

Moteurs moléculaires biologiques et matière active

Le sujet comprend 47 pages numérotées de 1 à 47.

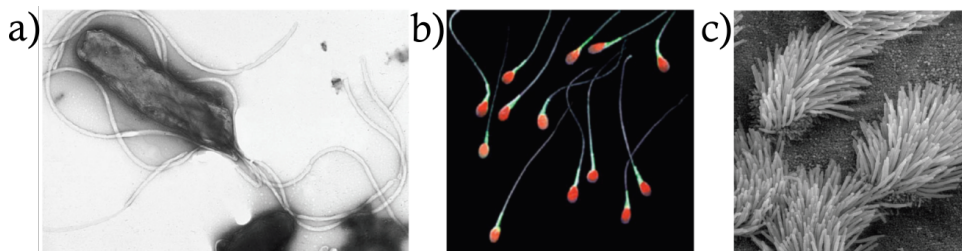
AVERTISSEMENT

Certaines questions de ce sujet nécessitent l'étude de documents, de code Python, ou consistent en des questions de modélisation. Compte-tenu de l'investissement nécessaire pour répondre à ces dernières, elles seront valorisées en conséquence.

Un formulaire est disponible en annexe de ce sujet, page 33.

Dans un texte visionnaire, Aristote cherche à définir ce qui caractérise et distingue la nature – matière vivante – de la matière inerte. Il pressent l'existence d'un principe du mouvement : " *De tout ce que nous venons de dire, il résulte que la nature, dans son sens primitif et fondamental, c'est l'essence des êtres qui ont, en eux-mêmes et en tant que tels, le principe de leur mouvement. La matière, en effet, ne prend le nom de nature que parce qu'elle est susceptible de recevoir en elle ce principe ; et le devenir et la croissance, que parce que ce sont des mouvements procédant de ce principe. La nature, en ce sens, est le principe du mouvement des êtres naturels, immanent en quelque sorte, soit en puissance, soit en acte.*" (Aristote, Métaphysique, Livre V). Richard Feynman envisage, dans les années 1950, l'existence de moteurs à l'échelle de la molécule, qui pourraient avoir des mouvements directionnels et extraire du travail dans un environnement soumis au bruit thermique, en analogie avec une roue à crochet. Les moteurs moléculaires ont, par la suite, été découverts par A.F. Huxley et H.E. Huxley en 1954. En biologie, ils sont omniprésents à toutes les échelles : dans la traduction de l'information codée dans le génome, dans le transport de vésicules dans les cellules, dans l'application de forces dans les muscles, ou encore dans le changement de formes des tissus et des organes pendant le développement des embryons.

Extrait de Reflets de la Physique, n°42, Janvier 2014



Exemples de mouvement à l'échelle microscopique. a) Bactérie à flagelles *Helicobacter pylori*; b) Spermatozoïdes humains; c) Réseau de cils sur l'épithélium de la trachée pulmonaire. Source : *Wikimedia Commons*.

L'objet de ce problème est l'étude des mécanismes de déplacements spontanés de molécules nanométriques appelées *moteurs moléculaires* puis les mécanismes d'autopropulsion dans le cas de particules colloïdales synthétiques. **Ce problème est divisé en quatre parties largement indépendantes**, abordant les thématiques suivantes :

- **la dynamique d'une particule dans un fluide.**
- **le mouvement brownien** de particules dans un fluide. *Une partie de l'étude sera numérique et algorithmique.*
- **les moteurs browniens**, particules browniennes dont le mouvement est directionnel. *Un dossier scientifique rassemble des documents exposant des expériences de recherche récentes, permettant ainsi de comprendre le mécanisme de fonctionnement d'un moteur moléculaire intracellulaire : la kinésine.*
- **les particules de Janus** comme modèle simple de particules synthétiques autopropulsées.

I. Frottements fluides et régime de Stokes

L'objet de cette partie est l'étude de la dynamique d'une particule dans un fluide visqueux, y compris en régime turbulent. L'analyse d'une expérience simple sera effectuée, complétée par une approche numérique afin d'évaluer la validité et la pertinence du modèle utilisé.

A. Dynamique d'une particule dans un fluide visqueux

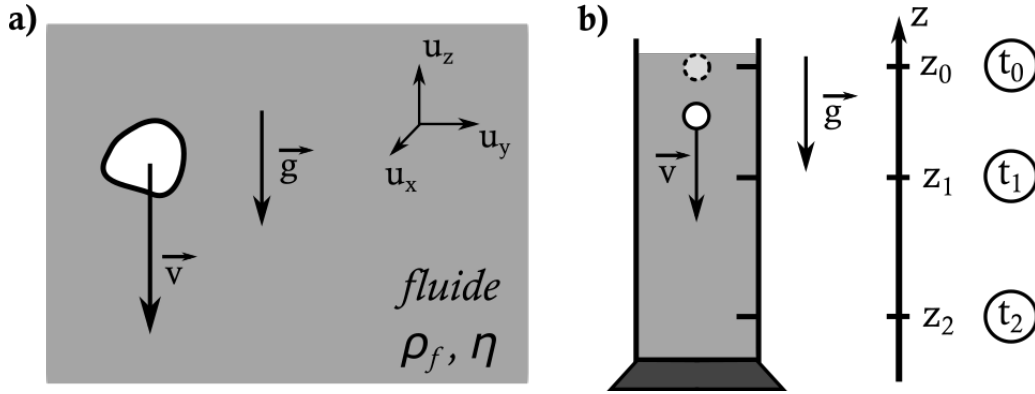


Fig. 1. a) Dynamique d'une particule de forme quelconque dans un fluide de masse volumique ρ_f et de viscosité dynamique η . b) Dispositif expérimental simple pour étudier la dynamique d'une particule sphérique dans un fluide visqueux. La particule est lâchée en $t = t_0$ à l'altitude $z = z_0$ sans vitesse initiale. À l'aide d'un dispositif adapté, on repère les instants de passage en z_1 et z_2 notés respectivement t_1 et t_2 .

On considère une particule de volume V , constituée d'un matériau uniforme de masse volumique ρ , immergée dans un fluide de masse volumique ρ_f et de viscosité dynamique η . Cette particule est soumise à la force de pesanteur (champ de pesanteur local $\vec{g}$) et à la poussée d'Archimède notée $\vec{\Pi}$. Dans la direction du déplacement, on définit S_{app} la surface apparente sous laquelle un observateur verrait la particule. Dans un premier temps, on s'intéresse au cas général d'une particule de forme quelconque, se déplaçant à une vitesse $\vec{v}$ dans le référentiel où le fluide est au repos. Dans la limite des faibles nombres de Reynolds, la force de frottement fluide s'écrit

$$\vec{F}_f(\vec{v}) = -K\eta\vec{v},$$

où K est un facteur géométrique. On munit l'espace d'un système de coordonnées cartésiennes, d'un repère d'origine O et de vecteurs de base directe $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ tels que $\vec{u}_z$ désigne l'axe ascendant local, *i.e.* $\vec{g} = -g\vec{u}_z$ avec $g > 0$ l'intensité locale du champ de pesanteur. La particule, de coordonnées $(x(t), y(t), z(t))$, est lâchée à l'instant $t = t_0$ sans vitesse initiale

$$\vec{v}(t_0) = \vec{0}.$$

On introduit la grandeur scalaire $v(t)$ telle que $\vec{v} = -v(t)\vec{u}_z$.

Q1. Quelle est l'interprétation physique du nombre de Reynolds Re , associé à l'écoulement d'un fluide?

Réponse. Nombre de Reynolds :

$$Re \sim \frac{\|\rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v}\|}{\|\eta\Delta\vec{v}\|} \sim \frac{VR}{\nu},$$

avec $\nu = \frac{\eta}{\rho}$ la viscosité cinématique. Le nombre de Reynolds est le rapport en ordre de grandeur du terme convectif sur le terme visqueux.

Q2. Énoncer le théorème d'Archimède et expliciter l'expression de la poussée d'Archimède $\vec{\Pi}$ dans le cas d'une particule de masse volumique ρ et de volume V , immergée dans un fluide de masse volumique ρ_f .

Réponse. Tout corps plongé dans un fluide reçoit de la part de ce fluide une poussée verticale ascendante égale à l'opposé du poids du volume de fluide déplacé. Ainsi, pour un volume de fluide déplacé V de masse volumique ρ_f , on a

$$\vec{\Pi} = -\rho_f V \vec{g} = \rho_f V g \vec{u}_z.$$

Q3. Établir l'équation différentielle vérifiée par $v(t)$.

Réponse. Principe fondamental de la dynamique appliqué à la particule

$$V\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{P} + \vec{\Pi} + \vec{F}_f,$$

d'où, en explicitant les forces,

$$-V\rho \frac{dv}{dt} = -V\rho g + V\rho_f g + K\eta v.$$

D'où l'équation différentielle vérifiée par $v(t)$

$$\frac{dv}{dt} + \frac{K\eta}{\rho V} v = \frac{\rho - \rho_f}{\rho} g.$$

Q4. Établir l'expression d'un temps caractéristique du mouvement que l'on notera τ , ainsi que la vitesse limite v_{lim} définie selon

$$v_{\text{lim}} = \lim_{t \rightarrow +\infty} v(t).$$

Réponse. Par analyse dimensionnelle, on obtient immédiatement le temps caractéristique

$$\tau = \frac{\rho V}{K\eta}.$$

Pour $t \rightarrow +\infty$, la vitesse atteint sa valeur stationnaire v_{lim} et

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{dv}{dt} = 0,$$

telle que l'équation du mouvement devienne pour $t \rightarrow +\infty$

$$\frac{v_{\text{lim}}}{\tau} = \frac{\rho - \rho_f}{\rho} g.$$

D'où le résultat

$$v_{\text{lim}} = \frac{\rho - \rho_f}{\rho} \tau g = (\rho - \rho_f) \frac{Vg}{K\eta}.$$

Q5. Établir l'expression de $v(t)$ en fonction de v_{lim} , τ , t et t_0 .

Réponse. En introduisant les grandeurs τ et v_{lim} , l'équation est sous la forme canonique

$$\frac{dv}{dt} + \frac{v}{\tau} = \frac{v_{\text{lim}}}{\tau},$$

de solution générale

$$v(t) = Ae^{-\frac{t}{\tau}} + v_{\text{lim}},$$

où $A \in \mathbb{R}$ est une constante d'intégration déterminée par les conditions initiales, à savoir ici $v(t_0) = 0$ soit $Ae^{-\frac{t_0}{\tau}} + v_{\text{lim}} = 0$. D'où le résultat

$$v(t) = v_{\text{lim}} \left(1 - e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \right).$$

Désormais, on se restreint au cas d'une particule sphérique lisse. Le coefficient géométrique K de la force de frottement fluide dans la limite des faibles nombres de Reynolds prend alors la valeur suivante (*loi de Stokes*)

$$K = 6\pi R,$$

où R est le rayon de la particule. Dans le cas d'un nombre de Reynolds quelconque, la force de frottement fluide exercée sur la particule se déplaçant à la vitesse $\vec{v}$ dans la direction $\vec{u}$ (avec $\|\vec{u}\| = 1$) prend la forme générale suivante

$$\vec{F}_f = -\frac{1}{2}\rho_f v^2 S_{\text{app}} C_x(\text{Re}) \vec{u},$$

où $C_x(\text{Re})$ est le *coefficient de traînée*, fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement et de la géométrie de l'objet, y compris son état de surface. Pour éviter toute ambiguïté par la suite, on définit le nombre de Reynolds par le diamètre de la sphère selon

$$\text{Re} = \frac{2vR}{\nu} = \frac{2\rho_f vR}{\eta},$$

où $\nu = \eta/\rho_f$ est la viscosité cinématique du fluide. Le coefficient de traînée d'une sphère lisse peut être mesuré expérimentalement, et son évolution en fonction du nombre de Reynolds est représenté Fig. 2. On note un "décrochage" soudain pour $\text{Re} \gtrsim 2 \cdot 10^5$. Des modélisations de la fonction $C_x(\text{Re})$ ont été proposées afin d'obtenir une expression analytique de la dépendance en Re du coefficient de traînée C_x d'une sphère lisse. Ainsi, on peut modéliser ce dernier selon l'équation suivante

$$C_x^{\text{mod}}(\text{Re}) = C_x^{\text{laminaire}}(\text{Re}) + 2,6 \times \frac{\frac{\text{Re}}{5,0}}{1 + \left(\frac{\text{Re}}{5,0}\right)^{1,52}} + 0,411 \times \frac{\left(\frac{\text{Re}}{2,63 \cdot 10^5}\right)^{-7,94}}{1 + \left(\frac{\text{Re}}{2,63 \cdot 10^5}\right)^{-8,00}} + 0,25 \times \frac{\frac{\text{Re}}{10^6}}{1 + \frac{\text{Re}}{10^6}},$$

où $C_x^{\text{laminaire}}(\text{Re})$ est le coefficient de traînée dans le régime laminaire. Un calcul numérique représenté Fig. 3 permet de comparer les coefficients C_x obtenus dans le cadre d'un modèle laminaire et de la modélisation précédente.

Q6. Quelle est la dimension du coefficient de traînée (justifier)?

Réponse. Le terme $\frac{1}{2}\rho_f v^2$ a la dimension d'une pression, S_{app} est une surface donc $C_x(\text{Re})$ est sans dimension.

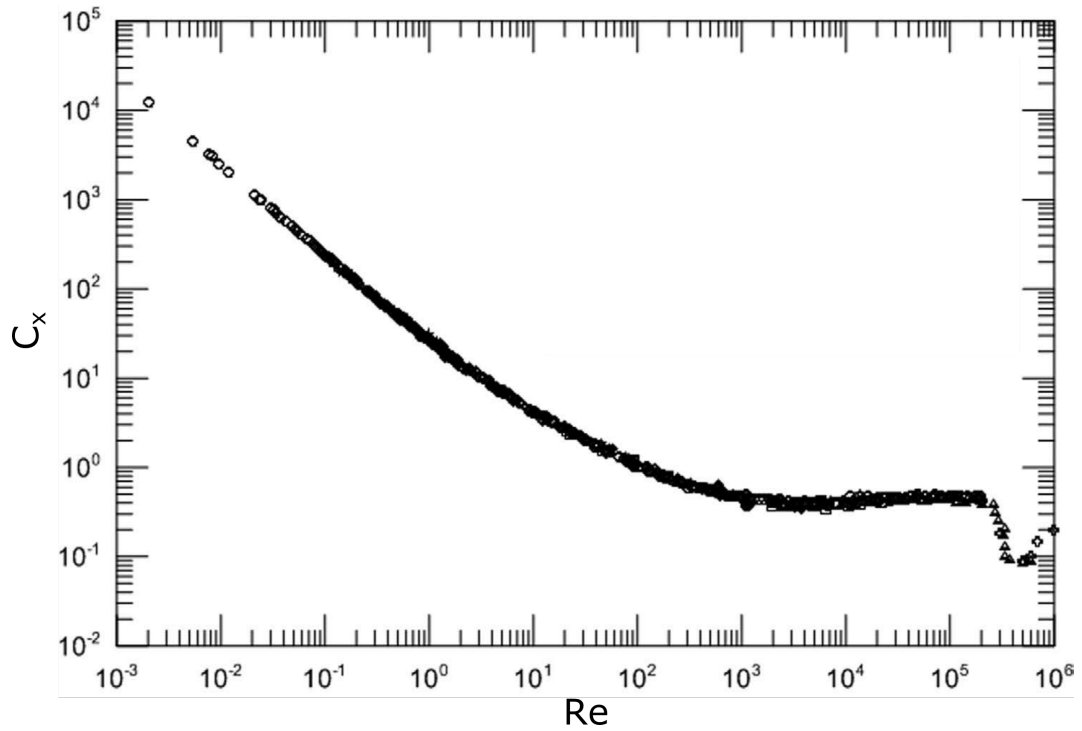


Fig. 2. Mesures expérimentales du coefficient de traînée C_x d'une sphère lisse en fonction du nombre de Reynolds $Re=2\rho_f v R/\eta$. Extrait de [Sphere Drag and Heat Transfer](#), *Scientific Reports* 5, 12304 (2015).

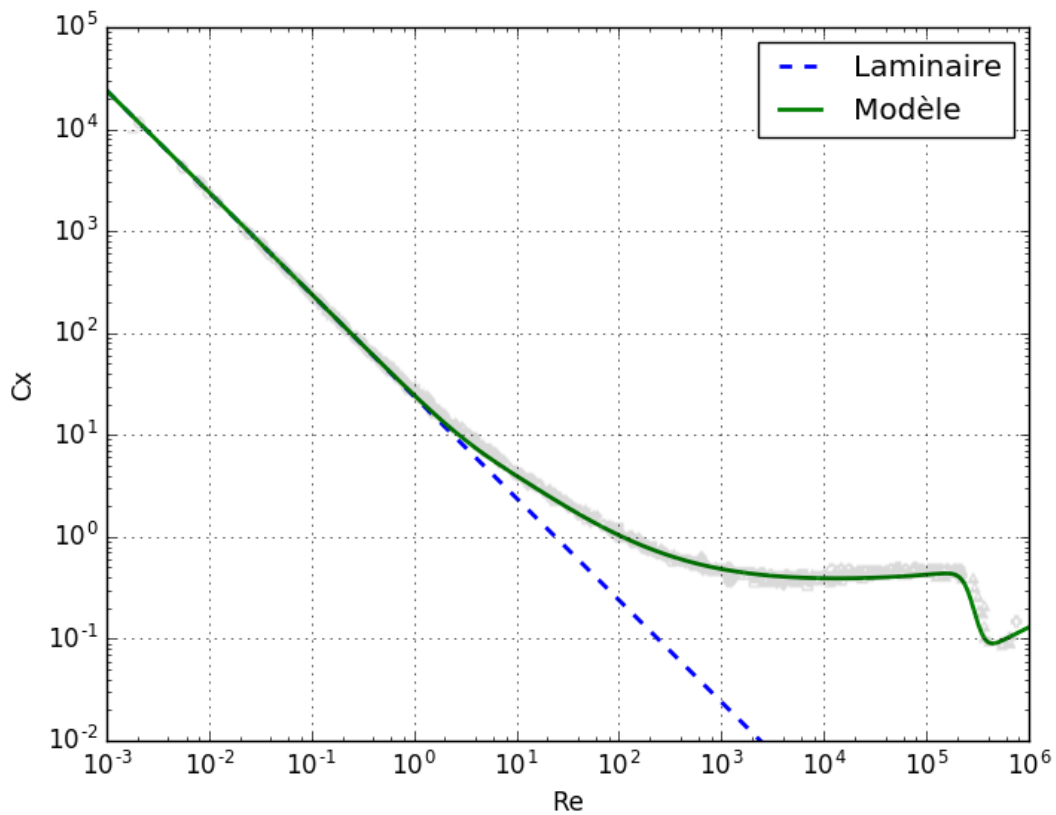


Fig. 3. Calcul numérique des coefficients de traînée dans l'approximation d'un écoulement laminaire (traits pointillés) et dans le cadre du modèle proposé (traits continus). Les données expérimentales de la Fig. 2 ont été rajoutées en transparence.

Q7. Établir l'expression de $C_x^{\text{laminaire}}(\text{Re})$ pour une particule sphérique lisse en régime laminaire ($\text{Re} \ll 1$).

Réponse. En régime laminaire, on a

$$\vec{F}_f = -6\pi\eta R v \vec{u} = -\frac{1}{2}\rho_f v^2 S_{\text{app}} C_x(\text{Re}) \vec{u}.$$

Par identification, on obtient immédiatement

$$C_x(\text{Re}) = \frac{24}{\text{Re}}.$$

Q8. Établir l'expression de la vitesse limite v_{lim} dans le cas du régime laminaire. **Dans la suite, on notera V_{Stokes} cette vitesse limite.**

Réponse. On a

$$v_{\text{lim}} = (\rho - \rho_f) \frac{Vg}{K\eta},$$

avec ici $K = 6\pi R$ et $V = \frac{4}{3}\pi R^3$, d'où le résultat

$$V_{\text{Stokes}} = (\rho - \rho_f) \frac{2g}{9\eta} R^2.$$

Q9. Fig. 2, à quel régime d'écoulement correspond la région $\text{Re} \in [5 \cdot 10^2, 10^5]$? Comment se comporte la vitesse limite v_{lim} dans ce régime?

Réponse.

Pour $\text{Re} \in [5 \cdot 10^2, 10^5]$, le régime d'écoulement est turbulent à couche limite laminaire.

Dans ce régime, le coefficient de traînée est approximativement constant, indépendant du nombre de Reynolds. Ainsi, la vitesse limite ne dépend plus de Re et donc de la viscosité mais seulement de cette valeur de C_x approximativement constante. Ainsi, une mesure de vitesse limite ne permet pas de remonter à la valeur de viscosité.

Q10. Que se passe-t-il au niveau de l'écoulement pour $\text{Re} \gtrsim 2 \cdot 10^5$?

Réponse. Pour $\text{Re} > 5 \cdot 10^5$, on est dans un régime de **crise de traînée**. La couche limite devient turbulente. La couche limite turbulente décolle plus tard que la couche limite laminaire et donc la traînée est réduite par rapport au cas de la couche limite laminaire. On a un sillage super-critique.

La réponse à la question **Q11.** nécessite d'y consacrer un temps suffisant, et donc sera valorisée en conséquence. La qualité de la démarche proposée et son explication seront évaluées autant que le résultat final.

Q11. Proposer une méthode graphique exploitant la courbe de la Fig. 2 pour **estimer** la vitesse limite d'une bille de rayon R connu. Appliquer cette méthode dans le cas de billes sphériques de

rayons $R_1 = 3\text{ mm}$, $R_2 = 7,5\text{ mm}$ et $R_3 = 10\text{ mm}$. Ces billes sont en acier ($\rho_{\text{Acier}} = 7800\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$) et chutent dans du glycérol pur à 20°C ($\eta \approx 1,49\text{ Pa}\cdot\text{s}$; $\rho_f = 1260\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$). On utilisera le document réponse accompagnant ce sujet ainsi que le formulaire.

Réponse. En régime établi, la force de trainée $\vec{F}_{\text{trainée}}$ doit compenser la force de dérive $\vec{F}_{\text{dérive}} = \vec{\Pi} + \vec{P}$

$$\vec{F}_{\text{trainée}} + \vec{F}_{\text{dérive}} = \vec{0}.$$

Donc

$$\|\vec{F}_{\text{trainée}}\| = \|\vec{F}_{\text{dérive}}\| \Leftrightarrow \frac{1}{2}\rho_f v^2 \pi R^2 C_x = (\rho - \rho_f) \frac{4}{3} \pi R^3 g.$$

Or, on peut relier la vitesse limite v au nombre de Reynolds selon

$$vR = \frac{\eta}{2\rho_f} \text{Re}.$$

On obtient alors

$$\text{Re}^2 C_x = \underbrace{\frac{32}{3} \left(\frac{\rho}{\rho_f} - 1 \right) \frac{g \rho_f^2}{\eta^2}}_{=A} R^3 = AR^3.$$

En prenant le logarithme, on obtient alors

$$\boxed{\log C_x = \log A + 3 \log R - 2 \log \text{Re}},$$

avec $A \approx 8,59$ (donnée dans le formulaire du sujet).

On peut déterminer la valeur du couple (Re, C_x) de l'écoulement autour de la bille en superposant la courbe $\log C_x = f(\log \text{Re})$ et la courbe $\log C_x = \log A + 3 \log R - 2 \log \text{Re}$ pour chaque rayon R considéré.

Ensuite, à partir de la définition du nombre de Reynolds, on obtient la vitesse limite

$$v_{\text{lim}} = \frac{\eta}{2R\rho_f} \text{Re} \approx (0,59\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}) \frac{1\text{ mm}}{R} \text{Re}.$$

Pour $R_1 = 3\text{ mm}$, $\log A + 3 \log R \approx 1,02$.

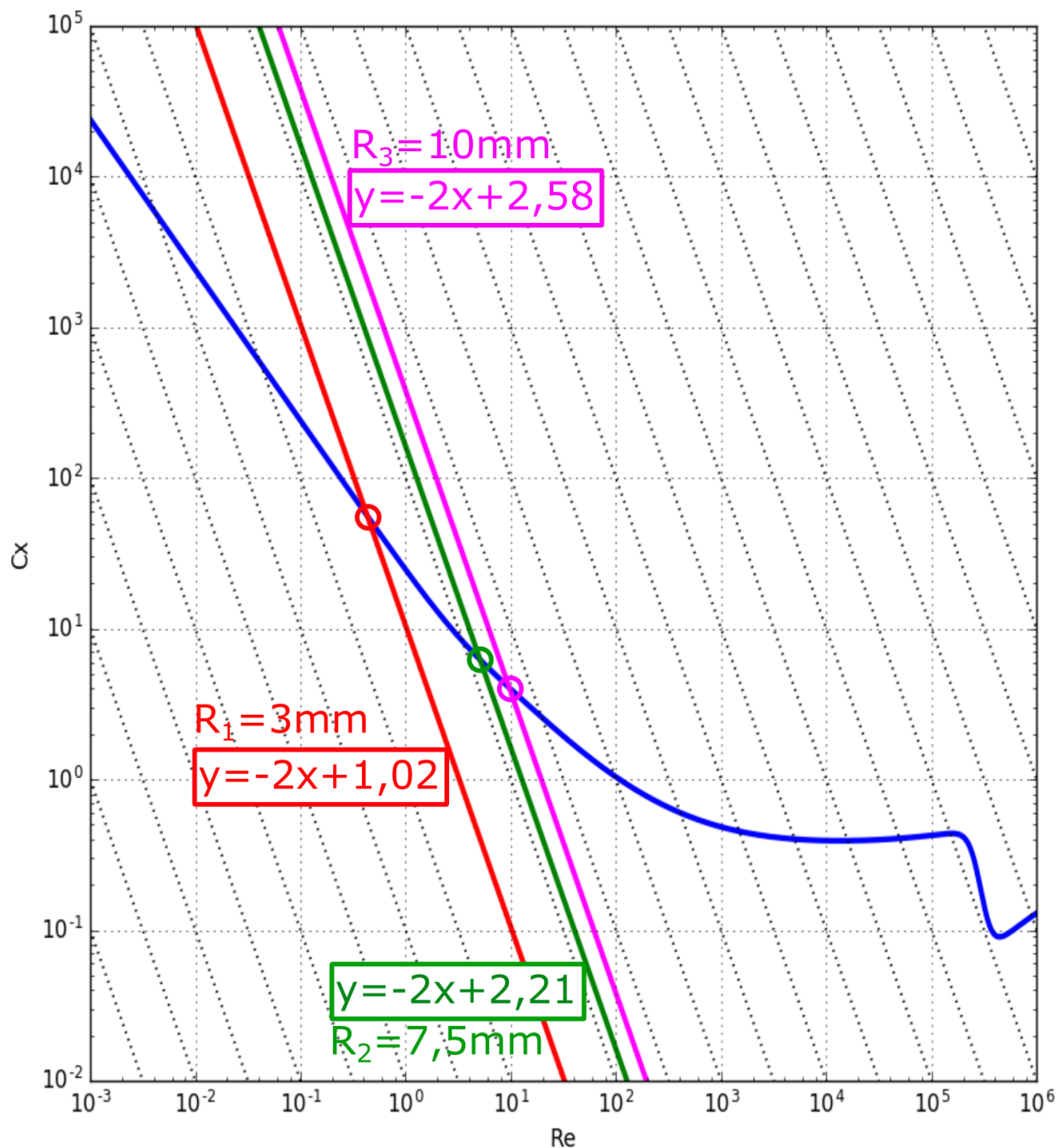
Graphiquement, on obtient $\text{Re} \sim 0,4$ et $C_x \sim 56$, d'où $v_{\text{lim}} \approx 0,08\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Pour $R_2 = 7,5\text{ mm}$, $\log A + 3 \log R \approx 2,21$.

Graphiquement, on obtient $\text{Re} \sim 5$ et $C_x \sim 6$, d'où $v_{\text{lim}} \approx 0,4\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Pour $R_3 = 10\text{ mm}$, $\log A + 3 \log R \approx 2,58$.

Graphiquement, on obtient $\text{Re} \sim 10$ et $C_x \sim 4$, d'où $v_{\text{lim}} \approx 0,6\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



Remarque : dans la méthode graphique, la poussée d'Archimède n'a pas été négligée donc on trouve des valeurs légèrement différentes des résultats numériques de la Fig. 4. Si l'on néglige la poussée d'Archimède, alors il faut utiliser la droite d'équation $\log C_x = \log B + 3 \log R - 2 \log Re$, où la constante B est donnée dans le formulaire de l'énoncé.

B. Détermination expérimentale d'un coefficient de viscosité dynamique

On se propose de déterminer la viscosité d'un fluide à l'aide d'un dispositif expérimental simple, représenté schématiquement Fig. 1. Une particule sphérique en acier, de rayon R , est lâchée *sans vitesse initiale* à l'instant t_0 et à l'altitude z_0 dans un récipient cylindrique rempli de glycérol pur à 20°C. La particule est lâchée au centre du cylindre, ce dernier ayant un rayon $R_{\text{cyl}} \gg R$; on négligera ainsi les effets de recirculation de fluide sur les parois. On note η la viscosité dynamique du glycérol,

et ρ_f sa masse volumique. Le récipient cylindrique est muni de deux repères en z_1 et z_2 . À l'aide d'un dispositif adapté, on repère les instants t_1 et t_2 de passage de la particule en z_1 et z_2 à l'aide d'un chronomètre, mais ce dernier ne permet d'obtenir que l'information sur la quantité $\Delta t = t_2 - t_1$. La distance $\Delta z = z_1 - z_2$ est connue. On note $V_{\text{mes}} = \frac{\Delta z}{\Delta t}$.

Q12. Expliquer comment une telle expérience permet de remonter à la viscosité. On prendra soin d'explicitier les hypothèses émises et de discuter leur validité.

Réponse. On émet les hypothèses suivantes

- l'écoulement est laminaire ($Re \ll 1$);
- conséquence immédiate, on suppose que la vitesse limite a pour valeur $V_{\text{Stokes}} = (\rho - \rho_f) \frac{2g}{9\eta} R^2$;
- on suppose que la vitesse limite est atteinte en $z = z_1$.

Pour être en régime laminaire, il faut des vitesses "faibles" pour avoir un nombre de Reynolds faible devant 1. En pratique, des billes de petites tailles permettront d'avoir une vitesse faible. Cette hypothèse sera confirmée *a posteriori* par l'estimation du nombre de Reynolds.

Une fois la vitesse limite mesurée, il est possible d'estimer la valeur de η à partir de l'expression de V_{Stokes} et en supposant

$$V_{\text{mes}} = \frac{\Delta z}{\Delta t} = V_{\text{Stokes}}.$$

Cette valeur permet de calculer le temps caractéristique τ .

Pour vérifier la validité de la dernière hypothèse, il suffit de vérifier en ordre de grandeur que $\tau V_{\text{Stokes}} \ll |z_0 - z_1|$ pour s'assurer qu'en $z = z_1$ la vitesse limite est atteinte.

Q13. Estimer un ordre de grandeur de l'erreur commise si l'on suppose négligeable la poussée d'Archimède. Cette hypothèse est-elle légitime selon vous ?

Réponse.

Le terme correctif est en $\frac{\rho_f}{\rho} \approx 16\%$. Le terme correctif sera à comparer à l'incertitude de mesure pour pouvoir conclure quant à sa prise en compte ou non. La prise en compte de la poussée d'Archimède revient à remplacer g par $\frac{\rho - \rho_f}{\rho} g$ donc se fait très facilement. Si l'on néglige cette correction, l'erreur commise est *a priori* importante ou comparable aux incertitudes expérimentales typiques d'un tel dispositif.

En effet, pour une bille de 1mm de diamètre, on estime $V_{\text{Stokes}} \sim 4\text{mm/s}$. Pour $\Delta z \sim 30\text{cm}$, on estime $\Delta t \sim 75\text{s}$. Avec une incertitude de l'ordre de la seconde quant au repérage des instants t_1 et t_2 , l'incertitude sur Δt est de l'ordre de 3s typiquement, soit une incertitude relative de mesure sur Δt de environ 4%. Il n'est pas légitime de négliger la poussée d'Archimède.

Tenant compte de $V_{\text{Stokes}} \propto R^2$, une bille de 2mm de diamètre correspondra à $V_{\text{Stokes}} \sim 16\text{mm/s}$ soit $\Delta t \sim 19\text{s}$ et une incertitude relative de l'ordre de 16%. Alors pour des billes de 2mm, la poussée d'Archimède n'est toujours pas négligeable, comparable à l'erreur expérimentale.

Si l'incertitude de la mesure était nettement supérieure à 12%, il conviendrait de s'interroger quant à la pertinence du protocole expérimental utilisé.

En parallèle de cette expérience, on utilise une approche numérique afin d'évaluer la pertinence des hypothèses formulées, et d'en déduire une méthodologie expérimentale. Pour cela, on considère un calcul numérique dont on trouvera le code écrit en Python 3.5 en annexe de ce sujet, page 44. Le résultat de ce code est représenté Fig. 4.

Q14. Si les hypothèses de la question **Q12.** sont vérifiées, quelle doit-être la dépendance de la quantité V_{mes}/R^2 avec le rayon R de la bille utilisée ?

Réponse. Si la bille est telle que le régime d'écoulement est laminaire, et que le régime permanent est atteint, alors la quantité évaluée par l'expérimentateur doit prendre la valeur

$$\frac{V_{\text{mes}}}{R^2} = (\rho - \rho_f) \frac{2g}{9\eta}.$$

Donc cette quantité ne doit pas dépendre du rayon de la bille R .

La réponse à la question Q15. nécessite d'y consacrer un temps suffisant, et donc sera valorisée en conséquence.

Q15. Expliquer le plus succinctement possible le principe du code proposé page 44.

Réponse.

- Le code Python proposé définit en préambule deux fonctions nommées `Vlim_exp_1` et `Vlim_exp_2`.
- La fonction `Vlim_exp_1` résout numériquement l'équation différentiel du mouvement avec une force décrite dans la limite des régimes laminaires, via le module `scipy.integrate.odeint`. Cette fonction calcule la valeur moyenne de la vitesse pour $z > Z_{\text{max}}$ où Z_{max} est un paramètre d'entrée. À $t = 0$, la vitesse est initialisée à $v = 0$ et $z(t = 0) = 0$. Ainsi, par rapport à la situation expérimental, cette fonction calcule la vitesse moyenne mesurée pour $t_0 = 0$, $z_0 = 0$, $z_1 = Z_{\text{max}}/2$ et $z_2 = Z_{\text{max}}$ dans la limite où l'écoulement est supposé laminaire.
- La fonction `Vlim_exp_2` est identique à la fonction `Vlim_exp_1` mais résout l'équation différentielle en utilisant l'expression générale de la force de frottement fluide dans la cadre du modèle proposé pour le coefficient de traînée. Ainsi, par rapport à la situation expérimental, cette fonction calcule la vitesse moyenne mesurée pour $t_0 = 0$, $z_0 = 0$, $z_1 = Z_{\text{max}}/2$ et $z_2 = Z_{\text{max}}$ dans le cas général.
- Ligne 64, une liste de valeur de rayons r est initialisée, pour une étude allant de $r = 250\mu\text{m}$ à $r = 10\text{mm}$.
- Pour chaque valeur de r , la boucle lignes 70 à 75 calcule la vitesse moyenne `Vl_1` entre z_1 et z_2 si le fluide était en écoulement laminaire, et `Vl_2` dans le cas général.
- À partir de la vitesse calculée dans le modèle le plus élaboré, le nombre de Reynolds est calculé (ligne 75).
- Une fois le calcul effectué, les résultats sont représentés graphiquement (lignes 77 à 99).

Q16. Pourquoi, ligne 46 du code, le paramètre `v0` est-il affecté à la valeur $1\text{e-}9$ et non 0 ?

Réponse. Pour éviter les problèmes numériques à l'intégration avec des termes en $1/v$.

Le dispositif expérimental est utilisé avec deux solutions de glycérol. La première est du **glycérol pur**, issu d'une bouteille récemment ouverte. La deuxième est une solution conservée dans un récipient ouvert à l'air libre depuis un certain temps. Suite à l'absorption d'eau atmosphérique au cours du temps, cette solution est un **mélange glycérol-eau** de fraction massique en glycérol x inconnue. Pour chaque solution, la vitesse de la bille est mesurée (notée V_{mes}) en fonction du rayon R de la bille utilisée. L'expérimentateur trace graphiquement la quantité V_{mes}/R^2 , représenté Fig. 5. Le rayon des billes utilisées est mesuré au pied à coulisse avec une incertitude au centième de millimètre, mais **l'expérimentateur a choisi de ne pas en tenir compte** dans le calcul de l'incertitude de V_{mes}/R^2 .

Q17. Pourquoi les incertitudes de la quantité V_{mes}/R^2 augmentent avec le rayon R de la bille utilisée?

Réponse. Si le rayon de la bille augmente, la vitesse limite également. L'incertitude sur le repérage des instants t_1 et t_2 est indépendante de la vitesse mesurée. Donc plus le rayon de la bille augmente, plus la durée mesurée Δt est faible à incertitude constante. Donc l'incertitude relative sur la mesure de V_{mes}/R^2 augmente.

Q18. Discuter de la validité du modèle utilisé en **Q12**. Dans chacun des deux cas proposés, à partir des données obtenues, discuter de la possibilité d'estimer ou non une valeur de viscosité dynamique η (sans calculer explicitement cette dernière).

Réponse. Dans le cas du glycérol pur, les points expérimentaux semblent, dans la limite des incertitudes expérimentales, ne pas avoir de dépendance en le rayon de bille R . Donc les données expérimentales sont compatibles avec le modèle proposé. On peut alors calculer une valeur de η . Une fois cette valeur obtenue, il convient de calculer le nombre de Reynolds et la durée du régime transitoire pour valider la valeur obtenue.

Dans le cas de la solution glycérol-eau, on observe une chute de la quantité V_{mes}/R^2 , indiquant que les hypothèses de **Q12** ne sont pas vérifiées pour $R > 1\text{mm}$. On peut supposer ces hypothèses vérifiées pour $R < 1\text{mm}$, et en déduire une valeur de viscosité dynamique η . Une fois cette valeur obtenue, il convient de calculer le nombre de Reynolds et la durée du régime transitoire pour valider la valeur obtenue.

Q19. À partir des courbes de la Fig. 5 et des données du formulaire, donner une estimation grossière la fraction massique en glycérol de la solution glycérol-eau.

Réponse. On a $\frac{V_{\text{mes}}}{R^2} \propto \frac{1}{\eta}$, donc à partir des courbes expérimentales on a $\eta_{\text{glycérol}}/\eta_{\text{glycérol-eau}} \approx 47500/9600 \approx 5$. Or, $\eta_{\text{glycérol}} = 1,49 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, soit $\eta_{\text{glycérol-eau}} \approx 0,3 \text{ Pa}\cdot\text{s}$. D'après le tableau de valeur du formulaire, on estime la fraction massique de glycérol à 91%-92%.

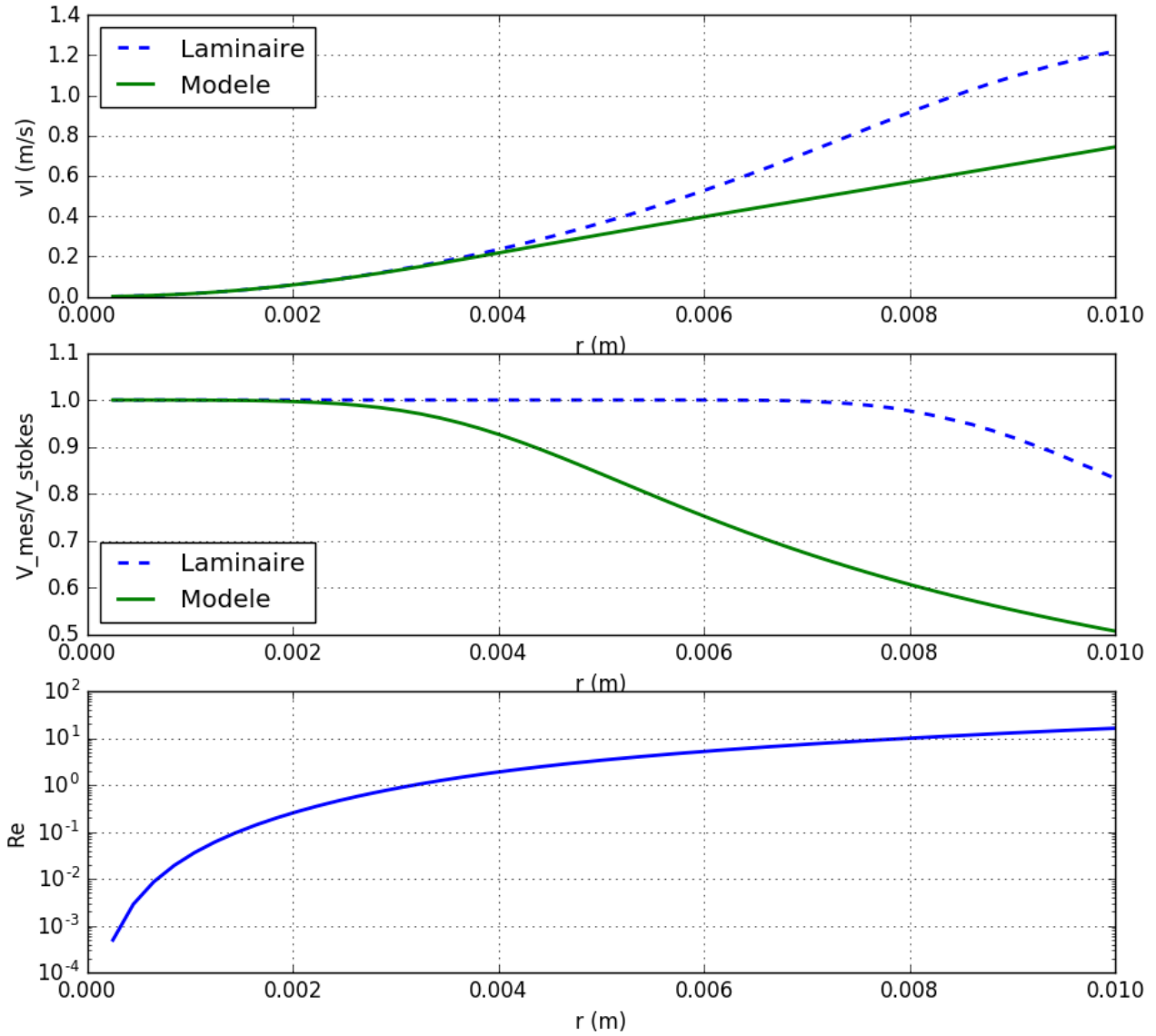


Fig. 4. Résultat du calcul numérique correspondant au code Python 3.5 situé page 44. Les paramètres expérimentaux utilisés correspondent à du glycérol pur à 20°C, et une distance $\Delta z = 40\text{cm}$.

On se restreint dans la suite au cas du glycérol pur à 20°C, et une distance de mesure $\Delta z = 40\text{cm}$. On dispose d'un ensemble de billes en acier de rayons allant de $R = 0,25\text{mm}$ à $R = 3,5\text{mm}$. La durée Δt est mesurée avec un chronomètre, déclenché à la main par simple observation à l'œil de la bille lors de son passage devant des marques en z_1 et z_2 . Afin de répondre à la question suivante, le candidat s'appuiera sur des considérations expérimentales et les résultats numériques de la Fig. 4. Contrairement à l'expérimentateur, **on tiendra compte de l'incertitude associée à la mesure du rayon de la bille R .**

La réponse à la question Q20. nécessite d'y consacrer un temps suffisant, et donc sera valorisée en conséquence. La qualité de la démarche proposée et son explication seront évaluées autant que le résultat final.

Q20. Dans le cas où l'on utilise qu'une seule bille pour les mesures, donc une seule valeur de rayon R , montrer qu'il existe une valeur de R optimale, notée $R_{\min}$, permettant de minimiser les incertitudes sur la valeur de η obtenue. Estimer la valeur numérique de $R_{\min}$ dans le cas considéré.

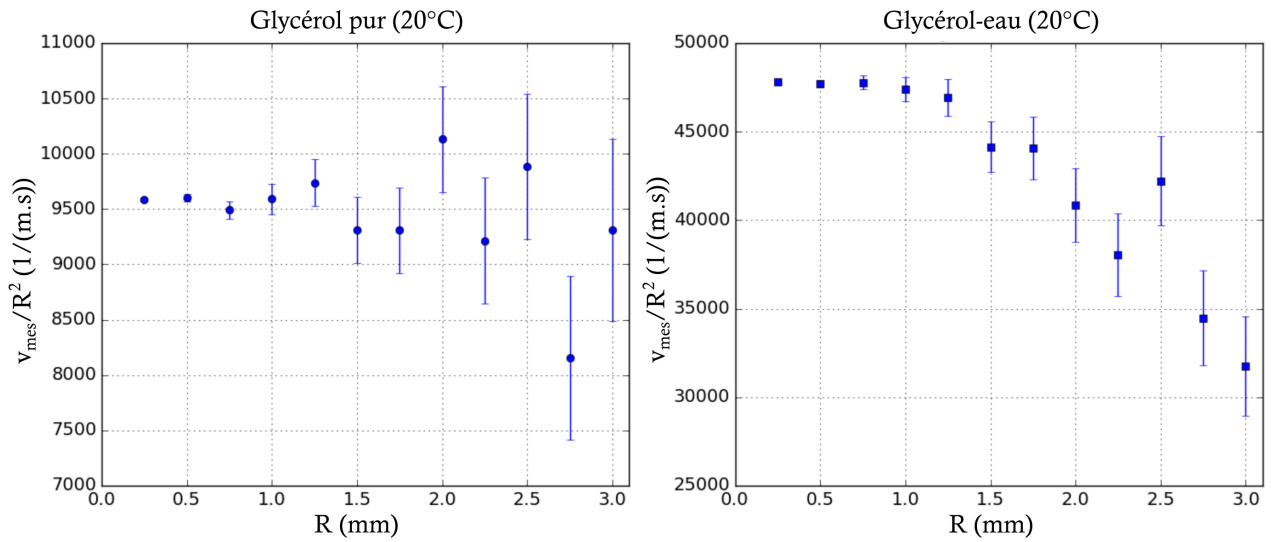


Fig. 5. Résultats expérimentaux pour du glycérol pur et une solution glycérol-eau (à 20°C). Pour chaque bille de rayon R , la vitesse mesurée V_{mes} permet de calculer la quantité V_{mes}/R^2 , représentée en fonction du rayon de la bille R . Les incertitudes expérimentales sont représentées graphiquement par des barres d'erreurs correspondant à un intervalle de confiance à 95%, c'est-à-dire à deux sigmas. **L'expérimentateur n'a pas tenu compte des incertitudes sur le rayon de la bille R dans son calcul de barres d'erreurs.**

Réponse. Avec un pied à coulisse au dixième, l'incertitude sur le diamètre est de l'ordre de $10\mu\text{m}$, soit une incertitude de l'ordre de $5\mu\text{m}$ sur le rayon. Dans le cas le plus défavorable ($R = 250\mu\text{m}$), cela correspond à une incertitude relative de 2%. Mais le rayon R intervient à la fois dans le temps Δt et dans le calcul de η une fois la vitesse mesurée. Il n'est pas possible de conclure à partir uniquement de l'incertitude relative $\delta R/R$. Il faut procéder à une analyse plus poussée de la dépendance en R de l'incertitude sur la viscosité dynamique $\delta\eta$.

On suppose que l'écoulement est laminaire, et que le régime permanent est atteint pour l'écoulement. On a alors

$$V_{\text{mes}} = (\rho - \rho_f) \frac{2g}{9\eta} R^2,$$

soit, en tenant compte de $V_{\text{mes}} = \Delta z / \Delta t$

$$\eta = (\rho - \rho_f) \frac{2g}{9\Delta z} \Delta t R^2.$$

Soit $\delta\eta$, $\delta(\Delta t)$ et δR les incertitudes respectivement sur η , Δt et R , on a

$$\frac{\delta\eta}{\eta} = \sqrt{\left(\frac{\delta(\Delta t)}{\Delta t}\right)^2 + \left(2\frac{\delta R}{R}\right)^2}.$$

Or,

$$\Delta t = \frac{\Delta z}{V_{\text{Stokes}}} = \Delta z \frac{R^2}{V_{\text{Stokes}} R^2}.$$

Or, $\frac{R^2}{V_{\text{Stokes}}}$ est indépendant de R dans la limite où les hypothèses de **Q12** sont vérifiées. Par lecture graphique, à partir de la Fig. 5, on a

$$\alpha = \frac{R^2}{V_{\text{Stokes}}} \approx \frac{1}{9600\text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}} \approx 10^{-4} \text{m} \cdot \text{s}.$$

Alors

$$\Delta t = \frac{\alpha}{R^2} \Rightarrow \left(\frac{\delta\eta}{\eta}\right)^2 = \left(\frac{\delta(\Delta t)}{\alpha}\right)^2 R^4 + \left(2\frac{\delta R}{R}\right)^2.$$

Les incertitudes $\delta(\Delta t)$ et δR sont indépendantes de R donc il faut maximiser la fonction

$$f(x) = \left(\frac{\delta(\Delta t)}{\alpha} \right)^2 x^4 + 4 \frac{\delta R^2}{x^2}.$$

On a

$$f'(x) = 4 \left(\frac{\delta(\Delta t)}{\alpha} \right)^2 x^3 - 8 \frac{\delta R^2}{x^3}.$$

La dérivée sera nulle pour

$$\left(\frac{\delta(\Delta t)}{\alpha} \right)^2 x^3 = 2 \frac{\delta R^2}{x^3} \Leftrightarrow x^3 = \sqrt{2} \frac{\delta R \alpha}{\delta(\Delta t)},$$

d'où la valeur de rayon $R_{\min}$ minimisant l'incertitude sur la mesure de la viscosité dynamique

$$R_{\min} = \left(\sqrt{2} \frac{\delta R \alpha}{\delta(\Delta t)} \right)^{1/3}.$$

Application numérique : pour $\delta R = 5\mu\text{m}$ (un demi centième), $\delta(\Delta t) \approx 300\text{ms}$, on obtient

$$R_{\min} \approx 1,3\text{mm}.$$

Ainsi, l'incertitude sur la mesure de vitesse sera faible pour une bille de faible diamètre, mais l'incertitude sur la mesure du diamètre va impacter l'incertitude sur la viscosité au final. Il faut donc des billes avec un diamètre de l'ordre de 1,3mm pour optimiser l'incertitude de mesure sur le paramètre d'intérêt (la viscosité). D'après la modélisation numérique Fig. 4, le nombre de Reynolds est inférieur à 10^{-1} donc le régime est bien laminaire, est la mesure est bien effectuée une fois la vitesse limite atteinte.

Alors, pour $R = R_{\min}$, on obtient l'incertitude relative sur la mesure de viscosité η avec un tel dispositif

$$\frac{\delta\eta}{\eta} \approx 1\%.$$

Il est en théorie possible d'atteindre de très bonnes précisions de mesure avec ce dispositif. Il convient de vérifier alors s'il ne faut pas tenir compte d'effets négligés auparavant (recirculation de fluide, bulle d'air accrochée à la bille, effets de parallaxe, etc...).

Les effets de recirculation de fluide liés au rayon fini R_{cyl} du récipient sont négligés d'après l'énoncé : $R_{\text{cyl}} \gg R$. La correction associée est en $2, 1 \frac{R}{R_{\text{cyl}}}$ (Cf. *Hydrodynamique physique* - 3e édition - de Étienne Guyon, Jean-Pierre Hulin et Luc Petit (EDP Sciences)).

Pour $R < 3\text{ mm}$ et $R_{\text{cyl}} \sim 15\text{ cm}$, le terme correctif est inférieur à 4.2%. Si on considère les incertitudes expérimentales de la Fig. 5, les incertitudes associées à la mesure expérimentale sont supérieures à 5% pour $R \geq 2$.

Pour $R < 2\text{ mm}$ et $R_{\text{cyl}} \sim 10\text{ cm}$, le terme correctif est inférieur à 4.2%.

Pour le rayon optimal, $R = 1,3\text{ mm}$, l'incertitude relative de mesure est estimée à 2%, et le terme correctif associé aux recirculations est de 2,1%. Dans ce cas ($R_{\text{cyl}} \sim 10\text{ cm}$), il conviendrait de corriger l'erreur systématique associée, non négligeable comparée à l'incertitude statistique de mesure (mais cet effet était négligé par hypothèse de l'énoncé).

C. Régime de Stokes

L'approximation du régime de Stokes consiste à se placer dans le cadre de deux hypothèses : 1)

être dans un régime de vitesses tel que l'écoulement autour de la particule soit laminaire (faibles nombres de Reynolds) et 2) que le temps τ du régime transitoire de la particule soit faible devant les autres temps caractéristiques associés à sa dynamique, de manière à négliger le terme inertiel dans l'équation du mouvement. Si ces hypothèses sont vérifiées, on obtient l'équation du mouvement dite *équation de Stokes* selon

$$\vec{F}_f(\vec{v}) + \sum_i \vec{F}_i = \vec{0},$$

où $\{\vec{F}_i\}$ désigne l'ensemble des forces extérieures s'appliquant à la particule (autre que les forces de frottement), et $\vec{F}_f(\vec{v})$ la résultante des forces de frottements fluides.

Une bactérie nageante comme *Escherichia coli* possède un mouvement erratique, composé de déplacements en ligne droite suivis de brusques changements de direction (*run-and-tumble dynamics*). *Escherichia coli* est un organisme unicellulaire de $1\mu\text{m}$ de diamètre et $3\mu\text{m}$ de long, muni de flagelles de quelques μm de long. Les vitesses atteintes par *Escherichia coli* sont typiquement de $20\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Le cytoplasme cellulaire possède une densité proche de l'eau. Les forces de frottements fluides auxquelles est soumise cette bactérie sont supposées être de type fluide visqueux en régime laminaire, telles que $\vec{F}_f(\vec{v}) = -\gamma\vec{v}$ où γ est le coefficient de frottement fluide.

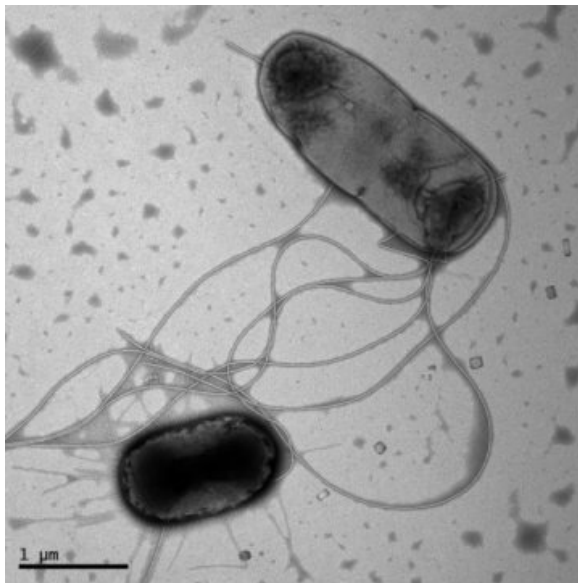


Fig. 6. Image d'une bactérie *Escherichia coli* au microscope électronique. Extrait de <https://www.sciencedaily.com/releases/2016/04/160419183923.htm>.

Des mesures expérimentales ont permis de déterminer le coefficient de frottement fluide γ d'une bactérie *Escherichia coli* ([Swimming efficiency of bacterium Escherichia coli Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 103\(37\), 13712–13717 \(2006\)](#)), pour obtenir

$$\gamma_{E. Coli} = (1,48 \pm 0,04) \times 10^{-8} \text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1}.$$

La propulsion est assurée par le mouvement de rotation des flagelles de la bactérie. La source d'énergie de ce mouvement provient de l'hydrolyse de molécules d'adénosine triphosphate (ATP), d'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G^0 \sim 30,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. L'ATP peut être régénéré à partir d'adénosine diphosphate (ADP) au moyen de l'énergie libérée par l'oxydation de glucides ou de lipides à travers un ensemble de processus appelé respiration cellulaire. Environ 30 molécules d'ATP peuvent être produites pour chaque molécule de glucose oxydée.

Q21. Estimer l'ordre de grandeur de la durée du régime transitoire de la vitesse de micro-objets sphériques (rayon R de l'ordre de quelques μm) dans un fluide aux caractéristiques proches de l'eau. En déduire, en justifiant, que l'on peut se placer dans l'approximation du régime de Stokes pour l'étude de la dynamique de tels objets, aux vitesses typiques de l'ordre de $20 \mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$.

Réponse. $Re \ll 1$ on est en régime laminaire. Le temps associé au régime transitoire issu du terme inertiel est de l'ordre de

$$\tau \sim \frac{4\rho R^2}{9\eta} = \frac{4 \times 10^3 \times 9 \cdot 10^{-12}}{9 \times 10^{-3}} \approx 4\mu\text{s}.$$

Avec des vitesses de l'ordre de $10\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, une particule se déplace de l'ordre de $0.4\text{\AA}$ pendant τ . Le mouvement transitoire est donc complètement négligeable, et on peut négliger le terme inertiel.

Q22. Discuter de l'importance relative entre la poussée d'Archimède et le poids d'une bactérie. Quelle approximation peut-on faire ?

Réponse. La masse volumique du cytoplasme est proche de la masse volumique du fluide environnant. Dans le régime de Stokes, la force de dérive de pesanteur est approximativement compensée par la poussée d'Archimède. On a donc $\vec{P} + \vec{\Pi} \approx \vec{0}$

Q23. Estimer l'ordre de grandeur de la force de propulsion $\vec{F}_{\text{prop}}$ et la puissance minimale produite $\mathcal{P}_{\text{min}}$ par la cellule pour assurer son mouvement.

Réponse. $F_{\text{prop}} \approx 0,3 \text{ pN}$ soit une puissance minimale de $\mathcal{P}_{\text{min}} \approx 5,9 \times 10^{-18} \text{ W}$.

Q24. Estimer l'ordre de grandeur de la consommation d'ATP dans une bactérie pour assurer sa propulsion, ainsi que la correspondance en molécules de glucose.

Réponse.

Dans le cytoplasme, la température et la pression sont régulées par le milieu environnant qui joue le rôle de thermostat, et donc les transformations sont à T et P constants. Le bon potentiel thermodynamique est donc l'enthalpie libre G et la variation d'enthalpie correspond au travail maximum récupérable lors d'une transformation. On considère le système { kinésine + ATP }. Alors on peut estimer que lors de l'hydrolyse d'une molécule d'ATP, la variation d'enthalpie libre du système, et donc le travail récupérable maximal, est de l'ordre de $\Delta_r G^0$.

$\Delta_r G^0 \sim 30,5 \text{ kJ/mol} \sim 5 \cdot 10^{-20} \text{ J/molécule}$. Pour une puissance de $5,9 \times 10^{-18} \text{ W}$, on obtient un taux de consommation d'ATP minimum de 118 molécules par secondes soit environ 4 molécules de glucose par seconde.

II. Dynamique brownienne

Une petite particule, immergée dans un liquide, a un mouvement erratique, désordonné, associé aux chocs entre la particule et les molécules de fluide environnant. Le mouvement résultant est appelé *mouvement brownien*, découvert en 1827 par le botaniste Brown lors de l'observation de grains de pollen de *Clarkia pulchella* au microscope. L'objet de cette partie est d'étudier la modélisation microscopique du mouvement brownien et son implémentation numérique.

A. Équation de Langevin

On considère une particule de masse m , repérée par son vecteur position $\vec{r}$. Plongée dans un fluide, cette dernière est soumise à une force de frottement fluide de la forme

$$\vec{F}_f(\vec{v}) = -\gamma\vec{v},$$

où $\vec{v}$ est la vitesse de la particule et γ est le coefficient de frottements fluides. On suppose que l'ensemble des forces conservatives auxquelles la particule est soumise sont décrites par l'énergie potentielle $U(\vec{r}, t)$. Les collisions avec les particules du fluide induisent un mouvement aléatoire, on parle de mouvement brownien. Ce mouvement est décrit formellement par l'introduction d'une force aléatoire dite *force de Langevin* $\vec{F}_L(t)$. Cette force est un bruit blanc gaussien, entièrement décrite par sa valeur moyenne et sa variance selon

$$\langle \vec{F}_L(t) \rangle = \vec{0}, \quad \forall t,$$

$$\langle F_{L,i}(t)F_{L,j}(t') \rangle = \Gamma\delta_{ij}\delta(t-t'), \quad \forall(t, t'), \quad \forall(i, j) \in \{x, y, z\}^2, \quad (1)$$

où $F_{L,i}(t)$ est la composante i du vecteur $\vec{F}_L(t)$, $\langle X \rangle$ désigne la valeur moyenne **statistique** de la grandeur X , δ_{ij} est le symbole de Kronecker, $\delta(t)$ est la distribution de Dirac par rapport à la variable t et Γ une constante. On note $\tau = m/\gamma$ le temps caractéristique du mouvement. On introduit le coefficient de transport D à partir de la fonction de corrélation en vitesse selon

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle dt.$$

On admet la *relation d'Einstein*, reliant le coefficient de transport D à la température T et au coefficient de frottements fluides γ selon

$$\gamma D = k_B T,$$

où k_B est la constante de Boltzmann.

Q25. Quelle est la signification physique de l'équation (1)? Pourquoi parle-t-on de *bruit blanc*?

Réponse. Chaque composante de la force de Langevin est décorrélée des autres, et la valeur de chaque composante est décorrélée dans le temps. On parle de bruit blanc, car c'est un processus stochastique dont le spectre est "blanc" dans l'espace réciproque, c'est-à-dire d'intensité spectrale indépendante de la fréquence.

Q26. Établir l'équation du mouvement de la particule.

Réponse.

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\gamma\vec{v} - \vec{\nabla}U(\vec{r}, t) + \vec{F}_L(t).$$

Q27. En l'absence de forces extérieures ($U(\vec{r}, t) = \text{Cte}$), montrer que dans la limite où $t \gg \tau$

$$\langle \vec{v}(t)^2 \rangle = \frac{3\Gamma\tau}{2m^2}.$$

Pour cela, on pourra utiliser les résultats du formulaire proposé en annexe de ce sujet.

Réponse. On intègre l'équation du mouvement pour obtenir la vitesse

$$\vec{v}(t) = \vec{v}_0 e^{-t/\tau} + \frac{1}{m} \int_0^t \vec{F}_L(t') e^{-(t-t')/\tau} dt',$$

avec $\tau = m/\gamma$. D'où la relaxation de la vitesse moyenne

$$\langle \vec{v} \rangle = \vec{v}_0 e^{-t/\tau}.$$

Variance de la vitesse

$$\sigma_v^2(t) = \langle \vec{v}^2(t) \rangle - \langle \vec{v}(t) \rangle^2 = \frac{3\Gamma\tau}{2m^2} (1 - e^{-2t/\tau}) \rightarrow \frac{3\Gamma\tau}{2m^2}.$$

Q28. En déduire, en justifiant, la relation $\Gamma = 2k_B T \gamma$.

Réponse. Equipartition de l'énergie

$$\frac{1}{2} m \langle \vec{v}^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T \Rightarrow \langle \vec{v}^2 \rangle = \frac{3\Gamma\tau}{2m^2} = \frac{3k_B T}{m},$$

d'où

$$\Gamma = 2k_B T \gamma.$$

Q29. Montrer que

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r}^2 \rangle = 2 \int_0^t \langle \vec{v}(u) \cdot \vec{v}(0) \rangle du.$$

Réponse.

$$\vec{r}(t) = \int_0^t \vec{v}(u) du,$$

d'où

$$\langle \vec{r}^2 \rangle = \left\langle \int_0^t \vec{v}(u_1) du_1 \int_0^t \vec{v}(u_2) du_2 \right\rangle = \int_0^t \int_0^t \langle \vec{v}(u_1) \cdot \vec{v}(u_2) \rangle du_1 du_2.$$

En prenant la dérivée, on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r}^2 \rangle = 2 \int_0^t \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(u) \rangle du.$$

Invariance dans le temps, indépendant de l'origine des temps

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{r}^2 \rangle = 2 \int_0^t \langle \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(u) \rangle du.$$

Q30. Établir le comportement asymptotique de $\langle \vec{r}^2 \rangle$ pour $t \gg \tau$, en fonction de D et t . Commenter ce résultat.

Réponse. Immédiat

$$\langle \vec{r}^2 \rangle \approx 6Dt.$$

On retrouve bien le résultat "classique" d'un processus diffusif, où la distance caractéristique du problème varie en $\sqrt{t}$.

B. Étude numérique de l'équation de Langevin

Dans cette partie, on cherche à simuler numériquement le mouvement d'une particule brownienne libre. En annexe de ce sujet, page 46, est établie une convention de symbolique algorithmique pour implémenter cette étude numérique. À titre d'exemple, un algorithme simple, noté A1, est présenté page 47. On se place dans le cas 1D et on cherche à simuler numériquement l'équation du mouvement suivante

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma \frac{dx}{dt} + F_L(t).$$

Le temps t est discrétisé en un ensemble d'instants $\{t_i\}$, $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ selon

$$t_i = i\Delta t,$$

avec Δt le pas temporel, et la position x_i associée selon

$$x_i = x(t = t_i).$$

On cherche à établir l'équivalent numérique de la force de Langevin. On dispose pour cela d'une fonction numérique w consistant en un générateur de nombre aléatoire gaussien de valeur moyenne nulle et de variance unité

$$\langle w_i \rangle = 0, \quad \langle w_i w_j \rangle = \delta_{ij}.$$

Q31. Établir l'expression *numérique* des variables $\dot{x}_i = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{t=t_i}$ et $\ddot{x}_i = \left(\frac{d^2x}{dt^2} \right)_{t=t_i}$ en fonction de x_i , x_{i-1} , x_{i-2} et Δt .

Réponse.

$$\dot{x}_i = \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t} \quad \text{et} \quad \ddot{x}_i = \frac{x_i - 2x_{i-1} + x_{i-2}}{\Delta t^2}.$$

Q32. Montrer que l'équivalent numérique de la force de Langevin F_L est

$$F_L \Leftrightarrow \sqrt{\frac{2k_B T \gamma}{\Delta t}} w_i.$$

Réponse. On a la force de Langevin qui est caractérisée par

$$\langle F_L(t) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle F_L(t) F_L(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t').$$

En intégrant sur la variable t' , on obtient

$$\int_{\mathbb{R}} \langle F_L(t) F_L(t') \rangle dt' = \Gamma.$$

On cherche un processus aléatoire gaussien discret $X_i = \alpha w_i$ équivalent numérique de F_L . On a bien $\langle X_i \rangle = 0$ et

$$\Gamma = \int_{\mathbb{R}} \langle F_L(t) F_L(t') \rangle dt' = \sum_j \langle X_i X_j \rangle \Delta t.$$

Or

$$\langle X_i X_j \rangle = \alpha^2 \langle w_i w_j \rangle = \alpha^2 \delta_{ij}.$$

On en déduit la relation $\Gamma = \alpha^2 \Delta t$ soit

$$\alpha = \sqrt{\frac{\Gamma}{\Delta t}}.$$

Par ailleurs, il a été vu que $\Gamma = 2k_B T \gamma$, d'où le résultat

$$X_i = \sqrt{\frac{2k_B T \gamma}{\Delta t}} w_i.$$

Q33. En déduire l'expression de x_i en fonction de x_{i-1} , x_{i-2} et w_i .

Réponse.

$$x_i = \frac{2 + \frac{\Delta t}{\tau}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau}} x_{i-1} - \frac{1}{1 + \frac{\Delta t}{\tau}} x_{i-2} + \frac{\sqrt{2k_B T \gamma}}{m} \frac{1}{(1 + \frac{\Delta t}{\tau})} \Delta t^{3/2} w_i,$$

avec $\tau = \frac{m}{\gamma}$.

Remarque : la méthode numérique proposée ici est une méthode à base de différences finies simple, qui n'est pas la plus efficace du point de vue numérique. L'intégration numérique des équations différentielles stochastiques nécessite des outils mathématiques avancés, tels que les tribus (ou σ -algèbres), les martingales et la formule d'Itô. La résolution numérique d'un processus stochastique est en général non triviale (P. E. Kloeden et E. Platen, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations* (Springer, Heidelberg, 1999). L'approche simplifiée décrite ici est issue de *Simulation of a Brownian particle in an optical trap* American Journal of Physics 81, 224 (2013).

Q34. Montrer qu'en choisissant Δt de manière pertinente, la résolution numérique est simplifiée comme suit

$$x_i = x_{i-1} + \sqrt{2D\Delta t} w_i.$$

Réponse. On se place dans le régime où le terme inertiel de l'équation du mouvement est négligeable. Pour être dans ce régime entre deux impulsions de la force de Langevin, il faut que $\Delta t \gg \tau$. Alors, l'équation du mouvement devient

$$\dot{x}(t) = \frac{1}{\gamma} F_L(t), \text{ soit numériquement } x_i = x_{i-1} + \sqrt{\frac{2k_B T \Delta t}{\gamma}} w_i.$$

Or, $D = \frac{k_B T}{\gamma}$, d'où le résultat.

On peut retrouver directement cette expression à partir du résultat de la question précédente dans la limite où $\frac{\Delta t}{\tau} \gg 1$, en prenant garde de faire apparaître $\frac{(\frac{\Delta t}{\tau})^{3/2}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau}}$ dans le terme associé à la force de Langevin.

Q35. Du point de vue numérique, quel intérêt a-t-on à choisir un tel pas temporel? Quelle(s) contrainte(s) cela impose-t-il?

Réponse. À pas temporel donné, l'approximation ne permet pas de raccourcir le temps de calcul. Cependant, le calcul par différence fini est plus précis lorsqu'il s'agit d'une différence d'ordre 1 avec approximation, plutôt qu'une différence d'ordre 2 sans approximation. Ainsi, la tolérance sur le pas temporel Δt est plus importante et l'on peut en choisir un plus grand et donc par conséquence réduire le temps de calcul.

La contrepartie est que toute la dynamique rapide n'est plus accessible mais le mouvement "moyen" est conservé. Pour une étude sur un temps long devant le temps d'amortissement inertiel, le calcul de la position n'est pas impacté par l'absence du terme inertiel ("bruit" supplémentaire). En revanche, pour les dynamiques rapides, il faut faire le calcul sans approximation.

Dans la suite, on se place dans cette approximation des régimes diffusifs où $x_i = x_{i-1} + \sqrt{2D\Delta t}w_i$.

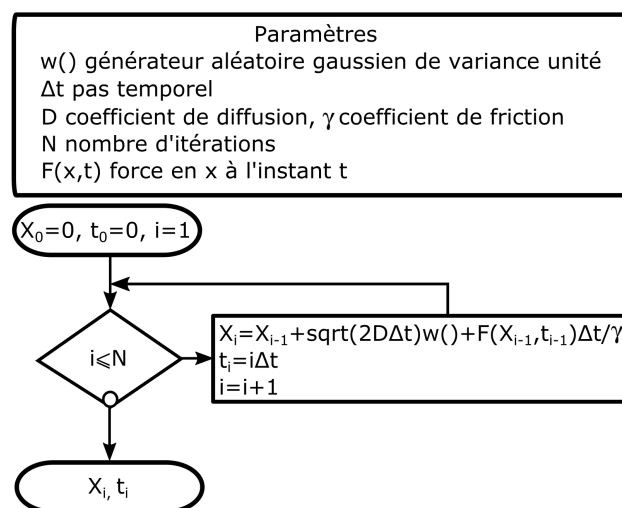
Q36. Expliquer brièvement quelle situation physique permet de simuler l'algorithme A1 (situé page 47) par le calcul du couple de variables $\{t, X\}$.

Réponse. Cet algorithme permet de simuler une particule brownienne à 1D avec un coefficient de diffusion D .

On considère désormais que cette particule brownienne est soumise à une force extérieure dépendante du temps $F(x, t)$.

Q37. Modifier l'algorithmme A1 afin de proposer un algorithme permettant de calculer la position X d'une particule après avoir diffusé pendant un temps t , en présence d'une force extérieure $F(x, t)$ supposée connue.

Réponse.



III. Moteur brownien

Dans une cellule eukaryote, les moteurs moléculaires permettent le transport de protéines et l'organisation de la dynamique intracellulaire. Un de ces moteurs est la kinésine, se déplaçant sur les microtubules, éléments de base du cytosquelette cellulaire.

A. Étude expérimentale d'un moteur moléculaire intracellulaire : la kinésine

Dans cette section, on se propose d'étudier les résultats expérimentaux qui ont été obtenus en laboratoire de recherche pour comprendre le mécanisme de fonctionnement d'un moteur moléculaire intracellulaire comme la kinésine. Pour cela, un dossier scientifique, situé page 35, est constitué de 6 documents présentant des expériences permettant de suivre le mouvement d'une molécule de kinésine unique lors de son déplacement le long d'un microtubule. On considère que le déplacement le long du microtubule est un mouvement à une dimension de coordonnée x (voir Fig. 7).

Pour pouvoir répondre aux questions de cette section, une étude préalable du dossier scientifique est nécessaire.

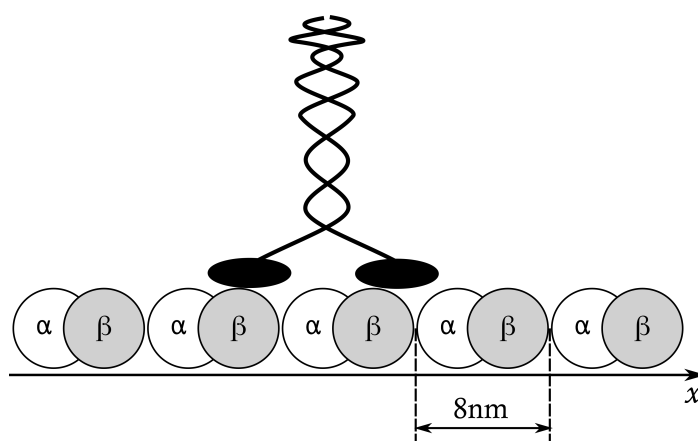


Fig. 7. Modélisation 1D du mouvement d'une molécule de kinésine le long d'un microtubule.

Les questions **Q38.** et **Q39.** consistent en une modélisation de la problématique proposée. Les réponses à ces dernières nécessitent de l'initiative, mais également d'y consacrer un temps suffisant, et donc seront valorisées en conséquence. La qualité de la démarche proposée et son explication seront évaluées autant que le résultat final.

Q38. On se propose de modéliser la kinésine comme un moteur ditherme, où l'ATP permettrait d'obtenir localement deux sources de chaleur à des températures différentes. Discuter de la pertinence d'un tel modèle et sa compatibilité avec les valeurs expérimentales obtenues dans le dossier scientifique (notamment en terme de vitesses de déplacement).

Réponse. Diffusion thermique dans l'eau. On a l'équation de diffusion

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c} \Delta T.$$

Donc pour une longueur L , le temps de diffusion est $\tau \sim L^2 \frac{\rho c}{\lambda}$. Pour l'eau, $\rho c = 4.2 \cdot 10^6 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$, $\lambda = 0.63 \text{ J} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Pour $L \sim 10 \text{ nm}$, on alors

$$\tau \sim 7 \text{ ns}.$$

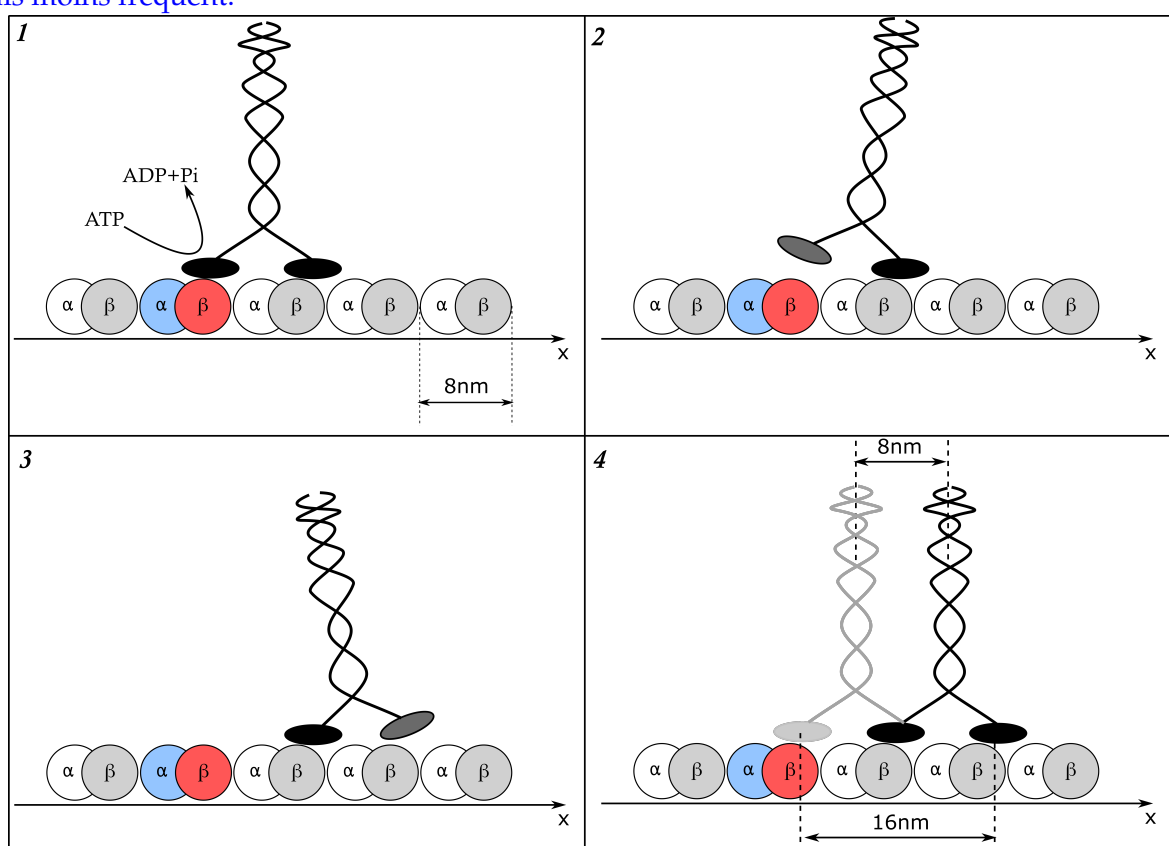
La thermalisation est bien plus rapide que la fréquence des pas du moteur. Il semble donc difficile de modéliser la kinésine comme un moteur ditherme.

Les mesures expérimentales démontrent qu'il est possible d'avoir un retour en arrière avec une probabilité plus faible que le mouvement en avant. Ainsi, il semblerait donc qu'une modélisation par une machine de Feynman isotherme soit la plus réaliste, avec des taux avant et arrière différents (voir *The Feynman lectures on physics*, vol. 1, Chapter 46 - Ratchet and pawl, ou *Making molecules into motors Scientific American*, 7, 2005 (2001)).

Q39. Proposer **qualitativement**, éventuellement à l'aide de schémas semblables à Fig. 7, un mécanisme décrivant le mode de déplacement de la kinésine sur un microtubule. On précisera le rôle de l'ATP.

Réponse.

L'ATP permet d'induire un changement conformationnel de la kinésine. Dans son état initial, la kinésine est fixée au microtubule. Après réaction avec l'ATP, la kinésine K-ADP subit un changement conformationnel **réduisant l'intensité de l'interaction avec le microtubule et une des deux têtes est libre de se déplacer** par mouvement brownien le long du microtubule. Une fois que l'ADP se désolidarise de la kinésine, cette dernière revient à sa conformation initiale, attirée par le microtubule. **Si la tête a suffisamment diffusée, elle peut se fixer sur un site adjacent.** La queue de la kinésine permet de jouer le rôle de rappel et le mouvement est nécessairement sur un site adjacent à 16nm du côté opposé à la tête restée attachée au microtubule. Pour briser l'asymétrie droite/gauche, **la polarité du dimère $\alpha - \beta$ -tubuline induit un potentiel d'interaction asymétrique, favorisant une direction à l'autre.** Le processus en sens inverse est possible, mais moins fréquent.



Une animation vidéo a été réalisée par John Liebler, intitulée *The Inner Life of the Cell*, où l'on peut voir une molécule de kinésine "marcher" le long d'un microtubule (à partir de 1min14s) : <https://www.youtube.com/watch?v=MZ47-G4XKDw>. Une vidéo expliquant plus en détail le rôle de l'ATP est disponible sur le site du Pr. Ron Vale : <https://vimeo.com/157524451> ou <https://valelab.ucsf.edu/kinesin/>.

Les questions **Q40.** et **Q41.** nécessitent de consacrer un temps suffisant à l'analyse du dossier scientifique, et seront valorisées en conséquence.

Q40. Les données expérimentales de la Fig. 18 du Document n°3 et celles de la Fig. 20 du Document n°5 sont-elles contradictoires (justifier)? Quel est l'apport scientifique de l'expérience du Document n°5 par rapport à celle du Document n°3?

Réponse. Dans le cas de l'expérience du Document n°3, la bille est attachée à la queue de la kinésine et l'on mesure le déplacement global, avec des pas de 8nm. Dans le cas de l'expérience du Document n°5, c'est une des deux têtes de la kinésine qui est repérée. Lorsqu'une tête se déplace de 16nm, l'autre reste immobile. Ainsi, globalement, le centre de masse de la kinésine se déplace de 8nm. Les deux expériences ne sont pas contradictoires.

L'intérêt de l'expérience du Document n°5 est qu'elle permet d'étudier le mouvement de la kinésine "à vide", sans avoir à travailler (au sens mécanique) pour déplacer une bille attachée à sa queue. En revanche, elle nécessite de fonctionnaliser (au sens chimique) une des deux têtes de la kinésine avec un quantum dot, sans influencer les changements conformationnels de la kinésine lors de la réaction chimique avec l'ATP.

Q41. Dans le Document n°3, expliquer l'intérêt d'analyser les données de la Fig. 18.a) en les représentant sous la forme de la Fig. 18.b) et du calcul de sa transformée de Fourier en Fig. 18.c).

Réponse. L'évolution de la position en fonction du temps est un processus stochastique, évoluant par pas discrets. On note a le pas de déplacement de la kinésine, et $\{x_i\}$ les mesures de sa position au court du temps. Alors, il existe un ensemble d'entiers $\{n_i\}$ tels que

$$x_i = n_i a + \varepsilon_i,$$

où ε_i est un processus aléatoire décrivant le bruit technique associé à la mesure expérimentale.

Les sauts de a ne sont pas modélisable, il s'agit d'un processus stochastique, probabiliste. Il n'est donc pas possible d'analyser les données en faisant un ajustement. Le rapport signal à bruit est trop faible pour mesurer le pas précisément directement sur la courbe.

En revanche, le modèle suppose que le pas est constant et égale à a . La méthode d'analyse des données consiste à oublier l'aspect temporel, pour se concentrer sur la quantité d'intérêt, le pas spatial a . Pour cela, à partir des $\{x_i\}$, ensemble de dimension N , on définit un nouvel ensemble de données $\{y_k = |x_i - x_j|, i \neq j\}$ de dimension $N \times (N - 1)$. La Fig. 18.b) représente alors l'histogramme en fréquence des $\{y_k\}$. Sans bruit, on ne devrait avoir des valeurs non nulles uniquement pour $y_k = na, n \in \mathbb{N}$. Donc la périodicité des pics de la Fig. 18.b) permet d'accéder à a . La Fig. 18.c) permet, à l'aide d'une FFT, d'accroître la précision de la mesure démontrant un pic principal et dominant à la fréquence spatiale $k_0 = 0.125\text{nm}^{-1} = \frac{1}{a}$ avec $a = 8\text{nm}$.

Des mesures expérimentales ont permis de déterminer la force maximale qu'une molécule de kinésine peut exercer sur son chargement. Cette force est de 6pN. La viscosité du cytoplasme d'une cellule eukaryote est de typiquement $\eta \sim 0,1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$.

Q42. Donner une estimation du rendement maximal de la kinésine comme moteur moléculaire. Commenter.

Réponse. Si une tête de la kinésine se déplace de 16nm, le centre de masse de la kinésine se déplace de 8nm. Ainsi, pour une force de 6pN et un déplacement de 8nm, chaque "pas" fournit un travail de l'ordre de $6\text{pN} \times 8\text{nm} \sim 48 \cdot 10^{-21}\text{J}$. (Pour rester cohérent avec le nombre de chiffres significatifs sur la force maximale, ce travail est de l'ordre de $5 \cdot 10^{-20}\text{J}$).

De plus, $\Delta_r G^0 \sim -31 \text{ kJ/mol} \sim 47 \cdot 10^{-20}\text{J}$. Le rendement maximal est donc de l'ordre de 100%!

B. Modèle microscopique à sites discrets

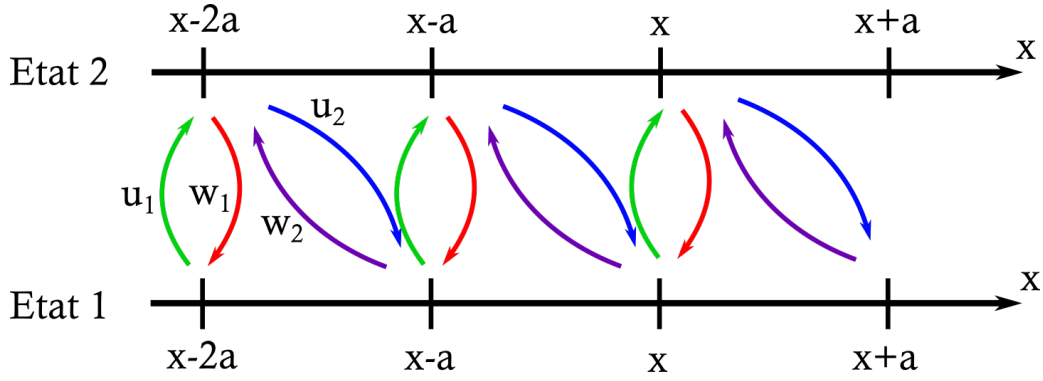


Fig. 8. Modèle stochastique à deux états.

On cherche à estimer la loi de vitesse du moteur moléculaire à partir de constantes microscopiques. Pour cela, on décrit le moteur comme un système à deux états 1 et 2, constitué de n sites discrets séparés d'un pas spatial a ($x_n = na$). Le moteur moléculaire peut "sauter" d'un état à l'autre et/ou d'un site adjacent à l'autre. On adopte la notation suivante (voir Fig. 8) :

- u_1 le taux de transition de l'état 1 vers l'état 2 à position constante ;
- w_1 le taux de transition de l'état 2 vers l'état 1 à position constante ;
- u_2 le taux de transition de l'état 2 vers l'état 1 avec un incrément de position de $\Delta x = +a$;
- w_2 le taux de transition de l'état 1 vers l'état 2 avec un incrément de position de $\Delta x = -a$.

On suppose que w_1 , u_2 et w_2 sont constants, mais que u_1 dépend de la concentration en molécules d'ATP dans le cytoplasme

$$u_1 = k_{\text{ON}}[\text{ATP}].$$

On note $p_1(x, t)$ (resp. $p_2(x, t)$) la probabilité pour le moteur moléculaire d'être dans l'état 1 (resp. 2) sur le site $x = na$ à l'instant t .

Q43. Établir les deux équations différentielles régissant $p_1(x, t)$ et $p_2(x, t)$.

Réponse. Par définition des taux introduits dans l'énoncé

$$\frac{\partial p_1(x, t)}{\partial t} = u_2 p_2(x - a, t) + w_1 p_2(x, t) - (u_1 + w_2) p_1(x, t),$$

$$\frac{\partial p_2(x, t)}{\partial t} = u_1 p_1(x, t) + w_2 p_1(x + a, t) - (u_2 + w_1) p_2(x, t).$$

On suppose dans la suite que $w_1 \approx w_2 \approx 0$.

Q44. Établir alors, pour $w_1 \approx w_2 \approx 0$, le système d'équations vérifié par $p_1(x, t)$ et $p_2(x, t)$ dans la limite continue $a \rightarrow 0$.

Réponse.

$$\frac{\partial p_1(x, t)}{\partial t} = u_2 p_2(x, t) - u_2 a \frac{\partial p_2(x, t)}{\partial x} - u_1 p_1(x, t),$$

$$\frac{\partial p_2(x, t)}{\partial t} = u_1 p_1(x, t) - u_2 p_2(x, t).$$

On cherche à obtenir la vitesse de déplacement de la particule à partir des équations sur les probabilités. Pour cela, on se place dans l'espace réciproque (ω, k) en cherchant des solutions de la forme

$$p_1(x, t) = p_1^0 e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{et} \quad p_2(x, t) = p_2^0 e^{i(kx - \omega t)}.$$

Q45. Établir l'équation de dispersion $k(\omega) = k'(\omega) + ik''(\omega)$, avec $k'(\omega) = \text{Re}(k(\omega))$ et $k''(\omega) = \text{Im}(k(\omega))$.

Réponse.

$$\begin{aligned} -i\omega p_1^0 &= -u_1 p_1^0 + u_2 p_2^0 - iku_2 a p_2^0, \\ -i\omega p_2^0 &= u_1 p_1^0 - u_2 p_2^0. \end{aligned}$$

Ce système possède une solution non nulle si et seulement si

$$\begin{vmatrix} u_1 - i\omega & u_2(ika - 1) \\ -u_1 & u_2 - i\omega \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow (u_1 - i\omega)(u_2 - i\omega) + (ika - 1)u_1 u_2 = 0.$$

D'où

$$k(\omega) = \frac{u_1 u_2 - (u_1 - i\omega)(u_2 - i\omega)}{iu_1 u_2 a} = \frac{u_1 + u_2}{u_1 u_2 a} \omega - i \frac{\omega^2}{u_1 u_2 a},$$

d'où par identification

$$\boxed{k'(\omega) = \frac{u_1 + u_2}{u_1 u_2 a} \omega}, \quad \text{et} \quad \boxed{k''(\omega) = -\frac{\omega^2}{u_1 u_2 a}}.$$

Q46. À partir du calcul de la vitesse de groupe, montrer alors que la vitesse de déplacement du moteur moléculaire vérifie

$$v = \frac{[\text{ATP}]}{[\text{ATP}] + K_m} v_{\max},$$

où K_m et $v_{\max}$ sont des constantes dont on précisera l'expression.

Réponse. À partir de la relation de dispersion, on a la vitesse v

$$v = a \frac{u_1 u_2}{u_1 + u_2}.$$

En utilisant $u_1 = k_{\text{ON}}[\text{ATP}]$, on obtient

$$v = \frac{[\text{ATP}]}{[\text{ATP}] + K_m} v_{\max},$$

avec

$$v_{\max} = a u_2,$$

et

$$K_m = \frac{u_2}{k_{\text{ON}}}.$$

Q47. À partir des résultats expérimentaux du dossier scientifique, donner les valeurs numériques des paramètres u_2 et k_{ON} de la kinésine dans les conditions expérimentales du Document n°4, **en précisant les incertitudes associées**. On prendra $a = 8\text{nm}$ comme pas spatial et on négligera les incertitudes associées à ce paramètre.

Réponse. La donnée de la courbe de vitesse en fonction de la concentration d'ATP permet à partir d'un ajustement d'obtenir les valeurs de $v_{\max}$ et K_d . Ensuite, on obtient $u_2 = v_{\max}/a$, et $k_{\text{ON}} = u_2/K_d = v_{\max}/(K_d a)$.

On a $v_{\max} = 680 \pm 31 \text{ nm/s} = a u_2$ donc immédiatement

$$u_2 = 85 \pm 4 \text{ s}^{-1}.$$

De même, avec $K_d = 62 \pm 5 \mu\text{mol/L}$, on obtient

$$k_{\text{ON}} = u_2/K_d = 1.4 \pm 0.2 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}.$$

IV. Micronageurs artificiels

Le plancton ou les colonies de bactéries sont des exemples de collections d'entités de petites tailles capables de se mouvoir de façon autonome et cohérente : on parle de "micronageurs". Leur comportement a inspiré les physiciens, qui ont cherché à en rationaliser la phénoménologie. Dans cette partie, un type de particule synthétique autopropulsée est étudiée : la particule de Janus.

A. L'osmose

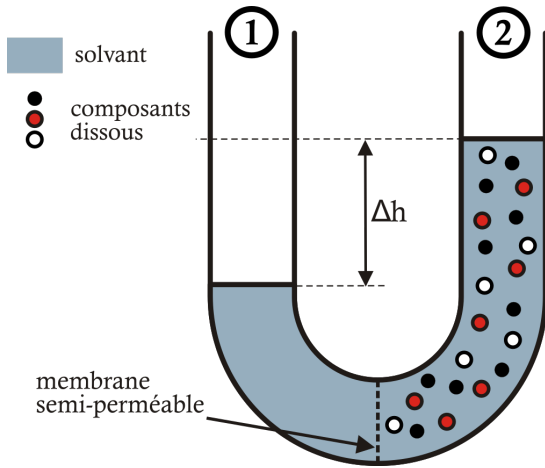


Fig. 9. Géométrie à deux compartiments considérée. Le compartiment 1 contient un solvant S pur et le compartiment 2 contient une solution de composants X_i dans le solvant S . Les deux compartiments sont séparés par une membrane semi-perméable laissant passer le solvant S mais pas les composants X_i . On observe une surpression Π dans le compartiment 2 au niveau de la membrane.

On considère un récipient formé de deux compartiments notés 1 et 2 (voir Fig. 9). Ces derniers sont à la même température T , séparés par une membrane *semi-perméable*. Le compartiment 1 ne contient que du solvant S pur alors que le compartiment 2 contient une solution idéale de solutés X_i dans le solvant S , de concentrations molaires c_i . **La membrane est totalement perméable au solvant, mais pas aux solutés.** On note P_1 (resp. P_2) la pression du fluide dans le compartiment 1 (resp. 2) au niveau de la membrane semi-perméable. On admet que le potentiel chimique du composant X_i dans un mélange idéal à la température T et à la pression P est

$$\mu_i(T, P) = \mu_i^0(T, P) + RT \ln \phi_i,$$

où ϕ_i est la fraction molaire du composé X_i dans le mélange et $\mu_i^0(T, P)$ le potentiel chimique du composant X_i pur. On rappelle que, pour un corps pur de potentiel chimique μ , on a le volume molaire v

$$v = \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T.$$

Q48. Quelle relation a-t-on entre les potentiels chimiques du solvant de chaque compartiment à l'équilibre ? En déduire une relation entre les fractions molaires ϕ_i des composants X_i et les potentiels chimiques du solvant pur à (T, P_1) et (T, P_2) .

Réponse. À l'équilibre, on doit avoir égalité des potentiels chimiques du solvant entre les deux compartiments

$$\mu_s(T, P_2, \{\phi_i\}) = \mu_s^0(T, P_2) + RT \ln \left(1 - \sum_i \phi_i \right) = \mu_s^0(T, P_1).$$

Q49. En supposant que la solution est diluée et le solvant incompressible, montrer que la surpression Π dans le compartiment 2 est de la forme

$$\Pi = RT \sum_i c_i,$$

où c_i est la concentration molaire en soluté X_i .

Réponse. On a

$$\mu_s(T, P_2, \{\phi_i\}) = \mu_s^0(T, P_2) + RT \ln \left(1 - \sum_i \phi_i \right) = \mu^0(T, P_1),$$

$$\mu_s^0(T, P_2) - \mu_s^0(T, P_1) = -RT \ln \left(1 - \sum_i \phi_i \right).$$

On pose $P_2 = P_1 + \Pi$ et pour de faibles concentration, on peut légitimement supposer que la surpression Π est faible. Donc

$$\mu_s^0(T, P_2) - \mu_s^0(T, P_1) = \Pi \left. \frac{\partial \mu_s^0}{\partial P} \right|_T = \Pi v,$$

où v est le volume molaire de l'eau, et

$$\ln \left(1 - \sum_i \phi_i \right) \approx - \sum_i \phi_i,$$

parce que la solution est diluée. D'où

$$\Pi v = RT \sum_i \phi_i.$$

Pour N_i le nombre de molécules X_i , on a

$$\phi_i = \frac{N_i}{N_s + \sum_i N_i} \approx \frac{N_i}{N_s},$$

et

$$\frac{\phi_i}{v} = c_i.$$

D'où le résultat

$$\boxed{\Pi = RT \sum_i c_i},$$

où c_i est la concentration molaire du composé X_i .

B. Particules de Janus - autodiffusion phorétique

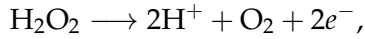
Janus est le dieu romain des commencements et des fins, des choix, du passage et des portes. Il est représenté par deux têtes, avec une face tournée vers le passé et l'autre vers l'avenir. Il est fêté le 1er janvier, son mois (*Januarius*) marque le commencement de la fin de l'année dans le calendrier romain. Une particule de Janus est une particule géométriquement symétrique mais dont la nature physico-chimique est elle asymétrique.

L'objet de cette section est de décrire dans un modèle simple les principes de base de l'autopropulsion de particules de Janus synthétiques. Différents mécanismes peuvent permettre de propulser des particules colloïdales synthétiques, ou de les manipuler électriquement ou magnétiquement.

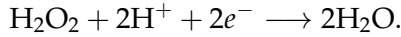
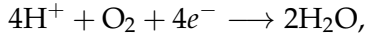
On s'intéresse à un mécanisme particulier d'autopropulsion schématisé Fig. 11.a), où les particules sont des bâtonnets allongés de longueur $L \sim 2\mu\text{m}$, et de diamètre 300 nm. La moitié de ce bâtonnet est constitué d'or et l'autre moitié de platine. Le milieu environnant est constitué d'eau avec du peroxyde d'hydrogène en solution, maintenu à concentration constante à l'aide d'une circulation de fluide externe.

Le bâtonnet se comporte alors comme une pile électrochimique, avec les réactions rédox suivantes :

- à l'anode de platine



- à la cathode d'or



Le système fonctionne à concentration de peroxyde d'hydrogène constant, en concentration faible devant la concentration en protons (pH acide). Ainsi, les réactions chimiques à la surface du bâtonnet résultent en une distribution inhomogène de dioxygène dissous en solution, et par conséquent une pression osmotique au niveau du bâtonnet. Pour modéliser plus précisément le phénomène, on considère une géométrie 2D (voir Fig. 11.b)). On considère un plan solide situé dans la région $z < 0$, en contact avec un fluide (le solvant) dans la région $z > 0$. Le soluté (le dioxygène) est en solution avec une répartition inhomogène associée à la réaction chimique. On ne cherche pas à connaître ici le détail de la répartition spatiale le long du bâtonnet de la concentration en soluté.



Fig. 10. Buste du dieu Janus, musée du Vatican. Source : [https://fr.wikipedia.org/wiki/Janus_\(mythologie\)](https://fr.wikipedia.org/wiki/Janus_(mythologie)).

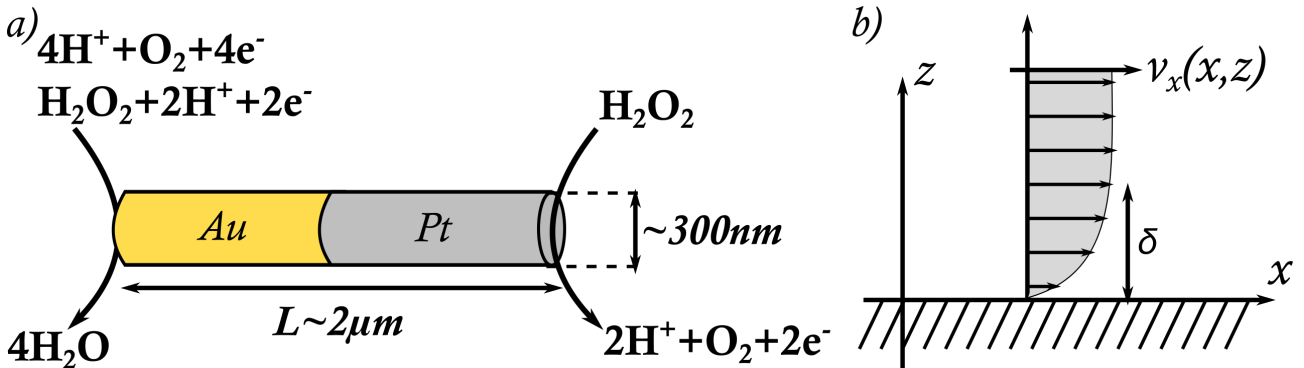


Fig. 11. a) Exemple de particule de Janus. b) Géométrie 2D considérée pour la modélisation simple de l'auto-diffusion phorétique.

En l'absence d'interactions avec le solide, cette concentration molaire en soluté ne dépend que de la position x et est notée $c_0(x)$. Les molécules de soluté interagissent avec la surface du solide, d'énergie potentielle d'interaction à une particule notée $U(z)$. On note λ la portée du potentiel $U(z)$, et L l'échelle typique de variation des gradients de concentration (la taille du bâtonnet). On suppose que

$$L \gg \lambda,$$

c'est-à-dire que le potentiel est localement de portée faible, permettant de découpler les dépendances en x et z pour la concentration molaire en soluté $c(x, z)$ en présence du solide. On suppose que l'équilibre selon z est établi rapidement comparé à la dynamique selon x . On se place dans le régime de Stokes, où les termes inertiels et convectifs sont négligés. Compte-tenu de la disparité des échelles spatiales, on néglige la composante selon z de la vitesse du fluide

$$\vec{v} = v_x(x, z)\vec{u}_x.$$

On se place en **régime stationnaire**, et on suppose que v_x varie faiblement selon x . Par conséquent

$$\Delta v_x \approx \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2}.$$

Q50. Préciser la relation entre les directions x et z de la modélisation proposée (Fig. 11.b) et le grand axe de longueur L de la nanoparticule de Janus considérée (Fig. 11.a).

Réponse. La direction x correspond à l'axe de la particule de Janus, et z est une direction perpendiculaire à cet axe.

Q51. Établir, en justifiant, l'expression de la concentration molaire $c(x, z)$ sous la forme d'une solution à variables séparées $c(x, z) = g(x)h(z)$, en fonction de $c_0(x)$, $U(z)$ et T la température du solvant.

Réponse. On dissocie les dépendances en x et z . Dans la limite où le solide n'interagit pas avec le soluté, $c(x, z) = c_0(x)$. Donc $g(x) = c_0(x)$. Enfin, pour la dépendance selon z , on peut supposer être à l'équilibre thermique et donc

$$c(x, z) \approx c_0(x) e^{-\frac{U(z)}{k_B T}}.$$

Q52. Montrer alors que le champ de pression $p(x, z)$ et la concentration molaire en soluté $c(x, z)$ vérifient l'équation

$$p(x, z) = RT (c(x, z) - c_0(x)) + P_0,$$

où P_0 est la pression de l'enceinte expérimentale.

Réponse. L'équation de Navier-Stokes dans le régime de Stokes s'écrit

$$\eta \Delta \vec{v} - \vec{\nabla} p + \vec{f} = \vec{0},$$

où $\vec{f}$ est la densité volumique de force externe sur une particule de fluide. On a

$$\vec{f} = \mathcal{N}_A c(x, z) \left(-\vec{\nabla} U \right).$$

En projection sur $\vec{u}_z$, compte-tenu de $\vec{v} = v_x(x, z)\vec{u}_x$, on obtient

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\mathcal{N}_A c(x, z) \frac{dU}{dz} = -\mathcal{N}_A c_0(x) e^{-\frac{U(z)}{k_B T}} \frac{dU}{dz}.$$

En intégrant cette équation, on obtient

$$p(x, z) = RT c(x, z) + p_0(x),$$

où $p_0(x)$ est une constante d'intégration et $R = \mathcal{N}_A k_B$ la constante des gaz parfaits. Pour trouver physiquement $p_0(x)$, on se place loin de la surface $z \gg \lambda$ tel que $c(x, z) \approx c_0(x)$. Or, loin de la surface, la pression du solvant équilibre la pression osmotique, soit $p_0(x) = P_0 - RT c_0(x)$, où P_0 est la pression de l'enceinte expérimentale. Alors

$$p(x, z) = RT (c(x, z) - c_0(x)) + P_0.$$

Q53. En déduire une équation différentielle régissant la vitesse du fluide $v_x(x, z)$ en fonction de $U(z)$, R , T , η et le gradient de concentration molaire de soluté $\frac{dc_0(x)}{dx}$.

Réponse. À partir de l'équation de Stokes projetée sur $\vec{u}_x$

$$\frac{\partial p(x, z)}{\partial x} = \eta \Delta v_x \approx \eta \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2}.$$

À partir de l'expression de $p(x, z)$ obtenue précédemment,

$$\boxed{\frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} = \frac{RT}{\eta} \left(e^{-\frac{U(z)}{k_B T}} - 1 \right) \frac{dc_0(x)}{dx}}.$$

On définit la *vitesse de diffusion osmotique* $\vec{V}_{\text{do}}$ comme

$$\vec{V}_{\text{do}} = \lim_{z \rightarrow +\infty} v_x(x, z) \vec{u}_x.$$

En intégrant l'équation obtenue dans la question précédente, on montre que

$$\vec{V}_{\text{do}} = -\frac{k_B T}{\eta} \Gamma \Lambda \frac{dc_0(x)}{dx} \vec{u}_x,$$

avec

$$\Gamma = \int_0^{+\infty} \left(e^{-\frac{U(z)}{k_B T}} - 1 \right) dz, \text{ et } \Lambda = \frac{1}{\Gamma} \int_0^{+\infty} z \left(e^{-\frac{U(z)}{k_B T}} - 1 \right) dz.$$

Le modèle utilisé suppose un solide fixe et un fluide en écoulement. On considère un colloïde de Janus en géométrie bâtonnée avec $L \gg \Gamma, \Lambda$, où localement existe un gradient de concentration par réactions chimiques à ses deux faces.

Q54. À partir des résultats des questions précédentes, montrer que le colloïde se déplace à une vitesse $\vec{V}_{\text{dp}}$ de diffusion phorétique que l'on explicitera en fonction de $R, T, \Gamma, \Lambda, \eta$ et $\frac{dc_0(x)}{dx}$.

Réponse. Immédiat : par changement de référentiel, $\vec{V}_{\text{dp}} = -\vec{V}_{\text{do}}$ d'où

$$\boxed{\vec{V}_{\text{dp}} = \frac{k_B T}{\eta} \Gamma \Lambda \vec{\nabla} c}.$$

★ ★
★

Formulaire

Équation différentielle du premier ordre à coefficient constant et à second membre quelconque

Soit $\vec{F}(t) \in \mathbb{R}^3$ un vecteur dépendant du temps, et $\tau \in \mathbb{R}$. Soit $\vec{v}(t) \in \mathbb{R}^3$ un vecteur dépendant du temps, vérifiant l'équation différentielle suivante

$$\frac{d\vec{v}(t)}{dt} + \frac{\vec{v}(t)}{\tau} = \frac{\vec{F}(t)}{m}.$$

La solution générale de cette équation différentielle est

$$\vec{v}(t) = \vec{v}_0 e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} + \int_{t_0}^t \frac{\vec{F}(t')}{m} e^{-\frac{t-t'}{\tau}} dt',$$

où $\vec{v}_0 = \vec{v}(t = t_0)$.

Symboles mathématiques

Symbole de Kronecker δ_{ij} .

Le symbole de Kronecker δ_{ij} pour $(i, j) \in \mathbb{Z}^2$ est défini selon

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}.$$

Distribution de Dirac $\delta(x)$ de la variable x .

Soit f une fonction continue quelconque et a un élément de l'intervalle de définition de f . La distribution de Dirac $\delta(x)$ est définie selon

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a).$$

Variables numériques

Soit X un processus aléatoire numérique, et $\{X_i\}_{i \in \llbracket 1, N \rrbracket}$ un ensemble de N réalisations de ce processus. Alors la valeur moyenne de X est définie numériquement selon

$$\langle X_i \rangle = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i.$$

Vitesse de groupe et vitesse de phase

Pour une onde de relation de dispersion complexe $k(\omega)$, les vitesses de phase v_φ et v_g sont définies ainsi

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k'(\omega)}, \quad \text{et} \quad v_g = \frac{d\omega}{dk'} = \frac{1}{\frac{dk'}{d\omega}},$$

avec $k'(\omega) = \text{Re}(k(\omega))$ et $k''(\omega) = \text{Im}(k(\omega))$.

Equation de Navier-Stokes

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right) = \eta \Delta \vec{v} - \vec{\nabla} P + \vec{f},$$

avec ρ masse volumique du fluide considéré, $\vec{v}$ le champ de vitesse, η sa viscosité dynamique, P le champ de pression et $\vec{f}$ le champ de forces volumiques subi par le fluide.

Nombre de Reynolds (Re)

$$\text{Re} = \frac{VL}{\nu}$$

avec V vitesse caractéristique, L taille caractéristique, $\nu = \frac{\eta}{\rho}$ viscosité cinématique.

Propriétés physiques de quelques fluides

- ρ : masse volumique ;
- γ : tension superficielle à l'interface avec l'air ;
- η : viscosité dynamique ;
- $\nu = \frac{\eta}{\rho}$: viscosité cinématique ;
- λ : conductivité thermique ;
- $\kappa = \frac{\lambda}{\rho c_p}$: diffusivité thermique.

	Air (20°C)	Eau (20°C)	Ethanol (15°C)	Glycérol (15°C)	Mercure (15°C)
ρ (kg·m ⁻³)	1,205	998	790	1264	13610
γ (mN·m ⁻¹)		73	22	63	487
η (Pa·s)	$1,81 \times 10^{-5}$	$1,002 \times 10^{-3}$	$1,34 \times 10^{-3}$	2,33	$1,58 \times 10^{-3}$
ν (cm ² ·s ⁻¹)	0,15	0,01	0,017	18,5	$1,16 \times 10^{-3}$
λ (W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	$2,53 \times 10^{-2}$	$5,9 \times 10^{-1}$	$1,83 \times 10^{-1}$	$2,9 \times 10^{-1}$	8,0
κ (cm ² ·s ⁻¹)	0,202	$1,42 \times 10^{-3}$	$9,9 \times 10^{-4}$	$9,8 \times 10^{-4}$	0,042

Valeurs numériques pour le glycérol pur à 20°C

Pour le glycérol pur à 20°C, on admet que $\eta \approx 1,49 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ et $\rho_f = 1260 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. On pose $g = 9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ l'intensité locale de l'accélération de pesanteur. On note $\rho_{\text{Acier}} = 7800 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ la masse volumique de l'acier. On donne alors

$$A = \log \left(\frac{32}{3} \left(\frac{\rho_{\text{Acier}}}{\rho_f} - 1 \right) \frac{g \rho_f^2}{\eta^2} \right) \approx 8,54, \quad B = \log \left(\frac{32 \rho_{\text{Acier}} \rho_f g}{3 \eta^2} \right) \approx 8,62.$$

Viscosité dynamique du glycérol dilué à 20°C en fonction de la fraction massique de glycérol x

Fract. mass. x	100%	99%	98%	97%	96%	95%	94%	93%	92%	91%	90%
η (Pa·s)	1,49	1,15	0,939	0,765	0,624	0,523	0,437	0,367	0,310	0,259	0,219

Nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A$

$$\mathcal{N}_A = 6,02214076 \cdot 10^{23}.$$

Dossier scientifique

	Document	Pages
1	Structure des microtubules.	36
2	Exemple de moteur moléculaire intracellulaire : la kinésine.	37-38
3	Utilisation des pinces optiques pour la manipulation de systèmes biologiques.	39-40
4	Vitesse de la kinésine en fonction de la concentration en ATP.	41
5	Suivi en temps réel du déplacement d'une tête de kinésine.	42
6	Cycle chimique kinésine-ATP.	43

Les microtubules sont des constituants élémentaires du cytosquelette des cellules eukaryotes, la matrice structurant mécaniquement la cellule. Ils sont le siège du transport intracellulaire, les moteurs moléculaires se déplaçant le long des microtubules. Ce sont des tubes cylindriques creux, issus de la polymérisation de la tubuline. La tubuline est un dimère protéinique issu de l'assemblage de deux protéines : l' α - et la β -tubuline. Un dimère est électriquement polarisé et long de 8nm environ. Leur polymérisation résulte en un protofilament qui s'enroule pour donner une structure cylindrique creuse, de diamètre extérieur de 24nm et une paroi épaisse de 5nm. La structure asymétrique du protofilament confère au microtubule une structure globalement polarisée avec une extrémité dite "+" et une extrémité dite "-".

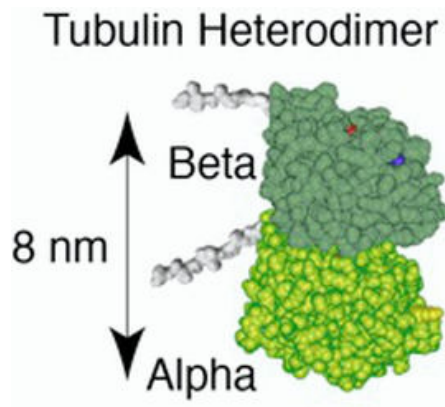


Fig. 12. Dimère $\alpha - \beta$ tubuline, constituant élémentaire d'un protofilament constituant un microtubule. Extrait de <https://www.rosslabbiophysics.com/>.

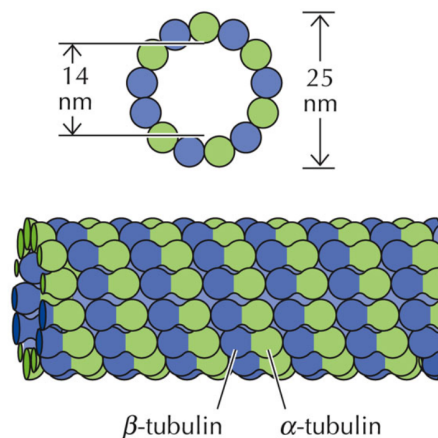


Fig. 13. Structure de cylindre creux d'un microtubule. Extrait de *The Cell*, 4ième édition (2006).

La kinésine est une protéine capable de se déplacer en présence d'ATP, elle a été découverte en 1984. Les déplacements de la kinésine se font principalement au niveau des microtubules. Cette faculté la place au rang des protéines motrices, au même titre que la dynéine. Nous pouvons imaginer que les microtubules sont des autoroutes sur lesquelles circulent les kinésines. Le déplacement de ces transporteurs se fait vers la membrane plasmique soit en direction du pôle positif de la microtubule (mouvement antérograde). [...] Kinésine est un terme issu du grec kinêsis, qui signifie se mouvoir.

Extrait de <https://fr.wikipedia.org/wiki/Kinésine>

La kinésine est une protéine dont la structure est schématisée Fig. 14. Elle est constituée de deux chaînes : une lourde et une légère. La chaîne légère forme la queue d'accroche de la kinésine. Une molécule d'intérêt (que l'on souhaite transporter) peut s'accrocher à cette queue. La chaîne lourde possède une terminaison à l'opposée de la chaîne légère, formée par deux têtes en forme de pelotes. Ces deux têtes peuvent s'accrocher à la surface d'un microtubule. En présence de molécules d'ATP (Adénosine TriPhosphate), la kinésine est capable de se déplacer le long d'un microtubule, dans un sens donné (fixé par la polarité du microtubule). Si une molécule est attachée à la queue de la kinésine (un "cargo"), alors la kinésine tire cette dernière lors de son déplacement. C'est un moteur moléculaire intracellulaire (voir Fig. 15).

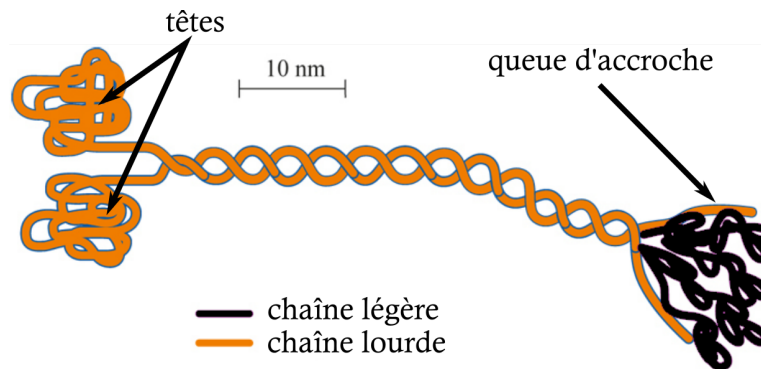


Fig. 14. Structure schématique d'une molécule de kinésine (inspiré de <http://eng.thesaurus.rusnano.com/wiki/article945>).

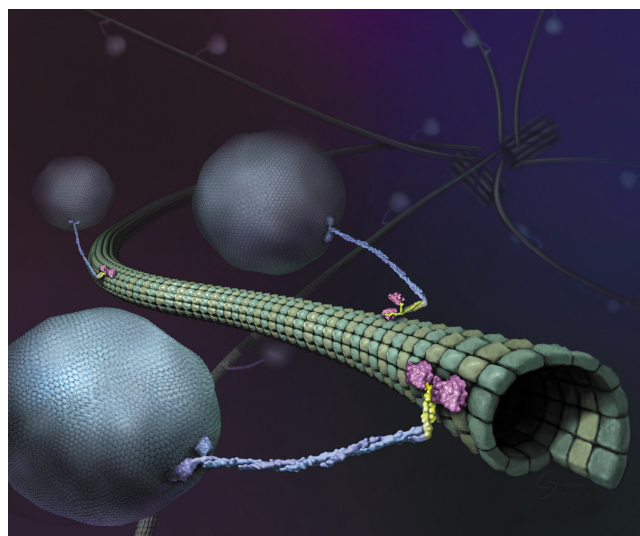


Fig. 15. Vue d'artiste représentant une molécule de kinésine transportant une protéine le long d'un microtubule. Extrait de <https://valelab.ucsf.edu>.

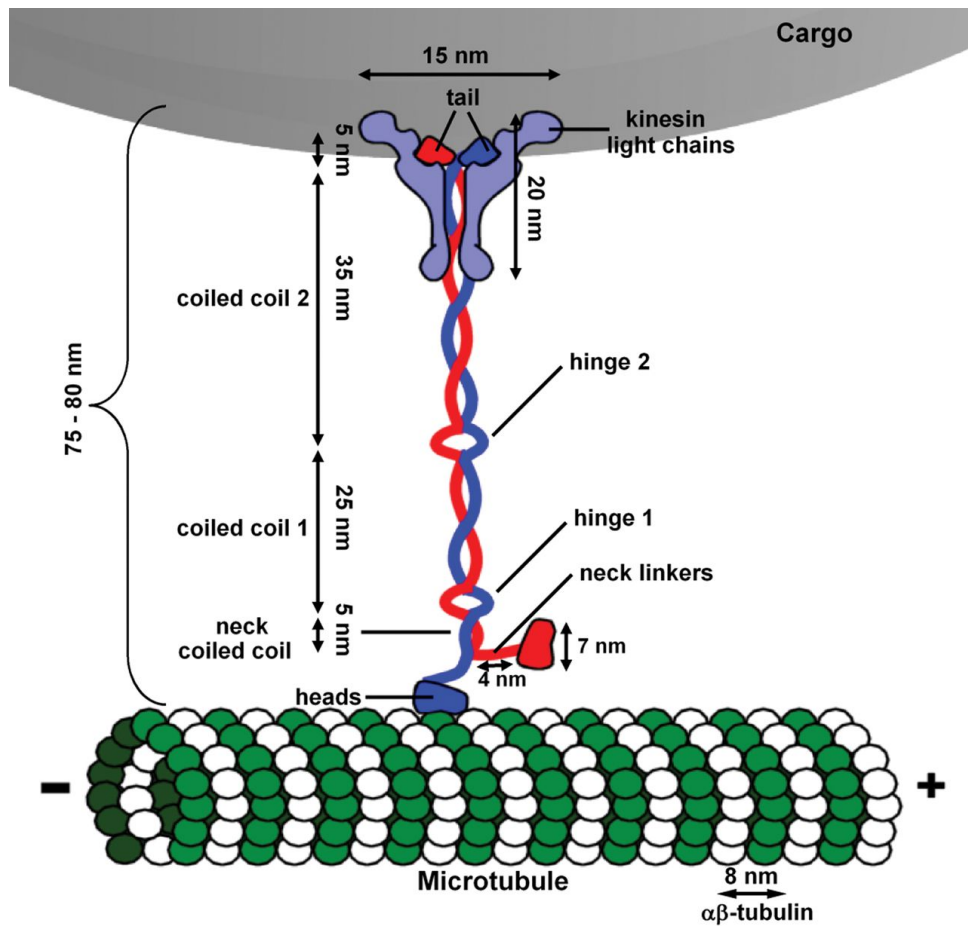


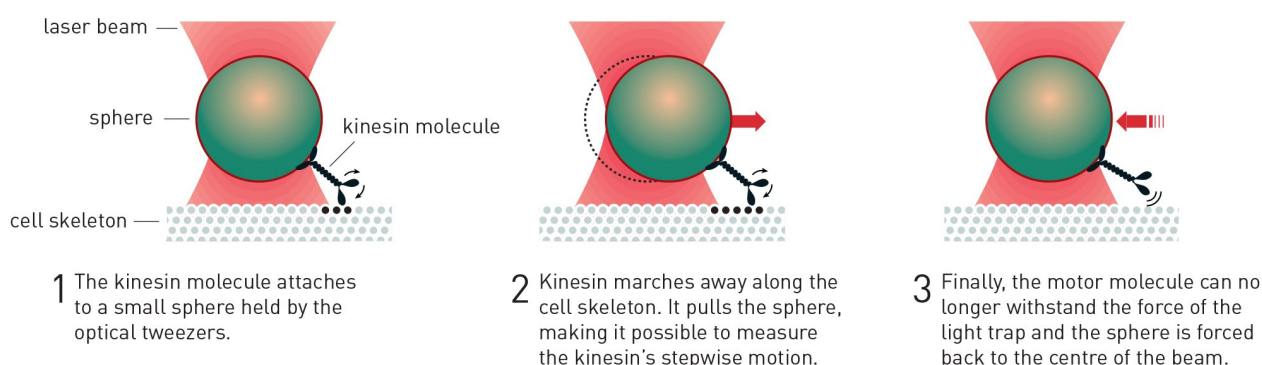
Fig. 16. Molécule de kinésine attachée à un microtubule, transportant un cargo. Extrait de [The mechanical properties of kinesin-1: a holistic approach](#) *Biochemical Society Transactions* **40**, 438-443 (2012).

Le 2 octobre 2018, le prix Nobel de Physique a été attribué conjointement à Arthur Ashkin, Gérard Mourou et Donna Strickland pour leurs travaux dans le domaine de la physique des lasers. Plus exactement, Arthur Ashkin a été récompensé pour ses travaux sur les pinces optiques et leurs applications aux systèmes biologiques.

Une pince optique désigne un faisceau laser focalisé dans un fluide non absorbant contenant des microsphères diélectriques. Ces microsphères sont polarisables et l'interaction entre une microsphère et le faisceau laser se traduit par une énergie potentielle attractive. Un laser focalisé permet de générer un minimum de potentiel et de piéger la microsphère. Une fois piégée, il est alors possible de déplacer la microsphère en déviant le laser ou en changeant le point de focalisation. À l'aide d'une technique non décrite dans ce document, il est possible de mesurer très précisément le déplacement de la microsphère diélectrique par rapport au minimum de potentiel, avec des résolutions inférieures au nm !

Ces méthodes sont utilisées pour étudier les moteurs moléculaires intracellulaires à l'échelle du moteur unique. Si on attache la microsphère diélectrique à la queue d'un moteur moléculaire comme la kinésine, il est possible de suivre son déplacement le long d'un microtubule. Pour illustrer les travaux de Arthur Ashkin, le comité Nobel a pris l'exemple de l'étude de la kinésine (voir Fig. 17).

A motor molecule walks inside the light trap



©Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences

Fig. 17. Extrait du message Twitter du comité Nobel suite à l'attribution du prix Nobel de Physique 2018 (<https://twitter.com/nobelprize/status/1047063176116875264>).

En 1997, Mark J. Schnitzer et Steven M. Block de l'Université de Princeton ont réussi à mesurer en temps réel le déplacement d'une molécule de kinésine. Pour cela, ils ont mesuré le déplacement d'une microsphère attachée à la queue de la kinésine, cette dernière étant à la surface d'un microtubule. En présence d'ATP (Adénosine TriPhosphate), la kinésine se déplace et emporte avec elle la microsphère dont le déplacement est mesuré à l'aide de la pince optique (voir Fig. 18).

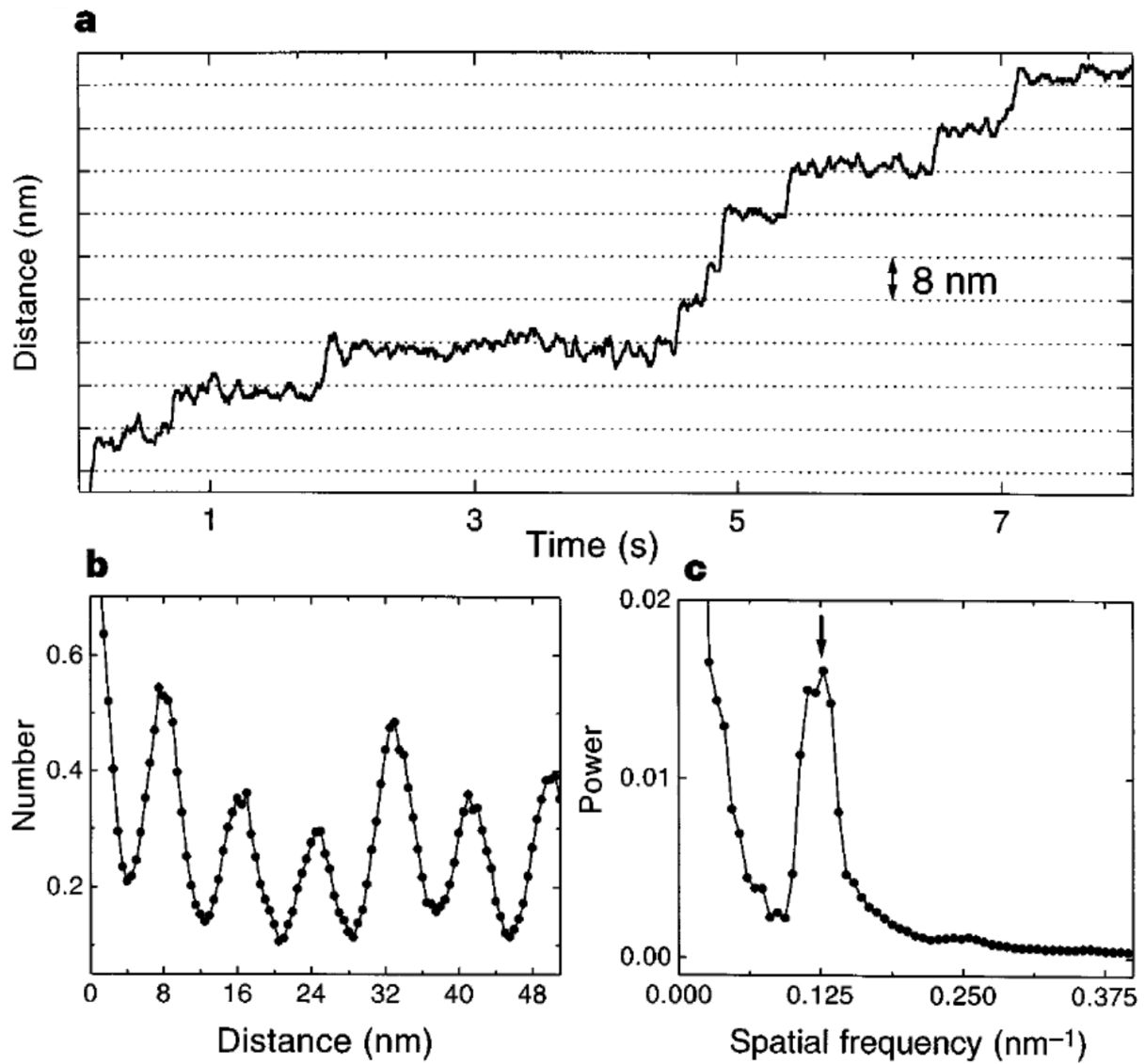


Fig. 18. Résultats expérimentaux obtenus lors de la mesure du déplacement d'une microsphère accrochée à une molécule de kinésine. a) Déplacement mesuré pour une concentration de $2\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ d'ATP (trait continu). Les lignes en pointillés sont espacées de 8nm. b) Histogramme normalisé des distances entre toutes les paires de points de l'enregistrement. c) Spectre de puissance normalisé des données de b).
Extrait de [Kinesin hydrolyses one ATP per 8-nm step](#) *Nature* 388, 386-390 (1997).

La vitesse moyenne de déplacement de la kinésine sur un microtubule dépend de la concentration en Adénosine TriPhosphate (ATP). Les mesures expérimentales de cette dépendance sont représentées Fig. 19. La force exercée par le cargo sur la kinésine est estimée inférieure à 1,5 pN.

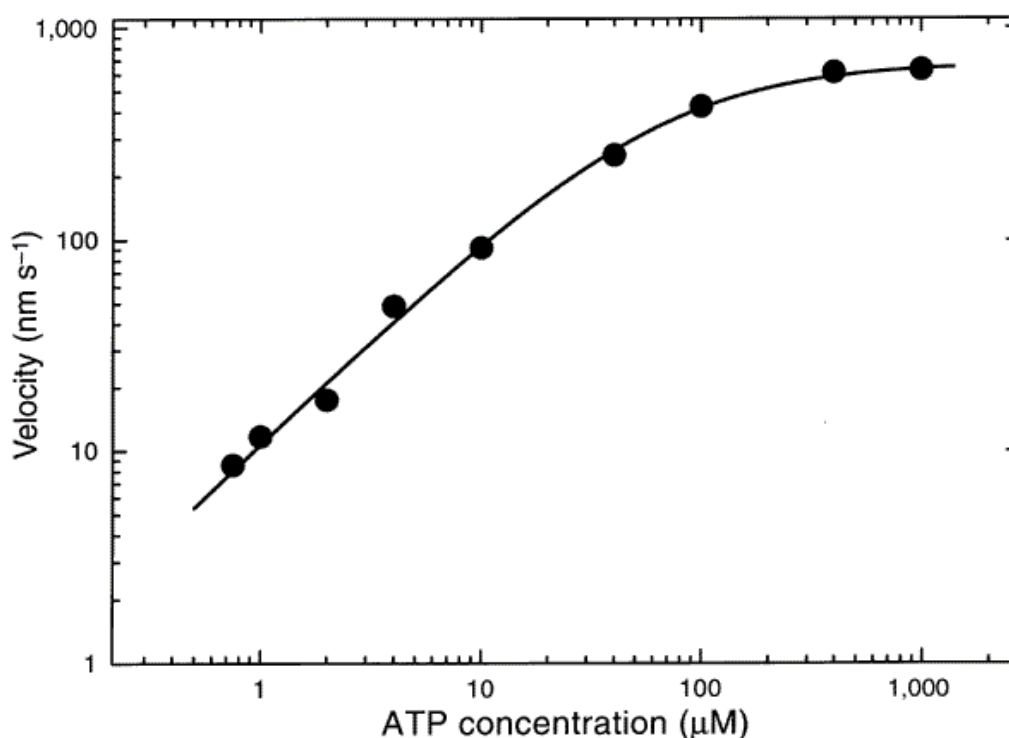


Fig. 19. Vitesse de déplacement mesurée d'une molécule de kinésine en fonction de la concentration d'Adénosine TriPhosphate (ATP) dans le milieu ($1 \mu\text{M} = 1 \mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$). Les données expérimentales sont ajustées par une cinétique de Michaelis-Menten : $v = v_{\max}[\text{ATP}]/(K_m + [\text{ATP}])$. Le résultat de l'ajustement est la courbe en trait continu, avec $v_{\max} = 680 \pm 31 \text{ nm}\cdot\text{s}^{-1}$ et $K_m = 62 \pm 5 \mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$. Extrait de [Kinesin hydrolyses one ATP per 8-nm step](#) *Nature* **388**, 386-390 (1997).

Afin d'étudier le mouvement de la kinésine sans chargement, des mesures complémentaires ont été réalisées à l'aide d'une technique différente des pinces optiques. Pour cela, une boîte quantique a été attachée à une des deux têtes de la molécule de la kinésine. Cette boîte quantique peut fluorescer lorsqu'elle est excitée par une lumière de longueur d'onde adaptée. La technique d'imagerie par fluorescence permet de localiser une molécule unique (ou une boîte quantique unique) avec une résolution de l'ordre du nanomètre. À l'aide de cette technique, le déplacement d'une tête de kinésine lors de son déplacement le long d'un microtubule a pu être mesuré en temps réel. Les résultats de cette expérience sont représentés Fig. 20.

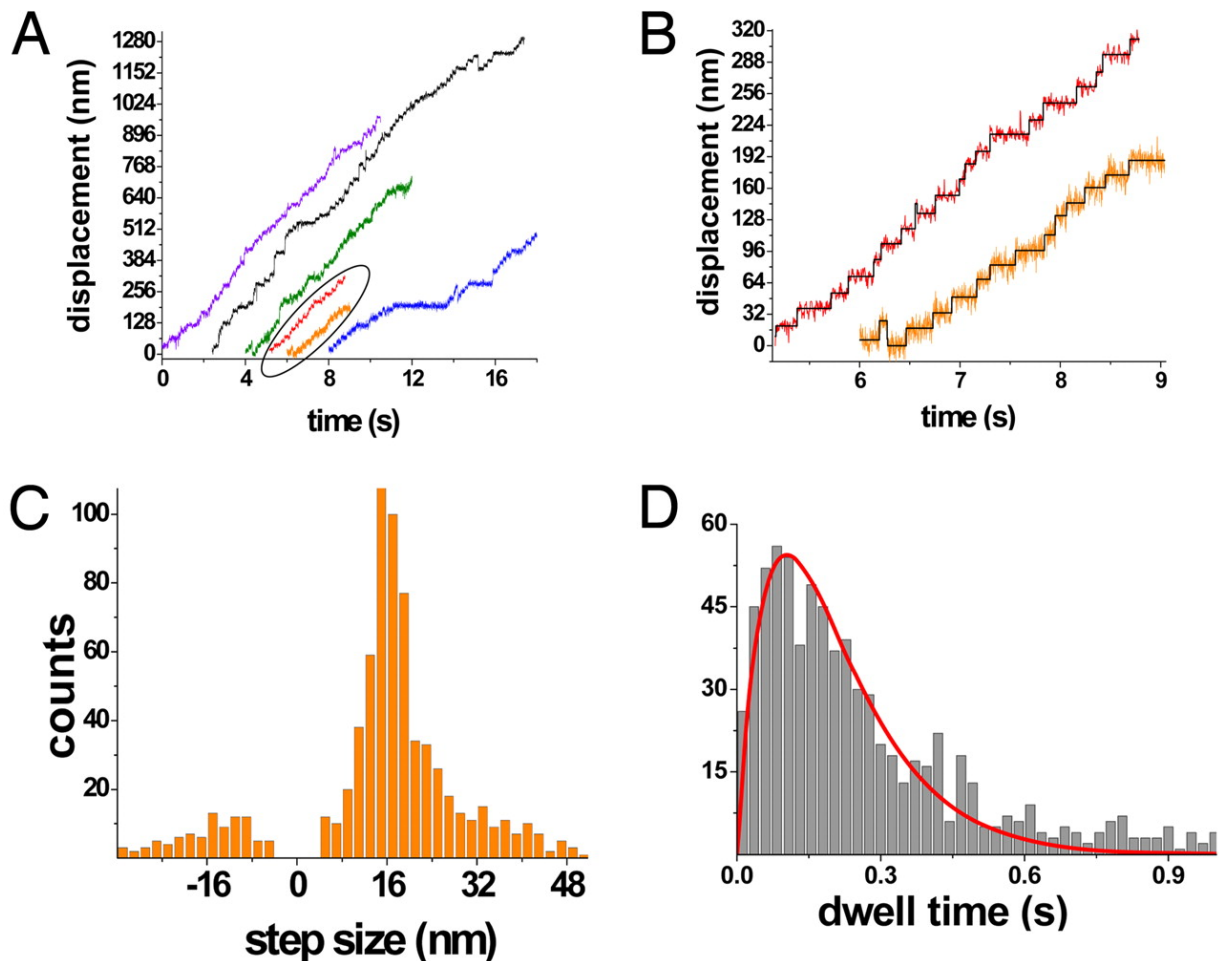
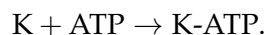


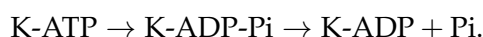
Fig. 20. (A-B) Déplacement de 6 molécules de kinésines repérées par des boîtes quantiques en présence de $5 \mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ d'adénosine triphosphate (ATP). (C) Histogramme de la répartition des pas spatiaux mesurés expérimentalement. (D) Histogramme des intervalles de temps entre deux évènements consécutifs. La courbe en traits continus correspond à un ajustement par la fonction $P(t) = A \times t \times k^2 \times \exp(-k \times t)$, avec un taux k de 9.76s^{-1} ($R^2 = 0.97$).

Extrait de [Why kinesin is so processive](#) *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **106** (31) 12717-12722 (2009).

L'interaction entre une tête de kinésine et la tubuline n'est pas la même suivant le type de protéine : si l'interaction avec la β -tubuline est globalement attractive, l'interaction avec l' α -tubuline est en revanche répulsive. La kinésine (notée symboliquement K) peut réagir avec des molécules d'adénosine triphosphate (ATP) pour former un complexe kinésine-ATP noté $K\text{-ATP}$



La dissociation de l'ATP en adénosine diphosphate (ADP) et en phosphore inorganique Pi libère de l'énergie permettant un changement conformationnel de la tête de la kinésine formant alors un complexe kinésine-ADP-phosphore inorganique noté $K\text{-ADP-Pi}$. La molécule de phosphore inorganique est ensuite libérée du complexe



Le complexe $K\text{-ADP}$ peut se dissocier en libérant la molécule d'ADP, et la kinésine relaxe vers sa conformation initiale, mais avec un gain net d'énergie. Ce cycle de transformation peut être simplifié par une description à deux états, schématisée Fig. 21.

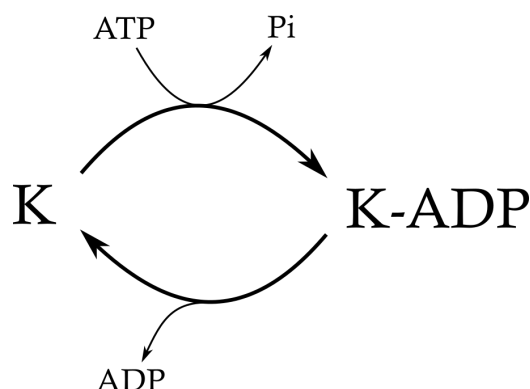


Fig. 21. Description simplifiée du cycle chimique d'une molécule de kinésine en présence d'ATP entre un état K et un état $K\text{-ADP}$.

Dans son état K , la molécule de kinésine est "attachée" au microtubule via l'interaction attractive entre ses deux têtes et deux molécules adjacentes de β -tubuline (voir Document n°1). En revanche, dans l'état $K\text{-ADP}$, la conformation de la molécule de kinésine interagit peu avec la tubuline et on néglige alors l'interaction.

On donne l'enthalpie libre de réaction associée à la réaction chimique



$$\Delta_r G^0 \sim -30,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Annexe 1 : Code Python - partie I.

```
1 # Python 3.5.2
2 import math
3 import numpy as np
4 import matplotlib.pyplot as plt
5 import scipy
6 from scipy.integrate import odeint
7
8
9 def Vlim_exp_1(r, rho_f, rho, eta, Zmax):
10     def dv1(Z_V, t):
11         g=9.81
12         Z,V=Z_V
13         nu=eta/rho_f
14         return [V, g*(rho-rho_f)/rho - (9*eta/(2*rho*r**2))*V]
15
16     to=0
17     tmax=Zmax/(2*g*rho*r**2/(9*eta))
18     npoints=100
19     t=scipy.linspace(to, tmax, npoints)
20     vo=0
21     zo=0
22
23     sol=odeint(dv1, (zo, vo), t)
24     z, v=sol.T
25     tmp=[]
26     for i in range(len(z)):
27         if z[i]>Zmax/2:
28             tmp.append(v[i])
29     out=np.mean(np.array(tmp))
30     return out
31
32 def Vlim_exp_2(r, rho_f, rho, eta, Zmax):
33     def dv2(Z_V, t):
34         g=9.81
35         Z,V=Z_V
36         nu=eta/rho_f
37         return [V, g*(rho-rho_f)/rho - (0.5*rho_f)*(math.pi*r**2)*(1.5*V/(r/nu)
38             +0.1625*V*V*(V*r/(5*nu))/(1+(V*r/(5*nu))**(1.52))
39             +0.0256875*V*V*((V*r/(nu*2.63e5))**(-7.94))/(1+(V*r/(nu*2.63e5))**(-8))
40             +0.015625*(V*r/(nu*1e6))/(1+V*r/(nu*1e6)))/((rho*4*math.pi*r**3)/3)]
41
42     to=0
43     tmax=Zmax/(2*g*rho*r**2/(9*eta))
44     npoints = 100
45     t=scipy.linspace(to, tmax, npoints)
46     vo=1e-9
47     zo=0
48
49     sol=odeint(dv2, (zo, vo), t)
50     z, v=sol.T
51     tmp=[]
52     for i in range(len(z)):
53         if z[i]>Zmax/2:
54             tmp.append(v[i])
55     out=np.mean(np.array(tmp))
56     return out
57
58 g=9.81
```

```

59 rho_f=1260
60 eta=1.49
61 rho=7800
62 Zmax=0.4
63
64 r=scipy.linspace(0.00025,0.010,50)
65
66 Vl_1, Vl_2=([],[])
67 rVl_1, rVl_2=([],[])
68 Re_r=[]
69
70 for x in r:
71     Vl_1.append(Vlim_exp_1(x,rho_f,rho,eta,Zmax))
72     Vl_2.append(Vlim_exp_2(x,rho_f,rho,eta,Zmax))
73     rVl_1.append((9*eta/(2*rho*g))*Vl_1[-1]/x**2)
74     rVl_2.append((9*eta/(2*rho*g))*Vl_2[-1]/x**2)
75     Re_r.append(2*Vl_2[-1]*rho_f*x/eta)
76
77 plt.figure()
78 plt.subplot(3,1,1)
79 plt.plot(r,Vl_1,'—',linewidth=2)
80 plt.plot(r,Vl_2,'-',linewidth=2)
81 plt.xlabel('r (m)')
82 plt.ylabel('vl (m/s)')
83 plt.legend(['Laminaire','Modele'])
84 plt.grid()
85 plt.subplot(3,1,2)
86 plt.plot(r,rVl_1,'—',linewidth=2)
87 plt.plot(r,rVl_2,'-',linewidth=2)
88 plt.xlabel('r (m)')
89 plt.ylabel('V_mes/V_stokes')
90 plt.ylim([0.9,1.01])
91 plt.legend(['Laminaire','Modele'])
92 plt.grid()
93 plt.subplot(3,1,3)
94 plt.plot(r,Re_r,linewidth=2)
95 plt.yscale('log')
96 plt.xlabel('r (m)')
97 plt.ylabel('Re')
98 plt.grid()
99 plt.show()

```

Annexe 2 : Algorithmes

Symbole	Signification	Exemple	
	Début paramètres d'entrée		Initialise $X=0$
	Symbole général de traitement		Affecte la valeur X^2 à la variable Y
	Branche conditionnelle		SI $X=10$ continuer, SINON terminer.
	Action exécutée en boucle tant que la condition est vraie		Incréméte X de 1 jusqu'à ce que $X=10$
	Action exécutée en boucle tant que la condition est fausse		Incréméte X de 1 jusqu'à ce que $X=10$
	Appel d'un sous-programme de paramètres d'entrée $\{X_i\}$ et affectation éventuelle des paramètres de sortie $\{Y_i\}$		Appelle le programme prog1 avec les paramètres d'entrée $a=1$ et $b=X$ prog1 affecte ses paramètres de sortie $Y1$ et $Y2$ à X et t respectivement
	Fin de l'algorithme Paramètres de sortie $\{X_i\}$		Fin du calcul Variables X et t en mémoire

Manipulation des variables

$i, j, p, \dots$ indice entiers

X_j est la $j^{\text{ième}}$ composante de X

X variable scalaire ou vectorielle

Pour Y un scalaire, $X_j=Y$ affecte la
valeur Y à la $j^{\text{ième}}$ composante de X ,
toutes les autres n'étant pas modifiées.

Fig. 22. Symbolique utilisée pour la conception des algorithmes.

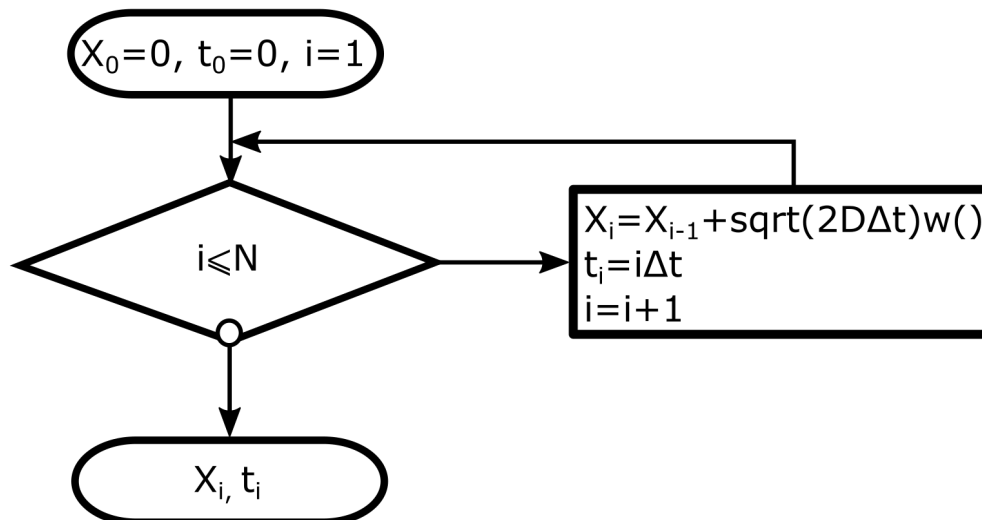
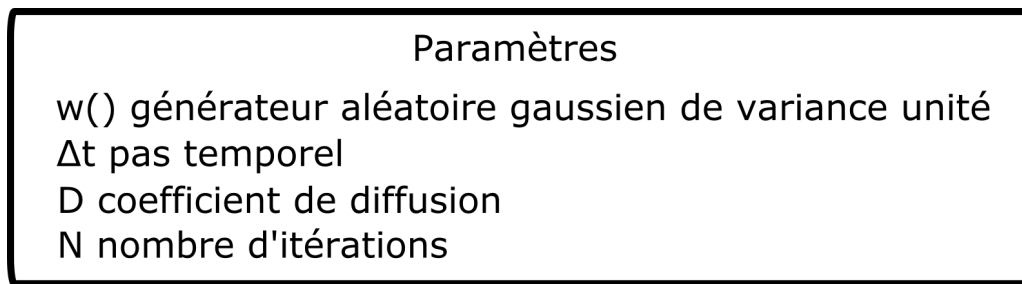


Fig. 23. Algorithme A1.