Devoir 2 (40% de la note finale)

Simulateur 1 : déplacement carré moyen (MSD) d'une particule qui diffuse sur un plan XY.

(**10pts**) Développez un simulateur de trajectoires d'une particule qui diffuse sur un plan XY. Les paramètres de l'expérience à simuler doivent inclure le temps total de l'expérience, le temps entre deux détections (dt), la précision de localisation et le coefficient de diffusion de la particule.

- A) Évaluez la courbe du "mean squared displacement (MSD)" pour une trajectoire et montrez que le coefficient de diffusion peut être estimé.
- B) Quel est l'impact de la durée de la simulation sur la mesure estimée du coefficient de diffusion?
- C) Quel est l'impact de la précision de localisation sur la courbe MSD ?
- D) Comment est-ce que le confinement influence les courbes MSD? Pour modéliser ceci, confinez la particule en 2D (cercle de 2 um) et en simili 1D (tube de 1 um de diamètre). Montrez comment ces confinements influencent les courbes de MSD. Montrez qu'il est possible de retrouver la taille du confinement. Est-il possible de découpler les mouvements en fonction des deux dimensions pour faire ressortir ces confinements?
- E) Générez les films, acquis avec un détecteur de type caméra, créés à partir des trajectoires simulées. Chaque image devra être limitée par la diffraction et peut être créée en convoluant la position par un filtre Gaussien. Des valeurs raisonnables de la taille de la PSF et du pixel de la caméra devront être choisis. Un bruit Poissonien et un bruit de fond devront être également ajoutés. Discutez de chaque paramètre utilisé pour générer ce film.

Simulateur 2 : Diffusion de particules indépendantes qui diffusent sur un plan.

(**10pts**) Développez un simulateur de trajectoires de particules qui diffusent sur un plan XY. Les paramètres de l'expérience à simuler doivent inclure le temps total de l'expérience, le temps entre deux détections (dt), la densité de particules, le coefficient de diffusion des particules qui diffusent, la densité de la population immobile. Comme dans le simulateur du MSD, générez les films, acquis avec un détecteur de type caméra, créés à partir des trajectoires simulées. Développez un simulateur de FRAP. Pour ce faire, il faudra "éteindre" toutes les molecules dans une zone de la simulation et suivre le retour de la fluorescence dans cette même zone.

- A) Quel est l'impact du coefficient de diffusion sur le retour de la fluorescence?
- B) Quel est l'impact de la population immobile sur le retour de la fluorescence?
- C) Quel est l'impact du type de la structure étudiée (simulation 2D sans contraintes et en simili 1D (tube de 1 um de diamètre) sur la courbe FRAP?

Simulateur 3: fluorescence correlation spectroscopy (FCS)

(10pts) Utilisez le simulateur de trajectoires de particules qui diffusent sur un plan XY développé avant. Reconstruire la trace de fluorescence obtenue d'un laser gaussien focalisé au centre de la région de la simulation. Les paramètres de l'expérience à simuler doivent inclure le temps total de l'expérience, le temps entre deux détections (dt), la densité des particules et le coefficient de diffusion des particules. Calculez la fonction autocorrelation G(t) et montrez qu'il est possible d'estimer la densité des particules et le temps de residence τ_D dans le faisceau laser.

Montrez l'impact de ces variables sur les fonctions de corrélation

- Le coefficient de diffusion (de 0.1 à 10 μm²/s),
- La densité des particules qui diffusent (0.1 to 10 emitters / surface effective du laser (pi*w_{xv}²)),
- Deux populations de particules avec des coefficients de diffusion différents,
- Bruit du détecteur (Shot noise),
- La durée de la simulation.

Simulateur 4 : corrélation pairée provenant de traces d'intensité de deux lasers focalisés

(10pts) Utilisez le simulateur de trajectoires de particules uniques qui diffusent sur un plan XY développé auparavant. Reconstruire les traces de fluorescence obtenues d'un laser gaussien focalisé au centre de la région de la simulation et d'un autre focalisé à une position (X_0,Y_0) .

- A) Quel est l'effet sur la corrélation croisée G_{1,2}(t) de ces variables
 - Densité des molécules,
 - Shot noise,
 - Distance entre les deux lasers.
- B) Montrez l'impact sur la fonction de corrélation croisée si les deux lasers sont focalisés dans des zones indépendantes qui ne communiquent pas. Comparez les courbes obtenues pour les simulations avec et sans barrière en utilisant les mêmes paramètres de simulation.
- C) Montrez comment l'existence de barrière entre les deux points focaux influence la fonction de corrélation. Comparez les courbes obtenues pour les simulations avec et sans barrière en utilisant les mêmes paramètres de simulation.

Pour chacune de ces 4 questions, répétez les simulations et montrer les résultats qui justifient vos conclusions. Pour chaque simulation, inclure des schémas qui expliquent les paramètres des simulations effectuées. N'hésitez pas à me contacter pour des précisions si nécessaire.