

Interaction d'une vésicule avec des parois solides à faible nombre de Reynolds

Roberto Trozzo^a, Gwenn Boedec^b, Marc Jaeger^a, Marc Leonetti^b

a. M2P2, UMR 7340, Aix-Marseille Université, Ecole Centrale Marseille, Technopôle de Château-Gombert, 38, Rue Frédéric Joliot-Curie, 13451 MARSEILLE

b. IRPHE, UMR 7342, Aix-Marseille Université, Ecole Centrale Marseille, Technopôle de Château-Gombert, 49, Rue Frédéric Joliot-Curie, 13384 MARSEILLE

Résumé :

Les vésicules sont des gouttes immergées dans un fluide externe visqueux et entourées par une membrane imperméable constituée de lipides. Leur dynamique est gouvernée principalement par les forces de flexion, la préservation de la surface membranaire et du volume interne sur l'échelle de temps des expériences. Pour une meilleure compréhension de l'interaction des vésicules avec des surfaces, nous avons étudié le comportement d'une vésicule à proximité de parois rigides en utilisant la méthode des éléments de frontière (BEM), particulièrement adaptée aux écoulements de Stokes. En particulier nous avons focalisé nos études sur la dynamique du transport dans un capillaire d'une vésicule soumise à un écoulement de Poiseuille.

Abstract :

Vesicles are drops immersed in an external viscous fluid and surrounded by an impermeable lipid membrane. Their dynamics is mainly governed by bending forces, the conservation of the membrane surface and the internal volume on the timescale of experiments. For a better understanding of the interaction of vesicles with solid structures, we have studied the behavior of a vesicle near rigid walls using the boundary element method (BEM), particularly suitable for Stokes flows. In particular, we have focused our studies on the dynamics of the transport in a capillary of a vesicle subjected to Poiseuille flow.

Mots clefs : vésicule ; micro-fluidique ; interaction avec paroi

1 Introduction

Les vésicules sont des micro-gouttes (taille typique $\sim 20\mu m$) qui sont entourées d'une membrane phospholipidique. Les phospholipides qui composent la membrane présentent une tête polaire hydrophile et une queue carbonée hydrophobe. Lorsqu'ils sont mis en solution aqueuse, ces phospholipides s'organisent spontanément en bicouche fermée, les têtes hydrophiles vers les milieux aqueux et les queues hydrophobes vers l'intérieur de la bicouche. Cette structure moléculaire particulière confère à la membrane des propriétés mécaniques singulières : elle se comporte comme un fluide bidimensionnel incompressible, tout en présentant une résistance à la flexion. Du fait de ces propriétés particulières, et aussi de la proximité de ces membranes modèles avec les membranes biologiques, les vésicules suscitent l'intérêt des physiciens depuis plusieurs décennies. Les propriétés à l'équilibre thermodynamique ainsi que les fluctuations thermiques autour de cet équilibre sont désormais bien caractérisées [1]. L'attention est maintenant portée sur les propriétés hors-équilibre de ces membranes, en présence d'un forçage extérieur (d'origine électrostatique, chimique, hydrodynamique par exemple). En particulier, la déformation et la dynamique d'une ou plusieurs vésicules sollicitées hydrodynamiquement ont suscité de nombreuses études ([2] et références incluses). Une méthode numérique originale basée sur la méthode BEM a été développée et validée pour la simulation d'une vésicule immergée dans un

fluide infini [3, 4], avec une attention particulière aux formes de sédimentation [3]. Dans cet article, on s'intéresse au contraire au forçage hydrodynamique en milieu confiné où la proximité d'une paroi est un facteur déterminant. Plus précisément, nous considérons ici le cas du transport d'une vésicule dans un capillaire sous l'action d'un écoulement de Poiseuille en configuration axisymétrique. Contrairement au cas de Poiseuille en milieu infini [5], cette configuration n'a pas attirée que très peu d'attention [6] alors que c'est un écoulement dont l'intérêt pour l'analyse du comportement mécanique membranaire a largement été démontré sur le cas des capsules [7]. Dans ce contexte, une comparaison vésicule-capsule serait certainement intéressante pour discriminer le rôle de l'incompressibilité surfacique et de la flexion vis-à-vis de l'élasticité membranaire. La raison probable de la quasi-inexistence d'études pour cette configuration, notamment en configuration axisymétrique (aucune étude à notre connaissance), réside sans doute dans l'effort de développement d'une fonction de Green axisymétrique considérant la paroi et combinée à une intégration numérique efficace et précise. Nous avons implémenté cette version dans notre code consacré aux vésicules et présentons ici les premiers résultats.

2 Présentation du problème

La description de la déformation de la vésicule est un problème d'interaction fluide-structure en régime de Stokes, en raison de l'échelle microscopique. Il est ainsi gouverné par l'équation de Stokes pour l'écoulement des fluides ambiants interne (i) et externe (e) :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{i,e} = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u}^{i,e} = 0 \quad (1)$$

avec la condition de continuité des vitesses à l'interface membranaire :

$$\mathbf{u}^e(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^i(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_\Gamma \quad (2)$$

où Γ désigne l'interface, \mathbf{u}_Γ le champ de vitesse des points de la membrane et $\boldsymbol{\sigma}^{i,e} = -p^{i/e}\mathbf{I} + \eta(\nabla\mathbf{u}^{i/e} + \nabla^T\mathbf{u}^{i/e})$ est le tenseur des efforts fluides. En cas de contraste de densité entre l'intérieur et l'extérieur de la vésicule, l'action de la gravité peut être facilement considérée dans le terme de pression.

La membrane phospholipidique est prise en compte par son action mécanique sur les fluides environnants avec :

- une condition d'incompressibilité surfacique $\nabla_s \cdot \mathbf{u}_\Gamma = 0$, conduisant à une tension surfacique γ .
- une densité surfacique de force :

$$\mathbf{f}^m = \kappa [2\Delta_s H + 4H(H^2 - K)] \mathbf{n} - 2\gamma H \mathbf{n} + \nabla_s \gamma \quad (3)$$

où H est la courbure moyenne, K la courbure gaussienne, Δ_s l'opérateur de Laplace-Beltrami sur la surface, $\kappa \sim 10^{-19}\text{J}$ le module de flexion et \mathbf{n} la normale sortante à la surface membranaire. Les termes en γ traduisent l'action de la tension surfacique et les autres termes la résistance à la flexion.

La membrane est en équilibre quasi-statique avec les efforts exercés par les milieux fluides qui l'entourent :

$$[[\sigma^e - \sigma^i]] \cdot \mathbf{n} + \mathbf{f}^m = \mathbf{0} \quad (4)$$

Le problème peut être adimensionné en utilisant les grandeurs de référence suivantes :

- $l_{ref} = R_0$, rayon de la sphère de même volume ;
- $t_{ref} = \eta R_0^3 / \kappa$ temps visqueux d'amortissement d'une perturbation de flexion ;
- $f_{ref} = \kappa / R_0^3$ densité typique des efforts de flexion ;

Soit (le tilde indique une variable adimensionnée) :

$$\mathbf{x} = R_{ref} \tilde{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{t} = t_{ref} \tilde{\mathbf{t}}, \quad \mathbf{u} = R_{ref} / t_{ref} \tilde{\mathbf{u}}, \quad \mathbf{f} = f_{ref} \tilde{\mathbf{f}}, \quad \gamma = f_{ref} R_{ref} \tilde{\gamma} \quad (5)$$

Dans la suite, seules des variables adimensionnelles sont utilisées, et le tilde est omis pour plus de clarté.

Les nombres sans dimension qui pilotent le problème sont :

– l'excès d'aire Δ , qui mesure l'aire supplémentaire par rapport à la sphère de même volume :

$$A = (4\pi + \Delta) R_0^2 \quad (6)$$

Une vésicule sphérique ($\Delta = 0$) de volume et de surface fixés se comportera comme une sphère rigide. Pour pouvoir la déformer, il faut la "dégonfler", et c'est ce dégonflement qui est mesuré par le paramètre Δ .

- le nombre de capillaire de flexion $Ca = \eta u_m R_0^2 / \kappa$, où u_m désigne l'intensité de la vitesse moyenne de l'écoulement de Poiseuille imposé, qui traduit l'intensité de la sollicitation qui s'exerce sur la vésicule. Il remplace le nombre de capillaire $Ca = \eta V / \phi$, où ϕ est la tension de surface utilisée habituellement pour les gouttes.
- le rapport $\lambda = R_0 / \sigma_c$ entre la taille typique R_0 de la vésicule et le rayon σ_c du capillaire.

3 Méthode numérique

La méthode numérique est basée sur la méthode BEM avec une représentation C^0 de la surface par un maillage en éléments triangulaires pour les études 3D [3], ou par des segments pour la version axisymétrique [8]. Cette méthode est très intéressante parce que elle exploite la structure de l'équation de Stokes pour ramener la résolution du problème volumique à un problème portant uniquement sur les frontières du domaine. L'intérêt de cette méthode est qu'elle permet de s'affranchir d'un maillage volumique et de représenter uniquement l'interface, ce qui simplifie énormément la problématique de suivi de celle-ci. Ainsi elle permet un suivi lagrangien avec une grande précision.

Pour l'étude des interactions avec une paroi, nous ne considérons ici que les configurations axisymétriques sans contraste de viscosité. La composante α du champ de vitesse en tout points \mathbf{x}_0 de la membrane, est déterminé entièrement par la distribution de force sur l'interface [9] :

$$u_\alpha(\mathbf{x}_0) - u_\alpha^\infty(\mathbf{x}_0) = -\frac{1}{8\pi\eta} \int_\Gamma M_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}) f_\beta(\mathbf{x}) dl(\mathbf{x}) \quad (7)$$

où Γ est la trace de l'interface membranaire dans le plan (r, z) , $dl = rdz$ l'élément de surface, f_β la composante β du saut d'efforts visqueux à l'interface, u_α^∞ la composante α du champ de vitesse extérieur imposé et $M_{\alpha\beta}$ désigne l'intégration suivant l'angle azimutal de la fonction de Green tridimensionnelle.

Elle se décompose en une contribution d'espace libre $M_{\alpha\beta}^{FS}$ plus une correction $M_{\alpha\beta}^c$ permettant de considérer l'action de confinement de la paroi. Cette dernière est donnée par [10] :

$$\begin{aligned} M_{zz}^c &= \sigma_0 \int_0^\infty \left[\begin{array}{c} tI_0(\omega) \\ \omega I_1(\omega) + 2I_0(\omega) \end{array} \right] A_z \cos(\hat{x}t) dt \\ M_{zr}^c &= \sigma_0 \int_0^\infty \left[\begin{array}{c} tI_0(\omega) \\ \omega I_1(\omega) + 2I_0(\omega) \end{array} \right] A_r \sin(\hat{x}t) dt \\ M_{rz}^c &= \sigma_0 \int_0^\infty \left[\begin{array}{c} tI_1(\omega) \\ \omega I_0(\omega) \end{array} \right] A_z \sin(\hat{x}t) dt \\ M_{rr}^c &= -\sigma_0 \int_0^\infty \left[\begin{array}{c} tI_1(\omega) \\ \omega I_0(\omega) \end{array} \right] A_r \cos(\hat{x}t) dt \end{aligned} \quad (8)$$

où $\hat{x} = x - x_0$ est la distance selon la direction axiale, $\omega = t\sigma$, A_z et A_r sont fonctions de $\omega_0 = t\sigma_0$, $\omega_c = t\sigma_c$ et t , solutions d'un système linéaire [9], et I_0, I_1, K_0, K_1 sont les fonctions de Bessel modifiées d'ordre 0 et 1.

Le problème de la singularité logarithmique du terme M_{zz}^c de l'expression (8) en $t = 0$ est surmonté grâce à l'identité :

$$\frac{\pi}{[\hat{x}^2 + (2\sigma_c - \sigma - \sigma_0)^2]^{1/2}} = 2 \int_0^\infty K_0(2\omega_c - \omega - \omega_0) \cos(\hat{x}t) dt$$

d'où [11]

$$M_{zz}^c = \sigma_0 \int_0^\infty [F_{zz} + 8K_0(2\omega_c - \omega - \omega_0)] \cos(\hat{x}t) dt - \frac{4\pi\sigma_0}{[\hat{x}^2 + (2\sigma_c - \sigma - \sigma_0)^2]^{1/2}}$$

La difficulté dans le calcul numérique des intégrales (8) réside dans la nature fortement oscillante des intégrands sur un domaine d'intégration semi-infini. En pratique, l'intervalle d'intégration doit être judicieusement découpé en plusieurs zones avec un choix de quadrature adapté à la fréquence d'oscillation des intégrands [12].

4 Résultats

Pour valider cette extension de la version axisymétrique de notre modèle BEM intégrant la fonction de Green adaptée aux écoulements en capillaire, nous avons considéré le cas simple de la chute d'une sphère rigide dans un tube cylindrique. Imposant la vitesse de chute U_c sur l'interface, on recherche

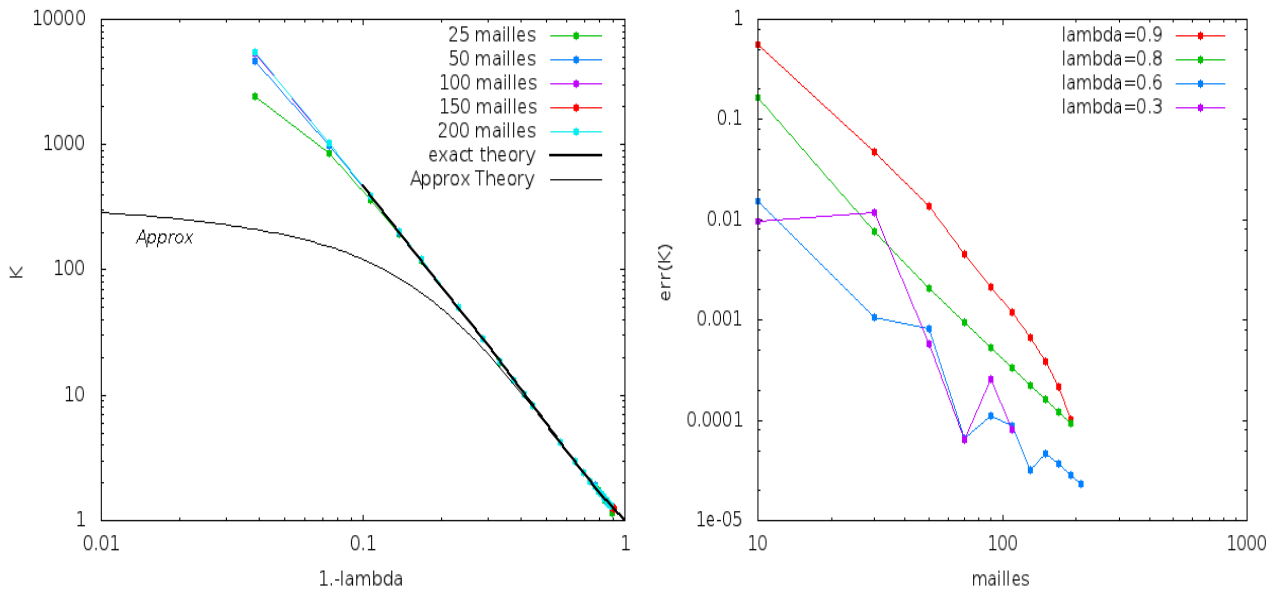


FIGURE 1 – À gauche : correction K pour une sphère dans un tube en fonction de λ pour différents maillages de la sphère. Dans la figure on a ajouté aussi la solution approximée que l'on obtient en prenant juste les deux premières équations de l'ensemble infini des équations. À droite : erreur relatif sur K pour différents λ en fonction du nombre de mailles par rapport a les valeurs théoriques [13, 14]

la distribution de force correspondante par inversion de la matrice $M_{\alpha\beta}$. Ensuite, par intégration sur l'interface, on détermine la résultante de traînée C que l'on peut caractériser par la correction K au coefficient de traînée pour la chute d'une sphère en espace libre :

$$C = \underbrace{6\pi\eta U_c R_0}_{\text{Traînée en milieu infini}} K \quad (9)$$

La Fig. 1 donne l'évolution de K en fonction du rapport $\lambda = R_0/\sigma_c$, où R_0 est le rayon de la sphère et σ_c est celui du tube, comparée aux résultats théoriques [13, 14]. On peut noter que la convergence vers les résultats théoriques est très satisfaisante.

Le problème que nous intéresse, c'est à dire le transport d'une vésicule dans un capillaire sous l'action d'un écoulement de Poiseuille a été abordé ensuite. La Fig. 2 montre l'évolution dans le temps de la forme d'une vésicule oblate initialement avec un excès d'aire $\Delta = 1.11$, dans un capillaire avec $\lambda = 0.5$ sous un écoulement de Poiseuille caractérisés par $Ca = 10$. On peut noter l'inversion de la courbure

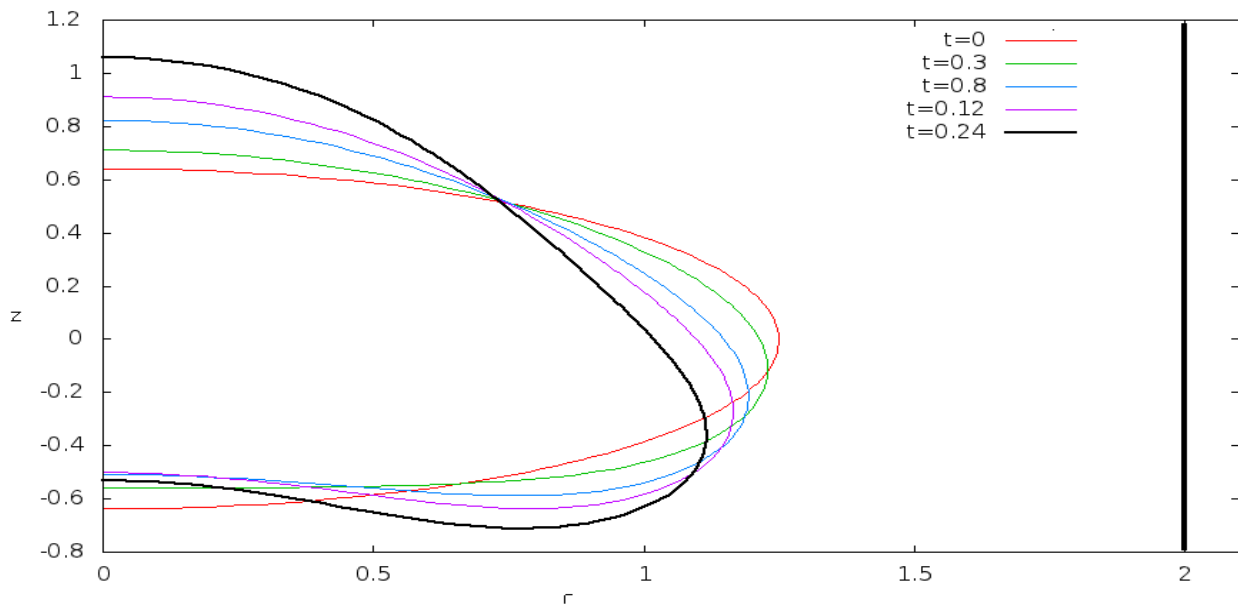


FIGURE 2 – Évolution dans le temps du profil d'une vésicule avec $\Delta = 1.11$ dans un tube avec $\lambda = 0.5$ sous un écoulement de Poiseuille caractérisés par $Ca = 10$.

dans la partie basse de la vésicule sous l'action du forçage hydrodynamique. Cette inversion de la courbure n'est observée qu'à partir de valeurs critiques des paramètres caractéristiques.

Une question non triviale concerne la dépendance aux conditions initiales de la forme finale atteinte par la vésicule. Pour répondre à cette question nous avons considéré des formes initiales différentes, une prolata et une oblate, avec les mêmes valeurs des paramètres caractéristiques, et avons suivi leur dynamique au cours du temps. En Fig. 3 on peut voir que les deux dynamiques tendent vers la même forme finale. On peut donc supposer que la forme initiale, si elle conditionne très fortement la dynamique, ne joue aucun rôle sur la forme finale.

5 Conclusions

Notre étude numérique basée sur la méthode BEM de la déformation axisymétrique d'une vésicule dans un écoulement de Poiseuille confiné montre que les propriétés mécaniques particulières de la membrane permettent d'obtenir des formes stationnaires non triviales par rapport à celles que l'on obtient dans le cas de la sédimentation dans un milieu infini. Ces formes dépendent de plusieurs paramètres : de l'excès d'aire qui mesure la déformabilité de la vésicule, du rapport entre la taille de la vésicule et le rayon du tube et de l'intensité de l'écoulement. Nous avons aussi vérifié que la forme finale obtenue ne dépend pas de la forme initiale (oblate, prolata). Ces premiers résultats nous permettent de valider l'implémentation numérique du modèle. Ils doivent être maintenant complétés par une étude paramétrique systématique permettant de couvrir toute la gamme des paramètres caractéristiques du problème.

Ce travail a été mené grâce au support financier de l'ANR Capshydr (11-BS09-013-02) et aux moyens de calcul du Mésocentre d'Aix-Marseille Université.

Références

- [1] Seifert, U. 1997 Configurations of fluid membranes and vesicles *Adv. Phys.* **46**
- [2] Vlahovska, P. , Podgorski, T. , Misbah, C. 2009 Vesicles and red blood cells in flow : From individual dynamics to rheology *C. R. Phys.* **10**
- [3] Boedec, G. , Jaeger, M. , Leonetti, M. 2011 3D vesicle dynamics simulations with a linearly triangulated surface *J. Comp. Phys.* **230** 1020-1034

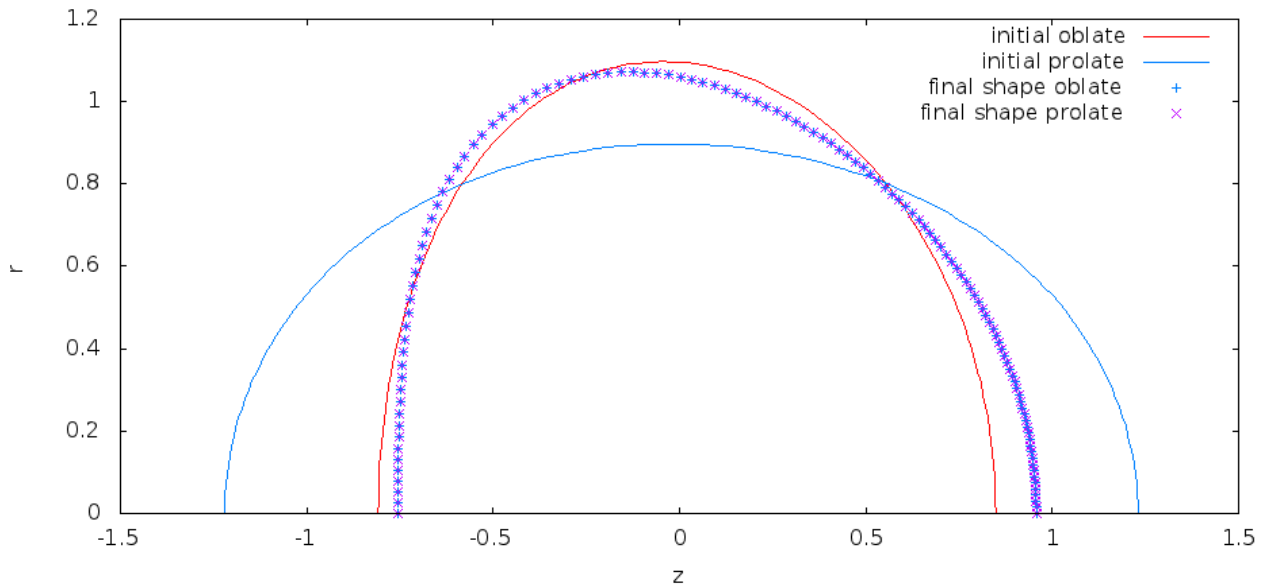


FIGURE 3 – Comparaison des formes finales pour deux vésicules qui partent des formes initiales différentes (oblate, prolate) mais avec la même $\Delta = 0.2$ (dans ce cas $\lambda = 0.5$ et $Ca = 10$). Les deux dynamique tendent vers la même forme finale.

- [4] Boedec, G. , Jaeger, M. , Leonetti, M. 2012 Settling of a vesicle in the limit of a quasi-spherical shape *J. Fluid Mech.* **690** 227-261
- [5] Danker, G., Vlahovska, P. M., Misbah, C. 2009 Vesicles in Poiseuille Flow *Phys. Rev. Lett.* **102** 148102
- [6] Noguchi, H. , Gompper, G. 2005 Shape transitions of fluid vesicles and red blood cells in capillary flows *PNAS* **102**, 40, 14159-14164
- [7] Quéguiner, C. , Barthès-Biesel, D. 1997 Axisymmetric motion of capsules through cylindrical channels *J. Fluid Mech.* **348** 349-376
- [8] Boedec, G. 2012 Modélisation d'une vésicule sous forçage hydrodynamique *Phd Thesis*, Aix-Marseille 3
- [9] Pozrikidis, C. 1992 Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow *Cambridge University Press*
- [10] Tozeren, H. 1984 Boundary integral equation method for some Stokes problems *Int. J. Num. Meth. Fluids* **4** 159-170
- [11] Happel, J. , Brenner, H. 1973 Low Reynolds number hydrodynamics *Noordhoff International Publishing*
- [12] Abramowitz, M. , Stegun, I. A. 1972 Handbook of Mathematical Functions *Dover*
- [13] Higdon, J. J. L. , Muldowney, G. P. 1995 Resistance functions for spherical particles, droplets and bubbles in cylindrical tubes *J. Fluid Mech.* **298** 193-210
- [14] Pozrikidis, C. , Davis, J. M. 2013 Resistance and pressure coefficients for a periodic array of spherical, spheroidal, and cylindrical particles inside a circular tube *IMA J Appl Math* **78** 32-58