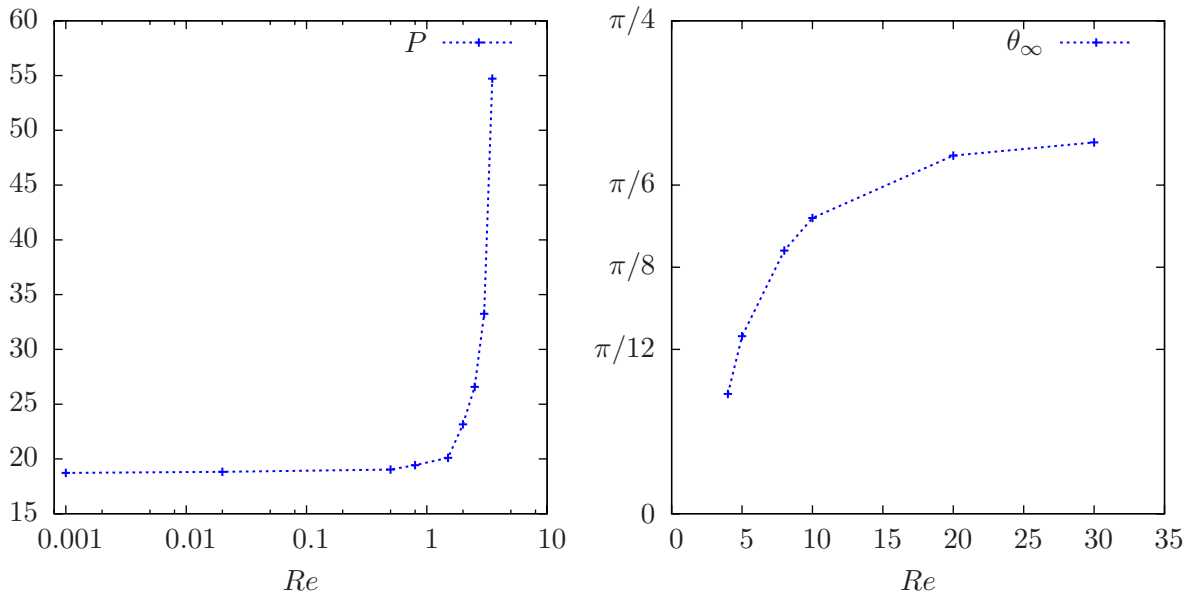

FIG. 8.20 – (a) : Évolution de la période de basculement pour les bas Reynolds. (b) : Évolution de l'angle de stationnaire pour les Reynolds élevée (mouvement de la chenile de char).

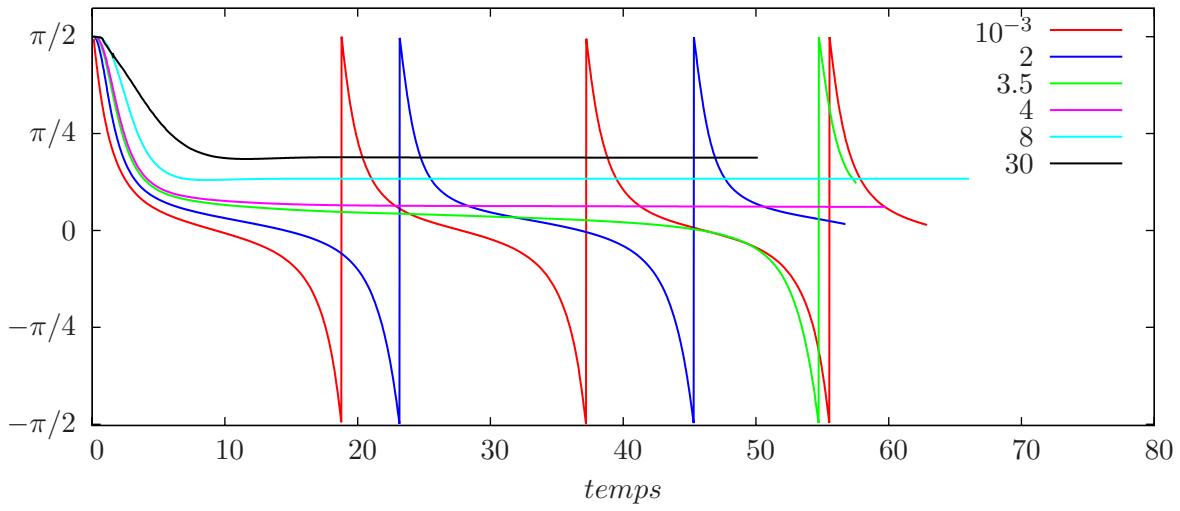

FIG. 8.21 – Évolution de l'angle de la vésicule ($\gamma = 0.82$) pour différents choix de Re.

Chapitre 9

Conclusion et perspectives

Sommaire

9.1 Conclusion **182**
9.2 Perspectives **183**

9.1 Conclusion

Ce travail, à l'interface entre les mathématiques appliquées et la physique, s'articule autours de la modélisation numérique des vésicules biologiques dans le sang. Nous avons pour cela adopté le modèle de Canham [13] et Helfrich [96] pour mimer le comportement des vésicles. En dépit de sa simplicité, ce modèle reste difficile à résoudre numériquement et très riche à exploiter. C'est ainsi que plusieurs outils de calcul numériques doivent être mis en place.

Dans un premier temps, une attention toute particulière a été portée sur l'élaboration d'un code de calcul permettant la modélisation de certains mouvements d'interface élémentaires.

Après avoir exposé dans l'introduction les enjeux de cette thèse ainsi que les motivations à choisir la méthode des lignes de niveaux dans notre calcul numérique, nous avons introduit dans un premier chapitre cette méthode dans le cadre des éléments finis. Nous avons évoqué le principal inconvénient de cette méthode au niveau de son implémentation numérique : il s'agit des pertes de masse couramment observées. Nous nous sommes intéressés à des problèmes d'advection afin de se focaliser sur ce problème et nous avons proposé un algorithme de résolution numériques avec des maillages adaptés en utilisant des multiplicateurs de Lagrange globaux. L'analyse de l'erreur dans le cadre des tests classiques de Zalesac et de Leveque a permis de révéler les performances de cet algorithme à remédier aux pertes de masse et à améliorer l'ordre de convergence de l'erreur.

Avant de nous attaquer au problème physique principal, nous nous sommes intéressés dans une première étape particulièrement aux mouvements par courbure moyenne et par diffusion de surface. Nous avons choisi de traiter par la suite le problème de la minimisation de l'énergie de courbure de Helfrich sans imposer les contraintes de la conservation du volume et de la surface caractéristiques des vésicules et nous avons proposé une formulation variationnelle pour chacun de ces problèmes. Ceci a permis de comparer les résultats numériques aux solutions théoriques exactes dans le cas de certains mouvements d'interfaces afin de valider cette première partie de ce travail.

La deuxième partie de cette thèse aborde les simulations des vésicules.

Le cinquième chapitre est consacré à l'étude numérique de l'équilibre statique des vésicules à travers la résolution d'une équation différentielle ordinaire. Ceci nous a permis de disposer d'une famille de solutions s'obtenant simplement comme solution d'une EDO et qui ont servi par la suite à une étude comparative avec les solutions obtenues dans le cadre des éléments finis.

Le sixième chapitre a fait l'objet d'une étude théorique d'une condition d'équilibre mécanique des vésicules. Nous nous sommes servi des outils de dérivation par rapport à la forme pour obtenir une équation d'Euler-Lagrange généralisée pour une fonctionnelle d'énergie plus générale que celle dépendant du carré de la courbure de Helfrich.

Nous avons présenté dans le septième chapitre un algorithme pour mimer l'équilibre des vésicules. Ceci a nécessité d'effectuer un contrôle *a posteriori* des multiplicateurs de Lagrange correspondant à la conservation du volume et de la surface. Nous avons pu valider ces résultats en comparant les solutions avec ceux du cinquième chapitre et en vérifiant que les pertes numériques sont inférieures à $10^{-5}\%$ de l'aire et du périmètre de références de la vésicule.

Enfin, nous avons développé un outil numérique efficace pour modéliser la dynamique d'une vésicule dans un écoulement de cisaillement. Les simulations ont montré, en premier lieu, que nous retrouvons certains résultats classiques et nous ont permis de prédire, en deuxième lieu, la dynamique des vésicules dans des écoulements avec un nombre de Reynolds supérieurs à 1. Ces

derniers résultats sont originaux, ils permettent d'ouvrir des voies prometteuses pour l'étude de la rhéologie du sang. Reste à voir des expériences physiques s'élaborer dans les laboratoires avec de tels nombres de Reynolds pour pouvoir comparer.

9.2 Perspectives

Ce travail est une première étape vers la compréhention de la rhéologie du sang.

Sur le plan de la physique, il serait intéressant de traiter dans un premier temps d'autres types de dynamiques tels que le cas des vésicules en écoulement de cisaillement près d'un substrat. Les résultats expérimentaux ont montré que, lors du mouvement de la chenille de char, les vésicules glissent et roulent. Par ailleurs, la déformabilité des vésicules génère une force de portance, d'origine purement visqueuse, qui les fait décoller du substrat. Les simulations numériques servent à déterminer une loi de dépendance entre la force de portance et la distance au substrat.
Sur le même plan, il serait intéressant d'étudier le passage des vésicules dans une bifurcation. Ces deux dynamiques posent le problème du traitement du contact vésicule/substrat dans le cadre de la méthode des lignes de niveau.

Afin de voir l'effet de la présence des vésicules sur le comportement réologique du sang, il est important d'augmenter la concentration des vésicules dans la dynamique. La difficulté qui réside dans ce problème est d'éviter l'interpénétration entre les différentes particules.
Par conséquent, on s'approche de l'objectif primordial de tout ce projet de recherche, il s'agit de faire le passage *micro-macro* et donc de trouver une loi de comportement du sang en augmentant la concentration des vésicules.

Sur le plan des mathématiques, plusieurs voix prometteuses sont à explorer. Il s'agit d'élaborer des estimations d'erreur *a priori* en maillages régulier et adapté des sous problèmes étudiés numériquement dans la première partie de cette thèse.
Il serait aussi intéressant de faire des estimations d'erreur *a posteriori* à s'en servir pour les adaptations de maillage.

Enfin, nous pouvons dire que nous sommes très loin d'avoir épuisé le problème et que ce travail ne représente qu'un premier pas sur une voie très prometteuse qui devrait permettre l'observation numérique des comportements originaux afin de prévoir la physique, ceci dans l'intérêt de coupler, à terme, ces études aux sciences biomédicales.

Annexe A

Équilibre statique des membranes en 3D axisymetrique

Afin de trouver les points selles des membranes en dimention trois, il faut faire la différentiation du lagrangien $\mathscr{L}$. On a :

$$\left[(H-H_0)^2\right]'_\psi(w) = 2\,H'_\psi(w)\,(H-H_0)\,,$$

$$\left[\left(1+w^2(r)\right)^{\frac{1}{2}}\right]'_\psi(w) = \frac{w(r)\psi}{(1+w^2(r))^{\frac{1}{2}}}\,.$$

Or,

$$\begin{aligned}\frac{\delta\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p)}{2\,\pi} &= \textstyle\int_0^{r_f} 2\,\delta(H)\,(H-H_0)\,\left(1+w^2(r)\right)^{\frac{1}{2}}\,r\,\mathrm{d}r \\ &\quad + \textstyle\int_0^{r_f}\left[(H-H_0)^2+\lambda\right]\,r\frac{w\psi}{(1+w^2(r))^{\frac{1}{2}}}\,\mathrm{d}r - p\int_0^{r_f} r^2\psi\,\mathrm{d}r\,.\end{aligned} \tag{A.1}$$

La normale est donnée par (6.46) :

$$\mathbf{n}(r,z) = \frac{1}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\begin{pmatrix} -w(r) \\ 1 \end{pmatrix}\,. \tag{A.2}$$

Calcul de la courbure $H(r)$

D'après (6.47), la courbure est donnée par :

$$\begin{aligned} H(r,z) &= \nabla_s.\,\mathbf{n} = \frac{1}{r}\partial_r(r\,n_r) + \partial_z n_z \\ &= -\,\partial_r\left(\frac{r\,w(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right) \\ &= -\,\frac{(w(r)+rw'(r))\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}} - \dfrac{rw^2(r)w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}}{1+w^2(r)} \\ &= -\,\frac{1}{(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{w(r)}{r} + \frac{w^3(r)}{r} + w'(r)\right]\,. \end{aligned} \tag{A.3}$$

Calcul de la dérivé $H'(r)$

$$
\begin{aligned}
H'(r) &= -\frac{r\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{3}{2}}\left(w'(r)+rw''(r)+w'(r)+3w'(r)w^2(r)\right)}{r^2\left(1+w(r)^2\right)^3} \\
&\quad + \frac{\left(rw'(r)+w(r)+w^3(r)\right)\left(\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{3}{2}}+3rw'(r)w(r)\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}}\right)}{r^2\left(1+w(r)^2\right)^3} \\
&= -\frac{r^2w''(r)\left(1+w(r)^2\right)+rw'(r)\left(1+w(r)^2\right)-w(r)\left(1+w(r)^2\right)^2-3r^2w'^2(r)w(r)}{r^2\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{5}{2}}} \\
&= \frac{-\left[\left(1+w(r)^2\right)w''(r)-3w(r)w'^2(r)+\frac{w'(r)}{r}\left(1+w(r)^2\right)-\frac{w(r)}{r^2}\left(1+w(r)^2\right)^2\right]}{\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{5}{2}}}.
\end{aligned}
$$

Calcul de la différentiation $H'_\psi(w)$

$$
\begin{aligned}
H'_\psi(w) &= -\frac{\left(r\psi'+\psi+3w^2(r)\psi\right)r\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{3}{2}}}{r^2\left(1+w(r)^2\right)^3} \\
&\quad + \frac{\left(rw'(r)+w(r)+w^3(r)\right)r\,3w(r)\psi\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{1}{2}}}{r^2\left(1+w(r)^2\right)^3} \\
&= -\frac{r\psi'\left(1+w(r)^2\right)+\psi\left(1+3w^2(r)\right)\left(1+w(r)^2\right)-3w(r)\left(rw'(r)+w(r)+w^3(r)\right)\psi}{r\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{5}{2}}} \\
&= -\frac{1}{\left(1+w(r)^2\right)^{\frac{5}{2}}}\left[\left(1+w(r)^2\right)\psi'-3w(r)w'(r)\psi+\frac{1}{r}\left(1+w(r)^2\right)\psi\right].
\end{aligned}
$$

Éxtraction de l'EDO en $w(r)$

On note les trois termes de la différentiation (A.1) respectivement par T_1, T_2, T_3 qu'on calcule chacun à part.

$$
\begin{aligned}
T_1 &= -\int_0^{r_f}\frac{2r\,(H-H_0)}{\left(1+w(r)^2\right)^2}\left[\left(1+w(r)^2\right)\psi'-3w(r)w'(r)\psi+\frac{1}{r}\left(1+w(r)^2\right)\psi\right]\mathrm{d}r \\
&= -\left[\frac{2r\,(H-H_0)}{\left(1+w(r)^2\right)}\psi\right]_0^{r_f}+\int_0^{r_f}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{2r\,(H-H_0)}{\left(1+w(r)^2\right)}\right]\psi\,\mathrm{d}r \\
&\quad -\int_0^{r_f}\frac{2\,(H-H_0)}{\left(1+w(r)^2\right)}\psi\,\mathrm{d}r+\int_0^{r_f}\frac{6rw(r)w'(r)\,(H-H_0)}{\left(1+w(r)^2\right)^2}\psi\,\mathrm{d}r\,.
\end{aligned}
$$

Le premier terme dans l'équation précédente s'annule car $w(r_f) = -\infty$. De plus,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{2r\ (H-H_0)}{(1+w(r)^2)}\right] &= \frac{[2\,(H-H_0)\ +2rH']\ \left(1+w(r)^2\right)\ -2r(H-H_0)\,2w(r)w'(r)}{(1+w(r)^2)^2}\\ &= \frac{2rH'}{(1+w(r)^2)}+\frac{2(H-H_0)\left(1\ +w^2(r)\,2rw(r)w'(r)\right)}{(1+w(r)^2)^2}\,.\end{aligned}$$

Donc

$$T_1 = \int_0^{r_f}\frac{2rH'}{(1+w(r)^2)}\psi\,\mathrm{d}r + \int_0^{r_f}\frac{2rw(r)w'(r)\,(H-H_0)}{(1+w(r)^2)^2}\,\psi\,\mathrm{d}r\,. \tag{A.4}$$

Il reste à évaluer l'intégrant de T_1 en utilisant l'expréssion de $H'(r)$ précédemment calculée :

$$\begin{aligned}\frac{2rH'}{(1+w(r)^2)}+\frac{2rw(r)w'(r)\,(H-H_0)}{(1+w(r)^2)^2} &= -\frac{2rw''(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}+\frac{6rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}}-\frac{2w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\\ &\quad+\frac{2w(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}}-\frac{2rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}}-\frac{2w'(r)w^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\\ &\quad-\frac{2H_0rw(r)w'(r)}{(1+w(r)^2)^2}\,.\end{aligned} \tag{A.5}$$

Afin d'évaluer T_2, on explicite l'expression de $H(r)$ (A.3) :

$$(H-H_0)^2+\lambda = -\frac{\left(w'(r)+\dfrac{w(r)}{r}\left(1+w(r)^2\right)\right)^2}{(1+w(r)^2)^3}+\frac{2H_0\left(w'(r)+\dfrac{w(r)}{r}\left(1+w(r)^2\right)\right)}{(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}}+\left(H_0^2+\lambda\right)\,.$$

Par conséquent, on peut évaluer T_2 :

$$\begin{aligned}T_2 &= \int_0^{r_f}\left[\frac{rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}}+\frac{2w'(r)w^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}+\frac{w^3(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}}\right.\\ &\quad\left.+\frac{2H_0rw'(r)w(r)}{(1+w(r)^2)^2}+\frac{2H_0w^2(r)}{(1+w(r)^2)}+\frac{\left(H_0^2+\lambda\right)rw(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}\right]\psi\,\mathrm{d}r\,.\end{aligned}$$

En sommant les expressions respectives de T_1, T_2, T_3 dans (A.1), on obtient :

$$\begin{aligned}\frac{\delta\mathscr{L}(\Omega;\lambda,p)}{2\,\pi} &= \int_0^{r_f}\left[-\frac{2rw''(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}+\frac{5rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}}-\frac{2w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}\right.\\ &\quad\left.+\frac{2w(r)\ +w^3(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}}+\frac{2H_0w^2(r)}{(1+w(r)^2)}+\frac{\left(H_0^2+\lambda\right)rw(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}-pr^2\right]\psi\,\mathrm{d}r\,.\end{aligned}$$

Par conséquences, les points selles du problème vérifient l'équation d'Euler-Lagrange suivante :

$$\begin{aligned}\frac{2rw''(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}} &= \frac{5rw(r)w'^2(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{7}{2}}}-\frac{2w'(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{5}{2}}}+\frac{2w(r)\ +w^3(r)}{r\,(1+w(r)^2)^{\frac{3}{2}}}\\ &\quad+\frac{2H_0w^2(r)}{(1+w(r)^2)}+\frac{\left(H_0^2+\lambda\right)rw(r)}{(1+w(r)^2)^{\frac{1}{2}}}-pr^2\,.\end{aligned} \tag{A.6}$$

Annexe B

Quelques rappels utiles

B.1 Formulaire

On considère les champs scalaires f et g et un champs vectoriel $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_z)$. Soit une surface Γ régulière, orientable et fermée où $\mathbf{n}$ est la normale sortante unitaire à Γ.

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x} \\ \dfrac{\partial f}{\partial y} \\ \dfrac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad \nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} & \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} & \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{u}_x}{\partial x} & \dfrac{\partial \mathbf{u}_x}{\partial y} & \dfrac{\partial \mathbf{u}_x}{\partial z} \\ \dfrac{\partial \mathbf{u}_y}{\partial x} & \dfrac{\partial \mathbf{u}_y}{\partial y} & \dfrac{\partial \mathbf{u}_y}{\partial z} \\ \dfrac{\partial \mathbf{u}_z}{\partial x} & \dfrac{\partial \mathbf{u}_z}{\partial y} & \dfrac{\partial \mathbf{u}_z}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

$$\nabla.\mathbf{u} = \mathrm{tr}(\nabla \mathbf{u}) = \frac{\partial \mathbf{u}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{u}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{u}_z}{\partial z}. \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned} \nabla_s f &= (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})\, \nabla f = \nabla f - (\mathbf{n}.\nabla f)\, \mathbf{n}. && \text{(B.2)} \\ \nabla_s.\mathbf{u} &= (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) : \nabla \mathbf{u} = \nabla.\mathbf{u} - ((\nabla \mathbf{u}).\mathbf{n}).\mathbf{n}. && \text{(B.3)} \\ \Delta_s f &= \nabla_s.\,(\nabla_s f)\,. && \text{(B.4)} \end{aligned}$$

$$\nabla_s.\,(f\mathbf{u}) = f\nabla_s.\mathbf{u} + \mathbf{u}.\nabla_s f\,. \tag{B.5}$$

$$\nabla_s\,(fg) = f\nabla_s g + g\nabla_s f\,. \tag{B.6}$$

B.2 Formule de Green pour les opérateurs surfaciques

On considère une surface Γ régulière, orientable et fermée de dimension $(d-1)$ et soient deux fonctions $g \in H^1(\Gamma)$ et $\mathbf{v} \in H^1(\Gamma)^d$. On note $\mathbf{n}$ la normale sortante unitaire à Γ, alors :

$$\int_\Gamma \nabla_s g.\mathbf{v}\ \mathrm{d}s + \int_\Gamma g\nabla_s.\mathbf{v}\ \mathrm{d}s - \int_\Gamma g(\nabla.\mathbf{n})\mathbf{v}.\mathbf{n}\ \mathrm{d}s = 0\,. \tag{B.7}$$

Bibliographie

[1] D. Adalsteinsson and J.A. Sethian. A Level Set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography II : Three-dimensional simulations. *Journal of Computational Physics*, 122(2) :348–366, 1995.

[2] D. Adalsteinsson and J.A. Sethian. A Level Set approach to a unified model for etching, deposition, and lithography III : Re-deposition, re-emission, surface diffusion, and complex simulations. *Journal of Computational Physics*, 138(1) :193–223, 1997.

[3] A.J.Bernoff, A.L. Bertozzi, and T.P. Witelski. Axisymetric surface diffusion : Dynamics and stability of self-similar pinch-off. *J.*, 1998.

[4] L. C. Wrobel ; M. H. Aliabadi. *The Boundary Element Method.* New Jersey : Wiley, 2002.

[5] G. Allaire and F. Jouve. Minimum stress optimal design with the Level Set method. *International Journal of Boundary Elements and Applications (accepted)*, 2007.

[6] S.M. Allen and J.W. Cahn. A microscopic theory for antiphase moundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metal.*, 27 :1085–1095, 1979.

[7] W.T. Ang. *A Beginner's Course in Boundary Element Methods.* Universal Publishers, 2007.

[8] T. K.-K. Au and T. Y.-H. Wan. Pysical parameters for biconcave shape vesicles. *Physical Review Letters, February 2*, 2008.

[9] P. K. Banerjee. *The Boundary Element Methods in Engineering.* McGraw-Hill College, 1994.

[10] G. Barles. *Solutions de Viscosite des Equations de Hamilton-Jacobi.* Springer-Verlag, Berlin, 1966.

[11] G. Beer, I. Smith, and C. Duenser. *The Boundary Element Method with Programming : For Engineers and Scientists.* Spinger, 2008.

[12] T. Biben, K. Kassner, and C. Misbah. Phase-Field approach to three-dimensional vesicle dynamics. *Phys. Rev. E*, 72, 2005.

[13] P.B. Canham. The minimum energy of bending as a possible explanation of the biconcave shape of the human red blood cell. *J. Theor. Biol.*, 26 :61–81, 1970.

[14] I. Cantat. *Dynamique de vésicules en adhésion.* Thèse de l'université Joseph Fourier de Grenoble, 1999.

[15] P. Carles and S. Popinet. Viscous non-linear theory of Richtmyer-Meshkov instability. *Physics of Fluids, Letters, 13*, 7 :1833–1836, 2001.

[16] G. Chen, C. Kharif, S. Zaleski, and J. Li. Two dimensional Navier-Stokes simulations of breaking waves. *Physics of Fluids*, 11 :121–133, 1999.

[17] Y.G. Chen, Y. Giga, and S. Goto. Uniqueness and existence of viscosity solutions of generalized mean curvature flow equations. *J. Differential Geo*, 33 :749–786, 1991.

[18] B.D. Coleman, R.S. Falk, and M. Moakher. Stability of cylindrical bodies in the theory of surface diffusion. *Physica D*, 89 :123–135, 1995.

[19] G.-H. Cottet and E. Maitre. A Level-Set formulation of Immersed Boundary methods for fluid-structure interaction problems. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 338 :581–586, 2004.

[20] G.-H. Cottet and E. Maitre. A Level-Set method for fluid-structure interactions with immersed surfaces. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 16(3) :415–438, 2006.

[21] G.-H. Cottet, E. Maitre, and T. Milcent. Eulerian formulation and Level-Set models for incompressible fluid-structure interaction. *M2AN*, 42 :471–492, 2008.

[22] M.G. Crandall, H. Ishii, and P.-L. Lions. User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations. *Amer. Math. Soc. Bull.*, 27 :1–67, 1992.

[23] S. Deparis, M. Discacciati, G. Fourestey, and A. Quarteroni. *Heterogeneous domain decomposition methods for fluid structure interaction problems, Technical report.* EPFL-IACS report, 2005.

[24] H.J. Deuling and W.Helfrich. The curvature elasticity of fluid membranes : a catalog of vesicle shapes. *J. Phys. (Paris)*, 37 :1335–1345, 1976.

[25] H.J. Deuling and W.Helfrich. Red blood cell shapes as explained on the basis of curvature elasticity. *Biophys. J.*, 16 :861–868, 1976.

[26] H.J. Deuling and W.Helfrich. A theoretical explanation for the myelin shapes of red blood cells. *Blood Cells*, 3 :713–720, 1977.

[27] Q. Du, C. Liu, and X. Wang. A Phase Field approach in the numerical study of the elastic bending energy for vesicle membranes. *J. of Comput. Phys.*, 198 :450–468, 2004.

[28] C.M. Elliott. *Approximation for curvature dependant interface motion.* University Press, 1992.

[29] C.M. Elliott and D.A. French. Numerical studies of the Cahn-Hilliard equation for phase separation. *IMA J. Appl. Math.*, 38 :97–128, 1987.

[30] D. Enright, R. Fedkin, J. Ferziger, and I. Mitchell. A hybrid partical Level Set method for improved interface capturing. *J. Comput. Phys.*, 183 :83–116, 2002.

[31] J. Escher, U.F. Mayer, and G. Simonett. The surface diffusion flow for immersed hypersurfaces. *SIAM J. Math. Anal.*, 29(6) :1419–1433, 1998.

[32] L.C. Evans and R. Gariepy. *Measure theory and fine properties of functions.* CRC Press, 1991.

[33] Y.C. Evans and J. Spruck. Motion of Level Sets by mean curvature. *J. Differential Geo*, 33(8) :635–681, 1991.

[34] P. Frolkovi and K. Mikula. Flux-based Level Set method : A Finite Volume method for evolving interfaces. *App. Numer. Math.*, 57(4) :436–454, 2007.

[35] C. Geuzaine and J-F. Remacle. Gmsh : A three-dimensional Finite Element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, Version 2.4.2. `http://www.geuz.org/gmsh/`, 2009.

[36] W.C. Gibson. *The Method of Moments in Electromagnetics.* Chapman and Hall/CRC, 2008.

[37] R.A. Gingold and J.J. Monaghan. Smoothed Particle Hydrodynamics, theory and application to non-spherical stars. *Royal Astronomical Society*, 181 :375–389, 1977.

[38] R. Glowinski. *Numerical methods for nonlinear variational problems.* Spinger-Verlag, New York, 1984.

[39] R. Glowinski and P. Le Tallec. *Augmented lagrangians and operator-splitting methods in nonlinear mecanics.* SIAM, Philadelphia, 1989.

[40] M.A. Grayson. A short note on the evolution of a surface by its mean curvature. *J. Duke Math*, 58 :555–558, 1989.

[41] D. Gueyffier and S. Zaleski. Formation de digitations lors de l'impact d'une goutte sur un film liquide. *Comptes Rendus Acad. Sci. Paris série II b*, 326 :839–844, 1998.

[42] F. Hecht. BAMG : Bidimensional anisotropic mesh generator. `http://www.rocq.inria.fr/gamma/cdrom/www/bamg/eng.htm`, 1998.

[43] F. Higuera and J. Jimenez. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhys. Lett. 9*, 663, 1989.

[44] F. Higuera, S.Succi, and R. Benzi. Lattice gas dynamics with enhanced collisions. *Europhys. Lett.9*, 345, 1989.

[45] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume Of Fluid (VOF) methods for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, 39 :201–225, 1981.

[46] Zhan-Ning Hu. New approach on the general shape equation of axisymetric vesicles. *Mod. Phys. Lett. B*, 1999.

[47] W. Huang. Metric tensors for anisotropic mesh generation. *Journal of Computational Physics*, 204 :633–665, 2004.

[48] E. Huisken. Flow by mean curvature of convex surfaces into sheres. *J. Differential Geo*, 20 :237–266, 1984.

[49] J.Hu and Z. Ou-Yang. Shape equations for the axisymetric vesicles. *Phys.Rev.E*, 47 :461–467, 1993.

[50] G.-S. Jiang and D. Peng. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21 :2126–2143, 2000.

[51] C. Josserand, L. Lemoyne, R. Troeger, and S. Zaleski. Droplet impact on a dry surface : triggering the splash with a small obstacle. *Journal of fluid mechanics*, 524 :47–56, 2005.

[52] C. Josserand and S. Zaleski. Droplet splashing on a thin liquid film. *Phys. Fluids*, 15 :1650–1657, 2003.

[53] Frank Julicher and Udo Seifert. Shape equations for axisymmetric vesicles : A clarification. *Phys.Rev.E*, 49(5) :4728–4731, 1994.

[54] S. Keller and R. Skalak. Motion of a tank-treading ellipsoidal particle in a shear flow. *J. Fluid Mech.*, 120 :27–47, 1982.

[55] B.A. Klimpke. *Hybrid Magnetic Field Solver Using a Combined Finite Element/Boundary Element Field Solver.* U.K. Magnetics Society Conference, 2003.

[56] E. Kuwert and R. Schatzle. The Willmore flow with small initial energy. *Journal of Differential Geometry*, 57 :409–441, 2001.

[57] A. Laadhari, C. Misbah, and P. Saramito. On the equilibrium equation for a generalized biological membrane energy by using a shape optimization approach. *Physica D*, 239 :1567–1572, 2010.

[58] A. Laadhari, P. Saramito, and C. Misbah. Improving the mass conservation of the Level Set method in a Finite Element context. *Comptes rendus mathématiques, Ser. I*, 348 :535–540, 2010.

[59] B. Lafaurie, C. Nardone R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *J. Comp. Phys.*, 113 :134–147, 1994.

[60] R.J. Leveque. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33 :627–665, 1996.

[61] P.L. Lions and M.G. Crandall. Condition d'unicité pour les solutions généralisées des équations de Hamilton-Jacobi du premier ordre. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 1981.

[62] L.B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical Journal*, 82 :1013–1024, 1977.

[63] J. C. Luke and J. I. Kaplan. On the theoretical shapes of bilipid vesicles under conditions of increasing membrane area. *BIOPHYs. J.*, 25 :107–111, 1979.

[64] M.-A. Mader, V. Vitkova, M. Abkarian, A. Viallat, and T. Podgorski. Dynamics of viscous vesicles in shear flow. *The European Physical Journal E : Soft Matter and Biological Physics*, 19 :389–397, 2006.

[65] B. Maury. Characteristics ale method for the 3d Navier-Stokes equations with a free surface. *Int. Journal of Comp. Fluid Dyn.*, 6 :175–188, 1996.

[66] B. Maury and R. Glowinski. Fluid particle flow : a symmetric formulation. *Comptes rendus acad. scien. Paris, Ser. I*, 324 :1079–1084, 1997.

[67] U.F. Mayer and G. Simonett. A numerical scheme for axisymmetric solutions of curvature driven free boundary problems, with applications to the Willmore flow. *Interface Free Boundaries*, 4 :89–109, 2002.

[68] Uwe F. Mayer. Numerical solutions for the surface diffusion flow in three space dimensions. *Computational and Applied Mathematics*, 2001.

[69] B. Merriman, J. Bence, and S. Osher. Diffusion generated motion by mean curvature. *J.E. Taylor, editor, Computational rystal Growers Workshop, American Mathematical society, Providence, Rhode Island*, pages 73–83, 1992.

[70] L. Miao, U. Seifert, M. Wortis, and H. Dobereiner. Budding transitions of fluidbilayer vesicles - the effect of area-difference elasticity. *Phys. Rev. E*, 49 :5389–5407, 1994.

[71] J.J. Monaghan. An introduction to sph. *Computer Physics Communications*, 48 :88–96, 1988.

[72] J.P. Morris, P.J. Fox, and Y Zhu. Modeling low Reynolds number incompressible flows using sph. *Journal of Computational Physics*, 136 :214–226, 1997.

[73] F. Murat and J. Simon. Quelques résultats sur le contrôle par un domaine géométrique. Technical Report LA 189, Lab. d'Analyse Numérique, Univ. Paris VI, 1974.

[74] C Ollivier-Gooch. GRUMMP : Generation and Refinement of Unstructured, Mixed-Element Meshes in Parallel. `http://tetra.mech.ubc.ca/GRUMMP/`, 2010.

[75] E. Olsson, G. Kreiss, and S. Zahedi. A conservative Level Set method for two phase flow II. *J. Comput. Phys.*, 225 :785–807, 2007.

[76] S. Osher and R. Fedkiw. *The Level Set Method and Dynamic Implicit Surfaces.* Springer-Verlag, New York, 2003.

[77] S. Osher and R. Fedkiw. Level Set methods : An overview and some recent results. *J.*, 2005.

[78] S. Osher and J.A. Sethian. Front propaging with curvature deppend speed : Agorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79(12), 1988.

[79] S. Popinet and S. Zaleski. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 30 :775–793, 1999.

[80] S. Popinet and S. Zaleski. Bubble collapse near a solid boundary : A numerical study of the influence of viscosity. *J. Fluid Mech.*, 464 :137–163, 2002.

[81] C. Pozrikidis. *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow.* Cambridge University Press, 1992.

[82] A. Quarteroni and L. Formaggia. *Mathematical Modelling and Numerical Simulation of the cardiovascular System, P.G Ciarlet et J.L. Lions editor, Modelling of Living Systems, Handbook of Numerical Analysis Series.* Elsevier, Amsterdam, North-Holland, 2004.

[83] S.J. Ruuth, B. Merriman, J. Xin, and S. Osher. Diffusion-generated motion by mean curvature for filaments. *J. Nonlinear Science*, 11(6) :473–493, 2001.

[84] S.J. Ruuth and B.T.R. Wetton. A simple scheme for volume-preserving motion by mean curvature. *J. Scientific Computing, special issue dedicated to Stan Osher's 60th birthday*, 19(1) :373–384, 2003.

[85] P. Saramito, N. Roquet, and J. Étienne. Rheolef : A Finite Element environment, i.e. some `C++` classes and unix commands. `http://www-lmc.imag.fr/lmc-edp/Pierre.Saramito/rheolef`, 2008.

[86] U. Seifert. Configurations of fluid membranes and vesicles. *Adv. in Phys.*, 46 :13–137, 1997.

[87] J. A. Sethian. *Level set methods : evolving interfaces in geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science.* Cambridge University Press, UK, 1996.

[88] J.A. Sethian. *Level Set Methods and Fast Marching Methods.* Cambridge University Press, 1999.

[89] J. Simon. Differentiation with respect to the domain in boundary value problems. *J. Num. Funct. Anal. Optim.*, 2(7–8) :649–687, 1980.

[90] L. Simon. Existence of surfaces minimizing the Willmore functional. *Comm. Anal. Geom*, 1 :281–326, 1993.

[91] G. Simonett. The Willmore flow near spheres. *Differential and Integral Equations*, 14(8) :1005–1014, 2001.

[92] M. Sussman and E. Fatemi. An efficient, interface preserving Level Set re-distancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. *SIAM J. Sci. Comput*, 20(4) :1165–1191, 1998.

[93] S. A. Vavasis. Qmg : Mesh generation and related software. `http://www.cs.cornell.edu/Info/People/vavasis/qmg-home.html`, 1995.

[94] V. Vitkova, G.Coupier, M.-A. Mader, B. Kaoui, C. Misbah, and T. Podgorski. Tumbling of viscous vesicles in a linear shear field near a wall. *Journal of optoelectronics and advanced materials*, 11 :1218–1221, 2009.

[95] A.J. Wagner. *A Practical Introduction to the Lattice Boltzmann Method.* North Dakota State University, 2008.

[96] W.Helfrich. Elastic properties of lipid bilayers : theory and possible experiments. *Z. Naturforsch. Teil C*, 28 :693–703, 1973.

[97] W. Wintz, H. Dobereiner, and U. Seifert. Starfish vesicles. *Europhys. Lett.*, 33 :403–408, 1996.

[98] S. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected trasport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, 31 :335–362, 1979.

[99] Wei-Mou Zheng and Jixing Liu. Helfrich shape equation for axisymmetric vesicles as a first integral. *Phys. Rev. E*, 48(4) :2856–2860, 1993.

[100] O.-Y. Zhong-can and W. Helfrich. Bending energy of vesicle membranes. General expression for the first, second and third variation of the shape energy and application to spheres and cylinders. *Phys. Rev. A*, 39 :52–80, 1989.

[101] O.-Y. Zhong-can and W. Helfrich. Bending energy of vesicle membranes : general expressions for the first, second and third variation of the shape energy and applications to spheres and cylinders. *Phys. Rev. A*, 39(10) :5280–5288, 1989.