

Présentation synthétique de mes activités de recherche

L'étude des propriétés des marches aléatoires et leur application à la description de différents systèmes hors d'équilibre inspirés par la physico-chimie du vivant est au centre de mes recherches. Celles-ci combinent des modélisations des phénomènes physiques et l'étude par des méthodes analytiques de propriétés générales de marches aléatoires, individuelles ou collectives. Ces contributions s'organisent essentiellement selon trois axes.

1. Marches aléatoires et réactivité

Une réaction chimique nécessite tout d'abord la rencontre de réactifs qui doivent ensuite franchir une barrière d'énergie pour donner les produits de la réaction. Je me suis intéressé aux réactions limitées par la première de ces étapes, i.e. le transport. Sur l'exemple de la réaction de capture $A + B \rightarrow B$, nous avons apporté des réponses explicites aux questions suivantes : (i) influence des coefficients de diffusion des réactifs sur la cinétique de la réaction ; (ii) influence d'un catalyseur ; (iii) influence d'un confinement géométrique. Cette dernière étude a permis de révéler une dépendance universelle du temps moyen de premier passage en fonction du volume du système et en fonction de la distance entre les points de départ et d'arrivée¹. Ces prédictions ont été appliquées à différents modèles emblématiques de la physique statistique (fractales, milieux désordonnés, diffusion anormale ...). Au-delà de ces aspects théoriques, ces résultats nous ont conduits à introduire la notion de « réactions contrôlées par la géométrie », pour lesquelles la position initiale devient un paramètre clé de la cinétique².

2. Marches aléatoires et physico-chimie des surfaces

J'ai également abordé plusieurs problèmes qui relèvent de la physico-chimie des surfaces. Le premier concerne la modélisation du transport d'une particule marquée dans une monocouche adsorbée sur une surface solide. Le deuxième, à coloration plus mathématique, a trait aux propriétés d'enroulement d'une chaîne polymérique adsorbée sur un substrat. Nous avons étendu des résultats connus dans le cas d'une particule brownienne unique au cas d'un ensemble de particules browniennes en interaction. Le troisième problème, mené en lien avec des études expérimentales, a eu pour objet la modélisation de l'évaporation de gouttes en situation de mouillage total.

3. Marches aléatoires et processus de recherche de cibles

Je m'intéresse depuis quelques années aux processus de recherche de cibles cachées : combien de temps faut-il à un « chercheur » pour trouver une « cible » de position inconnue ? Cette question se pose dans de nombreux contextes, non seulement dans la vie quotidienne, typiquement dans la situation banale où l'on a perdu ses clés, mais aussi pour la recherche de nourriture par des espèces animales. Nous avons introduit un *nouveau type de stratégies de recherche*, qualifiées d'intermittentes, qui combinent des phases de recherche minutieuse et des phases de déplacement rapide « aveugles », au cours desquelles le chercheur n'essaie pas de détecter la cible. Nous avons montré qu'il est possible de jouer sur les temps passés dans chacune de ces deux phases afin d'optimiser le temps de recherche. Ce modèle a permis de rendre compte de données expérimentales à des échelles microscopiques (recherche d'une séquence cible par une protéine sur l'ADN, réactions en milieu cellulaire³) aussi bien que macroscopiques (recherche de proies par des animaux).

Depuis 2013, nous avons poursuivi dans ces directions. Parallèlement, nous avons développé les trois nouvelles thématiques suivantes.

a. Cinétique de réactions impliquant des polymères. Les réactions impliquant des polymères sont essentielles, notamment dans le cas des acides nucléiques où elles conditionnent la régulation des gènes. Le principal obstacle au calcul des cinétiques de ces réactions est le caractère non markovien du mouvement d'un maillon donné d'un polymère. Nous avons introduit une nouvelle théorie analytique qui permet de prendre en compte

1. **Nature** **450**, 77 (2007).

2. **Nature Chemistry** **2**, 472 (2010).

3. **Nature Physics** **4**, 137 (2008).

ces effets de mémoire, et qui a révélé les points suivants⁴ : (i) à l'instant précis de la réaction, le polymère est en moyenne plus allongé que dans une conformation d'équilibre. La détermination de ces conformations réactives est l'étape clé de notre approche, et conduit à des temps de réaction en accord quantitatif avec les simulations numériques, à la différence de l'approche markovienne classique (Wilemski-Fixman) ; (ii) dans certains régimes, les conformations réactives sont si différentes des conformations d'équilibre que les temps de réaction prédits par notre approche peuvent différer de plusieurs ordres de grandeur des prédictions utilisant les approximations markoviennes employées jusque-là ; (iii) au-delà du cadre des polymères, la théorie peut être étendue à l'étude de temps de premier passage de processus gaussiens non markoviens très généraux, présentant des temps de mémoire très longs comme dans le cas du Mouvement Brownien Fractionnaire (FBM)⁵.

b. Fluctuations et corrélations d'un traceur biaisé dans un gaz de cœur dur, et micro-rhéologie active.

Ces dernières années, je me suis tout particulièrement intéressé à la dynamique d'un traceur soumis à une force extérieure dans un bain de particules. Nous avons proposé un modèle qui prend en compte explicitement la dynamique du bain, et qui donne accès aux corrélations entre la dynamique du traceur et la réponse du bain (le traceur réalise une marche aléatoire biaisée tandis que les particules du bain réalisent des marches aléatoires symétriques, en présence d'interaction de cœur dur). Au-delà de son intérêt théorique propre, ce modèle fournit une représentation schématique des expériences dites de micro-rhéologie active. L'étude analytique de ce problème à N corps nous a permis de mettre en évidence un grand nombre d'effets surprenants : (i) en géométrie confinée et dans la limite de grand encombrement tel que rencontré en milieu cellulaire, les fluctuations de la position du traceur ne se comportent pas de manière diffusive mais de manière superdiffusive ; (ii) la vitesse moyenne du traceur elle-même a une dynamique anormale, caractérisée par un brusque saut entre deux valeurs de la vitesse ; (iii) cette vitesse peut par ailleurs être une fonction non monotone de l'amplitude de la force extérieure appliquée : exercer une force extérieure plus grande peut ainsi conduire à une diminution de la vitesse du traceur.

c. Temps de couverture d'un volume fini par une marche aléatoire.

Combien de temps un marcheur aléatoire met-il à visiter tous les sites contenus dans un volume fini ? Ce temps, dit temps de couverture, permet de quantifier l'efficacité d'un processus de recherche requérant une exploration systématique de tout un domaine. Ce type de recherche exhaustive se rencontre à l'échelle microscopique comme à l'échelle macroscopique : recherche de corps pathogènes par le système immunitaire, exploration de l'espace par des robots aspirateurs ou démineurs, parcours de graphes en algorithmique. Nous avons mis en évidence le caractère universel de la distribution du temps de couverture pour divers types de marches aléatoires et en particulier de stratégies de recherche (marches persistantes où le marcheur a tendance à continuer dans la même direction pendant plusieurs pas, marches intermittentes où le marcheur alterne entre des phases de recherche diffusives et des phases de déplacement rapide ne permettant pas la détection des cibles, marches de Lévy ...) ⁶.

4. **Nature Chemistry** **4**, 568 (2012).

5. **Nature** **534**, 356 (2016)

6. **Nature Physics** (2015).