

Mémoire

Auteur : Damoisiaux-Delnoy, Iris

Promoteur(s) : Opsomer, Eric

Faculté : Faculté des Sciences

Diplôme : Master en sciences physiques, à finalité approfondie

Année académique : 2021-2022

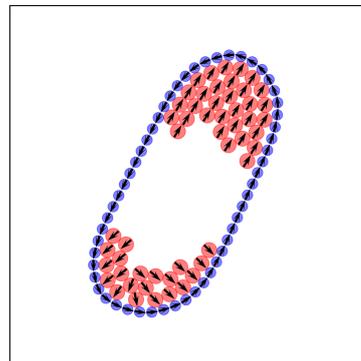
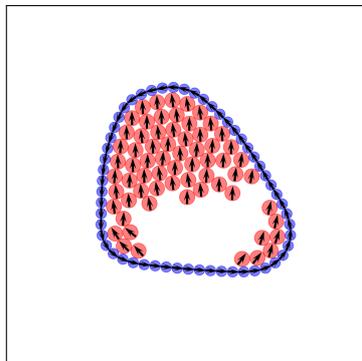
URI/URL : <http://hdl.handle.net/2268.2/14794>

Avertissement à l'attention des usagers :

Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.

Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.

Motilité d'une superstructure active



Mémoire présenté par IRIS DAMOISAUX-DELNOY en vue de l'obtention du grade de Master en Sciences physiques à finalité approfondie.

Promoteur :

Dr. É. OPSOMER

Comité de lecture :

Prof. N. VANDEWALLE

Prof. P. GHOSEZ

Prof. P. SCHLAGHECK

Remerciements

Je tiens à remercier tout d'abord **M. Opsomer** pour sa patience, son aide et sa disponibilité tout au long de l'année. Merci ensuite à **M. Vandewalle** qui a su m'écouter et me conseiller en temps de crise. Une mention toute particulière va à **Adrien Wafflard** pour le temps qu'il a consacré à m'aider dans la tâche ardue que fut l'obtention de l'accès au super-ordinateur et son utilisation. Merci aussi à **Nathan Vanesse** pour son aide dans l'écriture de l'algorithme. Je remercie mon comité de lecture pour leur lecture des nombreuses pages de ce travail qui fut ô combien laborieux. Merci enfin à mes camarades de bureau : **Cyril André** pour sa bonne humeur et loquacité distrayante, **Matteo Léonard** pour ses précieuses réponses à mes questions et **Florian Stevens** pour ses conseils et son empathie.

Table des matières

1	Introduction	1
2	État de l'art	5
2.1	Matière active	6
2.1.1	Particules auto-propulsées	8
2.1.2	Bains actifs	12
2.2	Transport d'objets dans des bains actifs	16
2.2.1	Bains hybrides	16
2.2.2	Objets non-sphériques	18
2.2.3	Membranes flexibles	21
2.3	Motivation	28
3	Matériels et méthodes	31
3.1	Algorithme	31
3.2	Particules auto-propulsées	33
3.3	Membrane semi-flexible	36
3.4	Paramètres	38
4	Contribution personnelle	39
4.1	Calibration et validation du modèle	39
4.1.1	Bain actif	39
4.1.2	Immersion d'un filament	46
4.2	Résultats	48
4.3	Discussion	57
5	Conclusion et perspectives	61
5.1	Conclusion	61
5.2	Perspectives	62
	Annexe A	65
	Bibliographie	67

Abstract

La matière active, dans les bonnes conditions, peut servir à transporter des objets dans son environnement. Nous étudions ainsi la motilité d'une superstructure composée d'une membrane enfermant des particules actives capables d'auto-organisation. Nous identifions les facteurs indispensables à sa mise en mouvement ainsi que ceux menant à sa motilité optimale. Les paramètres d'alignement, de densité et de rigidité de la membrane sont investigués, et nous trouvons qu'une combinaison des deux premiers favorise le déplacement de la superstructure. L'amorce de ce dernier est dû à l'existence d'une brisure de symétrie dans la distribution des particules formant des amas et nous assimilons ce phénomène au démon de Maxwell granulaire. Une telle étude offre à la fois des possibilités d'édification de technologies autonomes et intelligentes, et des aperçus sur la dynamique de migration d'une cellule biologique.

Active Matter, under the right conditions, can be used to transport objects across its environment. We therefore study the motility of a superstructure composed of a membrane enclosing active particles capable of self-organization. We identify the factors that are essential to its motion and those that lead to its optimal motility. The parameters of alignment, density and rigidity of the membrane are investigated, and we find that a combination of the first two favors the movement of the superstructure. The onset of the latter is due to the existence of a symmetry break in the distribution of cluster-forming particles and we equate this phenomenon to the granular Maxwell's demon. Such a study offers both possibilities for building autonomous and intelligent technologies, and insights into the migration dynamics of a biological cell.

Chapitre 1

Introduction

Depuis la nuit des temps, la polyvalence et toute-puissance de la Nature est encensée par l'Homme. Elle est à l'origine même de notre existence, de la perpétuation du monde. Au XVI^e siècle, Michel de Montaigne, philosophe et humaniste, dit "Nature peut tout et fait tout". Deux siècles plus tard, "La nature se suffit" sont les mots écrits par le philosophe allemand Friedrich Hegel. Si maintenant ces vérités sont acceptées comme telles, elles sont aussi mises en lumière par la Science, et tout particulièrement par la biophysique. La littérature scientifique recense et fournit quantité d'exemples de l'action fondamentale de la nature dans les êtres vivants.

C'est sur une infime et pourtant complexe partie de la littérature que nous nous concentrons dans ce mémoire. Cette partie porte le nom de "Matière Active". Elle regroupe une nouvelle catégorie de systèmes loin de l'équilibre composés d'agents autonomes. Ces agents consomment en continu l'énergie locale du milieu qu'ils explorent, ce qui conduit le système à un état hors-équilibre persistant [1]. Les agents de ces systèmes possèdent la capacité de s'auto-organiser spontanément, ce qui résulte en l'émergence de mouvements collectifs coordonnés. Les mécanismes qui sous-tendent ces phénomènes et leur dynamique sont nombreux et englobent la forme géométrique des agents, les interactions stériques, les fluctuations aléatoires et bien d'autres encore.

Quel est le lien de ces systèmes avec la nature ? Il s'avère que ces systèmes sont présents à toutes les échelles, allant des troupes d'oiseaux, bancs de poisson et même des humains à un certain degré, jusqu'aux essaims de bactéries et aux cellules biologiques individuelles. L'omniprésence de ces systèmes naturels garantit leur rôle vital dans la pérennité des espèces, ce qui suffit à justifier l'intérêt grandissant que leur porte la communauté scientifique. Dans le cadre de ce mémoire, ce dernier est avant tout physique et est réalisé dans l'espoir d'aider dans les recherches biologiques et technologiques.

Du point de vue biologique, l'étude des systèmes actifs vise à mettre en évidence la physique des phénomènes de motilité cellulaire qui jouent un rôle fondamental en biologie tant au niveau de la propagation des cellules tumorales métastatiques [2] que dans la réponse du système immunitaire [3]. Par ailleurs, parmi les événements les plus fondamentaux des cellules vivantes tels que la division ou la migration, un grand nombre d'entre eux reposent sur des processus intracellulaires impliquant des filaments du cytosquelette tels que l'actine ou les microtubules [4]. Ces processus contribuent également à la morphogenèse au niveau du tissu et plus encore. Les mouvements des moteurs moléculaires et de la dynamique des filaments du cytosquelette éloignent souvent ces systèmes loin de l'équilibre thermodynamique. Par conséquent, le cytosquelette est tout naturellement associé à la matière active.

Du point de vue technologique, la recherche visant à concevoir des dispositifs intelligents est en plein essor. Par exemple, dans le domaine de la robotique, de nouveaux concepts

bio-inspirés sont recherchés afin de confectionner des dispositifs plus réactifs, efficaces et autonomes [5]. Il existe déjà de multiples modèles de nano- et micro-robots synthétiques autonomes conçus à partir de stratégies diverses. Ces robots constituent la base des matériaux (artificiels) multifonctionnels et hautement réactifs, qui présentent un comportement émergent et la capacité d’accomplir des tâches spécifiques en réponse à des signaux provenant les uns des autres et de l’environnement. Le développement de nouvelles techniques facilite le contrôle de la locomotion de ces robots individuels ainsi que de leurs interactions, et la conception de matériaux actifs intelligents.

C’est d’ailleurs la multifonctionnalité de ce type de robots que Boudet *et al.* [6] cherchent à mettre en évidence. Ils réalisent l’étude pionnière d’une superstructure en quasi deux dimensions composée d’une membrane semi-flexible à l’intérieur de laquelle des robots vibrants interagissent. La dynamique de ces robots est en accord avec celle rencontrée dans la matière active naturelle. Leur objectif est d’attester la capacité de la matière active synthétique à accomplir certaines tâches, et ce, sans cerveau ou point de coordination central. Par exemple, la [FIGURE 1.1](#) illustre la superstructure tirant une charge à travers un parcours d’obstacle de gauche à droite.

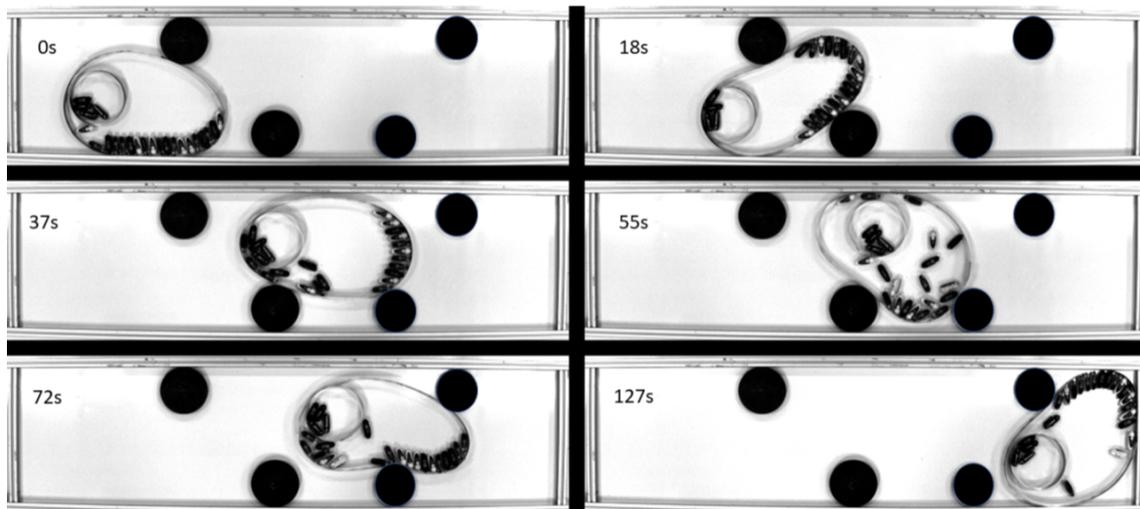


FIGURE 1.1 – Une membrane remplie de robots tire une charge (un cercle avec quatre robots immobiles) à travers un parcours d’obstacles. Les obstacles sont mis en évidence par des cercles noirs. De Boudet *et al.* [6].

Ce type de superstructure fait office d’un modèle simple d’une cellule contenant des organites actifs dont la membrane se déforme en fonction de l’activité de ses organites, provoquant une migration vers sa destination. Elle peut en outre révéler des déformations dynamiques et hors-équilibre si elle est suffisamment élastique et flexible, allant même jusqu’à former des branches satellites dû à l’accumulation de la matière active dans ses surfaces courbes [7] menant parfois à sa scission. Ces modes de déformation servent avant tout à l’exploration de l’environnement par la vésicule. La [FIGURE 1.2](#) présente une partie non exhaustive des structures dynamiques auxquelles elle peut accéder.

Bien que les études sur le sujet de la matière active, et en particulier sur la modélisation de cellules actives, soient abondantes, la caractérisation physique d’une telle superstructure et les facteurs qui induisent sa motilité demeurent encore que très peu investigués. C’est pourquoi **ce mémoire aspire à apporter des éléments nouveaux sur les paramètres qui lui dispensent sa capacité à se mouvoir et explorer son environnement**. Pour ce faire, nous dressons un modèle numérique d’une membrane enfermant

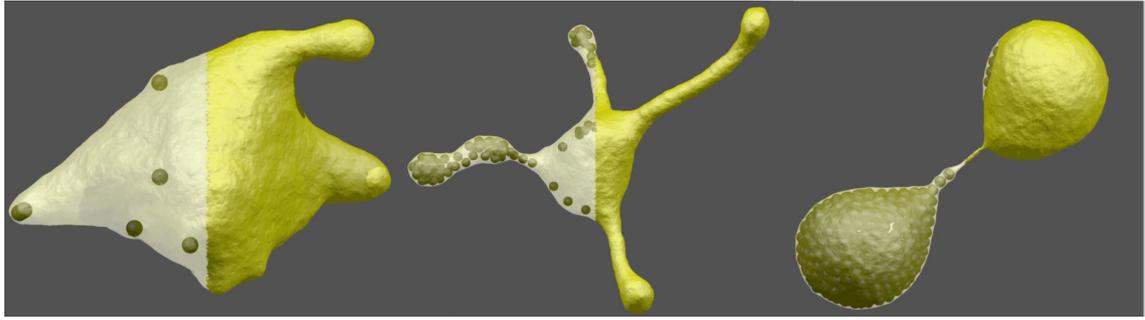


FIGURE 1.2 – Déformations dynamiques d'une membrane flexible contenant de la matière active. Par Vutukuri *et al.* [7].

des disques actifs appelés particules auto-propulsées browniennes. À l'aide de différents paramètres tels que le nombre de particules et l'intensité de l'alignement entre elles, nous exposons le comportement de la structure dans son ensemble. **En mettant en lumière les conditions nécessaires et suffisantes pour catalyser son mouvement dirigé**, nous espérons approfondir notre compréhension de la matière active et indirectement des cellules biologiques, contribuant alors à la conception de robots intelligents.

Chapitre 2

État de l'art

Ce chapitre comporte le détail des concepts et phénomènes physiques essentiels sur lesquels repose ce mémoire. Ils serviront dans l'édification d'un modèle numérique fidèle aux lois de la physique statistique. Ce modèle consiste en une simulation d'un gaz de particules actives au sein d'un milieu homogène non confiné dans lequel un intrus passif mou ou rigide est introduit. Plus spécifiquement encore, le rôle ultime de cet intrus est de prendre la forme d'une membrane au sein de laquelle sont confinées des particules actives. Cette modélisation a pour but d'étudier les comportements dynamiques de cette superstructure dans le milieu aux frontières périodiques.

Les comportements de tels gaz sont recensés dans nombre d'articles scientifiques, tout comme le sont les différents modèles établis dans le but de les étudier. C'est pourquoi, afin d'éviter toute ambiguïté, nous nous efforçons d'explicitier ces notions de façon structurée : allant de l'entité dans un milieu homogène à des systèmes plus complexes regroupant interactions et mouvements collectifs. Il s'agit donc, pas à pas, de considérer d'abord l'individu et de complexifier ensuite le milieu jusqu'à aboutir à l'étude d'une superstructure type mentionnée ci-haut.

La première étape consiste à mettre en lumière la présence de gaz actifs dans le domaine biologique qui sont à leur tour une source d'inspiration pour établir des systèmes numériques physiquement équivalents, *i.e.* des modèles qui respectent non seulement les interactions de base entre individus mais qui reproduisent aussi les comportements que la nature expose. Cette étape est réalisée graduellement, avec des analyses de comportements de particules actives isolées, qui sont utilisées pour créer un système collectif par la suite. Les outils de mesure indispensables à la caractérisation thermodynamique et statistique d'un gaz y sont également présentés. Ceux-ci comprennent l'étude de la cinétique du gaz et du déplacement physique d'une particule de notre système. Cela nous permettra, plus tard, de situer physiquement notre modèle numérique. La seconde et dernière étape se consacre au descriptif des découvertes associées aux comportements d'objets placés dans un bain actif. Enfin, le chapitre se termine par une présentation des articles précurseurs qui ont motivé ce travail, dans l'espoir de construire une base solide sur laquelle bâtir.

En parallèle, ce chapitre guide le lecteur chronologiquement depuis les plus anciennes recherches jusque dans les plus récentes dont la littérature dispose. Il peut par conséquent suivre les avancées scientifiques dans le domaine des bains actifs, et découvrir progressivement l'essence ainsi que l'utilité d'un tel travail.

2.1 Matière active

Cette section vise à définir la matière active. Celle-ci s'inspire des systèmes biologiques observés dans la nature, c'est-à-dire sur les systèmes composés de matière vivante qui peuvent être à la fois des animaux marins ou terrestres, ou encore des bactéries. Les systèmes de la matière active sont formés par des entités autonomes qui, via des interactions entre elles ou avec leur environnement, présentent des comportements collectifs variés. Ces mouvements organisés sont le fruit de conversions énergétiques locales (*i.e.* au niveau de chaque entité) qui suivent un cycle de changements internes conduisant, la plupart du temps, à un déplacement commun du système. La particularité de ces systèmes est qu'ils sont constamment en état hors-équilibre en raison de leur rapport étroit à l'environnement duquel ils prennent de l'énergie pour entretenir leur activité continue [8]. Ceci est en contraste avec les comportements sous équilibre thermique.

La nature fournit une quantité d'exemples de ces systèmes à différentes échelles. Parmi ceux-ci, on en trouve composés d'individus dont la taille est de l'ordre du micromètre tels que les bactéries *Bacillus subtilis* dont les mouvements engendrent un motif de turbulence au sein d'une goutte sessile (voir FIGURE 2.1a [9]). Plusieurs ordres de grandeur au-dessus, les bancs de poisson et troupeaux d'oiseaux reflètent des comportements organisés (appelés "flocage" [10]) comme ceux décrits plus hauts. Ils décrivent souvent un alignement qualifié de "polaire" car ils forment des amas d'individus tous orientés dans la même direction. Un exemple d'un banc de poisson est montré FIGURE 2.1b [8]. Par ailleurs, ces propriétés ne sont pas seulement présentes à l'échelle d'organismes et de populations : par exemple, Ramaswamy et Rao [11] mettent en évidence les comportements physiques complexes de membranes dites "actives" dans des milieux similaires à celui des cellules.

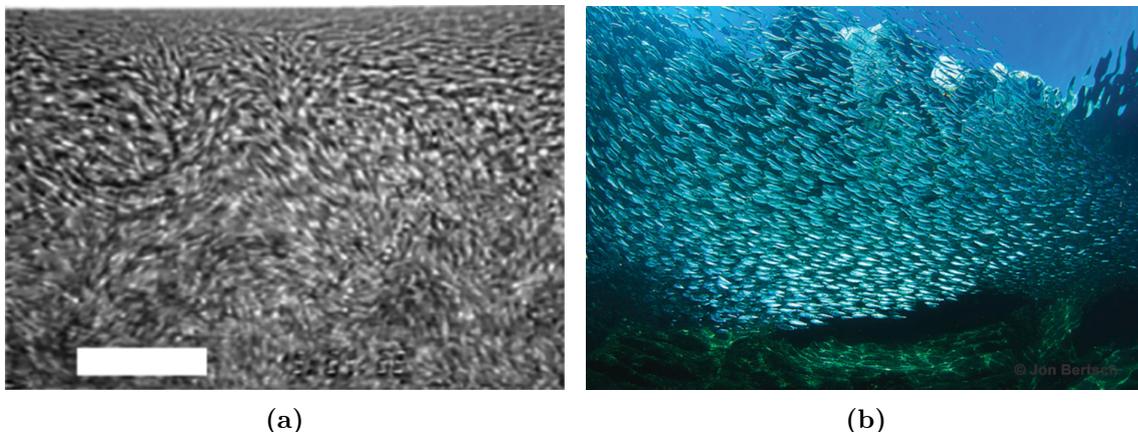


FIGURE 2.1 – Exemples de systèmes biologiques organisés. (a) "Turbulence" bactérienne dans une goutte sessile de *Bacillus subtilis* vue d'en bas à travers le fond d'une boîte de Pétri. La gravité est perpendiculaire au plan de l'image et la barre d'échelle équivaut à $35 \mu\text{m}$ [9]. (b) Une illustration remarquable de l'ordre polaire dans un banc de sardines. Figure de Jon Bertech, à partir d'images sous-marines de la mer de Cortez [8].

Il est primordial de s'intéresser à ces systèmes actifs : en effet, ils permettent l'étude de phénomènes émergents riches et complexes. Ceux-ci, à leur tour, suscitent l'apparition de fluctuations statistiques, de transitions entre ordre et désordre, de propriétés mécaniques et rhéologiques tout à fait inhabituelles telles que des transitions de phases spontanées [12,13], et bien plus encore [8].

Dans l'espoir d'expliquer ces propriétés particulières et de comprendre les principes globaux qui régissent ces systèmes, la communauté scientifique s'efforce, depuis maintenant

plus de 25 ans, à les modéliser. Étant donné leur complexité, une approche théorique décrivant les propriétés de la matière vivante ne peut pas être envisagée [8]. C'est pourquoi c'est d'abord la quantification du mouvement spontané de ces systèmes qui est investiguée dans des modèles numériques présentant des interactions simples entre individus. Il est essentiel de mentionner et expliquer brièvement les modèles numériques qui existent aujourd'hui afin d'établir les frontières du domaine dans lesquelles s'inscrit ce travail.

Avant d'explorer en détail la nature des particules actives et leurs comportements, une brève présentation des premiers modèles de la matière active s'impose. Les principaux instigateurs de la création de modèles visant à comprendre le flocage dans les groupes d'organismes vivants sont Reynolds en 1987 et Vicsek en 1995. Ils servirent avant tout à représenter pour la première fois un animal simulé en tant que particule active se déplaçant dans un milieu.

Reynolds [14] met au point un modèle graphique représentant chaque oiseau au sein de son groupe. À ce moment, il n'essaye pas d'articuler des interactions spécifiques à l'aide de potentiels ou d'application de forces qui conduiraient les oiseaux à participer à un processus de flocage. Plutôt, il retire de ses observations de la nature trois règles qui sont à respecter dans son animation graphique : les oiseaux ne rentrent pas en collision (1), tous tentent de faire correspondre leur vitesse avec leurs voisins (2) tout en restant proches les uns des autres (3).

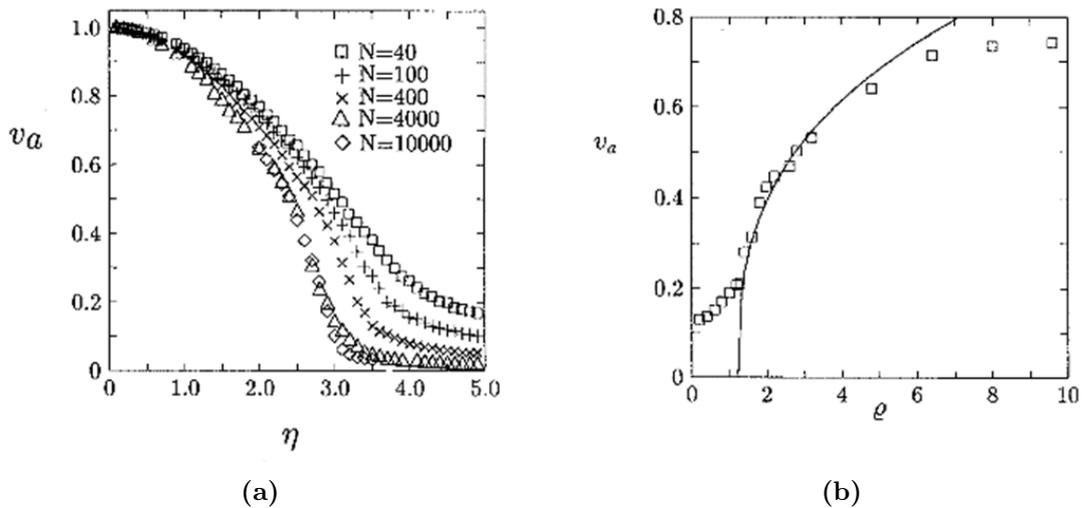


FIGURE 2.2 – Modèle de Vicsek *et al.* [15]. Évolution de la vitesse moyenne absolue v_a des particules en fonction (a) du bruit η à densité constante, (b) de la densité ρ pour un bruit constant. Les symboles correspondent à un couple différent (N, L) avec L étant la taille du milieu.

Le modèle de Vicsek [15] quant à lui représente un pilier dans le début d'élaboration de modèles similaires. Les oiseaux simulés prenant la forme de particules actives se déplacent à vitesse constante, changent d'orientation selon un bruit η et interagissent entre eux par un alignement de leur vitesse avec leurs voisins. Les voisins impliqués sont identifiés comme tels s'ils sont présents dans le cercle de rayon r centré sur le centre de masse de l'oiseau dont on cherche à modifier la direction de mouvement. En faisant varier à la fois le nombre d'oiseaux et le bruit sur la direction, ils mettent en évidence le phénomène de flocage (système dit ordonné) qui a une plus grande probabilité de se produire pour un faible bruit et une grande densité de particules. La [FIGURE 2.2](#) atteste de cette dépendance présentée sous la forme de l'évolution de la vitesse moyenne absolue en fonction de ces deux

paramètres. La vitesse absolue s'exprime :

$$v_a = \frac{1}{Nv} \left| \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \right|,$$

où v est la valeur de la vitesse fixée pour chaque particule et N le nombre de particules. Cette vitesse v_a est alors considérée comme un paramètre d'ordre servant à décrire cette transition de phase. Viscek approfondit son modèle et, en 2000 [16], présente une revue de modèles inspirés du sien où l'effet du bruit et de la dimension sur le système sont mis en évidence. En 2008, des variantes de son modèle sont introduites [17].

C'est lorsque ces modèles parurent que d'autres virent le jour peu de temps après, souvent inspirés de ces premiers [18]. Étant donné leur importance dans l'histoire de la modélisation de bains de particules actives, nous avons trouvé essentiel de les présenter.

2.1.1 Particules auto-propulsées

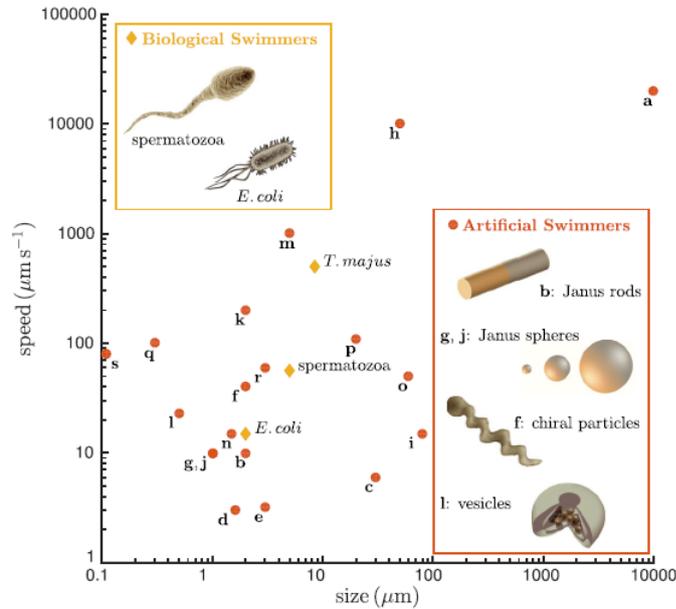


FIGURE 2.3 – Particules auto-propulsées classées en fonction de leur taille et vitesse. Les lettres font référence à des micro-nageurs artificiels du tableau 1 dans la review de Bechinger *et al.* [19]. Les 4 géométries récurrentes pour les particules artificielles sont les tiges et sphères de Janus, les particules chirales et les vésicules.

Au-delà des systèmes constitués de matière vivante et comme il a pu être constaté dans le modèle de Vicsek, il existe désormais des modèles variés dont les entités sont des particules actives synthétiques. Autrement appelées particules auto-propulsées (PAP) (*Self-Propelled Particles* en anglais), sous ce nom se cache la propriété que possède chaque particule de prendre de l'énergie de son environnement et de la transformer en mouvement dirigé [20]. Ceci est apparenté à la capacité d'un organisme vivant de faire de même (via la nourriture comme gain énergétique utilisée par les muscles par exemple). C'est d'ailleurs une caractéristique courante chez les micro-organismes, leur permettant une exploration plus efficace de leur environnement [21, 22].

Il existe de nombreux types de particules actives : on les différencie notamment par leur dynamique de déplacement dans le milieu. Les nageurs biologiques tels que les spermatozoïdes et les bactéries *E. coli* sont considérés comme des particules actives, tout comme le sont également les micro-nageurs artificiels de différentes formes (parmi lesquelles les tiges et sphères Janus, voir [FIGURE 2.3](#)).

Il est important de souligner que dans le cadre de ce travail, nous nous intéressons aux particules actives browniennes qui sont la généralisation hors-équilibre des particules dont la marche aléatoire suit un mouvement brownien. Nous mentionnons également les particules *Run-and-tumble* qui ne sont dès lors pas assimilées à des particules actives browniennes. Ces deux types de particules auto-propulsées ont la particularité de se déplacer de façon autonome tout en étant soumises à des fluctuations aléatoires. Une définition générale d'une PAP est établie dans le [cadre](#) ci-après. À noter que lorsque nous nous référons aux particules actives, par leur diminutif (PAP), il s'agit d'une appellation qui comprend tous les types de particules auto-propulsées présentées ci-avant, allant de micro-organismes vivants aux nageurs artificiels, et ce, indépendamment de leur dynamique de déplacement et de leur forme. De la même façon, si elles sont browniennes, cela est systématiquement indiqué.

Précisons encore que bien qu'il existe des particules actives dites polaires (*i.e.* dont la symétrie géométrique est rompue), nous ne nous focalisons ici que sur les particules sphériques à deux dimensions, c'est-à-dire en forme de disques. Cela assure une cohérence en rapport avec l'étude réalisée pour ce mémoire.

Particule auto-propulsée (*nom*)

Les particules auto-propulsées ont la capacité de transformer l'énergie de leur milieu en mouvement dirigé modifié par des fluctuations aléatoires, ce qui les conduit dans un état loin de l'équilibre. Le terme "particule active brownienne" réfère au modèle simplifié de **particules sphériques répulsives** guidées par une force quasi-constante et dont la direction obéit au phénomène de diffusion thermique [19].

La diffusion thermique mentionnée dans la [définition](#) fait partie d'un grand nombre de phénomènes de réorientation présents dans les modèles de particules actives. Certains modèles impliquent par exemple des frottements sur la particule qui varient en fonction de sa vitesse ou de l'espace dans lequel elle se meut [23–25]. Parmi toutes les dynamiques qui existent, nous n'en citerons que deux :

- ***Run-and-tumble*** : la particule alterne entre des parcours en ligne droite à vitesse constante et des réorientations abruptes qui se produisent aléatoirement à un taux α [26]. La bactérie *E. Coli* se meut selon ce modèle [27].
- **Diffusion rotationnelle** : la particule se déplace à une vitesse prédéfinie mais modifiée par un bruit sur sa direction et parfois son amplitude. Son orientation varie selon le phénomène de diffusion typique d'une marche aléatoire brownienne, c'est pourquoi les particules qui répondent à cette dynamique sont appelées PAP browniennes. C'est le cas des colloïdes Janus auto-propulsés [28–30]. La différence avec la marche *Run-and-tumble* est que le changement de direction se fait de manière graduelle [26].

Ces deux mécanismes sont visuellement représentés dans la [FIGURE 2.4](#) par la trajectoire type d'une particule soumise à chacune des dynamiques. La trajectoire de la particule active brownienne est plus progressive en matière de changement d'orientation comparé aux tournants brusques que prend la particule dans le cas d'une dynamique *run-and-tumble* [31].

La dynamique d'intérêt dans le cadre de ce travail est la dynamique de diffusion rotationnelle. Les particules soumises à cette dynamique sont alors nommées PAP browniennes. Nous nous attardons donc sur le comportement d'une telle particule ci-après.

De manière générale, une particule auto-propulsée brownienne est une particule active à laquelle un couplage entre les mouvements rotationnel et de translation est instituée. Ainsi, ce couplage implique que la particule, dont la forme est simplifiée à un disque en deux dimensions, se déplace originellement avec une vitesse v qui voit sa direction dépendre de son orientation. La réorientation de la particule est soumise à un phénomène de diffusion brownienne. À cette vitesse est ajouté un bruit blanc soit dans la direction du mouvement dirigé (selon le vecteur vitesse \vec{v}), soit dans les deux directions du plan comme c'est le cas dans le système d'équations ci-après [19] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x} = v \cos \theta + \sqrt{2D_T}\xi_x \\ \dot{y} = v \sin \theta + \sqrt{2D_T}\xi_y \\ \dot{\theta} = \sqrt{2D_R}\xi_\theta \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{avec } D_T = \frac{k_B T}{6\pi\mu R} \\ \text{avec } D_R = \tau_R^{-1} = \frac{k_B T}{8\pi\mu R^3} \end{array} \quad (2.1)$$

où θ est l'angle orienté entre l'axe d'orientation de la particule et l'axe horizontal de l'environnement. D_T et D_R sont les coefficients de diffusion de translation et de rotation respectivement et τ_R est le temps caractéristique entre deux changements distincts de la direction du mouvement dirigé. k_B est la constante de Boltzmann, μ la viscosité du fluide environnant, R le rayon de la particule, T la température absolue, et enfin ξ_x , ξ_y et ξ_θ sont des bruits blancs indépendants de moyenne nulle.

Une longueur de persistance, *i.e.* la distance que parcourt la particule le long de la direction fixée par son orientation initiale avant que sa direction ne soit modifiée aléatoirement, peut être déduite de cette description analytique. Il en va de même pour le nombre de Péclet qui compare les ordres de grandeur des phénomènes de diffusion et de mouvement dirigé de la particule [19] :

$$L = \frac{v}{D_R} = v\tau_R, \quad Pe \propto \frac{v}{\sqrt{D_T D_R}} \quad (2.2)$$

Ainsi, si le coefficient de diffusion rotationnel est petit, alors la distance parcourue par la particule avant de changer ostensiblement de direction est d'autant plus grande. En deux dimensions, un disque auto-propulsé dont l'orientation varie avec le phénomène de diffusion thermique est illustré [FIGURE 2.4a](#).

À noter que dans l'[EQUATION \(2.1\)](#), la modification du mouvement de la PAP brownienne s'applique directement sur ses vitesses. Toutefois, la façon usuelle de modéliser numériquement des particules actives est d'engendrer le mouvement dirigé en ajoutant une force motrice d'auto-propulsion aux autres forces qui s'appliquent déjà sur la particule [32–40]. Une autre solution par Weber *et al.* [41] se présente comme un modèle hybride dans lequel le mouvement dirigé est implémenté via une force, tandis que la réorientation de la particule est appliquée directement sur sa vitesse angulaire et non sur son moment de force.

Avant de s'intéresser au comportement d'un gaz actif en deux dimensions, il est utile de comprendre celui des entités qui le composent et donc celui d'une PAP brownienne. Dans l'[EQUATION \(2.1\)](#), le mouvement d'une PAP brownienne est donnée via une description mathématique, et le nombre de Péclet ainsi que la longueur de persistance ([EQUATION \(2.2\)](#)) nous informent quant à eux sur sa trajectoire physique. En effet, un mouvement dirigé domine dans les trajectoires sur de courtes échelles de temps tandis qu'elles arborent un

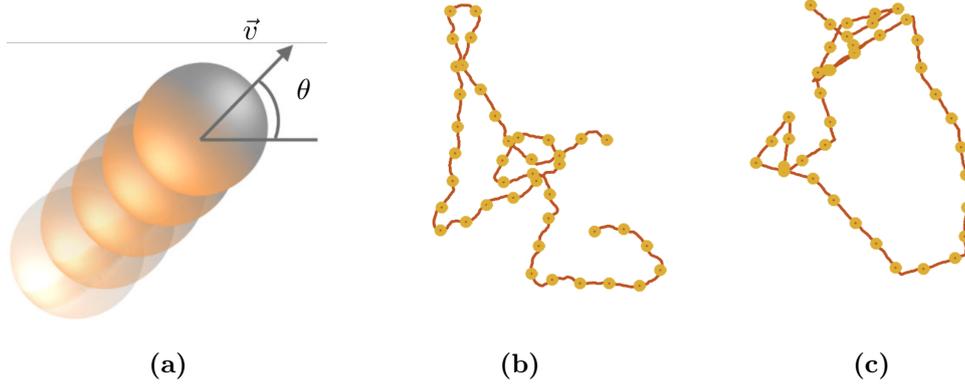


FIGURE 2.4 – (a) Représentation d’une particule active voyageant à une vitesse v dans la direction de son orientation θ [19]. Trajectoire d’une particule active correspondant à la dynamique de (b) diffusion rotationnelle (PAP brownienne), (c) *run-and-tumble*. Chaque cercle correspond à la position de la particule après un incrément de temps.

caractère plus aléatoire à de grandes échelles. Une façon usuelle de le confirmer est d’avoir recours au calcul du mean square displacement ($\text{MSD}(\tau)$) moyenné sur le temps [42–44] :

$$\text{MSD}(\tau) = \langle [x(t + \tau) - x(t)]^2 \rangle \quad (2.3)$$

Ce calcul quantifie la façon dont la particule s’écarte de sa position initiale et est facilement déterminé à partir des trajectoires *ad hoc*.

Dans un plan, le MSD est déterminé pour chacune des composantes (x et y) dont la somme donne le $\text{MSD}_r(\tau)$ attendu. τ représente l’incrément de temps entre deux positions de la particule. La courbe du MSD est alors tracée par rapport à ce temps τ et on distingue plusieurs processus de diffusion en fonction de sa tendance, tels que la super-diffusion et sous-diffusion connus sous le nom de diffusion anormale, et la diffusion brownienne ($\text{MSD} = 4D_T\tau$) [42]. De manière générale, les processus de diffusion anormaux sont décrits par une loi de puissance avec un coefficient de diffusion D_α et un exposant α (voir EQUATION (2.4)).

$$\text{MSD}_r(\tau) \simeq D_\alpha \tau^\alpha \text{ avec } \alpha > 0 \quad (2.4)$$

Les processus de diffusion sont alors différents en fonction de la valeur que prend α : la super-diffusion ($\alpha > 1$) et sous-diffusion ($\alpha < 1$) qui présentent une relation non linéaire entre le MSD et le temps (diffusion "anormale"), et la diffusion thermique (ou mouvement brownien) qui quant à elle est caractérisée par un MSD linéaire ($\alpha = 1$) dans le temps [43] (FIGURE 2.5a) . Une classe particulière appartenant à la diffusion anormale se réfère au cas spécifique où $\alpha \geq 2$ et la diffusion est alors qualifiée de balistique ou hyper-balistique.

Dans le cas d’une PAP brownienne au sein d’un milieu homogène, il existe un MSD théorique [28, 45, 46] plus complexe qui alterne entre un comportement linéaire et super-diffusif avec le temps :

$$\text{MSD}(\tau) = [4D_T + 2v^2\tau_R]\tau + 2v^2\tau_R^2[e^{-\tau/\tau_R} - 1] \quad (2.5)$$

La courbe correspondant à cette expression est représentée dans la FIGURE 2.5b [19]. Pour un $\tau \ll \tau_R$, le comportement est réduit à celui de la diffusion brownienne, c’est-à-dire linéaire dans le temps. Cette linéarité est observée seulement pour une faible force d’autopropulsion. Ceci est dû au phénomène brownien sous-jacent ($\sqrt{2D_T\xi_x}$) prenant le

dessus par rapport au mouvement dirigé ($v \cos \theta$), et ce, pour de très courts temps. En effet, sur la [FIGURE 2.5b](#), plus la vitesse d'auto-propulsion est importante, plus tôt dans le temps la courbe du MSD se différencie de la droite correspondant au processus thermique.

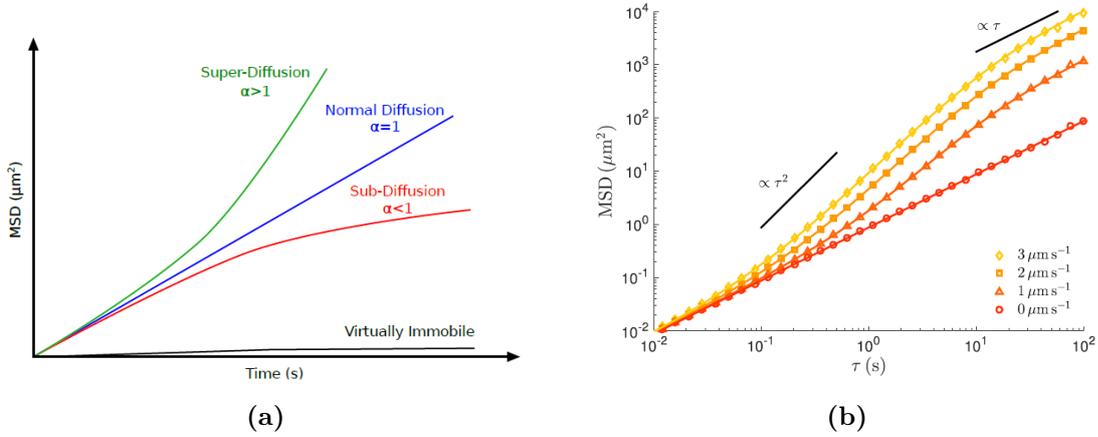


FIGURE 2.5 – (a) Les différents comportements théoriques d'une courbe MSD [42] en relation avec la valeur de α dans l'[EQUATION \(2.4\)](#). (b) Les courbes MSD d'une particule active pour plusieurs valeurs de sa vitesse d'auto-propulsion [19].

Lorsque l'échelle de temps augmente ($\tau \approx \tau_R$), le mouvement devient superdiffusif avant de revenir à une dépendance linéaire ($\tau \gg \tau_R$) dont le coefficient de diffusion effectif est augmenté d'un facteur multipliant la vitesse de la particule et le temps rotationnel : $D_{eff} = D_T + \frac{1}{2}v^2\tau_R$. Ce retour à la linéarité dans le temps est dû à la diffusion rotationnelle qui implique une randomisation de la direction de propulsion de la particule, le déplacement pour un temps important devenant donc une marche aléatoire brownienne. En somme, le mouvement d'une particule active dans un environnement homogène est balistique pour de courtes durées et diffusif à grandes échelles de temps, celles-ci correspondant à un τ plus grand que le temps de diffusion rotationnelle.

Le mouvement d'une particule active brownienne **seule dans un milieu homogène**, *i.e.* en l'absence de tout obstacle, diffuse thermiquement pour des très courtes échelles de temps, est **balistique** pour des échelles de temps moyennes et au-delà, retourne à un **régime diffusif** dont le coefficient de diffusion est augmenté d'un facteur proportionnel au temps de diffusion rotationnelle.

2.1.2 Bains actifs

Jusqu'ici une description non exhaustive du comportement d'une particule active a été réalisée. La prochaine étape est de caractériser le mouvement collectif d'un gaz de particules auto-propulsées browniennes. Il s'agit de l'homologue du gaz réel classique dont la différence réside dans la dynamique d'autopropulsion à laquelle les particules obéissent. En contraste avec la sous-section précédente, chaque particule est donc soumise à des forces d'interaction dues à la présence d'autres particules dans le milieu. Les particules peuvent entrer en collision (interactions stériques) ou interagir l'une avec l'autre à longue portée, introduisant dans le système un caractère dissipatif. Bien que ces interactions soient identiques à celles que subissent les particules passives à l'équilibre thermique dans un gaz classique, les dynamiques de ces gaz passifs et actifs s'avèrent pourtant dissemblables.

Ce système, complexifié par la présence d'interactions entre particules et environnement, est appelé bain actif ou gaz granulaire actif, en opposition aux gaz granulaire passif

ou gaz réel classique. Le qualificatif "granulaire" fait référence à l'omniprésence de forces dissipatives dues par exemple à des collisions entre particules ou avec un obstacle.

Dans le but de rendre compte des lois physiques qui régissent ces gaz, les interactions à courte ou longue portées sont instaurées dans les modèles via différentes techniques présentées brièvement ci-après.

Dans un gaz réel, qu'il soit actif ou passif, les particules se repoussent lorsqu'elles entrent en contact. Si la collision est élastique, alors la quantité de mouvement des deux particules est conservée. Si elle est inélastique, une dissipation du mouvement se produit et les deux particules sont ralenties ou s'arrêtent. Cette collision implique que les particules ne se superposent pas bien qu'elles puissent se déformer localement au contact avant de recouvrer leur forme initiale. Cette interaction, dite stérique, est généralement modélisée à l'aide d'un potentiel de répulsion. Ce potentiel peut présenter des discontinuités si le potentiel est abrupt, auquel cas les particules sont qualifiées de sphères dures (ou disques durs en deux dimensions), tel que

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \geq \sigma \\ \infty & \text{si } |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| < \sigma \end{cases}$$

où σ est le diamètre des particules. Pour éviter ces discontinuités lors du chevauchement, d'autres formes de ce potentiel de répulsion sont employées. Elles permettent par ailleurs un comportement plus uniforme en cas de collision. Notamment, Davoudi *et al.* [47] établissent un diagramme de phase d'une suspension de colloïdes à l'aide de l'activation d'un potentiel de Yukawa. 19 ans plus tard, Kryuchkov *et al.* [48] le combinent à une interaction dipolaire à longue portée. Ce modèle de Yukawa est un potentiel fréquemment utilisé, tout comme le potentiel de Lennard-Jones shifté et tronqué [49, 50]. Via la méthode des éléments discrets (DEM), cette interaction stérique peut aussi être implémentée à l'aide de la Loi de Hooke [51, 52] où une superposition maximale est tolérée, au-delà de laquelle une force de répulsion sépare les particules :

$$\vec{F}_n = -k_n \delta \vec{n}_{ij}$$

avec k_n la constante de raideur du ressort, δ la distance de superposition et \vec{n}_{ij} le vecteur joignant leur centre.

À partir de ces seules interactions stériques (*i.e.* absence de forces attractives), il est possible d'observer des amas (*clusters*) au sein d'une suspension active de colloïdes [12, 13, 29, 30, 36], ce qui contraste fortement avec l'absence de ces amas pour des particules passives dans une suspension peu dense. Cela peut être expliqué qualitativement : si on considère une collision frontale entre deux particules, celles-ci ne parviennent à se dépêtrer de l'amas qu'elles forment à deux qu'au moment où l'une des deux voit sa direction d'auto-propulsion pointer autre part que vers la particule avec laquelle elle est en contact. La figure qui schématise ce phénomène (FIGURE 2.6) met aussi en évidence la formation d'un amas à trois particules si le premier à deux particules n'a pas eu le temps de se dissoudre. Ce temps est comparable à celui que prend la particule pour se réorienter (τ_R , le temps de diffusion rotationnelle). C'est pourquoi, si le temps moyen entre deux collisions est suffisamment petit ($t < \tau_R$), ce qui requiert tout de même une certaine densité, des amas métastables se forment petit à petit.

Dans le travail de Palacci *et al.* [30], la répulsion à courte portée est accompagnée d'une interaction attractive dite phorétique à moyenne portée. À l'aide de ces deux types d'interaction, Palacci *et al.* imitent les conditions expérimentales d'un cristal "mobile" composé de colloïdes auto-propulsés. Le terme cristal mobile fait allusion au cycle de formation et rupture dynamique des amas au sein de la suspension. L'interaction phorétique mentionnée peut être contrôlée par l'illumination des colloïdes par la lumière : s'ils sont illuminés, elle

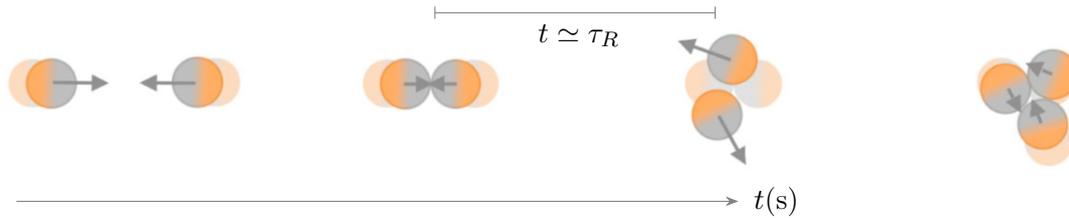


FIGURE 2.6 – Modélisation d’une collision entre deux particules actives et formation d’un amas à trois particules avant que celui à deux particules ait eu le temps de se dissoudre. Deux particules originellement en contact s’éloignent l’une de l’autre après un temps caractéristique τ_R [19].

est activée et entre en compétition avec la force d’autopropulsion. Dans ce cas, une densité de 0.03 à 0.2 est suffisante pour reproduire la formation des cristaux et leur temps de vie.

Cette observation met en évidence le mécanisme d’agrégation diffusiphorétique. La diffusiphorésie est définie comme étant la migration d’une particule colloïdale dans une solution en réponse à un gradient de concentration macroscopique [53]. Le gradient serait dans ce cas causé par l’interaction des profils de concentration autour de chaque particule qui les amènerait à former des amas [54–56]. Lorsque cette interaction est désactivée (*i.e.* la lumière est éteinte), une plus grande densité de 0.35 à 0.45 est nécessaire pour observer le même phénomène. Ce résultat est par ailleurs corroboré par le travail de Bialké *et al.* [57] où ils présentent une approche analytique au cas reprenant uniquement l’interaction répulsive (absence de force attractive).

Fily et Marchetti [12], en accord avec les résultats précédents, exposent l’existence d’une densité critique ($\phi_c = 0.4$) au-delà de laquelle une séparation de phase se produit : des amas de particules denses et macroscopiques se forment, entourés alors par un gaz dilué de faible densité. Même sous cette valeur critique, le regroupement des particules en amas est bien plus prononcé que dans un système thermique. Ces recherches conduisent à mettre en exergue le comportement d’auto-piégeage (ou *self-trapping*) des particules dans un amas.

Auto-piégeage (*nom*)

L’auto-piégeage (ou *self-trapping*) dans le contexte des bains actifs réfère au piégeage des particules formant un amas à la suite de **collisions** et dont l’orientation immédiate ne leur permet pas de s’en dégager [29]. Le temps requis pour qu’une particule s’éloigne de l’amas dépend de son **temps de diffusion rotationnelle** (τ_R).

La **FIGURE 2.7** met en image ce phénomène pour des colloïdes en concentration intermédiaire et est schématisé pour un amas de trois particules. Ce qui conduit au phénomène de piégeage est l’orientation de l’axe de propulsion des particules vers le centre de l’amas. Lorsque cette orientation varie, la particule se libère de son amas et retrouve un mouvement libre avant d’en rencontrer un autre. Ainsi, les regroupements de particules sont sans cesse changeants, dynamiques, ce qui vaut à ces bains de particules le nom de cristal actif. Par ailleurs, en biologie, des bactéries nageant à haute vitesse dans un bain engendrent elles-aussi des mouvements collectifs résultant en la formation de cristaux actifs (amas dynamiques) [58, 59].

La formation de tels amas entravant les mouvements des PAPs dans leur bain donne naissance à un phénomène de blocage (ou *jamming*), phénomène ayant déjà été longuement investigué dans le domaine des émulsions et systèmes granulaires passifs [60–63]. Il a même été observé dans des simulations de trafic de piétons [64].

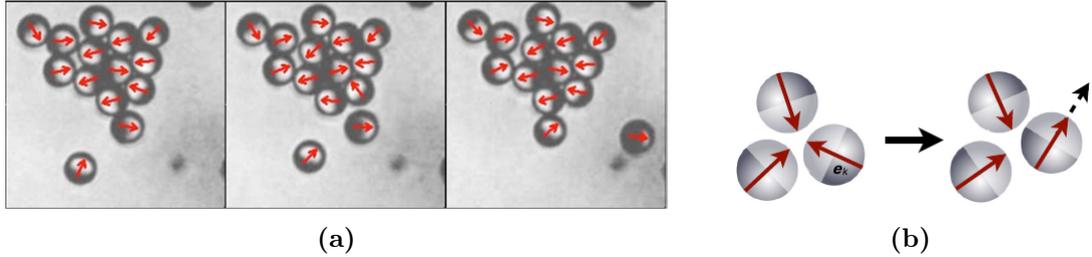


FIGURE 2.7 – Représentation de l’auto-piégeage [29] (a) lors d’une expérience de PAPs dans une suspension colloïdale de Buttinoni *et al.* où l’on remarque l’arrivée d’une particule venant remplacer une autre qui se libère de l’amas, (b) en schéma.

Il est dit que le système est bloqué quand la densité est suffisamment importante pour qu’il soit capable de résister à une force comme s’il était un solide à part entière, alors qu’il est constitué de grains *a priori* indépendants. Un solide est caractérisé par sa résistance finie au cisaillement et à la déformation [60]. Certaines propriétés du blocage sont associées à une transition de phase pouvant être déterminée par la mesure de la viscosité effective du fluide dont les fluctuations renseignent sur les changements dans le milieu [65]. Bien que l’activité des particules puisse réduire la probabilité que ce phénomène se produise, il existe tout de même du blocage local au centre des amas où les particules sont sous pression (*self-trapping* ou *self-jamming*). Plusieurs études ont montré l’incidence du blocage dans des bains actifs à haute densité, notamment pour des PAPs molles [66], ou pour des PAPs durs dont l’arrêt dynamique ($v \simeq 0$) survient à une densité critique ($\phi_c \simeq 0.8$) qui dépend fortement de l’activité des particules [67, 68].

Autrement encore, Yang, Manning et Marchetti [69] examinent l’agrégation et la ségrégation de particules actives soumises à de faibles interactions répulsives contre les murs d’une boîte en deux dimensions. Leurs principaux résultats sont en accord avec les comportements décrits plus haut dans le sens où une diffusion rotationnelle lente est nécessaire à une agrégation des particules contre les parois et que la pression au sein de la boîte diminue avec l’augmentation de la densité (au-delà du point de blocage), ce qui est unique aux systèmes actifs. Cette pression est non-homogène, en conséquence directe avec la non-homogénéité de la densité due au blocage.

Les interactions, comme déjà mentionné, peuvent ne pas se limiter au contact des particules entre elles et il est possible d’observer les phénomènes d’agrégation en présence de ces autres interactions à courte ou longue portée. Par exemple, van Dronghen *et al.* [18] en font la revue dans leur modèle de particules actives molles qui interagissent seulement à courte portée dans un milieu non confiné. Ils reproduisent les amas à l’aide d’une tension de surface et une force de cohésion de type Vicsek entre PAPs. Ces amas ont des comportements particuliers : certains d’entre eux migrent de façon aléatoire, d’autres tournent sur eux-mêmes sous forme de vortex lorsque l’alignement est faible. Ils mettent aussi en évidence que les amas migrants se déplacent avec un coefficient de diffusion trois fois plus grand que celui des particules individuelles.

Ce seul exemple concernant l’introduction d’interactions à plus longue portée dans les modèles numériques de bains actifs marque la fin de cette section. En effet, l’approfondissement d’études plus complexes, bien que utiles pour la curiosité et l’éveil scientifique, ne nous servira pas dans l’élaboration de notre modèle dont les seules interactions agissant sur les particules sont des interactions stériques répulsives et un alignement de type Vicsek.

2.2 Transport d'objets dans des bains actifs

Puisque le but de ce mémoire est de caractériser le mouvement d'une membrane à l'intérieur de laquelle sont placées des PAPs, il semble tout à fait naturel de considérer les cas des bains hybrides, c'est-à-dire qui sont constitués à la fois de PAPs et d'objets passifs. Il est d'ailleurs rare, dans la nature, de trouver un système actif qui voyage dans un environnement homogène, sans obstacles ou en l'absence d'autres agents au comportement différent. Ainsi, étudier une variante d'un milieu idéal nous rapproche peu à peu des réelles conditions que toute étude tend à reproduire.

2.2.1 Bains hybrides

Cette sous-section s'intéresse au dopage de bains passifs (resp. actifs) par des particules actives (resp. passives). Le premier cas est très brièvement expliqué étant donné son modeste intérêt dans le cadre de ce mémoire.

Lorsqu'une suspension de colloïdes est dopée par une très faible quantité de particules actives (moins de 1 %), le comportement du système change drastiquement. Ce dopage peut favoriser la cristallisation de la suspension [70, 71] comme il a été confirmé par Kümmel *et al.* [72]. En effet, des amas métastables se forment au cours du temps rassemblés par les quelques particules actives qui y circulent, similairement à un chien de berger qui regroupe les ovins. Une démonstration de ce phénomène se trouve [FIGURE 2.8](#). On y voit, petit à petit, un amas central se former et s'agrandir au fur et à mesure que les particules actives parcourent le milieu.

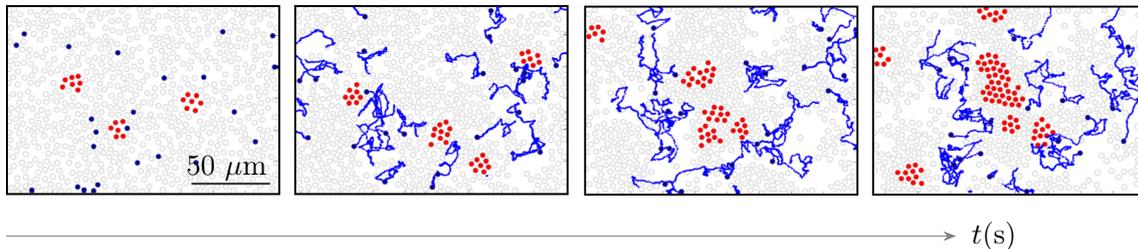


FIGURE 2.8 – Évolution au cours du temps d'une suspension de colloïdes (cercles vides) de densité 0.40 au sein de laquelle sont introduites des particules actives (densité de 0.01). Les points rouges sont les colloïdes rassemblés en amas et les trajectoires et points bleus représentent les mouvements des particules actives [72].

En inversant les proportions de particules actives et passives, nous nous retrouvons alors dans le cas où les particules passives sont à leur tour considérées comme des intrus. Comme attendu, les mouvements d'une particule passive dans un milieu à l'équilibre thermique ou plongée dans un bain actif hors-équilibre sont fondamentalement distincts. L'objet passif est soumis à des forces qu'appliquent sur lui ses voisins auto-propulsés et subit des fluctuations non-thermiques en conséquence. Il se comporte donc très différemment que s'il était introduit dans un bain thermique.

Wu et Libchaber [73] dès les années 2000 dressent la courbe des MSD d'une sphère en polystyrène dans un bain dense de bactéries mobiles *Escherichia coli* ([FIGURE 2.9](#)). Sa tendance est très proche de celle présentée dans la [FIGURE 2.5b](#), dans le sens où pour de courtes échelles de temps le colloïde se déplace selon le processus de superdiffusion et pour un temps plus grand son mouvement se rapproche d'un mouvement brownien.

Valeriani *et al.* [74], par après, confirment ce résultat en montrant une étroite correspondance entre l'expérience et les simulations de PAPs dures au moyen de courbes MSD également. La différence avec le profil MSD d'une PAP se marque dans la transition entre

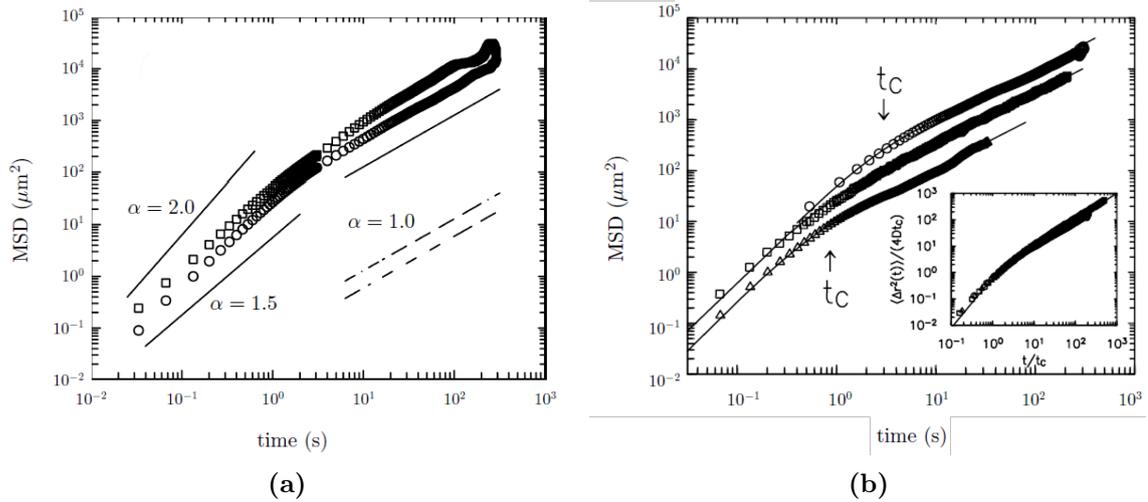


FIGURE 2.9 – (a) Les mesures de MSD réalisées sur des sphères en polystyrène de différents diamètres. Les carrés correspondent à un diamètre de $4.5 \mu\text{m}$ contre $10 \mu\text{m}$ pour les cercles. Les lignes pleines et en traits discontinus sont des aides visuelles. (b) Mesures de MSD effectuées sur une sphère en polystyrène de $10 \mu\text{m}$ de diamètre pour trois concentrations différentes de bactéries. Le temps critique t_C de transition entre superdiffusion et diffusion thermique augmente avec la concentration [73].

les deux régimes. Cette transition n'est pas dans ce cas liée au temps de diffusion rotationnelle τ_R mais plutôt à la densité et à l'activité des particules actives qui le contraignent. C'est pourquoi les courbes MSD pour différentes concentrations du bain en bactéries, bien que leur tendance soit semblable, ne possèdent pas une transition entre les deux régimes en un point systématiquement identique.

Le mouvement d'une **particule passive** (traceur) dans un bain actif est **super-diffusif** pour de courtes échelles de temps et **diffusif** au-delà. La transition entre les deux régimes dépend de la **densité du milieu** et de l'activité des particules auto-propulsées.

On remarque effectivement dans la [FIGURE 2.9b](#) que l'augmentation de la concentration provoque un retardement de la transition, *i.e.* elle se produit à un temps critique t_C plus long. La taille de la sphère quant à elle joue un rôle attendu dans le sens où elle entraîne une migration de la courbe vers le haut ([FIGURE 2.9a](#)) lorsque la sphère a un diamètre plus petit. En effet, un objet plus léger et donc plus facile à déplacer signifie un plus grand coefficient de diffusion tout au long de son mouvement (en accord avec l'expression de $D_T \propto 1/R$ dans l'[EQUATION \(2.1\)](#)).

En 2011, Miño *et al.* [75] réitèrent l'expérience de Wu et Libchaber à l'aide d'une population de bactéries et de micro-nageurs artificiels en forme de tiges avec des mécanismes d'auto-propulsion différents : ils ne disposent pas de flagelle contrairement aux bactéries. Leur objectif est de caractériser le transfert d'impulsion par les bactéries au fluide en étudiant le mouvement des traceurs passifs. Ils arrivent à la conclusion que la diffusion des traceurs est accrue par rapport à la diffusion brownienne, et que le coefficient de diffusion dépend linéairement de l'activité, celle-ci étant exprimée comme le produit de la densité et de la vitesse moyenne du gaz de PAPs. Ils justifient ces résultats par la survenance des collisions entre les nageurs actifs et les traceurs.

De manière générale, la contribution des particules actives à la diffusion accrue des

traceurs passifs peut être due à deux types d'interactions : hydrodynamiques [76–79] et collisionnelles [74,76] en fonction des paramètres du milieu étudié.

2.2.2 Objets non-sphériques

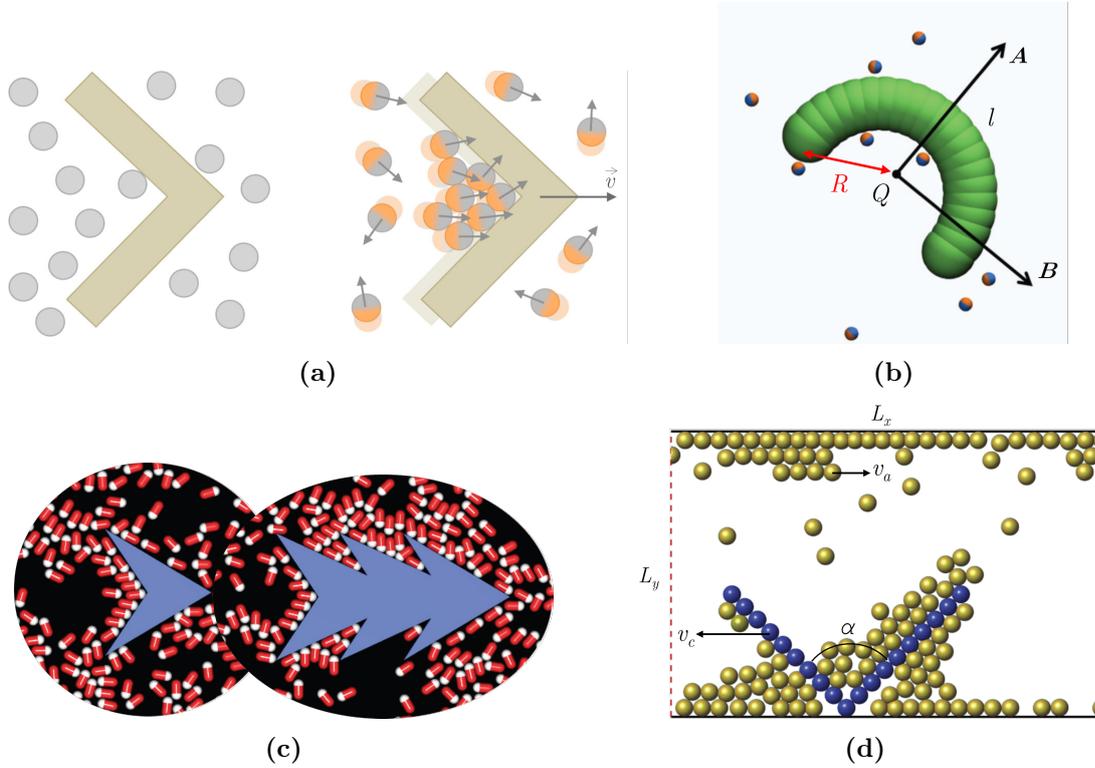


FIGURE 2.10 – Différentes formes de particules asymétriques passives : (a) barrière en forme de coin (*wedge*) [19], (b) traceur courbé [80], (c) micro-navettes avec un nombre de dents variable [81] et (d) barrière en forme de V [82].

Si le mouvement d'une particule passive sphérique est principalement diffusif avec un passage par un régime superdiffusif, il est intéressant de considérer les objets passifs asymétriques dont la forme particulière induit leur mouvement dirigé. En toute généralité, en deux dimensions, ces objets présentent une brisure de symétrie selon un axe. Différentes formes d'intrus passifs rencontrées dans la littérature [19, 80–82] sont présentées [FIGURE 2.10](#).

Le mouvement dirigé d'un traceur asymétrique peut être aisément expliqué de façon qualitative : la [FIGURE 2.10a](#) [19] en est l'illustration schématique. Le côté gauche de la figure met en avant l'absence de mouvement de l'intrus dans une direction spécifique dans le cas où il est placé dans un bain de particules browniennes passives. De par leur marche aléatoire, la force moyenne résultante que ressent l'intrus est nulle en raison d'une pression égale et symétrique de part et d'autre de celui-ci. Dans le cas du bain actif, le déplacement vers la droite de la barrière est due à l'agglomération des particules actives dans son coin anguleux qui la poussent selon la direction indiquée par leur orientation, occasionnant donc une force nette responsable du mouvement.

Il en va de même pour toutes les formes représentées dans la [FIGURE 2.10](#) qui, bien qu'elles ne possèdent pas toutes un coin anguleux, leur creux ou concavité permet l'accumulation des particules actives. Par ailleurs, nous noterons qu'une caractéristique essentielle

à l’amorçage de ce phénomène est que la taille de cette cavité doit être supérieure au diamètre de ces particules afin de leur permettre de s’y loger.

L’étude du mouvement de ces différents intrus a conduit à l’établissement de moult résultats, souvent très intuitifs. Plusieurs articles analysent les divergences dans les propriétés du mouvement pour des géométries différentes. C’est le cas notamment de Angelani et Di Leonardo [81] dont les observations s’accordent avec le raisonnement qualitatif admis ci-haut : via une simulation d’un bain de bactéries dans lequel sont plongées tour à tour des micro-navettes dentées (FIGURE 2.10c), et en contraignant d’abord leur mouvement à une seule dimension, ils trouvent une forte dépendance entre le nombre de dents de la navette et sa vitesse : celle-ci croît linéairement avec le nombre de creux (lié au nombre de dents) dans lesquels les PAPs se logent (FIGURE 2.11a). Après relaxation des contraintes dimensionnelles, le MSD dans le plan s’avère d’abord balistique avec une transition à une marche aléatoire pour de grandes échelles de temps similairement au déplacement des PAPs. Le changement aléatoire d’orientation de la navette est dû aux collisions avec les bactéries.

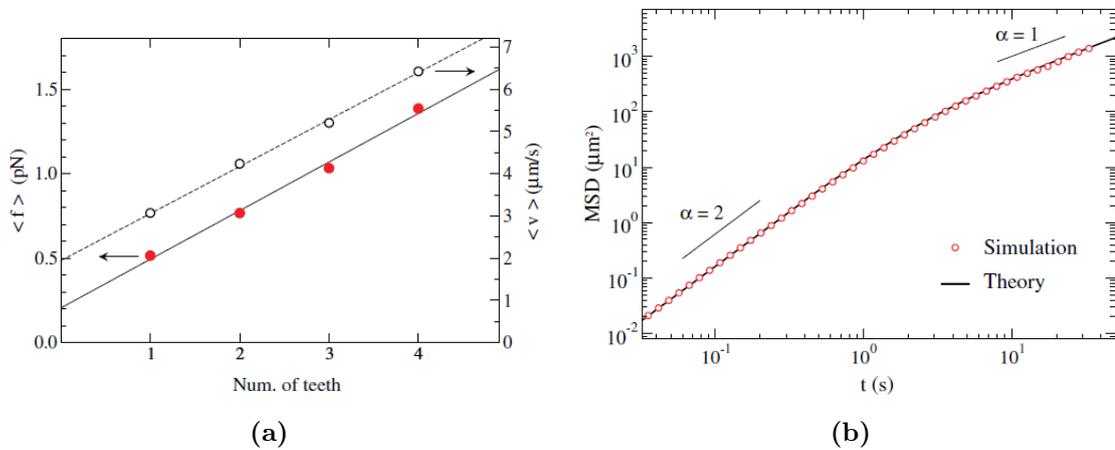


FIGURE 2.11 – Immersion d’une navette (FIGURE 2.10c) dans un bain de bactéries. (a) Dépendance linéaire de la force moyenne exercée sur la navette par les bactéries (points rouges remplis) et de la vitesse de la navette (points vides), avec le nombre de dents. (b) MSD de la plus petite navette (une dent de chaque côté) [81].

De la même façon, Mallory, Valeriani et Cacciuto [80] cherchent à contrôler le transport de particules passives en adaptant leur géométrie. À l’aide d’un large traceur concave plongé dans une simulation d’un bain actif de faible densité, ils illustrent l’importance de la courbure d’un tel traceur par rapport à ses propriétés de déplacement. Pour ce faire, en sachant que la taille l du traceur est toujours identique, ils quantifient la courbure par la valeur du rayon R de l’arc. La notation en schéma se trouve FIGURE 2.10b. Une grande courbure correspond à une petite valeur de R , et donc la diminution de ce rayon implique une rupture de symétrie de plus en plus significative. Ainsi une tige droite a une courbure nulle (R est infini).

Les auteurs démontrent dans la FIGURE 2.12 non seulement que le mouvement est balistique pour des temps courts mais aussi que la transition vers l’état diffusif, s’il existe, est retardée par l’accentuation de la courbure. Le coefficient de diffusion pour des temps longs montre la même dépendance. Cette observation se justifie par la preuve [83] qu’une courbure positive d’une surface pousse les particules actives vers une orientation stable où l’axe de propulsion devient parallèle à la normale de la surface. Elle peut donc agir comme une force de rappel avec un effet stabilisant, allongeant ainsi le délai d’évacuation des particules par les côtés. Enfin, il est observé que le mouvement dirigé d’un tel traceur n’est possible que si la longueur de persistance d’une particule active est considérablement plus grande que la dimension du traceur.

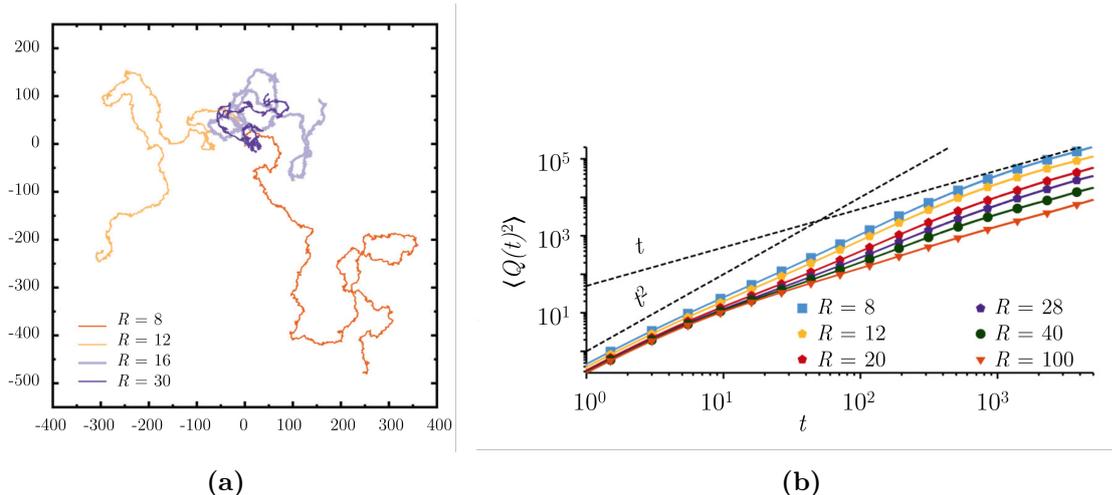


FIGURE 2.12 – Immersion d'un traceur courbé (FIGURE 2.10b) dans un bain actif de faible densité ($\Phi = 0.005$) [80]. Pour différentes valeurs de R relatives à la courbure du traceur (R grand équivaut à une faible courbure) : (a) Trajectoires, (b) MSD du centre de masse Q .

Ces résultats indiquent que le régime balistique ne nécessite pas un bain actif de grande densité pour dominer dans le mouvement du traceur, mais ne confère que peu d'informations sur l'influence de la densité et sur la forme la plus adaptée entre celle en "U" et en "V".

Smallenburg et Löwen [84] trouvent que la forme en "U" est idéale pour obtenir le transport le plus efficace. Kaiser *et al.* [85] comparent expériences et simulations sur le mouvement dirigé d'un traceur en forme de "V" et concluent que la densité la plus propice d'engendrer un transport efficace du traceur est observée à une densité intermédiaire ($0.25 \lesssim \phi \lesssim 0.75$) entre l'état dilué et bloqué. Ils l'expliquent par l'accumulation de bactéries autour du sommet du traceur qui agit comme un bouclier contre les tourbillons des turbulences sans pour autant détruire l'ordre polaire des bactéries en son centre. Par ailleurs, il est possible de le comprendre qualitativement : un état bloqué ralentit le traceur dû au manque de mobilité des bactéries tandis qu'un état dilué n'offre pas à assez de bactéries qui puissent venir se loger dans le coin du traceur pour le pousser, la force de quelques bactéries n'étant pas suffisante pour vaincre la friction du traceur avec la surface. De surcroît, le traceur voyage à sa vitesse maximale lorsque son ouverture approche les 90° .

Les particules actives ont une plus grande probabilité de **s'accumuler** le long d'un objet courbé, qui présente donc une partie **concave**. La courbure augmente le phénomène d'agrégation au sein de la concavité de l'objet et ainsi son mouvement dirigé.

Du côté des études plus récentes, on retrace notamment la modélisation novatrice d'une barrière en forme de "V" (*i.e.* en forme de coin) dans un canal confiné uniquement selon la dimension verticale. Le système n'est pas composé de particules browniennes actives répondant aux équations stochastiques dressées dans l'EQUATION (2.1), mais de particules actives chirales [82] (FIGURE 2.10d). Celles-ci présentent la caractéristique supplémentaire d'avoir un sens de rotation privilégié dû à la présence d'une vitesse angulaire initiale positive ou négative (dans le système de référence). Leur trajectoire est dès lors plutôt circulaire, voire hélicoïdale dans ce cas-ci, avec une vitesse de translation moyenne dans une direction donnée entièrement déterminée par le signe de la vitesse angulaire. En effet, dans le cas où le rayon de la trajectoire circulaire des particules chirales est significativement plus grande

que le diamètre du canal, les particules glissent le long des murs [82].

Ils envisagent deux possibilités selon la fixation ou non de la barrière. Lorsque celle-ci est autorisée à se mouvoir dans la direction longitudinale, deux principales singularités sont observées : le mouvement de l'obstacle est opposé à celui des particules chirales (et donc déterminé par leur vitesse angulaire), et sa vitesse est considérablement plus grande que celle des particules (d'un facteur 100). Ce comportement est le fruit de collisions entre l'objet de petite masse et l'amas mobile de particules actives dont la masse totale est plus importante. La principale différence avec les précédentes études présentées ici est que le déplacement résultant se fait perpendiculairement à son axe privilégié de mouvement (axe de symétrie).

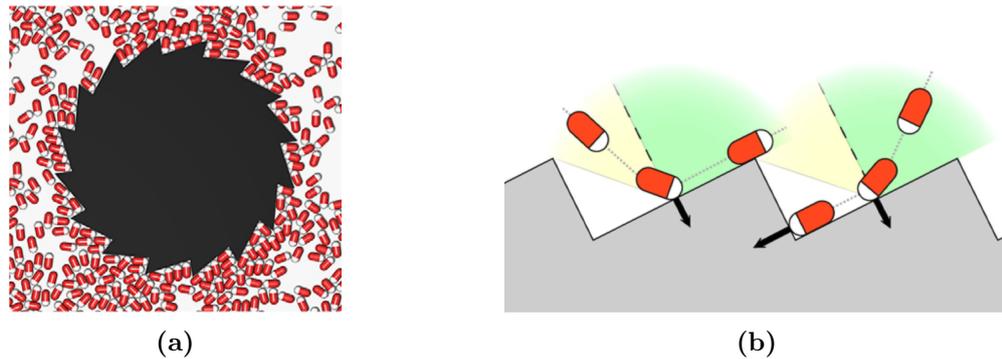


FIGURE 2.13 – (a) Engrenage à 16 dents dont la rotation est anti-horaire et disposée dans un bain de bactéries modélisées [86]. (b) Schéma représentant l'interaction de bactéries avec les dents asymétriques d'un objet en forme d'engrenage [19].

Au-delà de l'immersion d'objets asymétriques, des expériences et simulations relatent la rotation spontanée de roues dentées (ou engrenages) causée par l'interaction avec les particules actives [87–91]. De la même façon que pour les objets asymétriques, les PAPs sont piégées entre les dents asymétriques de l'engrenage et exercent une force sur celles-ci, entraînant sa rotation dont le sens est déterminé par la forme des dents. La FIGURE 2.13 illustre ce phénomène par un schéma simplifié et par une vue plus globale d'un engrenage à 16 dents au sein d'un bain actif de bactéries. La vitesse de rotation d'une telle roue accroît avec son nombre de dents [90], pour autant que l'accumulation de bactéries dans les coins de la roue soit toujours permise (*i.e.* l'espace inter-dents doit demeurer suffisamment grand). La vitesse de rotation en outre est soumise à des fluctuations importantes autour d'une valeur moyenne non nulle [88]. Comme attendu, à de hautes concentrations de particules actives, leur mobilité réduite diminue le taux de rotation de la roue [89].

2.2.3 Membranes flexibles

La description extensive de l'introduction d'objets rigides passifs dans des milieux composés de particules actives est suivie, tout naturellement, par la problématique d'objets flexibles. Ces objets qualifiés de flexibles, auxquels on réfère en tant que chaînes ou filaments, présentent deux caractéristiques : ils peuvent changer de forme en fonction des forces auxquelles ils sont soumis mais ne peuvent pas se diviser ou se détériorer. Ils peuvent également présenter une certaine élasticité et rigidité. La propriété d'élasticité informe sur la capacité qu'a l'objet de s'étendre si soumis à des forces externes tandis que la rigidité rend compte de la propriété qu'a l'objet de recouvrer sa forme à l'équilibre et de résister plus ou moins fortement à une déformation.

La façon la plus fréquente d'implémenter la construction d'un filament dans des modèles numériques [92–94] consiste à lier (par des forces de rappel, *i.e.* ressorts imagés) des

particules individuelles entre elles, bout à bout, jusqu'à former un filament de la longueur voulue. La FIGURE 2.14a en donne l'illustration schématique. Aucune rigidité n'est encore introduite, contrairement à l'élasticité qui est inhérente à la loi de rappel des ressorts.

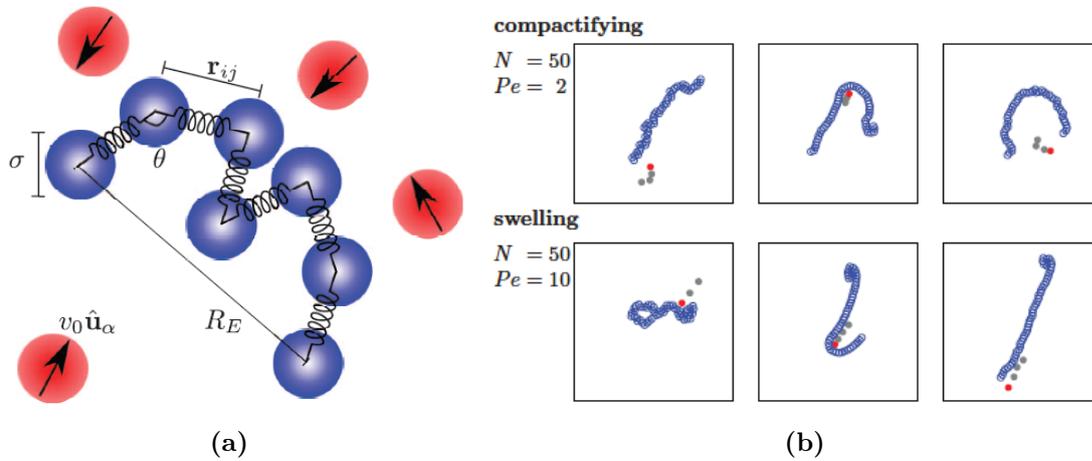


FIGURE 2.14 – (a) Schéma du système d'une chaîne avec un petit nombre de monomères $N = 7$ en bleu liés entre eux par des ressorts imagés avec un angle θ . La distance entre les deux extrémités R_E est indiquée. Les particules actives propulsées selon l'axe indiqué par leur flèche sont en rouge. (b) Séquences montrant le compactage et l'extension d'un polymère provoqués par une particule active [92].

Ces particules constitutives sont appelées monomères et le filament résultant un polymère. La physique de ce type de structure, propice à la modélisation d'entités biologiques telles que les protéines, est gouvernée par des lois d'échelles dans un bain thermique [92]. En effet, il existe des méthodes pour caractériser le mouvement des polymères dans une solution, parmi lesquelles on trouve les exposants de Flory. Ces derniers lient l'extension de la chaîne R_E à son poids moléculaire N élevé à l'exposant de Flory ν .

Plus intuitivement, la distance moyenne entre les deux extrémités du filament dépend du nombre de monomères qui le composent et de la dimension du milieu. Cette relation d'échelle est donnée ci-après (EQUATION (2.6)). Pour appréhender la signification de cette distance, la littérature introduit le rayon de giration R_g qui contient à la fois l'information sur la taille du polymère et qui tient compte de la position relative de tous les monomères qui le composent, contrairement à R_E . Le rayon de giration est la moyenne de la distance au carré de chacun des monomères par rapport au centre de masse du polymère :

$$R_E \propto N^\nu, \quad R_g^2 = \frac{1}{2N^2} \sum_{i,j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 \quad (2.6)$$

où \vec{r}_i est la position du monomère i . Il est important de noter que cette loi n'est valable que dans le cas où N est très grand. Dans le cas d'un bain thermique, un lien mathématique existe entre l'extension du polymère R_E et son rayon de giration tel que :

$$R_g \simeq \frac{R_E}{6^\nu} \simeq a \left(\frac{N}{6} \right)^\nu,$$

avec a la taille d'un monomère.

Selon la dimension du milieu et les contraintes de la chaîne, l'exposant de Flory diffère. Nous faisons d'abord la distinction entre une chaîne dite gaussienne (correspondant au

modèle de Rouse) et une chaîne auto-évitante. La seconde interdit la superposition de ses monomères dans l'espace, contrairement à la première, c'est-à-dire qu'elle adopte l'idée de volume exclus, n'autorisant aucun chevauchement. Une chaîne gaussienne est caractérisée par $\nu = 1/2$ tandis que pour une chaîne auto-évitante l'exposant de Flory varie avec la dimension : en 2D, $\nu = 3/4$ et en 3D, $\nu = 3/5$ [92]. Cette loi de proportionnalité est établie dans le cadre de l'équilibre thermique uniquement, c'est pourquoi il est intéressant d'en investiguer la variation lorsque le bain est soumis aux fluctuations thermiques engendrées par des particules actives.

Les études qui s'attaquent à cette problématique sont assez nombreuses, et nous tentons, comme pour les sections précédentes, d'en décrire les principaux résultats. La communauté scientifique porte un intérêt tout particulier à ces systèmes depuis 2014, notamment dans le cadre de la biologie au niveau des filaments d'actine par exemple ou de microtubules [4, 95, 96].

Parmi les premiers instigateurs [92] à étudier ces systèmes, on retrouve Kaiser et Löwen. Ils firent les premières observations d'une chaîne auto-évitante pleinement flexible plongée dans un milieu à deux dimensions de très faible densité en particules actives. Leurs principaux résultats se déclinent comme suit :

- De manière générale, la distance entre les extrémités du filament augmente avec le poids moléculaire N . La tendance se divise en trois phases : pour de petites longueurs, le filament s'étend plus fortement qu'à l'équilibre thermique ($\nu > 3/4$), dû aux événements où une bactérie s'introduit dans les enroulements du polymère et le force à s'étendre. Des N intermédiaires accroissent l'enroulement du filament, c'est pourquoi un plateau est atteint avant de transiter vers le comportement prédit par Flory ($\nu = 3/4$). L'origine de ce retour à un comportement thermique s'explique par les collisions des bactéries avec la plus longue chaîne, sachant qu'elle ne peut superposer ses monomères. Pour une densité finie (plus grande), l'étirement de la chaîne est également compensée par les collisions.
- L'extension de la chaîne est favorisée par une haute activité du bain bien que cette tendance ne soit pas monotone. Pour une faible activité, la chaîne tend à être compactée jusqu'à une certaine valeur limite de l'activité suivie alors par une dilatation accrue du polymère.
- Via le calcul du MSD pour le centre de masse du polymère, l'accent est mis sur sa dynamique balistique à des temps intermédiaires qui renseigne sur le transport de la chaîne effectué par les particules qui la tirent avec elles.

Le compactage et l'extension du polymère engendrés par le contact avec une particule active est montrée dans la [FIGURE 2.14b](#).

Quelques mois suivant cette étude, Harder, Valeriani et Cacciuto [93] l'approfondissent en ajoutant un degré de rigidité variable au polymère. Cette propriété supplémentaire induit une inversion de tendance dans les conformations du polymère. Pour une chaîne pleinement flexible, le rayon de giration moyenné sur le temps augmente avec l'activité du bain, confirmant les résultats de Kaiser et Löwen. Néanmoins, lorsqu'une certaine rigidité contraint le polymère, même très faiblement, celui-ci devient plus compact (comparé à sa structure à l'équilibre thermique) en présence de particules actives, contrairement au cas précédent. Cela est d'autant plus marqué que la rigidité est accrue, et on note une légère réduction du compactage pour de grandes activités. Le graphe présenté dans la [FIGURE 2.15b](#) met ceci en évidence.

Étant donné que le polymère rigide est initialement étendu à son maximum ou presque, une asymétrie dans les forces ressenties par la chaîne peuvent suffire à le courber. La

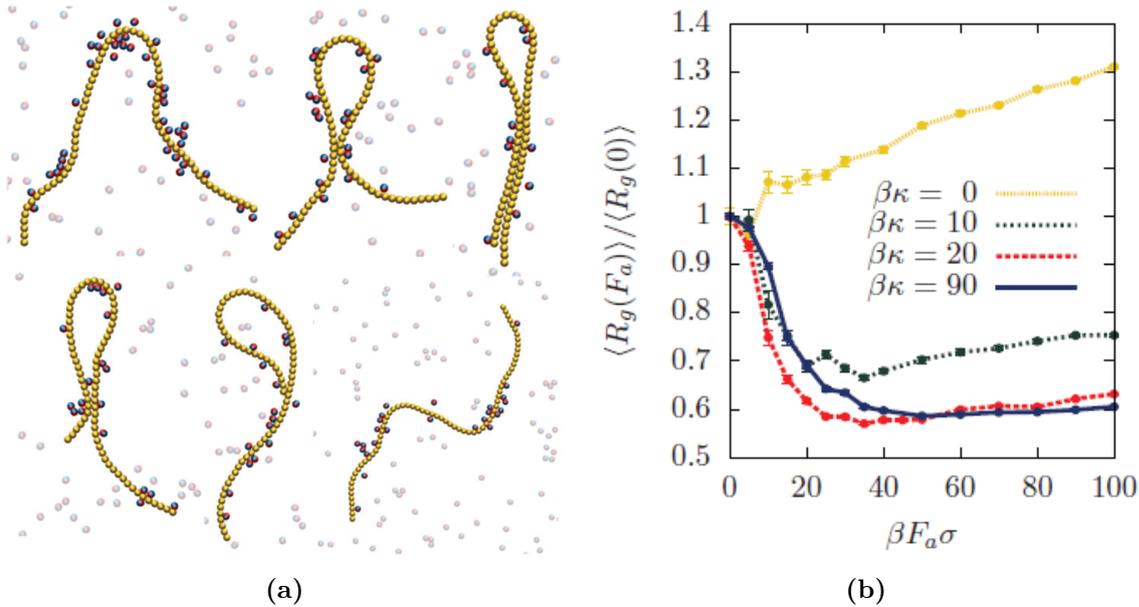


FIGURE 2.15 – (a) Séquences de la simulation de Harder, Valeriani et Cacciuto [93] montrant les différents stages de pliage et dépliage du filament. Les particules actives qui ne sont pas en contact avec (ou proche du) filament sont semi-transparentes. (b) Le rayon de giration moyenné sur le temps et normalisé par sa valeur calculée en absence d’activité du bain, en fonction de la force de propulsion F_a pour des rigidités κ différentes.

combinaison des forces s’appliquant sur les régions interne et externe du polymère crée un pivot autour duquel le filament se plie en forme d’épingle avant d’à nouveau se déplier (voir FIGURE 2.15a). À noter que leurs PAPs interagissent uniquement via répulsion stérique.

À la suite de ces études, comme déjà mentionné, une pléthore de recherches similaires voit le jour. Elles sont non seulement numériques et expérimentales mais aussi théoriques [97] tandis que d’autres se concentrent sur des chaînes constituées elles-mêmes de monomères actifs [95, 98, 99].

Une chaîne semi-flexible (resp. flexible) **auto-évitante** dans un bain de particules actives est rendue plus **compacte** (resp. se dilate) sous l’action des PAPs. Elle peut suivre un cycle dynamique de ploiement/déploiement au cours du temps. Une large distribution de conformations y sont accessibles.

Bien que la littérature scientifique fournisse encore de maintes recherches concernant ces systèmes, leurs résultats plus spécifiques ne rentrent pas dans le cadre de ce travail. En effet, l’objectif final concerne plutôt une application de cette rigidité sur des membranes fermées (la chaîne n’a pas d’extrémité à proprement dit) ou vésicules. Trois articles en particulier motivent notre travail : la déformation de vésicules géantes par des PAPs présentée par Vutukuri *et al.* [7] et complétée par l’étude de Ross *et al.* [4] sur le contrôle de microtubules, et la dynamique de mouvement de superstructures dont la frontière est une membrane fermée et constituée de PAPs par Boudet *et al.* [6].

Les PAPs, comme indiqué plus haut, ont tendance à s’accumuler dans les parties concaves d’objets rigides (*e.g.* roue dentée) ou même flexibles (*e.g.* ploiement d’un polymère). Si ce phénomène est présent en simulation et expérience avec des PAPs synthétiques, il l’est aussi au niveau des cellules vivantes en biologie. Constituées d’une membrane externe semi-flexible dans laquelle sont confinées des structures de même acabit que les PAPs, elles sont soumises à des déformations complexes à leur frontière qui leur permettent de

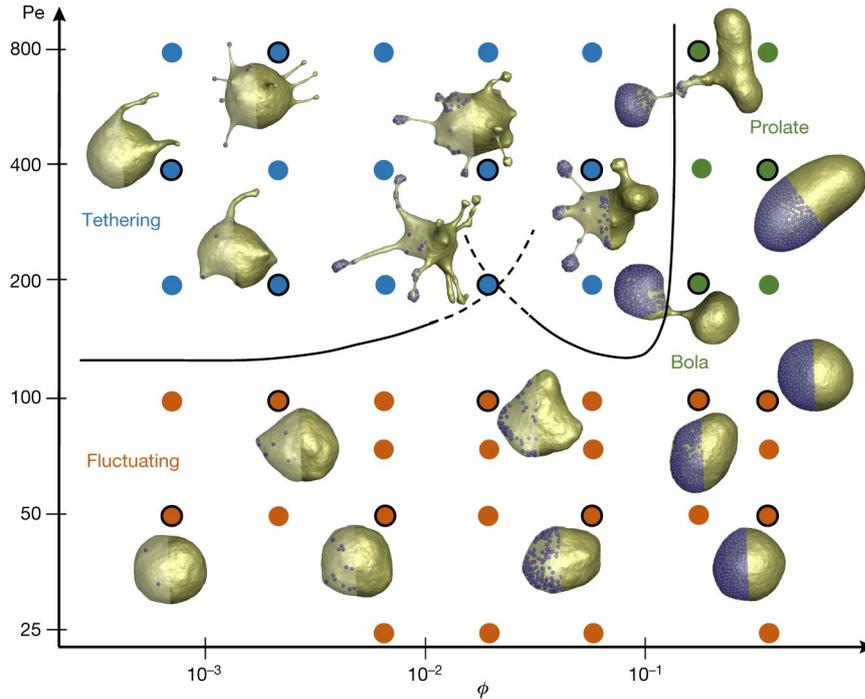


FIGURE 2.16 – Diagramme d'état des structures membranaires construit à partir de simulations en fonction de l'activité des particules auto-propulsées (nombre de Péclet Pe) et de la densité (fraction volumique/surfacique ϕ). Présence de trois régimes : "tethering" en bleu (formation de branches attachées à la vésicule mère), le régime fluctuant en orange, et bola/oblong ("prolate") en vert [7].

parcourir et détecter leur environnement ou de répondre à des stimuli externes [100, 101]. Ces déformations hors-équilibre sont dues à des forces locales par des organites ou autres entités auto-propulsées et provoquent une déformation globale et dynamique de la cellule. Ce sont ces déformations particulières dont Vutukuri *et al.* font la description.

À l'aide à la fois de simulations numériques et d'expériences avec des PAPs Janus sphériques, ils dressent un diagramme d'état des différentes structures membranaires (voir FIGURE 2.16). Ils y font varier l'activité des PAPs quantifiée indirectement par le nombre de Péclet, ainsi que la densité des PAPs au sein de la vésicule, et observent la formation de structures complexes. Elles sont alors classées selon trois régimes auxquels sont associées trois couleurs spécifiques dans le diagramme :

- **Tethering** : ce régime correspond à l'apparition de sortes de dendrites ou branches accrochées à la vésicule mère au bout desquelles des vésicules satellites se forment suite à l'accumulation de PAPs dans une même branche. Ce régime existe pour des valeurs faibles à modérées de ϕ et une valeur suffisamment grande de Pe .
- **Fluctuant** : ce régime est caractérisé par une forme quasi-sphérique des vésicules et l'absence de branches. Il apparaît pour des faibles activités Pe .
- **Bola/oblong** : pour de grandes valeurs de Pe et ϕ , des déformations plus globales (en contraste avec les dendrites) se produisent et conduisent à des vésicules en forme de poire, oblongues avec quelques vésicules satellites.

Leurs résultats numériques et expérimentaux se raccordent assez fidèlement à leurs estimations théoriques qui impliquent les tensions membranaires passive et active, l'élasticité de flexion, et la conservation de l'aire. Ils montrent par ailleurs que pour une grande tension passive (correspondant indirectement à un certain degré de rigidité ici), une faible

activité n'est plus suffisante pour exercer des déformations de la membrane. L'apparition puis disparition des branches dendritiques avec ϕ s'expliquent quant à elles par l'agglomération inévitable des PAPs le long des plus grandes courbures et donc préférentiellement au sein d'une même branche.

Ainsi, grâce au confinement de PAPs dans une membrane fermée (ou vésicule), des structures inexistantes dans le cas passif surviennent dans le cas actif. Leur caractère dynamique est dû à la réorientation constante des PAPs, étant donné qu'elles peuvent quitter à tout moment une branche pour se rediriger vers le centre. Ce phénomène est évidemment ralenti lorsque la densité de particules est grande au vu du nombre de collisions et de la formation subséquente d'amas.

Au-delà des déformations membranaires introduites par Vutukuri *et al.*, l'influence des PAPs sur les éléments composant le cytosquelette peut aussi être étudiée. Ross *et al.* [4], dans une récente étude sur la matière active, ont pu montrer qu'il était possible de façonner le mouvement dynamique d'une structure biologique active par un contrôle optique. Cette structure, faite de microtubules purifiés et de protéines motrices activables par la lumière, se contracte sous l'effet d'un motif particulier de lumière (dans ce cas-ci, un cylindre) qui l'illumine. Les protéines, assimilées à des PAPs, se lient entre elles et rassemblent les microtubules selon leur pôle positif, créant une structure en étoile sous l'action de la lumière. Cette étoile peut se mouvoir à différentes vitesses en suivant le cylindre de lumière qui se déplace progressivement. Ce déplacement est associé à des flux d'entrée et de sortie de microtubules de la structure au cours du temps, garantissant qu'il s'agit bien d'une structure dynamique et non constante. Si deux étoiles séparées dans le milieu se forment, elles auront tendance à se rapprocher l'une de l'autre progressivement avant de fusionner.

Ces phénomènes hors-équilibre varient en fonction de différents paramètres tels que le diamètre du cylindre de lumière illuminant le milieu ou encore la vitesse de déplacement du cylindre. Ainsi, la régulation de ces paramètres permet à la structure de parcourir des trajectoires complexes prédéfinies (comme une spirale par exemple). Ces possibilités de contrôle créent des opportunités en matière d'ingénierie avec la matière active. Cette dernière est très présente dans les cellules biologiques et est connue pour détenir un rôle important dans certains mécanismes cellulaires tels que la réplication et la locomotion. C'est pourquoi la caractérisation physique de structures actives est d'autant plus précieuse qu'elle permet une meilleure compréhension de mécanismes à l'échelle microscopique et graduellement un potentiel contrôle des processus fondamentaux liés à la division cellulaire.

L'article de Vutukuri *et al.* envisage uniquement le cas de membranes bicouches dans leurs simulations dont les propriétés d'élasticité, de tension et de flexion sont spécifiques à celles des vésicules biologiques. Notamment, dans le diagramme de la [FIGURE 2.16](#), il s'agit d'une vésicule dite flasque dont la tension (ou rigidité) est très faible, avec une grande élasticité comme le montre l'apparition de différentes branches. Boudet *et al.* quant à eux confinent des robots actifs en forme de bâtonnet dans une membrane déformable peu - voire pas - élastique. Leur stratégie se base sur la robotique en essaim (utilisation de robots simples dont l'intérêt individuel est faible mais dont les capacités d'assemblage ou d'auto-organisation en font un système collectif intelligent) qui s'apparente au système de particules actives browniennes envisagées dans notre travail. Leur objectif principal est de prouver les fonctionnalités multiples d'un tel système via la réalisation de tâches déterminées, et de comprendre les paramètres physiques qui contrôlent sa motilité. Cela servira à développer des outils pour pouvoir les diriger dans l'espace. Pour ce faire, ils réalisent une étude des forces au sein de ces superstructures ainsi que de l'influence de l'environnement dans lequel elles évoluent.

Cette étude [6] s'attaque donc à un autre aspect des structures déformables : leur mobilité dans l'espace, et non les déformations complexes qu'elles subissent. Ceci permet de compléter l'article sur les vésicules décrit précédemment [7]. La mise en mouvement de ces superstructures est due à l'alignement parallèle des robots entre eux perpendiculairement à la membrane déformable. Cet arrangement polaire résulte de leur capacité à s'auto-organiser, bien que leurs interactions mutuelles soient uniquement stériques.

Selon la littérature scientifique, cette auto-organisation est une condition nécessaire et suffisante à la découverte de l'environnement par la superstructure [102]. Pour qu'elle se manifeste spontanément, le modèle doit répondre à au moins un des deux critères suivants : la géométrie des PAPs doit être asymétrique selon au moins un axe de telle sorte à ce qu'elles privilégient un placement côte à côte, ce qui est le cas des robots utilisés par Boudet *et al.*, ou la dynamique d'autopropulsion de la particule doit présenter un couplage mutuel entre le vecteur vitesse de la particule et son vecteur d'orientation [103]. Ce dernier critère assure que lors d'une collision entre deux particules, les deux vecteurs résultants ne sont plus colinéaires et par le couplage, ce phénomène induit un alignement temporaire des deux particules. Ces deux facteurs induisent un alignement des particules qualifié de spontané, mais il peut aussi être provoqué par un agent externe ou une interaction modulée telle que celle de Vicsek.

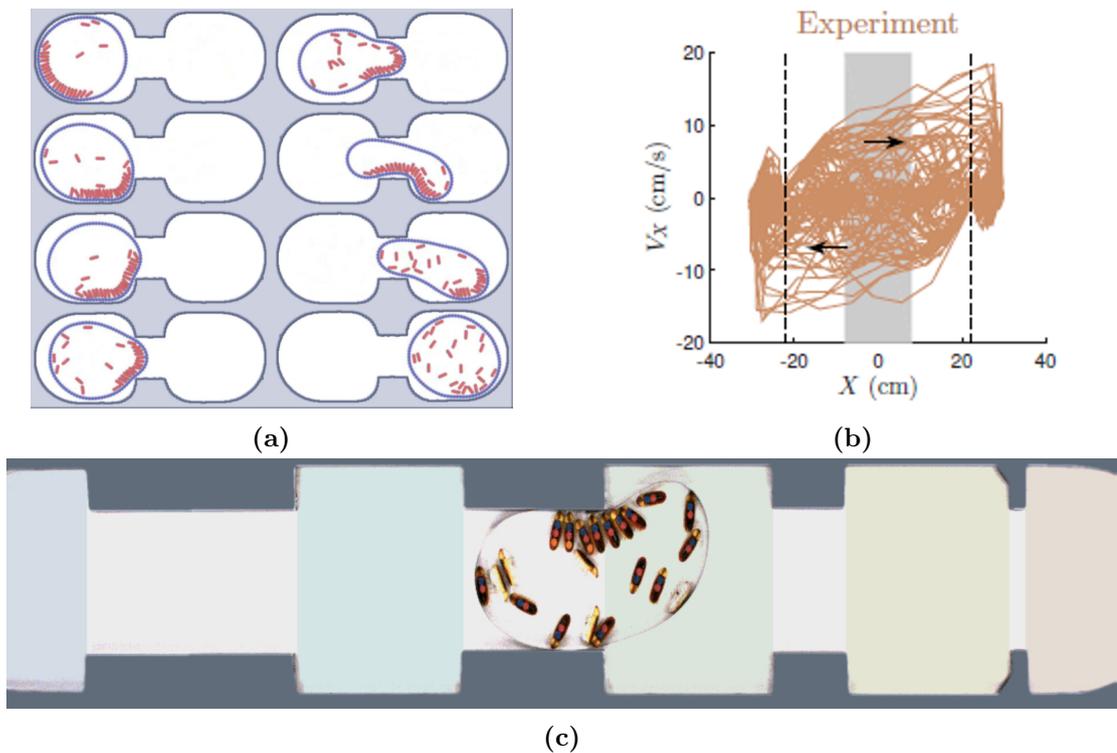


FIGURE 2.17 – (a) Simulation d'une superstructure (membrane confinant des robots) passant au travers d'une constriction. (b) Valeur de la vitesse le long du canal (selon x) en fonction de la position du centre de masse (CM). Les lignes discontinues indiquent la position du CM lorsque l'extrémité de la superstructure entre dans la constriction et la région grisée la constriction. (c) Canal avec plusieurs constrictions successives dont la longueur décroît de gauche à droite. De Boudet *et al.* [6].

Ce lien entre l'auto-organisation et la capacité de la superstructure à se mouvoir dans l'espace est démontré par l'expérience de Boudel *et al.* reprenant un canal étroit dans lequel elle se déplace dans une dimension. Via un graphe de la vitesse du centre de masse de la structure, une corrélation importante avec l'alignement des robots est clairement mise en

exergue (dépendance linéaire). La pente de cette droite dépend de la largeur du canal par rapport au diamètre de la structure et son inverse est interprété comme un coefficient lié à la friction, étant donné le contact avec les parois du canal.

Il est important de préciser que, contrairement au modèle numérique de PAPs de ce travail (voir [chapitre 3](#)), les robots utilisés présentent un léger biais et donc suivent des trajectoires courbes. Il en va de même pour leurs simulations. Ce biais induit une légère dérive des amas le long de la membrane dans le sens horaire ou anti-horaire et s'avère jouer un rôle important dans l'exploration de l'environnement par la structure. En effet, il est montré que le taux de changement dans l'arrangement polaire s'effectue après un temps caractéristique qui varie lui-même avec l'intensité du biais (temps plus long pour un biais plus faible).

En confirmant leurs expériences par des simulations, ils placent également une telle structure dans un canal avec une constriction (*i.e.* resserrement) en son centre (voir [FIGURE 2.17a](#)). Celle-ci voyage d'un côté à l'autre avec un temps caractéristique d'attente dans chaque extrémité. En fonction du diamètre et de la longueur de la constriction, ainsi que de la flexibilité de la membrane, ce temps d'attente varie. Ce passage de transition d'une chambre à l'autre est donc une fonction qui peut être accomplie par la superstructure. Une attention particulière aux forces en jeu nous apprend que la superstructure accélère dans la première moitié de la constriction puis décélère, avec une vitesse moyenne nulle lorsqu'elle se situe dans chaque chambre ([FIGURE 2.17b](#)).

L'étude approfondie de la polarisation du groupe de robots leur apprend que l'ajout de deux forces à l'entrée de la constriction est nécessaire pour prendre en compte la géométrie : l'une est résistive dans l'espace des vitesses (la géométrie résiste au passage de la structure) et l'autre est une contribution positive dans l'espace de la polarisation qui vient compenser la force de répulsion pour permettre à la structure de passer au travers de la constriction.

Ceci amène les auteurs à considérer le cas de constriction multiples. À l'aide de calculs de probabilités dans le cas d'un canal avec constriction successives dont les longueurs décroissent de gauche à droite ([FIGURE 2.17c](#)), ils démontrent qu'une superstructure peut être dirigée par un agencement intelligent de constriction étant donné qu'elle a une probabilité plus grande de transiter vers la plus courte. À noter également que ces transitions sont corrélées au-delà d'une seule constriction, ce qui indique un "effet mémoire".

Enfin, ces investigations permettent de faire accomplir des tâches diverses à ces superstructures : tirer une charge, nettoyer une surface ou encore provoquer des jeux de bataille entre deux superstructures. Il est aussi possible d'élaborer un contrôle externe par la lumière (en allumant ou en éteignant) qui permet de démarrer les robots, de les stopper ou de provoquer leur agrégation. Un résumé de ces différentes fonctions figure ci-après ([FIGURE 2.18](#)).

Ceci conclut la présentation de l'état de l'art. Ce dernier article dont s'inspire notre travail forme la base sur laquelle construire et approfondir les mouvements et déformations de ces superstructures. Une pléthore de paramètres et de situations peut être imaginée dans le but d'analyser leur comportement et c'est dans cette optique que nous nous tournons maintenant vers la présentation de notre recherche.

2.3 Motivation

L'état de l'art étant terminé, nous sommes maintenant amenés à motiver notre travail. Pour ce faire, il nous incombe d'en expliquer le but et d'en souligner l'utilité. Le coeur de ce mémoire consiste à caractériser une superstructure (similaire à celle de Boudet *et al.*) dont les PAPs ont un degré d'alignement variable dans un milieu non-confiné à deux dimensions. Cet alignement entre particules est indispensable à toute forme d'auto-organisation dans un

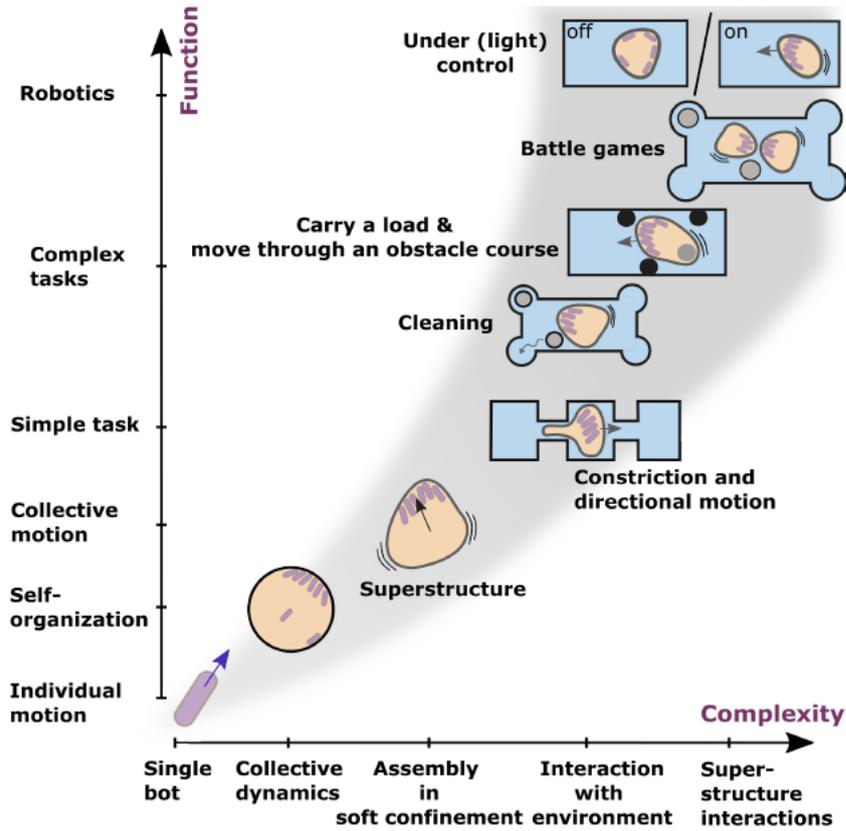


FIGURE 2.18 – Résumé des différentes fonctions/tâches pouvant être accomplies par une superstructure de Boudet *et al.* [6].

bain actif. Qu'il soit provoqué par la géométrie intrinsèque des PAPs ou par un potentiel externe modulé par le programme, l'auto-organisation qui en découle ouvre la voie vers l'émergence de mouvements collectifs.

Cette superstructure est donc composée d'une membrane enfermant des particules auto-propulsées browniennes et elle présente à la fois un degré d'élasticité et de rigidité. Il a déjà été démontré que de tels systèmes exhibent des comportements particuliers et peuvent accomplir certaines tâches. Dans le cadre biologique, ils sont connus pour détenir le rôle d'amorçage de mécanismes cellulaires fondamentaux. Toutefois, ce mémoire aspire plutôt à **approfondir la connaissance de ces superstructures en cherchant à comprendre la physique qui régit ses déplacements**. A notre connaissance, aucune étude n'a encore creusé le sujet en ce sens numériquement. Notre compréhension du système pourra, nous l'espérons, ouvrir des possibilités de contrôle d'une telle superstructure dans le cadre d'applications idoines.

Chapitre 3

Matériels et méthodes

Ce chapitre se consacre à la présentation du modèle numérique en deux dimensions mis au point dans le but d'étudier le comportement d'une membrane dirigée par un bain actif. Ce modèle sert à simuler des particules auto-propulsées browniennes dans leur milieu et plus tard, à observer leurs interactions avec une membrane et filament semi-flexible. Pour ce faire, ses paramètres ont du être soigneusement ajustés de sorte à ce que notre modèle respecte les caractéristiques physiques fondamentales d'un tel système. Mettre en évidence ses particularités permettra une meilleure compréhension et interprétation de nos résultats présentés dans le prochain chapitre.

La structure de ce chapitre se divise en trois parties. La première introduit le fonctionnement global de notre algorithme. La deuxième présente les propriétés des particules actives de notre modèle et les lois physiques qui sous-tendent leur comportement, suivie alors par une présentation similaire sur l'arrangement de la membrane semi-flexible. L'objectif de cette structure est de mettre l'accent sur notre modèle en tant que fondation fiable servant à réaliser ce travail, fondation sans laquelle il n'aurait pas pu avoir vu le jour.

3.1 Algorithme

Pour simuler notre bain actif, nous avons écrit un algorithme orienté objet. Ce travail étant exclusivement numérique, l'algorithme est l'unique outil employé pour réaliser l'étude de notre superstructure. Le programme est principalement exécuté sur le CÉCI (Consortium des Équipements de Calcul Intensif), un "super-ordinateur" permettant de réaliser du calcul de haute performance (*High-Performance Computing*). Grâce à la parallélisation de notre code, *i.e.* l'utilisation simultanée de plusieurs processeurs chargés d'exécuter des parties déterminées du code, le temps de calcul d'une simulation s'en trouve considérablement réduit.

Pour rendre compte de la dynamique de nos particules, nous utilisons la Méthode des Éléments Discrets (DEM) dans laquelle "l'interaction des particules est suivie contact par contact et le mouvement des particules modélisé particule par particule" [104]. Elle permet une modélisation très simple des contacts notamment via l'implémentation d'un ressort joignant les centres de chaque paire de particules circulaires en contact. Cette méthode spécifique du ressort linéaire est connue comme le modèle LSD (*linear-spring-dashpot* en anglais) [105]. Ce ressort endosse le rôle d'une force de répulsion \vec{F}_r suivant la loi de Hooke, autorisant une superposition des particules d'une distance maximale δ_{max} . Une constante de raideur k_n y est associée et elle fixe la superposition maximale tolérée entre deux particules telle que :

$$\vec{F}_r = -k_n \delta \vec{n}_{ij}, \quad (3.1)$$

avec δ la superposition entre particules en un temps donné et \vec{n}_{ij} le vecteur joignant les centres des particules en contact.

Une deuxième force, appelée force d'amortissement, garantit que le contact est dissipatif, sans laquelle il serait parfaitement élastique. Afin de calibrer la force de répulsion \vec{F}_r , l'expression de la constante de rappel k_n est calculée en comparant l'énergie potentielle de déformation de la particule avec l'énergie cinétique maximale qu'elle peut acquérir dans le système :

$$\frac{1}{2}k_n\delta_{max}^2 = \frac{1}{2}mv^2 \implies k_n = \frac{mv^2}{\delta_{max}^2}, \quad (3.2)$$

avec typiquement une valeur de déformation maximale $\delta_{max} \simeq -R/100$ où R est le rayon d'une particule.

Toutes les forces qui interviennent dans notre système sont intégrées après un pas de temps dt . Il est essentiel qu'il soit infinitésimal afin d'assurer une bonne intégration des forces. Dans la méthode des éléments discrets, une borne supérieure pour le pas de temps est établie à partir d'une expression directement liée au k_n mentionné ci-dessus de sorte qu'une collision dure, au moins, une vingtaine de pas de temps :

$$dt \leq c\pi\sqrt{\frac{m}{k_n}}, \quad (3.3)$$

avec $c \leq 0.05$. Si cette borne n'est pas respectée, cela risque de mener à des comportements non physiques du système et ainsi biaiser les résultats. Dans notre cas, k_n et dt sont respectivement fixés à 700 et 10^{-5} en respectant les expressions de l'EQUATION (3.2) et de l'EQUATION (3.3).

L'intégration des forces est implémentée selon la méthode du *Leap-frog* ou encore appelée saute-mouton. Celle-ci est une méthode usuelle de second ordre pour la résolution numérique d'équations différentielles ordinaires dans le cadre d'un système dynamique de la mécanique classique [106]. Elle sert donc à déterminer la vitesse et la position d'une particule à chaque pas de temps suivant la seconde loi de Newton [107] qui s'écrit : $\vec{F} = m\vec{a}$ et $\vec{M} = I\vec{\alpha}$, avec m la masse du disque et I le moment d'inertie. La singularité de la méthode saute-mouton est que la position ou la vitesse est calculée à un décalage d'un demi-pas de temps. Elle est plus stable et précise qu'une méthode du premier ordre telle que celle d'Euler. Nous nous focalisons sur le décalage de l'actualisation de la position. Si nous considérons le cas d'une particule soumise à une force qui dépend de sa position (pour un degré de liberté), nous cherchons à modéliser son mouvement et pour ce faire, il nous faut approcher au mieux la trajectoire (position $x(t)$) de la particule au cours du temps. Si nous supposons que $f(x) = dv/dt$ et $v = dx/dt$, la prédiction de la position et de la vitesse à l'itération $n + 1$ est donnée par :

$$\begin{cases} x_{n+1/2} &= x_n + \frac{1}{2}v_n dt \\ v_{n+1} &= v_n + f(x_{n+1/2})dt \\ x_{n+1} &= x_{n+1/2} + \frac{1}{2}v_{n+1}dt \end{cases} \quad (3.4)$$

Si nous combinons ces trois équations, nous retrouvons l'expression d'un MRUA (Mouvement Rectiligne Uniformément Accélééré) dont l'accélération est évaluée au milieu du pas de temps.

Lorsque cette intégration est effectuée, le programme écrit alors dans un fichier tous les quelques pas de temps dt les positions et vitesses calculées. Le nombre de fichiers par seconde dépend d'un paramètre fixé en début de simulation et est suffisamment grand pour

conserver un suivi quasi-continu du système.

La nature des forces appliquées aux disques quant à elle est divisée en trois catégories : auto-propulsion, alignement et contacts. Dans ces catégories, des forces et moments engendrent respectivement la propulsion de la particule, son alignement avec ses voisines et ses collisions. Leur implémentation est explicitée plus tard dans ce chapitre. La détection des contacts est quant à elle un problème récurrent en algorithmique : il s'agit d'élaborer une technique optimisée permettant de comparer uniquement les positions des particules proches les unes des autres. Ceci est particulièrement utile pour les interactions à courte portée qui ne nécessitent pas de connaître la position de toutes les particules du milieu mais seulement celle des voisines. La méthode des cellules liées est une de ces techniques et réduit le nombre d'itérations au nombre de particules N au lieu de N^2 . Elle consiste à diviser le système en régions (ou cellules) plus petites de sorte que les particules appartenant à une cellule n'interagissent qu'avec les particules de cette même cellule ou celles des cellules voisines. La taille de ces régions est choisie en fonction des interactions que nous cherchons à implémenter dans le système.

Avant de débiter la simulation, les particules sont placées dans le milieu et dès l'incrément du temps t par dt , l'application des forces et leur intégration s'effectue jusqu'à atteindre le temps total de simulation t_{total} fixé au préalable, *i.e.* ces processus sont réalisés t_{total}/dt fois. L'organigramme [FIGURE 3.1](#) résume de manière simplifiée le fonctionnement global de notre algorithme.

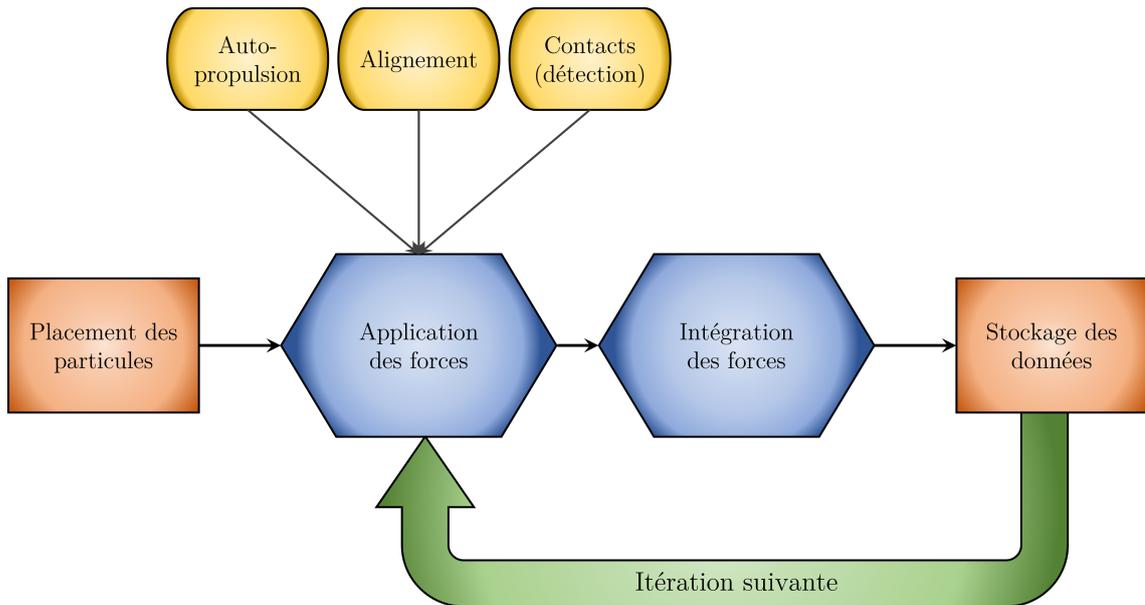


FIGURE 3.1 – Principe global simplifié de l'algorithme permettant de simuler notre superstructure. Le cycle s'arrête lorsque le temps t atteint le temps total de simulation.

3.2 Particules auto-propulsées

Les particules actives à géométrie circulaire dans notre système sont caractérisées par un diamètre constant et par une orientation indiquant leur direction de propulsion. Elles correspondent à la famille des particules actives browniennes. Leur dynamique de mouvement s'apparente à celle décrite dans l'[EQUATION \(2.1\)](#) à un détail près : le bruit dans les deux directions du plan s'applique uniquement sur la vitesse limite associée au mouvement

dirigé. Plus concrètement, une force motrice \vec{F}_m s'applique selon l'axe d'orientation de la particule et est contrebalancée par une force visqueuse \vec{F}_v tel que $\vec{F}_r = \vec{F}_m - \vec{F}_v$. La vitesse de la particule est alors limitée à une valeur spécifiée dans l'expression de la force motrice. Il existe ainsi un état stationnaire que toute particule tend à atteindre, en tout temps.

Cette force motrice est définie comme la force nécessaire pour accélérer la particule jusqu'à la vitesse limite v_l . Les expressions de F_x et F_y de l'EQUATION (3.5) sont couplées à l'orientation, ce qui signifie que la direction du vecteur vitesse de la propulsion est directement liée à l'axe de la particule. Le moment de force modifiant l'orientation de la particule varie tous les quelques pas de temps via une distribution uniforme balayant l'intervalle $[-\omega_l, \omega_l]$ où ω_l est la vitesse angulaire limite. Ce moment de force est également réduit d'une force visqueuse liée à la vitesse angulaire effective de la particule. Il permet à la particule de suivre une trajectoire rectiligne pendant un temps court avant de se réorienter graduellement vers une autre direction de propulsion. Cette réorientation obéit à la diffusion brownienne.

Les équations dans le plan s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} F_x = \beta((v_l + \xi_v) \cos \theta - v_x) \\ F_y = \beta((v_l + \xi_v) \sin \theta - v_y) \\ M = \eta(\omega_l \xi_\omega - \omega) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{avec } \beta = \frac{m}{T} \\ \text{avec } \eta = \frac{I}{T} \end{array} \quad (3.5)$$

Les paramètres β et η sont des coefficients de résistance au mouvement de l'objet dans le milieu en lien avec la viscosité du milieu environnant. Ils ont comme unités le kg/s et le $kg.m^2/s$ respectivement. Ils sont dérivés de la masse m et du moment d'inertie I de la particule. Cette viscosité n'a pas de signification physique étant donné que le milieu peuplé par les particules ne représente pas de fluide en particulier. T est le temps que prend la particule depuis le repos pour atteindre la vitesse limite v_l ou ω_l exprimé en secondes, sans freinage. θ indique l'orientation de la particule dans le plan et enfin, les bruits ξ_v et ξ_ω sont tirés de deux distributions uniformes de moyenne nulle. Le bruit ξ_v sur la vitesse prend la forme d'un écart-type de valeur ± 0.01 m/s de sorte que la vitesse limite moyennée dans le temps d'une particule dans un milieu homogène est égale à v_l . Puisqu'il est rare voire improbable qu'un organisme biologique se déplace toujours avec une même vitesse limite, cet écart-type permet de se rapprocher des conditions d'un système de matière vivante active.

Le tirage de ces bruits n'est pas effectué à chaque pas de temps dt mais toutes les $t_{tirage} = 1000 dt$ secondes. Ce dernier détermine l'influence du bruit ξ_ω sur le moment : un tirage à chaque pas de temps amènerait la particule à se diriger continuellement dans une direction moyenne et celle-ci réaliserait donc un déplacement rectiligne. Cette fréquence de tirage peut être comparée au temps T dans deux cas différents. Le premier se réfère au cas où $T < t_{tirage}$ signifiant que la particule, si sa trajectoire n'est pas entravée par des collisions, atteint toujours sa vitesse limite avant de changer d'orientation. Dans le cas contraire, pour $T > t_{tirage}$, cette vitesse limite n'est jamais atteinte car un changement d'orientation implique que le vecteur vitesse doit se réaligner avec la nouvelle orientation et ainsi perdre en magnitude.

Une remarque supplémentaire concerne les coefficients de diffusion D_T et D_R introduits dans l'EQUATION (2.1). Ces derniers n'apparaissent pas dans les équations de mouvement de nos PAPs. Dans le cas de D_R , il est déterminé dans le prochain chapitre à partir de la courbe du MSD sur l'orientation d'une PAP et son inverse, τ_R dont le rôle est crucial dans nombre de phénomènes observés dans la matière active, en est subséquemment dérivé. Celui-ci est intimement lié à t_{tirage} puisque que des réorientations plus fréquentes engendrent un temps τ_R plus court. D_T quant à lui tend vers zéro si celui-ci est évalué en

deux dimensions car le bruit sur la force d'auto-propulsion ne s'applique que selon l'axe d'orientation de la particule. Son déplacement est donc plutôt soumis à de la diffusion thermique en une dimension uniquement.

Un schéma en deux parties [FIGURE 3.2a](#) illustre la dynamique de réorientation : une force s'exerce sur la particule selon son axe d'orientation et celle-ci est soumise à un moment de force modifié au cours du temps. Cette modification est engendrée par le bruit ξ_ω sur la vitesse angulaire limitée fixée au préalable. Au pas de temps d'après, l'orientation de la particule ayant été affectée par le moment de force, la force dans le plan la propulse alors selon ce nouvel axe.

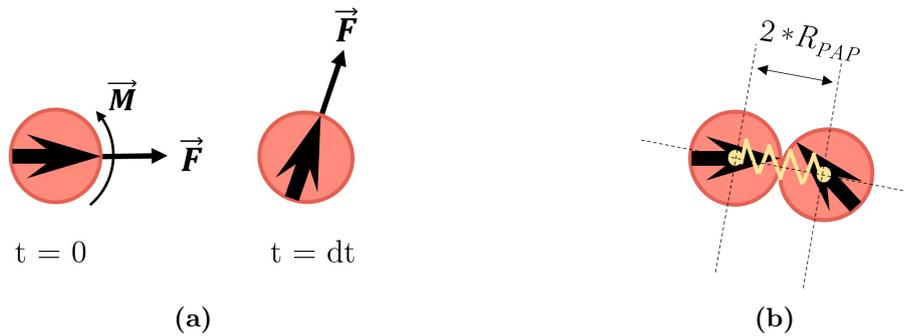


FIGURE 3.2 – (a) Illustration du changement d'orientation d'une particule brownienne active après un pas de temps dt . \vec{F} et \vec{M} sont respectivement la force de propulsion et le moment de force aléatoire appliqués sur la particule. (b) Représentation de l'interaction de type Hooke entre deux particules du bain actif. Le ressort en jaune a une position d'équilibre égale au diamètre d'une particule ($2 * R_{PAP}$).

Au-delà de la dynamique de déplacement des PAPs, il est important de considérer les interactions de ces particules entre elles et avec leur environnement. De par les conditions de bord périodique dans notre système, le milieu est considéré comme n'étant pas pourvu de parois. Si une particule quitte le milieu du côté droit, elle réapparaîtra du côté gauche. Cette propriété du système s'avère appropriée dans le cas où l'on cherche à représenter de grands espaces où se meuvent les PAPs (par exemple, un troupeau d'oiseau dans le ciel), permettant ainsi d'éviter leur agglomération contre les murs. Le mouvement collectif de ces PAPs via le processus d'auto-organisation peut par ailleurs subsister plus longtemps grâce à l'absence de collisions avec les frontières du milieu.

Lors de la validation de notre modèle, les particules sont uniquement soumises à une force répulsive lorsqu'elles entrent en contact. Cette interaction répond à un potentiel harmonique selon la loi de Hooke de l'[EQUATION \(3.1\)](#) et est illustrée par la conception d'un ressort virtuel aligné sur la droite joignant les centres des deux particules en contact. La constante de rappel k_n , déjà introduite dans la section concernant l'algorithme, est ajustée selon son expression dans l'[EQUATION \(3.2\)](#). Elle permet d'éviter une superposition trop importante des particules entre elles ou avec les objets du milieu et ainsi respecter la notion de volume exclus. Une illustration de cette interaction se trouve [FIGURE 3.2b](#). À noter qu'une importante dissipation d'énergie se produit en cas de collisions : le coefficient de restitution $e = v_f/v_i$ qui détermine la valeur de la vitesse résultante des particules après la collision est fixé à 0.2.

Les PAPs sont soit placées aléatoirement dans le milieu pour de faibles densités de PAPs, soit agencées initialement dans le milieu selon un empilement compact hexagonal (de type ABA) afin d'avoir une grande gamme de valeurs accessibles pour la densité. Leur

orientation initiale est aléatoirement fixée par une distribution uniforme entre 0 et 2π . Cet empilement est dit hexagonal car la cellule unitaire de cette structure forme un hexagone comme montré dans la [FIGURE 3.3](#).

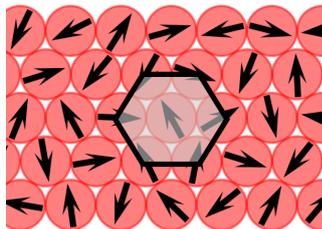


FIGURE 3.3 – Empilement hexagonal des PAPs en début de simulation. La cellule unitaire en forme d’hexagone est représentée en couleur grisée.

À ce stade de la construction de notre système aucune attraction à longue ou courte portée entre particules n’est encore implémentée. Ce choix permettra de mettre en évidence les phénomènes d’auto-piégeage et la création d’amas dans les concavités d’un filament sans autre interaction que l’interdiction de superposition.

La validation de notre modèle mène alors à l’implémentation d’un filament et d’une membrane composée de monomères. Au sein de notre superstructure, une interaction à courte portée de type Vicsek sert à provoquer l’alignement des PAPs entre elles. Celle-ci est seulement activée lors de l’étude de la superstructure afin de ne pas biaiser le comportement du bain actif lors de la calibration. Elle est aussi indispensable à toute forme d’auto-organisation des PAPs [103], comme déjà mentionné dans le [chapitre 2](#).

Lors d’un alignement de type Vicsek, chaque particule voit sa vitesse modifiée par la vitesse moyenne de ses voisins présents dans un rayon R . Cette méthode doit cependant être réadaptée dans le cas d’un modèle basé sur l’intégration des forces. Dans l’[EQUATION \(3.5\)](#) qui régit le mouvement d’une PAP, l’orientation détermine la direction de propulsion. C’est pourquoi l’implémentation de l’alignement, dans notre cas, revient à calculer la moyenne des orientations θ_{moy} des voisins de la particule i considérée et d’ajouter un moment de force à cette particule dont le signe est déterminé par

$$\frac{\theta_{moy} - \theta_i}{|\theta_{moy} - \theta_i|}.$$

Ce moment de force noté M_A entre en compétition avec celui de l’[EQUATION \(3.5\)](#) qui est responsable de la diffusion brownienne de θ_i . Sa valeur est donc choisie proportionnelle au moment de force moyen $M_B \simeq \eta\omega_i/2$ de l’équation de mouvement telle que

$$|M_A| = \zeta M_B,$$

avec $\zeta > 1$ correspondant au cas où l’alignement domine la diffusion brownienne de θ_i et $\zeta < 1$ au cas contraire. L’expression moyenne M_B a été déterminée empiriquement en moyennant les valeurs du moment de réorientation à chaque tirage.

3.3 Membrane semi-flexible

Dans le cadre des simulations concernant les superstructures mentionnées en début de chapitre, notre bain actif est confiné dans une membrane dont la rigidité est variable. Cette membrane, appelée autrement polymère, est constituée de monomères circulaires dont le rayon correspond à 7/10 de celui des PAPs. Ce rayon réduit permet de limiter la rugosité de la membrane.

Les monomères sont liés entre eux par des ressorts de translation virtuels attachés non pas de centre à centre comme dans la [FIGURE 2.14a](#) [92] mais aux extrémités du vecteur qui désigne leur orientation. La magnitude de la force d'attraction est contrôlée par un coefficient de rappel κ_T qui module l'écartement entre monomères en cas de contraintes. Cela confère à la membrane une propriété d'élasticité. L'expression de cette force se trouve [FIGURE 3.4](#) dans l'encadré. $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ est la distance entre les extrémités des vecteurs d'orientation i et j , comme illustré par les points d'attache du ressort dans la même figure. La force de rappel est adoucie par une force visqueuse $c\vec{v}_i$ avec $c = 0.1$ qui permet un retour à l'équilibre en douceur. La première partie du moment de force $\vec{M}_i = \vec{r}_i \times \vec{F}_i$ a pour but de faire correspondre les extrémités des axes d'orientation des monomères. Ce terme implique l'existence d'une rigidité inhérente à l'implémentation choisie du polymère.

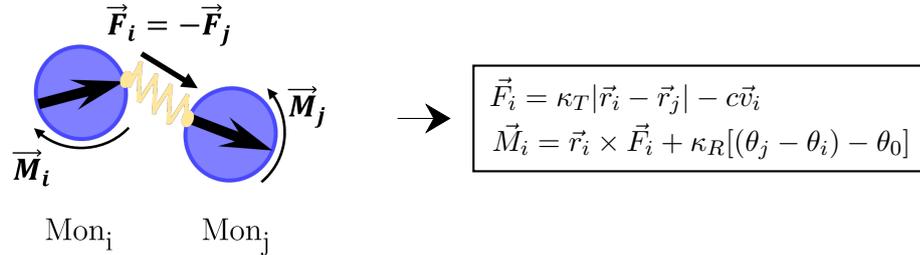


FIGURE 3.4 – Membrane à deux monomères dont les forces associées à sa cohésion et à sa rigidité sont symbolisées respectivement par un ressort (en jaune) attaché aux extrémités de leur vecteur d'orientation et par des moments de force \vec{M} les conduisant à s'aligner. Dans l'encadré figure l'expression des force et moment de force appliqués au monomère i à chaque pas de temps.

Les monomères sont donc toujours attachés l'un à l'autre au même endroit de leur circonférence permettant d'introduire un couplage entre leur orientation. Cette relation sert à restaurer la position de référence des vecteurs d'orientation, *i.e.* le moment de force $\vec{M}_i = \kappa_R [(\theta_j - \theta_i) - \theta_0]$ tend à faire correspondre l'écart des deux orientations θ_i et θ_j à un angle de référence préfixé θ_0 . L'angle de référence θ_0 peut être nul si l'on cherche à ce que la membrane soit rectiligne, ou fini dans le cas où la membrane forme un cercle fermé. En fonction de la valeur du coefficient de proportionnalité κ_R , l'alignement avec la référence est plus ou moins marqué. κ_R détermine donc la rigidité de la membrane, *i.e.* sa tendance à conserver sa forme initiale. Un schéma de deux monomères [FIGURE 3.4](#) met en évidence la présence du ressort de translation ainsi que les moments de force les incitant à aligner leur orientation l'un avec l'autre.

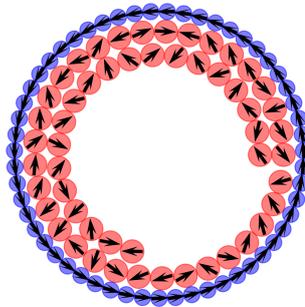


FIGURE 3.5 – Représentation du système dans son état initial contenant les PAPs (en rouge) et la membrane semi-flexible (en bleu).

La membrane, si disposée dans son état de référence, n'est soumise à aucune dynamique de mouvement. Elle interagit avec le bain actif via des collisions qui lui confèrent une certaine inertie. La vitesse moyenne de tous ses monomères suite à ces collisions n'est pas bornée : aucune viscosité ou frottement n'agit sur son déplacement. Ainsi, seulement d'autres collisions peuvent entraver son mouvement en changeant sa direction ou sa vitesse.

Enfin, le système dans son entièreté visible dans la [FIGURE 3.5](#) comprend la membrane fermée à l'intérieur de laquelle est placé un nombre variable de PAPs. Ces dernières sont disposées en cercle avec un rayon décroissant par rapport à celui de la membrane dans le but d'avoir encore une fois accès à de grandes densités de PAPs. Lors de la calibration de notre bain actif, nous utilisons en revanche un filament ouvert dont la forme de référence est rectiligne et dont les propriétés sont identiques à celles de la membrane explicitées ci-haut.

3.4 Paramètres

De nombreux paramètres sont ajustés dans notre modèle afin d'en assurer le bon fonctionnement. D'autres sont modifiés dans le but d'étudier leur impact sur la superstructure. Ci-après, nous reprenons les paramètres les plus importants tout en déclinant leur fonction. Leur gamme de valeurs est donnée en [Annexe A](#).

Vitesse limite v_l

Vitesse limite (ou maximale) d'une particule auto-propulsée.

Temps T

Le temps que prend une particule auto-propulsée pour atteindre sa vitesse limite v_l sans freinage depuis le repos.

Rigidité κ_R

Rigidité de la membrane (ou filament). Elle caractérise le degré de résistance à la déformation par rapport à sa forme initiale circulaire.

Élasticité κ_T

Élasticité de la membrane (ou filament). Elle module le degré d'écartement entre ses monomères en cas de contraintes.

Alignement ζ

Capacité des particules auto-propulsées à s'aligner entre elles. Une valeur unitaire correspond à une compétition équilibrée avec le moment de réorientation moyen des particules.

Densité ρ

Nombre de particules auto-propulsées par unité de surface.

Chapitre 4

Contribution personnelle

Ce chapitre se consacre à la présentation des résultats de notre travail et à l'interprétation des phénomènes sous-jacent aux différents comportements dont nous allons faire état. La première partie de ce chapitre consiste à calibrer et valider notre modèle numérique. Pour ce faire, la calibration de certains paramètres et la validation sont réalisées à l'aide de la corroboration de nos mesures par celles mises en évidence dans la littérature scientifique. La deuxième partie concerne la caractérisation du mouvement et de la déformation de notre superstructure dans son environnement. Les différents résultats sont alors discutés et interprétés consécutivement.

4.1 Calibration et validation du modèle

L'objectif de cette section est d'appuyer la validité du modèle numérique utilisé dans ce travail et d'en fixer les paramètres optimaux. Il est en effet essentiel de s'assurer que le système dont nous nous servons est fidèle à ce qui est observé expérimentalement et numériquement dans des études précédentes. Cela permettra d'accepter sans ambiguïté que les résultats obtenus prochainement sont représentatifs d'une réalité physique. Autrement dit, la validation du modèle le rapproche d'un dispositif expérimental où le même type de comportements pourrait être observé et où les mesures qualitatives seraient équivalentes. Le système de bain actif, c'est-à-dire le milieu composé des particules auto-propulsées et d'intrus passifs, est d'abord calibré et l'ajout d'un filament semi-flexible est abordé dans la sous-section d'après où nous introduisons les paramètres de rigidité et d'élasticité.

4.1.1 Bain actif

Notre système est constitué de particules auto-propulsées browniennes. Leur dynamique de déplacement correspond à celle explicitée dans le chapitre précédent ([chapitre 3](#)) et gouvernée par l'[EQUATION \(3.5\)](#). Afin de vérifier que leur mouvement possède les propriétés d'une telle particule, nous dressons la courbe du MSD de la trajectoire d'une PAP brownienne dans un milieu homogène aux frontières périodiques. La particule est seule et n'entre donc jamais en collision avec un objet ou une autre particule. Cela assure que les données de déplacement peuvent être calculées sur de plus longues durées dans un environnement de taille moyenne ($l_x = l_y = 0.4$ m). Les simulations durent 300 secondes et le MSD est calculé pour deux vitesses limites de la particule : $v_l = 0.03$ et $v_l = 0.02$ m/s. Un paramètre supplémentaire noté T joue un rôle important dans notre calibration : il incarne le temps nécessaire à la particule pour atteindre sa vitesse limite v_l depuis le repos. Son introduction dans notre modèle permet d'éviter la situation non physique d'une accélération infinie qui mène à une discontinuité dans le profil des vitesses.

Dans le [chapitre 2](#), il a été mis en évidence que le déplacement d'un PAP est superdiffusif pour un temps équivalent au temps de rotation diffusionnelle τ_R (voir [FIGURE 2.5b](#)). Au-delà de ce temps caractéristique, la courbe du MSD s'approche graduellement d'une évolution linéaire dans le temps. Cette tendance est retrouvée dans le résultat de nos simulations présenté [FIGURE 4.1](#).

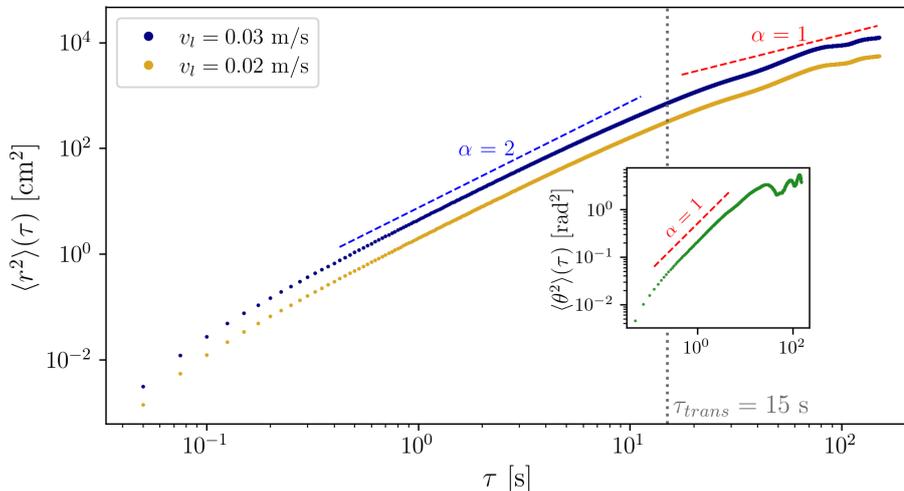


FIGURE 4.1 – Déplacement quadratique moyen d'une PAP brownienne isolée en fonction du temps τ pour deux valeurs de la vitesse limite v_l . La ligne verticale pointillée marque la transition entre le régime superdiffusif et diffusif. Les lignes en trait discontinu (bleu et rouge) sont des aides visuelles permettant d'identifier les deux régimes. Le graphique en médaillon montre la courbe de pente unitaire du MSD de l'orientation de la particule au cours du temps.

Les deux courbes présentent une transition entre le régime superdiffusif et le régime diffusif pour une valeur constante de $\tau_{trans} \simeq 15$ secondes mise en évidence par la ligne verticale grise en pointillé. Pour une vitesse plus faible, la courbe du MSD est décalée vers le bas. Ce comportement est attendu : la particule voit son mouvement dirigé réduit par la diminution de sa vitesse et parcourt de ce fait moins de distance. Le second graphique inséré en médaillon dépeint les fluctuations thermiques auxquelles l'orientation θ de la particule obéit. La pente unitaire du MSD de rotation au cours du temps, en référence à la diffusion brownienne de la rotation, est respectée.

Le graphe dans la [FIGURE 4.2](#) représente la trajectoire de la particule voyageant à $v_l = 0.03$ m/s pendant 300 secondes. Entourés en cyan sont les points de départ t_i et d'arrivée t_f de la particule. Le graphique en médaillon reflète les 40 premières secondes de sa trajectoire (dégradé de rouge) dans le milieu initial aux frontières périodiques. On observe la dynamique de son mouvement aléatoire pour un temps très grand et, dans le graphique en médaillon, son mouvement dirigé pour un temps plus court. À partir du point de départ t_i , la particule suit une direction verticale avec quelques fluctuations aléatoires sur une distance équivalente à la dimension du milieu puis prend une direction de plus en plus horizontale sur un laps de temps de quelques secondes.

Ces résultats permettent la détermination du temps de diffusion rotationnelle τ_R . Ce dernier caractérise le temps que prend la particule pour changer ostensiblement de direction lorsqu'elle se déplace. Il possède une importance capitale dans la dynamique des amas dans un bain actif. Le temps τ auquel se produit la transition entre les régimes balistique et diffusif est avant tout une bonne indication de la valeur de ce coefficient. En effet, pour des temps plus courts et de l'ordre de τ_R , la dynamique balistique, et donc le mouvement

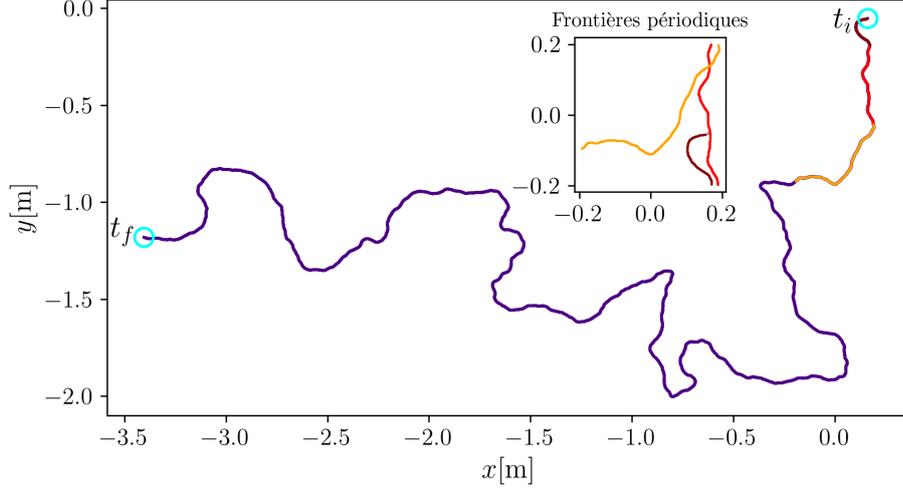


FIGURE 4.2 – Trajectoire (en mauve) d’une PAP pendant $t_f - t_i = 300$ secondes. Le graphique en médaillon représente la même trajectoire dans le milieu aux frontières périodiques. Le dégradé de rouge indique le passage d’une des frontières et est également représenté sur la trajectoire mauve.

dirigé, prédomine. Lorsque ce temps est excédé, la trajectoire de la particule s’apparente à de la diffusion brownienne comme représenté dans la [FIGURE 4.2](#). Il peut donc en être déduit que la transition à $\tau_{trans} \simeq 15$ secondes entraîne $\tau_R \simeq \tau_{trans}$. Cette égalité peut être vérifiée par un ajustement de la partie linéaire de la courbe $\langle \theta^2(t) \rangle$ dans le graphique en médaillon de la [FIGURE 4.1](#). Pour un graphique en échelle linéaire, la pente de la tangente à la courbe donne le coefficient de diffusion rotationnelle D_R . Suite à cet ajustement, le coefficient de diffusion est évalué à :

$$D_R = 0.069 \pm 0.0044 \text{ rad}^2/\text{s}.$$

En prenant en compte l’erreur sur le coefficient, le τ_R estimé varie ainsi entre 13,62 et 15,47 secondes. Si une erreur supplémentaire sur la gamme des données utilisées pour l’ajustement est prise en compte, ce temps de diffusion rotationnelle se situe approximativement entre 10 et 18 secondes. Afin de réduire cet intervalle, l’[EQUATION \(2.5\)](#) du MSD théorique d’une PAP est tracée pour $\tau_R = 10$ s et $v = 0.03$ m/s en vis-à-vis de la courbe issue de la précédente simulation où $v_l = 0.03$ m/s. D_T est fixé à zéro en accord avec l’[EQUATION \(3.5\)](#) où le bruit sur la force de propulsion fait varier la vitesse le long de l’axe de la particule uniquement, ne lui conférant donc peu voire pas de dynamique de diffusion thermique en deux dimensions. L’évolution peut être observée dans la [FIGURE 4.3](#). La courbe supplémentaire en rouge est le résultat d’un ajustement de l’[EQUATION \(2.5\)](#) sur nos données de simulation donnant $\tau_R = 10.544$ s et $v = 0.022$ m/s.

La partie supérieure de la courbe représentée met en évidence la transition entre les deux régimes mentionnés. Cette transition se produit d’autant plus tard que τ_R est grand, comme précisé dans le [chapitre 2](#). Par ailleurs, un décalage selon l’ordonnée entre la théorie (jaune) et la simulation est apparent : il rend en fait compte de l’importance du paramètre T dans notre modèle. Pour cette simulation, il est fixé à $T = 100 dt$ s. L’augmentation de ce paramètre accroît le temps que prend la particule pour atteindre sa vitesse limite depuis le repos. Étant donné que T entre en jeu à chaque réorientation de la particule (via $\beta = \frac{m}{T}$ et $\eta = \frac{l}{T}$ dans l’[EQUATION \(3.5\)](#)), la courbe effective de la simulation correspond à une vitesse plus faible.

Après avoir ajusté sur nos données la vitesse et le paramètre τ_R dans l’équation du MSD théorique ([EQUATION \(2.5\)](#)) et obtenu leurs valeurs, il est alors démontré que la vitesse qui correspond à notre courbe est plus faible que la valeur limite fixée en début de simulation.

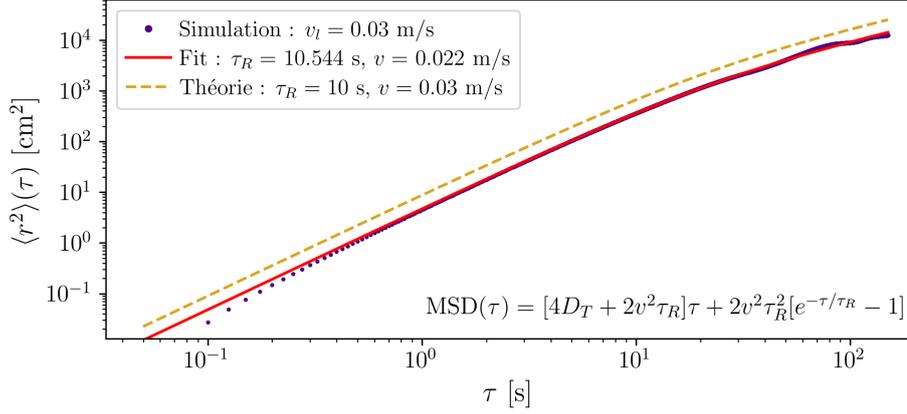


FIGURE 4.3 – Comparaison entre les données issues de la simulation et une courbe théorique (en jaune) tracées à l’aide de l’équation du MSD d’une PAP (EQUATION (2.5)) incluse en bas à droite. La courbe rouge est l’ajustement de cette équation pour τ_R et v sur la simulation.

La valeur de τ_R a aussi pu être déterminée précisément avec une erreur très faible sur l’ajustement des deux paramètres : $\tau_R = 10.544 \pm 0.004 \text{ s}$ et $v = 0.022 \pm 0.0004 \text{ m/s}$. À noter que la vitesse v est donnée en m/s afin de pouvoir être comparée au paramètre v_l de notre simulation. L’ordonnée du graphe pour le MSD a quant à elle l’unité de cm^2 .

Enfin, grâce à l’expression $D_{eff} = D_T + \frac{1}{2}v_{eff}^2\tau_R$ qui renseigne sur le coefficient de la diffusion thermique pour de longs temps, le coefficient de diffusion effectif de la marche aléatoire résultante peut être calculé : $D_{eff} = 25.52 \text{ cm}^2/\text{s}$ avec pour vitesse effective la vitesse modifiée ($v_{eff} = v = 0.022 \text{ m/s}$) due à T dans le cas de la simulation $v_l = 0.03 \text{ m/s}$.

Il a maintenant été démontré que l’entité à la base de notre système présente les propriétés physiques de déplacement en accord avec la théorie. La prochaine étape est de caractériser son rapport à l’environnement, *i.e.* son comportement en cas de collisions avec d’autres particules ou un obstacle.

Dans ce but, le bain actif est étudié du point de vue thermodynamique pour plusieurs densités ρ et valeurs du paramètres T . Les PAPs interagissent seulement via des interactions stériques lorsqu’elles entrent en contact. Afin de pouvoir placer une grande densité de particules dans le milieu, les grains sont disposés selon un réseau hexagonal (voir chapitre 3) et le traitement des données est réalisé à partir de cinq secondes après le début de la simulation afin de limiter l’influence des conditions initiales sur les mesures. La taille du milieu est réduite à $l_x = l_y = 0.2 \text{ m}$ dans le but de diminuer le temps de calcul de l’ordinateur à chaque simulation. Au centre du milieu est placé un obstacle circulaire immobile de diamètre $R_{OBS} = R_{PAP}$. Il sert à mesurer la pression au sein du système.

La FIGURE 4.4 donne un aperçu du comportement du bain actif pour un nombre croissant de PAPs et $T = 100 \text{ dt s}$. L’obstacle se différencie des PAPs par sa couleur grise opaque. Certains amas sont entourés pour chacun des instantanés en vue de mettre en évidence leur différence en taille lors de la comparaison entre deux densités.

La création de ces amas est dû au phénomène d’auto-piégeage illustré dans la FIGURE 2.7 du chapitre 2. Un amas éphémère de trois particules est également observé dans la FIGURE 4.4a. Des amas dont la durée de vie excède 0.5 s se manifestent dès $\rho = 0.22$ (FIGURE 4.4b) et grandissent (*i.e.* sont composés de davantage de particules) avec la densité. Ils deviennent difficile à isoler à partir de $\rho = 0.40$ (FIGURE 4.4d) et se regroupent en un amas principal dont la surface est équivalente à la moitié de celle du milieu pour $\rho = 0.52$ (FIGURE 4.4e). Cet amas est dynamique : il gagne et perd des particules au cours du temps. Ces particules voyagent autour de l’amas avant d’être déviées par une réorienta-

tion aléatoire qui les amène à rentrer en collision avec l’amas et à l’agrandir. La dynamique inverse se produit lorsque l’amas perd une particule. On remarque une tendance générale des particules à former des groupes au niveau de l’obstacle bien que cette caractéristique ne soit pas systématique.

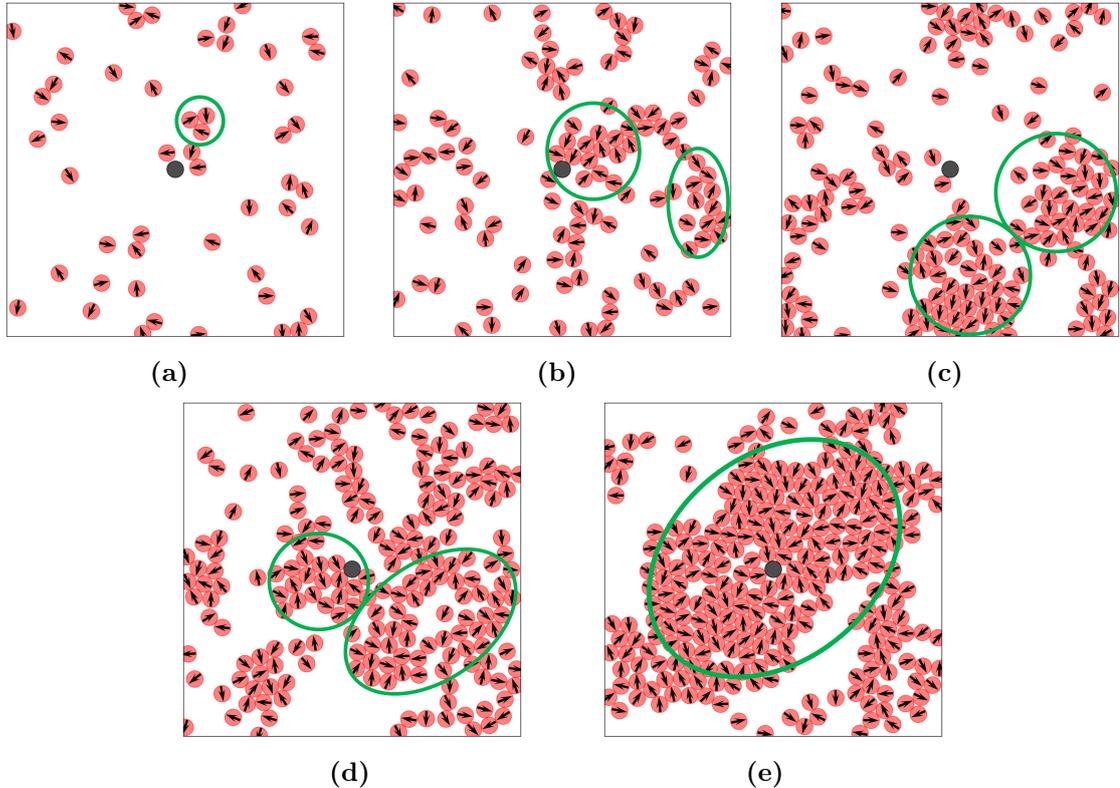


FIGURE 4.4 – Aperçus du bain actif en présence d’un obstacle (centre en gris) après un temps identique de simulation pour plusieurs densités : (a) $\rho = 0.10$, (b) $\rho = 0.22$, (c) $\rho = 0.31$, (d) $\rho = 0.40$ et (e) $\rho = 0.52$. En vert sont entourés les plus gros amas du milieu. La surface des cercles/ellipses est proportionnelle à la taille de l’amas.

Cette analyse étant qualitative, il est intéressant d’essayer de caractériser ces systèmes quantitativement. Cela permettra de lier la formation d’amas aux données et d’en tirer des conclusions. Pour ce faire, l’énergie cinétique $K = \frac{1}{2}Nm\langle v^2 \rangle$ du bain actif est calculée à chaque fichier de données et moyennée sur le temps total de la simulation. Chaque simulation correspond à une valeur spécifique du paramètre T et de la densité ρ . Le paramètre T varie entre $10^2 dt$ et $10^5 dt$ secondes et la densité de $\rho = 0.01$ à $\rho = 0.61$ par pas de 0.03 . Chacune d’entre elles est exécutée quatre fois. Le nombre total de simulations pour tracer l’évolution de l’énergie cinétique s’élève donc à $4 * 4 * 21 = 336$. Simultanément à l’énergie cinétique, la pression dans le bain actif a été calculée en mesurant la force totale qui s’exerce sur l’obstacle central au cours du temps puis en la divisant par son périmètre afin d’obtenir une pression en deux dimensions. Ces résultats sont présentés dans la [FIGURE 4.5](#) et l’axe de la pression est en échelle logarithmique dans le but de distinguer les quatre courbes facilement.

Dans le graphique de gauche, la droite pleine se rapporte à l’énergie cinétique du système en négligeant les interactions stériques entre particules. Elle correspond à l’énergie cinétique totale qu’un gaz idéal peut atteindre. Les courbes de simulation se démarquent de cette droite pour des densités d’autant plus petites que T est grand. T ayant une influence directe sur la norme de la force et donc indirectement sur la vitesse effective de la particule (comme montré dans l’[EQUATION \(3.5\)](#)), il est attendu que son augmentation im-

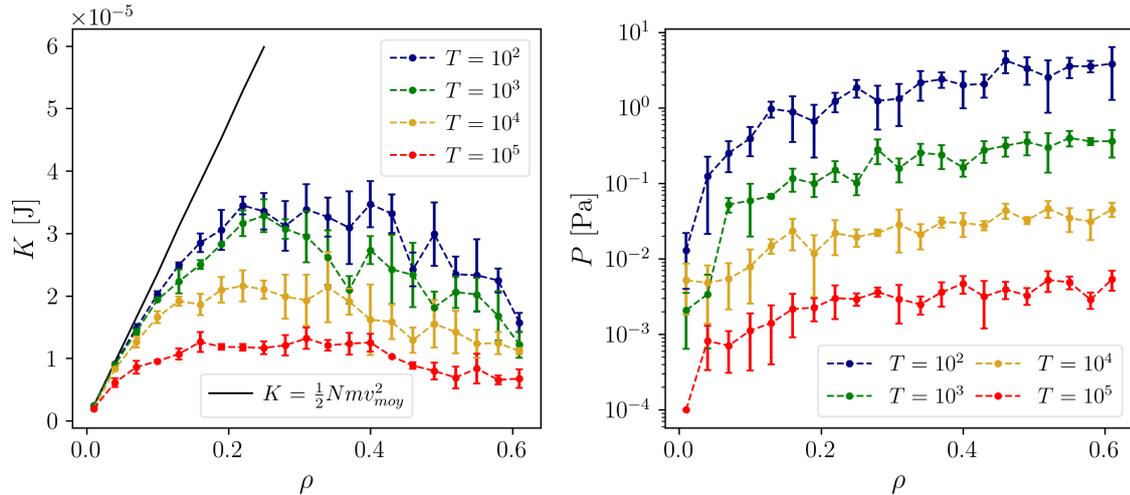


FIGURE 4.5 – Graphique de gauche : Énergie cinétique du système moyennée dans le temps en fonction de la densité de particules. La droite pleine est l'énergie cinétique théorique d'un système où les N particules n'interagissent pas. Graphique de droite : Pression en échelle logarithmique ressentie par l'obstacle présent dans la [FIGURE 4.4](#) en fonction de la densité. Chaque point associé à sa barre d'erreur est une valeur moyenne sur 4 simulations de 5 secondes. Chaque valeur de T est sous-entendu multipliée par dt .

pacte l'énergie cinétique totale du système de la sorte. Cela implique que la valeur donnée à T influence également la formation d'amas au sein du milieu : en effet, pour un T plus grand, les PAPs nécessitent un temps plus long pour recouvrer leur vitesse limite après une collision. Elles ont donc tendance à demeurer dans un amas plus longtemps dû à leur faible vitesse. Par ailleurs, elles n'atteignent parfois jamais leur vitesse limite en raison du temps moyen entre deux collisions qui s'avère plus court que le temps pour atteindre v_l , comme le montre la courbe rouge pour $T = 10^5 dt$ s. Ceci implique également que la pression dans le système est d'autant plus grande que T est petit étant donné que la force ressentie par l'obstacle est proportionnelle à la vitesse de la particule qui rentre en contact avec ce dernier. La différence entre les courbes de pression est d'ailleurs flagrante puisque seule celle correspondant à $T = 10^2 dt$ s se démarque significativement de zéro.

Une deuxième observation concerne la forme trapézoïdale des courbes avec un plateau s'étendant de $\rho = 0.19$ à $\rho = 0.40$. En amont, nous pourrions nous attendre à ce que le système gagne en énergie cinétique proportionnellement au nombre de particules présentes. Cela est respecté dans le cas de PAPs qui n'interagissent pas entre elles. Cependant, dans le cas où des collisions ont lieu, des amas se forment et entravent la libre circulation des particules qu'il contient et de celles qui se trouvent autour de lui. C'est pourquoi nous retrouvons une stagnation des données dès $\rho = 0.19$ en accord avec les clichés du système dans la [FIGURE 4.4](#) où les amas commencent à se former de manière durable à cette densité. Ce plateau peut ainsi servir d'indication de la présence d'amas dans le système.

La décroissance des courbes est expliquée par l'apparition d'amas denses dans un état bloqué (*jammed*) : le nombre de particules que contient l'amas est tellement important que la pression en son sein réduit la mobilité des PAPs. L'amas devient alors une entité à part entière, tel un solide, capable de se mouvoir à faible vitesse et demeurant difficile voire impossible à dissiper. La croissance de la pression en parallèle est un bon indicateur de ce phénomène. La valeur de $\rho = 0.40$ est en accord avec les résultats de Fily et Marchetti [12] qui exposent l'existence d'une densité critique à $\rho = 0.45$ au-delà de laquelle une transition de phase se produit. Subséquemment, les trois parties du graphique de gauche de la [FIGURE 4.5](#) - croissante, constante et décroissante - peuvent être associées aux trois états de la matière : gaz, liquide et solide. Cette identification nous permettra de fixer une

gamme de densité correspondant à un état en particulier dans nos prochaines simulations.

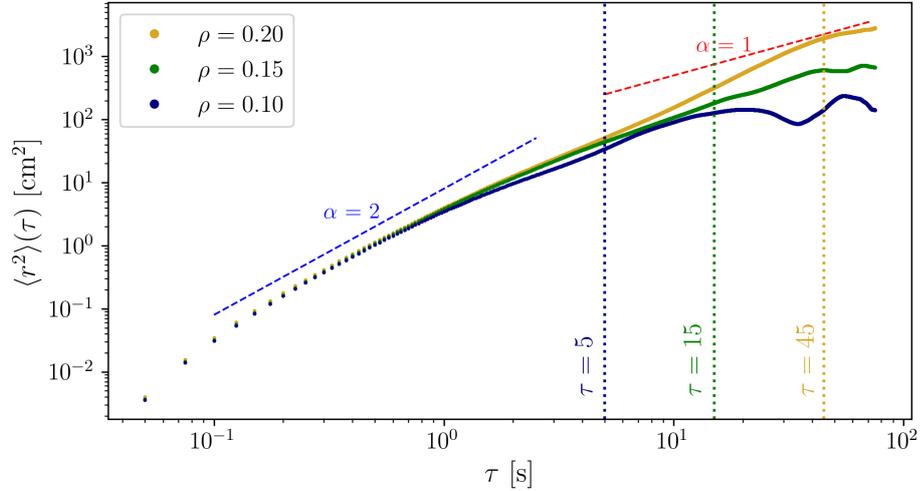


FIGURE 4.6 – MSDs d’un intrus passif circulaire de rayon égal à celui des PAPs pour plusieurs densités du système. Les lignes pointillées donnent la valeur de transition τ_{trans} entre le régime superdiffusif et diffusif pour chaque courbe de la couleur correspondante. Les lignes bleue et rouge sont des aides visuelles.

Une dernière caractérisation de notre modèle de bain actif consiste à inclure un intrus dans le milieu. Nous activons donc simplement le mouvement de l’obstacle présent dans la [FIGURE 4.4](#). Il devient alors une particule passive transportée par le flux de particules avec lesquelles il entre en contact. Seule l’interaction stérique avec les PAPs permet de le mettre en mouvement ou de le ralentir : en effet il n’est soumis à aucune viscosité mais il ressent une faible friction au contact des PAPs. Une fois que l’intrus acquiert une vitesse de déplacement, il la conserve jusqu’à une nouvelle collision.

L’intérêt d’analyser le mouvement de l’intrus est de le corroborer avec les résultats de Wu et Libchaber [73] et Valeriani *et al.* [74]. Ils soutiennent et démontrent que la courbe MSD de la trajectoire de l’intrus est similaire à celle d’une PAP mais dont la transition superdiffusion-diffusion se produit à un temps τ influencé par la densité et l’activité des PAPs dans l’environnement. Étant donné que notre intrus n’est freiné par aucune viscosité, contrairement aux deux études précédentes, il est utile de valider notre modèle dans ces conditions.

À partir de trois simulations de 100 secondes à trois densités différentes, nous dressons les courbes MSD de notre intrus dans la [FIGURE 4.6](#). La couleur de chaque ligne verticale pointillée se rapporte aux points ayant la couleur correspondante. Elles servent à marquer les moments de transition entre les deux régimes pour chacune des simulations.

En comparaison avec la [FIGURE 2.9b](#), la même relation entre densité et temps de transition survient entre les deux graphes. À noter qu’une différence de densité de 0.05 dans notre graphe entraîne une non-linéarité de l’évolution du temps de transition. En effet, la différence des valeurs de τ_{trans} entre les deux premières courbes est de 10 pour une différence de 0.05 en densité et de 30 entre les deux dernières pour le même saut en densité.

Cette relation est difficilement rapportable à l’expérience de Wu et Libchaber [73] puisqu’ils se réfèrent à une concentration de bactéries en cm^{-3} plutôt qu’à une densité sans unité. Toutefois, l’augmentation de τ_{trans} avec la densité est présente sans équivoque dans les deux cas. Le retardement de τ_{trans} avec la densité peut être dû à la formation

d'amas qui enferment la particule et l'entraînent dans leur mouvement dirigé avant de la libérer, allongeant donc le temps de son comportement superdiffusif.

Une dernière observation concerne les points des courbes $\rho = 0.10$ et $\rho = 0.15$ pour des temps grands : un plateau, *i.e.* une pente nulle, semble succéder à la diffusion thermique, ce qui n'est pas le cas dans la [FIGURE 2.9b](#). Ce plateau doit possiblement son existence à deux phénomènes : l'imprécision inhérente au calcul du MSD pour des τ grands et l'effet de confinement que la présence des PAPs suscite.

4.1.2 Immersion d'un filament

Compte tenu de l'importance de l'implémentation de la membrane dans notre modèle, nous portons une attention particulière à son comportement lorsque des forces s'appliquent sur ses monomères. Pour ce faire, nous tentons de reproduire les conformations en épingle du polymère semi-flexible de Harder, Valeriani et Cacciuto [93].

Les paramètres de notre modèle sont choisis de telle sorte à ce qu'ils soient le plus proche de ceux de leurs simulations, c'est-à-dire : $\rho = 0.10$ et $R_{Mon} = R_{PAP} = 0.005$. La rigidité angulaire qu'introduisent Harder, Valeriani et Cacciuto dans leur polymère est l'équivalent de notre κ_R dont le rôle est d'induire un moment de force de rappel qui tend à ramener la membrane dans sa configuration initiale. Cette dernière prend la forme d'une ligne droite, et c'est ainsi qu'elle est placée en début de simulation.

Les valeurs de rigidité angulaire sont toutefois difficilement comparables : la gamme de notre rigidité κ_R a été choisie en fonction de la résistance macroscopique qu'oppose le filament à la flexion. Pour $\kappa_R = 0.01$, le polymère ne se plie que très difficilement sous l'action des PAPs tandis que $\kappa_R = 0.00001$ n'entraîne qu'une résistance légèrement supérieure à celle d'un polymère totalement flexible ($\kappa_R = 0$). Les rigidités intermédiaires se situent entre ces valeurs. Le filament compte 40 monomères contre 70 monomères dans le cas de l'étude citée. Ce choix de réduction de la taille du filament s'explique par le placement de celui-ci : il doit en effet être disposé initialement en ligne droite, ce qui requiert un milieu suffisamment grand. Afin de limiter le temps de simulation, le milieu conserve sa taille d'origine $l_x = l_y = 0.4$ m et la taille du polymère est réduite.

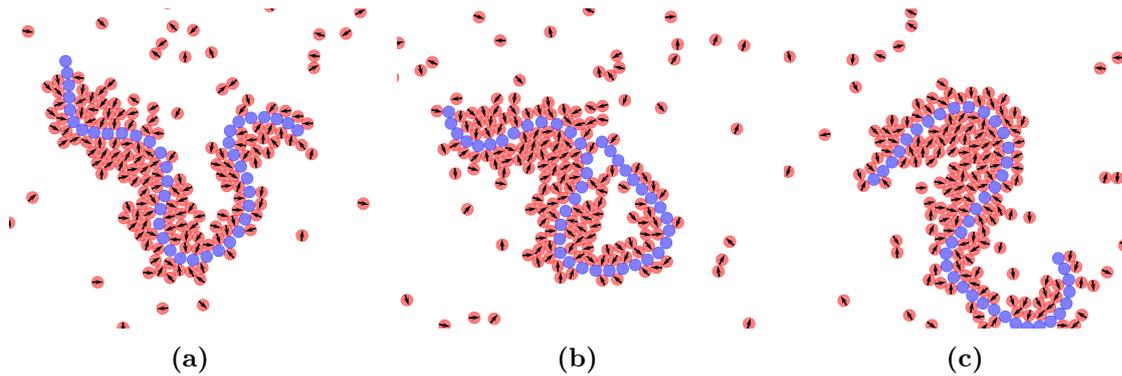


FIGURE 4.7 – Évolution de la conformation en épingle de la membrane (en bleu). De gauche à droite ((a) à (c)) : dépliement de la membrane dans le bain actif pour une densité $\rho = 0.10$, vitesse limite $v_l = 0.05$, élasticité moyenne $\kappa_T = 100$ et rigidité angulaire intermédiaire $\kappa_R = 0.001$.

La [FIGURE 4.7](#) montre des clichés d'une simulation comprenant le filament immergé dans le bain actif. La vitesse limite, et donc l'activité du bain, est de $v_l = 0.05$ m/s et la membrane possède une rigidité angulaire intermédiaire de $\kappa_R = 0.001$ et une élasticité moyenne de $\kappa_T = 100$. Cette élasticité est suffisamment faible pour empêcher les PAPs de passer entre deux monomères et assez grande de sorte que la force ressentie par l'ac-

cumulation des PAPs sur ses monomères engendre une faible séparation entre eux (voir [FIGURE 4.7](#) l'étirement du filament). Les images sont prises à deux secondes d'intervalle.

On y retrouve la conformation en épingle mise en évidence dans la [FIGURE 2.15a](#) ainsi que son dépliement au cours du temps. En accord avec ce qui a été expliqué dans le [chapitre 2](#), les PAPs ont tendance à se regrouper en plus grande quantité dans les fortes courbures du filament puisqu'elles y sont piégées plus facilement. De manière générale, les PAPs qui s'accumulent dans ses régions concaves de notre filament sont beaucoup plus nombreuses que dans les séquences de la [FIGURE 2.15a](#). L'explication la plus plausible serait liée au temps de diffusion rotationnelle τ_R dont la valeur dans l'article de référence serait considérablement plus faible que 10 secondes. Cela permettrait ainsi aux particules de se libérer plus rapidement des agglomérats dans la courbure du filament.

Harder, Valeriani et Cacciuto relatent dans la [FIGURE 2.15b](#) le phénomène de dilatation de leur polymère flexible pour une plus forte activité des PAPs et le phénomène inverse dans le cas de polymères semi-flexibles. Les données du rayon de giration de notre filament dans le bain actif pour plusieurs activités du bain n'apportent néanmoins que des résultats fortement bruités. Les tendances de dilatation ou contraction ne sont pas observées dans nos simulations alors que des conformations similaires du filament y sont constatées. Nous identifions plusieurs causes potentielles de cette divergence :

- Si nous considérons uniquement la dilatation du polymère flexible avec l'activité du bain, phénomène observé non seulement par Harder, Valeriani et Cacciuto, mais aussi par Kaiser et Löwen [92], la tendance de nos résultats est inverse : cela provient probablement de la **construction intrinsèque de notre filament**. Puisque que les monomères sont attachés à un endroit fixé de leur circonférence, cela implique l'existence d'un angle maximal entre les axes de deux monomères en cas de pliement. Une sorte de rigidité est donc inhérente à son implémentation et peut suffire, comme le montre la [FIGURE 2.15b](#), à inverser le phénomène de dilatation.
- **La reproductibilité de nos simulations est limitée** : plusieurs facteurs entrent en jeu dans les conditions initiales. Les orientations des PAPs sont choisies aléatoirement lorsqu'elles sont placées en début de simulation. Leurs positions initiales suivent également une distribution uniforme. Nos données ont été moyennées sur six simulations sans produire des résultats cohérents. Il en est donc déduit qu'une grande quantité de simulations est nécessaire pour obtenir des résultats fiables.
- Notre filament est construit à partir de monomères liés entre eux via un potentiel harmonique suivant la loi de Hooke et l'étude mentionnée ci-haut suit la même implémentation. Cependant, la valeur de leur constante de rappel n'est pas spécifiée précisément. Ceci entraîne une **inconnue sur l'élasticité** de leur polymère, élasticité qui pourrait avoir un rôle important dans le comportement du filament.
- Nos simulations durent 15 secondes afin d'éviter un temps excessif de calcul par l'ordinateur. Sachant cela, **le temps d'une simulation n'est pas suffisant pour atteindre un état stationnaire** pour le rayon de giration du polymère. En effet, en tenant compte des cycles de pliement et dépliement du filament, il serait attendu que l'évolution du rayon de giration oscille au cours du temps autour d'une valeur moyenne, tout du moins dans le cas d'un polymère semi-flexible. Étant donné le temps de diffusion rotationnelle τ_R de 10 secondes, ce cycle aurait une période au moins une fois supérieure à τ_R puisque le temps que requiert une particule pour se dégager d'un amas est de l'ordre de ce paramètre. En pratique, la concentration substantielle de PAPs dans les courbures du filament retarde le flux d'entrée et de sortie de PAPs dans et de l'amas, ce qui en conséquence augmente encore la période du cycle du rayon de giration (i.e. les amas subsistent plus longtemps).

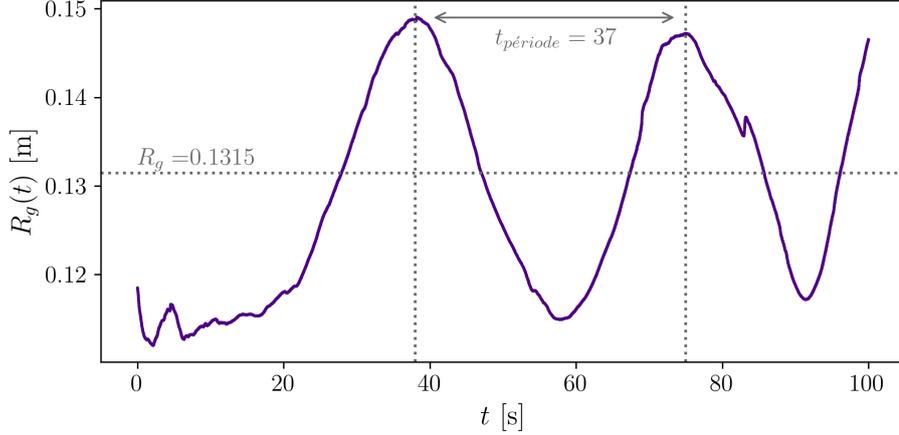


FIGURE 4.8 – Évolution dans le temps du rayon de giration d’un filament de 40 monomères pour les paramètres suivants : $v_l = 0.04$ m/s, $\rho = 0.1$, rigidité et élasticité intermédiaires de $\kappa_R = 0.001$ et $\kappa_T = 100$. La moyenne de l’oscillation et la période du signal sont indiqués sur le graphique.

En rapport avec le dernier point de notre liste, la [FIGURE 4.8](#) retrace l’évolution du rayon de giration au cours d’une simulation de 100 secondes pour $v_l = 0.04$ m/s, $\kappa_T = 100$, $\rho = 0.1$ et $\kappa_R = 0.001$. Tout comme il a été annoncé ci-haut, la courbe prend la forme d’un signal oscillant autour d’une valeur moyenne $R_g = 0.1315$ m et dont la période est de $t_{periode} = 37$ secondes, *i.e.* le temps que prend le filament pour se plier et se déplier une fois. Cette valeur est, comme attendu, largement supérieure à τ_R . Ce graphe confirme ainsi la dynamique de mouvement de la membrane dans le milieu.

Une deuxième simulation de même durée pour $v_l = 0.02$ m/s indique une valeur moyenne du rayon de giration de $R_g = 0.2114$ m, ce qui suppose donc une évolution de R_g avec l’activité du bain en accord avec celle de la [FIGURE 2.15b](#) (contraction du polymère). Toutefois, sans la possibilité d’effectuer plusieurs simulations de durée égale, il est difficile de garantir que cette tendance est générale et non liée aux conditions initiales du système.

4.2 Résultats

La section précédente nous a permis de valider notre modèle numérique en tant que base solide et fiable pour l’étude d’une superstructure composée d’une membrane semi-flexible enfermant des particules auto-propulsées (PAPs) browniennes. Le comportement de chacune des entités de cette superstructure a été étudié et comparé qualitativement à d’anciennes études similaires. Cette étude a apporté une caractérisation quantitative de nos PAPs grâce à la détermination du temps de diffusion rotationnelle τ_R , à l’appréciation d’un coefficient de rigidité κ_R pour la membrane ainsi qu’à l’identification de trois régimes correspondant aux trois états de la matière en fonction du nombre de particules dans le milieu (évalué par la densité ρ).

La prochaine étape consiste donc à observer le comportement de la superstructure dans son ensemble. Nous nous concentrons davantage sur sa motilité dans le but de fournir un ensemble de paramètres servant au contrôle de cette dernière dans le cadre d’un intérêt biologique et technologique.

Les résultats qui suivent sont tous tirés de mesures sur des simulations d’une durée variant entre 40 et 60 secondes. L’alignement est activé après une seconde du début de la

simulation et les données sont collectées dès que les 20 premières secondes se sont écoulées. L'intérêt de procéder de la sorte est de limiter l'influence de la disposition et orientation initiales des grains et de laisser le système atteindre un état stationnaire.

Les paramètres suivant sont changés d'une simulation à l'autre : la densité ρ , la rigidité de la membrane κ_R entre deux valeurs extrêmes (flexible contre peu voire pas déformable) et l'intensité de l'alignement ζ entre particules. La vitesse limite que peuvent atteindre les particules - et donc indirectement l'activité du bain - est fixée à $v_l = 0.04$ m/s. Le temps $T = 100 dt$ secondes quant à lui a été choisi de telle sorte à ce que sa valeur soit plus faible que le temps entre deux réorientations d'une particule. Elle est toutefois suffisamment grande pour conserver le caractère non instantané de la vitesse des particules mentionné dans la section précédente.

Deux cas opposés se distinguent : les PAPs à l'intérieur de la membrane se meuvent soit en l'absence du potentiel d'alignement entre particules actives soit en sa présence. Cela a pour impact d'aligner ou non les PAPs entre elles. L'ajout de ce potentiel est motivé par la nécessité de provoquer une auto-organisation des PAPs. Comme déjà expliqué dans le [chapitre 3](#), cette dernière est indispensable au mouvement significatif et dirigé de la superstructure dans son environnement. Cela signifie que, pour un ζ nul, le système ne s'auto-organise pas.

La membrane est composée de 55 monomères circulaires et son élasticité est réduite à une valeur $\kappa_T = 400$. Celle-ci équivaut à une très faible élasticité, c'est-à-dire que les espaces qui se forment entre monomères en cas d'application de forces locales demeurent restreints. Un faible frottement existe entre les PAPs elles-mêmes et les monomères. Cette friction induit un moment de force et une force de translation sur les particules avec un coefficient de frottement $\mu = 0.1$.

La [FIGURE 4.9](#) présente quelques clichés de la superstructure lors de différentes simulations. Elles sont placées par ordre croissant de la capacité des particules à s'aligner ζ et ont des valeurs différentes de densité ρ . La vitesse instantanée du centre de masse (CM) de la membrane est indiquée en bas à droite de chaque cliché en tant que v_{CM} en m/s. La rigidité κ_R étant nulle, la membrane est donc entièrement flexible.

Une première observation qualitative concerne l'alignement des PAPs au sein de la membrane. Pour rappel, ζ exprime le ratio entre la force d'alignement et le moment de réorientation moyen des particules. Pour $\zeta = 0.0$, il est clair qu'aucune interaction d'alignement entre en jeu. Lorsque ζ s'éloigne de zéro, même de peu notamment pour $\zeta = 0.2$, un ordre polaire est déjà marqué. Le moment dû à l'alignement semble même dominer le moment de réorientation (lui-même modifié par le bruit tiré d'une distribution uniforme) à partir de $\zeta = 0.5$. Cette transition se produit plus tôt que ce qui est prévu par la définition du coefficient de proportionnalité ζ . Cette impression est cependant trompeuse : en effet, lors de l'agglomération des particules le long de la membrane, elles exercent une pression et donc un frottement important les unes sur les autres qui limite leur réorientation. C'est pourquoi elles ont tendance à conserver la même orientation une fois agglomérées, indépendamment de la compétition entre le bruit et l'alignement.

De manière générale, avant l'activation du potentiel d'alignement, les particules se répartissent dans la membrane en fonction de leur orientation initiale aléatoire et du bruit sur leur direction de mouvement. À ce stade, étant donné qu'elles pointent toutes dans des directions différentes, la pression dans les agglomérats est faible. Une fois que l'alignement est activé (après une seconde), un alignement entre voisins s'opère conformément à son intensité. Le bruit permet à quelques particules isolées de rejoindre des amas et s'aligner à leur tour, ce qui résulte dans le piégeage des particules impliquées dans l'amas. D'ailleurs, nos simulations montrent que les PAPs en frontière des amas se réorientent plus facilement que celles qui se trouvent au centre de ceux-ci, ce qui confirme l'hypothèse de la pression.

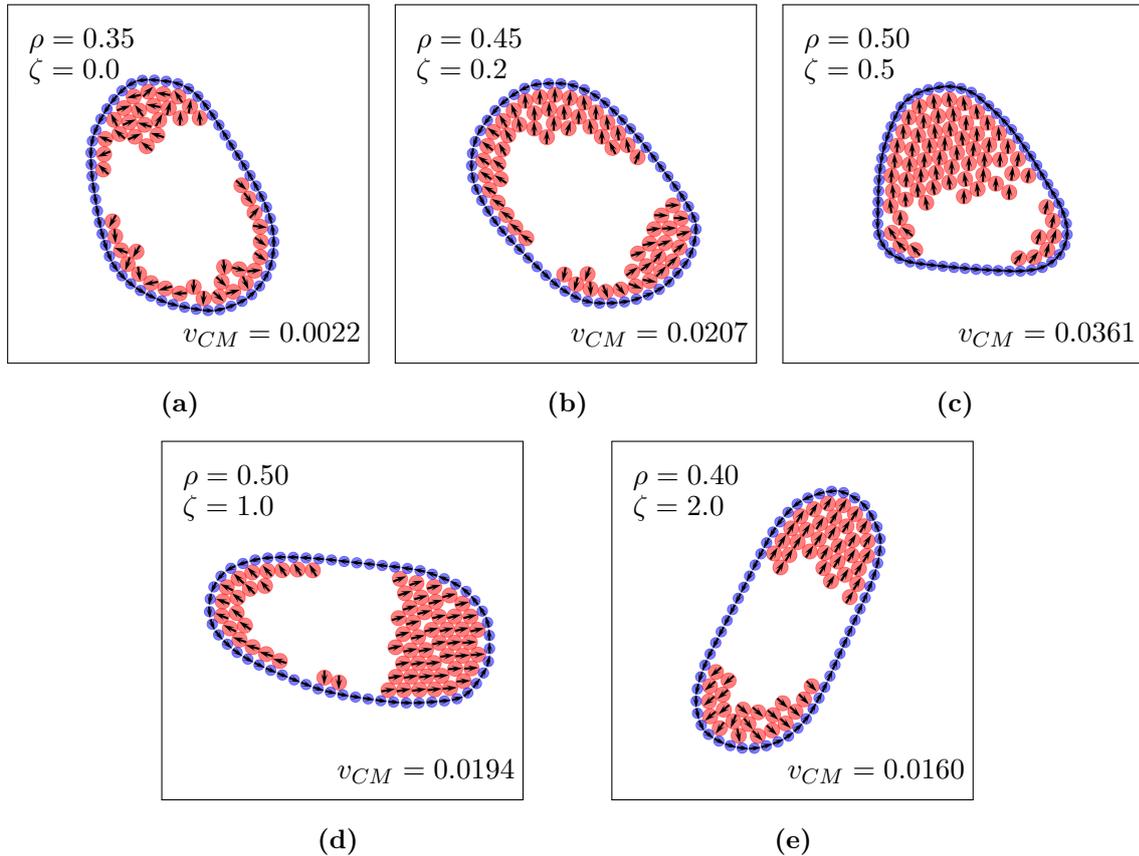


FIGURE 4.9 – Illustration de la superstructure après 35 secondes de simulation pour une rigidité κ_R nulle. L’intensité d’alignement ζ et la densité de particules ρ sont indiqués dans le coin supérieur gauche de chacune des sous-figures. En bas à droite, la vitesse instantanée du centre de masse de la membrane v_{CM} (m/s) est également donnée.

La sous-figure de droite de la [FIGURE 4.10](#) met en évidence cet effet de pression : certaines particules se retrouvent accumulées contre la membrane dans une orientation qui diffère fortement de celle de leurs voisins alors qu’une interaction d’alignement est présente. Elles gardent généralement cette orientation tout au long de la simulation car elles sont bloquées par les autres particules. Ce phénomène a donc un considérable impact sur leur réorganisation au cours du temps : plus la capacité à s’aligner ζ , et donc indirectement la pression, est importante, moins il y a de probabilité que les particules quittent leur amas, car l’influence du bruit est rendue minime par la friction et la force d’alignement. En conséquence, la vitesse du centre de masse au cours du temps demeure quasi-constante pour des valeurs importantes de l’alignement telles que $\zeta = 1.0, 2.0$.

Cette première déduction implique également un autre phénomène visible dans la [FIGURE 4.9](#) : la façon dont les particules se répartissent dans la superstructure varie de simulation en simulation. Elle est avant tout gouvernée par la réorientation aléatoire des PAPS mais elle est aussi fortement influencée par les conditions initiales. Le placement des PAPS en cercle sur la circonférence de la membrane demeure identique d’une simulation à l’autre mais leur orientation est fixée aléatoirement par une distribution uniforme. En fonction donc du bruit et de ces conditions initiales, les particules entrent en collision, forment des amas et se dirigent vers la membrane pour s’y agglomérer. Étant donné le caractère presque statique de ces agglomérats au cours du temps, cette suite d’événements - collisions, amas et agglomérats - conditionne quasi-intégralement la répartition des particules dans la superstructure dès les premières secondes.

En comparant les clichés de la [FIGURE 4.9](#) avec leur vitesse instantanée respective, nous observons qu'un regroupement de particules orientées dans le même sens favorise la motilité de la superstructure. Néanmoins, il est possible que deux amas extrêmes se forment et tirent la membrane dans deux directions opposées, résultant en une vitesse plus faible. C'est le cas notamment pour le cliché correspondant à $\zeta = 2.0$ en comparaison avec celui de paramètre $\zeta = 1.0$. Si la membrane est rendue non flexible ($\kappa_R = 10$) de sorte à ce qu'elle conserve une forme circulaire, comme dans la [FIGURE 4.10](#), nous observons un phénomène similaire où les valeurs distinctes du v_{CM} semblent liées à la répartition des particules et à leur orientation. À ce stade de l'étude, la différence en rigidité ne semble pas influencer sur la magnitude de la vitesse du CM de la superstructure. La densité ρ quant à elle implique la présence d'amas de plus grandes tailles : plus il y a de particules pouvant s'agglomérer et s'aligner, plus la force qui pousse la membrane à se déplacer est considérable. Toutefois, cette force peut être compensée par celle opposée d'un autre amas.

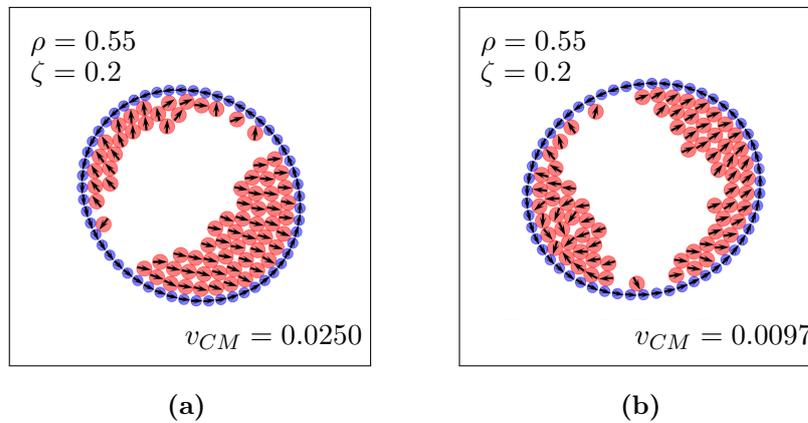


FIGURE 4.10 – Illustration de la superstructure après 35 secondes de simulation pour une forte rigidité $\kappa_R = 10$. L'intensité d'alignement ζ et la densité de particules ρ sont indiqués dans le coin supérieur gauche des deux sous-figures. En bas à droite, la vitesse instantanée du centre de masse de la membrane v_{CM} (m/s) est également donnée.

Au vu des observations ci-dessus, il peut être intuitivement supposé qu'une asymétrie dans la distribution des particules alignées est le moteur de la superstructure, *i.e.* un nombre de particules agglomérées d'un côté doit excéder celui de l'amas opposé, s'il existe, afin d'éviter une équilibration des forces et un mouvement de vitesse quasi-nulle. Cette asymétrie n'est pas suffisante en l'absence d'alignement car les particules ne s'auto-organisent pas, c'est-à-dire que, dans l'ensemble, elles ne s'orientent pas perpendiculairement à la membrane, ne lui permettant pas de se mouvoir.

Afin de mettre l'accent sur la dynamique de la superstructure, nous retraçons sa trajectoire, l'évolution de la vitesse de son centre de masse et sa déformation au cours du temps sur une simulation de 55 secondes dont seules les 35 dernières secondes sont prises en compte. La [FIGURE 4.11](#) reprend ces informations avec, en complément, deux clichés de la superstructure en début et fin de simulation. La déformation est déterminée à partir du ratio des moments d'inertie des deux axes principaux dans le plan. Un moment d'inertie renseigne sur la distribution des monomères par rapport à un axe choisi. Ces moments d'inertie sont calculés à partir du tenseur symétrique de second ordre et le système d'axes principaux est déterminé en diagonalisant la matrice représentative du tenseur. Les éléments de la matrice diagonalisée de dimension 3×3 correspondent aux moments d'inertie par rapport aux axes principaux X, Y et Z et sont notés I_1 , I_2 et I_3 avec $I_1 \leq I_2 \leq I_3$. Le tenseur dans sa forme générale, avant diagonalisation, s'écrit :

$$\bar{I} = \begin{bmatrix} I_{Ox} & -I_{xy} & -I_{xz} \\ -I_{xy} & I_{Oy} & -I_{yz} \\ -I_{xz} & -I_{yz} & I_{Oz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2) & -\sum_i m_i x_i y_i & -\sum_i m_i x_i z_i \\ -\sum_i m_i x_i y_i & \sum_i m_i (x_i^2 + z_i^2) & -\sum_i m_i y_i z_i \\ -\sum_i m_i x_i z_i & -\sum_i m_i y_i z_i & \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2) \end{bmatrix}$$

où Ox , Oy et Oz sont les axes du milieu (horizontal, vertical et perpendiculaire au plan).

Étant donné que nous sommes dans le cas d'une distribution à deux dimensions, les produits d'inertie I_{xz} , I_{yz} , I_{xz} et I_{yz} sont nuls. Le ratio de I_1 et I_2 obtenus après diagonalisation quantifie l'intensité de la déformation de la membrane dans le plan. Pour un cercle, ce ratio est unitaire et l'augmentation de la déformation engendre une diminution du ratio. Dans nos mesures ci-après, le ratio est donc borné entre 0 et 1.

La raison pour laquelle nous mesurons la déformation repose sur le phénomène d'agglomération des PAPs favorisée par les grandes courbures d'un objet. Nous en avons fait état dans le [chapitre 2](#), notamment pour le transport d'une nacelle courbée dont l'augmentation de la courbure accentue son mouvement dirigé ([FIGURE 2.12 \[80\]](#)). Ainsi, un de nos objectifs dans le cadre de ce travail est de déterminer si ce paramètre, *i.e.* la courbure directement liée à la rigidité κ_R , possède une influence similaire sur la motilité de la superstructure.

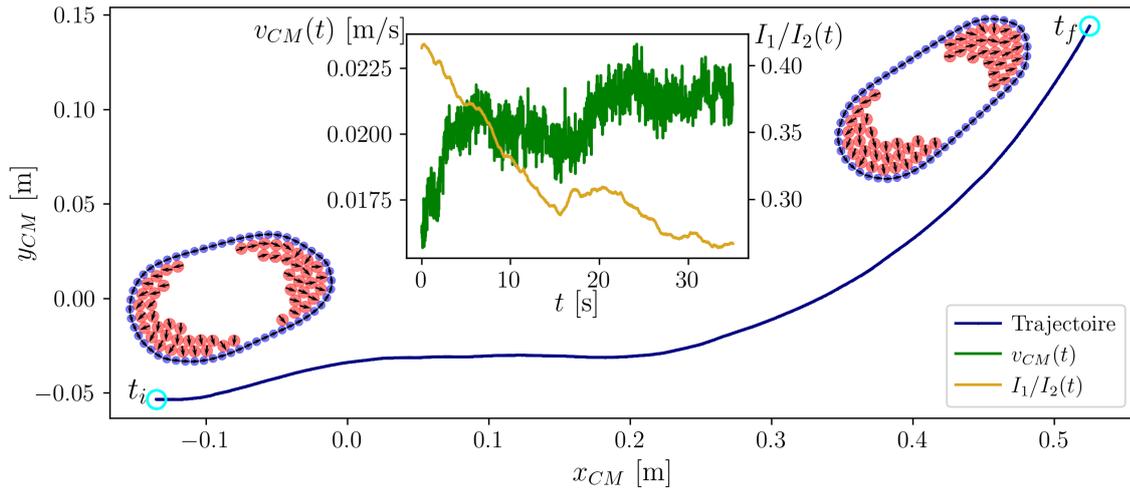


FIGURE 4.11 – Trajectoire de la superstructure pendant 35 secondes avec comme paramètres : $\rho = 0.40$, $\zeta = 0.2$ et $\kappa_R = 0$. Le début (resp. fin) de la trajectoire est marqué en cyan par t_i (resp. t_f). Le graphique en médaillon représente l'évolution de la vitesse du centre de masse $v_{CM}(t)$ et de la déformation $I_1/I_2(t)$ au cours du temps.

Les réorganisations des particules après agglomération étant peu fréquentes, la superstructure suit un mouvement dirigé avec des changements de direction progressifs et lents comme le montre la [FIGURE 4.11](#). En rapportant le graphique en médaillon à la trajectoire, la superstructure la parcourt avec une vitesse et déformation croissantes. Les deux clichés de la superstructure indiquent que les particules initialement présentes le long de la membrane ont rejoint un des deux amas, ce qui résulte en un accroissement de la déformation (et par conséquent la diminution de la valeur du ratio). Il existe donc un lien direct entre la distribution des PAPs et la déformation de la membrane.

Le résultat dans le graphique en médaillon de la [FIGURE 4.11](#) invite à penser qu'une plus grande déformation implique une vitesse plus importante. Afin de vérifier cette hypothèse, une moyenne sur cinq simulations de l'évolution dans le temps de la vitesse et de la déformation est réalisée. Les notations $\overline{v_{CM}}(t)$ et $\langle v_{CM} \rangle$ réfèrent à deux types de moyennes

différentes : la première est une moyenne de l'évolution de la vitesse sur plusieurs simulations et la seconde une moyenne de la vitesse sur le temps pour une simulation.

Le graphique de gauche de la [FIGURE 4.12](#) montre l'évolution de la vitesse du centre de masse au cours du temps de quatre courbes de densités différentes en fonction de la déformation de la membrane. La tendance générale semble être en accord avec l'hypothèse susmentionnée à quelques exceptions près pour la courbe rouge et bleue. En effet, la réduction de la vitesse est plus ou moins marquée par une augmentation de la déformation au cours du temps. Cette tendance n'étant cependant pas systématique pour les quatre progressions, il est difficile d'appuyer son influence dans la motilité de la superstructure. Nous pouvons toutefois arguer que l'amplitude de la déformation et donc la distribution des PAPS à l'intérieur de la membrane joue un rôle dans son déplacement au cours du temps. En revanche, cette corrélation n'est pas présente d'une simulation à l'autre comme observé dans le graphique de droite de la [FIGURE 4.12](#). La vitesse du CM moyennée dans le temps comparé à la déformation moyenne de la membrane n'apporte aucune information, si ce n'est que les différences de courbure ne suffisent pas à justifier les vitesses extrêmes rencontrées dans les diverses simulations. En conséquence, la recherche d'autres facteurs est approfondie ci-après.

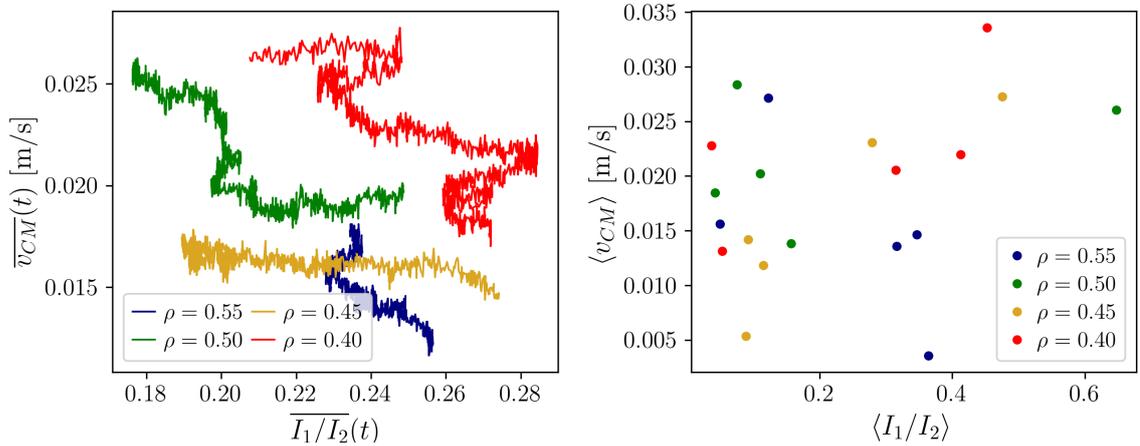


FIGURE 4.12 – Graphique de gauche : évolution de la vitesse du centre de masse $\overline{v_{CM}}(t)$ en fonction de la déformation de la membrane $\overline{I_1/I_2}(t)$ au cours du temps. Chaque courbe résulte d'une moyenne sur cinq simulations de paramètres identiques. Graphique de droite : vitesse du centre de masse en fonction de la déformation de la membrane. Chaque point correspond à une simulation dont la déformation et la vitesse ont été moyennés sur le temps. $\zeta = 0.2$.

Jusqu'ici, seule une étude du comportement dans le temps a été effectuée : nous n'avons pas encore de vue globale sur l'évolution de la motilité par rapport aux paramètres directement fixés dans nos simulations tels que la densité ou encore la capacité à s'aligner des PAPS. Dans une suite naturelle à ce qui a été explicité ci-haut, la [FIGURE 4.13](#) met en avant l'évolution de la vitesse du CM avec la densité des particules enfermées dans la membrane et ce, pour deux rigidités extrêmes : flexible $\kappa_R = 0$ et non-flexible $\kappa_R = 10$. Chaque point avec sa barre d'erreur associée constitue la moyenne sur le temps de la vitesse $\langle v_{CM} \rangle$ sur 8 et 15 simulations pour le graphique de gauche et de droite respectivement. Les lignes en traits discontinus qui joignent les points sont tracées pour faciliter la lecture des données. Le graphique de gauche correspond à un paramètre $\zeta = 0$ et celui de droite à $\zeta = 1$. Nous y retrouvons un écart-type de la vitesse non négligeable entre simulations, marqué par les barres d'erreurs, et une vitesse de la superstructure qui n'excède pas la vitesse limite $v_l = 0.04$ m/s d'une particule, de manière tout à fait attendue.

Dans le cas d'absence d'alignement, la courbe décroît avec la densité. Ce résultat se

justifie assez intuitivement et est en accord avec l'évolution de la cinétique du bain actif décrit dans la [FIGURE 4.5](#). Une densité sous 0.2 correspond à un état de la matière gazeux : les amas qui s'y forment sont éphémères et les collisions entre PAPs peu nombreuses. La probabilité qu'une asymétrie dans la distribution des particules le long de la membrane existe est plus importante que dans le cas où la densité se situe au-delà de 0.2. Les PAPs possèdent également une meilleure liberté de mouvement vu qu'elles ne sont pas entravées par la pression qu'exerceraient leurs voisins sur eux.

Nous avons donc affaire à un déplacement de la superstructure actionné par quelques particules seulement, sans que des amas opposés puissent se former pour ralentir son parcours. La réduction de la $\langle v_{CM} \rangle$ à une valeur plus faible qu'un quart de la vitesse limite v_l au-delà de $\rho = 0.2$ peut s'expliquer par l'omniprésence des amas qui restreignent le mouvement des PAPs et subséquemment de la superstructure.

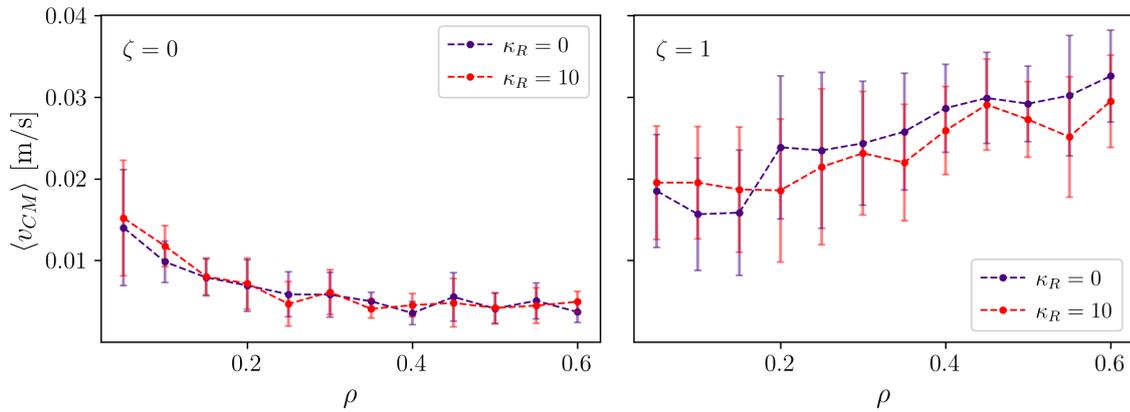


FIGURE 4.13 – Évolution de la vitesse du CM moyennée sur 8 (graphique de gauche) et 15 simulations (graphique de droite) en fonction de la densité ρ . Les rigidités κ_R réfèrent à des cas extrêmes : flexible contre non-flexible. Graphique de gauche : $\zeta = 0$. Graphique de droite : $\zeta = 1$.

La présence d'un alignement en compétition avec le moment de réorientation a néanmoins une incidence drastique sur cette tendance avec la densité. $\langle v_{CM} \rangle$ croît alors presque linéairement avec cette dernière : la formation d'amas, auparavant contraignante concernant la motilité de la superstructure pour un alignement nul, devient propice au mouvement dirigé de celle-ci. Ces amas donnent lieu presque systématiquement à un alignement général des particules le constituant dans la direction de mouvement. Ce phénomène est par contre peu probable voire improbable pour des conditions telles que $\zeta = 0$.

À noter que la rigidité de la membrane n'est pas un paramètre discriminant dans les résultats se rapportant à un alignement nul. En revanche, pour $\zeta = 1$, les résultats des simulations avec une membrane déformable contre celles avec une membrane rigide témoignent d'un léger écart à partir de $\rho = 0.2$, *i.e.* de la limite à partir de laquelle les amas sont omniprésents. Cette différence n'est pourtant que peu significative, mais elle permet de compléter l'hypothèse décrite ci-dessus concernant le rôle que joue la courbure (ou la déformation) de la membrane dans la motilité de la superstructure. Cette courbure incarnerait ainsi un facteur en partie représentatif de la répartition des particules dans la membrane sans pour autant posséder d'effet favorable manifeste sur la motilité de la superstructure.

Ces derniers résultats nous conduisent à nous interroger sur la réponse du système face à une variation de l'intensité de l'alignement. La [FIGURE 4.14](#) reprend l'évolution de la vitesse du CM en fonction de la densité pour plusieurs valeurs de l'alignement dans un premier temps, et, dans un deuxième temps, présente les mêmes mesures en fonction maintenant de l'alignement pour trois densités distinctes représentatives des trois états de

la matière ($\rho = 0.15$, $\rho = 0.35$ et $\rho = 0.55$). Le paramètre d'alignement prend les valeurs suivantes : $\zeta = 0$, $\zeta = 0.2$, $\zeta = 0.5$, $\zeta = 1$ et $\zeta = 2$.

Un faible alignement $\zeta = 0.2$, à savoir un alignement cinq fois inférieur à la moyenne du moment de réorientation M_B , entraîne déjà une divergence significative dans la tendance de la courbe de la vitesse. Elle ne décroît plus avec la densité mais adopte un caractère quasi-constant. En outre, $\zeta = 1$ semble être la limite au-delà de laquelle une augmentation de l'intensité de l'alignement n'a plus d'effet significatif sur la motilité. Par conséquent, un alignement de l'ordre de M_B est suffisant pour que la superstructure atteigne une vitesse dite maximale dans le cadre de notre modèle.

Concernant le graphique de droite, une plus grande quantité de particules signifie que la distance avant qu'une particule en rencontre une autre est d'autant plus courte. La probabilité qu'un grand nombre d'entre elles s'aligne se voit alors amplifiée, c'est pourquoi, *a priori*, la vitesse de la superstructure est accentuée avec la densité. Ce phénomène est clairement marqué par les trois courbes des trois états de la matière : la vitesse est d'autant plus accrue que la probabilité de créer des amas est grande. Enfin, l'effet de l'alignement se marque significativement à partir de $\rho = 0.2$, autrement les barres d'erreur se superposent aux moyennes, ce qui est une fois de plus relatif à la taille et temps de vie des amas associés aux densités plus élevées.

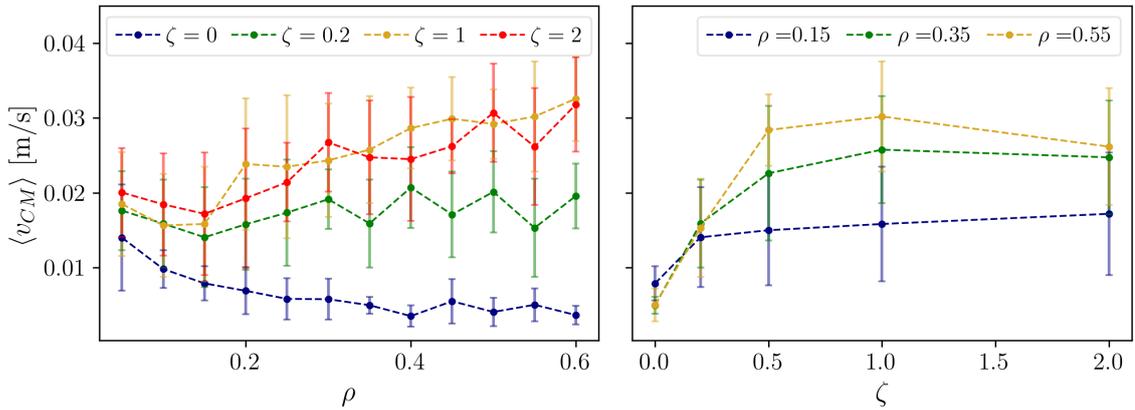


FIGURE 4.14 – Graphique de gauche : vitesse du CM en fonction de la densité pour 4 valeurs de l'alignement. Graphique de droite : vitesse du CM en fonction de l'alignement pour 3 valeurs de la densité. Les points représentent les moyennes sur 15 simulations. $\kappa_R = 0$.

Ce paramètre d'alignement étant favorable à la motilité de la superstructure, il est naturel de se poser la question sur sa réelle importance dans le déplacement de celle-ci. De plus, les simulations avec des paramètres identiques donnent des résultats parfois divergents, c'est pourquoi nous pouvons supposer que l'alignement effectif des particules dépend lui-aussi de la distribution des PAPs engendrée par les conditions initiales et le bruit aléatoire sur leur orientation. L'intensité de l'alignement effectif et celle de la capacité à s'aligner de paramètre ζ sont évidemment interdépendantes et il s'agit surtout d'appuyer le rôle primordial que tient le premier. L'alignement effectif, appelé polarisation $P_{\vec{r}}$, mesure le degré d'alignement des particules en tout temps tel que :

$$P_{\vec{r}} = \frac{1}{N} \left| \sum_i^N \vec{r}_{\theta_i} \right|$$

avec N le nombre de PAPs et \vec{r}_{θ_i} le vecteur d'orientation unitaire de la particule i .

Si toutes les particules pointent dans la même direction, alors $P_{\vec{r}} = 1$. Par contre, si leur orientation respective est aléatoire, la polarisation s'approche d'une valeur nulle. D'une

certaines façon, pour notre modèle, la polarisation tient également compte de la distribution des PAPs : en effet, lorsque des agglomérats opposés se forment, ils pointent généralement vers la membrane, donc dans des directions opposées. Dès lors, notre calcul de la polarisation est directement affecté par la façon dont sont placées les particules au cours du temps.

La [FIGURE 4.15](#) atteste de l'implication indéniable de la polarisation dans la motilité de la superstructure. Le graphique de gauche dépeint l'évolution de la vitesse du CM en vis-à-vis avec la polarisation au cours du temps. $\zeta = 0.2$ et la densité vaut $\rho = 0.25$. Une différence d'environ 0.4 entre les polarisations initiale et finale provoque une augmentation du $v_{CM}(t)$ de presque deux fois sa valeur initiale. Cette première indication de l'impact substantiel de la polarisation est vérifiée par le graphique de droite. Ce dernier expose la corrélation linéaire existant entre la vitesse du CM moyenne et la polarisation moyenne pour plusieurs simulations avec un paramètre de densité balayant les trois états de la matière et $\zeta = 0.5$. Le résultat est sans équivoque : la polarisation constitue un facteur majeur qui permet à la superstructure d'explorer son environnement.

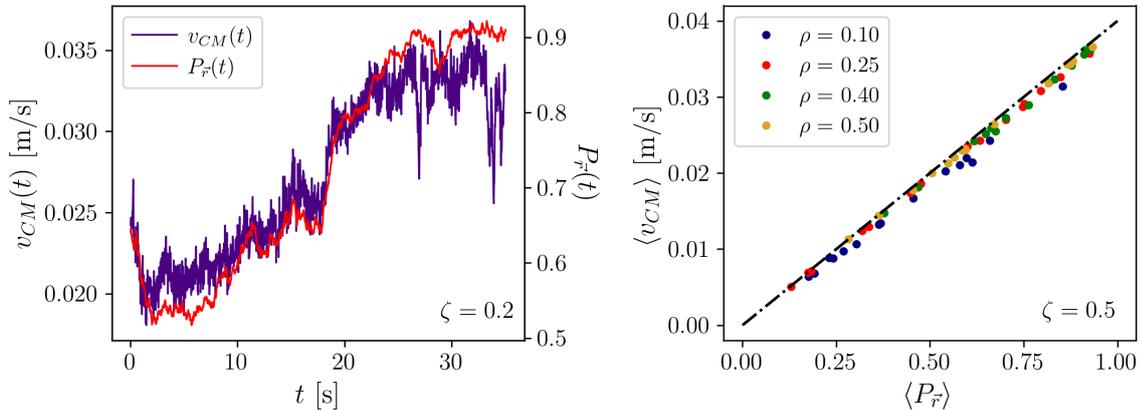


FIGURE 4.15 – Graphique de gauche : vitesse du CM et polarisation $P_{\vec{r}}$ (ou alignement effectif) au cours du temps avec $\zeta = 0.2$. Graphique de droite : corrélation linéaire de la vitesse du CM avec la polarisation pour plusieurs simulations et plusieurs densités ρ pour $\zeta = 0.5$. La droite discontinue est un ajustement des données de pente $v_l = 0.04$. $\kappa_R = 0$.

Dans le graphique de gauche, la vitesse bascule parfois entre deux valeurs éloignées sans que cette variation soit reproduite dans l'évolution de la polarisation. C'est notamment le cas pour le pic à environ $t = 27$ secondes. Il semblerait ainsi que, dans notre modèle, la polarisation détermine presque entièrement le mouvement de la superstructure. Les fluctuations de la vitesse trouvent probablement leur origine dans les changements d'orientation des PAPs dus au bruit tiré de la distribution uniforme. Ces réorientations impliquent que la direction de la force qu'exerce une PAP sur la membrane peut être modifiée en raison du bruit et peut donc momentanément ralentir la superstructure dans son parcours si cette réorientation se propage à ses voisins via l'interaction d'alignement.

La droite discontinue noire de la [FIGURE 4.15](#) est une droite de pente égale à la vitesse limite ($v_l = 0.04$ m/s). La vitesse du centre de masse est ainsi bornée par cette valeur et la corrélation entre polarisation et vitesse en est directement dépendante. Les points se situent dans l'ensemble sous cette droite, rappelant l'influence du paramètre T sur la vitesse effective des PAPs et donc sur celle de la superstructure.

4.3 Discussion

Par souci de clarté, avant de discuter plus en avant de nos résultats de la section précédente, nous reprenons les propriétés de notre bain qui ont été mises en évidence lors de la validation de notre modèle. Certaines de ses caractéristiques se révèlent utiles dans l'interprétation de nos résultats, c'est pourquoi nous en faisons une description récapitulative ci-après.

La calibration de notre modèle nous a permis de mettre en exergue le déplacement typique d'une particule active dans le temps. Celui-ci présente une transition entre un mouvement dirigé et diffusif après un temps déterminé par la valeur du temps de diffusion rotationnelle τ_R lié au coefficient de diffusion de rotation. Dans notre cas, $\tau_R \simeq 10$ secondes et n'est pas changé d'une simulation à l'autre. Ce paramètre a une importance capitale dans le temps de vie d'un amas de particules et leur formation de manière générale.

En outre, la vitesse effective moyenne d'une particule seule est plus faible que la vitesse limite v_l fixée en début de simulation en raison des réorientations continuelles de son vecteur vitesse et d'un paramètre supplémentaire T qui est le temps que prend une particule pour atteindre v_l depuis le repos. La vitesse effective est déterminée, tout comme τ_R , par ajustement d'une courbe théorique sur nos données. Via l'introduction d'un intrus dans le milieu, nous montrons que son mouvement dû aux collisions avec les particules actives est lui aussi dicté par une transition entre les deux régimes mentionnés bien que celle-ci soit alors influencée non plus par τ_R mais par la densité et l'activité du bain.

L'influence du paramètre T décrit ci-haut est mise en évidence par une étude thermodynamique du bain : le comportement de ce dernier s'éloigne d'autant plus de celui d'un gaz idéal (*i.e.* aucune collision n'est permise) que T est grand. Les collisions résultent en un ralentissement voire un arrêt dynamique des particules et cet état subsiste d'autant plus si T est grand, allongeant ainsi le temps de vie des amas et leur nombre dans le système. Nous en retirons une valeur de T appropriée de telle sorte à ce qu'il soit plus faible que le temps entre deux réorientations (autrement, cela signifierait que les particules n'atteignent jamais leur vitesse limite). Trois régimes du système sont identifiés en fonction de la densité et nous les associons aux trois états de la matière : gaz, liquide et solide.

Finalement, un filament de rigidité variable construit à partir de monomères est immergé dans le bain et sa dynamique de dilatation et de pliage sous forme d'épingle est en accord avec les conformations observées dans la littérature scientifique. Toutefois, en fonction du degré de rigidité de notre filament, cette dynamique avec l'activité du bain ne suit pas une tendance similaire à celle présentée auparavant. Nous proposons plusieurs hypothèses expliquant ces divergences : elles comprennent l'influence des conditions initiales sur la reproductibilité du phénomène, l'inconnue sur l'élasticité du filament dans les anciens papiers, les différences de contraintes entre monomères et le temps considérable du cycle de pliage et dépliement qui ne permet pas d'atteindre un état stationnaire sur la longueur de nos simulations.

Nos résultats qui suivent la validation de notre modèle réunissent l'entièreté de notre étude de la motilité de la superstructure telle que définie plus haut. Si quelques pistes d'interprétation ont déjà été élaborées lors de la description de ces résultats, il reste encore quelques points à soulever avant de clôturer ce travail.

Nous avons mis en avant l'incidence cruciale que les conditions initiales et le bruit aléatoire ont sur la distribution des PAPs dans la membrane. Ceci est en fait dû, plus largement, à un phénomène de friction entre les particules et avec la membrane, ainsi qu'à la dissipation intervenant dans les collisions. Cette friction, étant proportionnelle à la force normale à la surface, est encore accentuée par l'agglomération des particules qui exercent, l'une sur l'autre, une force non négligeable. La pression est telle au sein de ces amas qu'ils

sont alors assimilés à des solides et les particules s’y retrouvent bloquées, dans le sens où leur moment de réorientation modulé par le bruit n’est plus suffisant pour enclencher cette réorientation face à la friction de coefficient μ non nul. Nous savons que la densité à laquelle ce blocage a lieu dépend fortement de l’activité des PAPs [67, 68] mais il peut aussi être accéléré par l’interaction qui tend à aligner les particules entre elles dans un milieu confiné, comme le montre la [FIGURE 4.9](#).

Le changement de tendance de la vitesse en fonction de la densité lors de l’activation de ζ peut être expliqué à l’aide de la formation d’amas dès $\rho = 0.2$ mise en évidence lors de la validation du modèle. Ceux-ci sont à l’origine d’une meilleure motilité à de hautes densités puisque la présence de plus gros amas suppose que le nombre de voisins au contact de chaque particule augmente, favorisant un alignement. Ainsi, l’influence de ce dernier est principalement marqué pour des densités supérieures à l’état de la matière gazeuse (associé au régime sous $\rho = 0.2$). Dans le cas d’une absence d’alignement, les amas réduisent la motilité des particules et subséquemment de la superstructure.

Ce paramètre ζ a été introduit dans notre modèle car, d’après de nombreux articles sur le sujet [6, 102, 103], la faculté des particules à s’auto-organiser est essentielle à l’amorçage d’un mouvement significatif de la superstructure. Cette auto-organisation n’existe que dans des cas particuliers : la forme des particules est asymétrique et elles se placent alors côte à côte, ou la dynamique des particules est telle que leur orientation et leur vecteur vitesse sont mutuellement couplés. Étant donné qu’aucun des deux cas ne correspond à notre modèle, nous choisissons de provoquer un alignement via l’application d’une force entre voisins pour à la fois sa simplicité et également pour la possibilité de varier le degré d’alignement que cette approche confère.

La friction et la dissipation ne représentent pas les seules causes du piégeage des particules. La rugosité induite par la géométrie de la membrane entraîne elle-aussi une baisse de la motilité des PAPs. En effet, les monomères bloquent parfois des PAPs dans l’espace qui existe entre eux, existence inhérente à leur forme circulaire. C’est pourquoi nous avons fait le choix de diminuer le ratio de taille entre ceux-ci et les PAPs. Cette taille, cependant, permet toujours une certaine intrication entre ces deux entités et pourrait être réduite davantage.

Le piégeage des particules par la friction induite par la pression au sein de l’amas, et par la dissipation des collisions (une particule qui se joint à un amas a tendance à y rester) implique que la distribution des particules varie très peu sur la durée des simulations. En fonction des conditions initiales et du bruit aléatoire sur la direction de mouvement des particules, les particules ne forment pas le même nombre et taille d’amas et leur position relative dans la membrane diffère d’une simulation à l’autre. En raison de cette variabilité, elles ne s’alignent pas de la même façon et induisent des vitesses de déplacement de la superstructure parfois très distinctes.

De par ces différents phénomènes, une plus grande vitesse est associée à une brisure de symétrie dans la distribution des particules dans la membrane. En fonction des amas, de leur taille, de leur position et de la polarisation interne des particules qui les constituent, la motilité de la superstructure sera plus ou moins favorisée. Il s’agit à la fois de la combinaison entre cette asymétrie et la capacité des particules à s’auto-organiser qui permet à la superstructure de se mouvoir dans son environnement. Si la brisure de symétrie existe mais que les particules ne s’alignent pas entre elles, la vitesse de déplacement qui en résulte demeure très faible. La [FIGURE 4.13](#) le confirme en montrant que la motilité décroît avec la densité. Si maintenant un alignement est présent, une densité seuil de particules est nécessaire pour obtenir un mouvement significatif. En revanche, dans le cas d’un système symétrique, *i.e.* les particules sont distribuées uniformément dans la membrane ou forment deux amas opposés de même taille dans lesquels elles pointent en direction des monomères,

l'alignement n'a à son tour aucun effet sur la motilité puisque la polarisation est nulle.

L'effet de piégeage des particules dans des amas, et la brisure de symétrie résultante, est un phénomène déjà observé dans les gaz granulaires. Il porte le nom de démon de Maxwell granulaire [108]. L'expérience qui illustre le mieux ce phénomène consiste à faire vibrer une boîte divisée en deux compartiments et communiquant par une ouverture. Un nombre équivalent de billes est placé dans chacun des compartiments. La vibration agite les billes, elles rebondissent et ont alors une probabilité non nulle de passer à travers l'ouverture vers le compartiment voisin. Après un certain temps, on observe qu'une grande quantité de billes se sont regroupées dans un même compartiment, laissant le second presque entièrement vide. Il s'agit là d'un phénomène où, via les collisions dissipatives entre les billes, elles se piègent entre elles, de manière tout à fait similaire à notre système.

En outre, l'existence d'une friction et de la qualité dissipative des collisions a aussi sa part d'influence dans le degré d'exploration de l'environnement par la superstructure. Nous avons pu montrer que la trajectoire de cette dernière, via la [FIGURE 4.11](#), est gouvernée par un mouvement dirigé dont les changements ostensibles de direction sont peu nombreux sur une échelle de temps de 35 secondes. Le temps important que prend le bain de PAPs pour se réorganiser dans la membrane - et donc opérer un changement de direction dans le mouvement de la superstructure - découle de plusieurs paramètres : le temps de diffusion rotationnelle τ_R , l'intensité du moment de réorientation moyen M_B contre la force de l'alignement, la friction entre PAPs et la rugosité de la membrane.

Si les réorganisations sont trop fréquentes, la superstructure tendrait à changer constamment de direction, résultant en un mouvement nul ou à une exploration restreinte du milieu. Au contraire, pour des réorganisations ponctuelles séparées par un temps long, comme c'est le cas pour notre modèle, la superstructure suit une direction privilégiée dont elle ne dévie presque pas sur un temps moyen. Par conséquent, ces deux cas extrêmes ne confèrent pas à la superstructure la propriété de parcourir l'entièreté de son milieu. Sa capacité d'exploration en est réduite et il serait alors intéressant d'établir un modèle se situant entre les deux extrêmes et d'observer son comportement face à des obstacles.

Cela nous conduit à nous interroger sur les limitations de notre modèle : notre modèle mathématique de la friction et la géométrie de la membrane, plus précisément la taille de ses monomères, pourraient être adaptés dans le but d'offrir plus de liberté de mouvement aux particules, dans la limite qu'un tel système soit expérimentalement reproductible ou représentatif d'un système naturel. Une membrane dont les monomères seraient infiniment petits annihilerait le phénomène de rugosité, et une friction plus adaptée, par exemple avec un coefficient μ non constant et dépendant de la vitesse, apporterait des possibilités de glissement entre particules et avec la membrane. Ces deux aspects constituent des possibles pistes de solution.

Pour un mouvement restreint à une dimension, Boudet *et al.* [6] observent la dynamique de leur superstructure face à des obstacles en étudiant son passage au travers d'une ou plusieurs constriction. Leurs vidéos montrent que leur superstructure subit des déformations perpétuelles de sa membrane, signe d'un haut taux de réorganisation des PAPs. Principalement, ce comportement est dû à la dynamique intrinsèque de leurs robots : ceux-ci présentent un biais dans leur direction d'auto-propulsion qui les amène à glisser dans le sens horaire ou anti-horaire le long de la membrane. Étant donné leur géométrie asymétrique, ils se placeront préférentiellement côte à côte au lieu de s'agréger en amas comme dans notre modèle. Cette asymétrie est d'ailleurs le facteur responsable de leur auto-organisation que nous avons incorporé à notre modèle à l'aide du paramètre ζ .

L'intérêt d'employer un potentiel d'interaction et non un facteur géométrique est que le degré d'auto-organisation peut être modulé, ce qui équivaut à la confection de géomé-

tries avec un degré croissant d'asymétrie dans le cadre d'une étude expérimentale. Cette entreprise est bien entendu plus fastidieuse que notre approche.

Ces différences fondamentales entre notre modèle et celui de Boudet *et al.* ont pour effet de modifier l'échelle de temps au cours de laquelle les déformations, réorganisations et changements de direction se manifestent. Toutefois, leur étude de la motilité étant principalement uni-dimensionnelle, il est difficile de prédire si les paramètres de leur superstructure contribueraient à une exploration optimale d'un milieu en deux dimensions.

Ils observent en revanche une corrélation similaire à la FIGURE 4.15 entre la vitesse du CM de leur membrane dans une direction et la polarisation de leurs robots le long de cette même direction. Leur superstructure est confinée verticalement, c'est-à-dire que son diamètre est équivalent à celui du canal dans lequel elle se meut. En accord avec ce qui a été supposé ci-dessus, ils mettent en évidence que le taux de variation moyen de l'ordre polaire (ou polarisation) de leurs robots est lié à la densité de particules mais aussi au biais induit par le fonctionnement de leurs robots. Ils en retirent un temps caractéristique moyen entre deux réorganisations significatives des robots dans la superstructure et, comme attendu, ce temps augmente drastiquement pour un biais réduit. La FIGURE 4.16 reprend la corrélation entre la vitesse du CM et la polarisation lors d'expériences et simulations aux paramètres identiques.

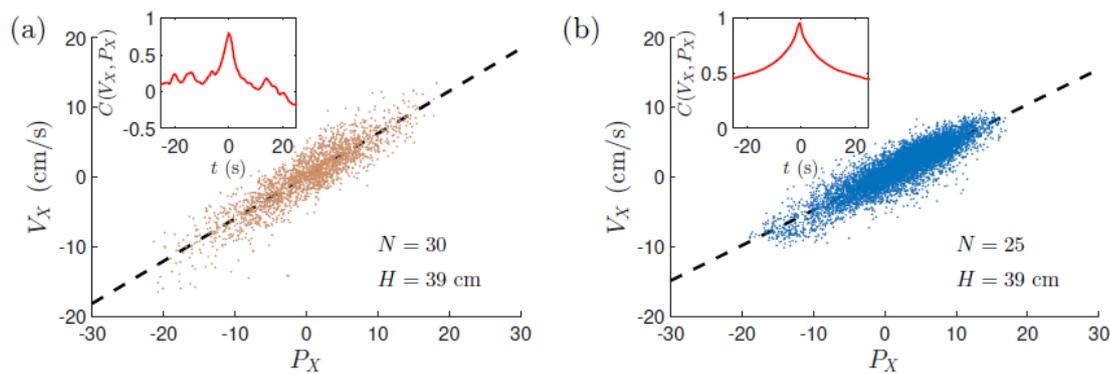


FIGURE 4.16 – Corrélation entre la vitesse du CM de la superstructure dans la direction du canal et l'ordre polaire des robots le long de cette direction. (a) expérience, (b) simulation. De Boudet *et al.* [6].

Ils n'approfondissent cependant pas l'effet de la rigidité de leur membrane qu'ils font varier en changeant l'épaisseur. Au vu de ce qui a été montré dans la section précédente, le rôle de la rigidité demeure contestable car nous n'avons pas pu identifier des tendances dans la motilité d'une superstructure rigide qui soient significativement différentes de celles d'une superstructure totalement flexible.

Enfin, la dépendance de la motilité avec les conditions initiales n'a pas pu être prouvée quantitativement : nous supposons que l'agglomération des particules selon une certaine distribution est à la fois corrélée à l'orientation initiale des PAPs - certaines pointent déjà vers la membrane, d'autres vers l'intérieur - , au bruit sur leur moment de réorientation et à leur polarisation initiale. Établir une relation de corrélation entre elles relève d'une étude complexe de multicollinéarité. Bien que cette dépendance aux conditions initiales puisse sembler être une nuisance, elle offre pourtant des possibilités de contrôle de la superstructure en exposant l'importance de la distribution des particules, et indirectement de leur polarisation, servant à une motilité optimale et à la modulation de sa vitesse de déplacement.

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

La discussion de nos résultats étant terminée, ce travail touche maintenant à sa fin. Les deux prochaines sections servent respectivement à résumer nos résultats et à mettre en lumière les éventuelles améliorations et pistes à suivre dans le but d’approfondir la recherche dans le domaine d’objets dirigés par un bain actif.

5.1 Conclusion

Ce travail a étudié le comportement d’une superstructure dans un milieu non confiné et homogène, *i.e.* sans obstacle, grâce à un modèle numérique. Cette superstructure est constituée d’un assemblage de deux types d’entités à part entière : une association de monomères formant une membrane fermée semblable à un polymère, et en son sein, des particules auto-propulsées browniennes. Ces particules parcourent le milieu avec une dynamique particulière qui consiste en un déplacement dirigé ponctué de fluctuations sur leur direction de mouvement. Ce dernier est donc dans un premier temps balistique (quasi-rectiligne) et devient aléatoire pour de plus longs temps. Les contacts entre particules sont caractérisés par des collisions inélastiques et un léger frottement. La membrane quant à elle présente un degré de rigidité variable et est peu élastique.

Le but de ce mémoire a été de déterminer les facteurs responsables de la motilité optimale d’une superstructure. Par motilité optimale, nous entendons sa capacité à se mouvoir à grande vitesse et à explorer son environnement de manière efficace. L’identification de ces paramètres clefs apporte des indications nouvelles dans la manière dont une cellule biologique migre dans les tissus ainsi que dans la mise au point de technologies intelligentes.

L’édification de nos résultats a nécessité qu’une étape essentielle soit réalisée au préalable. Celle-ci est la calibration et la validation, de notre modèle numérique. L’état de l’art présenté dans le [chapitre 2](#) nous a servi à dresser les comportements types d’une particule auto-propulsée seule puis celui d’un bain actif et enfin ceux d’objets tels que des intrus circulaires ou asymétriques, ou encore des filaments, plongés dans ce bain. Grâce à l’étude pas à pas de nos particules actives, nous avons pu valider notre modèle à l’aide des résultats d’études précédentes.

Ce que nous avons obtenu corrobore ces derniers et a permis une caractérisation quantitative de nos PAPS grâce à la détermination du temps de diffusion rotationnelle τ_R , à l’appréciation d’un coefficient de rigidité κ_R pour la membrane ainsi qu’à l’identification de trois régimes correspondant aux trois états de la matière en fonction du nombre de particules dans le milieu (évalué par la densité ρ). Nous avons également retiré une valeur du paramètre T appropriée, *i.e.* le temps que prend une particule auto-propulsée pour atteindre sa vitesse limite depuis le repos, de telle sorte à ce qu’il soit plus faible que le temps entre deux réorientations.

A la suite de cette étape qui a pu confirmer que notre modèle est un outil fiable dans le cadre de l'étude d'un bain actif, la superstructure a été implémentée et placée dans le milieu aux frontières périodiques. Pour une activité du bain fixée ($v_l = 0.04$), nous avons cherché à mettre en évidence le rôle dans la motilité de la superstructure de trois paramètres dont les valeurs sont choisies à chaque exécution du programme : la densité ρ qui quantifie le nombre de particules auto-propulsées que contient la membrane, la rigidité κ_R de la membrane qui paramétrise sa résistance à la déformation, et la capacité des particules à s'aligner ζ , inspirée du modèle de Vicsek [15].

La capacité à s'aligner ζ représente la compétition entre le moment qui incite les particules à s'aligner avec leurs voisines et leur moment de réorientation. Le rôle que détient ζ dans la motilité de la superstructure est patent : son augmentation, même faible, change foncièrement la magnitude de la vitesse de son centre de masse. Cela est d'autant plus apparent quand la densité ρ entre en jeu : la tendance décroissante de la vitesse du centre de masse avec l'augmentation de la densité, pour un alignement ζ nul, est inversée lorsque ζ augmente, et elle devient alors croissante.

Les vitesses, cependant, varient fortement d'une simulation à l'autre et nous nous sommes donc intéressés aux simulations individuelles et avons tenté d'identifier les raisons de cette variabilité. Nous avons établi une corrélation linéaire entre le degré d'alignement effectif (ou polarisation $P_{\vec{r}}$) et la vitesse du centre de masse. Celle-ci quantifie le degré d'alignement qui existe dans la superstructure en un temps donné. Cette polarisation change fortement d'une simulation à l'autre et est l'origine de ce même comportement trouvé dans les vitesses. Derrière ce paramètre est dissimulé le réel moteur de la superstructure : l'existence d'une asymétrie dans la distribution des particules amène un déséquilibre dans les forces qu'elle subit ainsi qu'un changement dans la polarisation, résultant en un mouvement dirigé. Par comparaison, nous avons pu assimiler ce phénomène à celui connu du démon de Maxwell granulaire.

Cette brisure de symétrie ne semble pas liée à la déformation de la membrane et, dans l'autre sens, sa résistance κ_R à la déformation ne montre pas de répercussion sur cette brisure de symétrie. De par nos mesures de la déformation de la membrane au cours du temps et entre simulations, notre étude ne peut pas confirmer que la déformation de la membrane a un rôle affirmé dans sa motilité. Il en va de même pour la comparaison entre les tendances de la vitesse avec la densité pour deux rigidités extrêmes.

Il est en revanche manifeste qu'une brisure de symétrie dans la distribution des particules est indispensable au déclenchement du mouvement. Celui-ci est dirigé et peu marqué par des changements de direction. Cela est directement lié à la tendance des amas à conserver leur position dans la membrane tout au long de la simulation en raison de la dissipation entre collisions et de la friction induite par la pression dans les amas.

5.2 Perspectives

Il a été conclu que l'auto-organisation des particules, et donc leur capacité à s'aligner, est responsable de la motilité de la superstructure. Leur capacité à s'aligner est elle-même influencée par la distribution des particules auto-propulsées à l'intérieur de la membrane, ou autrement dit, par la brisure de symétrie qui en résulte. Il demeure cependant de nombreuses inconnues concernant le phénomène qui conduit à cette brisure. Nous savons qu'il englobe les collisions inélastiques et la friction entre particules mais sa mise en évidence quantitative requiert une étude plus approfondie sur les comportements et phénomènes observés en début de simulation. Cela mènerait alors à une meilleure compréhension des actions qui conduisent aux distributions spécifiques (*i.e.* nombre et taille des amas et asymétrie) des particules dans la membrane.

En outre, comme déjà expliqué dans la section précédente, le rôle de la courbure de la membrane est indéterminé. La distribution des particules en son sein impacte *a priori* directement sa déformation : intuitivement, une plus grande déformation signale une accumulation de particules dans deux amas opposés, tirant sur les extrémités. Les deux amas peuvent être de même ou différente taille (la taille se réfère au nombre de particules constituant l'amas), provoquant ou non la brisure de symétrie susmentionnée. Il serait alors plus approprié de s'intéresser au nombre d'amas et à leur différence de taille dans le but de les corrélés à la vitesse de la superstructure.

Nous pouvons envisager d'étudier le modèle en l'absence de friction et pour une membrane avec des monomères plus petits, afin de limiter sa rugosité. Cette perspective introduit la possibilité d'obtenir un mouvement dirigé nuancé par des changements de direction plus fréquents (la réorientation des particules ne serait plus entravée par la pression au sein de l'amas). Il en résulterait une meilleure exploration du milieu par la superstructure. Bien qu'un modèle sans friction ne se rapporte à aucun équivalent expérimental, la comparaison avec celui de ce travail pourrait apporter des éléments nouveaux concernant les facteurs responsables d'une meilleure motilité de la superstructure.

De surcroît, notre modèle inclut un mouvement dans un espace non contraint. L'étude du comportement du système face à l'ajout d'obstacles dans le milieu pourrait prodiguer des observations et résultats utiles sur la façon dont se réorganisent les particules dans le but de les contourner. Contrairement à Boudet *et al.*, les particules auto-propulsées de notre modèle ne présentent pas de biais dans leur direction, ce qui réduit fortement leur probabilité de glisser le long de la membrane et d'engendrer un changement de direction. Nous pouvons néanmoins supposer que les propriétés des amas seraient modifiées par la collision avec l'obstacle.

Au-delà de la capacité de la superstructure à explorer son milieu et à éventuellement éviter des obstacles, un facteur encore que très peu investigué est l'élasticité de la membrane. Cette élasticité se distingue de la rigidité dans le sens où elle autorise l'apparition d'un faible espace entre les monomères. Au plus la membrane est contrainte localement par les forces qui s'exercent sur elle, au plus cet espace est grand. C'est pourquoi dans notre cas, cette élasticité doit être limitée afin d'empêcher ces dernières de s'échapper de la membrane par les espaces qui se forment. Nous pouvons imaginer qu'une plus grande élasticité mènerait à des déformations particulières, telles que celles mises en évidence par Vutukuri *et al.* Il serait alors intéressant d'étudier l'influence de la survenance et disparition de ces déformations sur la motilité de la superstructure.

Moult autres paramètres peuvent être étudiés et diverses situations modélisées : le chemin vers la compréhension de ces superstructures et bains actifs est encore long et nécessite davantage d'attention si l'on espère en découvrir toutes les facettes. Tout comme l'incarne Thomas Édison, père de l'ampoule électrique, en testant plus de mille matériaux dans l'espoir d'allonger la durée de vie du filament dans les lampes à incandescence, la persévérance est à la base de toute recherche, et celle-ci n'est jamais vraiment achevée. Par ce travail, nous espérons promouvoir la recherche dans le cadre des bains actifs et avoir à la fois attisé et satisfait votre curiosité scientifique à ce sujet.

Annexe A

R_{PAP}	Rayon d'une PAP	0.005
v_l	Vitesse limite des PAPs	{0.03, 0.04}
dt	Pas de temps de la simulation	10^{-5}
T	Temps pour atteindre v_l	$[10^2, 10^5]*dt$
e	Coefficient de restitution	0.2
ρ	Densité de PAPs dans le milieu	[0.01, 0.61]
κ_T	Cohésion de la membrane	{100, 400}
κ_R	Rigidité de la membrane	$[10^{-5}, 10]$
R_{Mon}	Rayon d'un monomère	$\{\frac{7}{10}, 1\}*R_{PAP}$
N	Nombre de monomères	{40, 55}
μ	Coefficient de friction	0.1
l_x, l_y	Dimensions du milieu	{0.2, 0.4}
ζ	Capacité à s'aligner des PAPs	[0,2]

TABLE 1 – Les paramètres du modèle et leurs valeurs. Les valeurs uniques indiquent qu'elles sont constantes pour toutes les simulations, { , } représente l'ensemble des valeurs prises par le paramètre et [,] un intervalle entre deux valeurs minimale et maximale.

Bibliographie

- [1] G. Gompper et al., *The 2020 motile active matter roadmap*, Journal of Physics : Condensed Matter **32**, 193001 (2020).
- [2] M. Yilmaz et G. Christofori, *Mechanisms of motility in metastasizing cells*, Molecular Cancer Research **8**, 629 (2010).
- [3] T. Lämmermann et al., *Rapid leukocyte migration by integrin-independent flowing and squeezing*, Nature **453**, 51 (2008).
- [4] T. D. Ross et al., *Controlling organization and forces in active matter through optically defined boundaries*, Nature **572**, 224 (2019).
- [5] S. Kim, C. Laschi, et B. Trimmer, *Soft robotics : a bioinspired evolution in robotics*, Trends in Biotechnology **31**, 287 (2013).
- [6] J. F. Boudet et al., *From collections of independent, mindless robots to flexible, mobile, and directional superstructures*, Science Robotics (2021).
- [7] H. R. Vutukuri et al., *Active particles induce large shape deformations in giant lipid vesicles*, Nature **586**, 52 (2020).
- [8] M. C. Marchetti et al., *Hydrodynamics of soft active matter*, Reviews of Modern Physics **85**, 1143 (2013).
- [9] C. Dombrowski, L. Cisneros, S. Chatkaew, R. E. Goldstein, et J. O. Kessler, *Self-Concentration and Large-Scale Coherence in Bacterial Dynamics*, Physical Review Letters **93**, 098103 (2004).
- [10] J. Toner, Y. Tu, et S. Ramaswamy, *Hydrodynamics and phases of flocks*, Annals of Physics **318**, 170 (2005).
- [11] S. Ramaswamy et M. Rao, *The physics of active membranes*, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IV - Physics-Astrophysics **2**, 817 (2001).
- [12] Y. Fily et M. C. Marchetti, *Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment*, Physical Review Letters **108**, 235702 (2012).
- [13] J. Tailleur et M. E. Cates, *Statistical mechanics of interacting run-and-tumble bacteria*, Physical Review Letters **100**, 218103 (2008).
- [14] C. W. Reynolds, *Flocks, herds and schools : A distributed behavioral model*, in *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, SIGGRAPH '87, pages 25–34, New York, NY, USA, 1987, Association for Computing Machinery.
- [15] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, et O. Shochet, *Novel type of phase transition in a system of self-driven particles*, Physical Review Letters **75**, 1226 (1995).
- [16] A. Czirók et T. Vicsek, *Collective behavior of interacting self-propelled particles*, Physica A : Statistical Mechanics and its Applications **281**, 17 (2000).
- [17] H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, F. Peruani, et F. Raynaud, *Modeling collective motion : variations on the Vicsek model*, The European Physical Journal B **64**, 451 (2008).

- [18] R. van Dronghen, A. Pal, C. P. Goodrich, et T. Idema, *Collective dynamics of soft active particles*, Physical Review E **91**, 032706 (2015).
- [19] C. Bechinger et al., *Active Particles in Complex and Crowded Environments*, Reviews of Modern Physics **88**, 045006 (2016).
- [20] S. J. Ebbens et J. R. Howse, *In pursuit of propulsion at the nanoscale*, Soft Matter **6**, 726 (2010).
- [21] M. E. Cates, *Diffusive transport without detailed balance in motile bacteria : does microbiology need statistical physics ?*, Reports on Progress in Physics **75**, 042601 (2012).
- [22] E. Lauga et T. R. Powers, *The hydrodynamics of swimming microorganisms*, Reports on Progress in Physics **72**, 096601 (2009).
- [23] J. Taktikos, V. Zaborudayev, et H. Stark, *Modeling a self-propelled autochemotactic walker*, Physical Review E **84**, 041924 (2011).
- [24] P. Romanczuk, M. Bär, W. Ebeling, B. Lindner, et L. Schimansky-Geier, *Active Brownian particles*, The European Physical Journal Special Topics **202**, 1 (2012).
- [25] S. Babel, B. ten Hagen, et H. Löwen, *Swimming path statistics of an active Brownian particle with time-dependent self-propulsion*, Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment **2014**, P02011 (2014).
- [26] M. E. Cates et J. Tailleur, *When are active Brownian particles and run-and-tumble particles equivalent ? Consequences for motility-induced phase separation*, EPL (Europhysics Letters) **101**, 20010 (2013).
- [27] H. C. Berg et L. Turner, *Movement of microorganisms in viscous environments*, Nature **278**, 349 (1979).
- [28] J. R. Howse et al., *Self-motile colloidal particles : from directed propulsion to random walk*, Physical Review Letters **99**, 048102 (2007).
- [29] I. Buttinoni, G. Volpe, F. Kümmel, G. Volpe, et C. Bechinger, *Active Brownian motion tunable by light*, Journal of Physics : Condensed Matter **24**, 284129 (2012).
- [30] J. Palacci, S. Sacanna, A. P. Steinberg, D. J. Pine, et P. M. Chaikin, *Living crystals of light-activated colloidal surfers*, Science (2013).
- [31] A. P. Solon, M. E. Cates, et J. Tailleur, *Active brownian particles and run-and-tumble particles : A comparative study*, The European Physical Journal Special Topics **224**, 1231 (2015).
- [32] W. Yang, V. R. Misko, K. Nelissen, M. Kong, et F. M. Peeters, *Using self-driven microswimmers for particle separation*, Soft Matter **8**, 5175 (2012).
- [33] J. Elgeti et G. Gompper, *Wall accumulation of self-propelled spheres*, EPL (Europhysics Letters) **101**, 48003 (2013).
- [34] A. Kaiser, K. Popowa, H. H. Wensink, et H. Löwen, *Capturing self-propelled particles in a moving microwedge*, Physical Review E **88**, 022311 (2013).
- [35] M. Mijalkov et G. Volpe, *Sorting of chiral microswimmers*, Soft Matter **9**, 6376 (2013).
- [36] G. S. Redner, M. F. Hagan, et A. Baskaran, *Structure and dynamics of a phase-separating active colloidal fluid*, Physical Review Letters **110**, 055701 (2013).
- [37] C. Reichhardt et C. J. O. Reichhardt, *Active matter ratchets with an external drift*, Physical Review E **88**, 062310 (2013).
- [38] A. Costanzo, J. Elgeti, T. Auth, G. Gompper, et M. Ripoll, *Motility-sorting of self-propelled particles in microchannels*, EPL (Europhysics Letters) **107**, 36003 (2014).

- [39] Y. Fily, S. Henkes, et M. C. Marchetti, *Freezing and phase separation of self-propelled disks*, *Soft Matter* **10**, 2132 (2014).
- [40] Z. Wang, H.-Y. Chen, Y.-J. Sheng, et H.-K. Tsao, *Diffusion, sedimentation equilibrium, and harmonic trapping of run-and-tumble nanoswimmers*, *Soft Matter* **10**, 3209 (2014).
- [41] C. A. Weber et al., *Long-range ordering of vibrated polar disks*, *Physical Review Letters* **110**, 208001 (2013).
- [42] K. Seier, *Investigation of dynamic processes of prototypical class A GPCRs by single-molecule microscopy*, Thèse de doctorat, Julius-Maximilians, Wurtzbourg, 2019.
- [43] V. Briane, M. Vimond, et C. Kervrann, *An overview of diffusion models for intracellular dynamics analysis*, *Briefings in Bioinformatics* **21**, 1136 (2020).
- [44] N. Ruthardt, D. C. Lamb, et C. Bräuchle, *Single-particle tracking as a quantitative microscopy-based approach to unravel cell entry mechanisms of viruses and pharmaceutical nanoparticles*, *Molecular Therapy* **19**, 1199 (2011).
- [45] K. Franke et H. Gruler, *Galvanotaxis of human granulocytes : electric field jump studies*, *European Biophysics Journal* **18**, 334 (1990).
- [46] K. Martens, L. Angelani, R. Di Leonardo, et L. Bocquet, *Probability distributions for the run-and-tumble bacterial dynamics : An analogy to the Lorentz model*, *The European Physical Journal E* **35**, 84 (2012).
- [47] B. Davoudi, M. Kohandel, M. Mohammadi, et B. Tanatar, *Hard-core Yukawa model for charge-stabilized colloids*, *Physical Review E* **62**, 6977 (2000).
- [48] N. P. Kryuchkov, F. Smallenburg, A. V. Ivlev, S. O. Yurchenko, et H. Löwen, *Phase diagram of two-dimensional colloids with Yukawa repulsion and dipolar attraction*, *The Journal of Chemical Physics* **150**, 104903 (2019).
- [49] J. Jover, A. J. Haslam, A. Galindo, G. Jackson, et E. A. Müller, *Pseudo hard-sphere potential for use in continuous molecular-dynamics simulation of spherical and chain molecules*, *The Journal of Chemical Physics* **137**, 144505 (2012).
- [50] R. M. Navarro et S. M. Fielding, *Clustering and phase behaviour of attractive active particles with hydrodynamics*, *Soft Matter* **11**, 7525 (2015).
- [51] T. Mikami, H. Kamiya, et M. Horio, *Numerical simulation of cohesive powder behavior in a fluidized bed*, *Chemical Engineering Science* **53**, 1927 (1998).
- [52] X. Ji, X. Wang, Y. Zhang, et D. Zang, *Interfacial viscoelasticity and jamming of colloidal particles at fluid–fluid interfaces : a review*, *Reports on Progress in Physics* **83**, 126601 (2020).
- [53] H. J. Keh, *Diffusiophoresis*, in *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*, edited by D. Li, pages 365–369, Springer US, Boston, MA, 2008.
- [54] I. Theurkauff, C. Cottin-Bizonne, J. Palacci, C. Ybert, et L. Bocquet, *Dynamic clustering in active colloidal suspensions with chemical signaling*, *Physical Review Letters* **108**, 268303 (2012).
- [55] F. Ginot et al., *Nonequilibrium equation of state in suspensions of active colloids*, *Physical Review X* **5**, 011004 (2015).
- [56] O. Pohl et H. Stark, *Dynamic clustering and chemotactic collapse of self-phoretic active particles*, *Physical Review Letters* **112**, 238303 (2014).
- [57] J. Bialké, H. Löwen, et T. Speck, *Microscopic theory for the phase separation of self-propelled repulsive disks*, *EPL (Europhysics Letters)* **103**, 30008 (2013).
- [58] X. Chen, X. Yang, M. Yang, et H. P. Zhang, *Dynamic clustering in suspension of motile bacteria*, *EPL (Europhysics Letters)* **111**, 54002 (2015).

- [59] A. P. Petroff, X.-L. Wu, et A. Libchaber, *Fast-moving bacteria self-organize into active two-dimensional crystals of rotating cells*, Physical Review Letters **114**, 158102 (2015).
- [60] T. S. Majmudar, M. Sperl, S. Luding, et R. P. Behringer, *Jamming transition in granular systems*, Physical Review Letters **98**, 058001 (2007).
- [61] C. Coulais, R. P. Behringer, et O. Dauchot, *How the ideal jamming point illuminates the world of granular media*, Soft Matter **10**, 1519 (2014).
- [62] L. Berthier, H. Jacquin, et F. Zamponi, *Microscopic theory of the jamming transition of harmonic spheres*, Physical Review E **84**, 051103 (2011).
- [63] M. van Hecke, *Jamming of soft particles : geometry, mechanics, scaling and isostaticity*, Journal of Physics : Condensed Matter **22**, 033101 (2010).
- [64] M. Muramatsu et T. Nagatani, *Jamming transition in two-dimensional pedestrian traffic*, Physica A : Statistical Mechanics and its Applications **275**, 281 (2000).
- [65] C. J. Olson Reichhardt et C. Reichhardt, *Fluctuations, jamming, and yielding for a driven probe particle in disordered disk assemblies*, Physical Review E **82**, 051306 (2010).
- [66] S. Henkes, Y. Fily, et M. C. Marchetti, *Active jamming : Self-propelled soft particles at high density*, Physical Review E **84**, 040301 (2011).
- [67] L. Berthier et J. Kurchan, *Non-equilibrium glass transitions in driven and active matter*, Nature Physics **9**, 310 (2013).
- [68] L. Berthier, *Nonequilibrium glassy dynamics of self-propelled hard disks*, Physical Review Letters **112**, 220602 (2014).
- [69] X. Yang, M. L. Manning, et M. C. Marchetti, *Aggregation and segregation of confined active particles*, Soft Matter **10**, 6477 (2014).
- [70] R. Ni, M. A. C. Stuart, et M. Dijkstra, *Pushing the glass transition towards random close packing using self-propelled hard spheres*, Nature Communications **4**, 2704 (2013).
- [71] R. Ni, M. A. C. Stuart, M. Dijkstra, et P. G. Bolhuis, *Crystallizing hard-sphere glasses by doping with active particles*, Soft Matter **10**, 6609 (2014).
- [72] F. Kümmel, P. Shabestari, C. Lozano, G. Volpe, et C. Bechinger, *Formation, compression and surface melting of colloidal clusters by active particles*, Soft Matter **11**, 6187 (2015).
- [73] X.-L. Wu et A. Libchaber, *Particle diffusion in a quasi-two-dimensional bacterial bath*, Physical Review Letters **84**, 3017 (2000).
- [74] C. Valeriani, M. Li, J. Novosel, J. Arlt, et D. Marenduzzo, *Colloids in a bacterial bath : simulations and experiments*, Soft Matter **7**, 5228 (2011).
- [75] G. Miño et al., *Enhanced diffusion due to active swimmers at a solid surface*, Physical Review Letters **106**, 048102 (2011).
- [76] G. Grégoire, H. Chaté, et Y. Tu, *Active and passive particles : Modeling beads in a bacterial bath*, Physical Review E **64**, 011902 (2001).
- [77] J.-L. Thiffeault et S. Childress, *Stirring by swimming bodies*, Physics Letters A **374**, 3487 (2010).
- [78] Z. Lin, J.-L. Thiffeault, et S. Childress, *Stirring by squirmers*, Journal of Fluid Mechanics **669**, 167 (2011).
- [79] D. O. Pushkin et J. M. Yeomans, *Fluid mixing by curved trajectories of microswimmers*, Physical Review Letters **111**, 188101 (2013).

- [80] S. A. Mallory, C. Valeriani, et A. Cacciuto, *Curvature-induced activation of a passive tracer in an active bath*, Physical Review E **90**, 032309 (2014).
- [81] L. Angelani et R. D. Leonardo, *Geometrically biased random walks in bacteria-driven micro-shuttles*, New Journal of Physics **12**, 113017 (2010).
- [82] J.-j. Liao, X.-q. Huang, et B.-q. Ai, *Transport of the moving barrier driven by chiral active particles*, The Journal of Chemical Physics **148**, 094902 (2018).
- [83] Y. Fily, A. Baskaran, et M. F. Hagan, *Dynamics of self-propelled particles under strong confinement*, Soft Matter **10**, 5609 (2014).
- [84] F. Smallenburg et H. Löwen, *Swim pressure on walls with curves and corners*, Physical Review E **92**, 032304 (2015).
- [85] A. Kaiser et al., *Transport powered by bacterial turbulence*, Physical Review Letters **112**, 158101 (2014).
- [86] L. Angelani, C. Maggi, M. L. Bernardini, A. Rizzo, et R. Di Leonardo, *Effective interactions between colloidal particles suspended in a bath of swimming cells*, Physical Review Letters **107**, 138302 (2011).
- [87] L. Angelani, R. Di Leonardo, et G. Ruocco, *Self-starting micromotors in a bacterial bath*, Physical Review Letters **102**, 048104 (2009).
- [88] R. D. Leonardo et al., *Bacterial ratchet motors*, Proceedings of the National Academy of Sciences **107**, 9541 (2010).
- [89] A. Sokolov, M. M. Apodaca, B. A. Grzybowski, et I. S. Aranson, *Swimming bacteria power microscopic gears*, Proceedings of the National Academy of Sciences **107**, 969 (2010).
- [90] L. Angelani et R. Di Leonardo, *Numerical modeling of bacteria propelled micromotors*, Computer Physics Communications **182**, 1970 (2011).
- [91] C. Maggi et al., *Self-assembly of micromachining systems powered by janus micromotors*, Small **12**, 446 (2016).
- [92] A. Kaiser et H. Löwen, *Unusual swelling of a polymer in a bacterial bath*, The Journal of Chemical Physics **141**, 044903 (2014).
- [93] J. Harder, C. Valeriani, et A. Cacciuto, *Activity-induced collapse and reexpansion of rigid polymers*, Physical Review E **90**, 062312 (2014).
- [94] G. Junot, G. Briand, R. Ledesma-Alonso, et O. Dauchot, *Active versus passive hard disks against a membrane : mechanical pressure and instability*, Physical Review Letters **119**, 028002 (2017).
- [95] T. Eisenstecken, G. Gompper, et R. G. Winkler, *Conformational properties of active semiflexible polymers*, Polymers **8**, 304 (2016).
- [96] R. Suzuki et A. R. Bausch, *The emergence and transient behaviour of collective motion in active filament systems*, Nature Communications **8**, 41 (2017).
- [97] A. Ghosh et N. S. Gov, *Dynamics of active semiflexible polymers*, Biophysical Journal **107**, 1065 (2014).
- [98] T. Eisenstecken, G. Gompper, et R. G. Winkler, *Internal dynamics of semiflexible polymers with active noise*, The Journal of Chemical Physics **146**, 154903 (2017).
- [99] M. S. E. Peterson, M. F. Hagan, et A. Baskaran, *Statistical properties of a tangentially driven active filament*, Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment **2020**, 013216 (2020).
- [100] H. Turlier et al., *Equilibrium physics breakdown reveals the active nature of red blood cell flickering*, Nature Physics **12**, 513 (2016).

- [101] D. Needleman et Z. Dogic, *Active matter at the interface between materials science and cell biology*, Nature Reviews Materials **2**, 1 (2017).
- [102] M. J. Falk, V. Alizadehyazdi, H. Jaeger, et A. Murugan, *Learning to control active matter*, Physical Review Research **3**, 033291 (2021).
- [103] K.-D. N. T. Lam, M. Schindler, et O. Dauchot, *Self-propelled hard disks : implicit alignment and transition to collective motion*, New Journal of Physics **17**, 113056 (2015).
- [104] P. A. Cundall et O. D. L. Strack, *A discrete numerical model for granular assemblies*, Géotechnique **29**, 47 (1979).
- [105] K. F. Malone et B. H. Xu, *Determination of contact parameters for discrete element method simulations of granular systems*, Particuology **6**, 521 (2008), Simulation and Modeling of Particulate Systems.
- [106] C.-E. Bréhier, *Introduction to numerical methods for Ordinary Differential Equations*, Lecture - Cours donné à Pristina (Kosovo), en décembre 2016, dans le cadre de l'école de recherche Franco-Kosovarde en Mathématiques, 2016.
- [107] P. Young, *The leapfrog method and other "symplectic" algorithms for integrating Newton's laws of motion*, (2013).
- [108] J. Eggers, *Sand as Maxwell's Demon*, Phys. Rev. Lett. **83**, 5322 (1999).