

Mémoire

Auteur : Compagnie, Arnaud

Promoteur(s) : Opsomer, Eric

Faculté : Faculté des Sciences

Diplôme : Master en sciences physiques

Année académique : 2022-2023

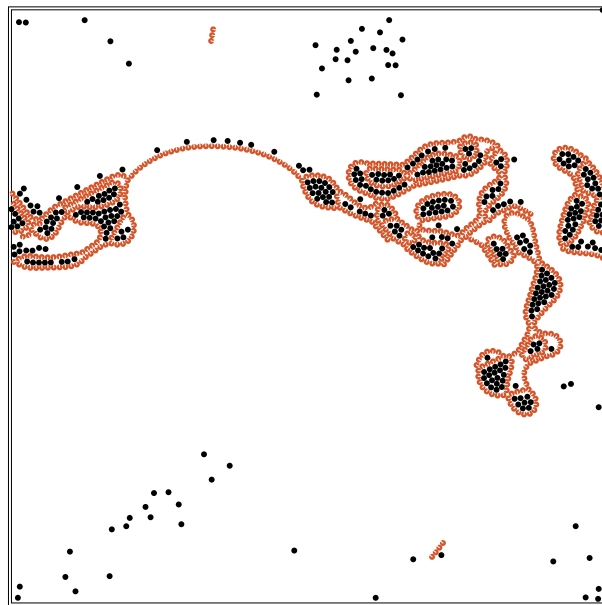
URI/URL : <http://hdl.handle.net/2268.2/17733>

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.

Capture de particules passives avec des particules actives : une étude numérique



Mémoire présenté par ARNAUD COMPAGNIE
en vue de l'obtention du grade de Master en
Sciences Physiques

Promoteur
E. OPSOMER

Comité de lecture
E. BOUSQUET
P. SCHLAGHECK
N. VANDEWALLE

Année académique 2022-2023

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Objectif	2
2	État de l’art	3
2.1	Plancton et plastique	3
2.2	Particules actives artificielles	5
2.3	Simulation numérique de matière molle	7
2.4	Ségrégation provoquée	9
2.5	Ségrégation spontanée	11
2.6	Déplacement contrôlé	13
2.7	Stratégie	15
3	Méthode numérique	16
3.1	Méthode des éléments discrets	16
3.1.1	Résolution d’équations différentielles	16
3.1.2	Répulsion stérique	20
3.1.3	Friction	22
3.1.4	Détermination des contacts	23
3.1.5	Conditions de bords	25
3.1.6	Effets hydrodynamiques	26
3.1.7	Propulsion	26
3.1.8	Influence de la viscosité	31
3.1.9	Outils numériques	31
3.2	Analyse des données	32
3.2.1	Fonction de distribution radiale	32
3.2.2	Indice de ségrégation	36
3.2.3	Moyenne de la taille des clusters	42
4	Résultats	44
4.1	Introduction	44
4.1.1	Paramètres	44
4.1.2	Remarques	45
4.2	Obstacles statiques	45
4.2.1	Implémentation	46
4.2.2	Simulations	46
4.2.3	Discussion	50
4.3	Mélanges de populations et ségrégation	51
4.3.1	Simulations	51
4.3.2	Discussion	61
4.4	Comportements biologiques	62

4.4.1	Implémentation	62
4.4.2	Simulations	62
4.4.3	Discussion	68
4.5	Interactions dipolaires	69
4.5.1	Implémentation	70
4.5.2	Simulations	71
4.5.3	Discussion	76
4.6	Interactions longue portée	77
4.6.1	Implémentation	77
4.6.2	Simulations	79
4.6.3	Discussion	80
4.7	Champ magnétique	81
4.7.1	Simulations	81
4.7.2	Discussion	83
5	Conclusion	86
	Bibliographie	89

Abstract

Ce mémoire traite de l'application de la matière molle hors d'équilibre, particulièrement des particules actives, afin de trier et capturer des particules passives dans un espace visqueux à deux dimensions. Les particules actives, contrairement aux passives dont les mouvements sont uniquement régis par les fluctuations thermiques, peuvent s'autopropulser. Ce domaine de recherche est encourageant pour la purification d'eaux usées ou des applications médicales, pour lesquelles des nanoparticules artificielles sont des outils prometteurs.

Des simulations numériques ont été effectuées sur base de l'implémentation de la méthode des éléments discrets (DEM). Des mélanges de particules passives, représentant des déchets, et de particules actives, représentant des organismes vivants et modélisés comme particules actives browniennes (ABP), ont été étudiés. Ces mélanges ont été utilisés pour analyser le tri de ces populations avec des obstacles statiques, et la séparation de phases induite par motilité (MIPS) pour des concentrations faibles avec alignement biologique. Ces pistes étant peu concluantes, les particules actives ont été modifiées avec des dipôles perpendiculaires à leur propulsion et avec des propriétés répulsives, ce qui a permis la capture améliorée de particules passives, essentiellement grâce à l'application temporaire d'un champ alignant les dipôles.

Les interactions dipolaires et la répulsion sont des interactions prometteuses pour capturer des particules passives au sein de superstructures de particules actives, un phénomène qui permettrait d'extraire par différents moyens ces particules de l'environnement. Les résultats obtenus pourraient être améliorés en faisant des simulations à plus grande échelle.

This thesis investigates the application of non-equilibrium soft matter physics, specifically active particles, to sort and capture passive particles in a two-dimensional viscous environment. Active particles, in contrast to passive particles whose movements are only driven by thermal fluctuations, can self-propel. This field of research is encouraging for waste management and medical applications, in which nanoparticles with special characteristics are promising tools.

Numerical simulations were conducted based on the implementation of the Discrete Element Method (DEM). Mixtures of passive particles, representing waste, and active particles, representing living organisms and modeled as Active Brownian Particles (ABP), were studied. These mixtures were used to analyse the sorting of these populations with static obstacles, and the Motility-Induced Phased Separation (MIPS) at lower concentrations with biological alignment. As these leads were inconclusive, active particles were modified with dipoles perpendicular to their propulsion and repulsive properties, which allowed enhanced capture of passive particles, mainly thanks to external fields temporarily aligning the dipoles.

Dipole interactions and repulsion are found to be promising characteristics to trap passive particles inside superstructures of active particles, a phenomenon that would lead to different ways to extract these particles from the environment. Results could be further improved with large-scale simulations.

Chapitre 1

Introduction

La modernisation de la société durant la deuxième moitié du XX^{ème} siècle aura notamment marqué l'avènement du plastique dans la vie quotidienne en Occident [1]. Malgré son utilité évidente, cette production effrénée d'objets en plastique a un impact écologique important sur le monde. En effet, le plastique est énormément utilisé dans de nombreuses applications jetables, mais est également assez résistant, ce qui empêche une dégradation rapide de ces polymères dans l'environnement. Ainsi, de nombreux morceaux de plastique, de tailles et compositions très variables, se retrouvent dans la nature et ont une influence sur le monde vivant.

De ce fait, les océans sont envahis de morceaux de plastique. Il existe notamment une catégorie, les micro-plastiques, qui a un impact particulier sur la vie marine. Ces morceaux, dont la taille est habituellement de l'ordre du microscopique et arbitrairement définie par des diamètres ne dépassant pas les cinq millimètres, sont particulièrement dangereux pour les écosystèmes marins. Leur taille, proche de celle du plancton, pose problème et peut mener à de grands risques pour les organismes vivants [2]. Ainsi, mettre en place des systèmes permettant de trier ces micro-plastiques sans impacter la vie marine pourrait être une étape primordiale pour limiter l'impact de l'homme sur les écosystèmes marins, même s'il ne faut pas négliger les actions préventives limitant l'arrivée de plastique dans la nature.

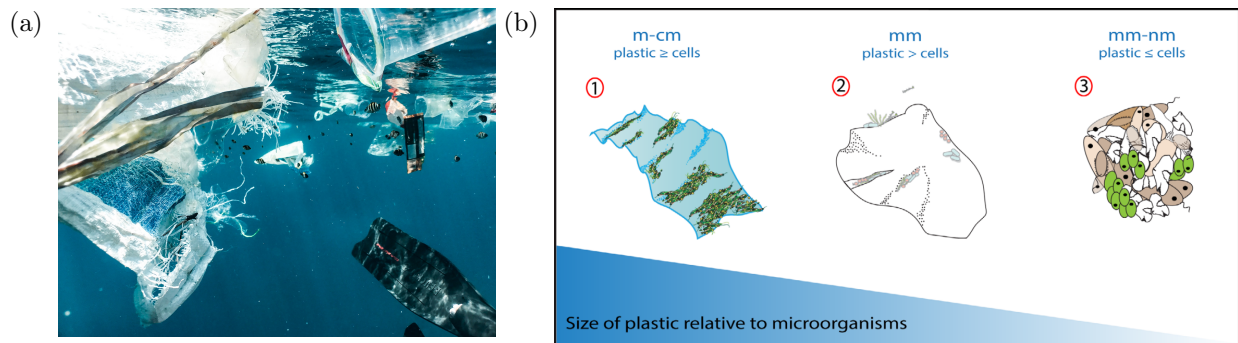


FIGURE 1.1 – (a) Poissons et objets en plastique dans l'océan [3]. (b) Taille relative de contamination de plastique par rapport à la taille des organismes marins [4].

L'épuration des océans et autres eaux polluées par l'activité humaine est donc la motivation centrale de ce mémoire. Cependant, ce même type de système pourrait se voir appliqué dans d'autres domaines, comme dans certaines industries ou dans des laboratoires de recherche. Par exemple, il pourrait être nécessaire d'avoir une solution aqueuse la moins contaminée possible dans le but de réaliser des expériences. Les systèmes présentés pourraient aider à effectuer la purification de ces solutions via l'extraction des particules non-désirées.

Le domaine de recherche de la matière molle en physique s'avère particulièrement prometteur pour explorer cette problématique. En effet, étudier le comportement global d'un nombre important de particules dans un milieu aqueux est un des sujets d'étude de la matière molle. Particulièrement, l'étude de particules hors équilibre, simulant le vivant ou des systèmes capables d'utiliser de l'énergie pour se déplacer, est un sujet très actuel, appelé matière active.

Trouver des configurations spécifiques permettant la ségrégation du plastique dans un milieu aqueux en présence de plancton à l'aide de simulations numériques donnerait ainsi des pistes afin de réaliser un système concret permettant ce tri.

Pour la réalisation de ce mémoire, la lecture de nombreux articles scientifiques liés au sujet, ainsi que de nombreuses discussions avec le promoteur Dr. E. Opsomer, auront permis l'évolution progressive du code C++ simulant le comportement des particules, ainsi que la modification et l'ajout de nombreux paramètres qui pourraient permettre la séparation des particules passives de manière contrôlée.

Dans un premier temps, la présentation d'un état de l'art permettra une bonne compréhension des concepts fondamentaux utilisés par la suite. Grâce à cette présentation plus complète des concepts utilisés, l'explication des objectifs de manière plus précise permettra d'introduire les démarches réalisées. Une explication détaillée du fonctionnement des simulations effectuées et la présentation des résultats obtenus constitueront la majorité du mémoire. Sur base de ces résultats, un résumé du travail effectué permettra d'obtenir une vision d'ensemble. Finalement, différentes perspectives seront présentées afin d'approfondir le sujet présenté.

1.1 Objectif

L'objectif de ce mémoire est de réaliser des simulations numériques pour étudier le comportement de mélanges de particules. D'une part, des particules actives, représentant du plancton, et d'autre part, des particules passives, représentant du plastique, vont ainsi interagir de manière particulière. Il peut être intéressant d'essayer de profiter de ce comportement pour établir une méthode permettant d'extraire les particules passives directement à l'échelle microscopique.

Chapitre 2

État de l'art

Sachant que la ségrégation de planctons et de micro-plastiques dans les océans et l'extraction du plastique pour purifier l'eau sont les objectifs de ce mémoire, différentes thématiques sont à étudier afin de réaliser une étude complète du sujet.

2.1 Plancton et plastique

Avant d'effectuer une quelconque simulation, il est important de comprendre les bases des comportements du monde marin vivant et du plastique dans un milieu aqueux. Bien que relativement succincte par rapport à l'ensemble du domaine car s'éloignant du cœur du travail réalisé, cette section est fondamentale pour s'assurer de la pertinence des raisonnements effectués.

De manière simplifiée, la différence fondamentale entre les particules représentant le plancton et le plastique est la manière dont ils se déplacent, caractéristique directement liée aux observations. Les micro-plastiques retrouvés dans les eaux varient grandement en type et en taille [5] (figure 2.1a). Néanmoins, ce sont toujours des particules dites *passives*, qui n'ont pas de système interne de déplacement. Ainsi, leur mouvement est régi par l'agitation thermique brownienne, ainsi que par leur environnement, comme la présence de particules avoisinantes ou les phénomènes hydrodynamiques.

Cependant, les êtres vivants possèdent généralement un moyen de se déplacer par eux-mêmes. Ainsi, en plus de l'activité brownienne et des phénomènes hydrodynamiques, ces particules peuvent se mouvoir d'elles-mêmes par leur propulsion interne, qui va définir l'activité des ces particules, ainsi qualifiées d'*actives* [6] (figure 2.1b).

De nombreux facteurs influencent l'activité du plancton, en fonction de l'espèce considérée. En effet, le plancton varie grandement en taille et en forme, mais également selon le moyen de propulsion [8]. Un cas particulier est la propulsion rectiligne, par exemple par une flagelle, du plancton. Néanmoins, ce déplacement requiert une symétrie importante selon l'axe de propulsion, ce qui le rend peu probable pour une grande partie des êtres vivants microscopiques étudiés. Il est ainsi plus fréquent d'observer une certaine chiralité aux trajec-

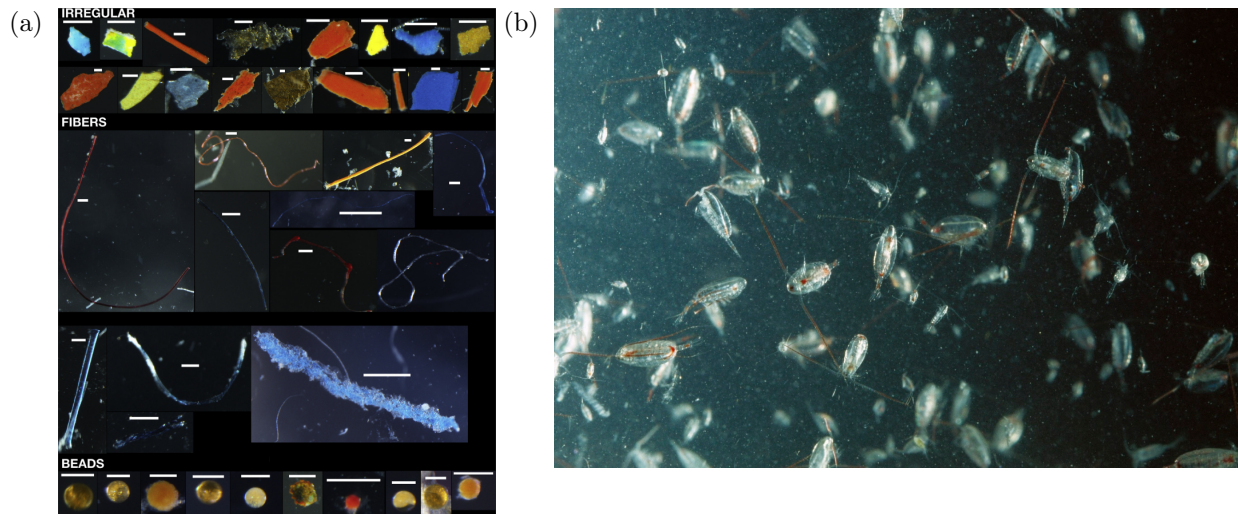


FIGURE 2.1 – (a) Exemples de morceaux de microplastiques récoltés dans l’océan. Les lignes blanches donnent une échelle de 100 μm [2]. (b) Groupe de copépodes arctiques [7].

toires observées, liée à la chiralité de la forme du plancton, que ce soit par des trajectoires circulaires confinées dans un espace en deux dimensions, ou par des trajectoires hélicoïdales en trois dimensions. La forme du plancton a aussi un impact important sur la trajectoire, qui peut rendre les trajectoires plus complexes que celles présentées, qui ne représentent finalement que des cas particuliers d’une théorie plus générale.

De plus, de par sa nature d’être vivant, le plancton possède une certaine intelligence qui lui permet de réagir de manière spécifique à certains stimuli. Ainsi, l’environnement du plancton a un impact important sur la direction de ses déplacements. Le plancton est notamment sensible à la lumière, et est donc capable de se déplacer afin de maximiser ou minimiser la quantité de lumière à laquelle il est sujet [9]. On parle alors de phototaxie, qui est entre autres responsable de migrations verticales des populations au cours d’une journée. Le plancton est également sensible au milieu chimique, ce qui lui permet d’aller en priorité vers les nutriments dont il aurait besoin [10]. On parle alors de chimotaxie, qui est responsable de mouvements dans l’ensemble de l’espace en fonction des besoins du plancton et de la concentration en différentes espèces chimiques.

L’environnement inerte des êtres vivants n’est pas le seul facteur qui puisse altérer ses mouvements. En effet, il est commun pour de nombreuses espèces animales de faire varier la direction et la vitesse de leurs déplacements en fonction des autres êtres vivants qui les entourent. Des êtres vivants vont ainsi avoir tendance à pourchasser des proies et éviter des prédateurs, mais ils peuvent également aligner leur direction de déplacement en fonction de leurs congénères se trouvant autour d’eux [11-13].

2.2 Particules actives artificielles

La matière active ne se limite pas aux êtres vivants. Il est possible de fabriquer des objets se propulsant eux-mêmes sans être vivants. Même s'il existe un grand nombre de mécanismes différents et de tailles différentes pour ce type d'objets, la discussion effectuée par la suite se concentrera sur des particules de taille micrométrique et pouvant se trouver dans des milieux aqueux, vu le contexte dans lequel ces particules vont être étudiées.

Ces particules actives artificielles peuvent ainsi être créées dans de nombreuses formes. La forme donnée à ces particules va avoir un impact sur leur propulsion, ce choix doit donc être effectué en fonction des besoins pour lesquels la particule a été conçue. Le mode de propulsion choisi peut également impliquer des restrictions sur la forme, notamment au niveau des éventuelles symétries [8]. Même si beaucoup de possibilités existent, deux formes sont particulièrement utilisées : des particules sphériques ou des particules cylindriques. Des formes plus exotiques permettent des mouvements plus complexes, notamment en induisant des mouvements chiraux aux particules.

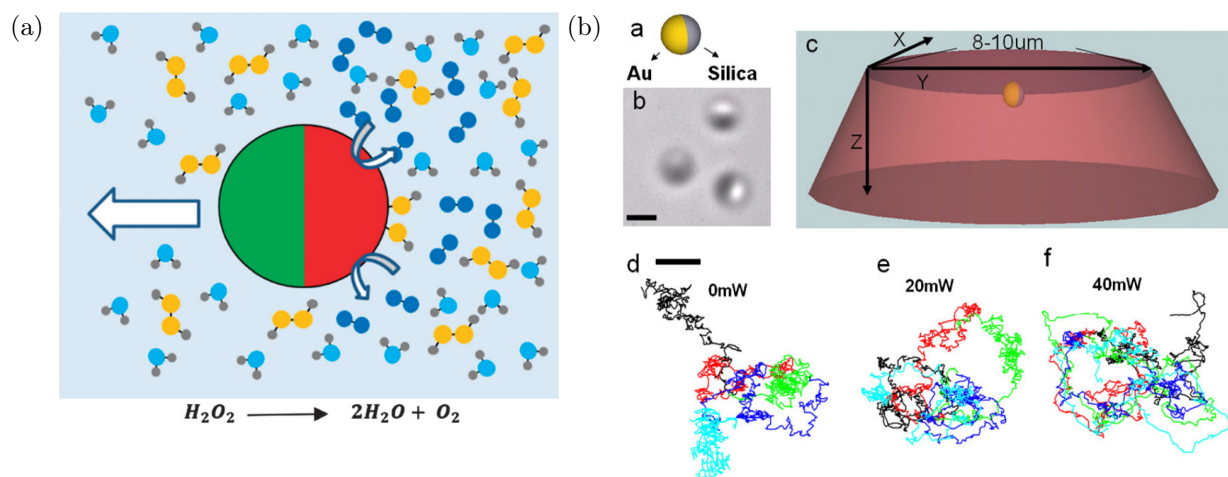


FIGURE 2.2 – (a) Schéma illustrant la propulsion d'une particule Janus dont la partie rouge sert de catalyseur à la réaction chimique [14]. (b) (a,b,c) Configuration expérimentale de particules Janus activées par irradiation. (d,e,f) Trajectoires dans le plan XY d'une particule Janus en fonction de l'intensité de l'irradiation, le couleure change toutes les 2 secondes. La ligne noire représente 1 μm [15].

De nombreux modes de propulsion existent pour rendre ces particules artificielles actives. Une technique commune afin de générer de l'autopropulsion est de briser la symétrie chimique de la particule. Ainsi, en ayant une partie de la particule qui réagit à un stimulus externe sans que cela ne soit symétrique, un mouvement peut être observé. C'est sur cette base que sont développées les particules Janus, dont le nom fait référence au dieu romain à deux visages [16].

Des effets particulièrement importants peuvent par exemple être observés pour des particules dont le revêtement d'une face est fait de platine dans une solution de peroxyde d'hy-

drogène H_2O_2 . En effet, le platine va catalyser la réaction chimique permettant de produire de l'eau et du dioxygène à partir de l' H_2O_2 . Les bulles d'eau et de dioxygène vont alors être projetées et la particule va se déplacer (figure 2.2a). Dans certains cas, cette propulsion peut également être contrôlée par un facteur externe. Un exemple est la propulsion de particules composées de polymères, mais dont une partie est formée d'hématite [17]. L'effet catalyseur de l'hématite ne se produit que sous rayonnement ultra-violet, ce qui permet effectivement de contrôler l'activité de ces particules.

Néanmoins, ce mécanisme de propulsion requiert la présence d' H_2O_2 , et la vitesse obtenue dépend de la concentration de cette molécule. Il ne peut donc pas être utilisé dans toutes les applications, comme dans un océan. D'autres réactions chimiques peuvent toutefois être utilisées pour effectuer l'autopropulsion de particules actives artificielles. Par exemple, la création de particules de magnésium partiellement recouvertes d'une double couche de revêtement nickel-or permet une propulsion dans l'eau sans ajout de carburant externe [18].

D'autres moyens de propulsion ont également été inventés, notamment la propulsion par irradiation. Un des avantages de ces autres modes de propulsion est leur faculté à fonctionner sans avoir besoin d' H_2O_2 , ce qui est particulièrement important pour fonctionner dans toute solution aqueuse, et qui permet également de contrôler plus facilement l'activité. Cela fonctionne par exemple pour des particules composées de silice avec un revêtement d'or sur une des faces [15] (figure 2.2b). Si ces particules sont irradiées par un laser émettant dans l'infrarouge, la partie en or va plus absorber le rayonnement, ce qui génère un gradient de température dans chaque particule, ainsi que dans le milieu aqueux autour des particules. Ainsi, par thermophorèse, une force s'applique sur les particules si elles sont assez petites, ce qui leur permet de se déplacer [19].

Différentes propriétés peuvent également être ajoutées aux particules fabriquées, ce qui permet diverses interactions entre particules. Il est notamment intéressant d'ajouter des propriétés électriques ou magnétiques aux particules. Certaines particules, en fonction de leur mode de propulsion, possèdent déjà des propriétés magnétiques. En effet, les revêtements utilisés pour permettre aux particules de se déplacer peuvent être ferromagnétiques, paramagnétiques ou superparamagnétiques. Des caractéristiques électriques peuvent également être incorporées aux particules, ce qui complexifie les interactions entre elles et induit des réactions spécifiques à des champs électriques [16].

Des particules artificielles possèdent de nombreux avantages par rapport aux particules vivantes, dans le cadre de leur utilisation contrôlée dans les systèmes. En effet, même si le plancton peut avoir des comportements complexes avantageux et ne requiert pas de techniques de production complexes pour être fabriqué, il requiert tout de même des conditions particulières pour que des colonies se développent et ne meurent pas. Une fois des colonies développées, il n'est pas non plus possible de les libérer dans n'importe quel milieu, puisque ces planctons pourraient ne pas se comporter de la manière escomptée ou mourir rapidement.

D'un autre côté, même si la fabrication de particules actives artificielles peut s'avérer complexe, celles-ci ne requièrent pas la même attention pour continuer de fonctionner correctement, puisqu'elles sont censées être imaginées pour fonctionner dans l'environnement dans lequel elles vont être placées. Il est aussi possible d'ajouter de nombreuses propriétés

aux particules, notamment magnétiques ou électriques, ou de contrôler leur forme et leur propulsion. De manière générale, c'est leur aspect modulaire qui rend leur utilisation propice à de nombreuses applications dans le monde microscopique.

2.3 Simulation numérique de matière molle

Afin d'effectuer les différentes simulations de ce mémoire, une implémentation numérique de la méthode des éléments discrets (DEM) en deux dimensions a été utilisée pour simuler des particules s'apparentant à du plastique, du plancton ou des particules artificielles. Cette section a pour objectif de traiter certaines considérations numériques à prendre en compte dans la transposition des systèmes physiques à étudier.

Les contacts entre particules peuvent être modélisés par différents modèles. Bien que n'étant pas la représentation la plus rigoureuse, on peut considérer que des particules qui se superposent vont se repousser selon une loi de Hooke, comme si un ressort était à l'origine de ce phénomène [20]. Il est également possible d'intégrer les contacts selon le modèle de Hertz, qui considère les déformations de particules, mais celui-ci ne sera pas utilisé en raison de sa complexité.

Outre les contacts entre particules, qui sont à prendre en compte peu importe la simulation, deux paramètres sont particulièrement importants dans les simulations réalisées : la propulsion interne aux particules et les différentes forces que subissent les particules.

La propulsion interne des particules étudiées peut venir de deux contributions différentes : l'activité brownienne liée à la température et la propulsion liée au caractère actif de la particule. Seul le mouvement brownien est à considérer pour les particules représentant le plastique, alors que les deux phénomènes sont à considérer pour les particules représentant le plancton et les particules actives artificielles.

Deux modèles permettent notamment d'intégrer ces déplacements : le *Run-and-Tumble* et l'*Active Brownian Motion* (figure 2.3). Ces deux modèles, bien que démontrés équivalents à certaines échelles, ne sont pas implémentés de la même manière [21].

D'une part, une particule dont le mouvement interne est implémenté selon le Run-and-Tumble va avoir tendance à effectuer une succession de mouvements rectilignes, en se réorientant entre chaque période où il avance de manière rectiligne, ce qui permet à la particule d'explorer l'ensemble de l'espace en deux dimensions choisi. La fréquence de réorientation ainsi que l'intensité de la propulsion durant les phases de déplacement vont définir l'aspect actif ou passif de la particule [22].

D'autre part, une particule dont le mouvement interne est implémenté selon l'Active Brownian Motion va avancer selon une direction relative à l'orientation de la particule, mais cette direction est influencée par un bruit rajouté sur l'orientation de la particule et sur ses déplacements. Le rapport de ces deux contributions permet d'évaluer le caractère actif de la particule, et est exprimé par le nombre adimensionnel de Péclet [8].

L'interaction la plus évidente entre une particule et son environnement, en dehors des contacts directs avec d'autres particules, est l'influence du milieu aqueux. En première ap-

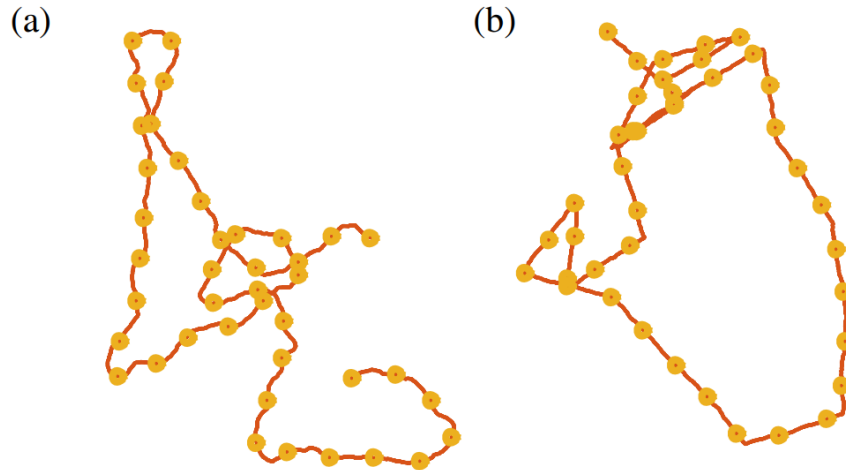


FIGURE 2.3 – Trajectoire d’une particule modélisée par (a) Active Brownian Motion et (b) Run-and-Tumble [8].

proximation, des particules qui se déplacent dans un fluide vont donc être soumises à la force de frottement de Stokes. Cependant, si plus d’une particule en mouvement se trouvent dans ce fluide, ces mouvements auront un impact sur le fluide, et donc sur l’interaction entre le fluide et d’autres particules. Une approximation en multipôles, semblable à celle communément effectuée en électromagnétisme, peut alors être effectuée. Dans le cas présent, la charge des particules est un vecteur qui dépend des caractéristiques de la particule [23]. Celles-ci peuvent donc être des *Stockslets*, des *pushers* ou des *pullers*, qui vont influencer différemment le fluide.

Un modèle répandu pour simuler l’alignement de particules actives en déplacement est le modèle de Vicsek [11]. Celui-ci a été conçu afin de répondre aux observations effectuées dans la nature, et rajoute une règle imposée à la vitesse des particules. L’orientation de la vitesse de chaque particule est égale à la moyenne des orientations des vitesses des particules autour d’elle dans un rayon défini, à un bruit près (figure 2.4). Ce modèle, bien qu’intéressant, reste simpliste. Il peut également être modifié et affiné en fonction de son utilisation, notamment avec la cohésion entre les particules, en brisant la symétrie ou en transformant les points que représentent les particules en objets circulaires ou sphériques [24].

Même si cela ne sera pas effectué dans le cadre de ce mémoire, le chimotaxie [25] et la phototaxie [26] peuvent également être incorporées dans les simulations, en incluant des potentiels symbolisant la présence d’éléments chimiques ou de lumière. Ajouter une interaction spécifique entre les particules et ces potentiels construits est une manière de simuler la présence de lumière ou d’éléments chimiques.

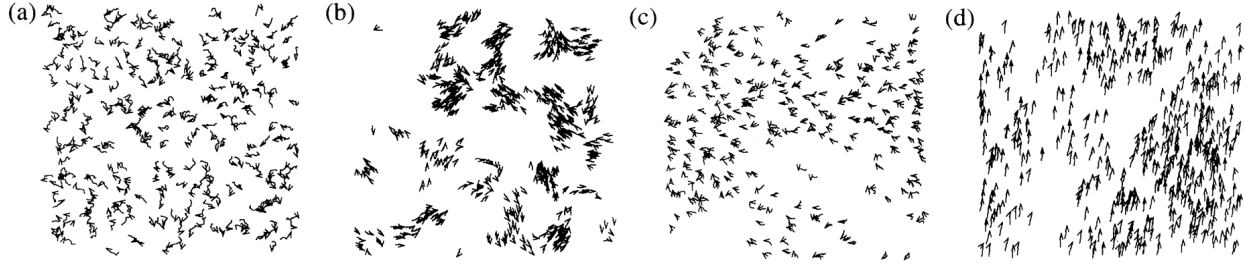


FIGURE 2.4 – Représentation de la position au cours des 20 derniers pas de temps et de la vitesse de 300 particules interagissant selon le modèle de Vicsek. (a) Positions initiales. (b) Avec densité et bruit faibles, des groupes se déplacent de manière cohérente. (c) Avec densité et bruits forts, les particules se déplacent aléatoirement avec un peu de corrélation. (d) Avec densité forte et bruit faible, le mouvement global devient ordonné. [11]

2.4 Ségrégation provoquée

De nombreuses configurations spatiales peuvent favoriser la formation de grappes ou la ségrégation de différentes populations de particules. Ces mécanismes dépendent grandement des caractéristiques des particules. Cette section présente donc une liste non-exhaustive de différentes techniques qui ont pour objectif de forcer le déplacement d'un type de particule de manière contrôlée dans un espace à deux dimensions.

Par la simple présence de deux obstacles rectilignes formant un canal, des particules actives déjà présentes dans le canal vont avoir tendance à s'agréger le long de ces obstacles. Cet effet est observable pour des particules en forme de tige [27] ou en forme de cercle [28], et l'effet est d'autant plus important que l'activité des particules est élevée.

Cependant, ces mêmes particules actives peuvent avoir tendance à ne pas rentrer dans le canal si celles-ci ne sont pas entre les deux parois. Un effet équivalent à l'effet Casimir est observé avec ce type de géométrie pour un milieu dans lequel se trouve des particules actives [29]. En plus de la force exercée sur les deux parois, la probabilité que les particules passent à l'intérieur de ces parois peut être grandement réduite si les caractéristiques géométriques des parois sont correctement ajustées par rapport aux caractéristiques de la propulsion des particules actives.

Des particules actives rapides vont également avoir tendance à s'accumuler sur des obstacles asymétriques [30]. En effet, dans un mélange de particules actives relativement rapides et lentes, la probabilité de présence proche des parois d'un demi-disque des particules rapides est nettement supérieure à celle des particules lentes.

Il est aussi possible de piéger des particules actives en forme de tige entre deux parois de longueur finie formant un angle [31]. Le piège peut être capable de contenir l'ensemble des particules du système si l'angle formé par les deux parois est correctement ajusté par rapport à la concentration de particules actives et la taille des parois.

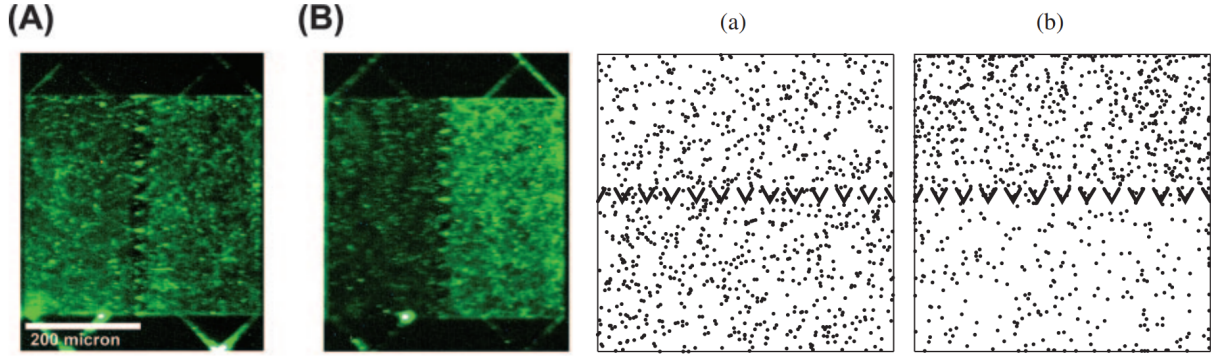


FIGURE 2.5 – Concentration de particules actives d’un côté d’un mur de d’entonnoirs. (A),(a) Positions initiales. (B),(b) Après un temps suffisant pour que l’effet soit observable. (A),(B) Expériences [32] et (a),(b) simulations [33].

Ce type de configuration géométrique peut également être utilisé pour forcer un flux de particules actives dans une direction. Placer successivement plusieurs paires de parois va favoriser le flux de particules actives vers une zone en fonction de l’orientation des parois (figure 2.5). L’effet dépend des caractéristiques géométriques des parois par rapport à l’ensemble des caractéristiques des particules. L’activité des particules a également une influence sur l’efficacité, puisque plus les particules sont actives, plus l’effet sera prononcé. Ce phénomène a été démontré via des simulations numériques [33], mais également observé avec des bactéries de motilités différentes [32].

Des particules circulaires toutes soumises à une force dans une direction définie, en plus de leur propulsion interne, peuvent également être piégées par un réseau carré de particules fixes [34]. Les particules actives peuvent alors elles-mêmes former des cristaux à l’intérieur du réseau carré dans certaines bonnes conditions, liées aux caractéristiques du réseau carré et des particules (figure 2.6).

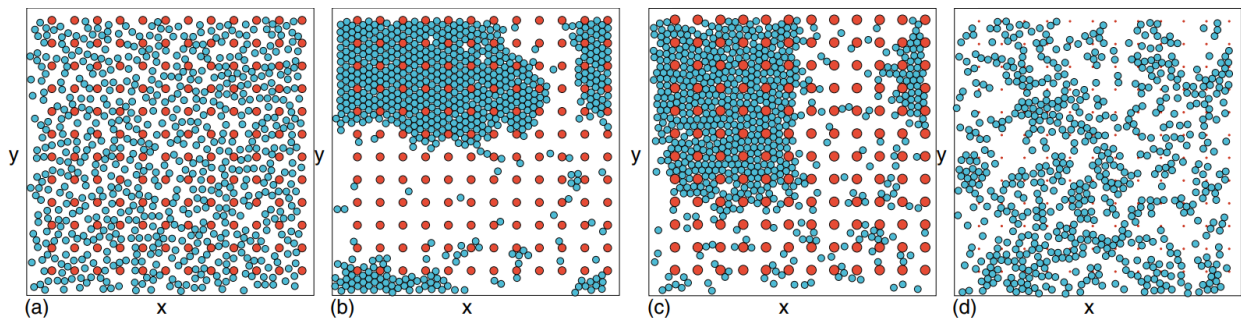


FIGURE 2.6 – Cristallisation de particules actives soumises à une force constante et dans un substrat périodique en fonction de l’activité et de la taille des particules composant le substrat. (a) Activité faible. (b),(c),(d) Activité forte. [34]

Finalement, la chiralité des mouvements des particules peut également être utilisée afin

de les piéger [35]. En effet, si les mouvements de la particule ont tendance à être circulaires, il est possible de piéger ces particules en fonction du sens dans lequel celles-ci tournent. Un ensemble de parois placées en cercle et favorisant le passage de particules tournant dans un seul sens peut alors être utilisé.

2.5 Ségrégation spontanée

Puisque différentes populations de particules aux propriétés diverses vont interagir, il est important de se rendre compte de l'influence de ces paramètres sur l'organisation dans l'espace des particules qui va en découler.

Les concentrations de deux populations différentes, une active et une passive, sont des facteurs importants pour une ségrégation spontanée de ces deux populations [36]. En effet, plus la concentration en particules actives est importante, plus celles-ci vont rassembler les particules passives. Ces dernières vont progressivement se rapprocher, puis former des grappes organisées approximativement selon un réseau hexagonal (figure 2.7). Ce phénomène se produit également pour une concentration constante de particules actives et une augmentation progressive de la concentration en particules passives. L'alignement de la vitesse des particules, notamment implémenté par le modèle de Vicsek, permet aussi d'observer une accélération du phénomène de ségrégation [37], et facilite également cette ségrégation [13].

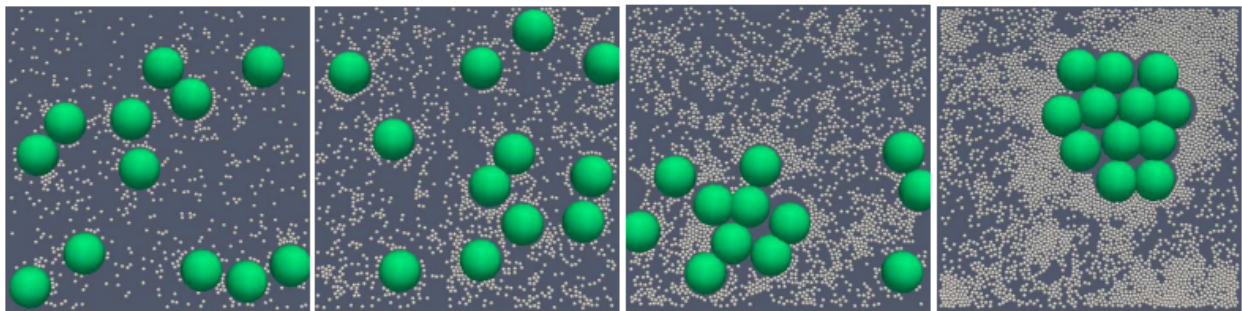


FIGURE 2.7 – Observation de la séparation de phases entre des petites particules actives (en gris) et des grosses particules passives (en vert) en fonction de la concentration de particules actives. De gauche à droite, ϕ_a vaut 0.1, 0.2, 0.3 et 0.5 [36].

En attendant assez longtemps, ce phénomène de séparation de phase peut être très marqué. Si les perturbations browniennes ne sont pas trop importantes, des phases liquides et gazeuses vont se former. Les phases liquides sont majoritairement formées par des particules passives, entourées par des particules actives qui exercent une pression sur cette phase liquide aux interfaces entre phases [38].

La taille des particules a également un impact sur une éventuelle séparation de phases des populations [36]. Des grosses particules passives vont avoir tendance à être rassemblées

par des particules actives plus petites pour former des grappes. Plus la différence de taille entre les deux populations est grande, plus ce rassemblement est important.

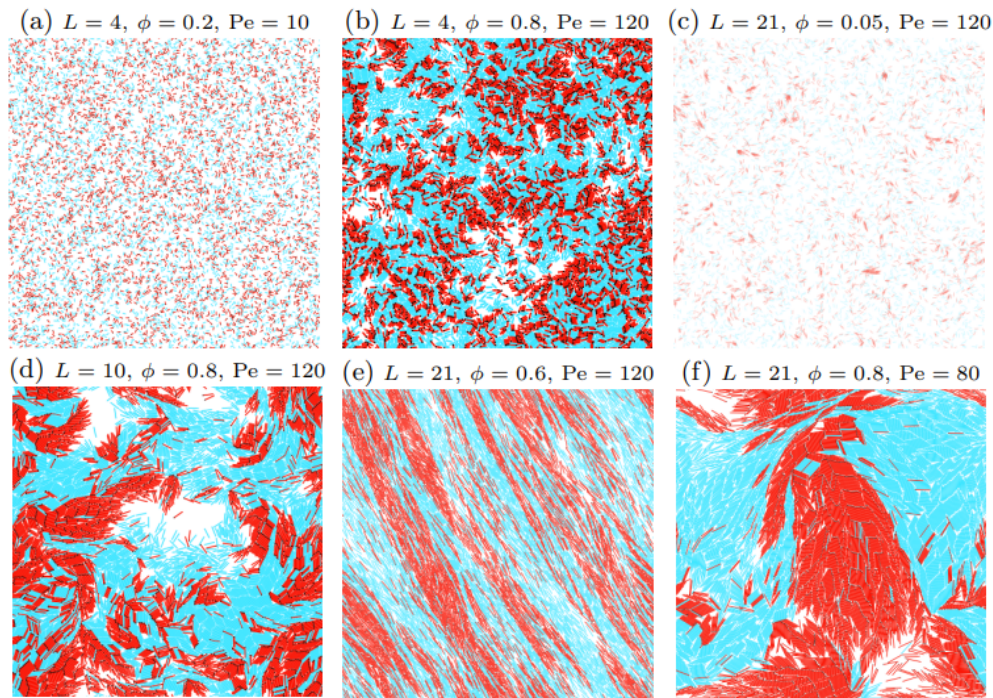


FIGURE 2.8 – Observation de la ségrégation d’un mélange de tiges actives (en rouge) et passives (en bleu) en fonction de rapport de taille entre les deux dimensions des tiges L , de la concentration de particules ϕ et du nombre de Péclet Pe . [39]

Le mélange de particules d’activités différentes et en forme de tige va également permettre la ségrégation des différentes populations de particules [39]. Uniquement avec des phénomènes d’autopropulsion et de contacts, des populations d’activité différente vont avoir tendance à se regrouper sous différentes formes, comme des grappes ou encore des essaims temporaires de particules qui se forment et se déforment (figure 2.8). La forme des particules est ainsi très importante pour la ségrégation spontanée, puisque ces phénomènes ne se produisent pas de la même manière si les particules sont des sphères par exemple.

Différentes phases peuvent également se former si deux populations de particules aux mouvements chiraux opposés interagissent par répulsion stérique et par alignement polaire des vitesses entre particules voisines. La compétition entre les mouvements circulaires et l’alignement va mener au mélange ou à la séparation des phases, en fonction de la grandeur respective de ces phénomènes [40].

La forme des particules, et donc la manière dont les contacts sont considérés, a également une grande influence sur les comportements globaux des phases de particules. Différents mélanges de deux populations de polygones peuvent ainsi provoquer certains régimes de séparation de phases particuliers : la séparation de microphases (des phases constituées des deux types de polygones), la fluidification (des phases constituées des deux types de

polygones, mais qui ne se cristallisent pas et s’assimilent à des fluides), ou un état stable triphasé (formation simultanée de phases solides et liquides sans préférence particulière) [41].

L’ensemble des phénomènes présentés dans cette section sont inclus dans un terme global, nommé MIPS (Motility-Induced Phase Separation). En effet, les différents cas de ségrégation spontanée exposés sont directement induits par l’activité d’une ou de plusieurs populations. Ce domaine est extrêmement vaste et un nombre important de paramètres permettent de faire varier l’expression de ce phénomène de séparation de phase.

2.6 Déplacement contrôlé

De simples particules actives vont avoir tendance à créer des phases plus denses, voire des cristaux en fonction des différents paramètres déjà explorés. Cependant, cela ne peut pas être qualifié de réel auto-assemblage, puisque la formation de phases spécifiques n’est jamais que transitoire. Les assemblages ne sont généralement présents que pendant des durées trop faibles pour présenter une utilité concrète dans le contrôle efficace des déplacements de certaines populations. Néanmoins, l’ajout d’autres propriétés permet d’effectuer des auto-assemblages. De fait, des particules actives vont avoir tendance à parcourir tout l’espace, et donc à accéder à des états métastables d’assemblages qui ne seraient pas atteignables sinon. C’est donc la compétition entre l’activité et d’autres propriétés qui permet l’auto-assemblage.

Cet auto-assemblage se produit notamment pour des particules pour lesquelles on considère une interaction de type Lennard-Jones, et donc répulsive à très courte portée, attractive à courte portée et progressivement nulle à longue portée [42]. Cela va mener à la formation de gels, de fluides actifs ou de phases séparées. Cette interaction mène tout de même à des assemblages limités, dûs au caractère isotropique des forces en présence. Il est possible de créer des chaînes en ajoutant des charges opposées à deux extrémités de la particule active, ce qui change le comportement des assemblages. En effet, les structures formées peuvent être stabilisées ou déstabilisées en fonction de la vitesse des particules, mais la transition de comportement peut aussi ne pas s’effectuer si la transition de vitesse est assez lente.

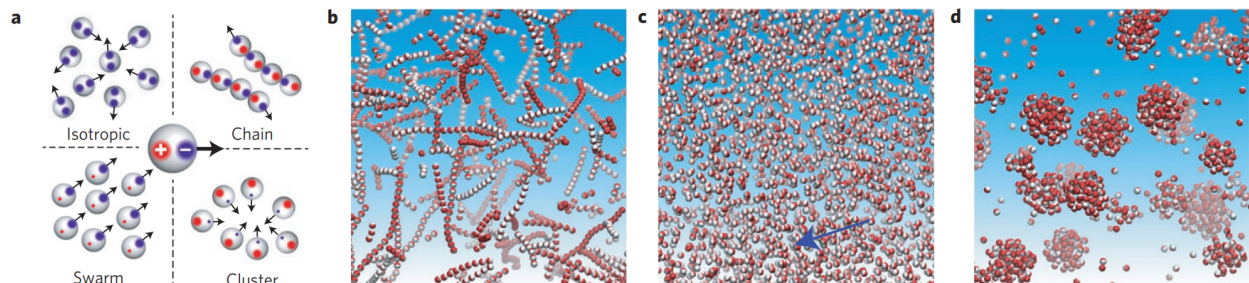


FIGURE 2.9 – Différents assemblages en fonction de charges positionnées aux hémisphères des particules. (a) Différents positionnements des charges, la couleur indiquant le signe et la taille indiquant la valeur proportionnelle de la charge. (b) Formation de chaînes (Chain). (c) Formation de nuées (Swarm). (d) Formation de grappes (Cluster). [43]

Les comportements peuvent encore être complexifiés, en remplaçant par exemple le potentiel de Lennard-Jones par des charges aux hémisphères des particules actives [43] (figure 2.9). Le signe des charges ainsi que le rapport d'intensité entre celles-ci vont avoir une influence directe sur la manière dont les particules actives vont s'agencer. Par exemple, si les charges sont opposées et de même grandeur, des chaînes vont se former. Si la charge du côté du sens de la propulsion est plus importante, des nuées vont se former. Et si c'est la charge du côté de l'arrière de la particule par rapport au sens de propulsion qui est la plus importante, des grappes de particules vont alors se former. Il est donc possible de réaliser différents types de suspensions colloïdales avec de légères variations dans les interactions entre particules.

De plus, la forme des particules a également un impact sur la manière dont l'auto-assemblage va se produire [44]. Briser la symétrie des particules va permettre à des populations spécifiques de réagir différemment entre elles et avec les autres types de particules, ce qui peut induire des phases drastiquement différentes, comme la formation simultanée de gouttes et de colonies se déplaçant dans une direction particulière.

L'autopropulsion est une caractéristique centrale pour les phénomènes présentés jusqu'ici et pour la formation de colloïdes. La modification de cette caractéristique permet donc de contrôler les phénomènes présentés, comme la séparation de phases et la formation de colloïdes. Il est par exemple possible de modifier la direction du déplacement en fonction de la nature du rayonnement qui irradie les particules [45]. Cela permet de former et déformer des grappes de particules à volonté, et également de changer les caractéristiques hydrodynamiques des particules actives, pour ainsi modifier leur interaction avec les particules passives.

Il est également possible de contrôler le déplacement de particules passives grâce à différentes interactions avec les particules actives, qui vont agir comme transporteurs. Ce type de dispositif requiert cependant une attention particulière par rapport à la réaction qui s'opérera entre les deux types de particules. Différents exemples ont déjà été mis en pratique, se basant sur différents types d'interactions.

Cela peut notamment s'effectuer avec des systèmes de dipôles dans les particules [46]. Si les particules actives possèdent un front polarisé de manière opposée à la polarisation des particules passives, les particules passives vont s'attacher à une particule active et être transportées par celle-ci. Si la polarisation est induite par un champ électrique externe, ce transport de cargo par navette peut être contrôlé. De plus, la direction des navettes peut être également contrôlée si les particules actives possèdent une partie ferromagnétique et qu'un champ magnétique est correctement appliqué.

Un autre dispositif consiste en l'utilisation de particules Janus en partie formées de carbone activé, possédant des propriétés d'adsorption [47] (figure 2.10). De par la nature active de ces particules Janus, celles-ci vont parcourir l'ensemble de l'espace contaminé par différents composés, comme du méthyl-paraoxone ou du plomb, et les capturer par adsorption. Cela permet donc de purifier le milieu de certains éléments non désirés de manière relativement efficace, effet obtenu grâce à la combinaison de l'autopropulsion et de l'adsorption.

Grâce aux avancées numériques, il devient également possible de détecter la position en temps réel de particules microscopiques, et de les identifier en différentes classes [48]. En combinant ce système avec des particules propulsées par auto-thermophorèse et la capacité

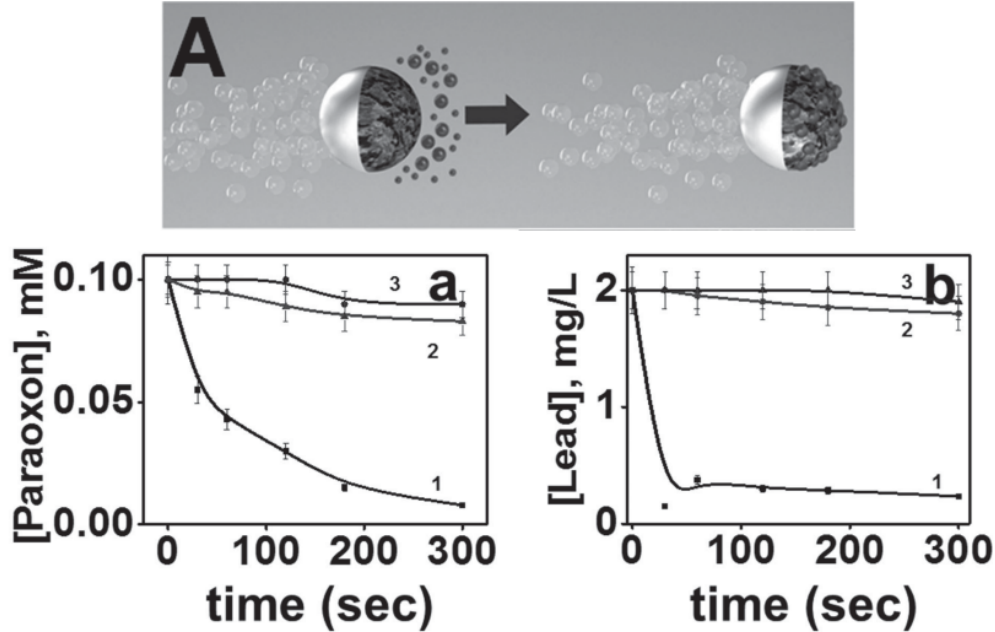


FIGURE 2.10 – (A) Particule Janus composée de platine microporeux (gris) et de carbone actif (gris) capable de collecter des particules passives (sphères grises). Quantité de (a) méthyl-paraoxone et de (b) plomb d’un échantillon en fonction du temps en présence (1) de moteurs en carbone actif, (2) de moteurs en polystyrène et (3) de particules de carbone actif stationnaires [47].

d’irradier précisément les particules, il est alors possible de contrôler l’autopropulsion de chacune des particules. Cela démultiplie les possibilités pour complexifier le comportement général des particules, que ce soit pour le transport de particules passives ou pour la formation de colloïdes.

2.7 Stratégie

L’objectif général de ce mémoire sera donc d’imaginer un dispositif automatique permettant le tri de particules passives dans un milieu aqueux. Pour ce faire, deux points distincts fondamentaux constitueront l’objectif global de ce mémoire.

Premièrement, la manière dont les phases actives et passives de particules vont ségréger doit être étudiée en fonction des paramètres les plus évidents qui peuvent varier dans un système faisant intervenir ces deux populations de particules.

Secondement, différents systèmes, inspirés par la littérature, vont être mis en place afin de contrôler le déplacement d’une population de particules actives.

Chapitre 3

Méthode numérique

Ce chapitre, dont la structure est en partie basée sur le cours d'outils numériques de la matière molle [49], permet d'exposer l'ensemble des bases nécessaires pour la réalisation de chacune des simulations effectuées au cours du mémoire. Certains aspects spécifiques, relatifs à des résultats spécifiques montrés dans le chapitre suivant, seront directement présentés avec les résultats, par souci de clarté.

3.1 Méthode des éléments discrets

La méthode des éléments discrets (DEM pour Discrete Element Method) a été développée dans les années 1970 dans le but de simuler le comportement de systèmes granulaires dans le cadre d'études géologiques. Cette méthode permet d'étudier les déplacements d'un grand nombre de sphères ou de disques qui interagissent entre elles et qui peuvent également subir d'autres forces. Il a été montré en 1979 que cette méthode permettait effectivement d'obtenir des résultats proches d'expériences effectuées [20].

3.1.1 Résolution d'équations différentielles

La démarche générale de cette méthode numérique est de discrétiser les lois de la mécanique de Newton dans le temps, pour un nombre fini d'objets. Les objets présentés sont des disques vu les simulations effectuées, mais d'autres objets peuvent être modélisés. Avant d'étudier la manière dont les objets interagissent entre eux et la modélisation employée, il est important de comparer les différentes manières de discrétiser le principe fondamental de la dynamique.

Le principe fondamental de la dynamique permet de déduire l'accélération \mathbf{a} d'un objet de masse m subissant une force totale \mathbf{F} .

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = m\mathbf{a}(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$

$$\iff \mathbf{a}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)/m = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \quad (3.2)$$

La fonction \mathbf{f} , bien qu'égal à l'accélération, représente un concept différent. Elle exprime l'ensemble des forces exercées sur l'objet divisé par la masse m , et non l'effet résultant qui est une accélération.

Dans un espace à une dimension, la position x , la vitesse v et l'accélération a sont liées par des dérivées temporelles.

$$v = \frac{dx}{dt} \quad (3.3)$$

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} \quad (3.4)$$

La résolution de ce principe consiste donc en la résolution d'une équation différentielle, et différentes méthodes numériques permettent d'obtenir une solution approximative de cette équation. Dans tous les cas, il est nécessaire de connaître les conditions initiales x_0 et v_0 , ainsi que de définir un pas de temps Δt .

La méthode la plus simple pour résoudre une équation différentielle est la méthode d'Euler. Elle postule que l'accélération et la vitesse sont constantes entre les pas de temps, et que celles-ci sont modifiées à chaque pas de temps par une relation linéaire en fonction du temps. Ainsi, entre le pas de temps i et le pas de temps $i + 1$, la position et la vitesse évoluent comme suit.

$$x_{i+1} = x_i + v_i \Delta t \quad (3.5)$$

$$v_{i+1} = v_i + f(x_i, t_i) \Delta t \quad (3.6)$$

Cette méthode du premier ordre, bien qu'ayant l'avantage d'être la plus simple, n'est cependant pas très fiable. Des méthodes du deuxième ordre permettent d'améliorer les résultats obtenus par méthode numérique.

Une méthode commune du deuxième ordre est la méthode des trapèzes. Entre deux pas de temps, la vitesse est constante, comme pour la méthode d'Euler. Cependant, au lieu de faire évoluer la position grâce à la vitesse au temps i , la moyenne des vitesses en temps i et $i + 1$ est calculée et utilisée. La position et de la vitesse au temps $i + 1$ sont exprimées dans les équations suivantes.

$$v_{i+1} = v_i + f(x_i, t_i) \Delta t \quad (3.7)$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{v_i + v_{i+1}}{2} \Delta t \quad (3.8)$$

Une autre méthode du deuxième ordre est la méthode leapfrog, aussi appelée saute-mouton, qui consiste en une actualisation décalée de la position par rapport à l'actualisation de la vitesse. Cette alternance donne son nom à la méthode. Les expressions de la vitesse et de la position deviennent alors :

$$x_{i+1/2} = x_i + v_i \frac{\Delta t}{2} \quad (3.9)$$

$$v_{i+1} = v_i + f(x_{i+1/2}, t_{i+1/2}) \Delta t \quad (3.10)$$

$$x_{i+1} = x_{i+1/2} + v_{i+1/2} \frac{\Delta t}{2} \quad (3.11)$$

En exprimant x_{i+1} en fonction de x_i et v_i , il devient évident que cette méthode est l'équivalent de la discrétisation d'un mouvement rectiligne uniformément accéléré, pour laquelle la valeur de l'accélération est déterminée entre les deux pas de temps.

Une comparaison rapide de l'efficacité, du point de vue de la précision des résultats et du temps requis pour appliquer ces méthodes, permet de montrer pourquoi la méthode leapfrog sera utilisée lors des simulations. Pour ce faire, une implémentation de ces différentes méthodes a été effectuée dans Wolfram Mathematica.

Trois fonctions seront utilisées pour comparer l'efficacité respective des trois méthodes. Ces fonctions permettent de créer une équation différentielle dont elles sont la solution avec les conditions initiales imposées. Ces fonctions, ainsi que les caractéristiques communes imposées aux trois simulations, sont présentées dans le tableau 3.1.

$x(t)$	t_0	Δt	n	Graphiques
$\sin(t)$	0	0.1	200	3.1a / 3.1b
$\exp(t)$	0	0.1	100	3.2a / 3.2b
t^{-2}	1	0.002	2000	3.3a / 3.3b

TABLE 3.1 – Trois fonctions utilisées pour tester les différentes méthodes numériques de résolution d'équations différentielles, ainsi que la condition initiale t_0 , le pas de temps Δt et le nombre de pas de temps n utilisés.

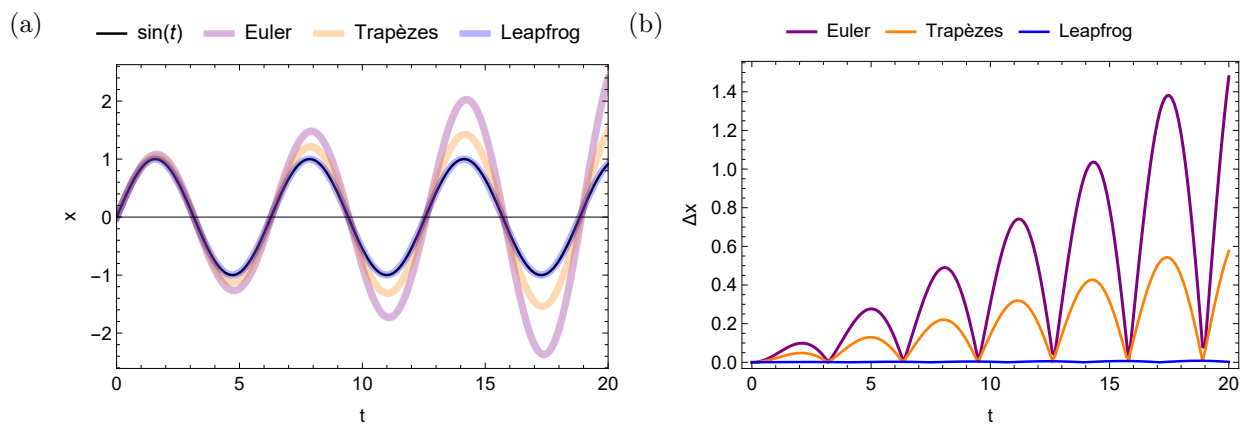


FIGURE 3.1 – (a) Fonction $\sin(t)$ et résultats numériques obtenus avec les trois méthodes pour les paramètres indiqués dans le tableau 3.1. (b) Valeur absolue de la différence entre la fonction $\sin(t)$ et les résultats numériques obtenus avec les trois méthodes pour les paramètres indiqués dans le tableau 3.1.

Dans chacun de ces tests, il est facilement observable que la méthode leapfrog est toujours la plus précise à caractéristiques de simulation équivalentes. Pour les fonctions sinus et

exponentielle, l'erreur obtenue sur le résultat au dernier pas de temps est inférieure à 0.5%, et l'erreur obtenue pour la fonction t^{-2} est de 2.23%, contrairement aux deux autres méthodes pour lesquelles les erreurs explosent et ne donnent plus de résultats approximant la fonction voulue. Il est intéressant de noter que la méthode d'Euler donne de meilleurs résultats que la méthode des trapèzes dans le cas de la fonction t^{-2} , étant pourtant une méthode d'un ordre inférieur.

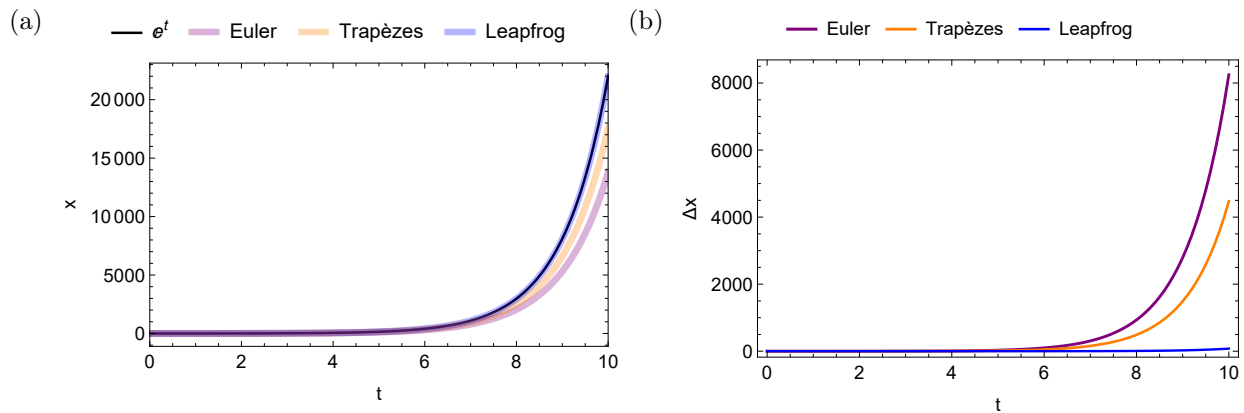


FIGURE 3.2 – (a) Fonction $\exp(t)$ et résultats numériques obtenus avec les trois méthodes pour les paramètres indiqués dans le tableau 3.1. (b) Valeur absolue de la différence entre la fonction $\exp(t)$ et les résultats numériques obtenus avec les trois méthodes pour les paramètres indiqués dans le tableau 3.1.

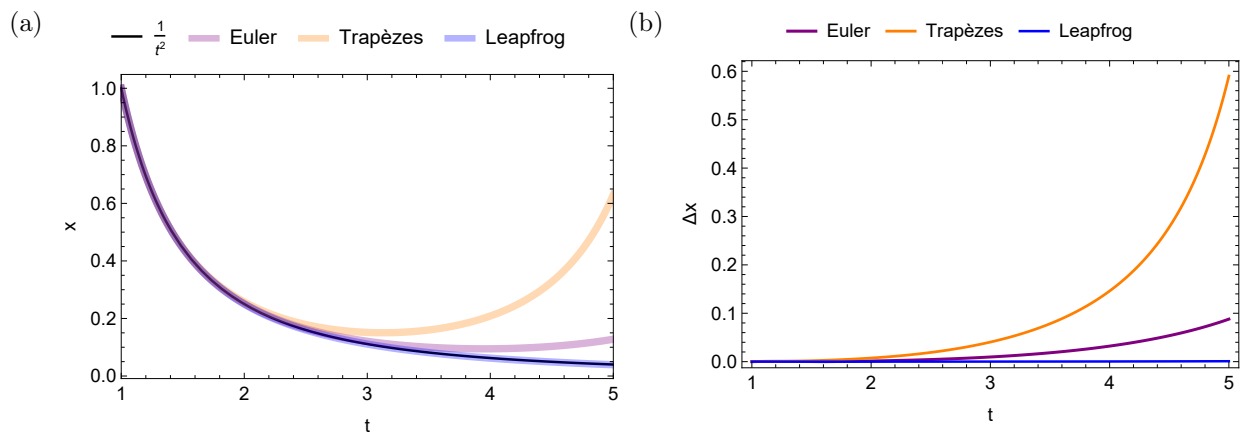


FIGURE 3.3 – (a) Fonction t^{-2} et résultats numériques obtenus avec les trois méthodes pour les paramètres indiqués dans le tableau 3.1. (b) Valeur absolue de la différence entre la fonction t^{-2} et les résultats numériques obtenus avec les trois méthodes pour les paramètres indiqués dans le tableau 3.1.

Cependant, à cause de l'impact de Δt sur le temps nécessaire pour effectuer ces différentes méthodes, un résultat à Δt égal n'est pas suffisant pour montrer que la méthode leapfrog sera plus efficace. En effet, il se pourrait que la méthode leapfrog prenne beaucoup plus de

temps à pas de temps égal, et qu’une autre méthode donne des résultats similaires avec un pas de temps plus faible mais dont la durée totale d’exécution serait tout de même plus courte.

Néanmoins, dans le cas présenté, nous observons que ce n’est pas le cas. Le temps requis pour chacune des résolutions est recensé dans le tableau 3.2. Sachant que les temps présentés dans ce tableau ne représentent que des exemples d’une implémentation spécifique via un programme spécifique, ils semblent tout de même assez proches entre eux pour conclure que la méthode leapfrog ne demande pas une quantité significative de ressources supplémentaires, et qu’elle produira très certainement de meilleurs résultats pour un temps de calcul égal.

$x(t)$	Euler	Trapèze	Leapfrog
$\sin(t)$	0.359375 s	0.328125 s	0.40625 s
$\exp(t)$	0.28125 s	0.234375 s	0.21875 s
t^{-2}	3.6875 s	3.8125 s	3.23438 s

TABLE 3.2 – Temps nécessaire à la réalisation des approximations numériques pour chacune des fonctions et des méthodes présentées dans le tableau 3.1.

L’ensemble de ces considérations permettent de justifier l’utilisation de la méthode leapfrog, puisque celle-ci donne de meilleurs résultats pour un temps de calculs équivalent. De plus, cette méthode est stable par rapport aux mouvements oscillatoires, tant que le pas de temps est constant et assez faible par rapport à la fréquence d’oscillation [50, 51]. D’autres méthodes d’ordre deux existent et peuvent être utilisées dans le cadre de la méthode des éléments discrets, mais elles ne seront pas abordées ni utilisées lors des simulations effectuées.

La deuxième loi de Newton permet d’obtenir l’accélération, et donc la vitesse et la position au pas de temps suivant, à partir des forces que subit chaque particule. Il est donc nécessaire d’identifier et d’exprimer ces forces, à commencer par la répulsion stérique entre les particules.

3.1.2 Répulsion stérique

Les particules ne pouvant physiquement pas se superposer, il convient d’intégrer une force les faisant se repousser à partir du moment où elles se superposent. Même s’il existe des modèles plus complexes, exprimer cette force comme celle d’un ressort amorti permet déjà d’obtenir des résultats en accord avec les observations [20].

Considérons d’abord simplement un ressort non amorti. Pour deux particules, la force dépend de la distance r_{ij} séparant les particules i et j de rayons R_i et R_j . Ces grandeurs sont visualisées dans la figure 3.4.

$$\mathbf{F}_{\mathbf{r},i}(r_{ij}) = \begin{cases} -k_n |r - (R_i + R_j)| \widehat{\mathbf{r}}_{ij} & r_{ij} < R_i + R_j \\ \mathbf{0} & r_{ij} \geq R_i + R_j \end{cases} \quad (3.12)$$

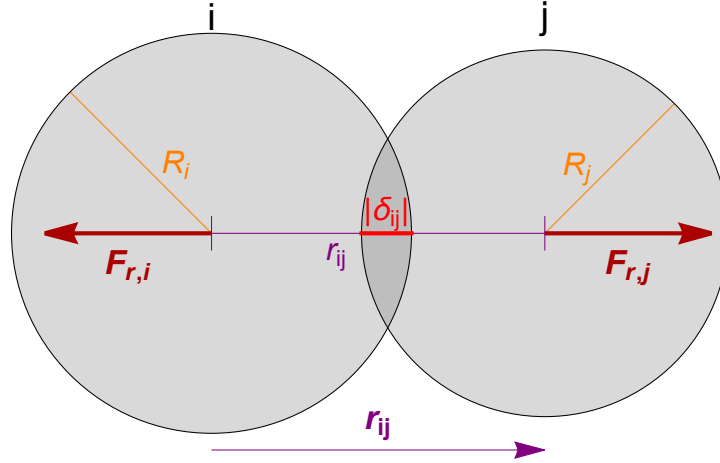


FIGURE 3.4 – Représentation des différentes grandeurs liées au calcul des contacts entre deux particules qui se superposent.

Le choix de la constante de raideur k_n est crucial pour effectuer une simulation dans laquelle la superposition des particules n'est pas trop importante. Il faut ainsi trouver une constante de raideur permettant une superposition maximale δ_{max} dans le cas le plus extrême. Ce cas dépendra des forces, et une première possibilité peut être présentée en considérant l'énergie cinétique maximale des particules.

L'énergie cinétique maximale K_{max} d'une particule doit être égale à l'énergie d'un ressort dont l'élongation serait définie comme étant la limite permise. Dans les premières simulations effectuées, l'énergie cinétique maximale est directement liée à l'autopropulsion des particules actives, dont on a défini une vitesse nommée v_{max} . On peut alors obtenir l'expression de la constante de raideur k_n dans l'équation 3.14.

$$\frac{1}{2}k_n\delta_{max}^2 = \frac{1}{2}mv_{max}^2 \quad (3.13)$$

$$\implies k_n = \frac{mv_{max}^2}{\delta_{max}^2} \quad (3.14)$$

Pour l'ensemble des simulations, la valeur choisie pour δ_{max} est d'un centième du rayon des particules, ce qui permet une superposition assez faible pour que les particules soient effectivement considérées comme rigides.

La valeur de δ_{max} pourrait être choisie de manière à être encore plus faible, afin de représenter le plus fidèlement des particules qui ne se superposent pas. Cependant, le choix de la constante de raideur k_n a un impact sur le pas de temps Δt nécessaire pour que la force obtenue soit intégrée correctement par le modèle leapfrog. Pour que la collision dure au minimum 20 pas de temps et soit ainsi intégrée de manière relativement correcte, il est possible de définir une borne supérieure pour Δt dépendant de k_n et de la masse m des

particules.

$$\Delta t \leq c\pi \sqrt{\frac{m}{k_n}}, \quad c = 1/20 = 0.05 \quad (3.15)$$

Effectuer une approximation des contacts par un simple ressort n'est pas un modèle suffisant pour représenter la réalité. Cela représenterait une collision purement élastique, sans perte d'énergie. Il est donc nécessaire d'ajouter un terme visqueux permettant la perte d'énergie par les particules au cours de la collision. Il est possible de déterminer la viscosité du ressort à partir du coefficient de restitution ϵ , qui est une valeur estimable pour la collision de différents couples de matériaux. Nous pouvons alors obtenir l'expression de la viscosité dans l'équation 3.17, où la masse m choisie est la masse effective calculée à partir des masses des deux particules.

$$m = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (3.16)$$

$$\eta = -2 \ln(\epsilon) \sqrt{\frac{m k_n}{\ln^2(\epsilon) + \pi^2}} \quad (3.17)$$

La force totale à appliquer à une particule i entrant en contact avec une particule j se superposant sur une distance δ_{ij} qui varie au cours du temps t peut donc s'exprimer grâce aux coefficients définis précédemment.

$$\mathbf{F}_r(\delta_{ij}) = \left(-\eta \frac{d\delta_{ij}}{dt} - k_n \delta_{ij}\right) \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad \delta_{ij} < 0 \quad (3.18)$$

3.1.3 Friction

Lors des contacts, la répulsion n'est pas le seul phénomène à prendre en compte. En effet, si les particules se déplacent l'une par rapport à l'autre selon la tangente, la friction entre les particules est censée freiner ce mouvement. Il est possible de déterminer la force de frottement avec la méthode de Coulomb. La force de friction \mathbf{F}_t s'exprime en fonction du coefficient de frottement cinétique μ , du vecteur unitaire tangentiel $\hat{\mathbf{t}}$ et de la force normale F_n , qui est en l'occurrence la force de répulsion de l'équation 3.18.

$$\mathbf{F}_t = -\mu F_n \hat{\mathbf{t}} \quad (3.19)$$

Le signe de l'expression 3.19 vient de la définition du vecteur unitaire tangentiel, qui est orienté dans le sens du mouvement entre les deux particules du point de vue de la particule considérée. Cependant, dans le cas où la vitesse relative tangentielle est nulle, une discontinuité est présente. Cela peut se résoudre en introduisant une régularisation autour de zéro, comme présenté dans l'équation 3.20. Pour ce faire, il est nécessaire de connaître la vitesse tangentielle non-normalisée u et de définir un coefficient de régularisation k_t suffisamment important.

$$\mathbf{F}_t(u) = \begin{cases} -\mu F_n \hat{\mathbf{t}} & |u| > \mu F_n / k_t \\ -k_t \mathbf{u} & |u| \leq \mu F_n / k_t \end{cases} \quad (3.20)$$

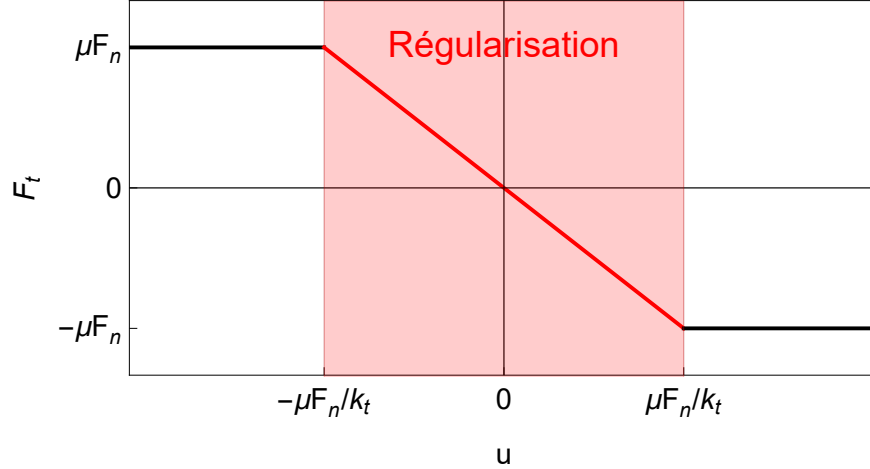


FIGURE 3.5 – Force de friction F_t en fonction de la vitesse tangentielle u avec la régularisation comme exprimée dans l’expression 3.20.

Un problème avec cette régularisation est qu’elle indique que la force de friction est nulle si la vitesse relative est nulle, alors que deux objets en contact au repos l’un par rapport à l’autre sont censés être sujets à une force de frottement statique.

Cette friction mène également à un moment de force, dont l’expression est donnée en 3.21.

$$M_{t,ij} = -R_i \hat{\mathbf{r}}_{ij} \times \mathbf{F}_t \quad (3.21)$$

Le résultat d’un produit vectoriel devrait être un autre vecteur. Puisque tous les systèmes de ce mémoire sont en 2D, le résultat d’un produit vectoriel sera toujours un vecteur d’une seule composante selon l’axe sortant du plan simulé. Par facilité, seule la composante non-nulle est exprimée comme solution d’un produit vectoriel.

3.1.4 Détermination des contacts

Pour un grand nombre de particules, il devient vite problématique de calculer l’ensemble des distances séparant chaque paire de particules, afin de déterminer si celles-ci sont en contact. En effet, la complexité algorithmique est d’ordre $O(n^2)$. Il existe néanmoins différentes méthodes permettant de limiter le nombre de calculs nécessaires pour déterminer si des particules pourraient être en contact. La méthode présentée et utilisée est celle des cellules liées.

La démarche générale est la suivante. La position de chacune des particules étant connue pour tous les pas de temps, les particules vont être classées dans des cellules, et les contacts ne seront évalués que pour les particules appartenant à des cellules voisines.

Il est facile de déterminer l’appartenance des particules aux cellules en fonction de leurs coordonnées. Pour une particule i située aux coordonnées (x_i, y_i) dans un système dont l’origine de la classification en cellules est placée en (X, Y) et dont les cellules possèdent des

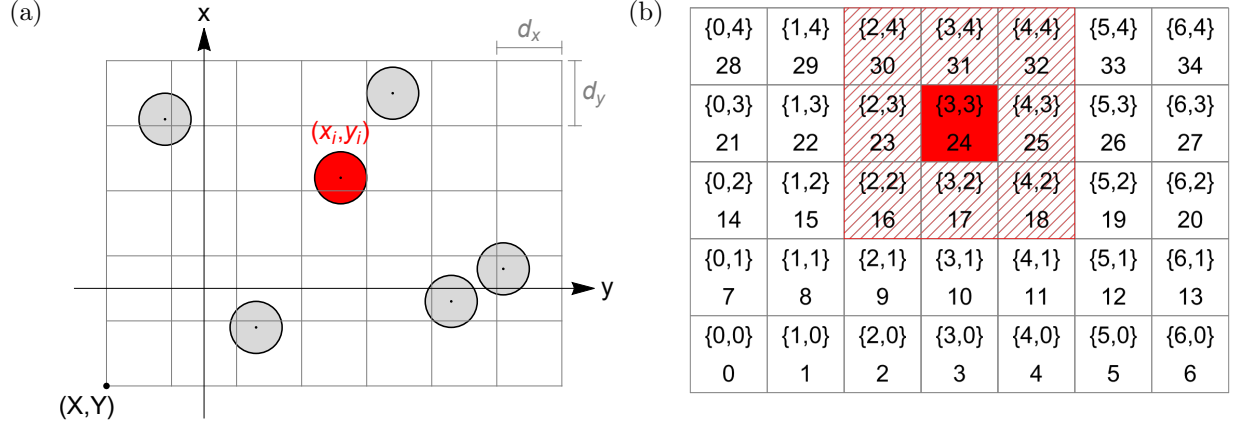


FIGURE 3.6 – (a) Représentation de la construction des cellules à partir d’une origine (X, Y) , de taille de cellules $d_x \times d_y$ et d’un ensemble de particules. (b) Méthodes de numérotation des cellules, avec en haut chaque couple c_x, c_y et en bas l’entier c déduit, avec visualisation des cellules voisines.

dimensions $d_x \times d_y$, le couple d’entiers c_{ix}, c_{iy} permettant d’identifier la cellule dans laquelle se trouve la particule est donné dans les équations 3.22 et 3.23, où $\lfloor \cdot \rfloor$ est la fonction partie entière. Connaissant le nombre de cellules n_x selon la longueur, il est possible d’associer à la particule un seul entier c_i qui la lie à sa cellule avec l’expression 3.24 (figure 3.6a).

$$c_{ix} = \lfloor (x_i - X)/d_x \rfloor \quad (3.22)$$

$$c_{iy} = \lfloor (y_i - Y)/d_y \rfloor \quad (3.23)$$

$$\implies c_i = c_{ix} + n_x c_{iy} \quad (3.24)$$

Il est ainsi possible de connaître l’appartenance de chaque particule à sa cellule. De plus, lors de la construction des cellules, il est facile de déterminer quelles cellules sont voisines entre elles peu importe la méthode de numérotation employée lors de la construction des cellules. Il faut cependant faire attention à ne pas sélectionner huit voisins si la cellule choisie se situe en bord de grille.

Connaissant l’appartenance de chaque particule à sa cellule, et l’ensemble des cellules voisines, il est possible de n’effectuer les calculs de détermination de contacts qu’avec les particules situées dans la même cellule et dans les cellules voisines. Pour que cette méthode soit la plus efficace, il est nécessaire de choisir une taille de cellule légèrement supérieure au diamètre de la plus grosse particule. Cela permet à la fois de limiter le nombre de particules potentielles dans les cellules à considérer, et également de toujours considérer la répulsion stérique pour deux particules qui se superposent.

Même s’il est possible d’effectuer ces calculs en associant explicitement toutes les particules présentes dans une cellule à celle-ci, la méthode employée dans les simulations aura été différente. La méthode des listes liées a été utilisée pour associer les particules aux cellules, car celle-ci présente certains avantages en pratique.

Cette méthode nécessite un procédé itératif ordonné. Une cellule ne possédera jamais l'information de la présence que d'une seule particule dans celle-ci, appelée tête de liste. Par contre, chaque particule aura l'information de la présence d'une autre particule dans la même cellule : ces particules seront alors liées. Ainsi, pour une cellule donnée, la tête de liste est connue. Par récursion, l'ensemble des particules appartenant à la cellule sont connues, puisque les particules sont à chaque fois liées à une autre, jusqu'à ce qu'on atteigne la dernière particule qui n'est liée à aucune autre.

La démarche nécessaire à appliquer à chaque particule afin de déterminer les différentes listes est constituée de trois étapes.

1. Calcul de la cellule dans laquelle la particule se trouve à partir des équations 3.22, 3.23 et 3.24.
2. Changement de la tête de liste avec la nouvelle particule considérée.
3. Création du lien entre la nouvelle tête de liste et l'ancienne tête de liste.

Numériquement, cette méthode présente l'avantage de pouvoir facilement naviguer dans la liste afin de déterminer les contacts, puisqu'un ordre est directement établi par les liens successifs entre particules. Néanmoins, cette démarche nécessitant un ordre pour effectuer les différentes étapes et l'étape i étant dépendante de l'étape $i - 1$. Elle n'est donc pas parallélisable.

3.1.5 Conditions de bords

Les systèmes que nous voulons étudier étant très grands par rapport à la taille des particules étudiées, et contenant un nombre important de particules, il est important de réfléchir aux limites du système. L'étude d'un système dans sa totalité est irréalisable si l'on considère l'océan, ou même un contenant liquide que l'on voudrait traiter, à l'aide de simples simulations effectuées sur un ordinateur personnel. Limiter le système à l'aide de barrières physiques empêchant les particules de sortir de l'ensemble des cellules définies afin de déterminer les contacts n'est pas une solution viable non plus, puisque la différence notable d'ordres de grandeur entre le système simulé et le système cible pourrait mener à des comportements différents.

Des conditions de bords périodiques sont ainsi utilisées, qui permettent de résoudre ces problèmes en gardant des simulations réalisables techniquement. Il faut tout de même faire attention lors de l'analyse de tels systèmes à considérer que si toutes les particules simulées interagissent directement entre elles, par exemple en formant une unique grappe, il est probable que les phénomènes observés soient encore plus prononcés avec des systèmes plus grands.

En pratique, l'ajout de cellules dites fictives contenant des particules fictives, simples translations de particules réelles situées aux bords du système réel, permet l'instauration des conditions de bords périodiques. Un exemple de ces conditions est illustré dans les figures 3.7a et 3.7b, respectivement pour l'illustration des particules fictives et pour la numérotation des cellules fictives.

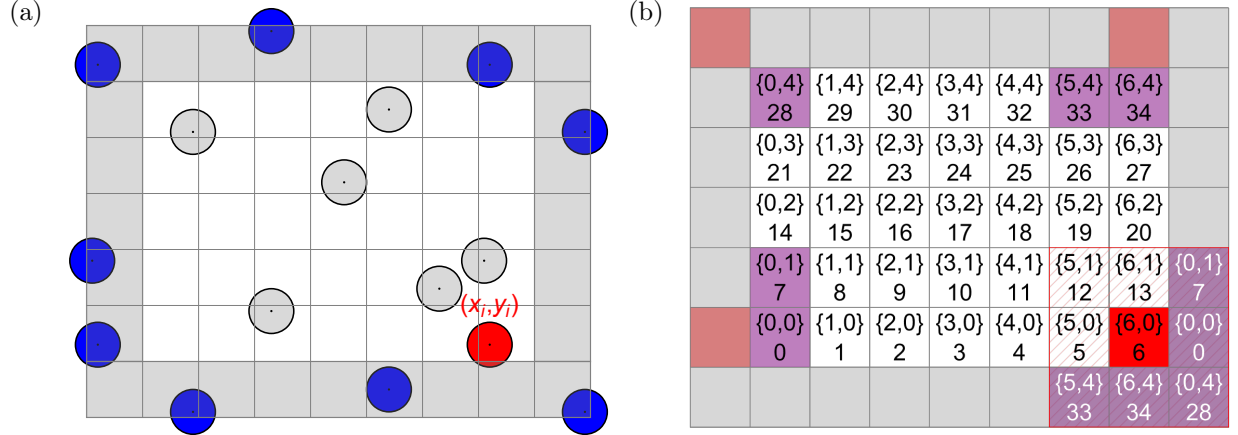


FIGURE 3.7 – (a) Représentation de la disposition des particules et de leur équivalent fictif résultant de la périodicité du système, avec une particule mise en évidence afin d’étudier ses voisines. (b) Numérotation des cellules voisines fictives d’une particule située en bord de simulation dans le but de déterminer les particules voisines avec lesquelles un contact pourrait se produire.

3.1.6 Effets hydrodynamiques

L’interaction entre le fluide et les particules peut avoir un effet important sur le comportement des particules. Même si les interactions dynamiques peuvent être approximées numériquement, par l’introduction de multipôles par exemple, la simple utilisation de la force de frottements visqueux de Stokes a été utilisée. Bien que cette approximation puisse être considérée comme peu valable pour les systèmes que l’on étudie, notamment en raison de la proximité entre les particules qui se déplacent, celle-ci permet des calculs rapides. De plus, vu les dimensions du système. Cette force et le moment de force associé sont exprimés dans les équations 3.25 et 3.26, avec η la viscosité du fluide, \mathbf{v} la vitesse de la particule et ω la vitesse angulaire de la particule.

$$\mathbf{F}_s = -6\pi\eta R\mathbf{v} \quad (3.25)$$

$$M_s = -8\pi\eta R^3\omega \quad (3.26)$$

Cette simplification reste très réductrice. Même si elle a été utilisée pour faciliter la réalisation et l’exécution des simulations, les perturbations à longue distance de particules actives sur le fluide sont un paramètre ayant une influence non négligeable sur l’organisation des particules. Cela s’observe notamment grâce au calcul de la fonction de distribution radiale [52].

3.1.7 Propulsion

Afin de simuler le déplacement des particules, que ce soit par leur caractère actif ou par leur activité brownienne, l’utilisation de certains modèles est requise. Deux d’entre eux seront présentés, le Run-and-Tumble et l’Active Brownian Motion. Ils seront également comparés afin de déterminer lequel sera utilisé lors des simulations.

Propulsion Run-and-Tumble

Le déplacement Run-and-Tumble est une manière de modéliser la propulsion des particules, directement inspiré de l’observation de bactéries [8, 22]. La particule va se déplacer de manière rectiligne (phase *run*) avant de subir une réorientation aléatoire (phase *tumble*) avant de se déplacer à nouveau de manière rectiligne. L’espacement des réorientations s’effectue selon une distribution de Poisson avec un taux défini.

Afin d’implémenter la propulsion Run-and-Tumble, il est nécessaire de définir au moins deux paramètres : la vitesse limite v_l pendant les phases de *run* et la durée moyenne τ d’une phase de *run*. Une valeur aléatoire issue d’une loi exponentielle de moyenne τ permet de déterminer la durée de la phase de *run*. Les simulations effectuées nécessitant d’introduire une force menant à ce type de déplacement, la particule sera soumise à une force dont la direction est donnée par l’orientation de la particule et dont l’intensité est donnée ci-après.

$$F_{run} = 6\pi\eta Rv_l \quad (3.27)$$

Le préfacteur issu de la force de frottement de Stokes permet d’atteindre la vitesse limite v_l , puisque les particules seront toujours sujettes à la force de propulsion et à la force de frottement.

La démarche la plus simple pour modéliser un *tumble* est de réorienter instantanément la particule dans sa nouvelle direction, afin que la nouvelle phase de *run* s’enchaîne directement. Il est cependant possible de rendre ce modèle plus complexe, en transformant les réorientations en phases dont la durée est non nulle. Cela peut par exemple s’effectuer en définissant une vitesse limite de rotation ω_l , et en introduisant le moment de force défini ci-dessous.

$$M_{tumble} = 8\pi\eta R^3\omega_l \quad (3.28)$$

Comme pour la force de propulsion, la combinaison du moment de force lié aux frottements et du moment de force lié à la réorientation permet d’atteindre une vitesse angulaire limite de réorientation ω_l . Il est également possible de choisir si la force de propulsion devient nulle pendant la réorientation ou si cette force continue de permettre la propulsion de la particule.

Propulsion Active Brownian Motion

Comme son nom l’indique, le mouvement brownien actif se base sur le mouvement brownien. Une particule modélisée comme telle sera sujette à deux contributions différentes, le mouvement brownien qui va dépendre des coefficients de diffusion du système, et également d’une propulsion directionnelle de vitesse limite v_l . Cette propulsion, qui va dépendre de la direction de la particule et donc de la diffusion rotationnelle, mène à un couplage des phénomènes rotationnel et translationnel [8, 22, 53].

Afin de générer un mouvement brownien, il est possible de déterminer la vitesse à chaque pas de temps à partir des coefficients de diffusion D_T et D_R , de la génération de nombres

aléatoires ξ et de la durée du pas de temps Δt , par le procédé du bruit gaussien des équations de Langevin. Les nombres aléatoires ξ sont générés suivant une loi normale de moyenne nulle et de variance unitaire. Les coefficients de diffusion, bien que liés à la température du système par la loi de Stokes-Einstein, ont été choisis arbitrairement afin d'obtenir des effets prononcés de la diffusion, particulièrement pour la rotation. Même s'ils ont été choisis, il restent tout de même liés par la relation 3.29. Ayant défini $D_T = 10^{-10} m^2 s^{-1}$ et connaissant le rayon des particules pour chaque simulation, le coefficient de diffusion rotationnel D_R est toujours connu.

$$D_R = D_T \frac{6}{8R^2} \quad (3.29)$$

En deux dimensions, les vitesses selon x et y ainsi que la vitesse angulaire ω liée à l'orientation ϕ de la particule sont données par les équations 3.30, 3.31 et 3.32.

$$v_x = \sqrt{2D_T \Delta t} \xi_x \quad (3.30)$$

$$v_y = \sqrt{2D_T \Delta t} \xi_y \quad (3.31)$$

$$\omega = \sqrt{2D_R \Delta t} \xi_\phi \quad (3.32)$$

Cependant, pour effectuer les simulations, les particules doivent subir des forces. Il est possible de déduire la force que les particules doivent subir à chaque pas de temps en considérant que $a_i \approx v_i / \Delta t$ et que cette vitesse soit atteinte pour un équilibre avec la force de frottement visqueux.

$$F_{x,B} = 6\pi\eta R \sqrt{\frac{2D_T}{\Delta t}} \xi_x \quad (3.33)$$

$$F_{y,B} = 6\pi\eta R \sqrt{\frac{2D_T}{\Delta t}} \xi_y \quad (3.34)$$

$$M_B = 8\pi\eta R^3 \sqrt{\frac{2D_R}{\Delta t}} \xi_\phi \quad (3.35)$$

Ces équations expriment la force que subissent des particules passives browniennes. Il est possible d'ajuster celles-ci afin d'obtenir les équations des forces et du moment angulaire que subit un particule active brownienne, ayant une vitesse limite v_l et une vitesse angulaire ω_l .

$$F_{x,A} = 6\pi\eta R \left(v_l \cos(\phi) + \sqrt{\frac{2D_T}{\Delta t}} \xi_x \right) \quad (3.36)$$

$$F_{y,A} = 6\pi\eta R \left(v_l \sin(\phi) + \sqrt{\frac{2D_T}{\Delta t}} \xi_y \right) \quad (3.37)$$

$$M_A = 8\pi\eta R^3 \left(\omega_l + \sqrt{\frac{2D_R}{\Delta t}} \xi_\phi \right) \quad (3.38)$$

La vitesse v_l est directement liée à l'activité de la particule, et la vitesse angulaire ω_l est quant à elle liée à la chiralité des déplacements de la particule.

Le nombre adimensionnel de Péclet Pe permet d'évaluer l'activité d'un tel type de particule. Celui-ci compare le phénomène de propulsion active et directionnelle, engendré par v_l , et les phénomènes browniens aléatoires, liés aux coefficients de diffusion D_T et D_R . Le nombre de Péclet est donc défini comme dans l'équation 3.39 [8].

$$Pe \propto \frac{v}{\sqrt{D_T D_R}} \quad (3.39)$$

La proportionnalité de la relation provient du fait que ce coefficient peut être défini de plusieurs manières différentes, et que la transition entre une particule dominée par la motilité ou dominée par la diffusion n'est pas toujours claire. Néanmoins, une particule dont le nombre de Péclet est grand peut être considérée comme active, et une particule dont le nombre de Péclet est faible peut être considérée comme passive.

Trajectoires

Même si les comportements de particules utilisant ces modèles de propulsion sont équivalents pour des temps longs, leurs comportements pour des temps courts sont très différents (figure 3.8). Une particule passive va avoir tendance à rester assez proche de sa position, n'étant pas animée d'une propulsion autre que l'activité brownienne. Une particule active brownienne quant à elle va se déplacer avec une persistance plus importante, ce qui lui permet de mieux se déplacer dans l'espace sans que la trajectoire ne soit prévisible. Une particule run-and-tumble va effectuer successivement les phases rectilignes et les événements de rotation, ce qui lui permet également de se déplacer plus facilement dans l'ensemble de l'espace mais de manière tout à fait rectiligne entre les rotations.

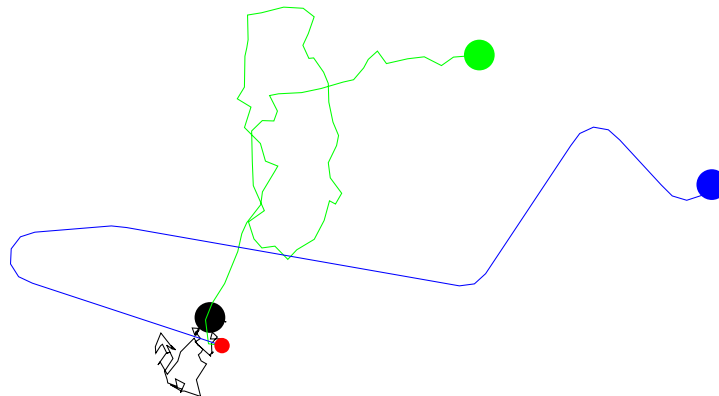


FIGURE 3.8 – Exemples de trajectoires pour une particule passive brownienne (en noir), une particule active brownienne (en vert) et une particule run-and-tumble (en bleu), avec l'origine représentée en rouge.

Déplacements quadratiques moyens

Le déplacement quadratique moyen $\langle r^2 \rangle$ (MSD pour Mean Square Displacement) d'une particule active est constitué de trois différentes régions [8]. Une première phase, pour des

temps très faibles par rapport au temps τ , est proportionnelle à t . Cette phase n'est pas forcément observable si l'intensité de la propulsion est trop importante [54]. Ensuite, pour des temps inférieurs à τ et de l'ordre de τ , la MSD évoluera de manière superdiffusive, donc proportionnelle à t^2 . Cela s'explique par le fait que la direction préférentielle initiale domine les phénomènes de réorientation. Pour des temps supérieurs à τ , la MSD évolue de manière diffusive en t , puisque les phénomènes de réorientation rendent les directions aléatoires par rapport aux directions initiales des particules. Les deux dernières phases sont observables pour les deux types de propulsion et pour différentes vitesses v_l dans les graphiques 3.9a et 3.9b.

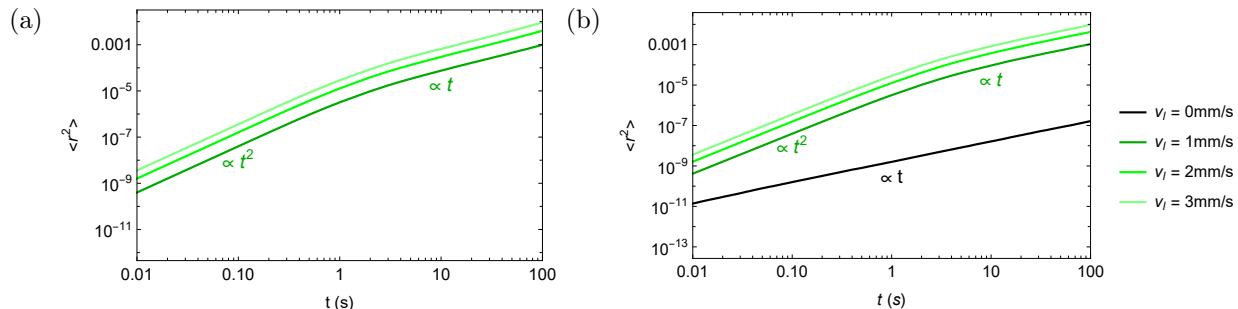


FIGURE 3.9 – Déplacement quadratique moyen pour des particules de type (a) Run-and-Tumble et (b) Active Brownian avec différentes vitesses v_l et mise en évidence des deux régimes observables.

Choix de la propulsion

Utiliser la propulsion Run-and-Tumble peut être très intéressant dans le cas de l'étude de certaines populations de bactéries, dont le mode de propulsion est très proche. Néanmoins, le mouvement brownien actif sera utilisé pour modéliser tous les types de particules présentés. Ce choix est motivé par trois raisons principales.

- Le mouvement brownien actif est plus général. Il est plus fidèle à la modélisation pour certaines populations d'êtres vivants, mais également pour les particules actives artificielles.
- Le nombre de Péclet, et donc le caractère actif ou passif d'une particule, est aisément déterminé à partir des caractéristiques de celle-ci.
- Le mouvement brownien est facilement généralisé au cas passif. C'est le cas dès que $v_l = 0$. De plus, contrairement à une particule Run-and-Tumble, cela n'implique pas une absence totale de mouvement.

Il est pertinent de noter que le modèle Run-and-Tumble pourrait peut-être être utilisé afin de modéliser une particule passive. En effet, certaines transitions sont observables entre les comportements de population en ajustant la vitesse v_l ou le temps moyen avant *tumble* τ . Si ces paramètres sont assez faibles sans être nuls, le comportement se rapproche alors d'une particule passive. Il serait intéressant d'étudier ces similitudes, et d'établir un éventuel lien entre ces caractéristiques et les coefficients de diffusion, mais cela n'aura pas été fait en

détail au cours de ce travail.

Il est également possible d'ajouter des perturbations browniennes à un mouvement de type Run-and-Tumble. Cela permet à la fois de définir le nombre de Péclet, et aussi d'éviter d'avoir une particule passive totalement immobile. Cette implémentation ne sera néanmoins pas étudiée.

3.1.8 Influence de la viscosité

Peu importe la méthode de propulsion, le préfacteur dépend de la viscosité. Afin que la force de propulsion et la force de frottements visqueux soient correctement intégrées, il est nécessaire que le pas de temps soit suffisamment faible pour éviter d'obtenir une divergence et des forces qui explosent de plus en plus à chaque pas de temps. On peut alors définir un pas de temps qui permettrait aux particules d'atteindre leur vitesse maximale en $1/c$ pas de temps.

$$\Delta t = \frac{2R^2\rho}{9\eta}c, \quad c \leq 1/20 \quad (3.40)$$

Il faut alors choisir le pas de temps le plus faible entre ceux présentés dans les équations 3.15 et 3.40 pour que l'intégration d'aucune force ne diverge.

La viscosité du fluide, en plus d'avoir un impact sur le comportement des particules, peut avoir un impact sur la vitesse d'exécution de la simulation, dans le cas où l'expression 3.40 est inférieure à celle liée aux contacts 3.15. Vu les conditions qui auront été utilisées afin de réaliser les simulations, la viscosité a un impact important sur le temps d'exécution. Afin d'accélérer les simulations, et en s'inspirant de l'étude de la viscosité sur la formation de colloïdes superparamagnétiques [53], la viscosité aura été définie comme valant $\eta = 10^{-4}$ Pa s, soit un dixième de la viscosité de l'eau. Cette modification permet la réalisation d'un nombre plus important de simulations, sans impacter significativement les résultats obtenus. Cela aura été montré en comparant les différents indices présentés par la suite pour des simulations dont la seule caractéristique différente est la viscosité.

3.1.9 Outils numériques

Afin de réaliser les simulations basées sur la méthode des éléments discrets, différents outils ont dû être utilisés.

Les simulations sont effectuées à l'aide du langage C++, qui permet d'obtenir la position de chaque particule à des temps définis.

La visualisation de la position des particules et le calcul de la majorité des indices permettant l'analyse des données ont été effectués avec Wolfram Mathematica. Ce choix est particulièrement pertinent sachant que la programmation fonctionnelle aura permis d'améliorer l'efficacité de ces calculs.

Afin de créer des vidéos des simulations, deux outils différents ont été utilisés. Premièrement, Gnuplot a permis, à partir des positions des particules, de créer les images constituant

les vidéos. Ensuite, FFMPEG a été utilisé de compiler ces images en vidéo, ce qui aura permis d'observer le déroulement des simulations, et de tirer plus facilement certaines conclusions.

3.2 Analyse des données

Afin d'analyser efficacement les résultats obtenus pour un grand nombre de simulations, il est nécessaire d'établir différentes grandeurs directement liées à certaines caractéristiques de l'organisation du système. Trois types d'indices vont principalement être utilisés pour analyser les différentes simulations : la fonction de distribution radiale, l'indice de ségrégation et la distribution de la taille des clusters.

3.2.1 Fonction de distribution radiale

La fonction de distribution radiale (RDF pour Radial Distribution Function), ou fonction de corrélation de paires, est un bon outil pour déterminer la structure d'un ensemble de particules. Cette fonction g donne pour toute distance r une valeur proportionnelle à la probabilité de présence d'une particule se trouvant entre r et $r + dr$ d'une autre particule. Cette fonction g est nulle pour des valeurs de r inférieures au diamètre des particules si ces particules sont dures et ne se superposent pas, et par normalisation g tend vers 1 à l'infini, puisque les présences des particules situées loin l'une de l'autre ne sont plus censées avoir d'impact sur la probabilité de présence de celles-ci, comme pour un gaz parfait [55].

Cette fonction est normalisée selon la distance r grâce au diamètre des particules D . Cela permet une visualisation facilitée de la structure obtenue dans le graphique.

En pratique, le calcul de cette fonction de distribution radiale s'effectue en trois étapes successives :

1. Calcul de la distance pour chaque paire de particules.
2. Répartition de ces distances dans un histogramme dont la largeur des classes est fixée à un dr défini.
3. Normalisation de chaque classe de l'histogramme par $2\pi r dr \rho n$ avec $2\pi r dr$ la surface de la classe, ρ la densité des particules dans l'espace étudié, et n le nombre total de particules.

Puisque le système possède des conditions de bords périodiques, il est utile de prendre en compte cette périodicité dans le calcul de la fonction de distribution radiale. Cela s'effectue en ajoutant les distances entre les particules du système et les particules fictives obtenues en déplaçant le système selon la périodicité.

L'influence de l'organisation des particules sur la fonction de distribution radiale peut s'observer directement dans les figures 3.10b et 3.11b. En effet, ces fonctions, respectivement liées aux instantanés 3.10a et 3.11a, sont très différentes. D'une part, la RDF liée à des particules disposées aléatoirement présente un maximum légèrement supérieur à 1 vers la distance d'un diamètre, mais diminue rapidement en oscillant autour de l'unité à cause de la normalisation et du hasard de la position des particules. D'autre part, la RDF de la simulation

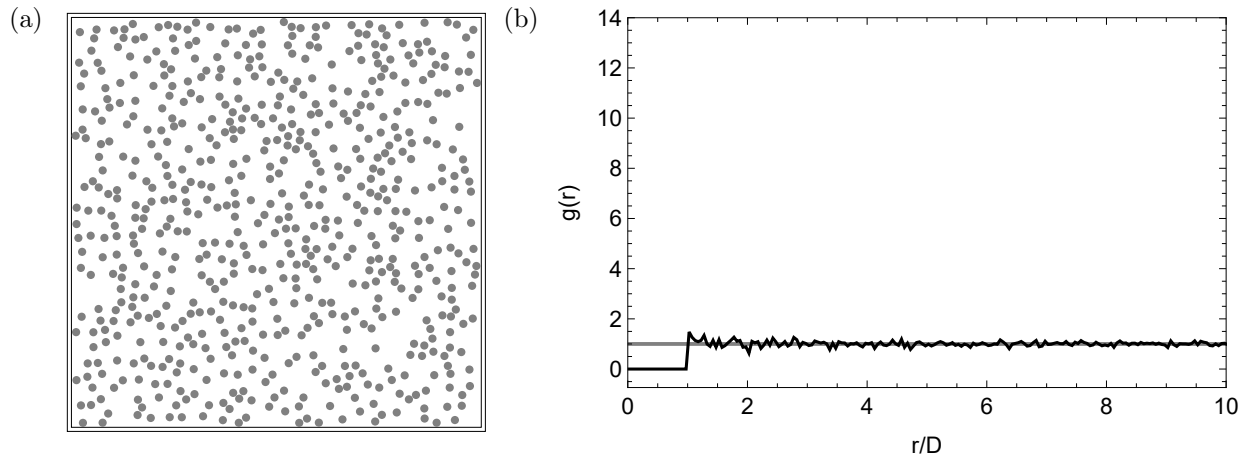


FIGURE 3.10 – (a) Instantané d'un ensemble de 640 particules placées aléatoirement. (b) Fonction de distribution radiale associée à l'instantané dont la distance r est normalisée par la taille du diamètre des particules D .

quand des grappes commencent à se former présente plusieurs pics bien définis. Le pic le plus important, situé à une distance d'un diamètre, est lié à la présence de voisins directs aux particules. Le deuxième pic le plus important, situé à une distance de deux diamètres, est également lié à la ségrégation qui est en train de se produire. Cependant, à une distance légèrement inférieure à deux diamètres, un autre pic est observable. Celui-ci provient des grappes denses qui forment des réseaux hexagonaux. Dans ce réseau, les deuxièmes voisins sont situés à une distance de $\sqrt{3}D \approx 1.73D$, ce qui explique la présence de ce pic. Les autres pics sont également liés à la structure générale du système, liés quant à eux aux voisins successifs du réseau.

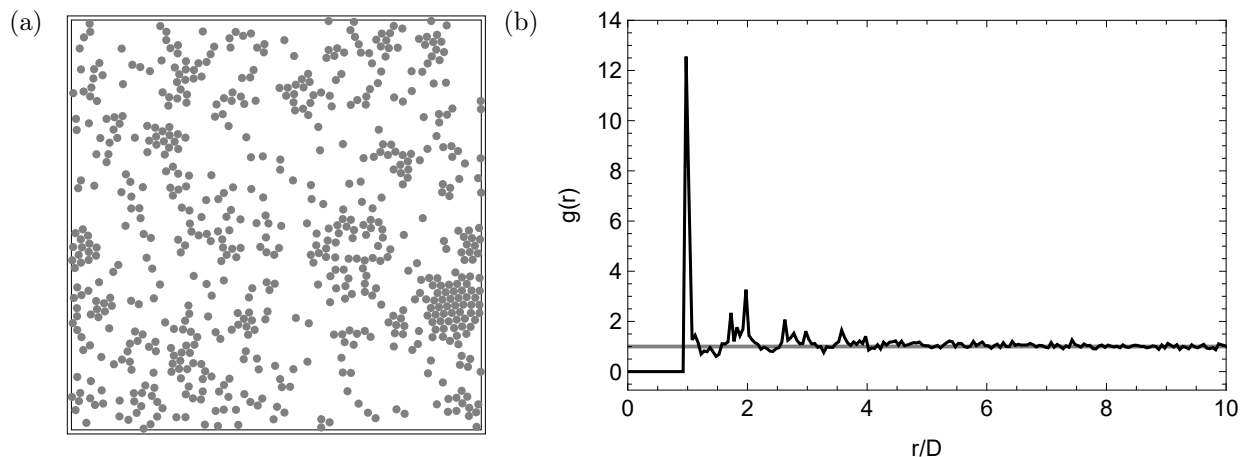


FIGURE 3.11 – (a) Instantané d'un ensemble de 640 particules commençant à former des grappes à cause de leur motilité. (b) Fonction de distribution radiale associée à l'instantané dont la distance r est normalisée par la taille du diamètre des particules D .

Pour avoir de meilleurs résultats, des moyennes au cours du temps seront calculées à partir d'un moment où l'on considère que les conditions initiales, où l'ensemble des particules sont

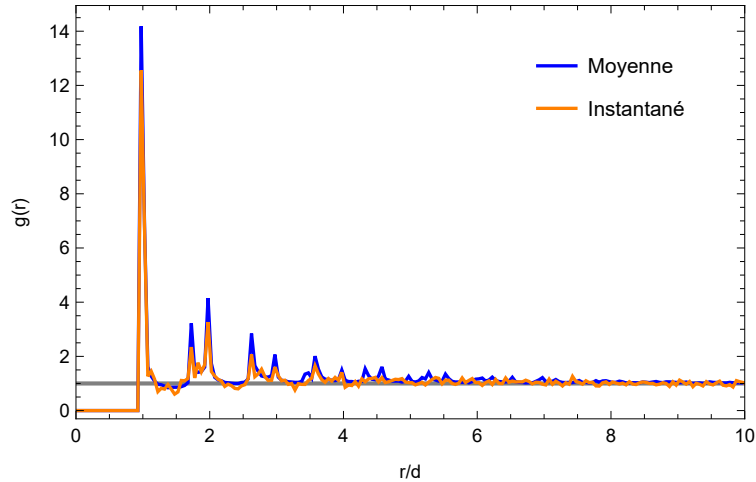


FIGURE 3.12 – Comparaison entre la fonction de distribution radiale basée sur un instantané ou sur la moyenne temporelle d’une partie de la simulation effectuée.

placées aléatoirement, n’a plus d’impact direct sur les structures observées au cours de la simulation.

Cette comparaison est montrée dans la figure 3.12. La moyenne offre l’avantage évident de rendre la fonction plus propre et plus lisible, dépendant moins de l’aléatoire de la simulation et des conditions initiales. Elle permet également de s’assurer qu’un événement spécifique n’affecte ni trop ni trop peu la fonction. Ce point est crucial sachant que certains phénomènes, et particulièrement les MIPS, ne sont pas permanents et peuvent beaucoup varier au cours d’une simulation.

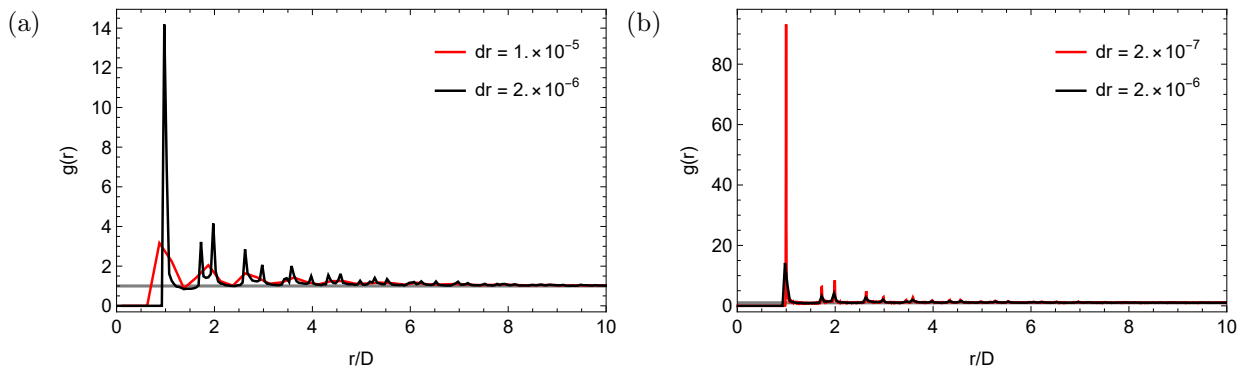


FIGURE 3.13 – (a) Comparaison entre la moyenne temporelle de la fonction de distribution radiale dont la taille de classes dr varie, avec dr faible en rouge et dr moyen en noir. (b) Comparaison entre la moyenne temporelle de la fonction de distribution radiale dont la taille de classes dr varie, avec dr élevé en rouge et dr moyen en noir.

Un autre facteur important dans le calcul des RDFs est la taille des classes dr , qui est un choix totalement arbitraire. Si la taille de ces classes est trop grande, beaucoup d’informations sont perdues, et les pics ne sont plus forcément identifiables (figure 3.13a). Si la taille des classes est très petite, les pics seront très visibles et facilement différenciables, mais certaines

informations pourront être plus difficiles à observer. Par exemple, dans la figure 3.13b, la valeur atteinte par la fonction entre les deux premiers pics est inférieure à un, ce qui veut dire que la probabilité qu’une particule se trouve entre ces deux distances est plus faible que si le système était un gaz parfait, mais ce n’est pas observable à cause de l’échelle. Ce problème pourrait être résolu en utilisant une échelle logarithmique, mais il devient alors plus difficile d’interpréter le rapport de taille des pics.

La taille des classes n’ayant pas d’influence sur le temps de calcul nécessaire pour effectuer ces mesures, ce choix est donc uniquement lié à la lisibilité des résultats fournis. Cependant, il est important de conserver ce paramètre dr constant au cours des différentes simulations si l’on veut les comparer. De ce fait, le choix arbitraire de $dr = 2 \times 10^{-6}$ m, ce qui représente un millième de la longueur du système, a été effectué.

De plus, dans le cadre d’un mélange de deux populations de particules distinctes, quatre fonctions de corrélation différentes peuvent être définies, et vont donner des informations différentes sur l’organisation de ces deux types de particules. Vu que la caractéristique principale qui diffère entre les deux populations qui seront étudiées est la propulsion, la population sans autopropulsion est appelée passive (p) et la population avec autopropulsion est appelée active (a).

- $g_p(r)$: Fonction de corrélation uniquement pour les particules passives. Permet de savoir si cette population forme des structures précises uniquement avec d’autres particules du même type.
- $g_a(r)$: Fonction de corrélation uniquement pour les particules actives. Permet de savoir si cette population forme des structures précises uniquement avec d’autres particules du même type.
- $g_{ap}(r)$: Fonction de corrélation pour les paires de particules de type différent. Permet de savoir si l’interaction effective est attractive ou répulsive à certaines distances entre les deux populations.
- $g(r)$: Fonction de corrélation pour l’ensemble des particules. Permet de savoir si l’ensemble des particules forment une structure particulière.

Un exemple de ces différentes fonctions de corrélation est présenté dans la figure 3.14b. Dans ce cas précis, les différentes fonctions ont la même allure générale, mais avec des intensités globales différentes. Cela peut s’expliquer par le fait que l’ensemble du système a tendance à s’organiser selon un réseau hexagonal. La fonction de corrélation liée aux particules actives a l’intensité la plus importante car les particules actives sont le moteur de cette cristallisation, elles ont donc plus tendance à former ce réseau particulier que les particules passives. Puisqu’on observe la formation de grappes composées des deux types de particules, la fonction de corrélation g relative à l’ensemble des particules ressemble également à la fonction de corrélation d’un réseau hexagonal, d’intensité intermédiaire entre g_a et g_p . La fonction de corrélation g_{ap} a également la même allure, car la cristallisation est commune entre les deux types de particules.

Afin de comparer rapidement un grand nombre de simulations rapidement, différentes caractéristiques de ces fonctions peuvent être interprétées. Ce sera particulièrement le cas

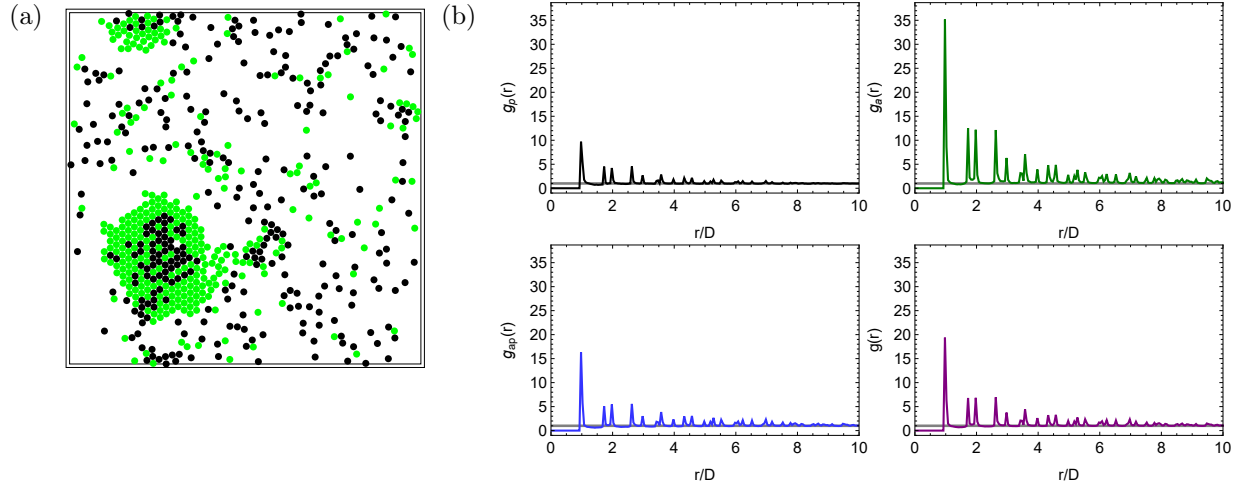


FIGURE 3.14 – (a) Instantané d’une simulation se cristallisant. (b) Différentes fonctions de corrélation liées à l’instantané.

pour l’intensité des deux pics les plus élevés de chaque fonction, qui seront utilisés comme indices pour évaluer la cristallisation et la ségrégation des particules du système.

Les couleurs utilisées dans cette section seront conservées pour l’ensemble des graphiques et instantanés de simulations dans l’ensemble de ce mémoire. Ce code couleur est présenté explicitement ci-dessous.

- Noir : particules passives.
- Vert : particules actives.
- Bleu : lien entre les particules actives et passives.
- Mauve : intégralité des particules.

3.2.2 Indice de ségrégation

La variance peut s’avérer être un bon indicateur de ségrégation [12]. Celle-ci va être utilisée de deux manières différentes pour analyser les différentes simulations effectuées. Cet indicateur signifiera que le système est relativement homogène s’il est faible, et que le système présente une ségrégation importante s’il est élevé. D’une part, la variance quant à l’occupation de l’espace de différentes boîtes carrées définies dans le système est une première possibilité. La comparaison par rapport à l’occupation théorique moyenne de celles-ci permet de définir un indice de ségrégation spatiale. D’autre part, la variance de la proportion d’une population dans ces boîtes carrées par rapport à la proportion théorique d’un système équivalent et homogène permet de définir un indice de ségrégation des populations.

Indice de ségrégation spatiale

Cet indice de ségrégation se base sur les disparités de présence des particules dans différentes cases du système. Il peut être calculé pour chaque type de particules séparément, mais également pour la totalité des particules. Cet indice sera alors nommé M_a , M_p ou M en

fonction des populations choisies. La démarche étant la même pour chacun de ces indices, une seule démarche pour un ensemble de particules i sera présentée. Ce processus est constitué de quatre étapes, et requiert le choix d'un nombre de classes b pour répartir les particules, en l'occurrence $b = 25$ permet de définir 5x5 boîtes.

1. Répartition des particules dans chacune des boîtes dans un histogramme en 2D.
2. Calcul de la différence entre le nombre de particules dans une boîte et le nombre moyen de particules $\langle n \rangle$ censées être présentes si les particules étaient organisées de manière homogène.
3. Calcul de l'écart-type grâce à cette différence.
4. Normalisation par la valeur maximale $M_{i,max}$ possible selon les conditions, afin d'avoir un indice compris entre 0 et 1.

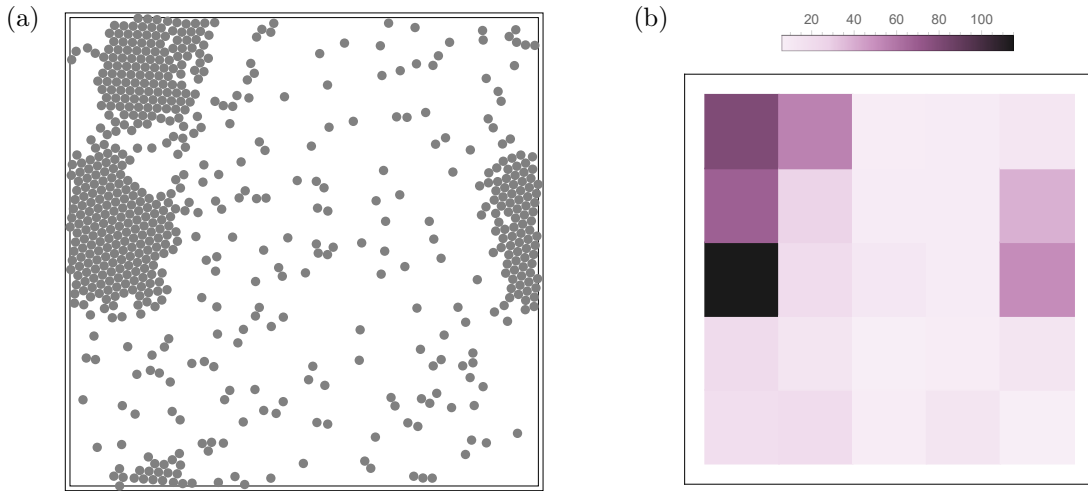


FIGURE 3.15 – (a) Instantané d'un moment de la simulation utilisée pour calculer un indice de ségrégation spatiale global. (b) Répartition en cellules des particules de l'instantané dans le but de calculer un indice de ségrégation spatiale global.

La première étape est illustrée dans la figure 3.15b, pour l'instantané 3.15a qui servira d'exemple. Le calcul de l'indice de ségrégation est illustré explicitement dans l'équation 3.41, où la somme est effectuée sur l'ensemble des boîtes définies.

$$M_i = \sqrt{\sum_{j=1}^b \frac{(n_j - \langle n \rangle)^2}{b-1}} M_{i,max}^{-1} \quad (3.41)$$

Il reste à déterminer la valeur de $M_{i,max}$, afin d'obtenir un indice de ségrégation normalisé. Pour ce faire, il faut imaginer le cas extrême qui induirait une ségrégation maximale. Cela se produit si toutes les particules se trouvent dans le nombre de boîtes le plus faible possible, laissant les autres vides. Dans ce cas, il y aurait alors trois types de termes dans la somme effectuée, relatifs à des boîtes totalement remplies, une boîte partiellement remplie et des boîtes totalement vides. Connaissant la surface d'une particule, la surface totale du

système et le nombre de particules, il est possible de déterminer le nombre de boîtes totalement remplies et vides. Il faut noter que la densité maximale atteinte pour le remplissage d'une surface par des cercles n'est que de $\eta = \pi/2\sqrt{3} \approx 0.907$ [56]. Les caractéristiques du système seront R le rayon des particules, n le nombre de particules, l la longueur d'une des dimensions du système et b le nombre total de boîtes.

- Aire d'une particule $a = \pi R^2$
 - Aire d'une boîte $S = (l/b)^2$
1. Il est possible de mettre $n_b = S\eta/a$ particules dans une boîte.
 2. Le nombre b_f de boîtes occupées par ces particules est l'entier inférieur ou égal à n/n_b .
 3. La boîte partiellement occupée devrait contenir $n_h = n - b_f n_b$ particules.
 4. Le nombre de boîtes vides est le nombre restant de boîtes $b_e = b - b_f - 1$.

L'ensemble de ces considérations permet de déterminer M_{max} par la définition 3.42.

$$M_{i,max} = \sqrt{\frac{b_f(n_b - \langle n \rangle)^2 + (n_h - \langle n \rangle)^2 + b_e(0 - \langle n \rangle)^2}{b - 1}} \quad (3.42)$$

Dans l'exemple issu de l'instantané 3.15a, l'indice de ségrégation non normalisé M_{not} , l'indice de ségrégation maximal M_{max} et l'indice de ségrégation final M peuvent être déterminés.

$$M_{not} = 37.4163 \quad (3.43)$$

$$M_{max} = 53.7382 \quad (3.44)$$

$$\implies M = 0.696269 \quad (3.45)$$

Cette valeur relativement supérieure à 0.5 indique bien que la ségrégation est importante, comme cela peut facilement être observé dans l'instantané de la figure 3.15a.

Indice de ségrégation des populations

Contrairement à l'indice précédent, celui-ci se concentre sur la manière dont deux populations sont mélangées. Il est donc nécessaire que deux populations soient en présence dans le système. Cet indice, lié aux mélanges de deux populations, une active et une passive, sera nommé M_{ap} . Ce processus est constitué de cinq étapes, et requiert le choix d'un nombre de classes b pour répartir les particules, en l'occurrence $b = 25$ permet de définir 5x5 boîtes. Le système est constitué de n_a particules actives, n_p particules passives, et donc $n = n_a + n_p$ particules au total.

1. Répartition des deux types de particules dans chacune des boîtes dans deux histogrammes en 2D.
2. Calcul de la proportion de particules actives par rapport au nombre total de particules dans chacune des boîtes.
3. Calcul de la différence entre cette proportion et la proportion moyenne n_a/n de particules censées être présentes si les particules étaient organisées de manière homogène.

4. Calcul de l'écart-type grâce à cette différence.
5. Normalisation par la valeur maximale $M_{ap,max}$ possible selon les conditions, afin d'avoir un indice compris entre 0 et 1.

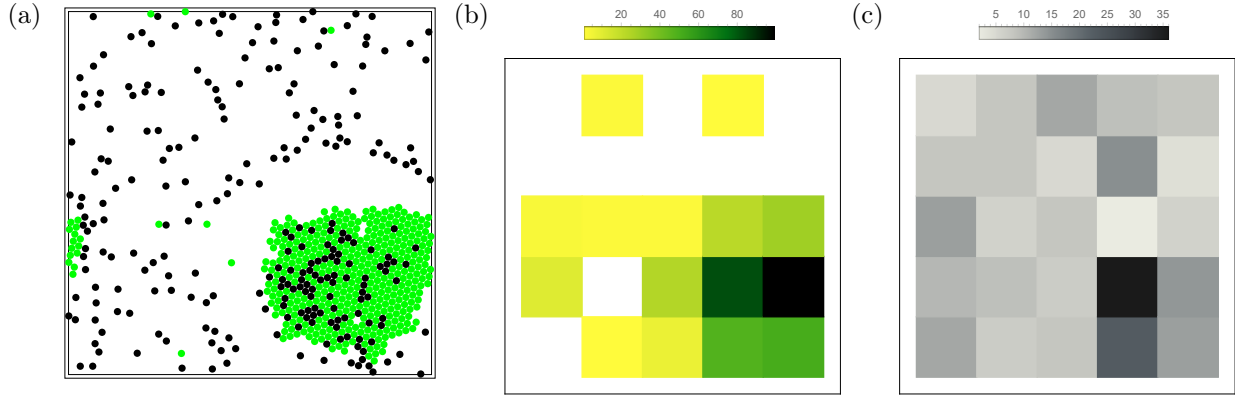


FIGURE 3.16 – (a) Instantané d'un moment de la simulation utilisée pour calculer un indice de ségrégation des populations. (b) Répartition en cellules des particules actives de l'instantané. (c) Répartition en cellules des particules passives de l'instantané.

La première étape est illustrée dans les figure 3.16b et 3.16c, pour l'instantané 3.16a qui servira d'exemple. Le calcul de l'indice de ségrégation est illustré explicitement dans l'équation 3.46, où la somme est effectuée sur l'ensemble des boîtes définies. Si aucune particule n'est présente dans une boîte, le terme total de la somme est considéré comme nul pour éviter de diviser par zéro ou de contribuer à la ségrégation sans que cela ne soit justifié.

$$M_{ap} = \sqrt{\sum_{j=1}^b \frac{\left(\frac{n_{a,j}}{n_{a,j}+n_{p,j}} - \frac{n_a}{n_a+n_p}\right)^2}{b-1}} M_{ap,max}^{-1} \quad (3.46)$$

Il reste à déterminer la valeur de $M_{ap,max}$, afin d'obtenir un indice de ségrégation normalisé. Pour ce faire, il faut imaginer le cas extrême qui induirait une ségrégation maximale. Cela se produirait si la population la plus faible en nombre occupe de manière la plus dense un minimum de boîtes, et que la population la plus importante en nombre occupe l'ensemble des autres boîtes. Postulons que le nombre de particules actives est supérieur au nombre de particules passives, comme dans l'exemple présenté.

- Aire d'une particule $a = \pi R^2$
 - Aire d'une boîte $S = (l/b)^2$
1. Il est possible de mettre $n_{p,b} = S\eta/a$ particules passives dans une boîte.
 2. Le nombre minimal b_p de boîtes occupées par les particules passives est l'entier supérieur ou égal à $n_p/n_{p,b}$.
 3. Le nombre de boîtes occupées par les particules passives vaut donc $b_a = b - b_p$

L'ensemble de ces considérations permet de déterminer $M_{ap,max}$ par la définition 3.47.

$$M_{ap,max} = \sqrt{\frac{b_a \left(1 - \frac{n_a}{n_a+n_p}\right)^2 + b_p \left(0 - \frac{n_a}{n_a+n_p}\right)^2}{b-1}} \quad (3.47)$$

Dans l'exemple issu de l'instantané 3.16a, l'indice de ségrégation non-normalisé $M_{ap,not}$, l'indice de ségrégation maximal $M_{ap,max}$ et l'indice de ségrégation final M_{ap} peuvent être déterminés.

$$M_{ap,not} = 0.457553 \quad (3.48)$$

$$M_{ap,max} = 0.584523 \quad (3.49)$$

$$\implies M_{ap} = 0.782781 \quad (3.50)$$

Ce résultat élevé est logique en interprétant la position des particules de chacune des populations de l'instantané 3.16a. En effet, une grappe contenant la presque totalité des particules actives englobe certaines particules passives, mais nombre d'entre elles se situent en dehors de cette grappe. Les deux populations sont donc très séparées, ce qui est en accord avec un indice de ségrégation élevé.

Comparaison

Il est intéressant de comparer les valeurs que prennent les différents indices de ségrégation définis, et comment leurs valeurs expriment différents phénomènes. Cette comparaison se fera à l'aide des exemples illustrés dans la figure 3.17.

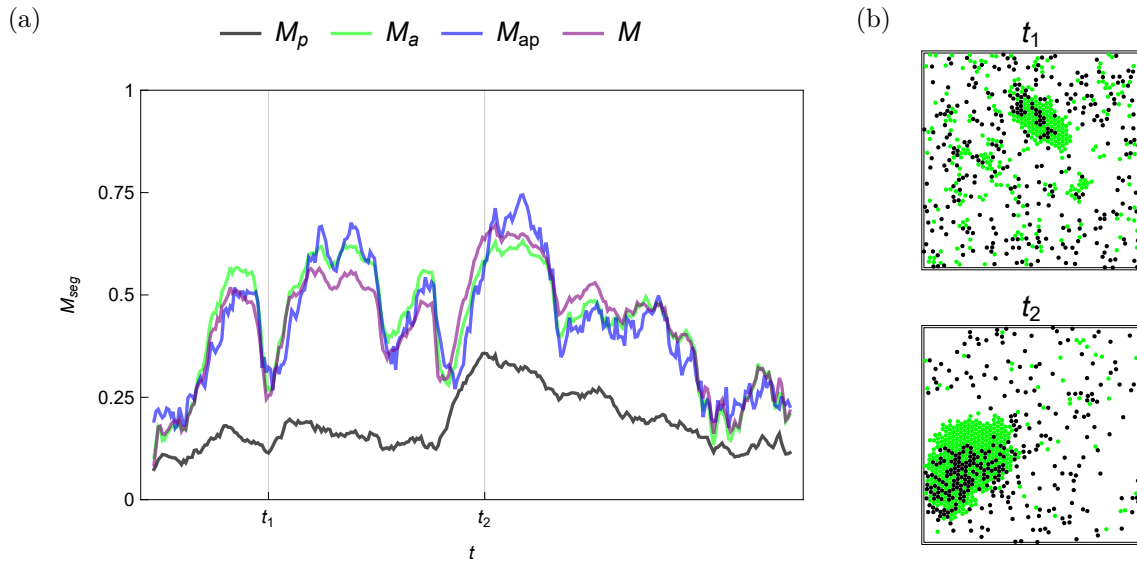


FIGURE 3.17 – (a) Différents indices de ségrégation au cours du temps, avec mise en évidence de deux moments t_1 et t_2 particuliers. (b) Instantanés nommés t_1 et t_2 , qui présentent une ségrégation respectivement faible et élevée.

On peut aisément observer que dans cet exemple, les quatre indices de ségrégation évoluent de manière similaire. C'est particulièrement le cas pour les indices M_a , M_{ap} et M , qui en plus d'évoluer de manière semblable, ont des valeurs relativement proches. La différence de valeurs entre ces trois indices et l'indice M_p peut s'expliquer en analysant les instantanés. Les particules passives subissent une ségrégation spatiale grâce à la cristallisation des particules actives dans les exemples présentés. Ce phénomène est donc plus faible, avec un

nombre significatif de particules passives occupant de manière approximativement homogène une grande partie de l'espace. On observe également qu'une valeur faible pour l'indice de ségrégation est synonyme de faible ségrégation, et inversement. Ces indices de ségrégation sont donc de bons indicateurs pour les simulations effectuées.

Remarques

Bien qu'étant des indices intéressants à analyser pour déterminer différentes caractéristiques de la ségrégation dans le système étudié, la dépendance au choix arbitraire de boîtes pour classer les particules a une grande influence sur les résultats obtenus. Cela se manifeste notamment par deux facteurs, la taille des boîtes ainsi que leur position.

La taille des boîtes a un effet évident sur les résultats. Cela s'observe facilement en considérant deux cas extrêmes. Si une seule boîte faisant la taille du système est choisie, tous les indices de ségrégation donneront une valeur nulle, étant donné que le système dans sa globalité contient forcément le nombre moyen de chaque particule dans le système. Si énormément de boîtes ne pouvant être occupées par une seule particule sont choisies, alors l'indice de ségrégation sera toujours maximal peu importe l'état du système dans son ensemble.

De plus, la densité de particules dans le système doit également rentrer en compte dans le choix de la taille des boîtes. En effet, des boîtes de relativement petite taille, de l'ordre de la dizaine de rayons des particules, donnent des résultats intéressants sur la ségrégation. Néanmoins, pour des systèmes assez peu denses, ce choix ne donnera plus de résultats en accord avec les observations. Des boîtes de plus grande taille, dans lesquelles nous pouvons nous assurer qu'une grande partie de celles-ci seront occupées par des particules, donneront des résultats ayant plus de sens par rapport au système [12].

Étant donné la densité relativement faible des systèmes étudiés dans le cadre de ce travail, de grandes boîtes seront utilisées, mais le choix de leur taille reste tout de même arbitraire. Ces résultats pourraient être améliorés en effectuant la moyenne de résultats obtenus avec des boîtes de tailles différentes, mais cela n'a pas été réalisé dans les résultats ci-présentés à cause du temps requis pour effectuer ces moyennes.

La position des boîtes a également un impact très important sur les résultats. Prenons par exemple le cas d'un disque très dense incluant toutes les particules situées au centre d'un système découpé en quatre boîtes. Il est évident que l'indice de ségrégation spatiale devrait être très élevé. Cependant, si ce disque de particules est situé parfaitement à l'intersection des quatre boîtes, l'indice de ségrégation calculé sera nul, puisqu'un nombre équivalent de particules à la moyenne dans le système se situera dans chacune des boîtes.

Bien qu'étant un cas extrême, ce genre de phénomène rend les résultats très variables au cours du temps. Cela peut s'améliorer en effectuant la moyenne des résultats obtenus avec des boîtes disposées différemment. Ce déplacement de boîtes a beaucoup de sens sachant que les conditions de bords sont périodiques, et que des particules fictives se trouvent au-delà des limites du système réel. Cette méthode a été employée pour améliorer les résultats de cet indice de ségrégation.

3.2.3 Moyenne de la taille des clusters

Sachant qu'un phénomène prédominant au cours de toutes les simulations effectuées est la séparation de phase induite par motilité, évaluer le nombre de particules d'un certain type formant une seule et même phase peut être un bon indicateur de la ségrégation dans le système. Il permet également d'étudier la taille moyenne des structures formées. Dans le cadre de ce travail, c'est cette dernière utilisation qui sera particulièrement utile.

Les phases peuvent être déterminées à partir de la position des particules. Des particules assez proches sont considérées comme voisines. Une marge d'un cinquième du rayon des particules est fixée pour considérer deux particules voisines. En connaissant les voisins de chaque particule, il est possible de successivement étendre les particules qui sont voisines pour obtenir les grappes de particules.

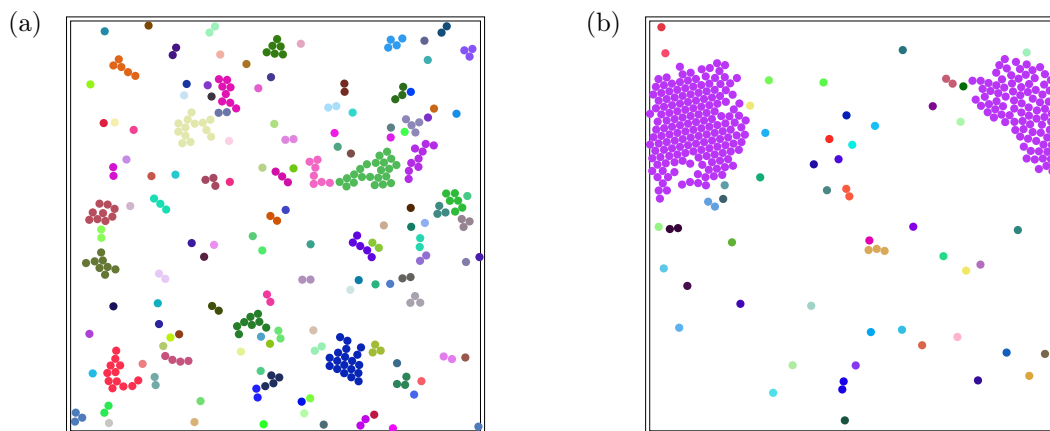


FIGURE 3.18 – Deux instantanés où chaque grappe de particules est représentée avec une couleur différente.

Une représentation visuelle de ces groupes de particules est illustrée dans les deux instantanés de la figure 3.18. Grâce à cette méthode, chaque particule i est associée à un groupe de particules composé de C_i particules différentes, qui sont l'ensemble des particules de même couleur. Il est donc possible d'effectuer une moyenne pour chacune des n particules constituant une population, avec la taille de la grappe C_i associée à la particule i . Cette valeur obtenue représente la moyenne de la taille des grappes, allant de 1 si toutes les particules sont éloignées les unes des autres, jusqu'à n si toutes les particules forment une seule grappe.

Le désavantage de cette définition est qu'elle n'est pas normalisée. Pour ce faire, il suffit de diviser la moyenne par le nombre de particules n . Un indicateur variant entre $1/n$ et 1 est alors obtenu. Cet indicateur, la moyenne normalisée de la taille des clusters, est défini dans l'équation 3.51.

$$\langle c \rangle = \sum_i^n \frac{C_i}{n^2} \quad (3.51)$$

En observant cet indicateur, l'ampleur des phénomènes peut alors être aisément déterminée. Par exemple, à l'aide de la figure 3.19, les moments où des clusters de particules actives

sont formés sont liés à des valeurs très élevées de $\langle c_a \rangle$, alors que les moments où les clusters se brisent sont liés à des valeurs faibles de $\langle c_a \rangle$. De plus, en t_2 , il est évident que les particules passives sont rassemblées par les particules actives, puisque la valeur de $\langle c_p \rangle$ est élevée.

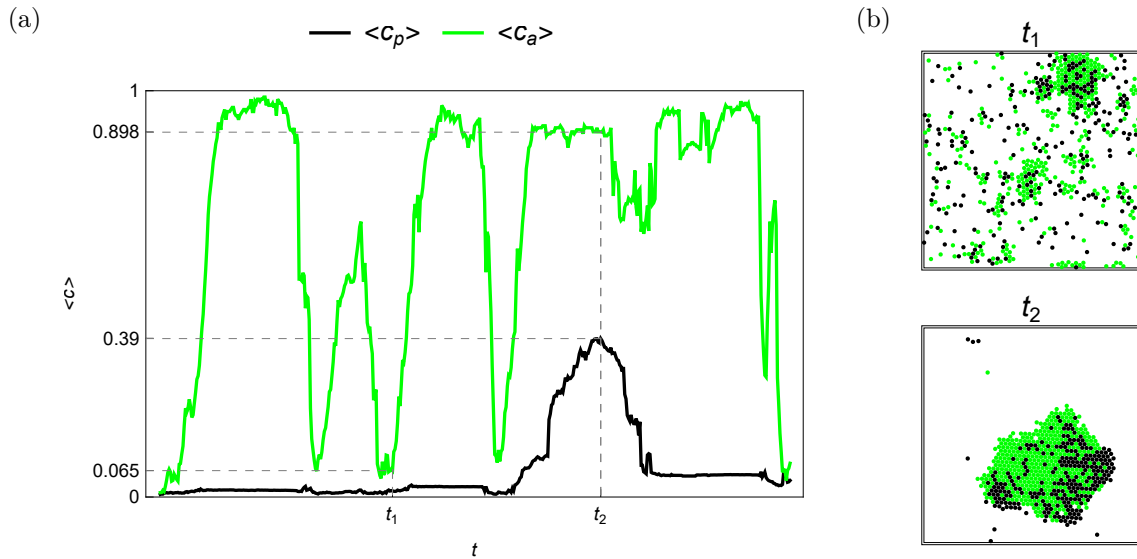


FIGURE 3.19 – (a) Évolution des moyennes normalisées de la taille des clusters au cours d’une simulation de 384 particules actives (vert) et 256 particules passives (noir), durant laquelle des clusters de chaque population se brisent (t_1) et se forment (t_2). (b) Instantanés nommés t_1 et t_2 , qui présentent une formation de clusters respectivement faible et élevée.

Chapitre 4

Résultats

4.1 Introduction

4.1.1 Paramètres

Beaucoup de paramètres ont une influence sur l'ensemble des phénomènes présentés dans cette section portant sur les résultats des simulations effectuées. Il est donc nécessaire de fixer certaines caractéristiques pour l'ensemble des simulations, et de faire varier seulement une sélection de caractéristiques clés.

Rayon des particules actives	R_a	2×10^{-5} m
Rayon des particules passives	R_p	2×10^{-5} m
Coefficient de diffusion translationnel	D_T	10^{-10} m ² s ⁻¹
Coefficient de diffusion rotationnel	D_R	0.1875 s ⁻¹
Viscosité dynamique du fluide	η	10^{-4} Pa s
Coefficient de frottement cinétique	μ	0.6
Coefficient de restitution	ϵ	0.6

TABLE 4.1 – Liste des caractéristiques constantes pour toutes les simulations avec leur valeur.

L'influence de trois paramètres va être particulièrement étudiée quant à leur impact sur la ségrégation et le déplacement des particules passives. Ces paramètres sont :

- La concentration de particules actives dans le système ϕ_a .
- La concentration de particules passives dans le système ϕ_p .
- La vitesse limite des particules actives v_a .

Faire varier ces paramètres a pour conséquence directe de faire évoluer deux autres pa-

ramètres, la concentration totale de particules ϕ_0 et le nombre de Péclet Pe .

D'une part, la variation de la concentration totale a un réel impact sur les résultats obtenus, comme cela sera discuté. Alors que ϕ_a et ϕ_p représentent les concentrations, il est également possible de définir la fraction de présence d'une population par rapport à l'ensemble des particules. On les nomme x_a et x_p , avec $\sum_i x_i = 1$, et ils seront utilisés dans le cas où la concentration totale est constante, mais où les concentrations des populations varient.

D'autre part, la variation du nombre de Péclet n'est qu'un équivalent de la variation de la vitesse v_a à une constante multiplicative près. Le nombre de Péclet, étant une grandeur adimensionnelle, sera utilisé en priorité par rapport à la vitesse.

4.1.2 Remarques

Vu la nature statistique de l'ensemble des phénomènes observés lors des simulations effectuées, il est nécessaire de conduire plusieurs fois une même simulation dans des conditions similaires pour s'assurer qu'un événement peu probable n'influence pas trop les résultats obtenus.

De manière générale, trois simulations différentes ont été conduites pour chaque type de simulation effectuée. La différence majeure entre ces trois simulations est donc tout ce qui est relatif à l'aléatoire, soit les conditions initiales des particules et les mouvements browniens. Cela permet d'effectuer la moyenne des analyses effectuées. L'écart-type des résultats des analyses permet d'évaluer si un phénomène donné est bien présent dans chaque simulation de manière équivalente ou non. Si cet écart-type n'est pas mentionné, cela veut dire que son importance est minime par rapport aux résultats énoncés.

Il n'est cependant pas forcément cohérent d'effectuer la moyenne de résultats d'analyse pour tous les types de résultats.

Par exemple, effectuer la moyenne sur plusieurs simulations des fonctions de distribution radiale obtenues donnera une fonction qui aura du sens, puisque la fonction de distribution radiale est calculée sur une partie temporelle de la simulation.

Par contre, effectuer la moyenne sur plusieurs simulations des indices de ségrégation ou de la taille des clusters au cours du temps ne donnera pas une fonction qui représentera des phénomènes particuliers au cours du temps, vu la nature instable de ces fonctions. Cette moyenne sur plusieurs simulations peut cependant être utilisée sur la moyenne temporelle de ces indicateurs.

4.2 Obstacles statiques

Une première piste permettant de favoriser la ségrégation est la disposition particulière d'obstacles statiques. Les particules actives ne réagissant pas de la même manière lors des contacts avec ce type d'objets, il est possible de contrôler leur déplacement. Cependant, l'efficacité de ce type de configuration dépend des caractéristiques des particules, et également de la manière dont les obstacles sont disposés.

4.2.1 Implémentation

Afin d'ajouter ces obstacles, un nouveau type d'objet a été introduit dans les simulations. Ces objets sont définis par des segments de droite reliés par deux points donnés, et permettent de repousser toute particule se trouvant sur cette droite. Un mur μ est défini à partir de sa longueur l , de la position de son centre $C : (x_c, y_c)$ ainsi que de l'angle qu'il formerait dans un cercle trigonométrique θ . Cette définition permet de déduire la position des deux extrémités $E_1 : (x_1, y_1)$ et $E_2 : (x_2, y_2)$, des composantes du vecteur unitaire normal au mur \hat{n} et du vecteur unitaire tangent au mur \hat{t} .

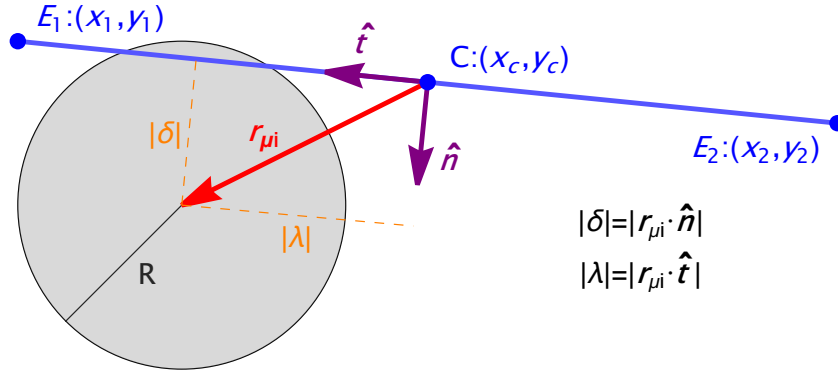


FIGURE 4.1 – Représentation des différentes grandeurs nécessaires à la détermination d'un contact entre une particule et un obstacle statique.

Afin d'appliquer une force permettant de repousser les particules se trouvant sur le mur défini, le même type de calculs que pour les collisions entre particules est à implémenter, avec quelques ajustements. Les grandeurs importantes, ainsi que les définitions de δ et λ , sont indiquées dans la figure 4.1.

- La condition pour que le contact soit établi doit être modifiée. Cette condition va dépendre des projections du vecteur liant la particule et le milieu du mur $\mathbf{r}_{\mu i}$ sur le vecteur normal et le vecteur tangent :
 - $|\delta|$ doit être inférieure au rayon R de la particule,
 - $|\lambda|$ doit être inférieure à la moitié de la longueur l de l'obstacle.
- Pour éviter d'avoir des discontinuités dans la force de répulsion pour une particule rentrant en contact avec le mur par une extrémité, une répulsion radiale est ajoutée entre la particule et l'extrémité concernée si $|\lambda|$ a une valeur entre $l/2$ et $l/2 + R$, avec R le rayon de la particule.
- L'obstacle étant statique et n'ayant pas de masse définie, la masse effective sera simplement égale à la masse de la particule.

4.2.2 Simulations

Différentes configurations d'obstacles statiques permettent la ségrégation de populations de particules actives et passives. L'utilisation d'obstacles en forme d'entonnoirs (funnels) per-

met notamment de favoriser le déplacement de particules actives dans une direction donnée, comme montré numériquement [33] et expérimentalement [32]. Reproduire ces expériences avec des simulations numériques basées sur la méthode présentée permet de valider celle-ci dans un cas concret, et d'étendre le champ des possibilités pour la ségrégation de populations de particules.

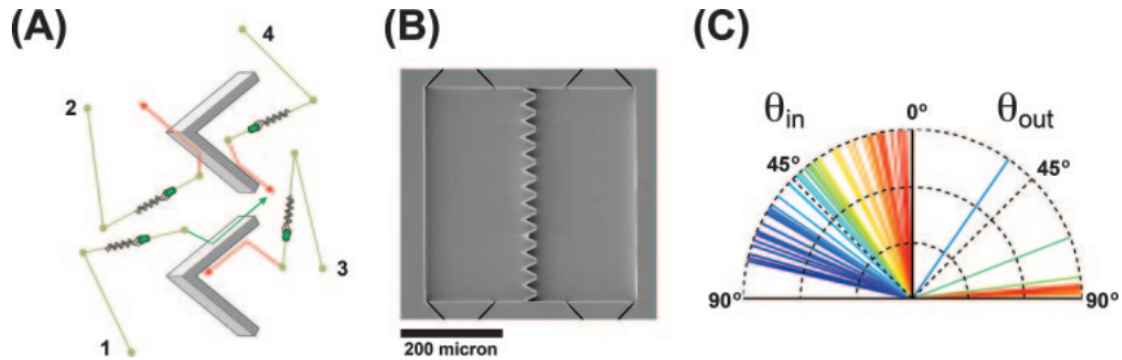


FIGURE 4.2 – (A) Représentation de trajectoires possibles pour une particule active rentrant en contact avec un entonnoir. (B) Dispositif expérimental. (C) Angles incidents des trajectoires d'un échantillon de particules passant dans le sens favorisé des entonnoirs ($\theta < 90^\circ$) et dans le sens défavorisé ($\theta > 90^\circ$). [32]

Chaque entonnoir est constitué de deux murs rectilignes de même longueur, dont une extrémité est commune et qui forment ainsi un angle α . Afin d'obtenir des résultats comparables à ceux provenant des deux articles cités, cette valeur a été fixée à 60° . Cette rupture de symétrie permet de favoriser le passage des particules actives dans un sens choisi, comme observable dans la figure 4.2.

Les dimensions des entonnoirs ont également un impact sur l'efficacité du phénomène. Cependant, cette influence ne sera pas étudiée, et des conditions similaires à celles utilisées par Wan et al. [33] ont été utilisées. Un nombre défini de particules actives et/ou passives sont placées aléatoirement dans une boîte carrée, dans laquelle une succession d'entonnoirs sont placés verticalement au milieu. Les conditions de bords étant périodiques, deux murs sont placés sur les côtés gauche et droit de la boîte, afin d'éviter que des particules passent d'un côté à l'autre de la boîte sans passer par les entonnoirs. Afin d'observer ce flux, la grandeur étudiée va être le rapport entre la concentration effective $\rho_i^{(d)}$ d'une population i dans une moitié (d) du système et la concentration moyenne ρ_i^0 d'une population i si cette population était répartie de manière homogène.

Si toutes les particules sont passives, aucun phénomène n'est observé (figure 4.3). Sachant que les particules passives ne se déplacent que par agitation brownienne, peu de particules vont entrer en contact avec les entonnoirs. Et puisque la direction dans laquelle elles se déplacent change à chaque pas de temps, les particules ne vont pas glisser le long des parois. L'observation est donc cohérente par rapport à ce raisonnement.

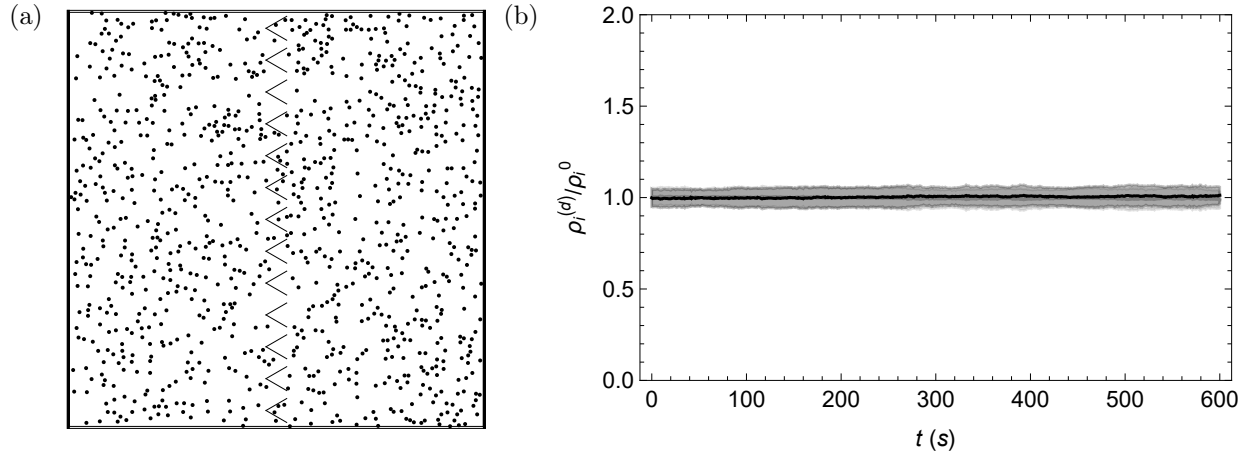


FIGURE 4.3 – (a) Instantané après 10 minutes de 1000 particules passives ($Pe = 0$) triées par un ensemble d'entonnoirs. (b) Rapport des concentrations effectives et homogènes de la population passive à gauche (en gris) et à droite (en noir) au cours du temps, avec l'écart-type de la moyenne sur trois simulations.

Cependant, si toutes les particules sont actives ($Pe = 92.38$), le phénomène de ségrégation est observable (figure 4.4). La probabilité qu'une particule passe de gauche à droite étant plus importante que l'inverse grâce à la rupture de symétrie, un flux net de particules dans le sens favorisé prend place. Il est néanmoins intéressant de comprendre l'ensemble des phénomènes qui se produisent au fil du temps lors de la ségrégation dans les simulations effectuées.

Au début de la simulation (figure 4.5a), puisque les particules ont été placées aléatoirement, certaines particules passent par les entonnoirs, et d'autres sont coincées à l'intérieur de ceux-ci.

Après une dizaine de secondes (figure 4.5b), deux phénomènes distincts dominent le comportement des particules. D'une part, les particules essayant de passer d'un côté à l'autre des entonnoirs arrivent majoritairement à passer dans un sens, et sont majoritairement piégées dans l'autre. D'autre part, les particules actives commencent à s'accumuler le long des obstacles à gauche et à droite du système. Ce phénomène s'observe pour toute population de particules actives entre des parois rectilignes [28].

Après plusieurs minutes (figure 4.5c), les particules sur les couches extérieures de la grappe qui s'accumulaient sur la paroi du côté gauche des entonnoirs s'échappent progressivement de cette paroi, et ont alors une probabilité importante de finir par passer de l'autre côté des entonnoirs. Cependant, les particules de la partie droite ont toujours peu de chances de passer par les entonnoirs. La concentration de particules se situant à droite continue donc d'augmenter.

Finalement (figure 4.4a), un équilibre dépendant de l'ensemble des caractéristiques du système s'installe, dans lequel une grande partie des particules se trouvent dans une des deux moitiés du système.

L'impact d'une telle configuration sur un mélange de particules actives et passives est

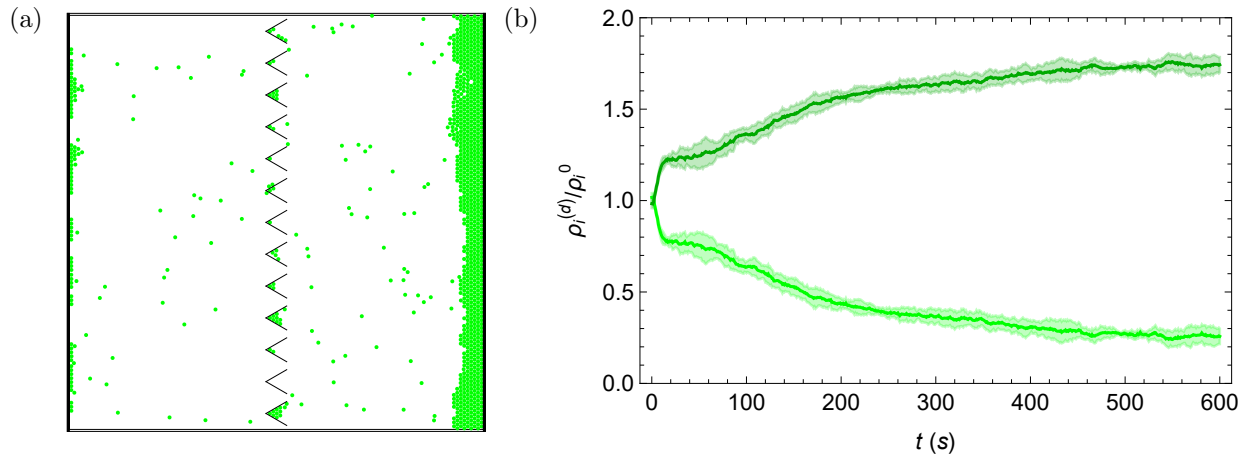


FIGURE 4.4 – (a) Instantané après 10 minutes de 1000 particules actives ($Pe = 92.38$) triées par un ensemble d'entonnoirs. (b) Rapport des concentrations effectives et homogènes de la population active à gauche (en vert clair) et à droite (en vert foncé) au cours du temps, avec l'écart-type de la moyenne sur trois simulations.

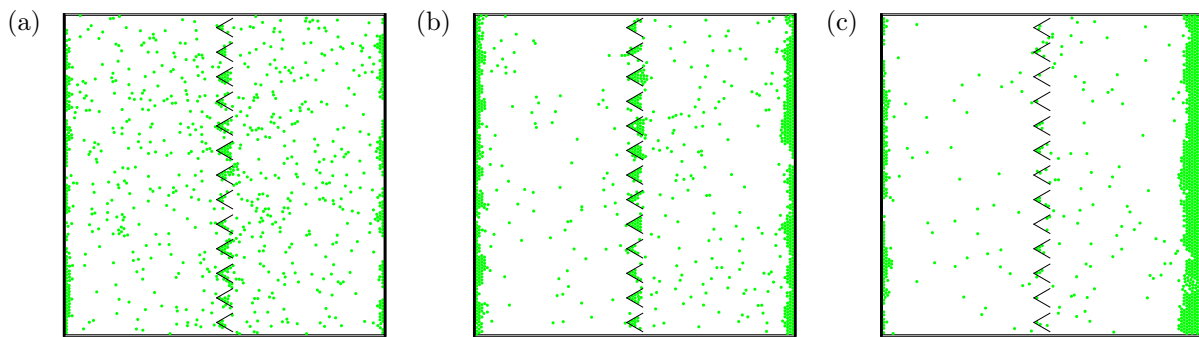


FIGURE 4.5 – Instantané après (a) 5 secondes, (b) 20 secondes et (c) 200 secondes de 1000 particules actives ($Pe = 92.38$) triées par un ensemble d'entonnoirs.

fondamental si l'on veut séparer ces deux populations. On observe alors que chaque population a très peu d'impact sur le comportement de l'autre (figure 4.7). Les particules passives ne vont être que faiblement emportées par les particules actives au travers des entonnoirs, et les particules passives ne vont pas limiter le passage des particules actives entre les entonnoirs. Ce système est donc efficace pour trier un seul type de population, en fonction de l'activité de celle-ci.

De plus, l'activité de la population active a un impact sur l'équilibre atteint par chacune des populations. Cela s'observe en augmentant l'activité de cette population ($Pe = 554.26$). Dès lors, la concentration finale de particules actives se trouvant finalement à droite des entonnoirs prend plus de temps pour être atteinte, mais est également plus importante (figure 4.7b). L'impact sur la population passive est quant à lui difficile à déterminer, car même s'il semble y avoir un flux net vers la droite au cours du temps, celui-ci est très faible et ne semble pas atteindre un équilibre plus important que celui atteint pour une activité plus faible, mais cela se produit peut-être après plus de temps.

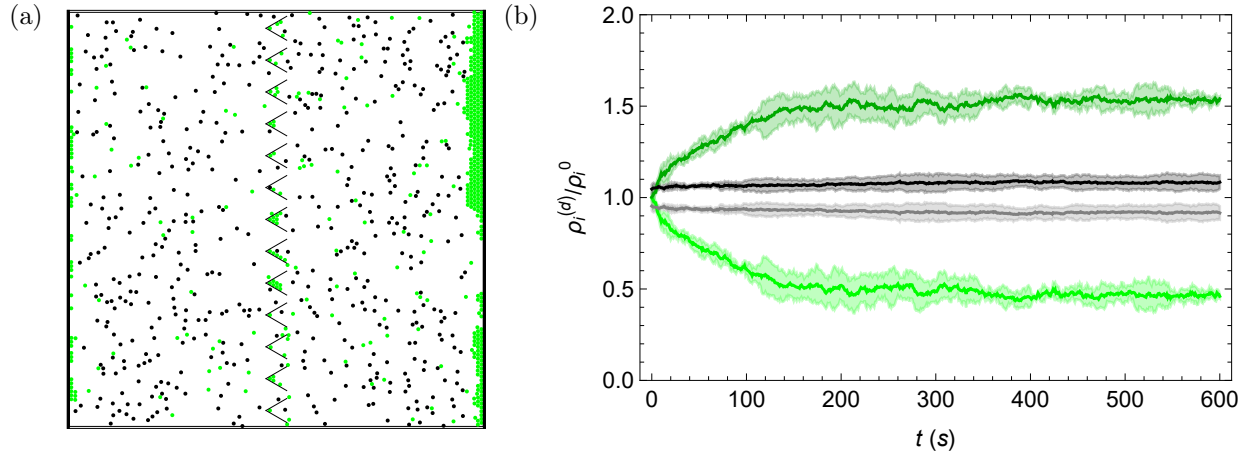


FIGURE 4.6 – (a) Instantané après 10 minutes de 500 particules passives ($Pe = 0$) et 500 particules actives ($Pe = 92.38$) triées par un ensemble d’entonnoirs. (b) Rapport des concentrations effectives et homogènes de la population active à gauche (en gris et vert clair) et à droite (en noir et vert foncé) au cours du temps, avec l’écart-type de la moyenne sur trois simulations.

4.2.3 Discussion

Grâce à ces simulations, nous pouvons conclure que ce type de configurations permet un tri efficace de particules en fonction de leur activité. Le phénomène d’accumulation de particules actives le long de parois se produit également, qui offre une autre piste permettant la capture et le tri de particules en fonction de l’activité.

Néanmoins, différents problèmes empêchent une utilisation directe de ces configurations pour enlever des particules passives d’un fluide contenant également des particules actives.

En pratique, les particules actives et passives peuvent avoir des tailles et des formes très variables. Les particules actives vont également avoir des propulsions différentes, que ce soit au niveau d’une éventuelle chiralité ou de la vitesse de l’autopropulsion. Tous ces facteurs rendent difficile l’utilisation des entonnoirs, dont l’efficacité dépend de ces caractéristiques. Une piste afin de régler ce problème serait d’utiliser différents types d’entonnoirs avec des tailles différentes, mais les grosses particules pourraient toujours bloquer les entonnoirs plus petits.

Un autre problème majeur est la capacité du système à contrôler en moyenne les déplacements des particules actives, mais pas des particules passives. Cela ne permet donc pas de trier les particules passives, qui restent dans l’ensemble du système.

La piste des pièges n’est pas non plus totalement à exclure dans le cadre de la capture de particules passives, même si celle-ci ne sera pas exploitée dans la suite de ce travail.

Il existe potentiellement des utilisations plus complexes des obstacles statiques permettant d’isoler les particules passives des particules actives, ce qui permettrait alors de récolter les particules passives.

D’autres types de pièges existent également. L’utilisation de puits harmoniques, desquels

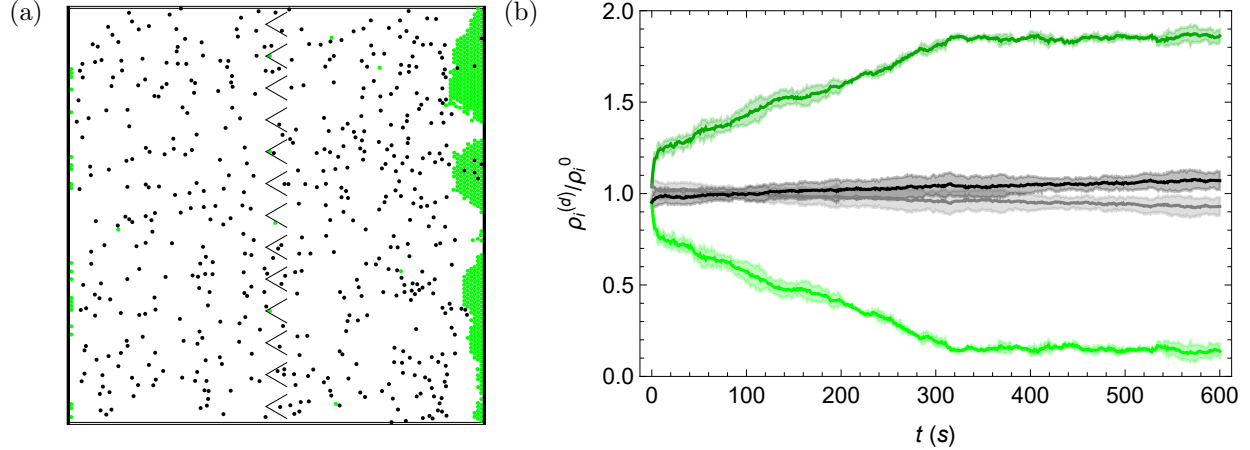


FIGURE 4.7 – (a) Instantané après 10 minutes de 500 particules passives ($Pe = 0$) et 500 particules actives ($Pe = 554.26$) triées par un ensemble d’entonnoirs. (b) Rapport des concentrations effectives et homogènes de la population active à gauche (en gris et vert clair) et à droite (en noir et vert foncé) au cours du temps, avec l’écart-type de la moyenne sur trois simulations.

les particules actives peuvent s’échapper mais pas les particules passives, a déjà été étudiée [57]. La présence de particules actives peut de plus améliorer l’efficacité des pièges sur les particules passives.

4.3 Mélanges de populations et ségrégation

Puisque le but est de trier et d’enlever des particules passives polluant un fluide contenant des particules actives, il est nécessaire de comprendre le comportement de ces deux populations de particules avant toute autre intervention. Ce comportement sera dominé par une séparation de phase des particules induite par la motilité des particules (MIPS), comme déjà étudié dans de nombreux articles [36, 38-41].

4.3.1 Simulations

Avant d’étudier le comportement d’un mélange de particules actives et passives, il est intéressant d’étudier le comportement observé par des populations pures de particules actives ou passives. Pour ce faire, les trois indices présentés précédemment vont être utilisés pour analyser des simulations où $\phi_0 = 0.2$, sauf indication contraire.

Un ensemble de particules passives ne vont pas former de phases spécifiques, et aucune ségrégation ne sera observée. Cela se déduit aisément en observant un instantané d’une simulation ou en étudiant les différents indices, comme présentés dans la figure 4.8. Les graphiques obtenus correspondent simplement aux résultats obtenus pour des particules positionnées de manière aléatoire, puisqu’aucun phénomène de propulsion n’est important.

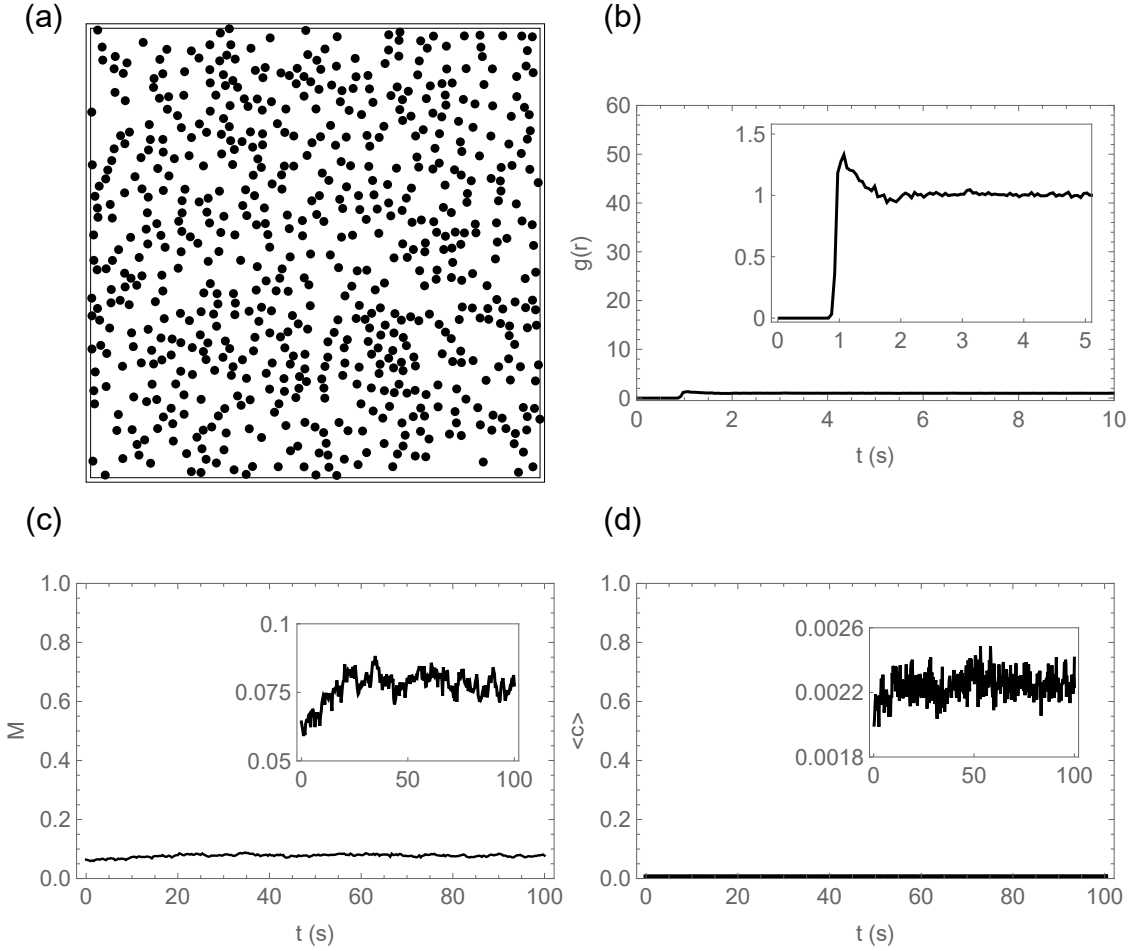


FIGURE 4.8 – Pour des particules passives avec $\phi_p = 0.2$. (a) Instantané d’une simulation. (b) Fonction de corrélation $g(r)$, signe d’une répartition presque homogène des particules. (c) Exemple de l’indice de ségrégation M , signe de l’absence de ségrégation. (d) Exemple de la moyenne normalisée des clusters $\langle c \rangle$, signe de l’absence de grappes. Les encarts permettent de représenter les mêmes graphiques, agrandis, avec les mêmes unités.

Un ensemble de particules actives vont quant à elles se comporter de manière drastiquement différente (figure 4.9). En effet, l’activité de ces particules va permettre la formation de phases denses, les clusters, et de phases constituées de particules isolées dont les mouvements sont peu contraints, qui peuvent s’associer à des phases gazeuses. La formation de ces deux phases a une grande influence sur la valeur obtenue pour chaque indice.

Plus la distance r est faible, plus la fonction de corrélation de paires ressemble à celle d’un cristal hexagonal parfait. On observe particulièrement bien le pic situé à $r/D = \sqrt{3}$, caractéristique du deuxième voisin pour un tel type de réseau. Pour des distances plus importantes, cette fonction ressemble de moins en moins à la fonction pour un réseau hexagonal, ce qui est dû à la limite de la taille des clusters et à la présence de la phase gazeuse.

Les fonctions relatives à l’indice de ségrégation spatiale et à la formation de clusters atteignent relativement rapidement une valeur importante, avant de fluctuer à cause de la

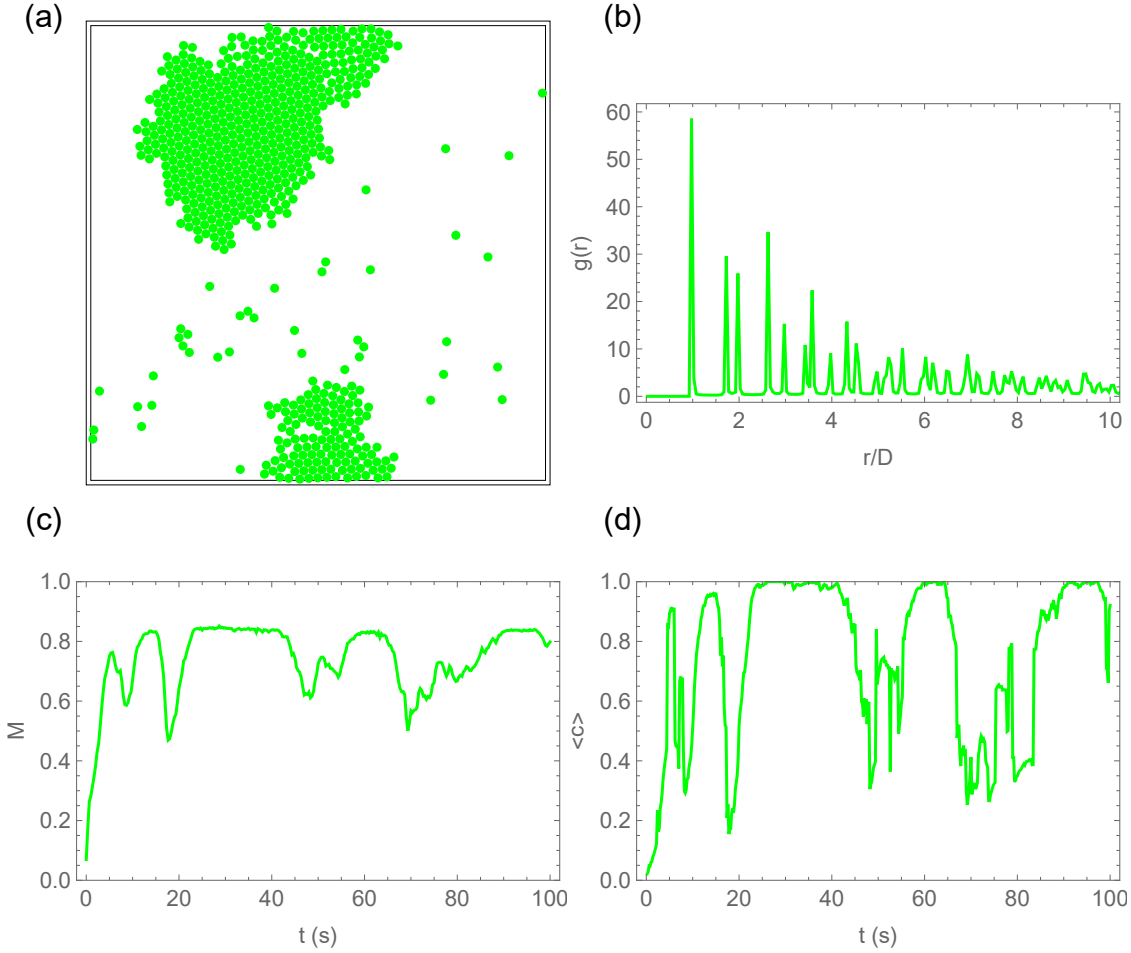


FIGURE 4.9 – Pour des particules actives avec $\phi_a = 0.2$ et $Pe = 554.26$. (a) Instantané d’une simulation. (b) Fonction de corrélation $g(r)$, signe d’une cristallisation importante. (c) Exemple de l’indice de ségrégation M , signe d’une ségrégation importante. (d) Exemple de la moyenne normalisée des clusters $\langle c \rangle$, signe de la formation de grandes grappes.

formation-destruction constante des phases.

En conservant le même nombre total de particules, mais en constituant un mélange de particules actives et passives, les interactions entre ces deux populations ont un impact sur leur comportement (figure 4.10). Deux phases sont alors observées, chacune constituée de proportions différentes de particules de chaque type. Des clusters vont être formés par des particules actives, qui vont par la même occasion capturer une partie des particules passives s’organisant à leur tour selon des morceaux de réseau hexagonal. Les phases gazeuses seront majoritairement constituées de particules passives qui n’ont pas été capturées dans des grappes, et certaines particules actives. La formation-destruction de grappes reste toujours un phénomène continu.

La fonction de corrélation des particules actives n’est que très peu altérée par la présence de particules passives, alors que la fonction relative aux particules passives est grandement

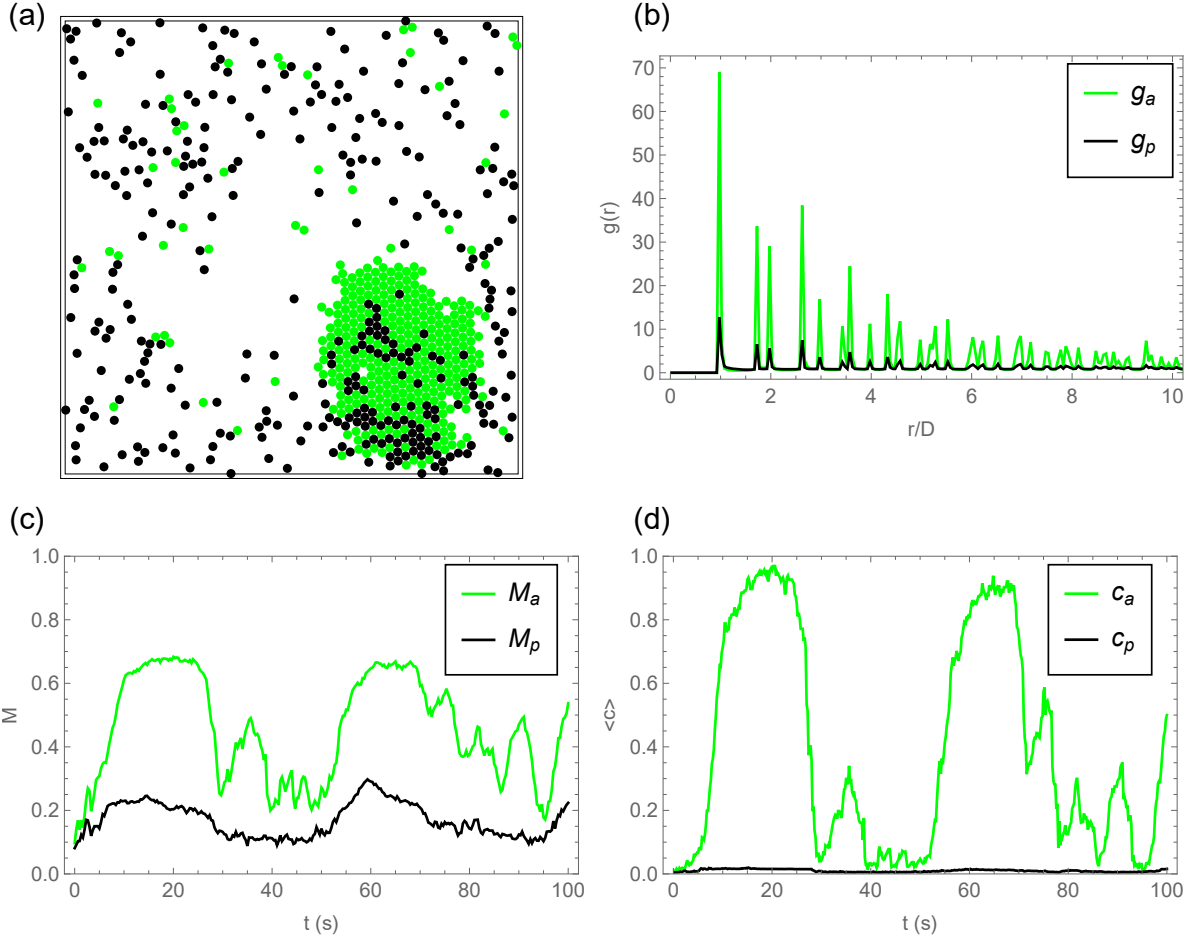


FIGURE 4.10 – Pour un mélange de particules avec $\phi_0 = 0.2$, $Pe = 554.26$, $x_a = 0.5$ et $x_p = 0.5$. (a) Instantané d’une simulation. (b) Fonctions de corrélation $g_a(r)$ et $g_p(r)$, signe de la cristallisation des deux populations. (c) Exemples des indices de ségrégation M_a et M_p , signe de la ségrégation accentuée des particules passives. (d) Exemples des moyennes normalisées des clusters $\langle c_a \rangle$ et $\langle c_p \rangle$, signe de l’absence de grappes conséquentes de particules passives.

modifiée. Cela provient majoritairement de la capture des particules passives au sein des grappes, et donc de la formation de morceaux de réseau hexagonal. Ainsi, la fonction de corrélation des particules passives ressemble à celle de particules organisées suivant un tel réseau, même si l’effet est moins important que pour les particules actives.

L’effet de la présence des particules passives sur la ségrégation des particules actives s’observe plus facilement en étudiant l’indice de ségrégation M_a et la distribution de clusters $\langle c_a \rangle$. Les valeurs maximales atteintes pour l’indice de ségrégation sont plus faibles, et des moments où les particules actives ne forment que peu de grappes importantes deviennent assez fréquents, ce qui ne s’observait pas vraiment pour une population pure de particules actives. Cependant, cela ne veut pas dire que les particules passives empêchent la formation de clusters de particules actives. En effet, tant que la proportion de particules passives n’est pas trop importante, celle-ci va favoriser la formation de clusters actifs. Les valeurs

plus faibles obtenues viennent du nombre réduit de particules actives, puisque l'on passe de $\phi_a = \phi_0 = 0.2$ pour la simulation purement active à $\phi_a = \phi_0/2 = 0.1$ pour la simulation de mélange.

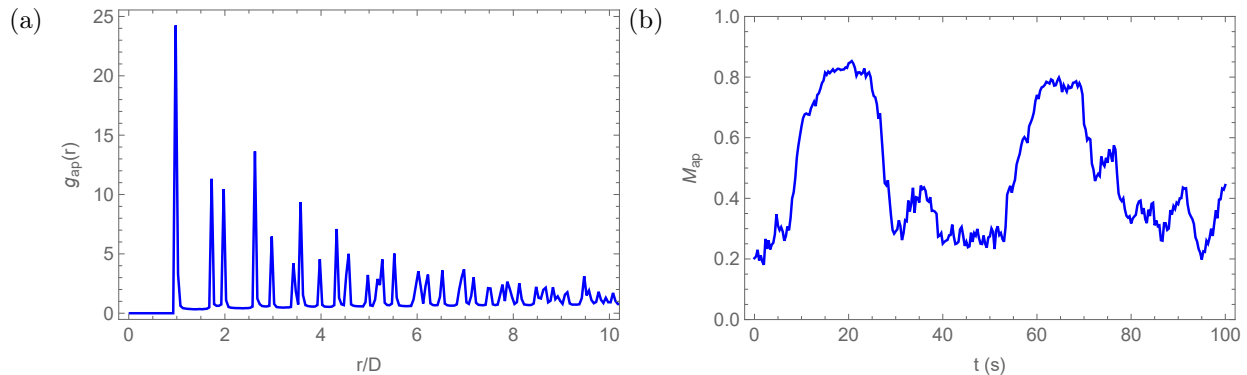


FIGURE 4.11 – (a) Fonction de corrélation croisée $g_{ap}(r)$ et (b) indice de ségrégation des populations M_{ap} pour un mélange de particules avec $\phi_0 = 0.2$, $Pe = 554.26$, $x_a = 0.5$ et $x_p = 0.5$.

Il est également possible d'étudier la manière dont les deux populations se comportent l'une par rapport à l'autre, grâce aux indices croisés $g_{ap}(r)$ et M_{ap} (figure 4.11). La fonction de distribution radiale nous confirme que certaines particules passives sont coincées dans les grappes de particules actives, qui forment ensemble un grand réseau hexagonal. L'indice de ségrégation M_{ap} , bien que ressemblant à l'indice M_a , permet de savoir que quand celui-ci est élevé, il existe une ségrégation importante entre les deux populations. Dans le cas présenté, les particules passives constituent la majorité de la phase gazeuse, alors que les particules actives forment majoritairement la phase dense. Cet indice est donc particulièrement important dans le cadre de l'étude de la séparation des populations, ce qui est un point fondamental dans la suite de ce travail.

Avant d'étudier l'ensemble d'un diagramme de phase faisant varier l'activité et la fraction de particules actives, il est judicieux d'analyser séparément l'effet de chacun de ces paramètres (figures 4.12 et 4.13). Il devient évident qu'accentuer l'effet de l'activité des particules, que ce soit en augmentant la valeur du nombre de Péclet ou en augmentant la fraction de particules actives dans le système, accentue les effets de cristallisation et de ségrégation. Même si cela n'est pas visible dans les exemples présentés, la formation de grappes de particules passives n'est pas forcément un phénomène qui va être accentué dans les cas de Pe ou x_a importants. Ces phénomènes peuvent se produire intensément ou non au cours d'une simulation, et dépendent énormément des conditions initiales et de l'aléatoire.

Afin d'étudier des diagrammes de phase indiquant l'effet de l'activité Pe et de la fraction active x_a sur le comportement du système, il est nécessaire de sélectionner les indices les plus pertinents.

- Le maximum de $g_p(r)$, noté G_p : la valeur maximale de la fonction de distribution radiale permet d'évaluer la proximité des particules passives en tant que premiers

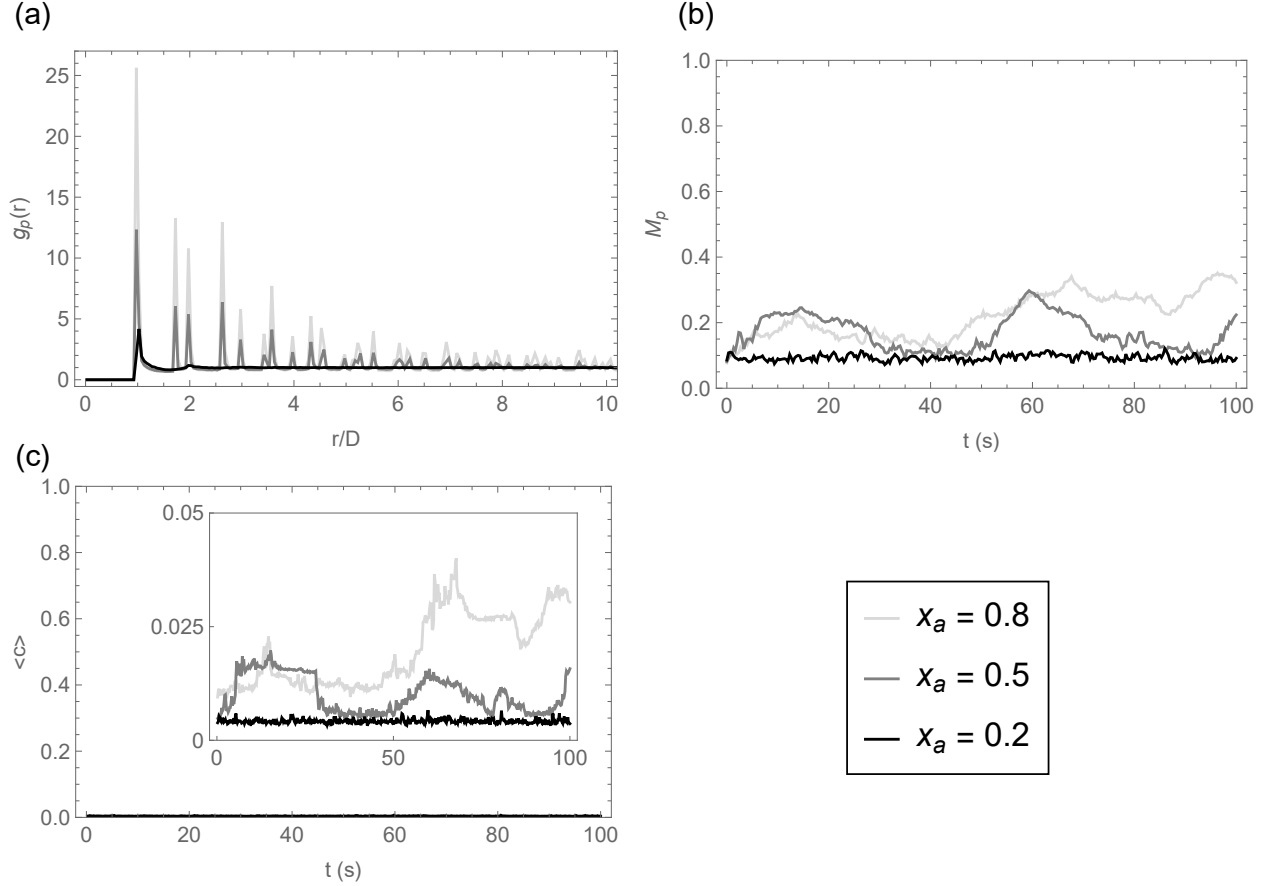


FIGURE 4.12 – Mélange de particules avec $\phi_0 = 0.2$ et $Pe = 554.26$ avec x_a variable, pour mettre en évidence l’influence de x_a sur les effets de ségrégation et cristallisation. (a) Fonctions de corrélation $g_p(r)$. (b) Exemples des indices de ségrégation M_p . (c) Exemples des moyennes normalisées des clusters $\langle c_p \rangle$. L’encart permet de représenter le même graphique, agrandi, avec les mêmes unités.

voisins.

- La moyenne temporelle de l’indice de ségrégation M_p , notée $\langle M_p \rangle_t$: cet indice permet d’évaluer la tendance des particules passives à se positionner préférentiellement de manière groupée.
- La moyenne temporelle de l’indice de ségrégation M_a , notée $\langle M_a \rangle_t$: cet indice permet d’évaluer la tendance des particules actives à se positionner préférentiellement de manière groupée.
- La moyenne temporelle de l’indice de ségrégation M_{ap} , notée $\langle M_{ap} \rangle_t$: cet indice permet d’évaluer la tendance des deux populations de particules à former des phases distinctes.

Les diagrammes de phase présentés pour étudier le mélange des populations actives ont été réalisés en effectuant la moyenne des indices provenant de trois simulations de 100 secondes. La représentation est basée sur une interpolation au premier ordre les résultats afin d’observer plus facilement les différents effets, et cette interpolation est basée sur 99 couples différents

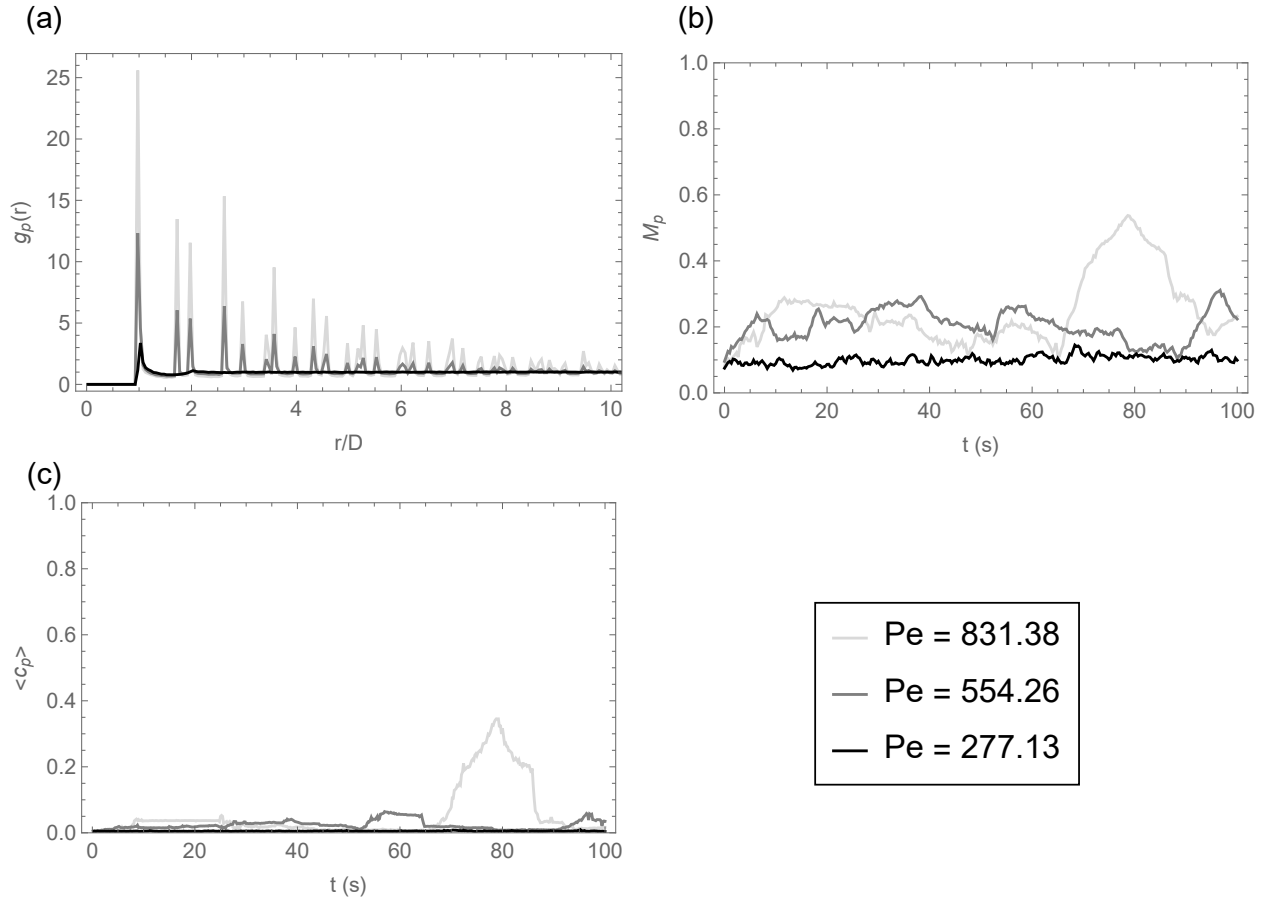


FIGURE 4.13 – Mélange de particules avec $\phi_0 = 0.2$ et $x_a = 0.5$ avec Pe variable, pour mettre en évidence l’influence de Pe sur les effets de ségrégation et cristallisation. (a) Fonctions de corrélation $g_p(r)$. (b) Exemples des indices de ségrégation M_p . (c) Exemples des moyennes normalisées des clusters $\langle c_p \rangle$.

(Pe, x_a). Elle a donc le désavantage de présenter des résultats fictifs entre ces points, tout en sachant que la moyenne sur trois simulations n’est pas nécessairement suffisante pour obtenir un résultat dont l’écart-type est assez faible. Cela s’observe avec les deux exemples présentés en figure 4.14, où l’écart-type de l’échantillon des trois simulations a été calculé. On observe clairement que la valeur obtenue provient d’un échantillon de trois valeurs dispersées pour certains points, ce qui mène à des pics. Ce genre de phénomène est récurrent, et il est donc nécessaire d’étudier l’écart-type si l’on veut tirer des conclusions sur des résultats particuliers et non des tendances générales. Pour atténuer ces phénomènes, un nombre plus important de simulations plus longues aurait dû être effectué, mais cela n’a pu l’être par limitations techniques.

Pour chaque diagramme de phase, la couleur indiquée varie en fonction de la valeur obtenue et du type d’indice utilisé (noir : passif, vert : actif, bleu : interaction actif/passif, mauve : global).

Grâce aux diagrammes de phase $Pe-x_a$ recensés dans la figure 4.15, nous pouvons observer

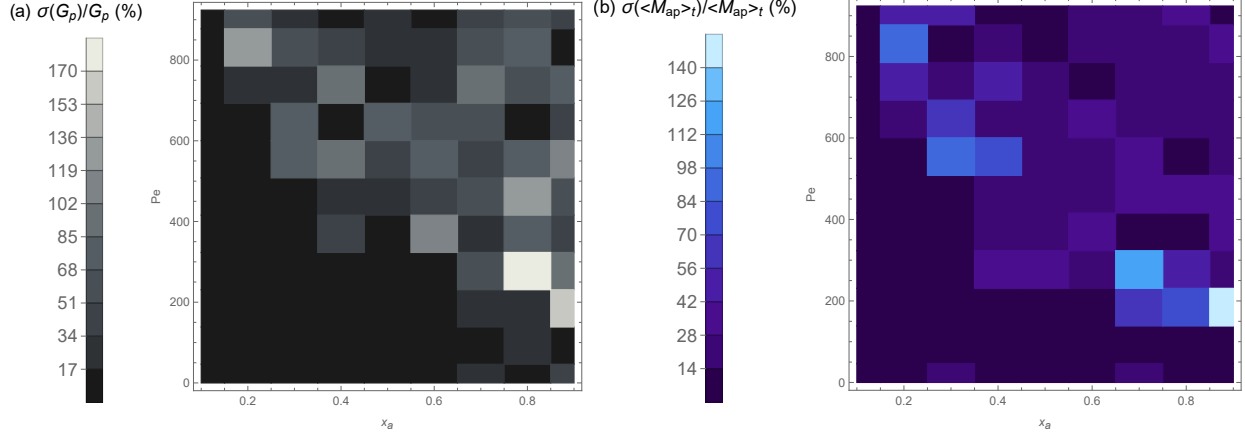


FIGURE 4.14 – Écart-types en pourcentage par rapport à la moyenne (a) de la valeur maximale de la fonction de distribution radiale et (b) de l'indice de ségrégation des populations.

cette tendance générale de phénomènes plus prononcés quand l'activité globale du système est augmentée par Pe ou x_a , mais avec certaines particularités. Premièrement, la progression de formation de grappes et de ségrégation n'est pas linéaire en fonction des paramètres Pe et x_a . On observe clairement deux zones, une où les phénomènes sont faibles ou presque inexistantes, et une où ils deviennent prononcés relativement rapidement.

La transition entre la phase homogène et la phase séparée semble suivre une fonction $x_a \propto 1/Pe$. Un modèle existe permettant d'expliquer cette transition pour des densités totales ϕ_0 élevées [38]. Cette modélisation considère que la formation de phase dense subit un apport constant de particules, mais également des événements qui lui en font perdre. C'est en atteignant l'équilibre de ces deux phénomènes que la formation de grappes devient plus stable et permet la séparation de phases. Considérant κ un paramètre adimensionnel permettant de prendre en compte le phénomène de sortie de particules, il est possible d'obtenir la relation suivante [38].

$$\phi_0 x_a = \frac{3\pi^2 \kappa}{4Pe} \quad (4.1)$$

Pour des systèmes denses ($\phi_0 \gtrsim 0.45$), la valeur de $\kappa \approx 4.05$ peut être déterminée à partir de simulations [38]. Cependant, ce modèle se base sur des approximations qui ne sont plus valables pour les systèmes étudiés dans la suite de ce travail ($\phi_0 \leq 0.2$).

Il est tout de même clair qu'une transition ressemblant à $x_a \propto 1/Pe$ est observée pour ϕ_0 . En utilisant l'équation 4.1 pour une valeur de $\kappa = 20$, les courbes blanches des diagrammes composant la figure 4.15 sont obtenues. Une interprétation possible de cette valeur plus grande de κ serait que la concentration totale plus faible favorise les événements de sortie de particules, ce qui rend plus difficile la séparation de phases. Cette interprétation n'est qu'une supposition et n'est pas supportée par un modèle. Cette transition est également moins soudaine que celle observée pour des concentrations plus élevées.

Un pic au niveau de la ségrégation spatiale des particules actives et de la ségrégation des populations pour des valeurs de Pe très élevées et de $x_a \approx 0.5$ existe.

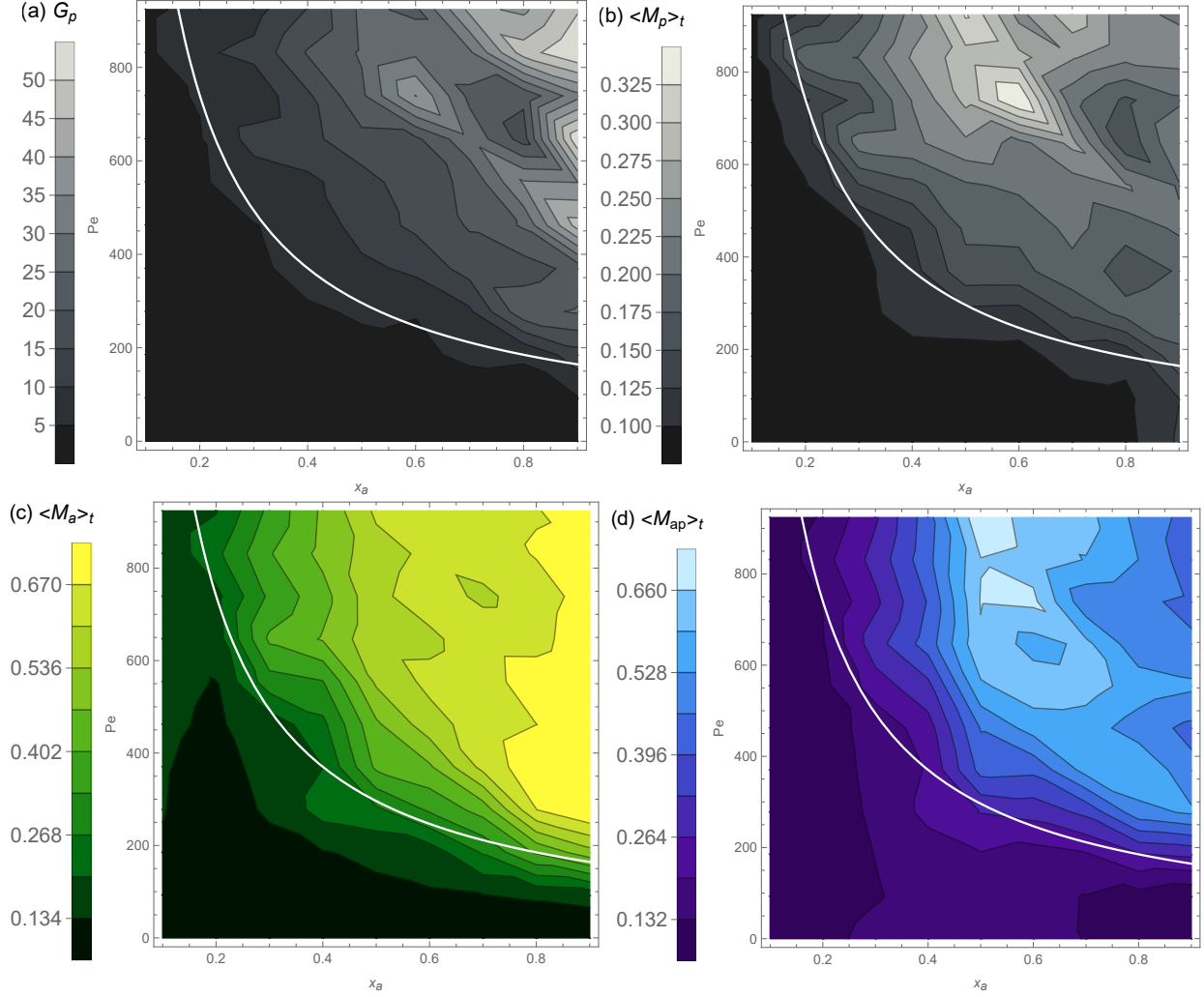


FIGURE 4.15 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.2$ pour différents indices avec représentation de la transition pour $\kappa = 20$. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

L'indice $\langle M_p \rangle_t$, bien que présentant un maximum défini, n'atteint pas pour autant des valeurs supérieures à 0.35. Cela provient du fait que les particules passives sont majoritairement dans la phase gazeuse du système, qui représente la plus grande surface de ce système, et y sont majoritairement positionnées de manière homogène.

L'indice $\langle M_{ap} \rangle_t$ nous permet de savoir que la ségrégation entre les deux populations est plus importante pour un système où $x_a = 0.5$ que pour $x_a = 0.8$ si la séparation de phases se produit. Cela indique donc l'importance de la présence des deux populations pour la séparation de phases, et pas simplement d'une formation de grappe induite par les particules actives. Cette différence a été étudiée par Wittkowski et al. [58], et est expliquée par l'origine de la formation de clusters par bifurcation de Hopf, et non par bifurcation stationnaire comme pour un système composé d'un seul type de particules.

La densité totale du système a donc une importance primordiale quant à l'apparition

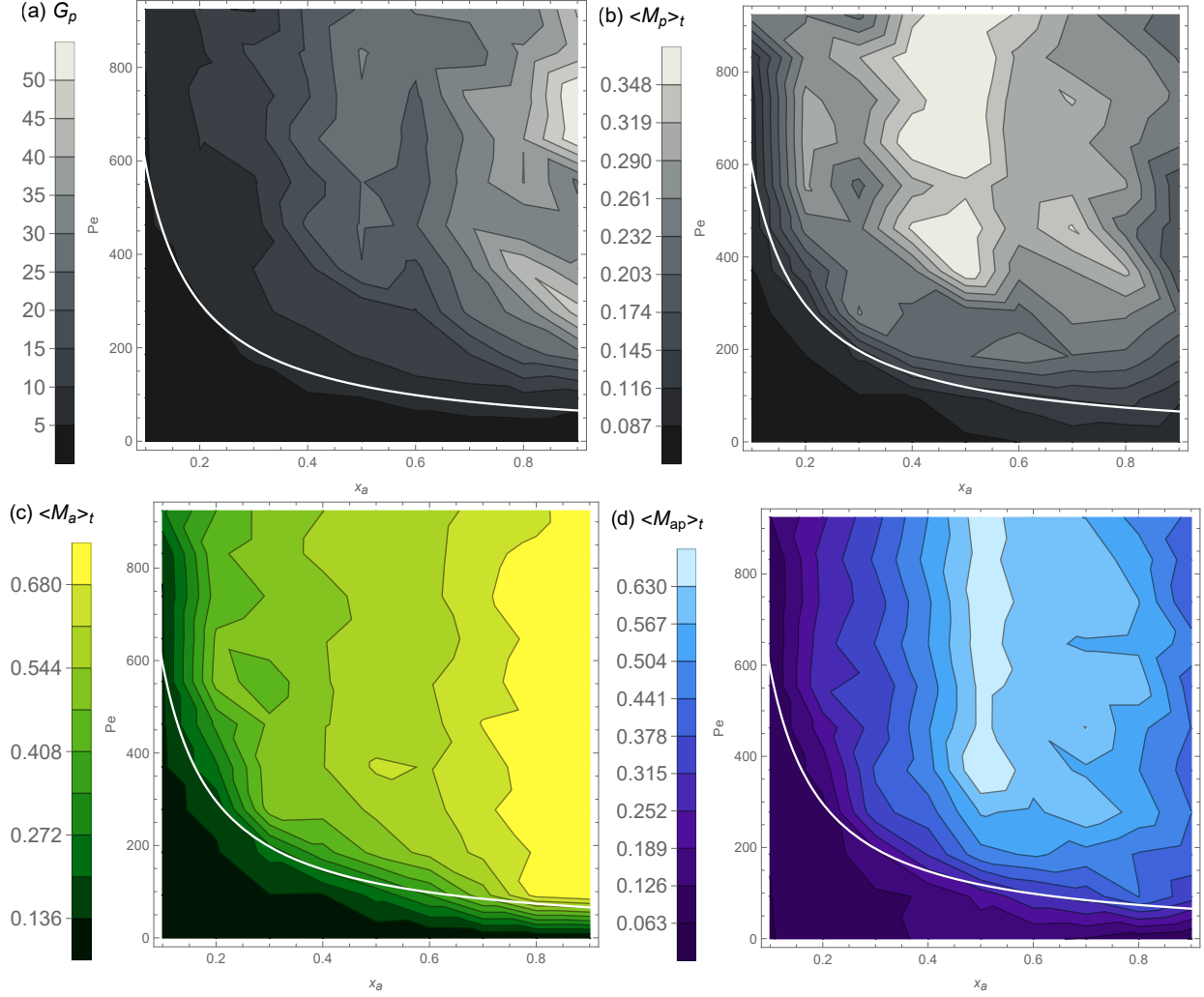


FIGURE 4.16 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.3$ pour différents indices avec représentation de la transition pour $\kappa = 8$. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

des phénomènes de ségrégation et de formation de phases denses. Augmenter cette densité permet de faciliter ces phénomènes. Cela s’observe en analysant notamment des simulations effectuées avec $\phi_0 = 0.3$ en figure 4.16. La transition s’effectue pour une valeur de κ plus faible, cependant les valeurs maximales atteintes ne changent que peu. Les zones maximales de $\langle M_p \rangle_t$ et $\langle M_{ap} \rangle_t$ sont donc plus grandes, mais pour des valeurs assez proches. Un mélange proche de $x_a = 0.5$ semble donc être la manière optimale de séparer les populations.

Si la concentration totale est trop faible, comme pour $\phi_0 = 0.1$, les phénomènes de séparation de phases deviennent extrêmement faibles, voire inexistant. Cela s’observe avec les graphiques de la figures 4.17, grâce à l’utilisation de gradients de couleurs constants entre les différents diagrammes de chaque ϕ_0 . Il devient évident qu’aucune transition aussi abrupte que précédemment n’est observée. Seules quelques simulations, à l’origine des deux pics présents pour des valeurs de Pe et x_a élevées, présentent des indices élevés synonymes

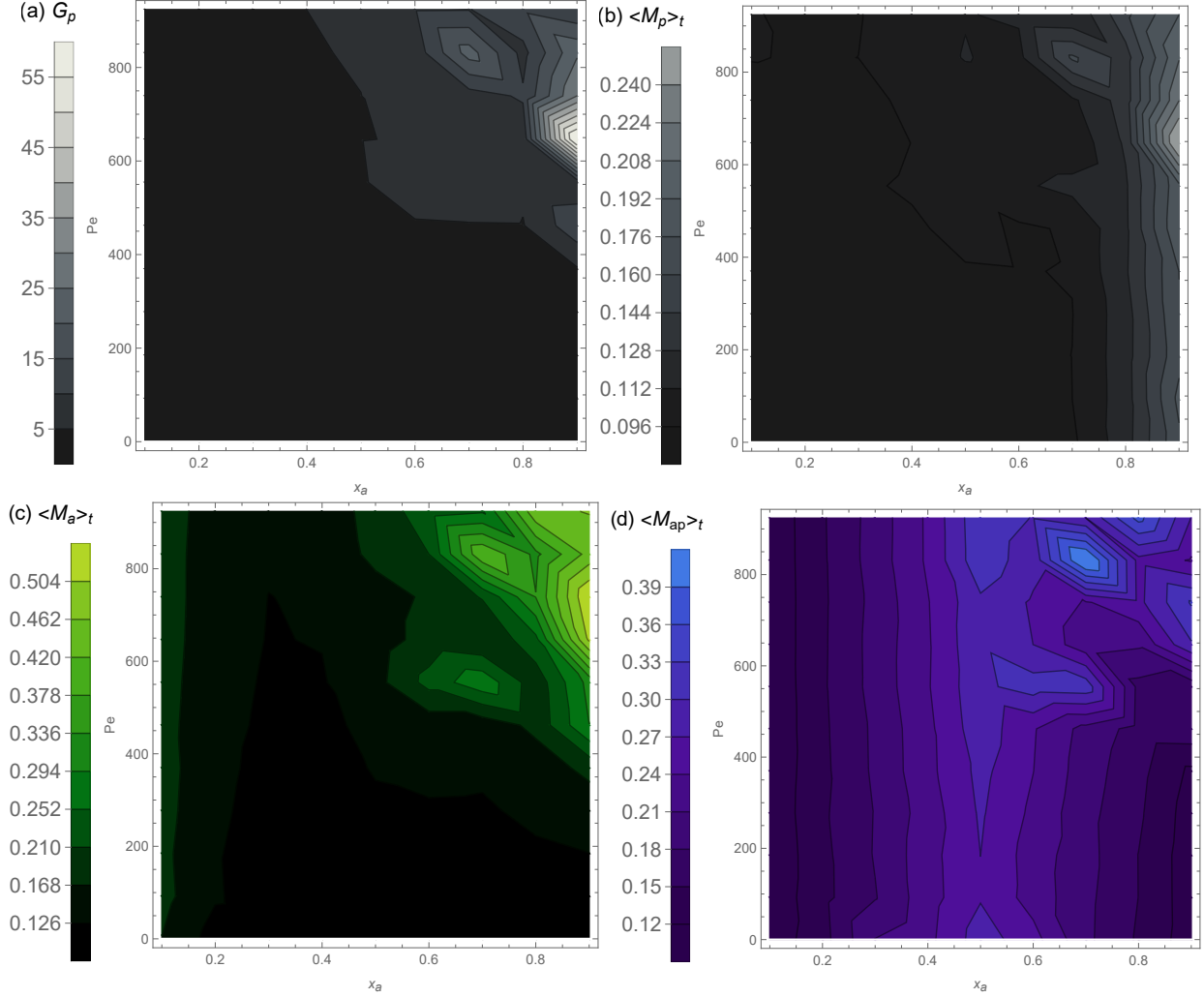


FIGURE 4.17 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.1$ pour différents indices. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

de ségrégation. Cependant, les écarts-types associés à ces simulations sont extrêmement grands et indiquent donc qu'un événement particulier est probablement survenu dans une des simulations, sans forcément être probable pour un nombre important de simulations.

Même si les phénomènes sont très faibles pour $\phi_0 = 0.1$, la ségrégation des populations reste un phénomène maximal pour x_a autour de 0.5, à l'exception d'un pic provenant d'une simulation avec un important écart-type. Néanmoins, ce maximum est également observé pour $Pe = 0$ avec des valeurs semblables, ce qui implique que ce maximum ne provient pas majoritairement de l'activité, mais simplement de la manière dont l'indice est calculé.

4.3.2 Discussion

L'étude des mélanges de populations actives et passives permet de comprendre les mécanismes de ségrégation spontanée qui peuvent se produire, ainsi que les conditions nécessaires

pour les accentuer. Les concentrations de plastique et plancton sont faibles dans l’océan par rapport aux concentrations minimales requises pour observer des phénomènes MIPS. Les résultats obtenus pourraient alors permettre de justifier la proximité entre la plancton et le plastique, proximité préjudiciable pour les organismes vivants. Il semble nécessaire de trouver une méthode permettant de capturer des particules passives, sans qu’elles ne soient forcément regroupées dans des phases spécifiques. Cependant, des considérations fondamentales ayant un impact sur le comportement du plancton, comme des interactions hydrodynamiques complexes ou leur intelligence, n’ont pas été prises en compte. Aucune conclusion certaine ne peut être établie sur la proximité de ces deux populations à partir d’un modèle aussi simple.

4.4 Comportements biologiques

La manière la plus simple de conférer une sorte d’intelligence est d’implémenter le modèle de Vicsek [11]. Celui-ci permet aux particules de connaître l’orientation de leurs voisines, et d’aligner leur propre direction par rapport à ces voisines. L’alignement permet d’accentuer l’effet de ségrégation dans des systèmes denses [12], mais également d’accélérer les phénomènes de ségrégation [37] et de les favoriser [13]. Il faut néanmoins effectuer des simulations pour vérifier si cet alignement favorise la ségrégation pour les systèmes peu denses étudiés.

4.4.1 Implémentation

Une manière efficace d’implémenter cet alignement est de réutiliser les cellules définies pour faciliter le calcul des contacts. En effet, cela permet de déterminer directement quelles particules sont voisines, même si le désavantage de cette méthode est l’utilisation d’une zone carrée non-centrée autour de la particule à la place d’un cercle centré pour la définition des voisins.

Un moment de force est appliqué à chaque particule pour chacune de ses voisines ainsi déterminées, en fonction de leurs directions respectives. Ce moment de force est exprimé dans l’équation 4.2, avec α un terme adimensionnel permettant de modifier l’intensité de l’alignement, et θ_i l’orientation de la particule i . L’angle $(\theta_j - \theta_i)$ doit être inclus dans l’intervalle $] -\pi, \pi]$. Le moment de force de l’autre particule est équivalent, mais de signe opposé.

$$M_{al,ij} = \alpha(\theta_j - \theta_i) \quad (4.2)$$

La valeur de α influe grandement sur l’ampleur du phénomène, mais l’impact de cette valeur dépend énormément de l’ensemble des paramètres des particules. Pour rendre ce paramètre plus compréhensible par rapport aux simulations effectuées, il est utile d’introduire une version normalisée α_n de ce paramètre. La normalisation est effectuée par rapport au préfacteur de la rotation brownienne inclus dans l’équation 3.35.

4.4.2 Simulations

Afin d’étudier l’impact de l’alignement sur la ségrégation pour des systèmes à concentration faible, des simulations ont été effectuées de manière similaire avec pour seule différence

l'ajout de l'alignement. Ainsi, la réalisation de deux nouveaux groupes de simulations avec des valeurs de α_n différentes, en faisant varier Pe et x_a pour $\phi_0 = 0.1$, permettent de comparer les résultats avec et sans alignement. Les mêmes indicateurs que ceux présentés précédemment seront utilisés, et directement comparés avec ceux de la figure 4.17.

Dans un premier temps, des simulations avec $\phi_0 = 0.1$ et $\alpha_n=1$ ont été effectuées. Cette valeur pour α_n indique qu'en général, les moments de force liés à l'alignement de particules seront du même ordre de grandeur que ceux de la rotation brownienne. Cependant, pour la rotation brownienne, la variable multipliant ce facteur est un nombre aléatoire dont la distribution suit une loi normale de moyenne nulle et de variance unitaire. L'alignement sera donc un phénomène beaucoup plus dominant puisqu'il n'est pas aléatoire.

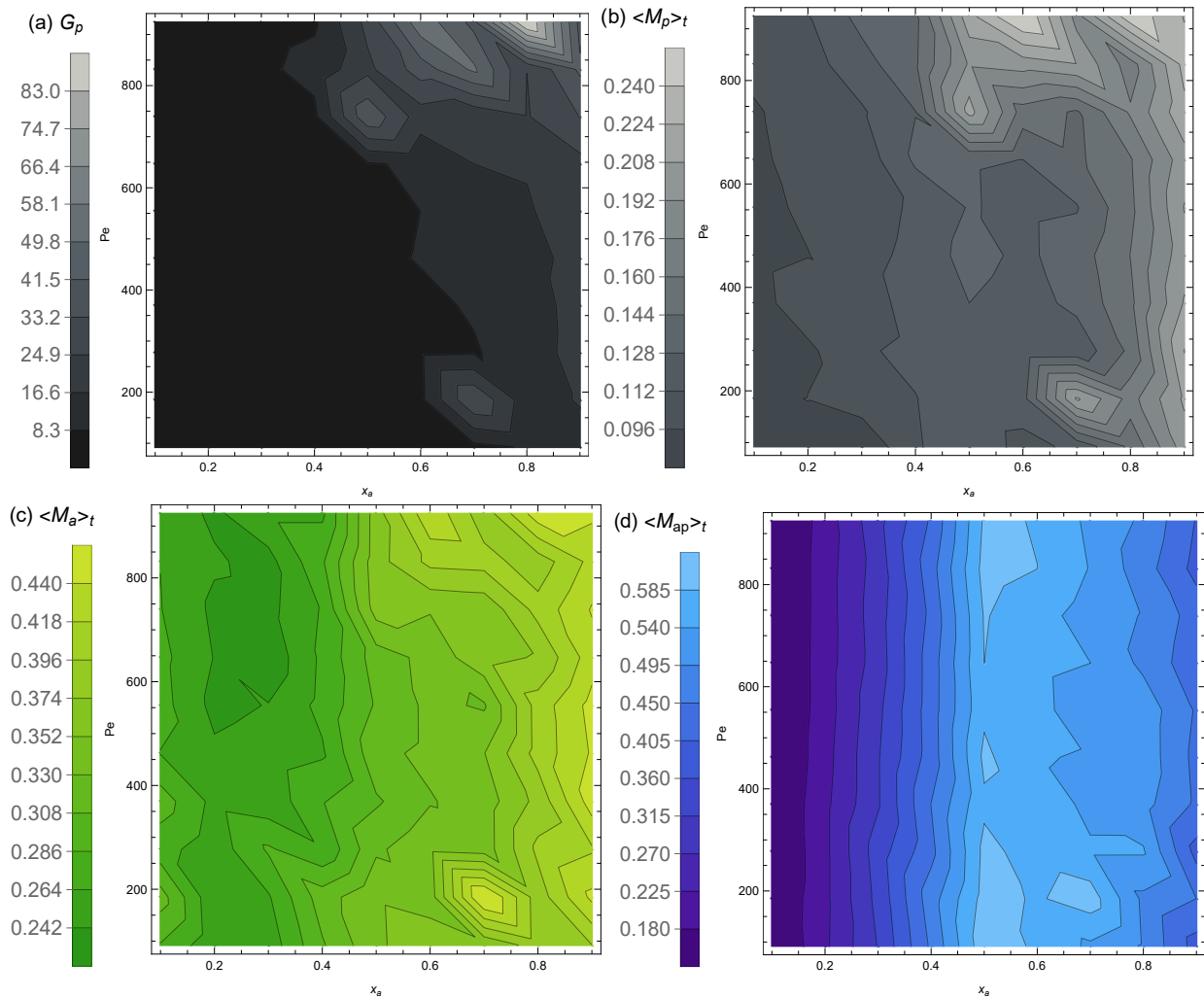


FIGURE 4.18 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.1$ et $\alpha_n = 1$ pour différents indices. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

Les indices relatifs à la ségrégation spatiale (figures 4.18a-b-c) n'indiquent pas spéciale-

ment une séparation prononcée en deux phases, même si elle semble être plus importante qu'en l'absence d'alignement. Par contre, la ségrégation de populations est quant à elle grandement augmentée, particulièrement pour des proportions de particules actives $x_a \geq 0.3$. Ces différences s'observent d'autant mieux grâce aux diagrammes de phase de la figure 4.19, qui comparent les indices avec et sans alignement.

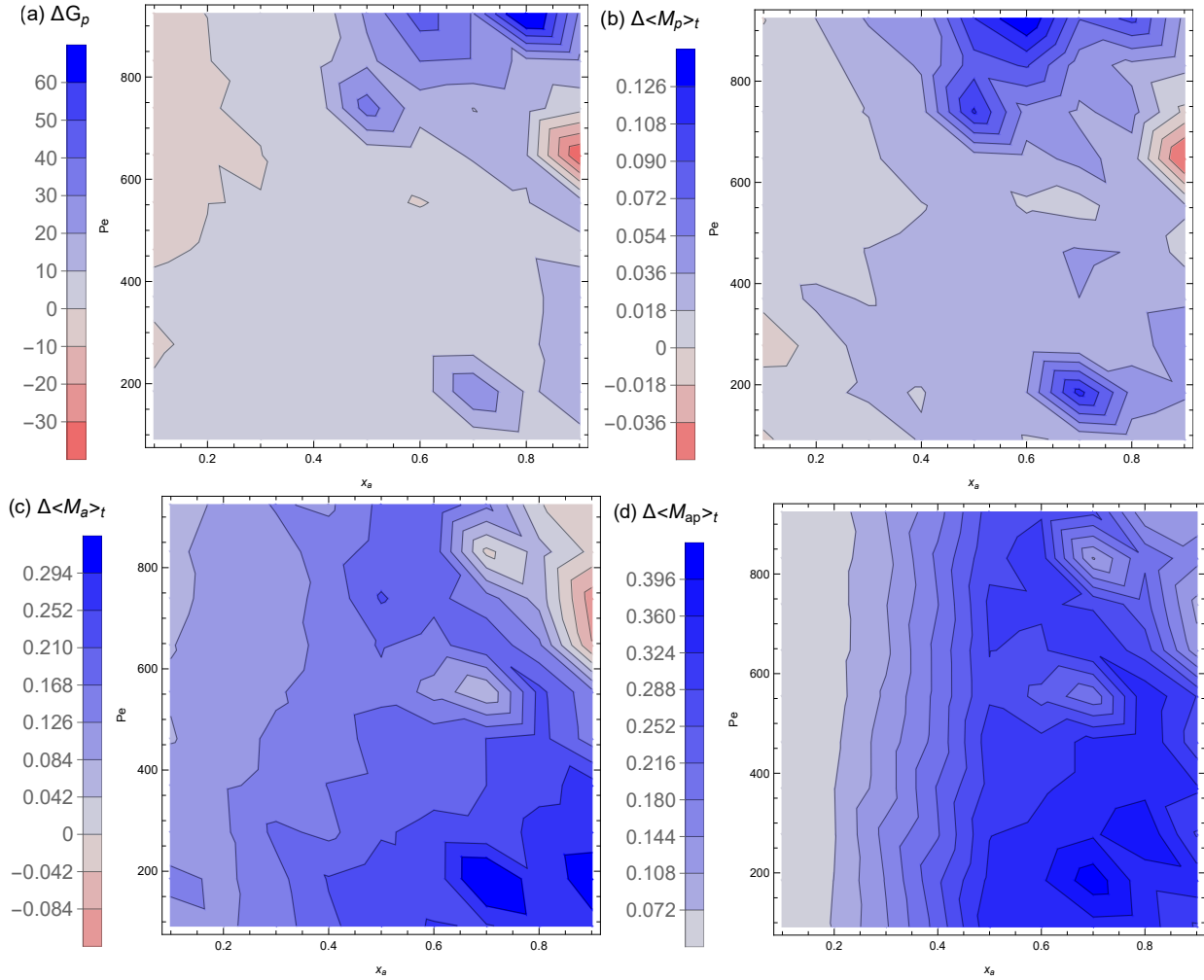


FIGURE 4.19 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.1$ et $\alpha_n = 1$ pour la différence de différents indices entre les valeurs obtenues avec (figure 4.18) et sans (figure 4.17) alignement. Les valeurs positives bleues indiquent que l'indicateur avec alignement est supérieur. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

L'observation de la disposition des particules au cours des simulations permet de comprendre la ségrégation de populations améliorée par l'alignement. Peu importe les conditions d'activité Pe ou de fraction x_a de particules actives, dès les premiers instants les particules vont avoir tendance à aligner leurs vitesses (figures 4.20a, 4.21a et 4.22a). Cela va permettre de former des nuées de particules actives qui se dirigent toutes dans une seule et même direction, et dont les déplacements peuvent être obstrués par des particules passives (figures

4.20b, 4.21b et 4.22b). Ce type de déplacements en groupe va favoriser la séparation des populations de particules, sans pour autant former des phases denses (figures 4.20c et 4.22c). Il peut tout de même arriver que, dans les bonnes conditions, les particules actives forment une phase dense en englobant des particules passives (figure 4.21c), comme pour des phénomènes de MIPS avec ϕ_0 élevé. L'apparition de ces phases est relativement peu probable et éphémère.

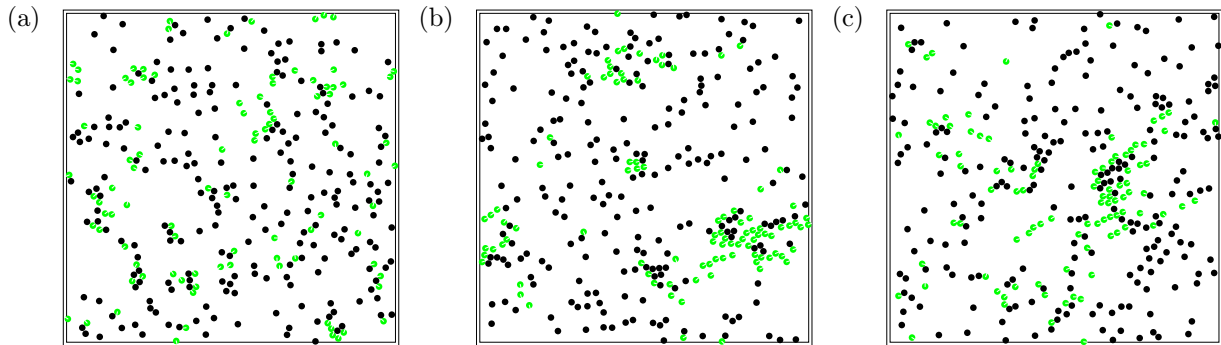


FIGURE 4.20 – Instantanés d'un ensemble de particules passives et actives avec comme paramètres $\phi_0 = 0.1$, $x_a = 0.3$, $Pe = 369.5$ et $\alpha_n = 1$ après (a) 0.33 secondes, (b) 30 secondes et (c) 60 secondes.

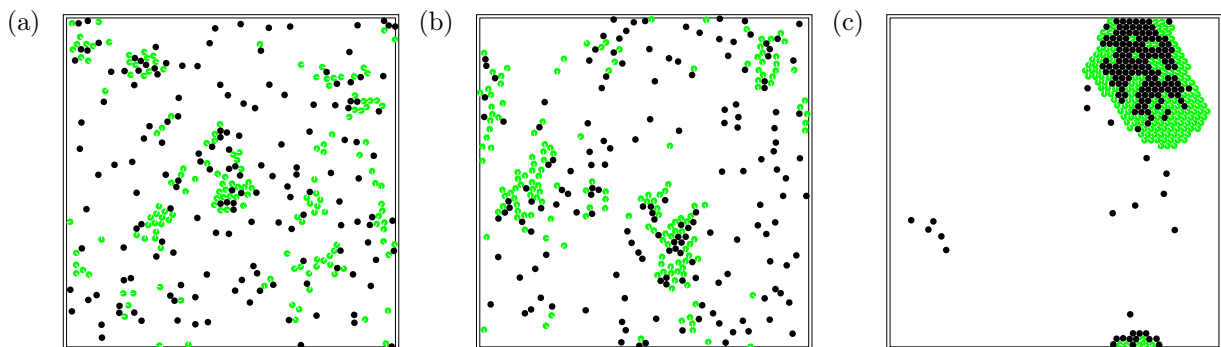


FIGURE 4.21 – Instantanés d'un ensemble de particules passives et actives avec comme paramètres $\phi_0 = 0.1$, $x_a = 0.5$, $Pe = 739$ et $\alpha_n = 1$ après (a) 0.33 secondes, (b) 30 secondes et (c) 60 secondes.

Le choix de la taille des cellules qui déterminent si des particules s'alignent et le facteur α_n ont une influence directe sur les phénomènes observés. Même si l'impact de la taille des cellules n'a pas été étudié, celui de la valeur de α_n est abordé.

Il est difficile d'évaluer la valeur de α_n par rapport à des grandeurs biologiques. Le choix de $\alpha_n = 1$ semble tout de même assez extrême, car cela devient presque impossible pour une particule de se réorienter pour sortir d'une nuée de particules. Les résultats présentés ci-après ont donc été effectués pour $\alpha_n = 0.1$, ce qui permet une vraie préférence pour l'alignement de particules actives sans pour autant totalement éclipser la rotation brownienne ou les frottements entre particules.

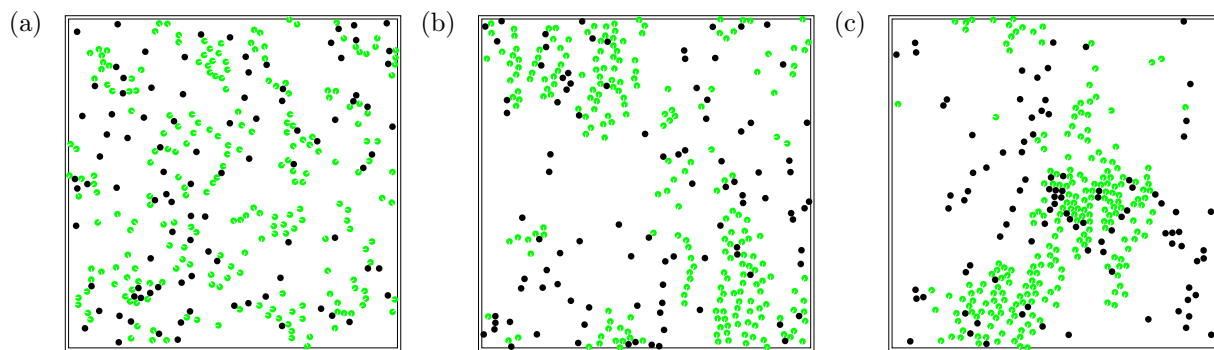


FIGURE 4.22 – Instantanés d'un ensemble de particules passives et actives avec comme paramètres $\phi_0 = 0.1$, $x_a = 0.7$, $Pe = 184.75$ et $\alpha_n = 1$ après (a) 0.33 secondes, (b) 30 secondes et (c) 60 secondes.

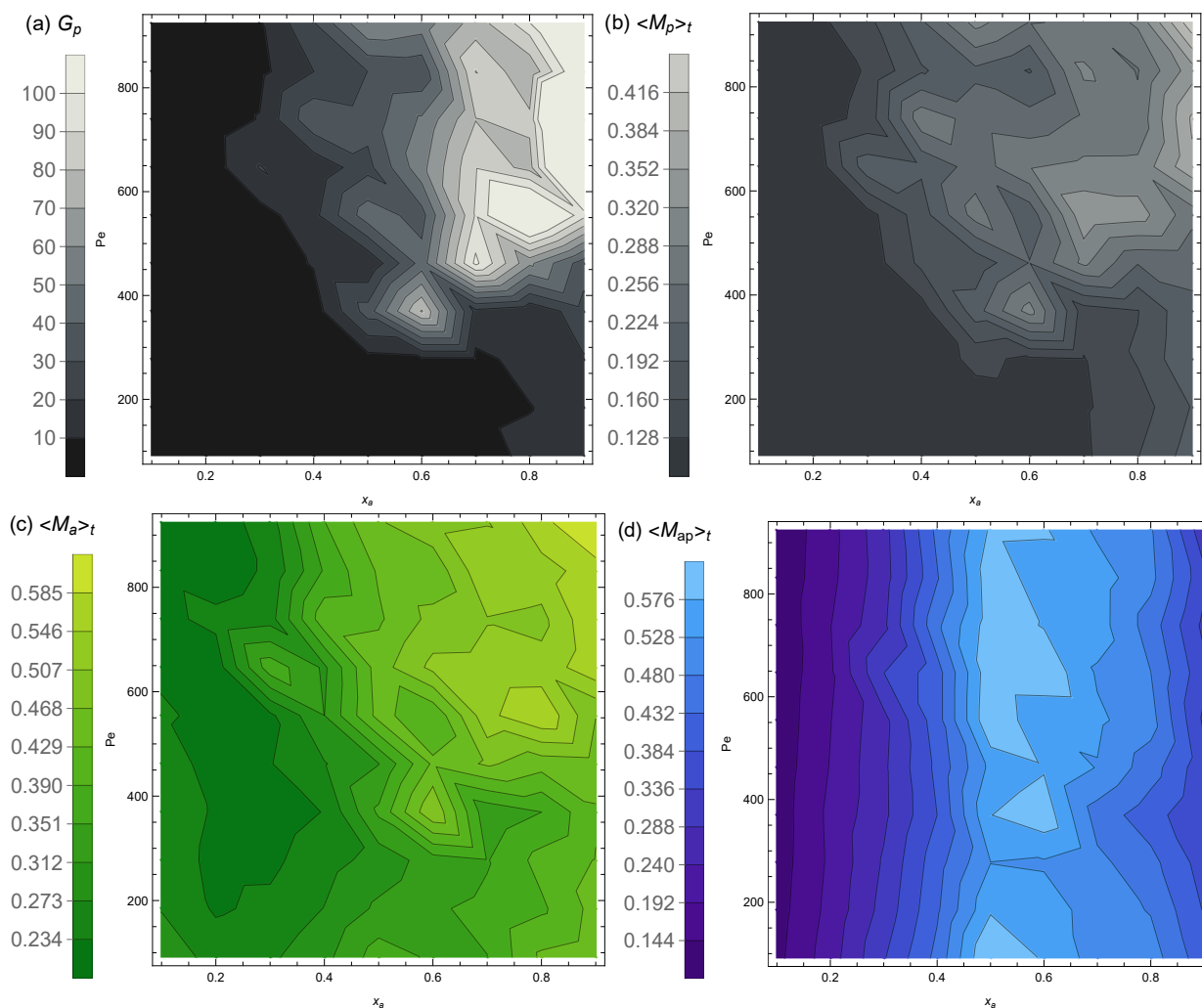


FIGURE 4.23 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.1$ et $\alpha_n = 0.1$ pour différents indices. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

La ségrégation spatiale et la ségrégation de populations sont grandement accentuées pour une valeur $\alpha_n = 0.1$ (figure 4.23). On observe clairement que la formation de phases plus denses pour des valeurs de Pe et x_a est assez élevée, mais également que la ségrégation de population peut être très importante, surtout pour $x_a = 0.5$. Ces différences sont mises en évidence par les diagrammes de phase de la figure 4.24. La ségrégation de populations ne dépend presque plus de l'activité Pe , ce qui indique que la ségrégation de populations est induite par l'alignement et non pas par l'activité, alors que la ségrégation de phases dépend toujours de l'activité.

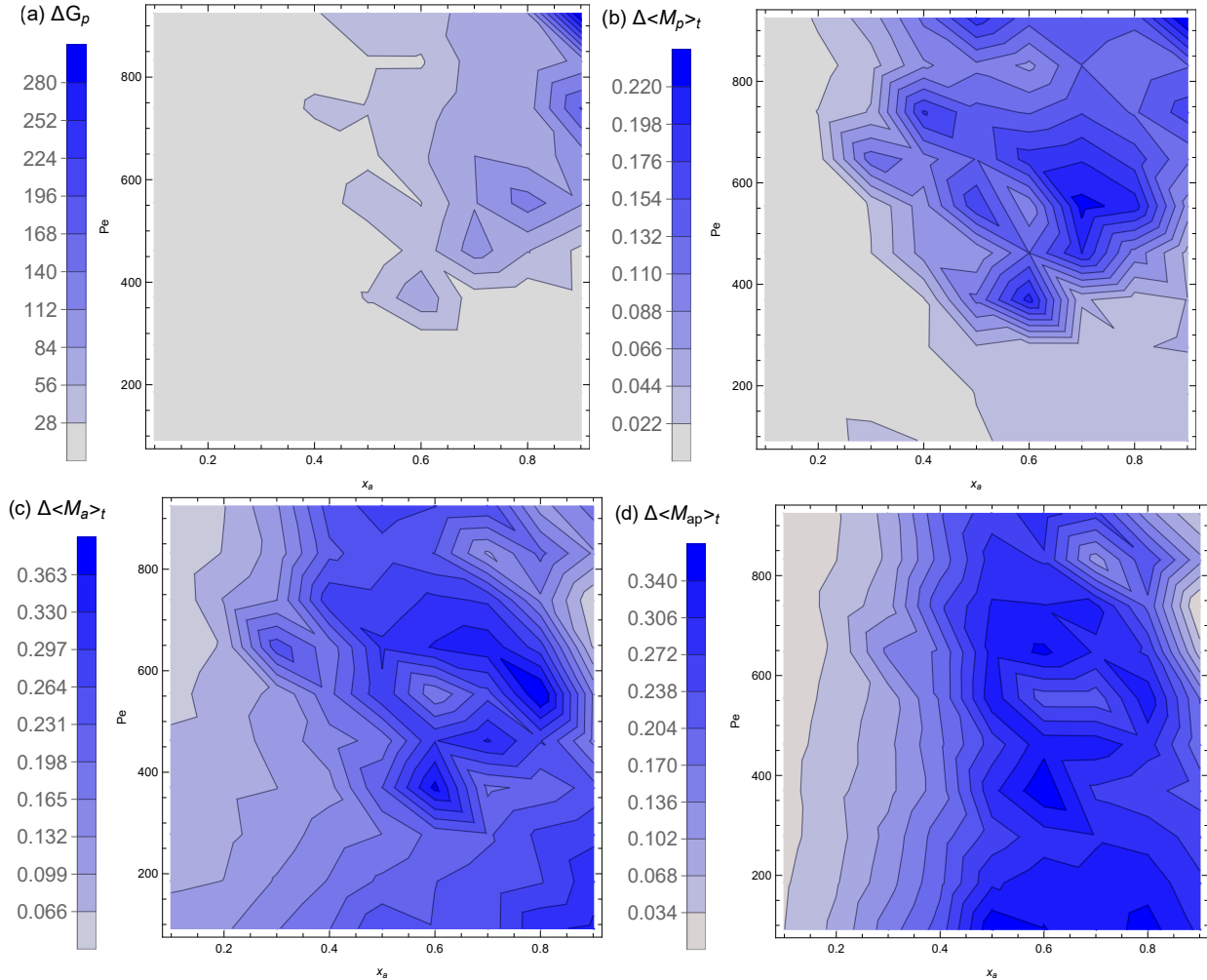


FIGURE 4.24 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.1$ et $\alpha_n = 0.1$ pour la différence des indices entre les valeurs obtenues avec (4.23) et sans (4.17) alignement. Les valeurs positives bleues indiquent que l'indicateur avec alignement est supérieur. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

L'alignement moins intense permet plus facilement la formation de phases denses car il brise moins facilement des amas qui se forment avec des particules qui se frottent. L'ap-

parition de ces amas est donc beaucoup plus probable, même s'ils sont toujours éphémères et se forment et déforment au cours du temps. Ceci est mis en évidence par les différents instantanés de la figure 4.25.

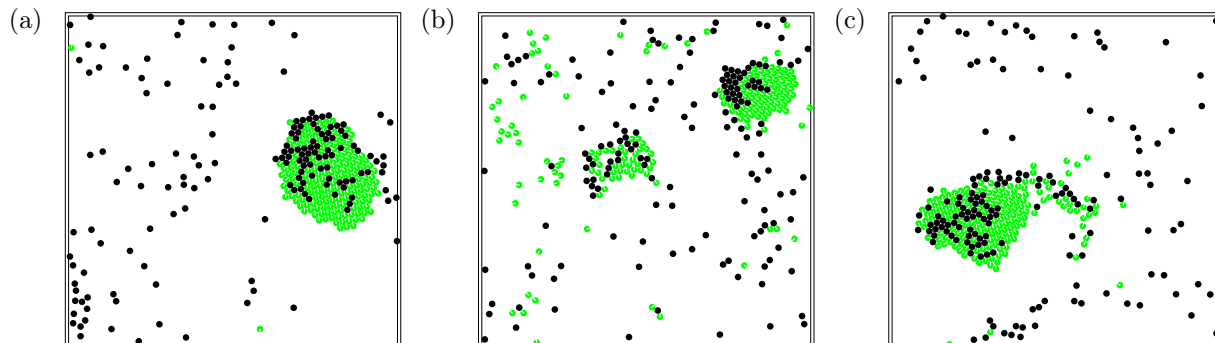


FIGURE 4.25 – Instantanés d'un ensemble de particules passives et actives avec comme paramètres $\phi_0 = 0.1$, $x_a = 0.5$, $Pe = 369.5$ et $\alpha_n = 0.1$ après (a) 20 secondes, (b) 40 secondes et (c) 60 secondes.

La comparaison des diagrammes de phase pour les alignements faible et élevé est illustrée dans la figure 4.26.

D'une part, il devient évident que l'alignement faible permet une réelle formation de phases denses par rapport à l'alignement élevé avec les trois premiers indices. Comme pour la séparation de phases induite par l'activité, la formation de phases denses dépend de l'activité et de la fraction de particules actives.

D'autre part, la ségrégation de populations est impactée de manière moins évidente par l'alignement. Les différences observées semblent plus être liées à l'écart-type sur les données obtenues que sur de vraies différences. Un alignement fort pourrait éventuellement favoriser la séparation de phases si x_a est très élevé ou si Pe est faible, mais la différence n'est pas assez importante pour pouvoir le conclure avec certitude.

4.4.3 Discussion

Les comportements biologiques des particules actives ont un impact sur leur disposition par rapport aux particules passives. Un modèle aussi simple que celui présenté dans cette section, basé sur le modèle de Vicsek [11], permet de mettre facilement en évidence cet impact, même pour des concentrations faibles.

Il est impossible d'obtenir une conclusion universelle sur le comportement de planctons en contact avec du plastique, vu l'aspect purement théorique des facteurs utilisés pour l'alignement et vu la diversité des caractéristiques du plancton. Il est tout de même possible de mettre en évidence le fait que si le nombre de planctons est plus important que le nombre de morceaux de plastique et que le plancton n'a pas une vitesse trop importante, il semblerait que le plancton évite spontanément le plastique sans forcément former des phases denses, vu les valeurs des indices obtenues dans les diagrammes des figures 4.19 et 4.24.

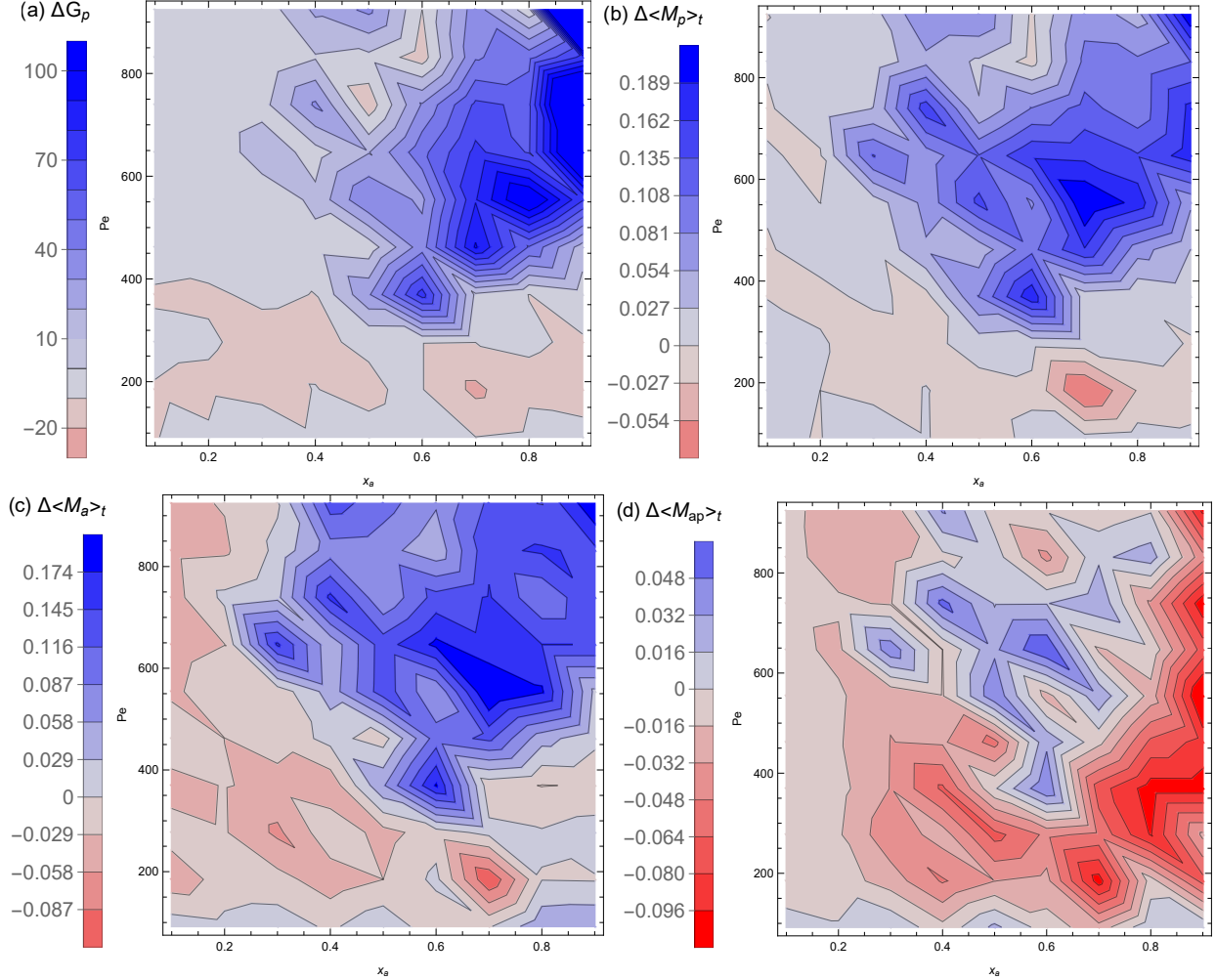


FIGURE 4.26 – Diagrammes de phase $Pe-x_a$ avec $\phi_0 = 0.1$ pour la différence de différents indices entre les valeurs obtenues avec alignement faible (4.23) et fort (4.18). Les valeurs positives bleues indiquent que l'indicateur avec alignement faible est supérieur. (a) Maximum de la fonction de distribution radiale $g_p(r)$. (b-c-d) Moyennes temporelles des indices de ségrégation M_p , M_a et M_{ap} .

4.5 Interactions dipolaires

Vu les résultats obtenus précédemment, il semble difficile de séparer une population active d'une population passive et de récolter une population passive sans ajouter un autre paramètre. Même si les interactions biologiques semblent rendre plus facile la séparation entre les particules actives et passives, cela n'est pas suffisant pour récolter les particules passives. Les obstacles statiques semblent également être une méthode difficilement applicable afin de récolter une population passive.

Une autre piste permettant cette récolte de particules passives serait l'utilisation de particules actives artificielles, auxquelles il serait possible d'ajouter des caractéristiques mo-

dulables en fonction des besoins. Des particules de ce type existent déjà et sont utilisées pour réaliser différentes tâches [14-19].

Ainsi, pour la suite des simulations effectuées, une population de particules passives, qui représentent toujours de la pollution dans le milieu aqueux, sera mise en contact avec des particules actives. Ces particules actives ne représentent plus des organismes vivants, mais des particules artificielles. Afin de visuellement représenter ce changement, les particules actives ne seront plus vertes mais orange. Les sections suivantes ont ainsi pour but d'étudier l'impact de caractéristiques choisies pour ces particules artificielles sur la ségrégation et la récolte des particules passives.

La première tentative de capture effectuée est d'ajouter un dipôle à chaque particule artificielle, afin que les interactions entre ces particules favorisent la récolte de particules passives. En pratique, tous types d'interactions dipolaires pourraient être utilisées. Dans le cas présent, ce sont des dipôles magnétiques qui auront été utilisés, permettant l'utilisation des notations usuelles liées à un tel type de dipôle.

4.5.1 Implémentation

L'ajout d'un dipôle à une particule nécessite l'ajout de 4 caractéristiques. En plus de la valeur du moment magnétique m , il est nécessaire de l'orienter par rapport à la direction de la particule via un angle θ_d , et de le placer au sein de cette particule. Par facilité d'implémentation, ce positionnement est déterminé en coordonnées circulaires r_d et ϕ_d par rapport au centre de la particule et par rapport à son orientation.

Grâce à la position et l'orientation de deux particules avec les quatre caractéristiques de leur dipôle, il est possible de déterminer la force et le moment qui s'applique sur chacune des particules. Considérant \mathbf{m}_i et \mathbf{m}_j les moments des dipôles des particules i et j , et \mathbf{r}_{ij} le vecteur liant les deux dipôles, la force exercée par le dipôle i sur le dipôle j est exprimée dans l'équation 4.3.

$$\mathbf{F}_{m,ij} = \frac{3\mu_0}{4\pi|\mathbf{r}_{ij}|^4} (\mathbf{m}_i(\mathbf{m}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \mathbf{m}_j(\mathbf{m}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + \hat{\mathbf{r}}_{ij}(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) - 5\hat{\mathbf{r}}_{ij}(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{m}_i)(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{m}_j)) \quad (4.3)$$

Par la troisième loi de Newton, la force exercée par le dipôle j sur le dipôle i est égale en norme et de sens opposé.

Le moment de force qui s'applique sur le dipôle j présent dans le champ induit du dipôle i est donné par l'équation 4.5.

$$M_{m,ij} = \mathbf{m}_j \times \mathbf{B}_i \quad (4.4)$$

$$= \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{(\mathbf{m}_j \times \hat{\mathbf{r}}_{ij})(\mathbf{m}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij}) - (\mathbf{m}_j \times \mathbf{m}_i)}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} \quad (4.5)$$

Si le dipôle n'est pas au centre de masse de la particule j , un moment de force résultant de l'application d'une force sur la particule est à considérer. Celui-ci est exprimé dans l'équation

4.6, avec \mathbf{r}_d le vecteur position du dipôle par rapport au centre de la particule et $\mathbf{F}_{m,ij}$ obtenu à partir de l'équation 4.3.

$$M_{r,ij} = \mathbf{r}_d \times \mathbf{F}_{m,ij} \quad (4.6)$$

De manière générale, et contrairement aux forces \mathbf{F}_m , les moments de force appliqués sur les particules suite à la présence de dipôles ne sont pas liés par paires, et doivent être calculés de manière indépendante. Le calcul de ces moments est tout de même effectué à partir des équations 4.5 et 4.6, en inversant les indices i et j .

Il est possible d'adapter les cellules liées, présentées pour faciliter le calcul des contacts, afin de limiter la quantité de calculs à effectuer pour les interactions dipolaires. En effet, dans un espace à deux dimensions, ces interactions sont de courte portée, grâce à la décroissance en $1/r^4$ [49]. Il est ainsi possible de définir une distance de cut-off au-delà de laquelle les interactions entre particules ne seront plus calculées. En définissant la taille des cellules comme ayant une longueur supérieure à cette distance de cut-off, et en calculant les interactions uniquement dans les particules situées dans le voisinage de cellules, il est possible de conserver le comportement approximatif des particules en accélérant énormément l'exécution des simulations.

Cette distance de cut-off r_c peut être obtenue à partir d'une fraction d de l'interaction maximale entre deux particules de rayon R , comme présenté dans l'équation 4.8. La fraction d est typiquement inférieure à 0.1.

$$\frac{1}{r_c^4} = \frac{d}{(2R)^4} \quad (4.7)$$

$$\implies r_c = \frac{2R}{d^{1/4}} \quad (4.8)$$

Il est également possible d'appliquer un champ magnétique externe uniforme \mathbf{B} à chaque particule. Cela aura pour effet d'ajouter une nouvelle contribution de moment de force qui favorisera l'alignement des dipôles m des particules avec ce champ magnétique externe. Ce moment de force est exprimé dans l'équation 4.9.

$$M_{B,i} = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B} \quad (4.9)$$

4.5.2 Simulations

Effectuer ce type de simulations demande plus de capacité de calculs. Afin de faire en sorte que les simulations puissent être réalisées dans des temps acceptables, leur durée a été réduite à 40 secondes. Cela n'a pas d'impact significatif sur les résultats, car des structures stables se forment généralement avant la dizaine de secondes. Il est néanmoins toujours utile de vérifier que ces structures sont stables en observant leur évolution après leur formation.

Le choix du nombre de particules a également un impact sur le temps de calculs nécessaire à la réalisation d'une simulation. Cependant, ce choix peut avoir un impact conséquent sur les résultats obtenus. Le choix arbitraire de 160 particules actives ($\phi_a \approx 0.05$) et 100 particules passives ($\phi_p \approx 0.03$) a été posé. Cela permet d'observer la capture et d'autres

phénomènes pour des concentrations très faibles, ce qui se rapproche plus des milieux réels tels qu'un liquide contaminé par du plastique. Ces concentrations sont plus faibles que celles nécessaires pour observer une séparation de phases avec de simples particules actives et passives.

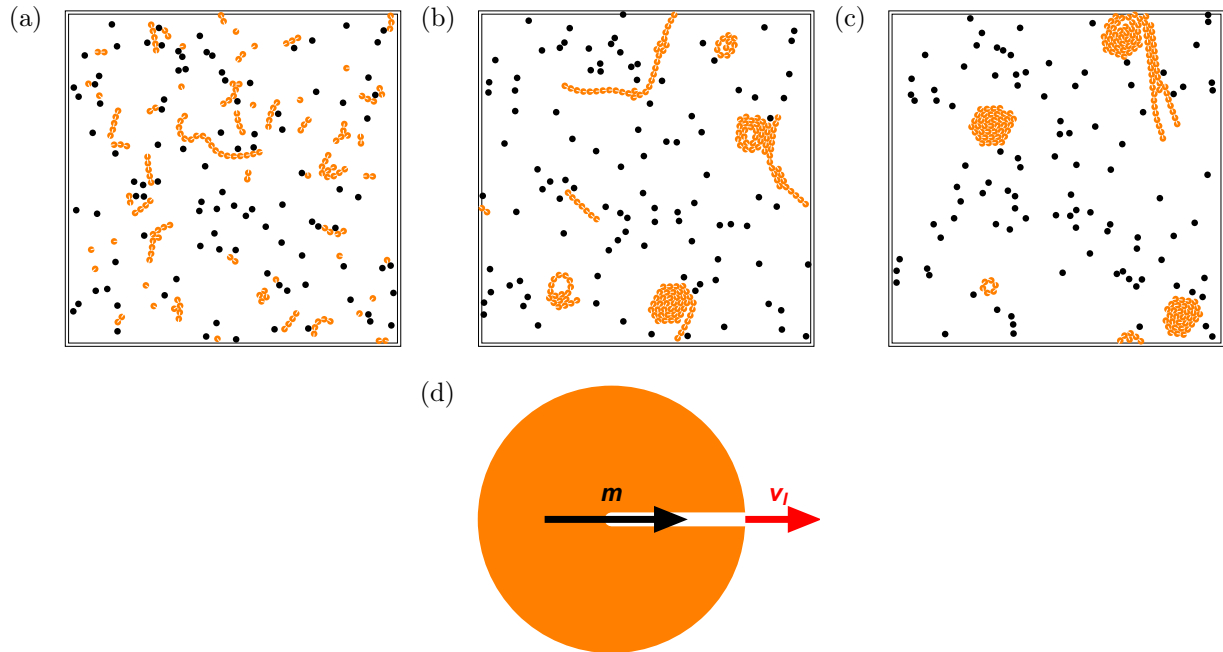


FIGURE 4.27 – Instantanés d'un ensemble de particules passives et actives ($Pe = 230.94$) dont le moment magnétique $m = 3 \times 10^{-11}$ A m² est aligné avec l'axe de propulsion après (a) 0.33 secondes, (b) 4 secondes et (c) 40 secondes. (d) Schéma d'une particule active avec le moment magnétique \mathbf{m} et la propulsion \mathbf{v}_1 .

La manière la plus évidente et directe pour ajouter un dipôle à une particule active est de placer un dipôle au centre et orienté dans l'axe de la propulsion (figure 4.27d).

Des particules assez proches vont alors avoir tendance à former des chaînes, comme observé dans l'instantané 4.27a. La formation de chaînes est un phénomène cohérent pour ce type de particules, puisque des simulations similaires ont déjà été effectuées en 3D avec des charges électriques formant un dipôle dans l'axe de propulsion des particules [43]. Ces chaînes sont formées de particules alignées, et dont la propulsion est dirigée dans une seule et même direction. Vu la concentration de particules actives, ces chaînes finissent par rentrer en contact. Suite à ces collisions, les chaînes peuvent fusionner pour devenir encore plus longues, comme observé dans l'instantané 4.27b, mais elles auront tendance à finir par s'effondrer et former des spirales de particules, grâce à la combinaison de la propulsion et des interactions dipolaires, comme observé dans l'instantané 4.27c. Ces grappes ont peu de chances de contenir des particules passives, ce qui ne permet donc pas une capture efficace des particules.

D'autres phénomènes peuvent également se produire, notamment en fonction de l'intensité des interactions dipolaires. Cela ne semble tout de même pas être une méthode efficace

pour capturer des particules passives.

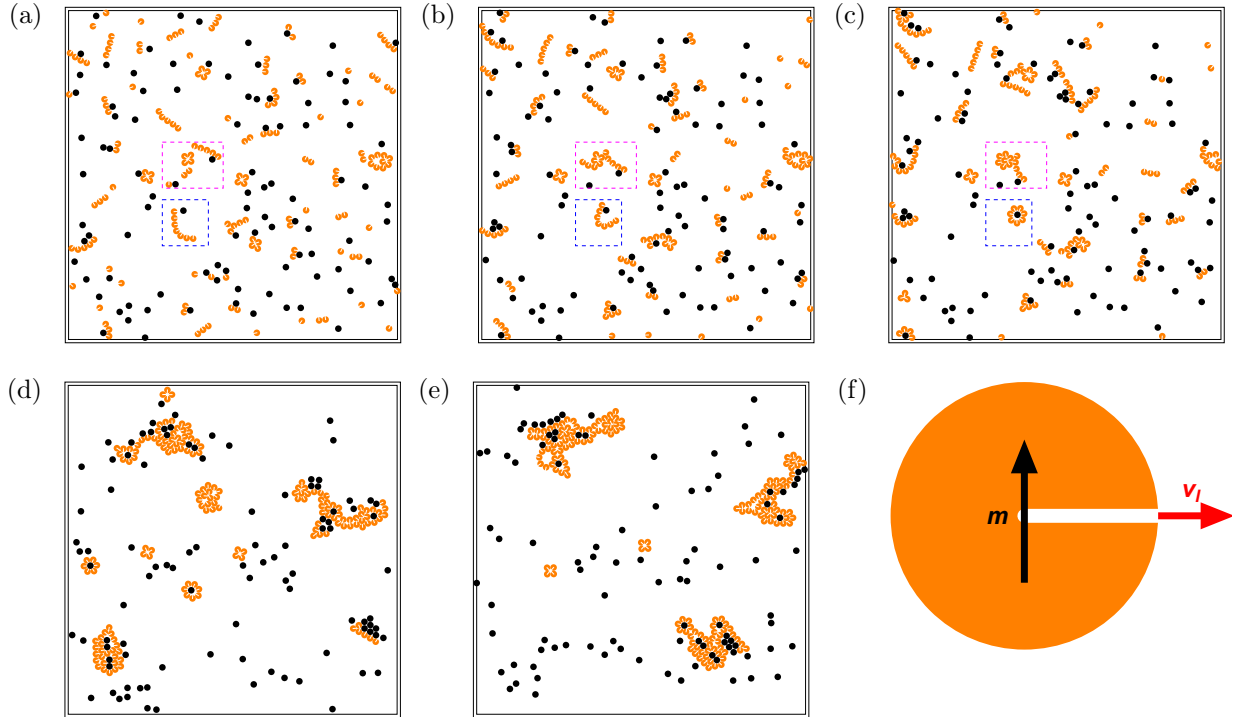


FIGURE 4.28 – Instantanés d’un ensemble de particules passives et actives ($Pe = 230.94$) dont le moment magnétique $m = 4 \times 10^{-11}$ A m² est perpendiculaire à leur propulsion après (a) 0.2 secondes, (b) 0.33 secondes, (c) 0.47 secondes, (d) 4 secondes et (e) 40 secondes. Les rectangles mauves et bleus permettent d’illustrer respectivement la collision des particules actives et d’un mur de particules actives avec une particule passive. (f) Schéma d’une particule active avec le moment magnétique \mathbf{m} et la propulsion \mathbf{v}_l .

Dans l’optique de créer des lassos de particules actives entourant les particules passives, orienter différemment le dipôle est une méthode qui pourrait s’avérer efficace. Ce nouveau degré de liberté ouvre énormément de possibilités, surtout en combinaison avec d’autres phénomènes comme la chiralité, et il est nécessaire de se limiter à un cas particulier prometteur. Les dipôles seront désormais orientés perpendiculairement à l’axe de propulsion des particules (figure 4.28f).

Comme pour les dipôles orientés dans l’axe de la propulsion, des chaînes vont commencer à se former une fois les particules en contact. Cependant, vu l’orientation des dipôles, ces chaînes ne vont pas se déplacer selon l’axe de la chaîne, mais perpendiculairement à celui-ci. Des sortes de murs de particules commencent alors à se déplacer, comme observé dans l’instantané 4.28a. Des petits cercles de particules se forment également. Puisque les particules qui les constituent se propulsent dans la même direction, les murs peuvent alors rencontrer d’autres murs et particules actives, ou alors des particules passives.

D'une part, si des murs de particules actives entrent en contact, ceux-ci peuvent fusionner et former un mur plus long, ou alors s'amasser comme observé dans les encarts mauves des figures 4.28a, 4.28b et 4.28c. D'autre part, en rencontrant des particules passives, un mur peut englober ces particules, qui peuvent alors être considérées comme capturées. Un tel phénomène est observable dans les encarts bleus des figures 4.28a, 4.28b et 4.28c.

Plus le temps passe, plus ces phénomènes vont se produire, et les particules actives vont peu à peu s'amasser en capturant de plus en plus de particules passives (figures 4.28d et 4.28e). Après un certain moment, ces amas deviennent stables et ne sont alors plus capables de récolter des particules passives.

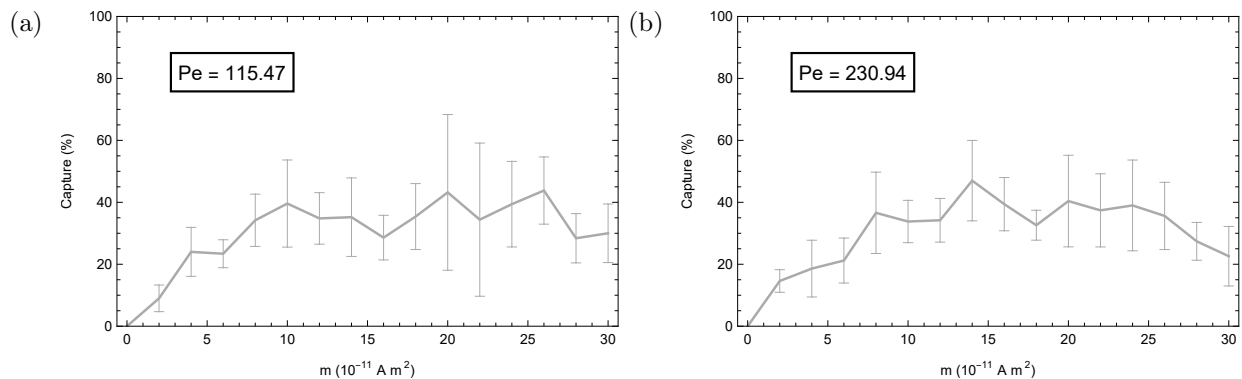


FIGURE 4.29 – Moyenne sur cinq simulations du pourcentage de particules capturées grâce à une population de particules actives avec un moment magnétique m . (a) $Pe = 115.47$. (b) $Pe = 230.94$.

Il est possible d'observer l'efficacité d'un tel mélange, en déterminant le pourcentage de particules passives entourées par des particules actives. La moyenne et l'écart-type de ces résultats en fonction du moment magnétique m pour deux valeurs du nombre de Péclet sont illustrées dans la figure 4.29. Analyser ces deux graphiques permet d'obtenir des informations sur l'origine des phénomènes.

Si le dipôle est trop faible, les particules auront tendance à se rapprocher les unes des autres suite aux interactions dipolaires, mais ces interactions ne seront pas assez importantes pour empêcher les particules actives de simplement s'amasser à cause de leur propulsion. Cela permet de coincer une partie des particules passives, mais ce n'est pas efficace.

En augmentant graduellement l'intensité des dipôles, il devient plus difficile pour les particules de former des amas. Cela mène à une augmentation du nombre de particules passives capturées par les murs, qui ont toujours tendance à s'effondrer suite à des collisions avec d'autres murs ou d'autres particules passives.

Cependant, si l'intensité des dipôles est trop importante, les murs seront trop solides et n'engloberont plus les particules passives. Celles-ci pourront toujours être capturées, mais cela sera moins probable.

En analysant ces graphiques, il est fondamental de faire attention aux écarts-types. Ceux-ci sont en effet conséquents par rapport aux valeurs obtenues, ce qui montre bien que le phénomène de capture n'est pas constant avec un ensemble de caractéristiques données, et qu'il dépend énormément des conditions initiales. Cela s'explique aussi par le nombre

limité de mesures pour chaque ensemble de caractéristiques, qui n'étaient basées que sur cinq simulations.

Il n'est ainsi pas possible de déterminer la valeur optimale pour l'intensité du dipôle, vu les incertitudes liées aux mesures, mais les différentes tendances peuvent tout de même être observées.

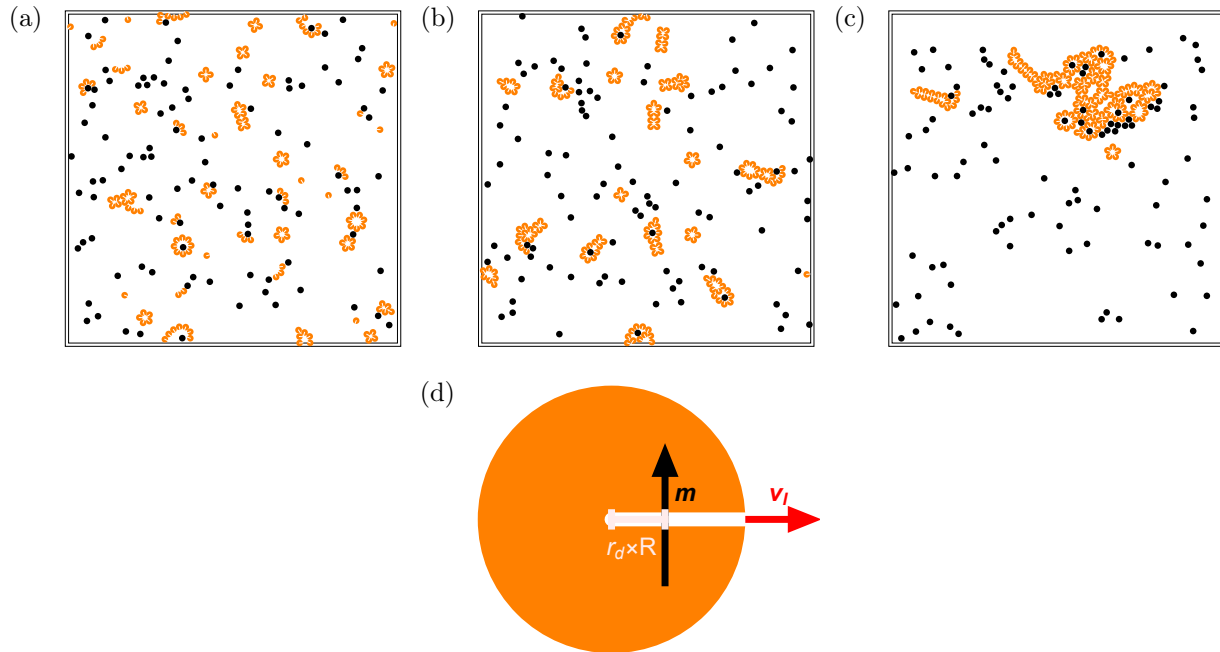


FIGURE 4.30 – Instantanés d'un ensemble de particules passives et actives ($Pe = 230.94$) dont le moment magnétique $m = 4 \times 10^{-11} \text{ A m}^2$ est perpendiculaire à l'axe de propulsion et placé à une fraction $r_d = 0.2$ du rayon par rapport au centre après (a) 0.33 secondes, (b) 4 secondes et (c) 40 secondes. (d) Schéma d'une particule active avec le moment magnétique \mathbf{m} , la fraction r_d du rayon où est placé le moment magnétique et la propulsion \mathbf{v}_1 .

Afin d'améliorer le taux de capture des particules passives, déplacer le dipôle au sein des particules pourrait être une méthode concluante. Avec un raisonnement intuitif, les forces d'attraction entre particules devraient permettre la formation facilitée d'arcs de cercle et non plus de murs rectilignes. Il devient évident que cette méthode n'est pas efficace au vu des résultats présentés ci-après.

Un schéma des caractéristiques principales de ces particules actives est illustré dans la figure 4.30d.

Si le décalage du dipôle est élevé ($r_d = 0.2$), les particules vont former dès le début des structures très compactes composées d'un nombre faible de particules (figure 4.30a). Ces petites structures s'assemblent alors pour constituer de plus grandes structures (figure 4.30b), et pour finalement former une superstructure (figure 4.30c). La probabilité que des particules passives soient capturées lors de ces fusions de structures est assez faible, et ne permet pas de capturer efficacement les particules passives.

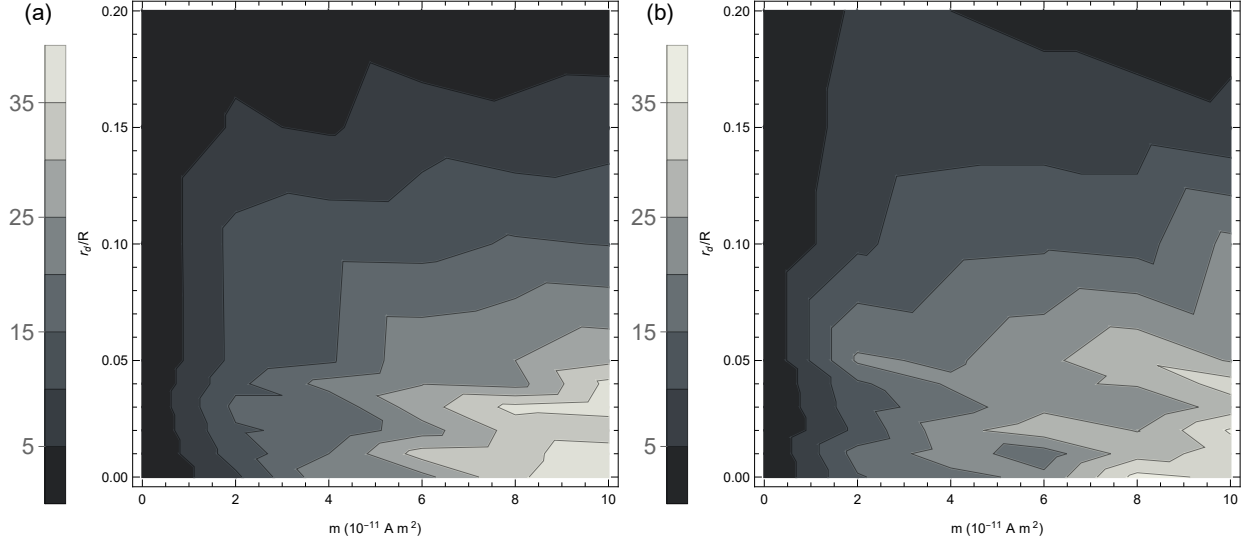


FIGURE 4.31 – Moyenne sur cinq simulations du pourcentage de particules capturées grâce à une population de particules actives avec un moment magnétique m perpendiculaire à la direction de la propulsion et situé à une fraction r_d du rayon par rapport au centre de la particule. (a) $Pe = 115.47$. (b) $Pe = 230.94$.

Un nombre important de simulations a été effectué, afin d’appréhender l’effet de r_d sur la capture. Les résultats issus de ces simulations sont recensés dans la figure 4.31. Il devient évident qu’éloigner le dipôle du centre de la manière présentée a un impact négatif sur la capture. Certains couples (m, r_d) semblent permettre de légèrement améliorer la capture. Néanmoins, c’est le cas pour des valeurs très faibles de r_d , et avec une différence de résultats bien inférieure aux écarts-types associés.

4.5.3 Discussion

L’ensemble de ces simulations a permis d’obtenir différentes conclusions fondamentales pour imaginer des particules actives récoltant des particules passives.

- L’ajout d’un dipôle orienté perpendiculairement à la direction de la propulsion des particules permet de favoriser la capture de particules passives par des particules actives, qui se retrouvent coincées comme des défauts dans un cristal.
- Si l’intensité des dipôles est trop faible ou trop forte, la capture ne sera pas optimale. Il est nécessaire de trouver la gamme de valeurs pour laquelle le phénomène est le plus prononcé, gamme qui dépend probablement de différentes caractéristiques des particules.
- Éloigner le dipôle du centre de la particule selon l’axe de propulsion semble au pire avoir un fort impact négatif sur l’effet de capture, et au mieux un éventuel impact légèrement positif pour des éloignements très faibles.

Pour ces trois raisons, les caractéristiques permettant la capture la plus importante seront utilisées pour la suite des simulations. Ces caractéristiques sont : $Pe = 230.94$, $m = 14 \times$

10^{-11} A m^2 et $r_d = 0$.

Cependant, suite aux résultats obtenus, il est évident que la simple utilisation de ces caractéristiques n'est pas suffisante pour considérer que la capture de particules passives soit efficace. Deux problèmes majeurs sont à corriger pour améliorer l'efficacité :

1. Les particules actives ont tendance à former des doubles couches, limitant grandement le nombre potentiel de particules passives capturées par particule active.
2. Les conditions initiales influent énormément sur l'efficacité du phénomène.

Des pistes pour résoudre ces deux problématiques seront explorées dans les deux sections suivantes.

4.6 Interactions longue portée

La formation de bicouches est liée à la propulsion et à la force attractive des dipôles. Ces structures ressemblent à des bicouches formées par des particules amphiphiles. Cela limite l'efficacité de la capture, puisque plus de particules sont nécessaires pour capturer un même nombre de particules. Il serait intéressant d'ajouter une composante répulsive aux particules, ce qui permettrait de limiter cette formation de bicouches. L'aspect longue portée de cette répulsion peut être important, puisque cela pourrait permettre d'obtenir des interactions plus fortes d'attraction à courte portée, pour ne pas empêcher la formation de murs.

Cette répulsion longue portée sera modélisée avec les conventions des interactions entre charges électriques de même signe, même si toute interaction répulsive évoluant en $1/r^2$ conviendrait.

4.6.1 Implémentation

Pour rajouter des interactions à longue portée, une charge électrique est ajoutée au centre de chaque particule active. Cet ajout ne dépend donc que d'un seul paramètre, la charge ajoutée. La force exercée par une particule i sur une particule j est donc exprimée par la loi de Coulomb de l'équation 4.10.

$$\mathbf{F}_{\mathbf{C},j} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (4.10)$$

Suite à la présence des dipôles magnétiques qui génèrent des champs magnétiques, la force de Lorentz incluant le terme $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ devrait également être incluse. Cela n'aura pas été pris en compte au cours des simulations pour deux raisons.

- La force obtenue à partir de ce terme donnerait une contribution selon l'axe z , faisant sortir les particules du plan simulé. Ce n'est donc pas possible avec les simulations effectuées, qui ne sont capables que de simuler des déplacements en 2D.
- Même si les formalismes des dipôles magnétiques et des charges électriques ont été utilisés, ce choix aura été motivé par facilité et non par nécessité. Il serait possible d'imaginer que les dipôles soient des dipôles électriques formés par une distribution non-uniforme de charges dans les particules, et que la répulsion soit la conséquence d'une charge totale non-nulle dans la particule. Considérer l'interaction entre les propriétés électriques et magnétiques restreindrait alors le modèle présenté.

Contrairement aux interactions dipolaires, la force de Coulomb ne peut être négligée à longue portée en deux dimensions [49]. Cela est dû au fait que la décroissance en r^{-2} de la force peut être compensée par la quantité de particules, qui évolue en r^2 . Il est tout de même nécessaire de simplifier ces interactions, pour réduire le temps d'exécution de telles simulations.

Pour ce faire, les cellules provenant de la détermination des contacts vont une nouvelle fois être adaptées. Les forces exactes d'interaction de charges vont être déterminées comme pour les contacts dans les cellules voisines. Pour éviter des effets d'anisotropie locale, la taille des cellules est augmentée.

De plus, à chaque pas de temps, la charge totale contenue dans une cellule sera calculée et associée à cette cellule. Ainsi, pour les interactions à longue distance, les particules vont interagir avec ce champ moyen dont la position est au centre de la cellule et dont la charge est la somme des charges incluses dans la cellule.

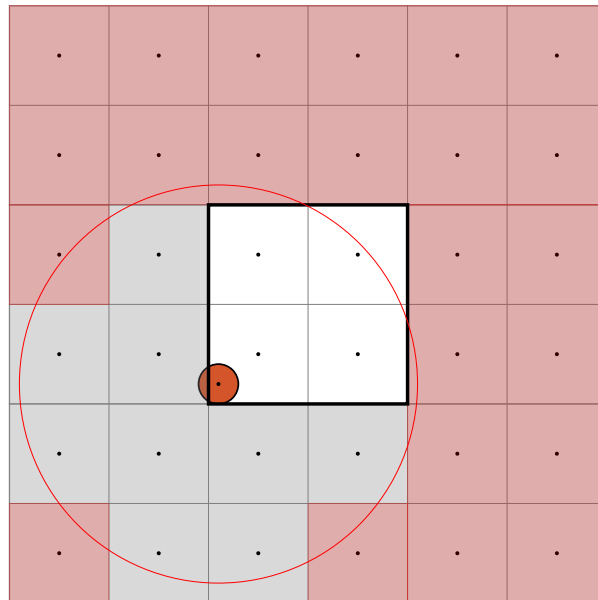


FIGURE 4.32 – Illustration d'une particule en orange située au bord du système réel en blanc, du centre des cellules en noir, des cellules fictives pour lesquelles les forces sont considérées en gris et des cellules pour lesquelles les forces ne sont pas considérées en rouge.

Cette méthode permet de grandement accélérer les simulations, mais il est toujours nécessaire de considérer les conditions de bord périodiques du système. Considérer simplement les 8 transpositions du système pour étendre le système global peut poser des problèmes de symétrie. En effet, si une particule se trouve proche d'un des bords du système et que les charges sont réparties de manière homogène dans le système, la force subie par la charge ne sera pourtant pas nulle. Cela provient du fait qu'un nombre plus important de forces seront déterminées d'un côté du système par rapport à l'autre. Cette force totale va avoir tendance à pousser les particules vers les bords, qui deviendront des zones où les particules oscilleront.

Pour limiter ces asymétries, les forces ne seront appliquées que si la distance entre la

particule et le centre de la cellule est inférieure à la dimension du système (figure 4.32).

Il est également possible d'appliquer un champ électrique \mathbf{E} uniforme à l'ensemble des particules. La force subie par les charges est donc exprimée par l'équation 4.11.

$$\mathbf{F}_E = q\mathbf{E} \quad (4.11)$$

4.6.2 Simulations

Pour obtenir l'effet de répulsion des murs formés par interactions dipolaires, une charge de même signe est ajoutée au centre de toutes les particules actives. L'intensité des forces répulsives va avoir un impact certain sur le comportement global des particules. En effet, si la répulsion est trop faible, le comportement sera similaire à celui obtenu en l'absence de charges. Si la répulsion est trop forte, les murs deviendront incapables de se fermer pour capturer des particules, ou les particules ne seront plus capables de former des murs dans des cas extrêmes.

Afin de visuellement représenter le fait que les particules ont des charges différentes, la couleur des particules actives est modifiée. Plus la charge est importante, plus la particule sera mauve. Cette modification de couleur, séparée en trois différentes classes, permet également de déterminer le comportement général des particules actives.

Les simulations ont été réalisées avec les paramètres optimaux obtenus précédemment. Les caractéristiques principales du système sont donc $\phi_a = 0.05$, $\phi_p = 0.03$, $Pe = 230.94$, $m = 14 \times 10^{-11} \text{ A m}^2$ et $r_d = 0$. Dix simulations de 10 secondes pour chaque valeur différente de la charge q ajoutée à toutes les particules ont été effectuées.

Contrairement aux simulations effectuées dans la section précédente, le nombre de particules passives entourées par des particules actives n'est pas l'indicateur adapté pour considérer si l'objectif est atteint ou non. L'objectif premier de l'ajout des charges est de ne plus créer que des monocouches de particules, et non des bicouches. La taille moyenne et normalisée des grappes de particules actives $\langle c_a \rangle$ permet, à l'aide d'une seule valeur numérique, d'évaluer le résultat obtenu. Cette mesure a été effectuée pour différentes valeurs de q , et les résultats sont recensés dans la figure 4.33d.

Si la charge q est faible, l'effet de répulsion ne va pas être assez important pour empêcher la formation de bicouches et de grandes structures (figure 4.33a). Des structures relativement compactes de tailles différentes vont alors se former. Cela explique la valeur moyenne élevée de $\langle c_a \rangle$, mais également l'écart-type élevé.

Pour une valeur intermédiaire de q , la répulsion va permettre de former de grandes chaînes qui se referment sur elles-mêmes (figure 4.33b). Ainsi, le nombre de particules qui constituent ces structures diminue, et l'écart-type diminue également, exprimant une formation plus uniforme des structures. La formation de membranes monochouches devient donc le phénomène majoritaire.

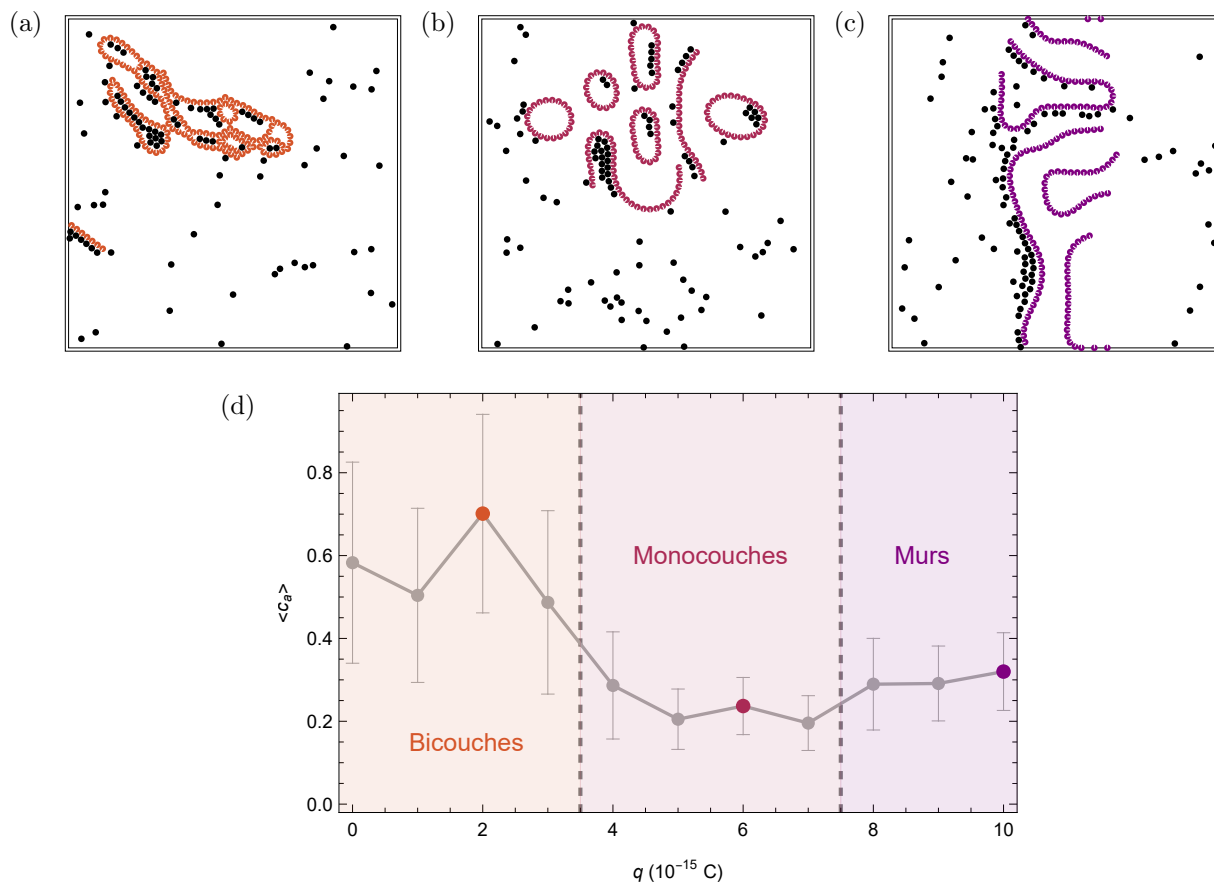


FIGURE 4.33 – Instantanés d’un ensemble de particules passives et actives après 10 secondes pour des charges (a) $q = 2 \times 10^{-15}$ C, (b) $q = 6 \times 10^{-15}$ C et (c) $q = 10 \times 10^{-15}$ C. (d) Moyenne sur dix simulations de la taille normalisée des clusters de particules actives après 10 secondes, en fonction de la charge des particules actives. Les trois zones sont définies pour donner une idée du comportement majoritaire des structures observées.

En augmentant encore la charge q , les structures vont moins se refermer, et former des murs plus longs en moyenne (figure 4.33c). Cette différence ne s’observe que faiblement sur les résultats de $\langle c_a \rangle$. Par contre, l’observation des instantanés permet aisément de conclure que les particules vont majoritairement former des murs qui ne se referment pas.

4.6.3 Discussion

Ajouter des charges aux particules actives, qui induisent des interactions répulsives entre elles, permet effectivement de limiter le nombre de particules actives par structure en empêchant la formation de bicouches. Il est toutefois nécessaire d’ajuster correctement l’intensité de cette répulsion, pour éviter d’obtenir des effets inexistantes ou indésirables.

Cette zone s’observe grâce à la moyenne $\langle c_a \rangle$ sur les simulations, mais également sur l’écart-type des résultats. Les structures de particules actives deviennent plus petites, et ont des tailles moins variables, comme observé dans la figure 4.33d.

La taille des structures formées devient également conséquente par rapport à la taille

des simulations. Les structures peuvent par exemple aboutir à de longs murs traversant l'ensemble de la simulation, formant ainsi un mur infini à cause de la périodicité. Il serait intéressant d'augmenter l'échelle des simulations pour obtenir de meilleurs résultats, et potentiellement des structures de taille beaucoup plus importante.

Uniquement ajouter des charges n'a pas permis d'améliorer le nombre de particules capturées, et a même eu tendance à réduire la capacité des structures formées à entourer des particules passives. Le problème lié à la variation des conditions initiales aléatoires, qui influencent grandement les résultats, n'a toujours pas été abordé au cours de cette section.

4.7 Champ magnétique

Un des avantages de travailler avec des particules aux propriétés magnétiques et électriques est la possibilité d'appliquer des champs qui vont affecter uniquement ces particules. L'utilisation de ces champs permet, dans les bonnes conditions, de grandement modifier les conditions initiales et de réduire la probabilité que la récolte ne s'effectue pas.

D'une part, un champ électrique uniforme va rajouter une force sur chaque particule. Puisque les particules ont toutes une charge de même signe, cette force sera toujours dans la même direction. Appliquer un tel champ pourrait donc être une méthode parmi d'autres pour récolter les structures formées. Néanmoins, cela ne semble pas être spécialement efficace pour faire en sorte que les structures de particules actives englobent les particules passives.

D'autre part, un champ magnétique va rajouter un moment de force, qui va favoriser l'alignement des dipôles avec ce champ. L'avantage de l'utilisation de ces champs est la combinaison avec l'autopropulsion, vu que les particules actives ont un dipôle perpendiculaire à la propulsion. Cela va permettre à l'ensemble des particules de se propulser dans une direction définie grâce au champ.

4.7.1 Simulations

Des simulations pour différentes valeurs de la charge q des particules ont de nouveau été effectuées, mais en appliquant un champ magnétique vertical pendant les 2 premières secondes, puis en laissant les particules évoluer sans stimulus extérieur pendant 18 secondes.

Le nombre moyen sur dix simulations de particules passives capturées après ces 20 secondes est recensé dans la figure 4.34d pour cinq valeurs de q différentes.

Le pourcentage de particules capturées est grandement amélioré par rapport aux résultats obtenus sans champ magnétique ni charge (figure 4.29). Pour des valeurs faibles de la charge q ($q \leq 2 \times 10^{-15}$ C), des bicouches peuvent se former, et la capture est importante (figure 4.34a). Les structures peuvent néanmoins être suffisamment longues pour traverser toute la simulation sans se refermer sur les particules passives.

En augmentant encore la charge ($q = 4 \times 10^{-15}$ C), les murs peuvent toujours se fermer en créant des structures plus courbes, menant à des zones internes aux structures plus grandes

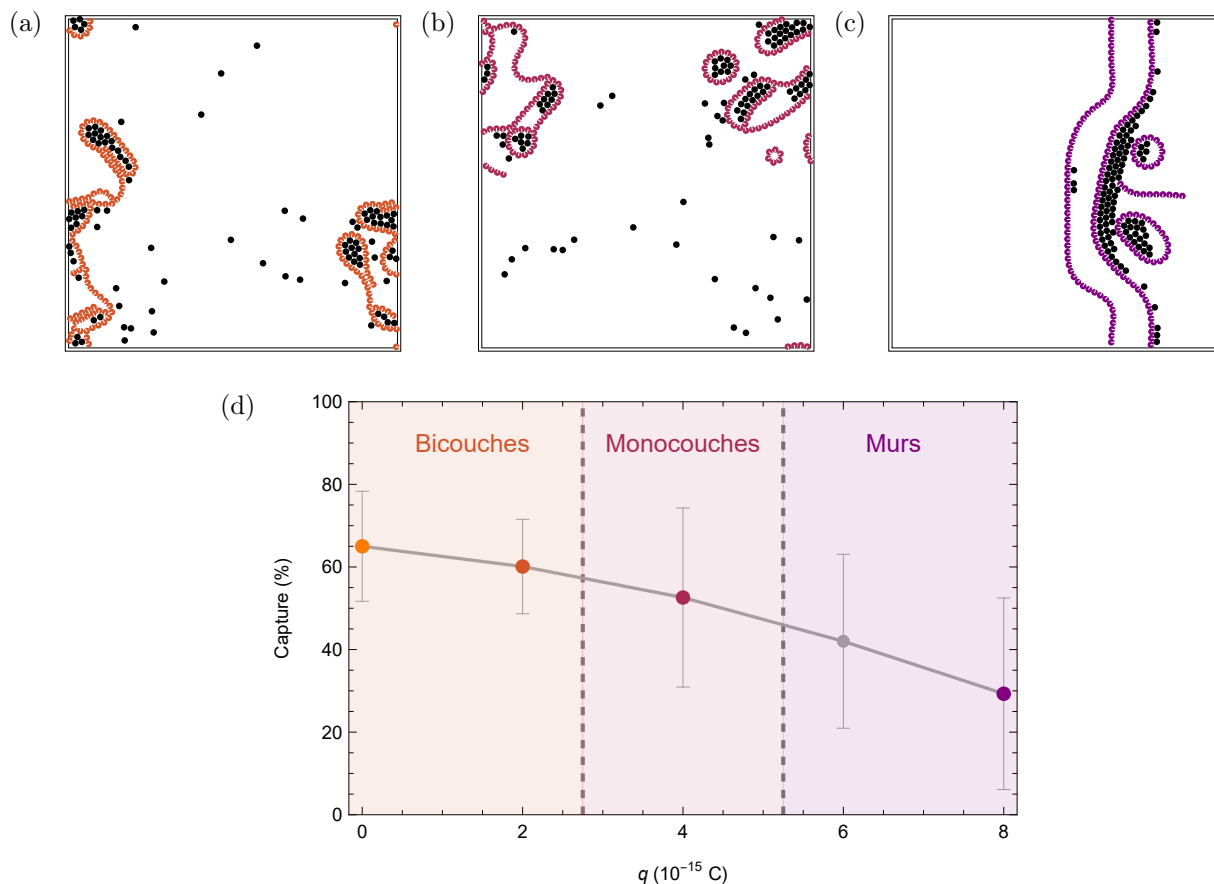


FIGURE 4.34 – Instantanés d’un ensemble de particules passives et actives après 2 secondes de champ magnétique et 18 secondes sans champ pour des charges (a) $q = 2 \times 10^{-15}$ C, (b) $q = 4 \times 10^{-15}$ C et (c) $q = 8 \times 10^{-15}$ C. (d) Moyenne sur dix simulations du pourcentage de particules capturées grâce à une population de particules actives magnétiques après l’application d’un champ magnétique.

et plus circulaires (figure 4.34b). Cependant, la possibilité que les murs ne se referment pas est toujours présente, et même quand les murs se referment, ils n’ont pas tendance à capturer plus de particules passives.

Pour des valeurs plus élevées de la charge ($q \geq 6 \times 10^{-15}$ C), les murs n’arrivent plus à se refermer, et la capture est un échec (figure 4.34c).

Quelques simulations à plus grande échelle ont été effectuées pour vérifier que l’impact de la taille des simulations n’est pas trop important. Quatre simulations ont ainsi été réalisées, pour différentes valeurs de la charge q , et dont la taille du système est quatre fois plus grande que précédemment. Un champ magnétique a été appliqué pendant 2 secondes, avant de laisser les particules se déplacer sans champ pendant 4 secondes. Trois instantanés de chacune de ces simulations sont illustrés dans la figure 4.35.

Les comportements des particules semblent similaires à ceux observés pour des simulations à plus petite échelle. Pour des charges assez faibles, les particules actives vont se refermer autour des particules passives, permettant la capture d’un nombre important de

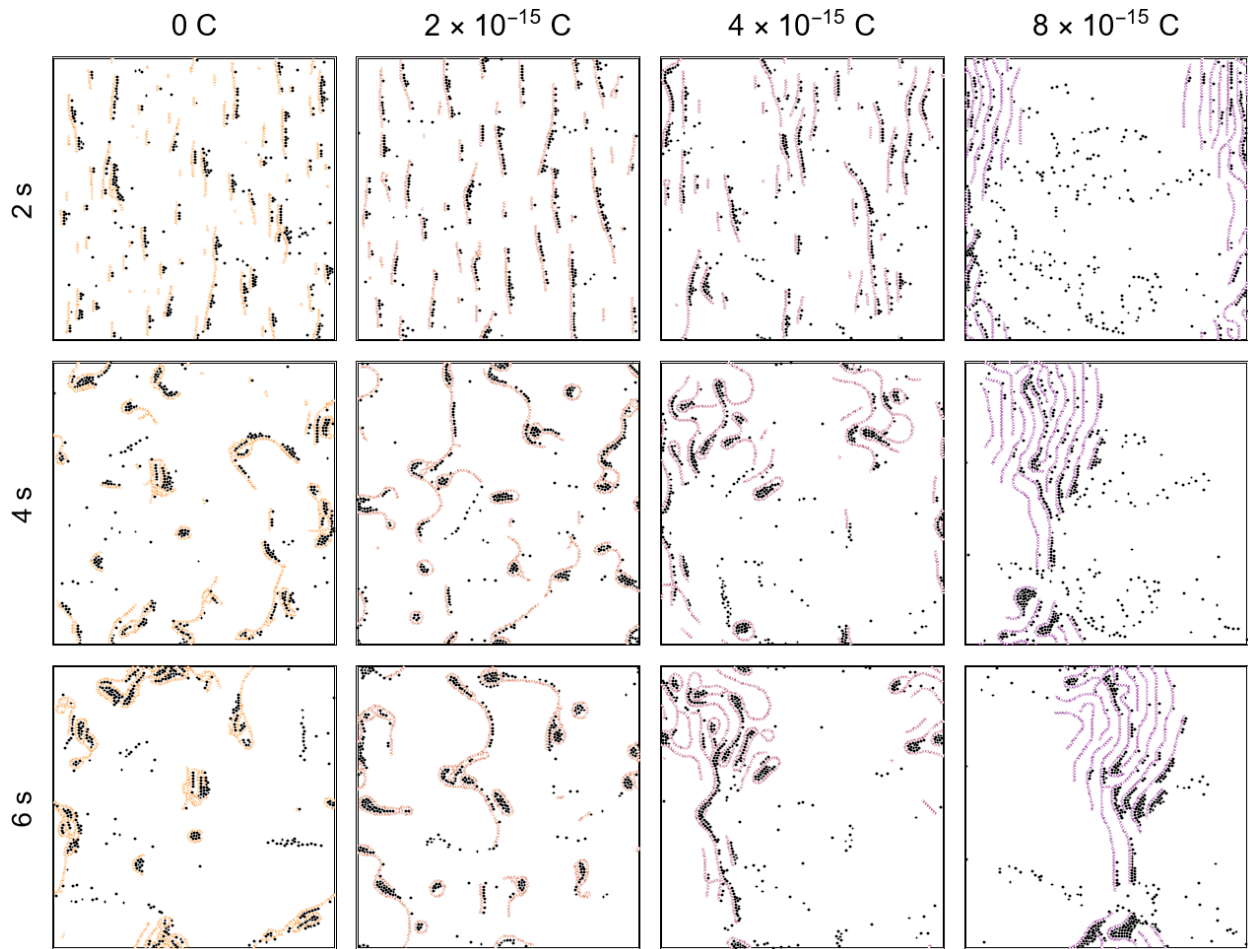


FIGURE 4.35 – Instantanés de simulations à grande échelle pour des particules magnétiques avec une charge q à différents moments, avec l’application d’un champ magnétique les 2 premières secondes.

ces particules. Progressivement, les charges vont empêcher les murs de particules actives de se refermer, jusqu’à ce qu’ils forment des murs se déplaçant les uns derrière les autres en emportant les particules passives, mais sans les entourer complètement.

4.7.2 Discussion

Appliquer un champ magnétique pendant 2 secondes permet de presque doubler le nombre de particules passives capturées en moyenne, sans ajouter de charge aux particules. Ajouter une charge permet effectivement de changer la structure, mais pas spécialement de favoriser la capture.

L’effondrement des structures sur elles-mêmes est rendue moins fréquente par l’application du champ magnétique. Un des mécanismes menant à la fermeture des structures est la collision entre murs, phénomène improbable puisque tous les murs ont tendance à se diriger dans la même direction à des vitesses similaires. Il est donc cohérent que ce phénomène soit

plus difficilement réalisable. Une conséquence directe est la valeur plus faible de la charge q pour que les particules forment majoritairement des murs qui ne se referment pas, comme observé en comparant les figures 4.33d et 4.34d.

Peu importe la charge q , les structures peuvent échouer à se refermer, ce qui est pourtant l'objectif fixé pour capturer des particules. Cependant, l'origine de ce phénomène ne provient peut-être pas de la physique des systèmes, mais de la taille des simulations. De manière générale, quand les murs ne se referment pas, ces structures ont une taille similaire à une des dimensions de la simulation, ou peuvent même former un grand mur qui se connecte à la frontière périodique de la simulation. En se reliant à la frontière périodique, toutes les particules de la chaîne ont deux voisins, ce qui stabilise grandement la structure dans sa globalité. Même si certaines simulations à plus grande échelle ont été effectuées, il est toujours nécessaire d'en effectuer un nombre important pour être capable de donner des conclusions pertinentes quant à l'efficacité de capture pour ces simulations.

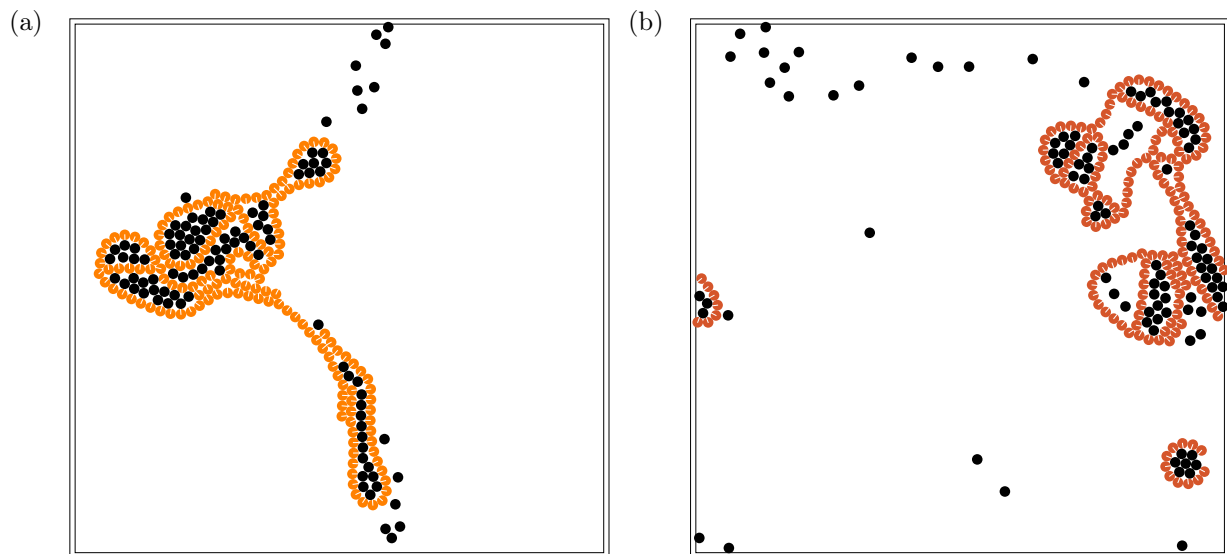


FIGURE 4.36 – Instantanés finaux de deux des simulations avec la capture la plus efficace. Caractéristiques : $\phi_a = 0.05$, $\phi_p = 0.03$, $Pe = 230.94$, $m = 14 \times 10^{-11} \text{ A m}^2$ et $r_d = 0$. (a) $q = 0 \text{ C}$ pour 84% de taux de capture. (b) $q = 2 \times 10^{-15} \text{ C}$ pour 74% de taux de capture.

Même si beaucoup de paramètres et de vérifications sont encore à effectuer, de bons résultats sont déjà obtenus avec les simulations effectuées. L'instantané final de deux des meilleures simulations est illustré dans la figure 4.36. Pour des valeurs de q inférieures à $4 \times 10^{-15} \text{ C}$, la capture n'est que rarement inférieure à 50% (une fois sur les dix simulations effectuées), et peut atteindre des valeurs autour de 80% quand celle-ci est particulièrement efficace.

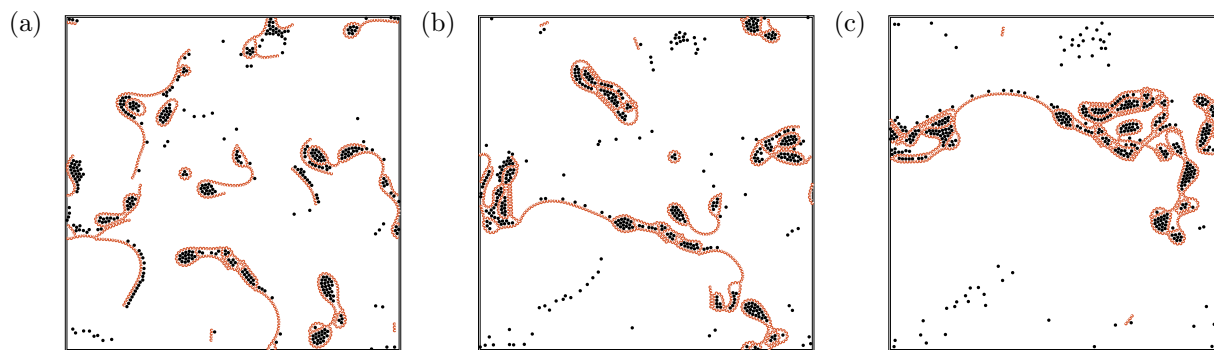


FIGURE 4.37 – Instantanés d’une simulation à plus grande échelle après (a) 5 secondes, (b) 10 secondes et (c) 40 secondes. Caractéristiques : $\phi_a = 0.05$, $\phi_p = 0.03$, $Pe = 230.94$, $m = 14 \times 10^{-11} \text{ A m}^2$, $r_d = 0$ et $q = 2 \times 10^{-15} \text{ C}$ pour 78.75% de taux de capture.

Une unique simulation relativement longue et à plus grande échelle a été effectuée (figure 4.37). Le comportement global est semblable à celui observé pour des simulations plus petites. Cependant, la superstructure finale est plus grande, puisqu’elle peut être composée d’un nombre plus important de particules. Plus la superstructure est grande, moins elle est mobile, indiquant que celle-ci ne devient plus capable de capturer de nouvelles particules. En l’occurrence, cette simulation aura permis de former une superstructure capturant 78.75% des particules passives.

Le protocole employé a donc permis d’obtenir des résultats satisfaisants, bien que pouvant encore être améliorés.

Chapitre 5

Conclusion

L'ensemble des simulations réalisées, qui se sont basées sur les études déjà publiées par de nombreux chercheurs en matière molle, aura constitué le cœur de ce mémoire. Trois pistes majeures ont été explorées pour séparer des populations de particules en fonction de leur activité, problématique inspirée par la pollution de micro-plastiques dans des eaux où différents organismes vivent.

Dans un premier temps, des obstacles statiques asymétriques ont été utilisés pour favoriser le déplacement des particules actives dans une direction donnée, étant une méthode efficace et déjà prouvée expérimentalement et numériquement. Néanmoins, aucune manière efficace dans ce travail n'a été trouvée pour directement récolter les particules passives de manière facilitée. Ces simulations auront tout de même permis de confirmer la validité du modèle numérique employé, et d'écartier une des trois pistes. Cette piste n'a pas non plus été totalement explorée, et il est peut-être possible d'utiliser efficacement des obstacles statiques pour récolter des particules passives.

Ensuite, les mélanges de particules passives et actives ont été étudiés, particulièrement au niveau des phénomènes de séparation de phases (MIPS). Pour des concentrations faibles, ce qui se rapproche des conditions réelles de plastiques et de planctons dans la mer, la séparation de phases ne s'observe que si des considérations biologiques sont prises en compte, en l'occurrence l'alignement des voisins. Cette séparation de phases devrait faciliter la récolte des particules passives, mais elle n'est pas suffisante pour permettre leur capture.

Suite à ces deux pistes explorées, les particules actives représentant le plancton ont été remplacées par des particules actives artificielles, dont les caractéristiques devraient permettre la récolte des particules passives. Ajouter un dipôle perpendiculaire à la propulsion et appliquer un champ qui aligne ces dipôles est une méthode qui va permettre de favoriser la formation de structures actives entourant les particules passives. L'ajout d'une force répulsive entre les particules actives permet de modifier la forme de ces structures, mais ne semble pas permettre d'entourer plus de particules passives.

Ajouter des dipôles correctement à chaque particule active semble être un protocole prometteur pour capturer des particules passives, et ainsi effectuer un traitement de l'envi-

ronnement aqueux en récoltant ces superstructures ainsi formées.

Cependant, ce mémoire n'a la prétention que d'explorer certaines pistes, sans effectuer d'étude en profondeur de chacune de ces pistes. Ce faisant, cela a tout de même permis de découvrir de nombreux phénomènes et caractéristiques qui pourraient être approfondis. Ces perspectives sont présentées ci-après.

Ce travail a fourni une première description des événements qui mènent à la formation de structures spécifiques. Il est probable qu'en analysant plus en détail ces événements, un modèle théorique pourrait potentiellement être établi afin de prédire des conditions optimales de capture. Ce modèle dépendrait certainement des caractéristiques magnétiques et électriques des particules, mais également de l'activité et des concentrations, paramètres qui n'ont été abordés que très brièvement.

De plus, avec les outils présentés, le protocole peut certainement être amélioré et étudié de manière plus profonde. Des simulations à plus grande échelle et couvrant plus en profondeur les paramètres présentés permettraient d'obtenir des résultats plus qualitatifs. L'impact de la taille du système n'a été observé que brièvement avec la figure 4.35, mais cet impact vaudrait la peine d'être étudié en détail. Le protocole peut également être affiné, en ajoutant par exemple des particules à certains moments précis, en faisant varier la propulsion au cours des simulations, ou encore en utilisant des champs plus complexes. La capture pourrait également être améliorée en appliquant successivement plusieurs fois le protocole déjà présenté, mais il serait alors nécessaire d'analyser l'impact des concentrations des particules sur l'efficacité de la capture.

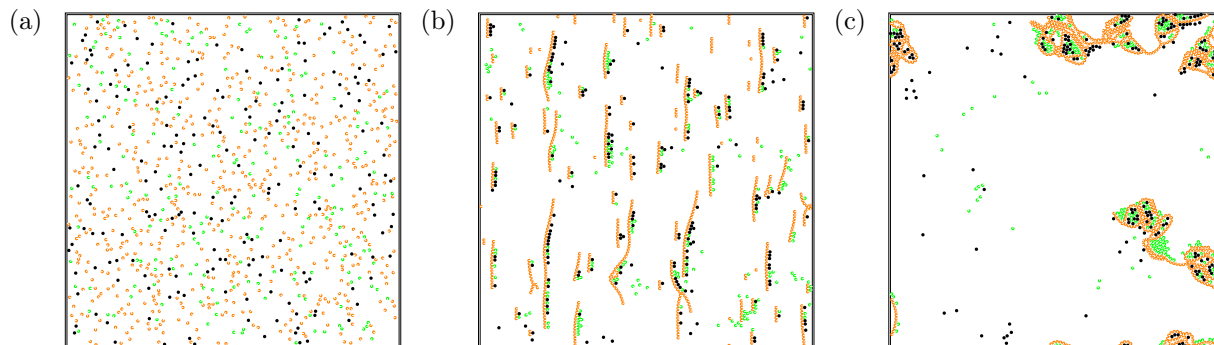


FIGURE 5.1 – Instantanés d'un ensemble de particules passives (en noir), actives avec dipôle (en orange) et actives avec alignement (en vert) (a) initialement, (b) après 2 secondes de champ magnétique et (c) après 2 secondes de champ magnétique et 18 secondes sans champ.

Appliquer un champ orientant les dipôles permet de créer des murs. En appliquant un tel champ de manière permanente et en incitant les particules actives à remonter à la surface, ces murs pourraient devenir des sortes de radeaux emportant les particules passives. Cette méthode ne requiert pas l'encerclement total des particules passives pour les déplacer efficacement. L'impact sur du plancton doit également être étudié, ainsi que l'efficacité d'un

tel protocole.

Il est aussi nécessaire d'analyser l'impact de particules actives symbolisant le plancton grâce au protocole présenté. En effet, l'objectif étant de capturer le plastique sans affecter le plancton, celui-ci ne devrait pas être capturé. Un exemple de simulation est représenté dans la figure 5.1. On observe aisément que le plancton est également capturé, et il serait par conséquent nécessaire d'améliorer le protocole pour limiter ce phénomène. Ce type de mélange à trois populations, une passive et deux actives, pourrait également être étudié au niveau des phénomènes MIPS, sans interactions dipolaires. Les mélanges actif/passif [38] et actif/actif [59] ont déjà étudiés, et mélanger ces deux modèles pourrait potentiellement mener à un autre modèle encore plus complet.

Plusieurs pistes qui n'ont pas été explorées permettraient également d'affiner le modèle. L'aspect le plus simplifié du modèle est l'implémentation de la viscosité du système, puisque l'interaction hydrodynamique entre les particules n'a pas été considérée. Les particules pourraient également être rendues plus complexes, avec des formes ou des tailles différentes par exemple. Un autre point important est l'aspect bidimensionnel des simulations. Le protocole présenté pourrait ne plus être valable en trois dimensions, mais d'autres possibilités pourraient également être envisagées.

Différentes études connexes au sujet traité dans ce mémoire pourraient également donner des résultats intéressants. Le point le plus important dans cette catégorie est l'étude des phénomènes MIPS pour des mélanges à concentration faible et avec alignement de Vicsek. Même si l'effet de l'alignement a rapidement été observé, notamment dans la figure 4.24, il est nécessaire d'effectuer plus de simulations avec des paramètres plus variés pour éventuellement établir un modèle prenant en compte les différents phénomènes observés.

L'ensemble de ces perspectives sont le signe d'un sujet d'étude très vaste et encore relativement peu exploré. Ce travail aura ainsi permis d'avoir un aperçu de différents paramètres ayant un impact significatif sur le comportement global de ces mélanges, et de proposer un protocole prometteur permettant de capturer des particules actives avec des particules passives aux propriétés dipolaires ajustées.

Bibliographie

- ¹M. Cole, P. Lindeque, C. Halsband et T. S. Galloway, “Microplastics as contaminants in the marine environment : a review”, [Marine Pollution Bulletin](#) **62**, 2588-2597 (2011).
- ²R. Di Mauro, M. J. Kupchik et M. C. Benfield, “Abundant plankton-sized microplastic particles in shelf waters of the northern gulf of mexico”, [Environmental Pollution](#) **230**, 798-809 (2017).
- ³N. B. Jensen, *Plastic pollution and juvenile fish*. 21 sept. 2021.
- ⁴K. L. Rogers, J. A. Carreres-Calabuig, E. Gorokhova et N. R. Posth, “Micro-by-micro interactions : how microorganisms influence the fate of marine microplastics”, [Limnology and Oceanography Letters](#) **5**, 18-36 (2020).
- ⁵R. Dris, S. Agarwal et C. Laforsch, “Plastics : from a success story to an environmental problem and a global challenge”, [Global Challenges](#) **4**, 2000026 (2020).
- ⁶R. Schuech et S. Menden-Deuer, “Going ballistic in the plankton : anisotropic swimming behavior of marine protists : going ballistic in the plankton”, [Limnology and Oceanography: Fluids and Environments](#) **4**, 1-16 (2014).
- ⁷F. Nicklin, *Arctic Copepod group swimming, Arctic*, 2008.
- ⁸C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichhardt, G. Volpe et G. Volpe, “Active particles in complex and crowded environments”, [Reviews of Modern Physics](#) **88**, 045006 (2016).
- ⁹G. Jékely, “Evolution of phototaxis”, [Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences](#) **364**, 2795-2808 (2009).
- ¹⁰A. York, “Chemotaxis in the ocean”, [Nature Reviews Microbiology](#) **20**, 381-381 (2022).
- ¹¹T. 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**, 1226-1229 (1995).
- ¹²N. K. Agrawal et P. S. Mahapatra, “Alignment-mediated segregation in an active-passive mixture”, [Physical Review E](#) **104**, 044610 (2021).
- ¹³J. M. Belmonte, G. L. Thomas, L. G. Brunnet, R. M. C. De Almeida et H. Chaté, “Self-propelled particle model for cell-sorting phenomena”, [Physical Review Letters](#) **100**, 248702 (2008).
- ¹⁴R. J. Archer, A. I. Campbell et S. J. Ebbens, “Glancing angle metal evaporation synthesis of catalytic swimming janus colloids with well defined angular velocity”, [Soft Matter](#) **11**, 6872-6880 (2015).
- ¹⁵H.-R. Jiang, N. Yoshinaga et M. Sano, “Active motion of a janus particle by self-thermophoresis in a defocused laser beam”, [Physical Review Letters](#) **105**, 268302 (2010).
- ¹⁶J. Hu, S. Zhou, Y. Sun, X. Fang et L. Wu, “Fabrication, properties and applications of janus particles”, [Chemical Society Reviews](#) **41**, 4356 (2012).

- ¹⁷J. Palacci, S. Sacanna, A. P. Steinberg, D. J. Pine et P. M. Chaikin, “Living crystals of light-activated colloidal surfers”, *Science* **339**, 936-940 (2013).
- ¹⁸W. Gao, X. Feng, A. Pei, Y. Gu, J. Li et J. Wang, “Seawater-driven magnesium based janus micromotors for environmental remediation”, *Nanoscale* **5**, 4696 (2013).
- ¹⁹R. Golestanian, T. B. Liverpool et A. Ajdari, “Designing phoretic micro- and nano-swimmers”, *New Journal of Physics* **9**, 126-126 (2007).
- ²⁰P. A. Cundall et O. D. L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies”, *Géotechnique* **29**, 47-65 (1979).
- ²¹M. 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).
- ²²A. 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**, 1231-1262 (2015).
- ²³E. Lauga et T. R. Powers, “The hydrodynamics of swimming microorganisms”, *Reports on Progress in Physics* **72**, 096601 (2009).
- ²⁴H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, F. Peruani et F. Raynaud, “Modeling collective motion : variations on the viclek model”, *The European Physical Journal B* **64**, 451-456 (2008).
- ²⁵N. Vladimirov, L. Løvdok, D. Lebiedz et V. Sourjik, “Dependence of bacterial chemotaxis on gradient shape and adaptation rate”, *PLoS Computational Biology* **4**, sous la dir. de C. Rao, e1000242 (2008).
- ²⁶G. Jékely, J. Colombelli, H. Hausen, K. Guy, E. Stelzer, F. Nédélec et D. Arendt, “Mechanism of phototaxis in marine zooplankton”, *Nature* **456**, 395-399 (2008).
- ²⁷H. H. Wensink et H. Löwen, “Aggregation of self-propelled colloidal rods near confining walls”, *Physical Review E* **78**, 031409 (2008).
- ²⁸J. Elgeti et G. Gompper, “Wall accumulation of self-propelled spheres”, *EPL (Europhysics Letters)* **101**, 48003 (2013).
- ²⁹D. Ray, C. Reichhardt et C. J. O. Reichhardt, “Casimir effect in active matter systems”, *Physical Review E* **90**, 013019 (2014).
- ³⁰M. Rojas-Vega, P. de Castro et R. Soto, “Fast and slow self-propelled particles interacting with asymmetric obstacles : Wetting, segregation, rectification, and vorticity”, *Publisher: arXiv Version Number: 1, 10.48550/ARXIV.2111.05952* (2021).
- ³¹A. Kaiser, H. H. Wensink et H. Löwen, “How to capture active particles”, *Physical Review Letters* **108**, 268307 (2012).
- ³²P. Galajda, J. Keymer, P. Chaikin et R. Austin, “A wall of funnels concentrates swimming bacteria”, *Journal of Bacteriology* **189**, 8704-8707 (2007).
- ³³M. B. Wan, C. J. Olson Reichhardt, Z. Nussinov et C. Reichhardt, “Rectification of swimming bacteria and self-driven particle systems by arrays of asymmetric barriers”, *Physical Review Letters* **101**, 018102 (2008).

- ³⁴C. Reichhardt et C. J. O. Reichhardt, “Active matter commensuration and frustration effects on periodic substrates”, [Physical Review E](#) **103**, 022602 (2021).
- ³⁵M. Mijalkov et G. Volpe, “Sorting of chiral microswimmers”, [Soft Matter](#) **9**, 6376 (2013).
- ³⁶P. Dolai, A. Simha et S. Mishra, “Phase separation in binary mixtures of active and passive particles”, [Soft Matter](#) **14**, 6137-6145 (2018).
- ³⁷E. Méhes, E. Mones, V. Németh et T. Vicsek, “Collective motion of cells mediates segregation and pattern formation in co-cultures”, [PLoS ONE](#) **7**, sous la dir. d’A. Szolnoki, e31711 (2012).
- ³⁸J. Stenhammar, R. Wittkowski, D. Marenduzzo et M. E. Cates, “Activity-induced phase separation and self-assembly in mixtures of active and passive particles”, [Physical Review Letters](#) **114**, 018301 (2015).
- ³⁹S. R. McCandlish, A. Baskaran et M. F. Hagan, “Spontaneous segregation of self-propelled particles with different motilities”, [Soft Matter](#) **8**, 2527 (2012).
- ⁴⁰B.-q. Ai, Z.-g. Shao et W.-r. Zhong, “Mixing and demixing of binary mixtures of polar chiral active particles”, [Soft Matter](#) **14**, 4388-4395 (2018).
- ⁴¹S. E. Moran, P. W. A. Schönhofer et S. C. Glotzer, “Shape-driven, emergent behavior in active particle mixtures”, [New Journal of Physics](#) **24**, 063007 (2022).
- ⁴²S. A. Mallory, C. Valeriani et A. Cacciuto, “An active approach to colloidal self-assembly”, [Annual Review of Physical Chemistry](#) **69**, 59-79 (2018).
- ⁴³J. Yan, M. Han, J. Zhang, C. Xu, E. Luijten et S. Granick, “Reconfiguring active particles by electrostatic imbalance”, [Nature Materials](#) **15**, 1095-1099 (2016).
- ⁴⁴H. H. Wensink, V. Kantsler, R. E. Goldstein et J. Dunkel, “Controlling active self-assembly through broken particle-shape symmetry”, [Physical Review E](#) **89**, 010302 (2014).
- ⁴⁵H. R. Vutukuri, M. Lisicki, E. Lauga et J. Vermant, “Light-switchable propulsion of active particles with reversible interactions”, [Nature Communications](#) **11**, 2628 (2020).
- ⁴⁶A. F. Demirörs, M. T. Akan, E. Poloni et A. R. Studart, “Active cargo transport with janus colloidal shuttles using electric and magnetic fields”, [Soft Matter](#) **14**, 4741-4749 (2018).
- ⁴⁷B. Jurado-Sánchez, S. Sattayasamitsathit, W. Gao, L. Santos, Y. Fedorak, V. V. Singh, J. Orozco, M. Galarnyk et J. Wang, “Self-propelled activated carbon janus micromotors for efficient water purification”, [Small](#) **11**, 499-506 (2015).
- ⁴⁸M. Fränzl et F. Cichos, “Active particle feedback control with a single-shot detection convolutional neural network”, [Scientific Reports](#) **10**, 12571 (2020).
- ⁴⁹E. Opsomer et G. Lumay, “PHYS3020-1 - Outils numériques de la matière molle”, Cours universitaire, Université de Liège, 2021.
- ⁵⁰*Leapfrog integration*, in [Wikipedia](#), Page Version ID : 1136991243 (2 fév. 2023).
- ⁵¹C. Birdsall et A. Langdon, *Plasma physics via computer simulation*, 0^e éd. (CRC Press, 8 oct. 2018).

- ⁵²F. J. Schwarzendahl et M. G. Mazza, “Hydrodynamic interactions dominate the structure of active swimmers’ pair distribution functions”, [The Journal of Chemical Physics](#) **150**, 184902 (2019).
- ⁵³A. Darras, E. Opsomer, N. Vandewalle et G. Lumay, “Superparamagnetic colloids in viscous fluids”, [Scientific Reports](#) **7**, 7778 (2017).
- ⁵⁴X. Zheng, B. Ten Hagen, A. Kaiser, M. Wu, H. Cui, Z. Silber-Li et H. Löwen, “Non-gaussian statistics for the motion of self-propelled janus particles : experiment versus theory”, [Physical Review E](#) **88**, 032304 (2013).
- ⁵⁵D. A. McQuarrie, *Statistical mechanics*, Harper’s chemistry series (Harper & Row, New York, 1975), 641 p.
- ⁵⁶H.-C. Chang et L.-C. Wang, “A Simple Proof of Thue’s Theorem on Circle Packing”, [Publisher: arXiv Version Number: 1, 10.48550/ARXIV.1009.4322](#) (2010).
- ⁵⁷W. Yang, V. R. Misko, F. Marchesoni et F. Nori, “Colloidal transport through trap arrays controlled by active microswimmers”, [Journal of Physics: Condensed Matter](#) **30**, 264004 (2018).
- ⁵⁸R. Wittkowski, J. Stenhammar et M. E. Cates, “Nonequilibrium dynamics of mixtures of active and passive colloidal particles”, [New Journal of Physics](#) **19**, 105003 (2017).
- ⁵⁹T. Kolb et D. Klotsa, “Active binary mixtures of fast and slow hard spheres”, [Soft Matter](#) **16**, 1967-1978 (2020).
- ⁶⁰B. Liebchen et D. Levis, “Chiral active matter”, [Europhysics Letters](#) **139**, 67001 (2022).