

Elasticité des nœuds

Nicolas Clauvelin¹, Basile Audoly², & Sébastien Neukirch²

¹ UPMC Univ Paris 06 & CNRS, UMR 7190, Institut Jean le Rond d'Alembert, F-75005, Paris, France

² CNRS & UPMC Univ Paris 06, UMR 7190, Institut Jean le Rond d'Alembert, F-75005, Paris, France
ncpub@lmm.jussieu.fr

Résumé. Nous présentons ici un modèle permettant de calculer la réponse mécanique et l'équilibre élastique d'une tige nouée dans le cas d'un nœud de trèfle ouvert. Dans la limite de faibles force de tension appliquées les équations de Kirchhoff en présence de contact de la tige avec elle même sont résolues par une méthode de développement asymptotique. Les prédictions sur la géométrie du nœud sont confrontées à des mesures expérimentales.

Abstract. We study the mechanical response of elastic rods bent into open knots, with focusing on the case of trefoil topology. The limit of a small applied tensile force is studied both analytically and experimentally : the Kirchhoff equations with self-contact are solved by means of matched asymptotic expansions ; predictions on the geometrical properties are compared to experiments.

1 Introduction

Les nœuds tiennent une place importante dans le domaine de la navigation, et les marins connaissent depuis longtemps un phénomène qui leur est associé : un nœud sur une corde diminue sa résistance à la traction [1]. Ce problème de mécanique n'a pas encore reçu à ce jour d'explication théorique complète, et plus généralement les propriétés mécaniques et élastiques des nœuds sont encore mal comprises. Longtemps considéré comme un sujet mathématique, avec notamment le problème des nœuds idéaux [2], les nœuds sont aujourd'hui au coeur de plusieurs faits scientifiques, particulièrement dans le domaine des filaments biologiques et des polymères. Il était ainsi connu qu'au-delà d'une certaine longueur un polymère peut adopter une conformation nouée de manière spontanée [3]. Plus récemment des expérimentateurs ont réussi dans le cadre d'expérience à molécule unique à nouer une molécule d'ADN [4], tandis que d'autres ont noué des filaments micrométriques de silice dans le but d'étudier la propagation d'un signal lumineux [5]. En complément de ces succès expérimentaux une récente étude approfondie de la géométrie des protéines a permis d'en recenser 273 ayant une configuration nouée, sans toutefois pouvoir clairement préciser la fonction biologique des nœuds [6,7].

Bien que mal compris le processus de nouage d'un filament a été le sujet de nombreux travaux. Ainsi le cas des polymères a été étudiées au moyen d'approches basées sur des calculs de dynamique moléculaire ou de type *ab-initio* [8]. Les outils de la physique statistique ont aussi été utilisés, principalement dans le cadre de simulations de type Monte-Carlo pour expliquer la localisation d'un nœud sur un filament soumis à l'agitation thermique [9]. Des modèles géométriques ont également été proposés pour expliquer les propriétés des nœuds [10].

Nous présentons ici un modèle permettant de calculer la configuration d'équilibre d'un nœud en nous basant sur la théorie des tiges élastiques. Cette présentation sera illustrée à travers l'étude d'un nœud simple (*i.e.* nœud de trèfle), mais le modèle peut s'appliquer de manière générale à tout type de nœud, et permet d'en calculer la réponse mécanique ainsi que la forme précise. Dans une première partie nous introduirons les hypothèses et les équations du modèle, pour ensuite dans une seconde partie présenter un schéma de résolution. Enfin nous confronterons les prédictions de notre modèle à des mesures expérimentales afin de vérifier la validité de nos résultats.

2 Modèle

On considère une tige élastique isotrope de longueur infinie, de section circulaire de rayon h , nouée en nœud de trèfle ouvert comme sur la Fig.1. La rigidité de courbure de la tige est définie par EI , avec E le coefficient de Poisson et $I = \pi h^4/4$ le moment d'inertie. Les extrémités de la tige sont soumises à des forces de tension de module T , celles-ci étant alignées selon l'axe z , qui est définie par la direction des parties terminales de la tige à l'infini.

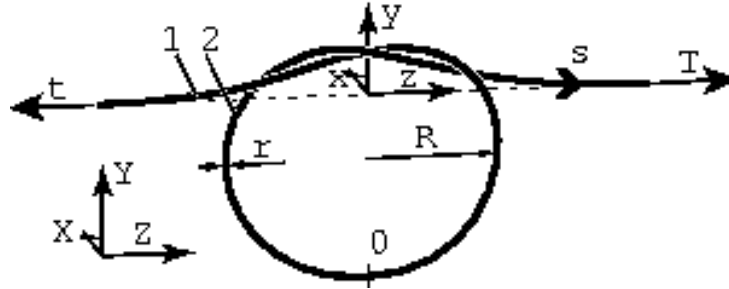


Fig.1. Géométrie du nœud de trèfle ouvert sous tension

L'équilibre élastique de la tige, composée d'un matériau élastique supposé linéaire, est obtenu en résolvant les équations de Kirchhoff, qui s'écrivent pour une tige à section circulaire [11] :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{t} \quad \mathbf{t}' = \frac{\mathbf{M}}{EI} \times \mathbf{t} \quad (1)$$

$$\mathbf{M}' = \mathbf{N} \times \mathbf{t} \quad \mathbf{N}' = -\mathbf{p} \quad (2)$$

avec s l'abscisse curviligne le long de la tige, $\mathbf{t}(s)$ la tangente à la ligne centrale repérée par $\mathbf{r}(s)$, $\mathbf{M}(s)$ le moment interne, $\mathbf{N}(s)$ la force interne, et $\mathbf{p}(s)$ la pression de contact (qui est une force par unité de longueur), les dérivées étant prises par rapport à l'abscisse curviligne.

La principale difficulté du problème réside dans la prise en compte de la contrainte d'impénétrabilité qui s'écrit :

$$|\mathbf{r}(s_1) - \mathbf{r}(s_2)| \geq 2h \quad (3)$$

Cette contrainte est valable pour tout couple (s_1, s_2) tel que la quantité $|s_1 - s_2|/h$ soit suffisamment grande pour exclure de la vérification les *plus proches voisins*, ou plus précisément pour ne pas prendre en compte le caractère continu de la tige. Le contact de la tige sur elle-même reste localisé dans la zone en tresse, schématisée sur la Fig. 1, si l'on considère des valeurs de h suffisamment petites [13]. Nous séparerons donc dans la suite de l'exposé le nœud en deux domaines : un domaine intérieur qui correspond à la tresse, et un domaine extérieur qui regroupe la boucle et les parties terminales. L'intérêt du problème est en grande partie dans la caractérisation du contact dans la tresse, qui requiert la connaissance de la fonction $\mathbf{p}(s)$ d'une part, mais aussi de la topologie du contact d'autre part. Or ces deux données sont dépendantes l'une de l'autre, et de plus la topologie du contact (étendu, ponctuel, d'un seul tenant ou non) n'est pas connue à l'avance [12].

Il est utile de remarquer à ce stade qu'à partir des Eq. (1,2) on montre aisément que la quantité $\mathbf{M} \cdot \mathbf{t}$, qui correspond au moment de torsion, est constante le long de la tige. Les extrémités étant libres de toute rotation selon l'axe z le moment de torsion est nul dans toute la tige, et cela implique que la torsion matérielle est elle aussi nulle.

Ce modèle s'applique bien entendu à des tiges *fines* , c'est à dire pour des valeurs de h petites, ce qui permet de s'assurer que le contact reste localisé. De même on considérera uniquement de faibles forces de tension aux extrémités, ce qui revient à considérer des nœuds *lâches* , c'est-à-dire tels que la longueur de tige dans la boucle soit grande devant h . Ces limitations se formulent plus aisément si l'on procède à l'adimensionnement des équations en utilisant comme longueur caractéristique le rayon de la boucle

(définie précisément comme la longueur prise dans la boucle divisée par 2π) notée R . En utilisant alors la relation (3) on obtient la condition $h/R \ll 1$, et on introduit donc comme quantité $\epsilon = (h/R)^{1/2}$ qui va jouer le rôle de petit paramètre du problème. Ainsi les limites de validité du modèle conduisent simplement à considérer des nœuds tels que $\epsilon \ll 1$.

3 Solution

La résolution du problème va utiliser un raisonnement de couche limite, légitimé par le fait que le domaine intérieur est d'ordre ϵ (pour $\epsilon = 0$ la tresse se réduit à un point), tandis que le domaine extérieur subsiste à l'ordre zéro en ϵ . Nous allons donc calculer dans un premier temps les solutions du domaine extérieur selon une méthode perturbative, et ensuite nous calculerons la solution du domaine intérieur. Il faudra alors procéder au raccordement de ces différentes solutions pour obtenir la solution générale des équations de Kirchhoff dans le cas du nœud de trèfle.

3.1 Domaine extérieur

Dans un premier temps considérons le cas d'une tige d'épaisseur nulle, c'est à dire $\epsilon = 0$. Dans ce cas la tresse se ramène à un point singulier, la boucle à un cercle et les parties terminales à des demi-droites. On a alors une solution de tige circulaire pour la boucle : $\mathbf{t} = \sin(s/R)\mathbf{e}_y - \cos(s/R)\mathbf{e}_z$, $\mathbf{M} = (EI/R)\mathbf{e}_x$ et $\mathbf{N} = \mathbf{0}$. Tandis que pour les parties terminales on a une solution de tige droite définie par : $\mathbf{t} = \mathbf{e}_z$, $\mathbf{M} = \mathbf{0}$, et $\mathbf{N} = \mathbf{T}$. On notera que la solution de boucle pour $\epsilon = 0$ fait apparaître la longueur R ce qui montre donc que cette quantité est d'ordre zéro en ϵ . De plus il est aisé de montrer qu'en minimisant l'énergie totale, définie comme la somme de l'énergie de déformation élastique et du travail des forces de tension, on obtient comme relation[4] :

$$R^2 = \frac{EI}{2T} \quad (4)$$

On va maintenant perturber la solution obtenue pour $\epsilon = 0$ à l'ordre 1 en ϵ . Pour les parties terminales la linéarisation des Eq. (1,2) autour de la solution de tige droite amène à considérer des corrections pour la ligne centrale de la forme $\exp(-|z|\sqrt{T/EI})$, comme illustrée sur la Fig. 2. Dans le cas de la boucle nous ne détaillerons pas la forme des corrections obtenues. Toutefois il est intéressant de noter que celle-ci reste contenue dans un plan, lequel s'obtient par une rotation d'ordre ϵ du plan (x, z) autour de l'axe y . La solution ainsi obtenue présente une ouverture au sommet de la boucle afin de pouvoir se raccorder à la solution du domaine intérieur (Fig. 2).

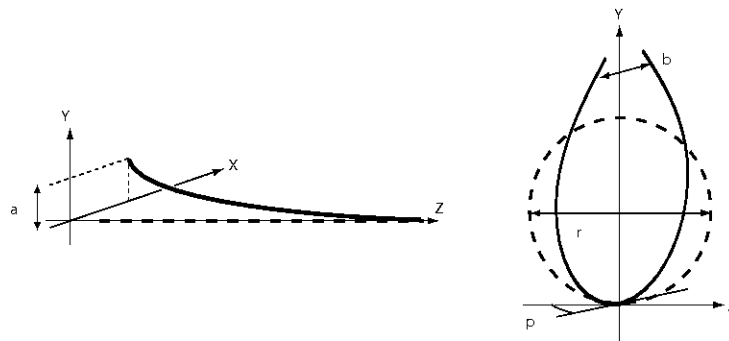


Fig.2. Géométrie simplifiée des parties terminales et de la boucle avec la perturbation d'ordre ϵ . y_0 est la correction selon l'axe y pour les parties terminales, l_0 est l'ouverture de la boucle qui permet de tenir compte de l'extension de la tresse, et θ_0 est l'angle du plan contenant la boucle par rapport au plan (x, z) .

Les solutions du domaine extérieur sont donc exprimées en fonction de paramètres d'ordre 1 en ϵ , et c'est lors du raccordement avec le domaine intérieur que nous pourrions déterminer ces paramètres.

3.2 Domaine intérieur

Il est facile de montrer que les solutions du domaine intérieur sont au minimum d'ordre 1 en ϵ . En effet le raccordement entre la boucle et la tresse implique la continuité de la pente de la ligne centrale (par rapport à l'axe z), or dans la tresse la pente est proportionnelle à h/l , où l est l'extension de la tresse sur l'axe z , tandis que en sortie de boucle elle est proportionnelle à l/R . On obtient donc comme loi d'échelle $l \sim \sqrt{hR}$ ou encore $l \sim \epsilon R$, ce qui montre que l'extension de la tresse est une quantité d'ordre 1. De plus les déplacements transverses dans la tresse seront proportionnels à h , c'est à dire à $\epsilon^2 R$, ce qui montre donc que la solution du domaine intérieur est d'ordre 2 en ϵ pour ses composantes x et y . Ainsi pour des valeurs de h raisonnables on peut négliger les non-linéarités géométriques dans la tresse, et dès lors les Eq. (1,2) s'écrivent pour le brin "a", en notant $\mathbf{r}_a = (x_a, y_a, z_a)$:

$$EI x_a'''' = p_a^x, \quad EI y_a'''' = p_a^y, \quad z_a' = 1 \quad (5)$$

où, en considérant le contact sans friction, $p_a^x = |\mathbf{p}|(x_b - x_a)/(2h)$ et $p_a^y = |\mathbf{p}|(y_b - y_a)/(2h)$. Les équations pour le brin "b" sont identiques avec : $p_b^x = -p_a^x$ et $p_b^y = -p_a^y$.

La linéarité des Eq. (5) permet de séparer le problème pour le domaine intérieur en un problème *moyen* et un problème *différence* en introduisant les nouvelles variables : $\langle \mathbf{r}(s) \rangle = (\mathbf{r}_a(s) + \mathbf{r}_b(s))/2$ pour la solution moyenne, et $\tilde{\mathbf{r}} = (\mathbf{r}_b(s) - \mathbf{r}_a(s))/2$ pour la solution différence.

Les équations du problème moyen s'écrivent simplement à partir des Eq. (5) en remarquant que les forces de contact s'annulent entre elles, et il vient : $EI \langle x \rangle'''' = 0$ et $EI \langle y \rangle'''' = 0$. La condition de raccord pour la solution moyenne est simplement exprimée par la continuité du moment qui impose $\langle x \rangle'' = 1/(2R)$ du côté de la boucle et du côté des parties terminales. La solution est alors triviale puisqu'il s'agit d'un arc de cercle de rayon $2R$ à un mouvement rigide près (translation et rotation) pour pouvoir raccorder les deux domaines.

Le problème différence contient l'information sur le contact entre les deux brins de la tresse. Les équations sont alors dans ce cas : $EI \tilde{x}'''' = |\mathbf{p}|\tilde{x}/h$ et $EI \tilde{y}'''' = |\mathbf{p}|\tilde{y}/h$. L'adimensionnement de ces équations conduit à définir de nouvelles variables (en accord avec les lois d'échelle précédemment obtenues) :

$$u = \frac{x_b - x_a}{2h}, \quad v = \frac{y_b - y_a}{2h}, \quad w = \frac{z}{\sqrt{2hR}} \quad (6)$$

En notant que dans la tresse $s = z$ on remarque que le problème est alors plan, puisqu'il s'agit de déterminer les fonctions $u(w)$ et $v(w)$. La condition d'impenétrabilité, Eq. (3), se réécrit alors sous la forme :

$$u^2(w) + v^2(w) \geq 1, \quad \forall w \quad (7)$$

Au final le problème différence se ramène à la recherche d'une solution s'enroulant autour d'un cylindre fixe de rayon 1, sous l'action d'un moment \mathbf{Q} appliqué aux deux extrémités afin de tenir compte du raccordement avec la boucle comme indiqué sur la Fig. 3(a). On ajoute également comme contrainte que la solution doit faire un nombre de tours fixés, n^* , autour du cylindre, avec $n^* = 1.5$ dans le cas du nœud de trèfle (on pourrait rechercher un nœud avec $n^* = 2.5$ par exemple, ce qui donnerait une géométrie de type 5₁).

Les équations de Kirchhoff pouvant être obtenues à l'aide du principe variationnel, on choisit de résoudre le problème différence par minimisation contrainte – pour garantir l'impenétrabilité – de l'énergie en cherchant $u(w)$ et $v(w)$ comme des fonctions minimisantes l'énergie élastique définie par :

$$E = \int_{-W}^{+W} \frac{u'^2(w) + v'^2(w)}{2} dw + v'(W) + v'(-W) \quad (8)$$

où W est une longueur prise suffisamment grande au-delà du dernier point de contact afin de garantir l'indépendance du résultat par rapport à cette variable. Il est intéressant de noter que aucun paramètre n'intervient dans la formulation du problème différence, et que donc la solution sera *universelle*.

Le premier résultat est le lieu de contact, indiqué sur la Fig. 3, qui présente une zone étendue au centre de la tresse et un point de contact isolé en sortie de tresse. On remarquera également la présence d'un

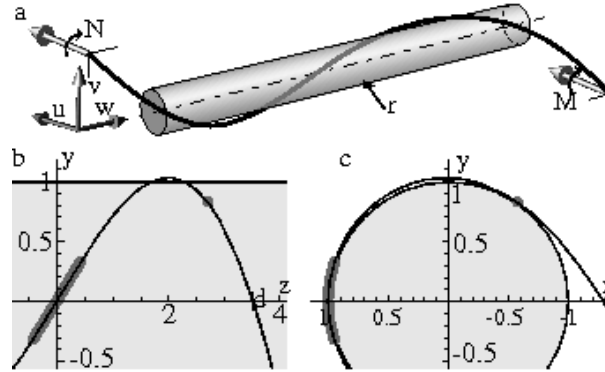


Fig.3. Problème différence pour la tresse. (a) Géométrie de la tige différence enroulée autour du cylindre. (b) Solution projetée dans le plan (v, w) et (c) dans le plan (u, v) perpendiculaire à l'axe du cylindre. Les zones grises épaissies correspondent aux zones de contact. On notera que seulement une demi-solution est représentée compte-tenu du fait que l'on cherche des solutions symétriques.

décollement entre le point isolé et la fin de la zone de contact étendue, lequel a une amplitude maximale égale à $0.043 h$. En prenant comme définition pour la longueur de tresse la longueur entre les deux points isolés de contact on a naturellement en unités adimensionnées $l = 2w_c$, ce qui donne en unités physiques :

$$l = 2w_c \sqrt{2hR} \quad (9)$$

avec $w_c = 3.506$.

Le raccord de la solution pour le domaine intérieur avec celles de la boucle et des parties terminales permet de relier l'ensemble des corrections d'ordre ϵ introduites aux résultats numériques provenant de la tresse. On a ainsi pour l'angle du plan contenant la boucle au premier ordre en ϵ la relation : $\theta_0 = 1.24 \sqrt{h/R}$. De la même manière on peut déterminer l'ensemble des paramètres grâce aux résultats du domaine intérieur.

4 Discussion

La solution générale que l'on vient d'obtenir décrit l'équilibre élastique d'un filament de rayon h noué à la manière d'un nœud de trèfle ouvert, et soumis à une tension T en chacune de ses extrémités. Cette solution est construite en utilisant un développement perturbatif à l'ordre 1 selon ϵ dans le cadre d'une théorie de couche limite. En conséquence, toute mesure expérimentale doit être effectuée de manière à satisfaire au mieux la condition $\epsilon \ll 1$ ainsi que le postulat d'un contact sans friction dans la zone de tresse. C'est pourquoi nous avons choisi d'utiliser des câbles de Nitinol (alliage à mémoire de forme superélastique), afin de mesurer pour différentes valeurs du rayon de la tige h et de la tension imposée T la longueur de tresse l . La comparaison entre notre prédiction théorique, Eq. (9), indépendante de tout paramètre ajustable, et ces mesures est présentée en Fig. 4. L'accord entre le modèle et l'expérience est très satisfaisant.

La méthode exposée dans cet article est générale et peut être appliquée à d'autres topologies de nœud, comme par exemple un nœud ouvert de type 5_1 . A ce sujet on pourra se reporter à la Fig. 4 de [14] qui présente les résultats relatifs à la longueur de tresse pour un nœud de type 5_1 . De même la Fig. 5 de [14] illustre une extension du modèle au cas d'un contact avec de la friction.

Le modèle ici présenté constitue un premier pas pour comprendre la mécanique des nœuds, et les limitations qu'il présente ne permettent pas par exemple d'expliquer le nouage d'un filament lorsque le nœud devient serré ($\epsilon \lesssim 1$). Dans ce type de situation de nombreuses questions sont encore débattues à l'heure actuelle, comme par exemple le profil de courbure dans le nœud mais aussi l'état des contraintes dans la tige (directement lié à la résistance en traction du nœud). Toutefois en restant dans le cadre de la limite $\epsilon \ll 1$ d'autres phénomènes restent encore à expliquer comme la réponse d'un filament noué à un

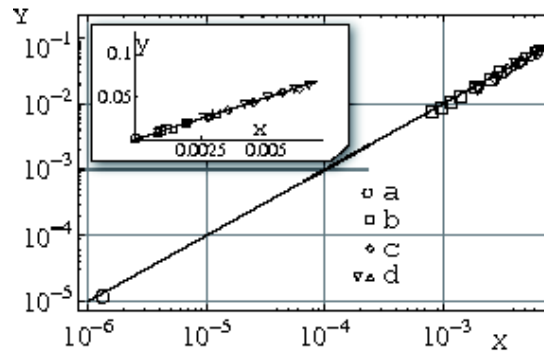


Fig.4. Longueur de la tresse en fonction de la longueur \sqrt{hR} en coordonnées log-log. L'insert représente les mêmes données en coordonnées usuelles. Tous les points ont été obtenus à partir de câbles de Nitinol, excepté le point isolé dans le coin inférieur gauche tiré de [5] La droite représente la prédiction théorique, Eq. 9, qui est une fonction *universelle*.

moment de torsion imposé à ses extrémités, situation qui donne vraisemblablement lieu à des instabilités de forme.

Références

1. A. STASIAK, A. DOBAY, J. DUBOCHET, G. DIETLER, H. E. GAUB, H. CLAUSEN-SCHAUMANN, M. BEYER, M. RIEF & M. GRANDBOIS, Knotted fishing line, covalent bonds, and breaking points, *Science*, **286** (5437), 11a, (1999).
2. A. STASIAK, V. KATRITCH & L. H. KAUFFMAN (eds.), *Ideal knots*, World Scientific, Singapore, (1998).
3. D. W. SUMNERS & S G WHITTINGTON, Knots in self-avoiding walks, *Journal of Physics A*, **21** (7), 1689–1694 (1988).
4. Y. ARAI, R. YASUDA, K.-I. AKASHI, Y. HARADA, H. MIYATA, K. KINOSITA & H. ITOH, Tying a molecular knot with optical tweezers, *Nature*, **399** (6735), 446–448, (1999).
5. L. TONG, R. R. GATTASS, J. B. ASHCOM, S. HE, J. LOU, M. SHEN, I. MAXWELL & E. MAZUR, Subwavelength-diameter silica wires for low-loss optical wave guiding, *Nature*, **426** (6968), 816–819 (2003).
6. M. L. MANSFIELD, Are there knots in proteins?, *Nature Structural & Molecular Biology*, **1**, 213–214, (1994).
7. P. VIRNAU, L. A. MIRNY & M. KARDAR, Intricate knots in proteins : Function and evolution, *PLoS Computational Biology*, **2** (9), 1074–1079 (2006).
8. A. M. SAITTA, PAUL D. SOPER, E. WASSERMAN & MICHAEL L. KLEIN, Influence of a knot on the strength of a polymer strand, *Nature*, **399** (6731), 46–48, (1999).
9. O. FARAGO, Y. KANTOR & M. KARDAR, Pulling knotted polymers, *Europhysics Letters*, **60** (1), 53–59 (2002).
10. P. PIERANSKI, S. PRZYBYL & A. STASIAK, Tight open knots, *The European Physical Journal E*, **6** (2), 123–128 (2001).
11. L. D. LANDAU & E. M. LIFSHITZ, *Theory of Elasticity (course of theoretical physics)*, 2nd ed., Pergamon Press, 1981.
12. H. VON DER MOSEL, Elastic knots in euclidean 3-space, *Annales de l'Institut Henri Poincaré C*, **16** (2), 137–166 (1999).
13. R. GALLOTTI & O. PIERRE-LOUIS, Stiff knots, *Physical Review E*, **75** (3), 031801 (2007).
14. B. AUDOLY, N. CLAUVELIN & S. NEUKIRCH, Elastic knots, *Physical Review Letters*, **99** (16), 164301 (2007).