

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Física

Modelagem de Movimentos Coletivos de Matéria Ativa

Emanuel Fortes Teixeira

Trabalho de conclusão de curso realizado sob a orientação do Prof. Dr. Heitor Carpes Marques Fernandes, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Física.

Porto Alegre, Julho de 2018.

Agradecimentos

Agradeço a minha mãe Sandra, meu pai Sérgio, minha família, meu orientador Heitor, meus colegas, amigos e também a minha namorada Nathália por todo apoio durante esses anos de graduação em Física.

Resumo

O estudo do movimento coletivo de matéria ativa vêm sendo pauta nos últimos anos por uma extensa comunidade de físicos teóricos e experimentais, devido a rica fenomenologia que apresenta. Revoadas de pássaros, cardumes de peixes, enxames de insetos, rebanhos de mamíferos são todos exemplos de sistemas de matéria ativa observados na natureza, os quais possuem a característica individual de serem auto-propelentes. Estudos mostraram que certas transições, de uma configuração desordenada para ordenada, ocorrem em tais sistemas devido ao fato de existir uma tendência de alinhamento entre os mais próximos (vizinhos).

A partir das observações a respeito da tendência de alinhamento que existe entre vizinhos e do movimento persistente individual, foram revisados neste trabalho modelos numéricos mínimos conhecidos para movimento coletivo de matéria ativa, os quais levam em conta essas propriedades. Inicialmente, analisamos o caso onde as entidades ativas são partículas pontuais. Transições contínuas e descontínuas foram observadas, as quais dependem da forma do ruído estocástico que o sistema está sujeito e do tamanho do sistema. Nas simulações numéricas realizadas, observa-se que sistemas ativos podem se alinhar a um campo externo dependendo da intensidade do ruído estocástico, o qual também foi observado em estudos iniciais de matéria ativa.

Além disso, considerou-se a possibilidade de existir em certos sistemas de matéria ativa, um volume de exclusão e uma interação de curto alcance, tipo harmônica, entre os constituintes do sistema. Assim, simulações foram realizadas, levando em conta essa nova propriedade, identificando-se que o sistema apresenta, além das fases movente (movimento ordenado) e não-movente (movimento desordenado) do caso anterior, fases sólida, gasosa e líquida, como também observado em trabalhos anteriores. Por fim, mostrou-se que um agregado (fase sólida) não movente, sob certas circunstâncias, pode interagir com um campo externo e passar a se mover na direção desse campo.

Abstract

In the last years, the study of collective motion in active matter has been a subject of intensive research by an extensive community of theoretical and experimental physicists, due to the rich phenomenology that it presents. Flocks of birds, schools of fish, swarms of insects and herds of mammals are examples of active matter systems observed in nature, which have the individual characteristic of being self-propelled. Studies have shown that certain transitions, from a disordered to ordered configuration, occur in such systems due to the fact that there is a tendency of alignment between neighbors.

From experimental observations, alignment tendency between neighbors and individual persistent movement were taken into account when developing minimum numerical models for collective movement of active matter. These models are reviewed in this work. Initially, when active entities were treated as point particles, it was observed that systems can undergo both continuous and discontinuous phase transitions. These transitions depend on the form of the stochastic noise applied to the system and the size of the system. Through numerical simulations, it was observed that active systems are able to align to an external field depending on the stochastic noise intensity.

In addition, it was considered systems of active matter where entities interact through excluded volume and harmonic (short-ranged) interactions. Simulations performed taking into account these new properties, identify that the system presents solid, gaseous and liquid phases, besides the moving and non-moving phases of the previous case. Finally, it has been shown that a non-moving aggregate (solid phase), under certain circumstances, can interact with an external field and move in the direction of that field.

Sumário

1	Introdução	2
1.1	Movimentos Coletivos de Matéria Ativa	5
1.2	Mecânica Estatística em Matéria Ativa	6
2	Revisão Bibliográfica	10
2.1	Modelos de Animóides em Matéria Ativa	10
2.1.1	O Modelo de Vicsek	11
2.1.2	O Modelo de Grégoire	17
3	Metodologia	23
3.1	Simulações do Modelo de Vicsek	23
3.2	Simulações do Modelo de Grégoire	31
4	Conclusões e Perspectivas	37
	Referências	39

Capítulo 1

Introdução

Matéria Ativa (MA) consiste de sistemas formados por “entidades similares” como partículas, seres vivos de uma dada espécie, consumidoras de energia (interna ou externa) o qual possuem a característica individual de serem auto-propelentes (“*self-propelled*”) e impulsionam tal sistema a se comportar de maneiras complexas [1–3]. Um exemplo clássico de MA são os cardumes de peixes, os quais podem se mover de uma maneira ordenada ou mudar sua direção de uma forma abrupta, bem como, produzir vórtices, como observado na Figura (1d). Sob a ameaça de um predador próximo, os mesmos peixes podem se mover como um fluido veementemente agitado, como visto no vídeo. Outro exemplo muito conhecido são as revoadas de centenas (até milhares) de pássaros (tal como os estorninhos) que voam no campo aberto em bandos (“*flocks*”), onde cada um deles move-se autonomamente. Cada pássaro está consumindo seu próprio suprimento de energia para se mover. Apesar do fato de que cada um deles é capaz de se mover independentemente dos outros, o bando mantém uma coerente e amorfa forma, o qual produz por vezes movimentos turbulentos e complexos, como mostrado no vídeo. Surpreendentemente, muitos dos belos movimentos dinâmicos de bandos de pássaros observados na natureza podem ser descritos pela forma como eles interagem com seus vizinhos. Para ser mais específico, verificou-se que os pássaros preferencialmente se alinham apenas com 6 ou 7 dos pássaros vizinhos mais próximos [4]. A partir desta regra simples, o movimento em bando (“*flocking*”) observado na natureza é realmente possível, como visto na Figura 1e.

Mais recentemente, pequenos organismos, como bactérias e algas, vem sendo estudados com o objetivo de aprender mais sobre a física dos sistemas de MA [5]. Bactérias podem se aglomerar na microescala quando há um grupo delas suficientemente denso, de modo que interajam no momento em que nadam, esbarrando umas nas outras. As bactérias, as quais possuem uma forma parecida com a de uma bastão alongado, se alinham com seus vizinhos e formam um grupo nemático, como é visto na Figura 1.2.

O Volvox é uma colônia esférica onde existem milhares de células, o qual forma um gênero de algas verdes. As colônias podem se ligar hidrodinamicamente ao seu vizinho em

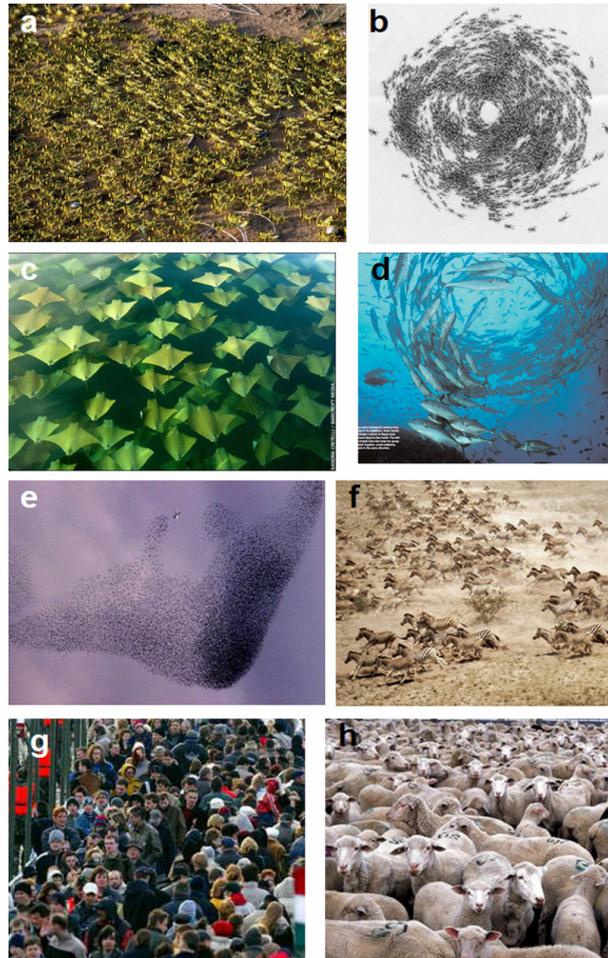


Figura 1.1: Fonte: [4]. Exemplos de comportamento coletivo. Entre outros, ilustra a possível existência de vários padrões de comportamentos gerais. (a) Gafanhotos sem asas marchando no campo. (b) Uma colônia rotativa de um exército de formigas. (c) Um arranjo tridimensional de arraias douradas. (d) Os peixes são conhecidos por produzir tais vórtices. (e) Milhares de estorninhos produzem uma estrutura aérea. Eles estão tentando evitar o ataque de um predador modificando a forma da estrutura. (f) Uma manada de zebra. (g) Pessoas espontaneamente ordenadas em “faixas de tráfego” enquanto cruzam uma ponte de pedestres em grande número. (h) Um rebanho de ovelhas.

um estado ligado no qual se movem juntos em um movimento parecido com uma “valsa”, como é visto na Figura 1.3. Um micro-organismo *Volvox* individual se move de forma autônoma em resposta ao ambiente, mas as interações entre os organismos controlam os movimentos em uma escala global, produzindo um movimento coletivo.

Os sistemas biológicos contêm a complexidade inerente da vida e, portanto, são difíceis de testar e ajustar no ambiente de laboratório. A fim de pesquisar a física da MA, alguns pesquisadores, nos últimos anos, vem buscando sistemas de MA que possam ser facilmente estudados experimentalmente. Isso significa que o experimento com tal sistema deve ser

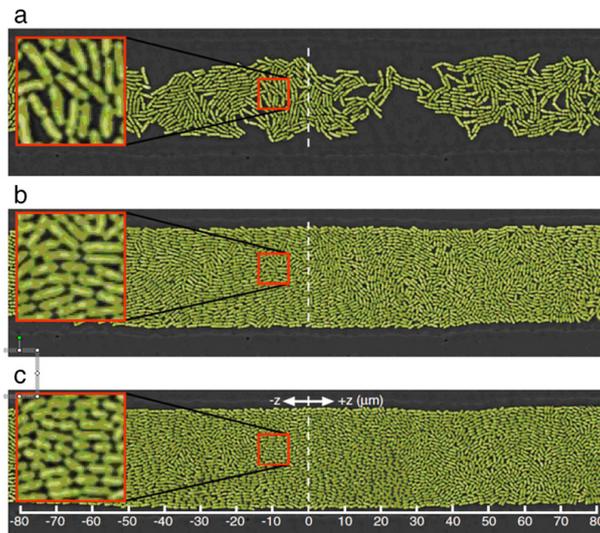


Figura 1.2: Fonte: [5]. O crescimento e ordenamento da bactéria *E. coli* em uma cavidade microfluídica quasi-2D aberta. Originalmente, no início do teste, as células são distribuídas de maneira uniforme e esparsa. Três *snapshots* são tomados em (a) 60, (b) 90, e (c) 180 minutos após o início do experimento. O crescimento e a divisão em uma densa colônia levam a uma transição de uma fase desordenada para uma altamente ordenada, caracterizada por um alinhamento das bactérias.

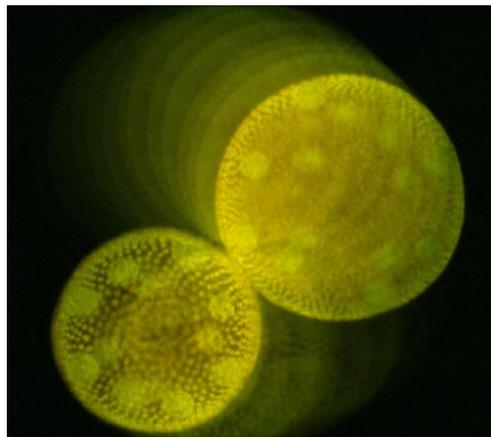


Figura 1.3: Fonte: [5]. Pares *Volvox* travados em uma interação governada pelas forças da superfície da água e lubrificação de curto alcance.

repetível, altamente sintonizável e dure um tempo suficiente para ser analisado. Uma abordagem possível é construir sistemas artificiais de MA no laboratório. Um exemplo disso, é o movimento coletivo de drones autônomos (“*Collective Motion of Autonomous Flying Robots*”), o qual vem sendo pauta de pesquisas mais recentes [6–8] dado suas possíveis aplicações futuras e utilidade para entender os principais mecanismos que levam os sistemas biológicos, presentes na natureza, à apresentar certos padrões coletivos, como mostrado na Figura 1.4.



Figura 1.4: Fonte: [6]. Drones têm sido, em pesquisas atuais, utilizados para uma maior compreensão dos principais fenômenos de movimentos coletivos de MA.

1.1 Movimentos Coletivos de Matéria Ativa

Embora o **movimento persistente** seja uma das características mais evidentes da vida [4, 9, 10], nos últimos anos vários sistemas físicos e químicos mostraram possuir tais “indivíduos” (auto-propelentes) [4, 9], os quais interagem entre si. Há um grande número de exemplos adicionais tanto de sistemas de seres vivos como de não-vivos [4, 9] que mantêm sua dinâmica através de algum tipo de interação. Uma pergunta pertinente é saber se os padrões dos movimentos observados de MA pertencem a algum sistema em específico, pois tal conclusão seria bastante comum na biologia. Ou, alternativamente, existem apenas algumas **classes típicas** os quais todos os padrões de **movimento coletivo** pertencem? Isso seria um pensamento familiar para um físico estatístico que lida com sistemas de um número enorme de moléculas em equilíbrio. De fato, movimento coletivo é uma das manifestações de uma classe mais geral de fenômenos chamados de **comportamento coletivo** [9, 11], sendo também uma das formas mais comuns e espetaculares das chamadas **ações coordenadas** [9]. Estudos do movimento coletivo de MA identificaram algumas leis gerais relacionadas a como novas e mais complexas características qualitativas surgem quanto mais unidades simples estão interagindo [9, 12, 13]. Além do mais, a natureza das “entidades” em tais sistemas pode ser puramente física, química, bem como, biológica. Portanto, saber se estes exibirão todos os mesmos padrões de movimentos e buscar que princípios universais (físicos, químicos ou biológicos) subjacentes predizem que tais movimentos coletivos devem ser dessa forma, parece ser uma abordagem razoável. Após inúmeras observações [4], constatou-se que o movimento em grupo produz inúmeras vantagens de origem evolutiva para as espécies tais como

- i) Defesa contra predadores;
- ii) Exploração mais eficiente de recursos ou caça;
- iii) Melhoria na tomada de decisões quando há grandes grupos (por exemplo, onde aterrissar).

Além disso, com base nas mesmas observações as seguintes hipóteses podem ser feitas sobre a natureza dos padrões de movimento que surgem em MA

- i) A tendência a adotar a direção do movimento dos vizinhos é a principal razão para o movimento ordenado;
- ii) Aparentemente os mesmos, ou comportamentos muito semelhantes ocorrem em sistemas de origem muito diferente. Isso sugere a possibilidade da **existência de classes universais de padrões de movimento coletivo**;
- iii) As condições de contorno afetam as principais características do movimento em grupo.

1.2 Mecânica Estatística em Matéria Ativa

Um sistema consistindo de muitas entidades similares (como moléculas, mas também, grupos de pássaros, cardumes de peixe, enxames de insetos e etc) pode possuir interações simples entre elas (atração/repulsão) ou interações mais complexas (como combinações de simples interações) ocorrendo entre vizinhos no espaço ou através de uma rede conectada. Nesse trabalho, consideramos o movimento coletivo como um fenômeno ocorrendo em coleções de unidades similares que interagem e movem-se com aproximadamente a mesma velocidade absoluta. Nesta interpretação, **a fonte de energia que torna o movimento possível (as formas pelas quais as unidades ganham momentum linear) e as condições que garantem uma velocidade de módulo fixo não são relevantes** para compreender tais sistemas e estudar suas principais características.

Uma característica intrínseca das entidades que compõem esses sistemas é que **elas movem-se sozinhas**. O fato delas se moverem variando suas velocidades sem a ação de uma força resultante externa não nula implica que esses **são sistemas fora do equilíbrio termodinâmico**. Assim, a principal diferença entre fenômenos coletivos na física estatística padrão e de sistemas de MA é que a “regra de colisão” (a tendência de alinha-

mento com os vizinhos, no caso de MA) é diferente para os dois tipos de sistemas: no segundo caso, **não há conservação de momentum linear**, ou seja, o momentum linear de duas partículas auto-propelentes não é o mesmo após a interação, como é visto na Figura 1.5. Aqui a expressão “regra de colisão” significa especificar como os estados (momentos) de duas partículas individuais mudam durante a interação. Nos sistemas em equilíbrio, de acordo com a mecânica newtoniana o momentum linear total é conservado e isso fornece a conhecida distribuição de velocidades maxwelliana construída a partir de condições iniciais arbitrárias de um sistema galileano fechado. A mera condição das entidades manterem uma velocidade de magnitude constante só é possível em um sistema aberto, o qual as afasta de qualquer tipo de comportamento de equilíbrio.

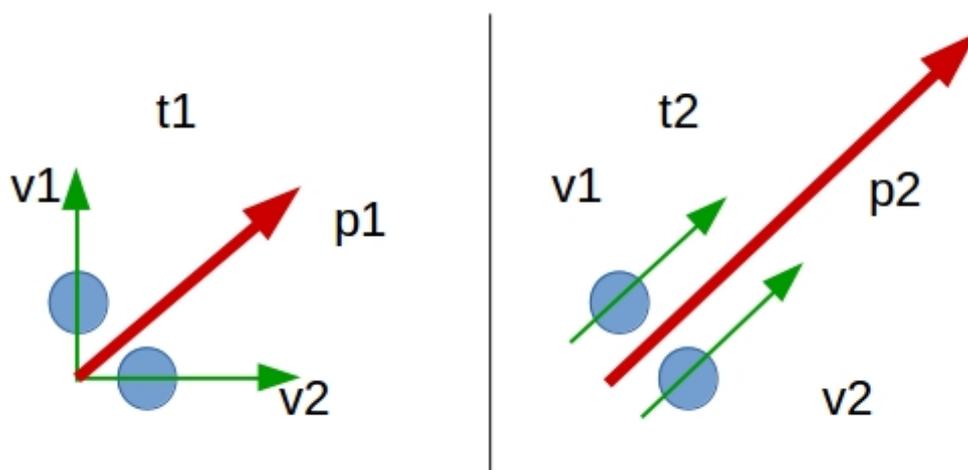


Figura 1.5: Fonte: [14]. Ilustração demonstrando a não conservação de momentum linear em MA. Em verde vemos o vetor velocidade de cada partícula ativa e em vermelho o momento total do sistema. Em t_1 há a interação (tendência de alinhamento) entre as duas partículas e em t_2 vemos o alinhamento após a interação. É visto que o momento não é conservado, pois apesar de \mathbf{p}_1 e \mathbf{p}_2 terem o mesmo sentido, o módulo de \mathbf{p}_2 é o dobro de \mathbf{p}_1 , dado que o módulo das velocidades sempre permanece o mesmo.

A energia sustentando a autopropulsão, pode ser de origem biológica como no caso dos seres vivos (pássaros, peixes e etc), ou ser introduzida no sistema, como no caso das partículas Janus, onde o movimento é assegurado por um feixe de laser que causa autotermoforese [15]. Em sistemas de MA é muito comum correntes internas serem geradas, proporcionando que o momentum linear global se altere.

Uma característica fundamental do movimento coletivo de sistemas de MA é o **surgimento espontâneo do movimento coletivo sem líder** [4, 9, 12], sem campo externo ou sem confinamentos geométricos para guiar o movimento, sendo a ação de uma dada entidade dominada pela influência das outras - ela comporta-se completamente diferente do seu comportamento inerente. Sob certas condições (de parâmetros de origem estocástica), “transições”, entre uma fase ordenada e desordenada, podem ocorrer quando um indivíduo

adota um padrão de comportamento quase completamente determinado pelos efeitos coletivos devido a seus vizinhos mais próximos, passando assim, o sistema a mover-se como um todo, quebrando a simetria orientacional global. Uma vez ocorrida essa transição, diz-se que o conjunto se encontra polarizado ou ordenado. Um exemplo disto é um grupo de pombos alimentando-se no chão aleatoriamente orientados que se ordenam ao saírem de cena voando após uma grande perturbação [16], como é visto no [vídeo](#). Para demonstrar mais claramente este aspecto do movimento coletivo, a melhor abordagem é adotar umas poucas definições motivadas principalmente pela mecânica estatística (a física de muitas moléculas interagentes). Em um sentido geral, a transição de fase é um processo, durante o qual um sistema, consistindo de um grande número de partículas, sofre uma mudança de uma fase para outra, em função de um ou mais parâmetros externos [17, 18]. As fases mais familiares em que um sistema físico pode estar são as fases sólida, líquida e gasosa, e o exemplo mais conhecido para uma transição de fase é o congelamento de um fluido quando a temperatura diminui. Neste caso a temperatura é o parâmetro externo ou de “controle”.

As transições de fase são definidas pela alteração de uma ou mais variáveis específicas do sistema, chamadas **parâmetros de ordem**. Este nome, parâmetro de ordem, vem da observação de que as transições de fase geralmente envolvem uma mudança repentina em uma propriedade de simetria do sistema. Por exemplo, no estado sólido da matéria, os átomos têm uma posição média bem definida nos sítios de uma rede cristalina ordenada, enquanto que as posições nas fases líquida e gasosa são desordenadas e aleatórias. Assim, o parâmetro de ordem refere-se ao grau de simetria que caracteriza uma fase. No caso do movimento coletivo, esse valor é geralmente zero em uma fase (na fase desordenada) e diferente de zero na outra (que é a fase ordenada).

incluindo processos específicos nos quais a pesquisa relacionada se concentra. [4]. Apesar dos sistemas de MA não representarem exemplos de equilíbrio termodinâmico, um número de analogias profundas ainda podem ser observadas entre sistemas da física estatística de equilíbrio e de MA. Em ambos, apenas alguns estados macroscópicos bem definidos ocorrem e as transições entre esses estados também seguem um cenário similar (descontinuidade, continuidade e etc).

A abordagem no que diz respeito a movimentos de grupos, ou mesmo grandes grupos, como sistemas de centenas de entidades de MA, conduz naturalmente à ideia de aplicar métodos bem-sucedidos da física estatística, como simulações de computador e teorias de escala, para a descrição detalhada do comportamento coletivo dos organismos. Naturalmente, para um melhor progresso, as observações/experimentos e modelagem devem ser intimamente relacionados. De fato, nas últimas décadas, um número cada vez maior de tentativas significativas tem sido feitas para observar e descrever sistemas de MA, através da modelagem (simulação numérica) das características mais evidentes de tais sistemas, os quais variam de moléculas à grupos de mamíferos.

No próximo capítulo é discutido alguns modelos numéricos mínimos que descrevem sistemas de MA, os quais foram introduzidos nos últimos anos por diversos grupos de físicos. Uma visão geral das principais características em tais modelos será feita, focando essencialmente nos detalhes da metodologia numérica e dos resultados obtidos a partir dela.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Modelos de Animóides em Matéria Ativa

Em 1986 o cientista da computação *Craig W. Reynolds* criou um modelo sobre “*Boids*” (do inglês, *bird-ioid object* encurtada) em seu trabalho de animação digital [19], o qual se baseia na interação visual (e de exclusão de volume) para descrever realisticamente o comportamento de um bando de pássaros, cardumes de peixes e rebanhos de mamíferos terrestres. O importante é entender que os complexos padrões coletivos de bandos são uma consequência do fato que cada animal consegue, individualmente, redirecionar a sua trajetória (segundo alguma lei ou regra) de acordo com a mudança de trajetória dos seus primeiros vizinhos, **não havendo a necessidade de um líder**. Para exemplificar o que Reynolds pensou, imagine um grupo de pessoas caminhando e conversando. A fim de manter o grupo coeso (para poder continuar a conversa), um membro do grupo acaba dobrando à direita simplesmente por que é visto que alguém ao lado dele fez o mesmo. Um outro exemplo é quando um grupo de pessoas continua andando em linha reta, simplesmente porque os demais estão fazendo o mesmo, resultando em situações onde ninguém sabia para onde estava indo (movimento sem liderança), mas todos, mesmo assim, continuam em frente (ação persistente). Outro caso é quando parte de um grupo de pessoas está tão focado na conversa local (entre vizinhos) que não percebe a curva feita por parte do grupo à frente e continua em linha reta, separando-se dessa parte do grupo. Esse é um exemplo claro da importância do **transporte de informação**, pois no momento que a informação dobra em alguma direção e não chega a uma parte do agregado, ocorre assim, uma fragmentação [20]. A fim de modelar o movimento de tais tipos de grupos, Reynolds propôs que os animóides se movimentassem mudando o ângulo do seu movimento de acordo com três regras simples:

a) Separação: cada animóide tenta se manter a uma distância mínima dos outros para evitar colisões;

b) Alinhamento: os animóides tendem a alinhar o ângulo do seu movimento com o dos vizinhos;

c) Coesão: os animóides tendem a se manter perto dos seus vizinhos, formando assim um bando e dificultando a dispersão de seus membros.

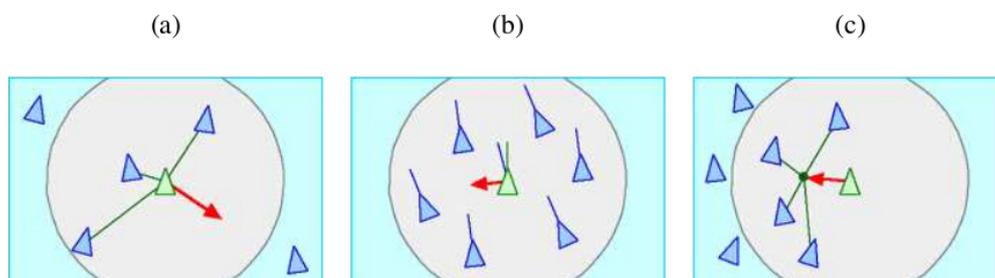


Figura 2.1: Fonte: [21]. Representação gráfica das regras de movimento propostas por Reynolds: a) Separação: cada animóide tenta se manter a uma distância mínima dos outros para evitar colisões; b) Alinhamento: tendem a alinhar-se segundo o ângulo médio de movimento de seus vizinhos; c) Coesão: tendem a se manter perto dos seus vizinhos, formando assim um bando e dificultando a dispersão de seus membros.

2.1.1 O Modelo de Vicsek

Embora o primeiro modelo conhecido de MA tenha surgido em 1986 com Reynolds, foi somente uma década depois que ele recebeu um devido estudo sistemático. Isso foi feito pelo grupo de *Vicsek* em 1995 [12], os quais incluíram ruído ao modelo e estudaram a transição de fase para o movimento coletivo. O objetivo do estudo era compreender com mais detalhes as condições necessárias para o surgimento do movimento coletivo sem a presença de líderes ou de forças externas. Tal abordagem para tratar MA fez muito sucesso com os físicos nas duas últimas décadas devido à rica fenomenologia que ele apresenta. O sucesso do chamado **Modelo de Vicsek** (MV), portanto, vem do fato dele ser um modelo mínimo - onde a complexidade matemática é minimizada sem perder os padrões emergentes característicos da matéria ativa. Utilizando-se apenas de animóides (partículas) puntiformes auto-propelentes sujeitas a interações simples e locais é possível observar uma transição de fase de movimento desordenado para movimento coletivo ordenado. A ideia central no MV é que a cada passo do tempo, uma partícula se move na direção média do movimento de seus vizinhos, com algum ruído. Em outras palavras, cada partícula segue seus vizinhos. Entretanto, as partículas cometem “erros” ao avaliar a direção do movimento de seus vizinhos, esses erros são considerados como sendo o ruído. Existem várias fontes de ruídos, mas elas podem ser divididas em dois grupos:

i) **Ruído Extrínseco:** Tal como o ambiente. Cada partícula não vê muito bem a direção em que seus vizinhos estão se movendo. Esse ruído é chamado extrínseco porque tem a ver com incertezas no mecanismo de “comunicação” partícula-partícula;

ii) **Ruído Intrínseco:** É possível imaginar que as partículas tenham algum tipo de “livre-arbítrio” em que, mesmo quando conhecem a direção de seus vizinhos, “decidem” mover-se em uma direção diferente. É chamado de ruído intrínseco, porque tem que ser com o mecanismo interno de tomada de decisão das partículas.

No trabalho original, Vicsek e colaboradores usaram apenas ruído intrínseco e mostraram que, quando a magnitude do ruído aumenta, o sistema passa por uma transição de fase do estado ordenado, onde todas as partículas se movem na mesma direção, para uma fase desordenada onde as partículas se movem em direções aleatórias não correlacionadas. O modelo consiste em N partículas colocadas em uma caixa quadrada bidimensional de lados L , com condições de contorno periódicas, os quais são um conjunto de condições usadas para simular um sistema grande, modelando uma pequena parte que está longe de sua borda. Isso considera que um objeto que deixa a célula da simulação de um lado entra de volta no outro. As partículas foram representadas por pontos se movendo no plano bidimensional. Também foi utilizado por Vicsek $r_0 = 1$ como o raio de interação entre as partículas e suas vizinhas, o qual é visto na Figura 2.2, e $\Delta t = 1$ o intervalo entre as atualizações das velocidades e posições. As condições iniciais escolhidas por Vicsek foram as mais simples: em $t = 0$, N partículas são distribuídas aleatoriamente na caixa com velocidades em direções aleatórias de magnitude fixa v_0 . O ângulo de movimento é calculado segundo a média dos ângulos dos vizinhos, somando-se também uma perturbação aleatória. Com intuito de descrever a variação do ângulo de movimento de cada partícula no tempo t e o seu deslocamento, foi utilizado que

$$\theta_n(t+1) = \arg \left[\sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) \right] + \eta \xi_n(t), \quad (2.1)$$

$$\vec{v}_n(t+1) = v_0(\cos(\theta_n(t+1)), \sin(\theta_n(t+1))), \quad (2.2)$$

$$\vec{r}_n(t+1) = \vec{r}_n(t) + \vec{v}_n(t+1)\Delta t, \quad (2.3)$$

onde a média no argumento do lado direito da Eq. (2.1) é realizada dentro do raio de vizinhança r_0 (incluindo-se a direção da velocidade da partícula n em questão) da partícula em t e η é a intensidade do ruído, definido em $0 \leq \eta \leq 2\pi$, que multiplica uma variável $\xi_n(t)$ aleatória distribuída uniformemente no intervalo $[-1/2, 1/2]$.

Há, portanto, três parâmetros livres para um dado tamanho do sistema: η , $\rho = N/L^2$

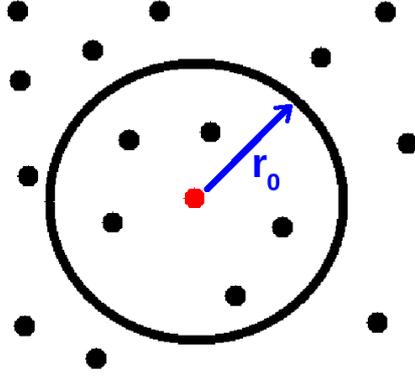


Figura 2.2: Representação da vizinhança de um animóide no MV, onde o círculo de raio r_0 limita a área de vizinhança do animóide marcado em vermelho. Fonte: [22]

e v_0 , sendo $v_0\Delta t$ a distância que a partícula percorre em cada passo temporal. Nós podemos interpretar a velocidade média como o sinal que a n -ésima partícula recebe de sua vizinhança. Devemos notar que na Eq. (2.1) o ângulo da orientação média da vizinhança (sinal) é calculado, ou seja, o sinal é identificado claramente pela partícula, mas então um ruído escalar é adicionado a esse ângulo, o que caracteriza a incerteza na tomada de decisão (intrínseco) de uma determinada partícula no que diz respeito a seguir seus vizinhos. No caso de ruído extrínseco, um vetor estocástico é adicionado à velocidade média e, em seguida, o ângulo do vetor resultante é calculado, ou seja, a partícula recebe um sinal alterado (pelo ambiente, por exemplo) e o segue. Portanto, no conjunto de equações do MV, a partícula recebe claramente o sinal de sua vizinhança, identifica para onde seus vizinhos estão se movendo, mas então decide se mover em uma direção um pouco diferente. Em contraste, para o caso de ruído extrínseco, a partícula recebe um sinal ruidoso da vizinhança, mas uma vez que o sinal foi recebido, a partícula segue o sinal ruidoso percebido [23] (interpretação de Grégoire, a qual será discutida mais tarde).

A fim de analisar a transição entre os comportamentos aleatórios e ordenados, foi escolhido como parâmetro de ordem a velocidade média normalizada (ou polarização)

$$\phi = \frac{1}{Nv_0} \left| \sum_i^N \vec{v}_i \right|, \quad (2.4)$$

onde N é o número de partículas no sistema e v_0 o módulo da velocidade de cada uma. Se o movimento é desordenado as velocidades das partículas individuais apontam em direções aleatórias e a média é um vetor de pequena magnitude (próximo a zero), enquanto que para movimento ordenado todas as velocidades somam um vetor de velocidade absoluta perto Nv_0 , assim o parâmetro de ordem pode variar de zero até 1, como é visto na Figura (2.3a). Esse é um parâmetro de ordem polar análogo a magnetização nas transições ferromagnéticas do **modelo de Ising**. É importante notar que, em casos de movimento

coletivo rotacional, esse parâmetro de ordem não indicaria a presença de movimento coletivo pois as velocidades iriam se cancelar. Para tais casos rotacionais, calcular o momento angular do sistema representaria melhor a transição do movimento. No limite $v_0 \rightarrow 0$ as partículas não se movem e o modelo se torna o bem conhecido modelo **XY** [24], um modelo similar ao modelo de Ising, mas ocorre no contínuo. Para $v_0 \rightarrow \infty$ as partículas ficam completamente misturadas entre dois instantes de tempo e tal limite corresponde ao então comportamento de **campo médio** do ferromagneto. Em seu trabalho Vicsek utilizou $v_0 = 0,03$, pois assim, as partículas interagem sempre com seus atuais vizinhos e movem-se rápido o suficiente para mudar a configuração depois de poucas atualizações das direções. Após sucessivos testes em suas simulações Vicsek concluiu que em um intervalo de escolha ($0,003 < v_0 < 0,3$) de velocidades não há mudanças nas propriedades fundamentais (transições de fase, por exemplo) de tal modelo, como pode ser visto na Figura (2.3b). A Figura. 2.4 mostra que variando a densidade e o valor da intensidade do ruído η , o modelo MV produz duas fases características de desordem e de alinhamento global de movimento .

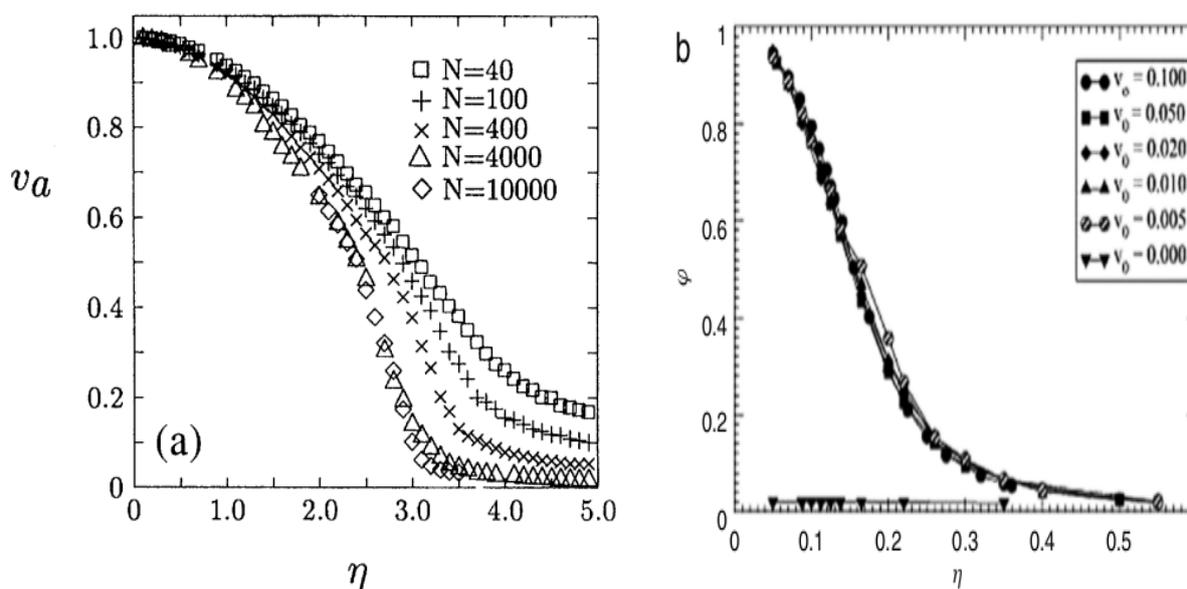


Figura 2.3: (a) Imagem retirada de [12]. A variação do parâmetro de ordem com η para uma densidade fixa, $\rho = 4$. (b) Imagem retirada de [25]. Diferentes curvas pertencentes a diferentes velocidades v_0 , com o qual as partículas se movem. Pode ser visto, que o valor concreto de v_0 (dentro do intervalo de Vicsek) não afeta a natureza da transição do parâmetro de ordem (exceto quando $v_0 = 0$, que é o caso, quando nenhuma partícula se move). Utilizado $\rho = 1/4$ e $N = 4096$.

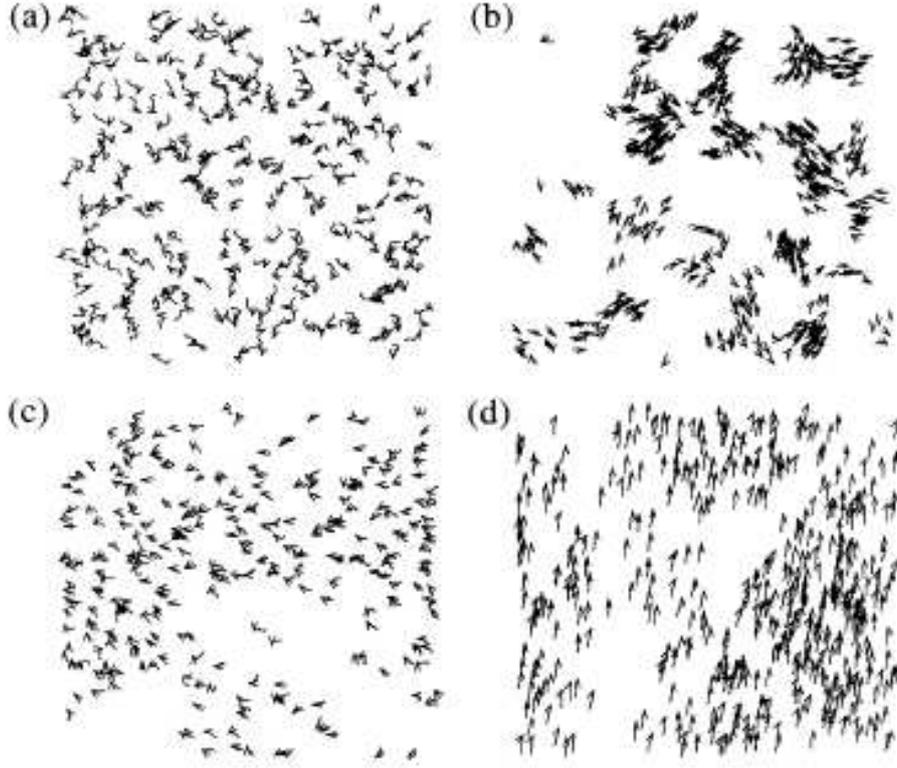


Figura 2.4: Fonte: [12]. Evolução de animóides sob a dinâmica do modelo de Vicsek. Uma sequência de 20 passos de cada animóide é mostrada para diferentes parâmetros. Em todos os casos, $N = 300$. a) $t = 0$, $L = 7$, $\eta = 2.0$; b) para densidades e ruídos pequenos temos a formação de grupos, $L = 25$ e $\eta = 0.1$; c) depois de algum tempo o sistema apresenta alguma correlação, $L = 7$, $\eta = 2.0$; d) para densidades maiores e ruídos pequenos o movimento é ordenado, $L = 5$ e $\eta = 0.1$.

Devido ao sucesso do MV, varias adaptações surgiram nas últimas duas décadas, tornando popular o uso da expressão modelos tipo Vicsek. Dois anos após a introdução do modelo de Vicsek, *Czirók* [13] introduziu um campo externo \vec{h} ao modelo e estudou como o parâmetro de ordem ϕ , que descrevia uma quebra de simetria ordem/desordem, se comportava com a variação da intensidade do campo h para um dado η . A maneira natural de introduzir esse campo ao modelo é realizar uma simples alteração na Eq. (2.1) para

$$\theta_n(t+1) = \arg \left[\alpha \sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) + h\vec{e} \right] + \eta \xi_n(t), \quad (2.5)$$

onde \vec{e} é vetor unitário arbitrário (definido na direção do campo), h é a intensidade do campo e α o parâmetro de alinhamento que controla a influência dos vizinhos na partícula em questão. Utilizando $\alpha = 1$, uma densidade $\rho = 2$ e um tamanho linear $L = 100$, ele observou o efeito da perturbação no sistema quando um campo externo é aplicado. Uma configuração ordenada é vista quando a intensidade do ruído é pequena o suficiente para

não quebrar a simetria de ordenamento que o sistema se situa. Com altos valores de perturbação o termo estocástico domina, produzindo padrões desordenados o qual é identificado por um parâmetro de ordem ϕ perto de zero, como observado na Figura 2.5. Note que para $h = 0$, para vários valores η , recai no modelo original de Vicsek.

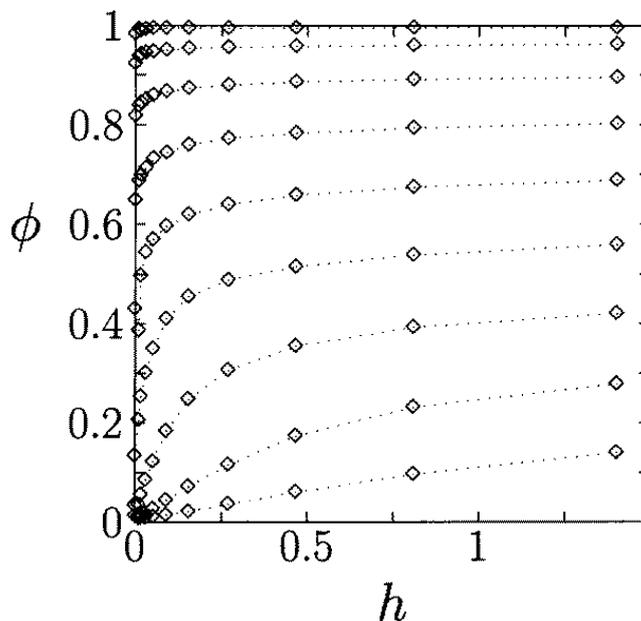


Figura 2.5: Fonte: [13]. Parâmetro de ordem em função da intensidade do campo externo h , para $\rho = 2$, $L = 100$ e $\eta : 0,3; 0,9; 1,5; 2,1; 2,7; 3,3; 3,5$ e $4,5$ (curvas de cima para baixo, respectivamente).

2.1.2 O Modelo de Grégoire

Em 2003 *Grégoire* [26], interpretou o ruído estocástico no MV de uma forma diferente daquele proposto por Vicsek em seu modelo original. Ele imaginou o ruído como sendo a incapacidade da partícula em identificar a direção em que seus vizinhos estão se movendo. Esse ruído, diferente do ruído intrínseco de Vicsek, é extrínseco porque está relacionado com incertezas no “mecanismo de comunicação” partícula-partícula e não devido a “livre vontade” da partícula em não seguir seus vizinhos. No caso onde o termo estocástico é alterado para um ruído extrínseco, o termo angular do MV é alterado para

$$\theta_n(t+1) = \arg \left[\alpha \sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) + \eta \gamma_n(t) \vec{\xi}_n(t) \right], \quad (2.6)$$

onde $\vec{\xi}_n(t)$ é um vetor estocástico unitário com orientação sorteada no intervalo $[0 : 2\pi]$ e $\gamma_n(t)$ o número de partículas dentro do raio de vizinhança r_0 da n -ésima partícula em t . Nesta interpretação é visto que a partícula recebe o sinal de sua vizinhança, mas devido ao termo de perturbação (devido ao ambiente, por exemplo) ela segue para uma direção um pouco diferente da média de sua vizinhança. Em 2004 [27], Grégoire mostrou que tal mudança de interpretação resulta em uma alteração na forma da transição de fase de um estado desordenado para um estado ordenado à medida que se variava a intensidade do ruído η . Foi identificado que diferentemente do MV, a transição era descontínua e, portanto, de primeira ordem, como mostrado na Figura 2.6.

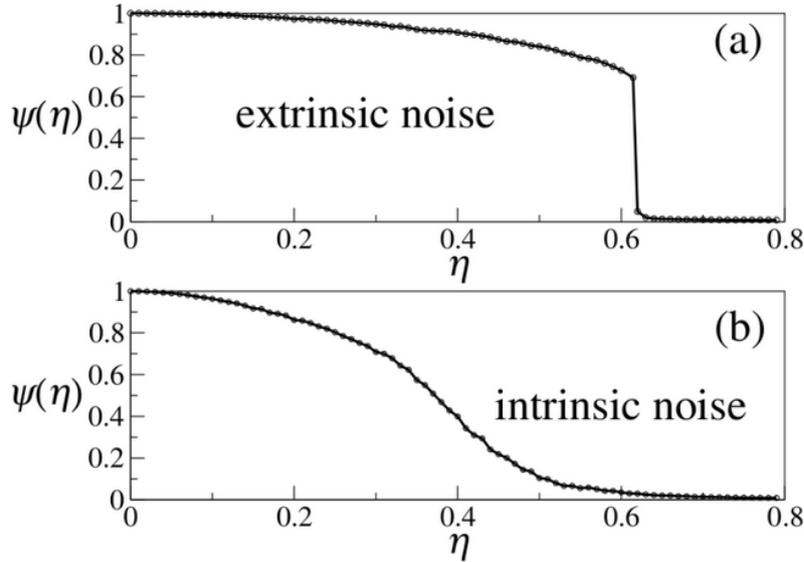


Figura 2.6: Fonte: [28]. Transição de fase do parâmetro de ordem para um sistema com a) ruído extrínseco e b) ruído do modelo de MV (intrínseco). No primeiro caso a transição parece ser contínua, enquanto que no segundo caso é claramente descontínua. As simulações foram realizadas utilizando $N = 2000$, $\alpha = 1$, $L = 32$, $r_0 = 0,4$ e $v_0 = 0,05$.

No mesmo trabalho de 2003, no qual o ruído extrínseco foi introduzido ao MV, Grégoire

incluiu propriedades físicas como volume e adesão para o movimento coletivo de MA. Foi adicionada uma “força” \vec{f}_{nj} , visto na Figura 2.7, semelhante à derivada de um potencial, tipo harmônica mais caroço duro que dá um volume de exclusão às partículas e promove a coesão do agregado mesmo para um limite de densidade zero. Assim, foi introduzida ao cálculo no modelo

$$\theta_n(t+1) = Arg \left[\alpha \sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) + \beta \sum_{j \sim n} \vec{f}_{nj}(t) + \eta \gamma_n(t) \vec{\xi}_n(t) \right], \quad (2.7)$$

onde $j \sim n$ indica as interações da n -ésima partícula com suas j -ésimas vizinhas, $\vec{f}_{nj}(t)$ é a força exercida pela j -ésima na n -ésima partícula em t , α controla a influência da velocidade dos vizinhos na nova direção (termo de movimento coletivo), β determina a influência da nova força de atração/repulsão dos animóides e $\vec{\xi}_n$ é um vetor unitário de direção aleatória sorteada no intervalo $[0 : 2\pi]$ e γ_n é o número de vizinhos da n -ésima partícula em t . A versão original da força \vec{f}_{nj} proposta por Grégoire é composta em quatro partes: para distâncias menores que um raio r_c é infinita (de repulsão), caracterizando o volume do animóide; para a distâncias em torno de r_{eq} é do tipo linear restauradora (o animóide tende a permanecer numa posição de equilíbrio); para distâncias entre o r_{har} e o r_{alc} é atrativa e constante (o animóide procura não se distanciar do bando); para distâncias maiores que r_{alc} é nula. Assim têm-se:

$$\vec{f}_{nj} = \vec{e}_{nj} \begin{cases} +\infty & se & r_{nj} \leq r_c \\ \frac{1}{4} \frac{r_{ij} - r_{eq}}{r_{har} - r_{eq}} & se & r_c < r_{nj} < r_{har} \\ -1 & se & r_{har} < r_{nj} < r_{alc} \\ 0 & se & r_{nj} > r_{alc} \end{cases} \quad (2.8)$$

onde

- \vec{e}_{nj} é o vetor unitário na direção da partícula j para n ;
- r_{nj} é a distância entre as partículas n e j ;
- r_{eq} é a distância de equilíbrio entre duas partículas;
- r_{alc} é a distância de alcance da força;
- r_c é distância impenetrável da partícula (hardcore);
- r_{har} é a distância máxima onde a força ainda está no regime harmônico.

Os parâmetros usados por Grégoire são vistos na Tabela 2.1. É importante salientar que, embora o trabalho original tenha se baseado na força apresentada acima Eq. (2.8),

Tabela 2.1: Tabela com os parâmetros usados por Grégoire.

Δt	v_0	r_{alc}	r_{har}	r_{eq}	r_c	η
1,0	0,05	1,0	0,8	0,5	0,2	1,0

os autores afirmam que a forma precisa dela é de pouca importância [26] e que os resultados podem ser generalizados para a de qualquer outra força que tenha uma forma semelhante. Através da adição do termo de força, tal modelo, agora chamado **Modelo de Grégoire** (MG), apresenta, além das fases ordenada/desordenada do MV, caracterizadas por um estado movente/não-movente do centro de massa do sistema, também possui as fases sólida, líquida e gasosa, podendo cada uma delas ser movente ou não-movente, como visto na Figura 2.8.

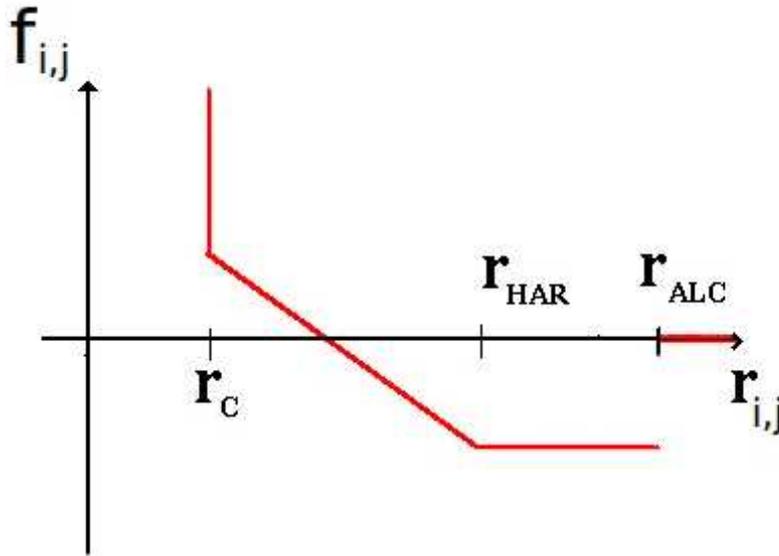


Figura 2.7: Fonte: [22]. Dependência da força com a distância das partículas na adaptação de Grégoire. Note que entre r_c e r_{har} a força atinge o valor zero, o qual caracteriza a distancia de equilíbrio r_{eq} .

Nesse modelo utiliza-se um ruído fixo e o diagrama de fases é construído para uma densidade fixa. Nessas condições, variando-se o parâmetro de alinhamento α obtêm-se as transições entre as fases movente/não-movente, equivalentes às obtidas no MV quando se variava o ruído η . As transições sólida/líquido/gasoso obtêm-se variando o parâmetro de força β . Resumindo, quanto maior o valor do parâmetro de alinhamento α , mais movente será o sistema e quanto maior o valor do parâmetro de força β , mais sólida será o sistema. No limite $\beta \rightarrow 0$ o sistema aproxima-se do comportamento de um gás.

Além disso, Grégoire estudou a dinâmica do centro de massa do agregado em fases distintas sólida/líquido, bem como, movente/não-movente, como observado na Figura 2.9.

Ele verificou que o deslocamento médio quadrático do sistema segue, para longos tempos, um comportamento difusivo em todos os casos. Foi observado um regime browniano e balístico, ou seja, $\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t$ e $\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t^2$, respectivamente, como visto na Figura 2.9.

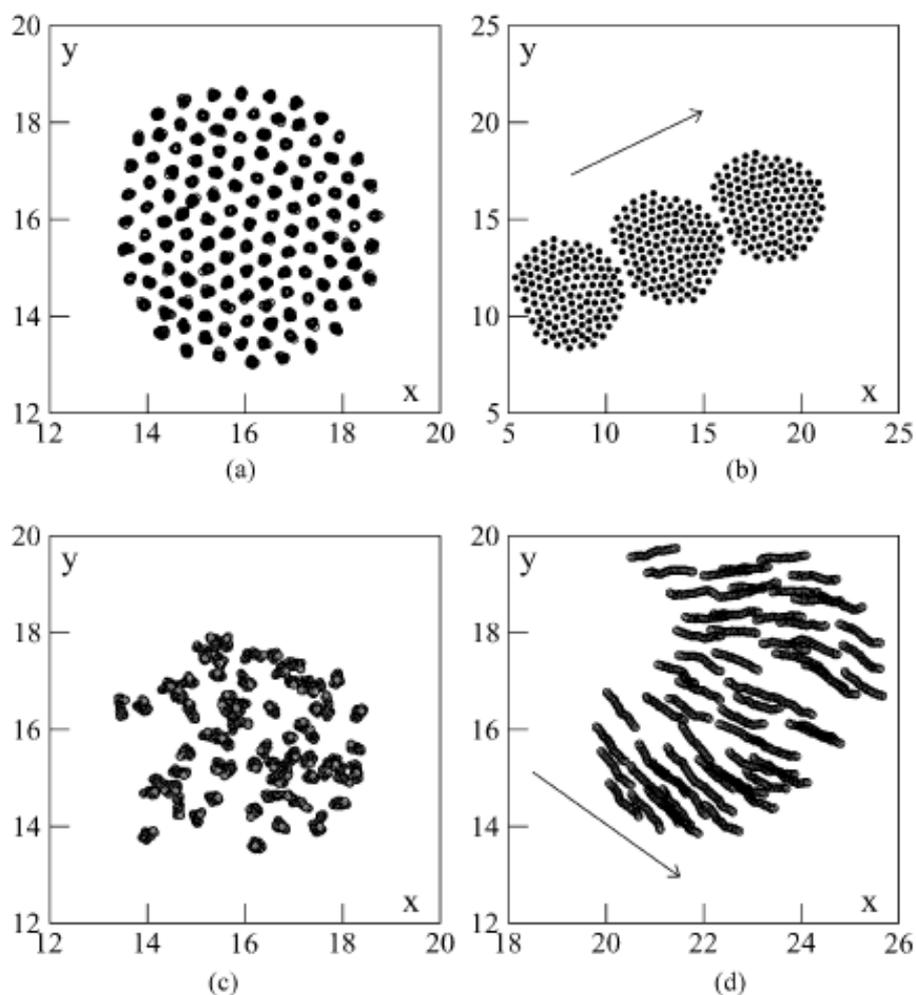


Figura 2.8: Fonte: [26]. Quatro diferentes tipos de estruturas que pode-se obter para o mesmo grupo de 128 partículas dentro de uma caixa quadrada de lado $L = 32$ com condições de contorno periódica e utilizando-se dos parâmetros da Tabela 2.1. (a) 20 intervalos de tempo sobrepostos do sólido não-movente para $\alpha = 1,0$ e $\beta = 100,0$. (b) Três *snapshots*, separados por 120 passos temporais, de sólido movente para $\alpha = 3,0$ e $\beta = 100,0$. (c) 20 intervalos de tempo de líquido não movente para $\alpha = 1,0$ e $\beta = 2,0$. (d) Líquido movente para $\alpha = 3,0$ e $\beta = 3,0$.

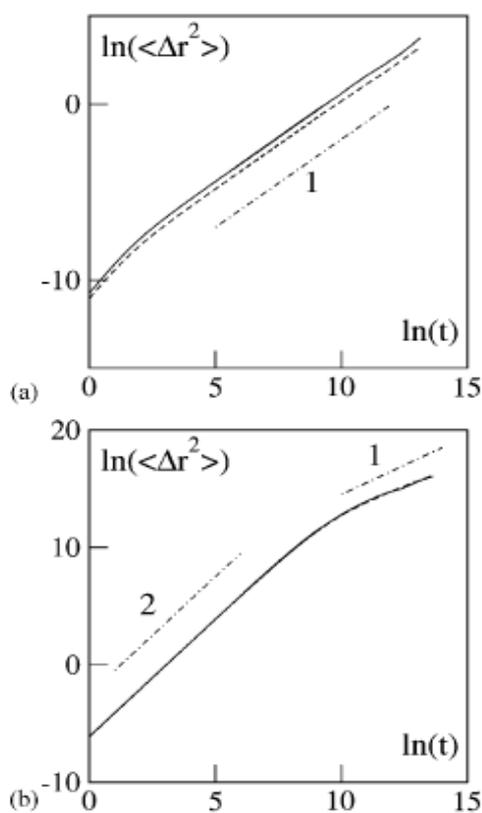
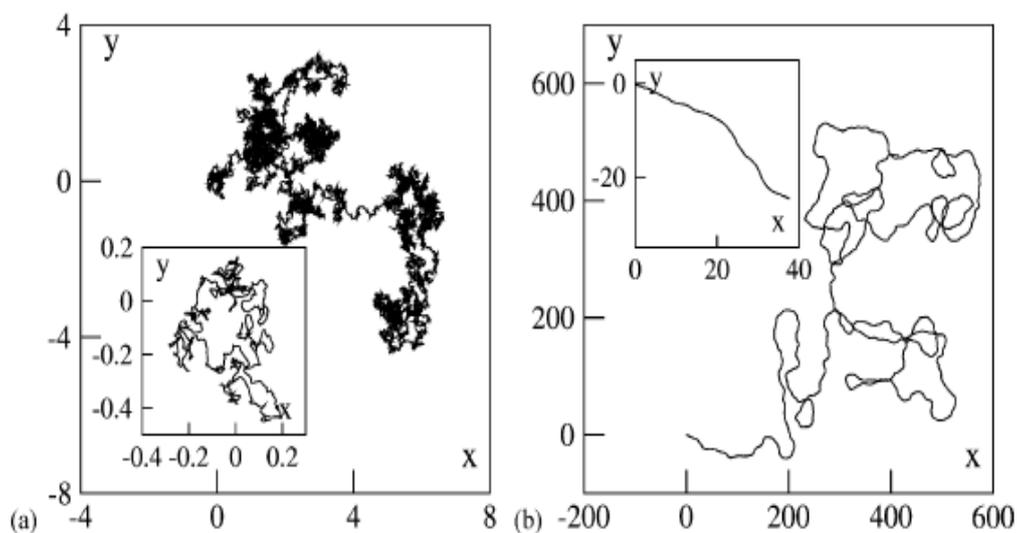


Figura 2.9: Fonte [26]. De cima para baixo: Trajetórias do centro de massa do agregado na fase não-movente ((a) $\alpha = 1$) e na fase movente ((b) $\alpha = 3$). Grupo com $N = 32$ *boids*, $\rho = 1/256$, $\beta = 40,0$. Para longos tempos (a, b), após 10^5 passos temporais. Em curtos tempos (quadrados menores), 1000 passos temporais são mostrados. Deslocamento quadrático médio do centro de massa do agregado em função do tempo para um líquido (linhas pretas) e para um sólido (linhas pontilhadas) para $N = 32$, $\rho = 1/64$, em escala log. (a) Na fase não-movente, $\alpha = 1$, $\beta = 40$ (líquido) e 65 (sólido). (b) Na fase movente, $\alpha = 3$, $\beta = 40$ (líquido) e 95 (sólido). As curvas (reta) possuem inclinação 1 ou 2 (dependendo do regime).

Nesse capítulo discutimos dois dos principais modelos numéricos mínimos de MA (MV e MG), bem como, suas características mais importantes. No próximo capítulo, será discutido com mais detalhes de que maneira é possível obter algumas das medidas e os resultados qualitativos mais importantes de ambos os modelos, assim como, todas as dificuldades inerentes que existem ao implementar interações de muitas partículas numericamente.

Capítulo 3

Metodologia

A partir da compreensão sobre os modelos mais simples de MA, discutimos no presente capítulo os principais detalhes acerca da implementação e execução das simulações numéricas e as formas de obter as medidas importantes que caracterizam o comportamento coletivo da MA observado.

3.1 Simulações do Modelo de Vicsek

Inicialmente, implementamos o modelo proposto por Vicsek (equações repetidas abaixo) com ruído intrínseco em uma rede bidimensional de lado L com os mesmos parâmetros trabalhados por ele [12]

$$\theta_n(t+1) = \arg \left[\sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) \right] + \eta \xi_n(t),$$

$$\vec{v}_n(t+1) = v_0(\cos(\theta_n(t+1)), \sin(\theta_n(t+1))),$$

$$\vec{r}_n(t+1) = \vec{r}_n(t) + \vec{v}_n(t+1)\Delta t.$$

Obteve-se *snapshots*, com $N = 300$ partículas de velocidades de módulo $v_0 = 0,03$, semelhantes àqueles que ele observou em seu trabalho, como visto nas Figuras 3.1 e 3.2. É observado na Figura 3.1 que após a inicialização, para uma intensidade de ruído intermediária, o sistema atinge um estado que apresenta algum alinhamento local e, portanto, alguma correlação espacial. Na Figura 3.2 é visto um sistema que possui uma densidade baixa, o que dificulta um movimento global ordenado mesmo que a intensidade do ruído seja baixa. Assim, é observado após um tempo a formação de grupos, de partículas alinhadas, que se movem aleatoriamente dentro da rede. Aumentando a densidade (partículas mais próximas) e permanecendo com um ruído baixo, é observado na Figura 3.2 que sistema, passa para uma configuração globalmente ordenada.

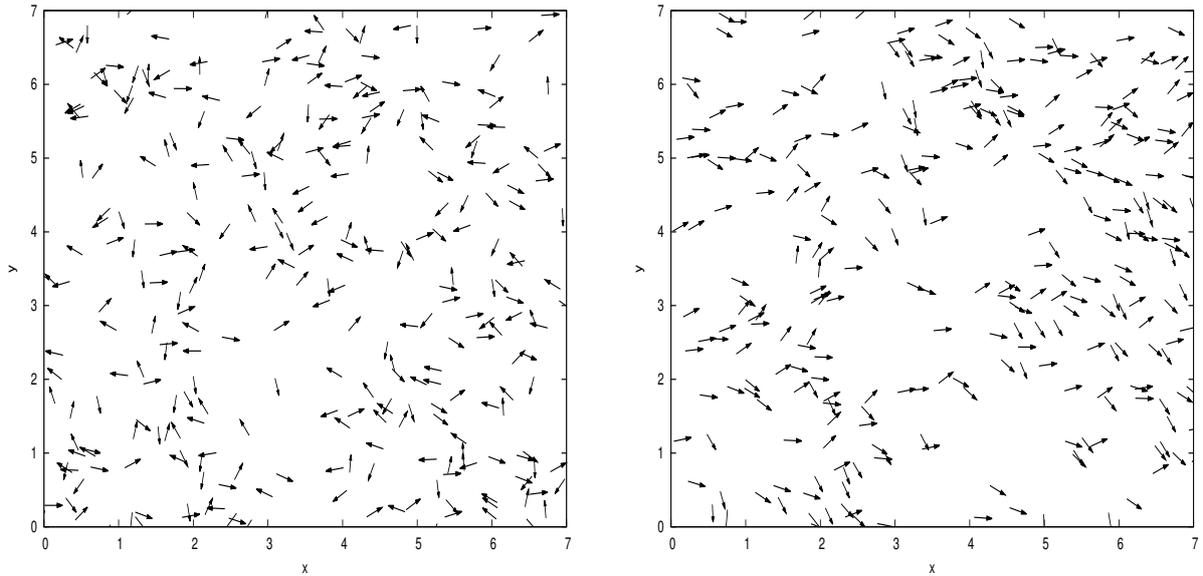


Figura 3.1: Da esquerda para à direita: Em $t = 0$, as partículas são distribuídas aleatoriamente na rede com velocidades aleatórias de módulo v_0 . Após 10^3 passos, o sistema apresenta alguma correlação, $\rho = 6, 12$ e $\eta = 2, 0$.

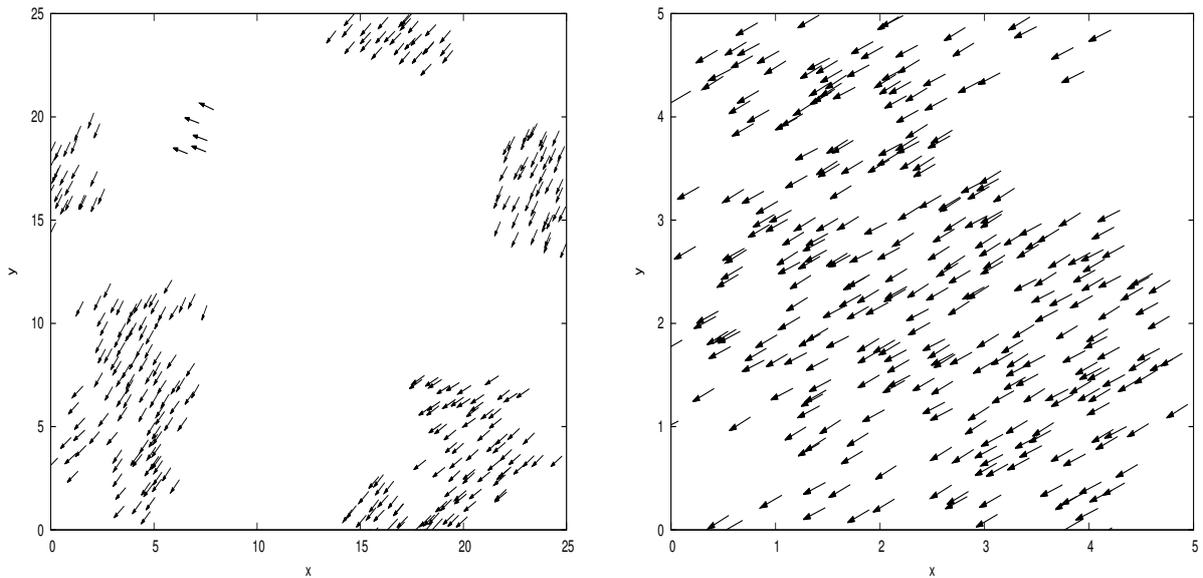


Figura 3.2: Da esquerda para à direita: Após 10^3 passos, para densidades e ruídos pequenos temos a formação de grupos, $\rho = 0, 48$ e $\eta = 0, 1$. No caso densidades maiores e ruídos pequenos o movimento é ordenado, $\rho = 12$ e $\eta = 0, 1$.

Com o objetivo de reproduzir¹a transição ordem/desordem, caracterizada pelo com-

¹Não foi estudado detalhes da transição a partir de teorias de escalas para obter os expoentes críticos.

portamento do parâmetro de ordem $\phi(t) = \frac{1}{Nv_0} \left| \sum_i^N \vec{v}_i(t) \right|$, visto na Eq (2.1), analisamos a série temporal do parâmetro de ordem para alguns valores de η , buscando encontrar um comportamento estacionário para, a partir disso, realizar as medidas correspondentes. Foram analisados os casos $N = 40$, $N = 100$, $N = 400$ e $N = 800$ com uma densidade fixa de $\rho = 4$ e posteriormente discutido o efeito de diminuir para $\rho = 2$, mantendo $N = 800$. A Figura 3.3 mostra que o parâmetro de ordem em $t = 10^4$ para $N = 40$, encontra-se no estado estacionário. Dessa forma, obteve-se a distribuição do parâmetro de ordem $P(\phi)$ para alguns valores de η , medida a partir de $t = 10^4$ (estado estacionário), tomada sobre 10^5 medidas temporais de ϕ , como é visto também na Figura 3.3.

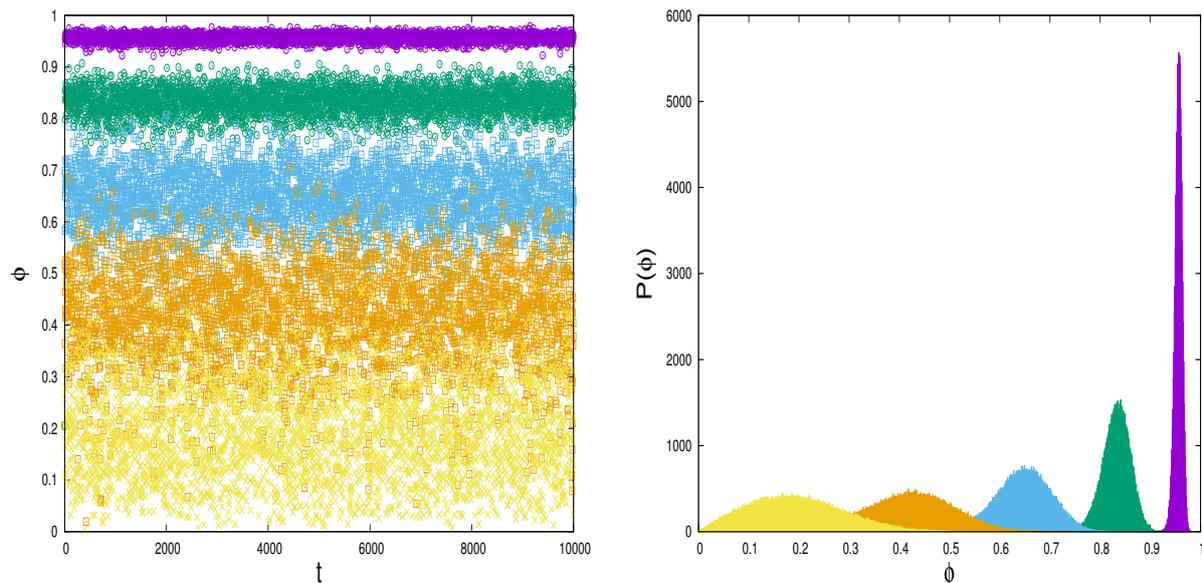


Figura 3.3: Série temporal do parâmetro de ordem ϕ e sua distribuição $P(\phi)$ no estado estacionário. Os valores de η são: 1 (roxo), 2 (verde), 3 (azul), 4 (laranja) e 5 (amarelo). Parâmetros fixos: $N = 40$ e $\rho = 4$.

Análogo ao caso $N = 40$, é visto na Figura 3.4, que em $t = 10^4$ o sistema, para $N = 100$, encontra-se no estado estacionário. Contudo, a distribuição, medida a partir do tempo que o sistema alcança o estado estacionário, sofreu um deslocamento para a esquerda, caracterizando o efeito de tamanho finito do sistema na medida do parâmetro de ordem ϕ . É visto claramente que para o mesmo valor de ruído, o parâmetro de ordem é um pouco menor que no caso anterior². Para $N = 400$ o sistema também encontra-se no estado estacionário em $t = 10^4$, contudo, é visto na Figura 3.5, uma série temporal com uma correlação temporal evidente³. A distribuição estacionária se desloca ainda mais para esquerda, o que mostra uma queda mais acentuada, em relação aos casos $N = 40$

²Caso estivéssemos definindo os expoentes críticos, seria necessário uma análise mais criteriosa das séries temporais.

³Este efeito é mais perceptível para ruídos mais altos (fase desordenada).

e $N = 100$, do valor do parâmetro de ordem com o aumento do sistema. A mesma abordagem foi realizada para o caso $N = 800$, o qual identificou-se que, da mesma forma que nos três casos anteriores, em $t = 10^4$ o sistema encontra-se no estado estacionário, como pode ser visto na Figura 3.6.

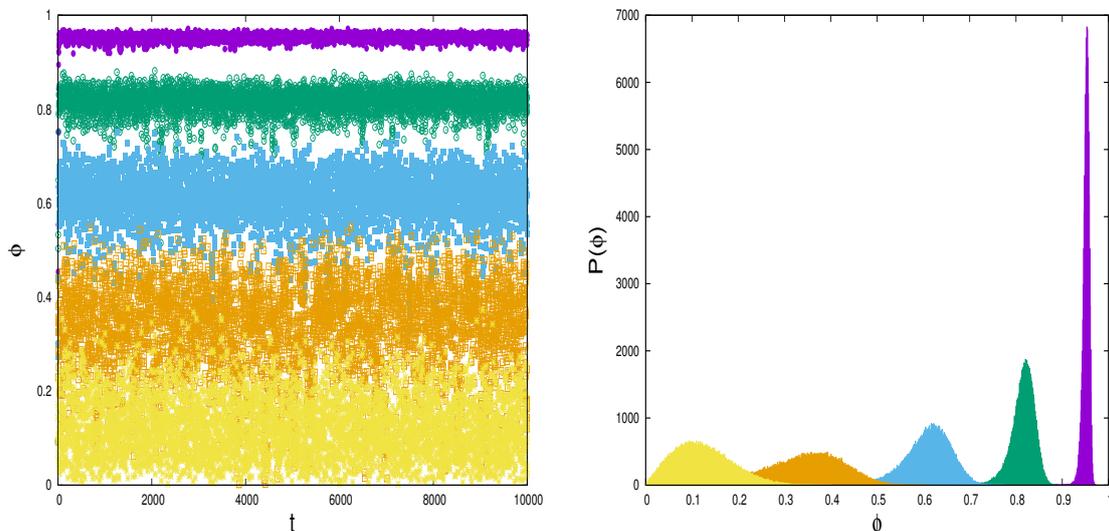


Figura 3.4: Série temporal do parâmetro de ordem ϕ e sua distribuição $P(\phi)$ no estado estacionário. Os valores de η são: 1 (roxo), 2 (verde), 3 (azul), 4 (laranja) e 5 (amarelo). Parâmetros fixos: $N = 100$ e $\rho = 4$.

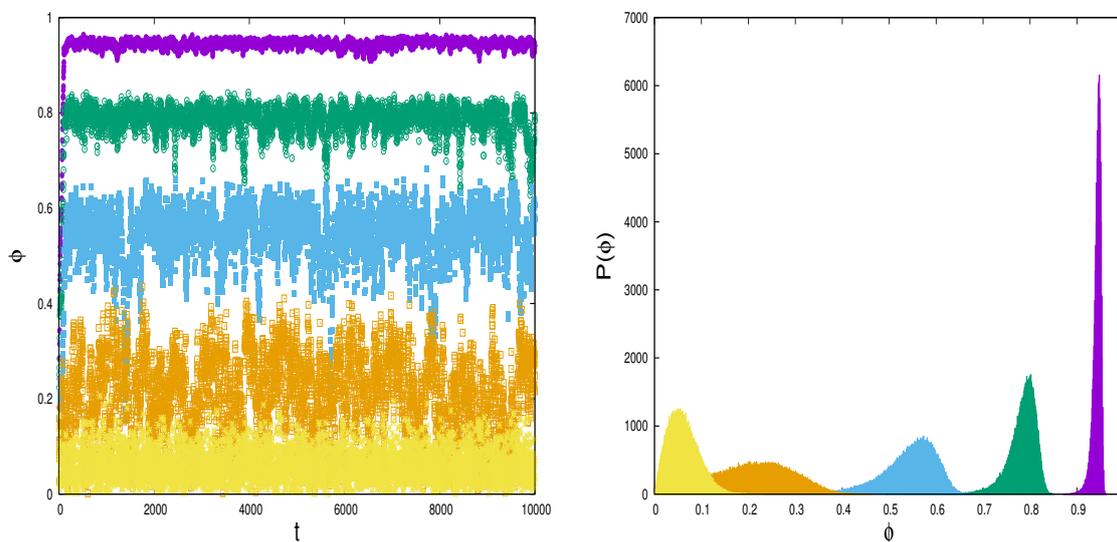


Figura 3.5: Série temporal do parâmetro de ordem ϕ e sua distribuição $P(\phi)$ no estado estacionário. Os valores de η são: 1 (roxo), 2 (verde), 3 (azul), 4 (laranja) e 5 (amarelo). Parâmetros fixos: $N = 400$ e $\rho = 4$.

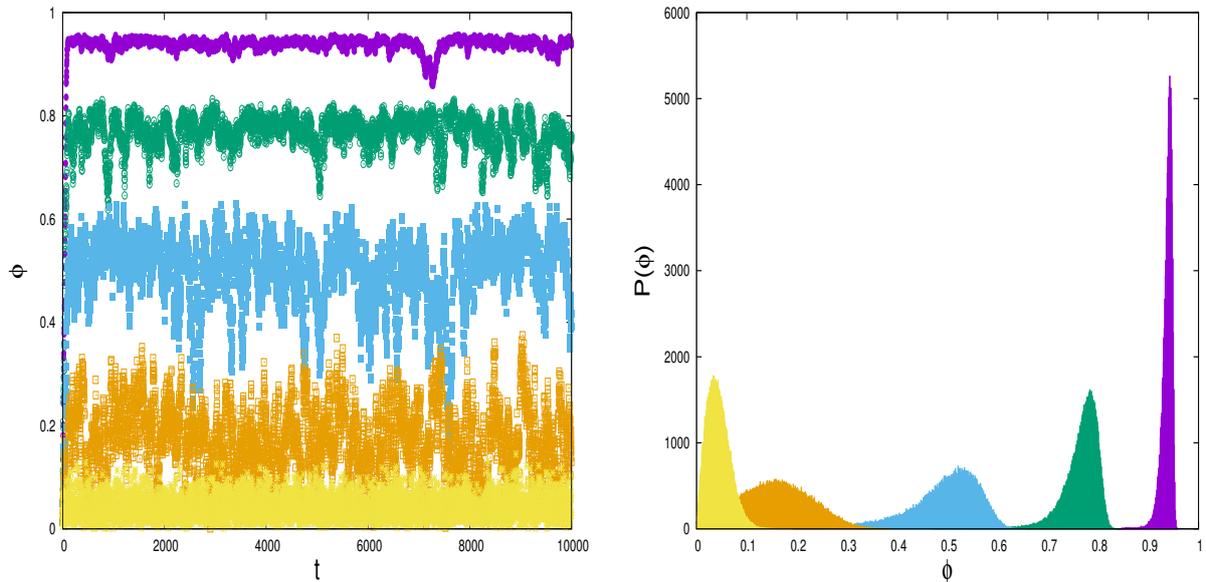


Figura 3.6: Série temporal do parâmetro de ordem ϕ e sua distribuição $P(\phi)$ no estado estacionário. Os valores de η são: 1 (roxo), 2 (verde), 3 (azul), 4 (laranja) e 5 (amarelo). Parâmetros fixos: $N = 800$ e $\rho = 4$.

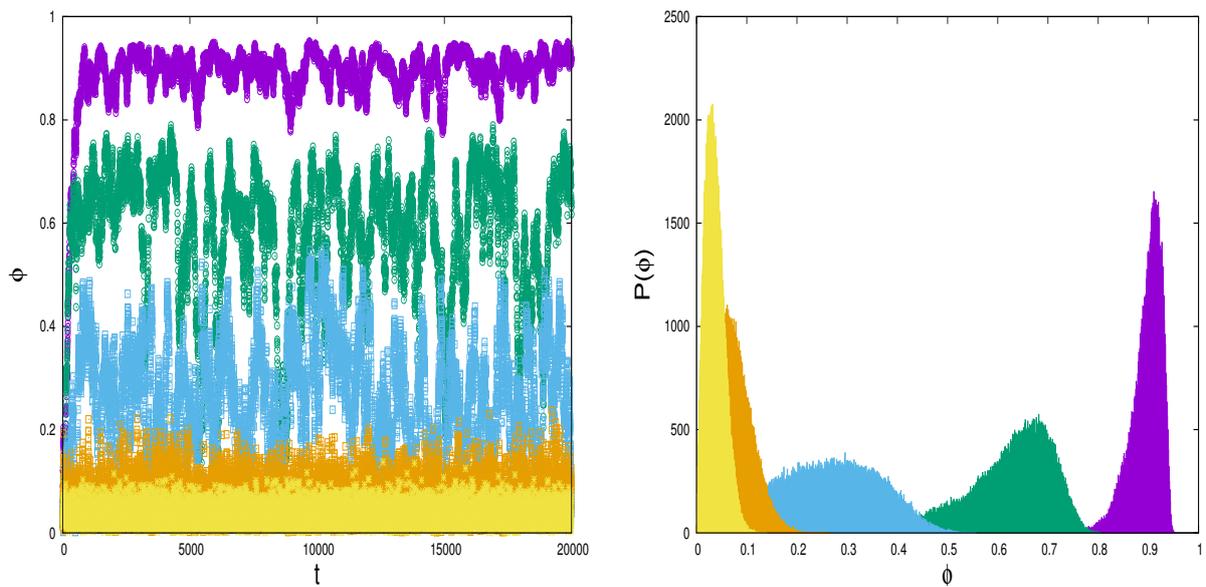


Figura 3.7: Série temporal do parâmetro de ordem ϕ e sua distribuição $P(\phi)$ no estado estacionário. Os valores de η são: 1 (roxo), 2 (verde), 3 (azul), 4 (laranja) e 5 (amarelo). Parâmetros fixos: $N = 800$ e $\rho = 2$.

Como observa-se na Figura 3.7, diminuir a densidade faz com que o sistema demore mais para chegar no estado estacionário. Isso é razoável, pois à medida que o tamanho

da caixa aumenta, como observado na Figura 3.2, para um mesmo número de partículas e uma mesma intensidade de ruído, formam-se localmente grupos, ao invés de um movimento global, o qual faz com que o sistema demore mais para chegar a um estado estacionário. Para densidades mais baixas as partículas estão muito próximas e já se alinham imediatamente, proporcionando um menor tempo dos efeitos transientes. Além disso, como observado na Figura 3.7, a distribuição estacionária de 10^5 medidas temporais, medida a partir de $t = 2 \cdot 10^4$ (estado estacionário), mostra que diminuir a densidade, causa um decréscimo no valor do parâmetro de ordem, ou seja, sistemas menos densos são mais desordenados.

A partir de todas as considerações feitas anteriormente, a respeito das séries temporais e da distribuição do parâmetro de ordem no estado estacionário, foi possível medir ϕ para $\rho = 4$, como é observado na Figura 3.8. Todas as medidas de ϕ foram realizadas desprezando os efeitos transientes, sendo realizadas no estado estacionário sobre cinco realizações (sistema inicializado com sementes distintas) do mesmo ruído onde cada ponto corresponde uma média (sobre as amostras) dessas realizações. As barras de erro não foram colocadas, pois são menores que os símbolos que representam um dado ponto do gráfico.

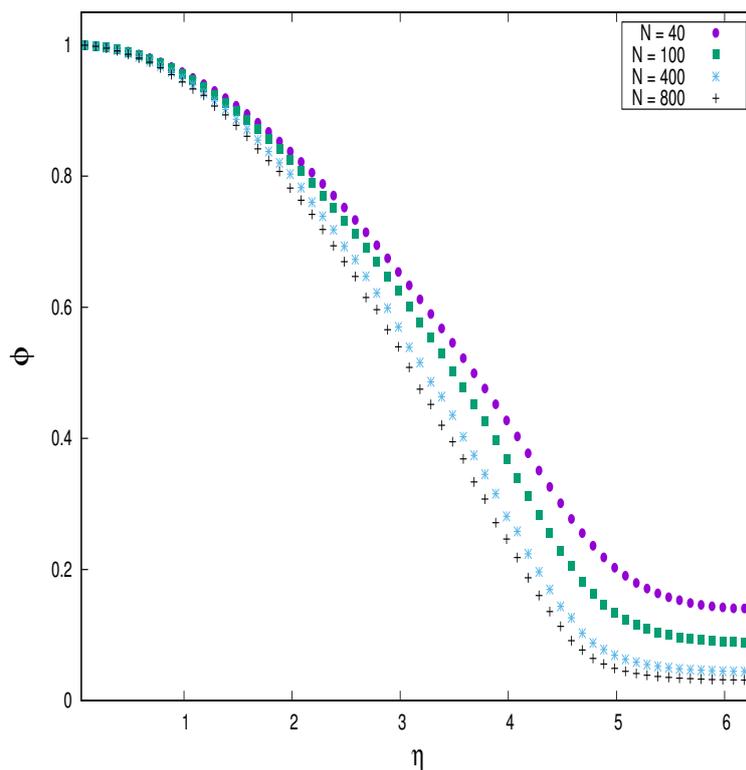


Figura 3.8: Parâmetro de ordem ϕ em função da intensidade do ruído η , com $\rho = 4$.

Na Figura 3.8, observa-se a transição de fase, o qual é aparentemente contínua, ou seja, de segunda ordem [17, 18]. Como observado nas séries temporais e nos gráficos das distribuições estacionárias, a transição é afetada quantitativamente com o aumento do número de partículas no sistema. Apesar de qualitativamente os resultados obtidos se mostrarem consistentes com os resultados de Vicsek [12], obtidos de acordo com a metodologia discutida por ele no artigo, quantitativamente não obtiveram-se os mesmos resultados que ele. É observado, em nossos resultados, que o parâmetro de ordem ϕ para todos os tamanhos de sistemas utilizados e para uma dada intensidade de ruído η , encontra-se maior. Portanto, tal questão ainda permanece em debate para futuros esclarecimentos.

Foi reproduzido brevemente a adaptação de Cziráok [13], Eq (2.5) repetida abaixo, em que um campo externo \vec{h} é inserido no MV com o objetivo de identificar possíveis analogias com os modelos da mecânica estatística de equilíbrio (XY, por exemplo) quando um campo é aplicado, quebrando alguma simetria do sistema.

$$\begin{aligned}\theta_n(t+1) &= \arg \left[\alpha \sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) + h\vec{e} \right] + \eta\xi_n(t). \\ \vec{h} &= h\vec{e}, \\ \vec{e} &= \cos(\theta_h)\vec{i} + \sin(\theta_h)\vec{j}.\end{aligned}$$

A direção escolhida não influencia no comportamento do parâmetro de ordem ϕ , sendo que apenas sua intensidade h altera sua forma. Assim, a direção escolhida para o campo foi $\theta_h = \pi/4$. O termo que indica a intensidade do sinal da vizinhança (tendência de alinhamento) usado por Cziráok foi $\alpha = 1$. Na Figura 3.9 é visto o efeito do campo externo na configuração do sistema. Para valores baixos de ruído, o sistema se alinha ao campo, enquanto que, para altos valores de ruído é observado uma configuração desordenada. O parâmetro de ordem foi medido como anteriormente, ou seja, a partir do estado estacionário $t = 10^4$, uma média de 10^5 medidas de ϕ foi realizada para um determinado valor de η . Os detalhes são análogos aos realizados anteriormente, a partir da análise das séries temporais e das distribuições estacionárias, os quais não serão mostrados aqui. À medida que a intensidade do campo h cresce, o valor de ϕ cresce até atingir um valor máximo. O aumento da intensidade do ruído para um mesmo valor de h fornece um decréscimo no parâmetro de ordem, como é observado na Figura 3.10. O efeito do campo externo é mais facilmente visto para altos valores da intensidade do ruído, pois a distribuição estacionária do parâmetro de ordem para um dado valor de intensidade do ruído η alto está centrada em um valor baixo de ϕ e sofre um deslocamento considerável para a direita, ou seja, o sistema torna-se mais ordenado, como é observado na Figura 3.11. Para valores baixos do ruído, o sistema já se encontra em um estado ordenado e o efeito do campo torna-se despercebido, pois o parâmetro de ordem não leva em conta o sinal da velocidade normalizada média global, mas apenas seu módulo.

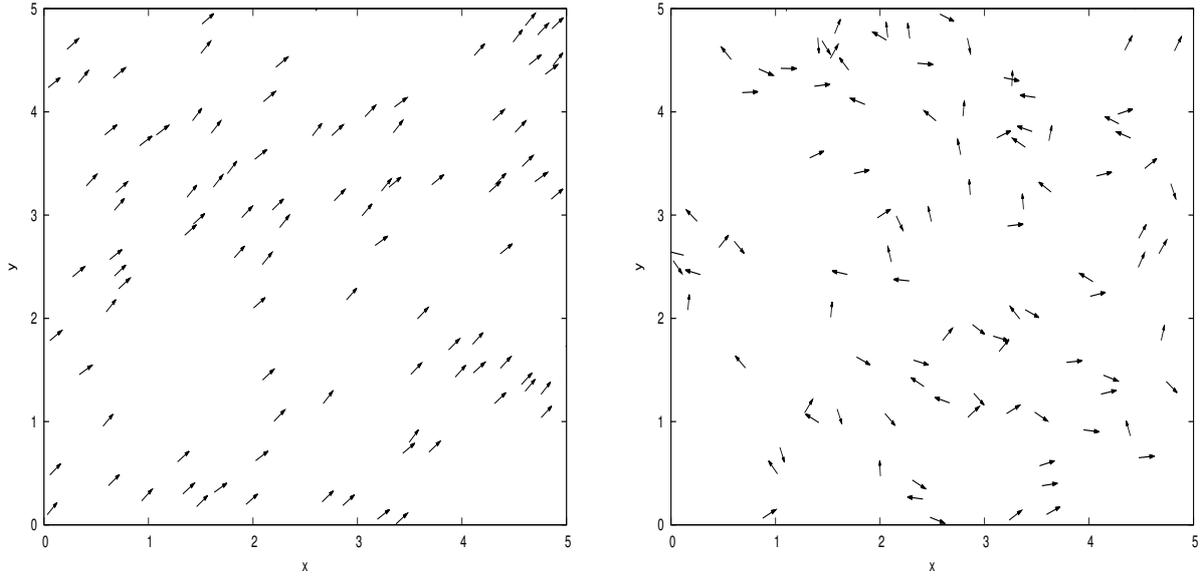


Figura 3.9: Da esquerda para à direita. Após 10^4 passos, para pequenos valores de intensidade de ruído $\eta = 0,3$ a influência do campo predomina e o sistema se alinha ao campo. No caso de um valor alto da intensidade do ruído $\eta = 4,5$ a influência do campo se torna pequena e o sistema apresenta um comportamento desordenado. Parâmetros fixos: $\rho = 4$, $N = 100$, $h = 1$ e $\alpha = 1$.

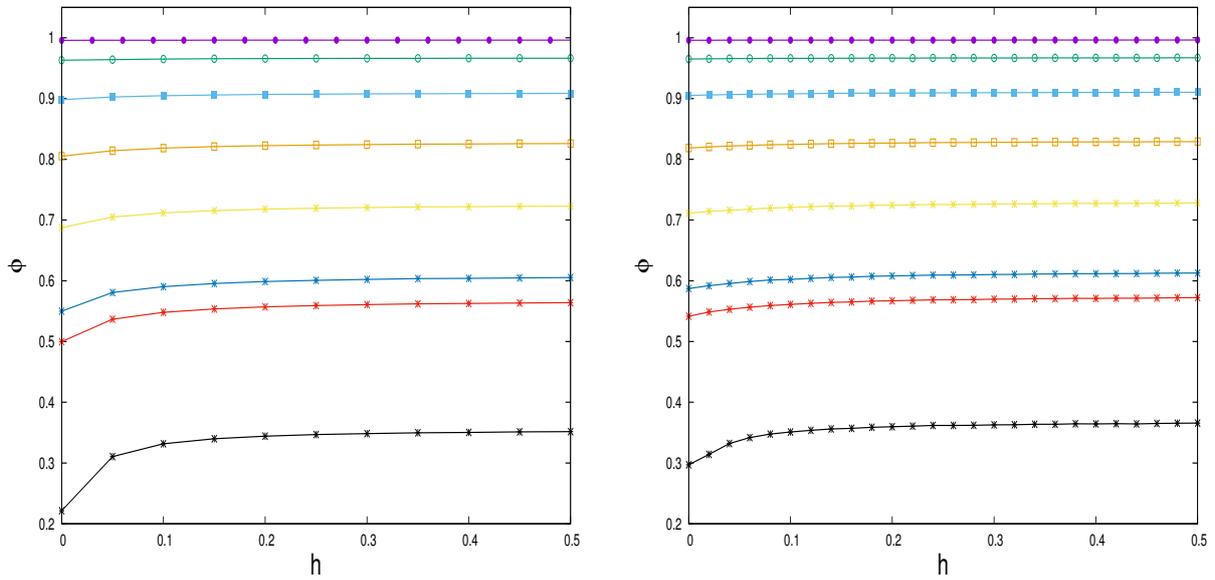


Figura 3.10: Parâmetro de ordem ϕ em função da intensidade do campo externo h para $N = 100$ e $N = 40$ (da esquerda para direita) com $\eta : 0,3; 0,9; 1,5; 2,1; 2,7; 3,3; 3,5$ e $4,5$ (curvas de cima para baixo, respectivamente). Parâmetros fixos: $\rho = 4$ e $\alpha = 1$.

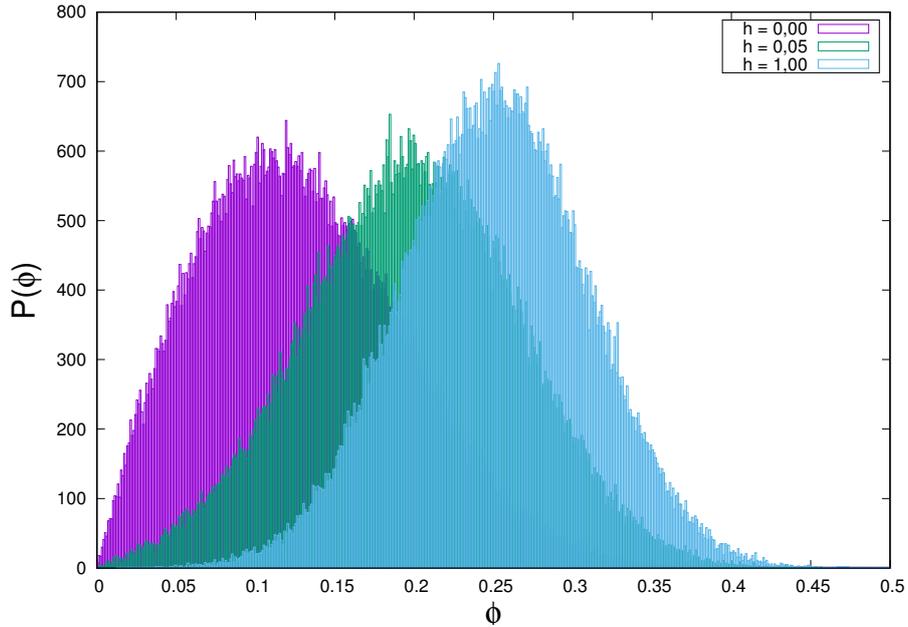


Figura 3.11: Distribuição do parâmetro de ordem ϕ , para três casos de intensidade do campo h . Sendo $\rho = 4$, $N = 100$, $\eta = 5,0$ e $\alpha = 1$.

No trabalho de Czirók ele não analisou o efeito da mudança do parâmetro α na dinâmica do sistema. Nem verificou as possíveis situações em que o sistema alinha-se ou não ao campo dependendo da intensidade α e da intensidade do campo h e, por isso, não foi realizado discutido aqui. Tal questão ainda poderá voltar a debate com mais detalhes em futuros estudos sobre movimento de MA.

3.2 Simulações do Modelo de Grégoire

Após a implementação do modelo de Vicsek, onde os animóides eram partículas sem dimensão, e portanto, sem um volume de exclusão, implementamos o modelo de Grégoire [26], inicialmente sem volume de exclusão e interação de curto alcance. Contudo, a interpretação para o ruído estocástico altera-se, sendo portanto, vetorial (extrínseco), ou seja,

$$\theta_n(t+1) = \arg \left[\alpha \sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) + \eta \gamma_n(t) \vec{\xi}_n(t) \right].$$

Nessa interpretação, a intensidade do sinal da vizinhança α torna-se relevante na transição de fase, o qual não era no MV devido ao fato de que o argumento da velocidade média da vizinhança não dependia de α . Dessa forma, a intensidade α determinará se uma dada partícula seguirá corretamente sua vizinhança e, portanto, produzir um movimento ordenado. Como discutido no capítulo anterior, tal mudança de interpretação a respeito do tipo de ruído estocástico o qual a partícula esta sujeita, altera a forma da

transição de fase do estado desordenado para o estado ordenado à medida que altera-se a intensidade do ruído η . Assim, simulações foram realizadas da mesma forma que no MV (inicialização, medidas e etc), entretanto, alterando-se o ruído intrínseco para o ruído extrínseco. De forma análoga ao MV, observou-se a série temporal do parâmetro de ordem ϕ para uma dada intensidade η , até o sistema atingir o estado estacionário. A partir de $t = 10^4$, uma média sobre 10^5 medidas de ϕ foi feita, o qual tomou-se como sendo o valor do parâmetro de ordem para o respectivo valor de intensidade do ruído η . Na Figura 3.12 é visto, claramente, uma transição descontínua na interpretação de ruído extrínseco, o qual não era óbvia no caso intrínseco. O efeito da intensidade do sinal de

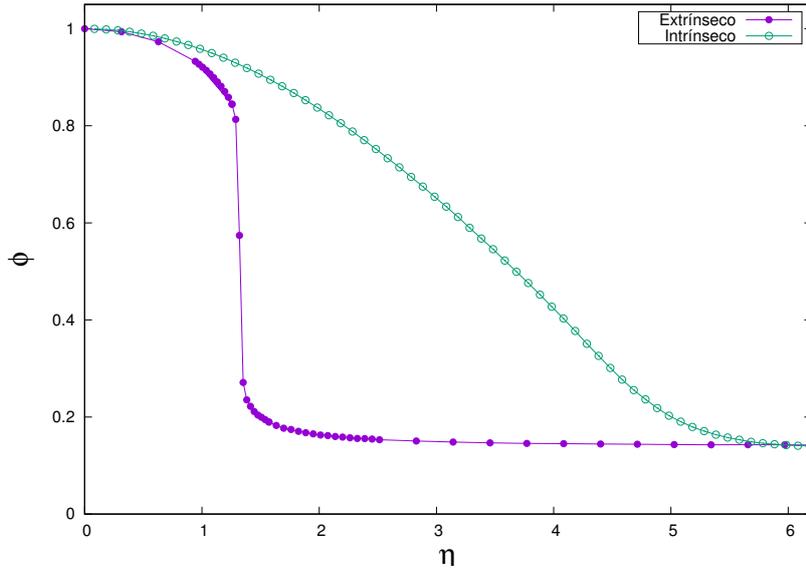


Figura 3.12: Parâmetro de ordem ϕ em função da intensidade do ruído η . Com $\rho = 4$, $N = 40$ e $\alpha = 10$.

alinhamento, agora torna-se importante, pois nessa interpretação onde o ruído não é uma “livre vontade” da partícula em querer não seguir a orientação média dos seus vizinhos (intrínseco), mas uma limitação em identificar tal orientação (extrínseco), a intensidade de tal sinal influencia onde ocorrerá a transição de fase, como é observado na Figura 3.13.

Há alguns sistemas de MA que é necessário um volume de exclusão (“*hardcore*”), bem como, alguma interação de curto alcance que torne o sistema coeso, tal como Grégoire propôs [26], ou seja,

$$\theta_n(t+1) = \arg \left[\alpha \sum_{j \sim r_0} \vec{v}_j(t) + \beta \sum_{j \sim n} \vec{f}_{nj}(t) + \eta \gamma_n(t) \vec{\xi}_n(t) \right].$$

Dessa forma, N partículas foram inicialmente colocadas em uma pequena região quadrada de lado $L/10$ próxima ao centro da rede bidimensional de lado L sujeitas a condições de contorno periódicas e a um ruído de intensidade η constante (extrínseco). Além disso,

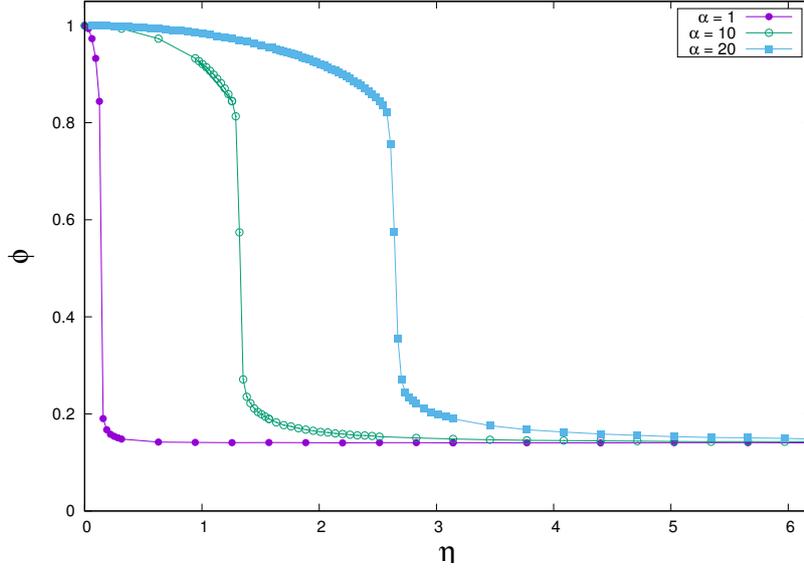


Figura 3.13: Parâmetro de ordem ϕ em função da intensidade do ruído η (extrínseco) para três casos da intensidade do sinal da vizinhança α . Com $\rho = 4$ e $N = 40$.

utilizando a mesma abordagem de Vicsek, as partículas foram inicializadas com velocidades de magnitude fixa v_0 , orientadas aleatoriamente. Os parâmetros utilizados são vistos na tabela 3.1.

Tabela 3.1: Tabela com os parâmetros usados nesse capítulo.

Δt	v_0	r_{alc}	r_{har}	r_{eq}	r_c	η
1,00	0,05	1,0	0,9	0,7	0,2	0,01

Como discutido no capítulo anterior, esse sistema apresenta fases sólida/líquida/gasosa, bem como, movente e não-movente. O que define em qual estado o sistema se encontra são os parâmetros α , β e η . Como é visto na Figura 3.14, fixando o valor de $\alpha = 0,05$ e variando-se a intensidade da força β , identifica-se três fases características: gasosa, líquida e sólida. Os três estados possuem uma fase movente (ordenado) e uma fase não-movente (desordenado). Nesse trabalho, mostraram-se apenas resultados para o caso em que o sistema esta em uma fase sólida porque estamos somente interessados em aspectos da dinâmica de um agregado de MA.

A fase movente e não-movente é devida a intensidade do sinal da vizinhança α . Para valores suficientemente pequenos de α o sólido formado move-se pouco, pois as velocidades individuais das partículas que constitui o sólido ou agregado, movem-se pouco alinhadas, e portanto, o momentum global torna-se pequeno. Utilizando $\alpha = 0,01$ e $\beta = 1,0$ é observado um sólido não-movente em dois instantes de tempos, como visto na Figura 3.15. Aumentando-se a intensidade α , o agregado passa a se mover com uma velocidade que torna possível identificar uma fase movente. Assim, utilizando $\alpha = 1,0$ e $\beta = 0,1$

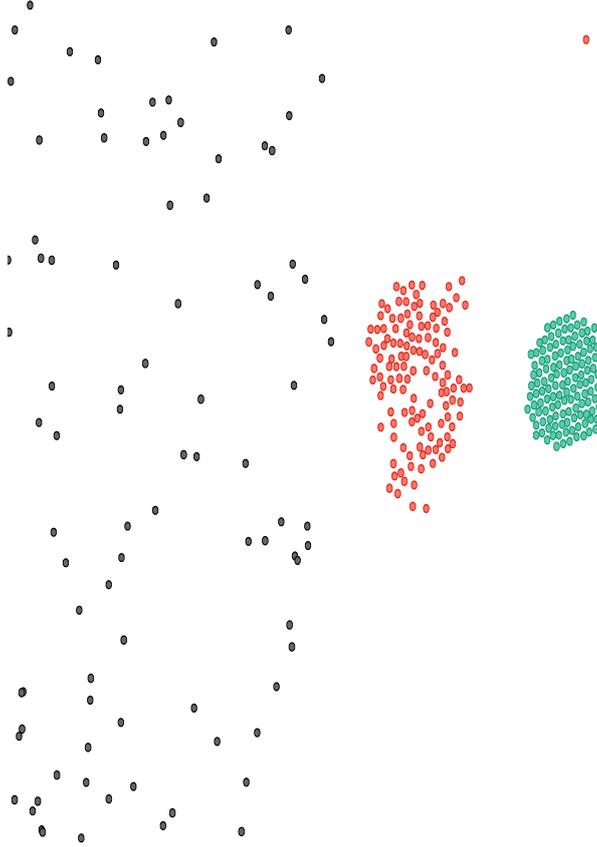


Figura 3.14: *Snapshot* em $t = 10^4$. Da esquerda para direita: fase gasosa $\beta = 0$, fase líquida $\beta = 0,01$ e fase sólida $\beta = 0,1$. Parâmetros fixos: $N = 128$, $L = 32$ e $\alpha = 0,05$.

é observado um sólido movente em dois instantes de tempos, como observado na Figura 3.15.

Como discutido no capítulo anterior, o agregado em tal modelo devido ao caráter estocástico do ruído, realiza um movimento difusivo para longos intervalos de tempo, ou seja, o deslocamento quadrático médio $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ do centro de massa (CM) do agregado segue um comportamento $\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t^\delta$. Para verificar isso, mediu-se $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ utilizando $\beta = 0,1$ e $\alpha = 0,01$ sendo encontrado que $\delta \sim 1$, como visto na Figura 3.16. Nesse caso, o sólido está na fase não-movente, ou seja, para grandes intervalos de tempo $t \rightarrow \infty$, sabe-se que ele permanece dentro da rede e a condição de contorno imposta não atrapalha a medida.

Da mesma maneira que no MV, aplicou-se um campo externo de intensidade h , e verificou-se como o agregado na fase não-movente se comporta com o campo. Primeiramente um campo foi aplicado na diagonal e no sentido $\theta_h = \frac{2\pi}{3}$, sendo visto que o agregado move-se na direção desse campo ao longo do tempo, como observado na Figura 3.17. Posteriormente, foi testado uma outra direção e sentido de aplicação do campo -

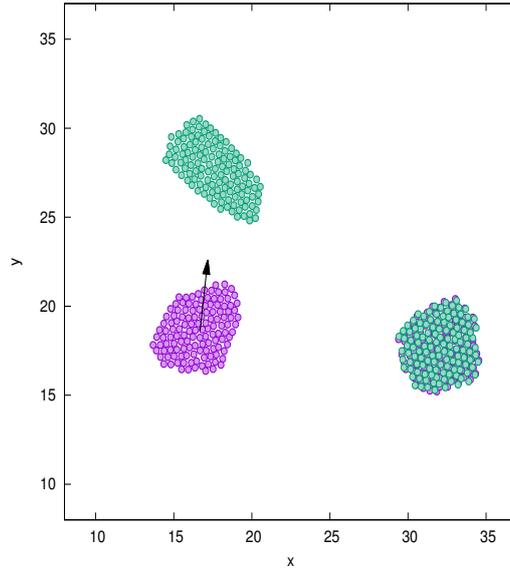


Figura 3.15: Da esquerda para direita: Sólido Movente, *snapshots* de dois instantes de tempo separados por 7000 passos temporais (seta aponta para configuração final) com $\alpha = 1, 0$. Sólido Não-Movente, *snapshots* de dois instantes de tempo separados por 7000 passos temporais (sobrepostos) com $\alpha = 0, 01$. Parâmetros fixos: $N = 128$, $L = 36$ e $\beta = 0, 1$.

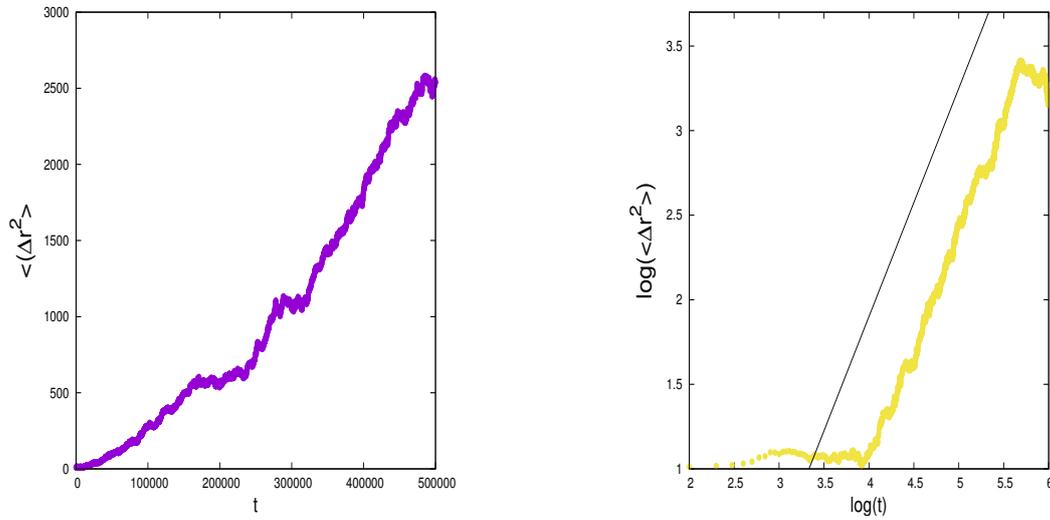


Figura 3.16: Da esquerda para direita: O deslocamento quadrático médio do CM $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ do sólido não-movente em função do tempo com $\alpha = 0, 01$. O $\log(\langle \Delta r^2(t) \rangle)$ em função de $\log(t)$ (reta indicando a inclinação). Parâmetros fixos: $N = 128$, $L = 32$ e $\beta = 0, 1$.

um campo na horizontal e no sentido $\theta_h = 0$. De forma análoga, também foi observado o mesmo processo onde o agregado não móvel, passa a se mover alinhado na direção e

sentido de \vec{h} (migração).

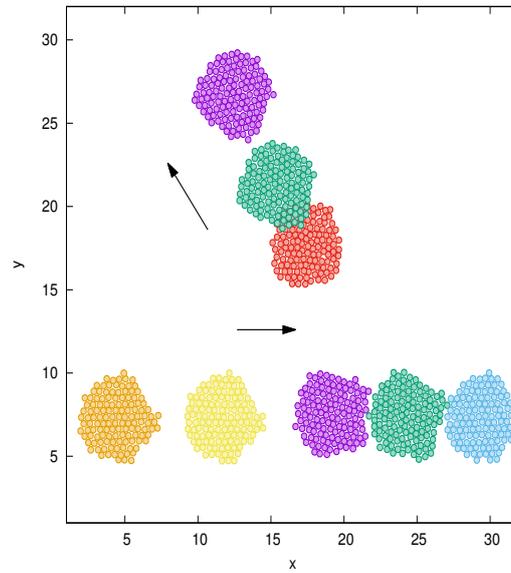


Figura 3.17: Campo na diagonal aplicado a um sólido não-movente, *snapshots* de três instantes de tempo separados por 1000 passos temporais (seta na direção e sentido do campo) com $h = 1, 0$. Campo na horizontal aplicado a um sólido não-movente, *snapshots* de cinco instantes de tempo separados por 1000 passos temporais (seta na direção e sentido do campo) com $h = 5, 0$. Parâmetros fixos: $N = 128$, $L = 32$, $\beta = 1, 0$ e $\alpha = 0, 01$.

Capítulo 4

Conclusões e Perspectivas

Modelos mínimos para descrever as principais características do movimento coletivo de matéria ativa foram trabalhados, observando-se que, a tendência de alinhamento entre vizinhos e o movimento persistente individual são os fatores essenciais para a existência de movimentos coletivos ordenados. Nas simulações do modelo de Vicsek [12], analisamos as séries temporais do parâmetro de ordem e foi visto que um estado estacionário é alcançado. As medidas do parâmetro de ordem, foram feitas no estado estacionário, onde verificou-se uma transição de fase aparentemente contínua, o qual depende do número de partículas que formam o sistema para uma densidade fixa. Além do número de partículas, constatou-se que a densidade do sistema influencia se o sistema se encontrará em um estado ordenado ou desordenado para uma dada intensidade de ruído η . Simulações do modelo de Vicsek com a existência de um campo externo também foram realizadas, onde observa-se que o parâmetro de ordem é afetado à medida que aumenta-se a intensidade h do campo para diversos valores de intensidade do ruído. Verificou-se que o sistema se alinha na direção do campo quando a intensidade do ruído é baixa e permanece em um estado desordenado quando a intensidade é alta.

Analisamos o efeito da mudança na interpretação do ruído, o qual era intrínseco no modelo introduzido por Vicsek. Utilizando o ruído vetorial extrínseco, proposto por Grégoire [26,27], verificou-se que a transição de um estado desordenado para um ordenado é claramente descontínua e depende, diferentemente do ruído intrínseco, da intensidade do sinal da vizinhança α . Além de analisar as mudanças que ocorrem ao introduzir um ruído extrínseco, verificou-se o efeito da introdução de um volume de exclusão e uma interação de curto alcance de intensidade β no modelo de Grégoire. Constatou-se através de simulações que, dependendo da intensidade da força β , o sistema pode estar três fases: sólido, líquido e gasoso. Além disso, analisou-se o conjunto de parâmetros α , β e η , que torna um agregado (sólido) móvel ou não móvel. Foi visto que o deslocamento quadrático médio do centro de massa do agregado $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ segue um comportamento $\langle \Delta r^2(t) \rangle \sim t^\delta$ para longos tempos com $\delta \sim 1$. Por fim, aplicando um campo externo a um agregado de matéria ativa na fase não-móvel, observa-se um movimento desse agregado na direção do

campo externo (migração).

Apesar dos modelos revisados nesse trabalho serem modelos mínimos, nos últimos surgiram inúmeras adaptações e aplicações. Estudos de caráter biológico [22], recentemente identificaram alguns sistemas celulares que formam agregados de diferentes tipos de células, as quais interagem de uma maneira diferente de uma célula para outra. Além disso, a forma que tais células interagem com algum campo externo (luz, por exemplo), provocando um movimento migratório na direção do campo, pode variar entre células de tipos diferentes, ocasionando assim, diversos fenômenos dinâmicos que envolvem o agregado celular. Por fim, partir dos conhecimentos obtidos e das ferramentas aprendidas para realizar esse trabalho, será possível posteriormente, desenvolver projetos de pesquisa mais avançados sobre o assunto, buscando um entendimento mais aprofundado sobre diversos sistemas de matéria ativa observados na natureza.

Referências Bibliográficas

- [1] SCHWEITZER, F. *Brownian agents and active particles: collective dynamics in the natural and social sciences*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [2] RAMASWAMY, S. Active matter. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2017, n. 5, p. 054002, 2017.
- [3] RAMASWAMY, S. The mechanics and statistics of active matter. 2010.
- [4] VICSEK, T.; ZAFEIRIS, A. Collective motion. *Physics Reports*, v. 517, n. 3-4, p. 71–140, 2012.
- [5] VOLFSON, D.; COOKSON, S.; HASTY, J.; TSIMRING, L. S. Biomechanical ordering of dense cell populations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 105, n. 40, p. 15346–15351, 2008.
- [6] YONG, E. Autonomous drones flock like birds. *Nature News*, doi, v. 10, 2014.
- [7] VÁSÁRHELYI, G.; VIRÁGH, C.; SOMORJAI, G.; TARCAI, N.; SZÖRÉNYI, T.; NEPUSZ, T.; VICSEK, T. Outdoor flocking and formation flight with autonomous aerial robots. In: . c2014. p. 3866–3873.
- [8] TARCAI, N.; VIRÁGH, C.; ÁBEL, D.; NAGY, M.; VÁRKONYI, P. L.; VÁSÁRHELYI, G.; VICSEK, T. Patterns, transitions and the role of leaders in the collective dynamics of a simple robotic flock. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2011, n. 04, p. P04010, 2011.
- [9] VICSEK, T. *Fluctuations and scaling in biology*. Oxford University Press New York, 2001.
- [10] VICSEK, T. A question of scale. *Nature*, London, v. 411, n. 6836, p. 421, 2001.
- [11] ZAFEIRIS, A.; VICSEK, T. *Why we live in hierarchies?: A quantitative treatise*. Springer, 2017.
- [12] VICSEK, T.; CZIRÓK, A.; BEN-JACOB, E.; COHEN, I.; SHOCHET, O. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical review letters*, v. 75, n. 6, p. 1226, 1995.

- [13] CZIRÓK, A.; STANLEY, H. E.; VICSEK, T. Spontaneously ordered motion of self-propelled particles. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 30, n. 5, p. 1375, 1997.
- [14] GODOLPHIM, P. C. Movimentos coletivos no reservatório e largura de canal determinam modos de propagação celular. 2017.
- [15] JIANG, H.-R.; YOSHINAGA, N.; SANO, M. Active motion of a janus particle by self-thermophoresis in a defocused laser beam. *Physical review letters*, v. 105, n. 26, p. 268302, 2010.
- [16] NAGY, M.; AKOS, Z.; BIRO, D.; VICSEK, T. Hierarchical group dynamics in pigeon flocks. *Nature*, London, v. 464, n. 7290, p. 890, 2010.
- [17] SALINAS, S. R. *Introdução a física estatística vol. 09*. Edusp, 1997.
- [18] REICHL, L. E. *A modern course in statistical physics*. John Wiley & Sons, 2016.
- [19] REYNOLDS, C. W. Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. In: . c1987. v. 21. p. 25–34.
- [20] ATTANASI, A.; CAVAGNA, A.; DEL CASTELLO, L.; GIARDINA, I.; GRIGERA, T. S.; JELIĆ, A.; MELILLO, S.; PARISI, L.; POHL, O.; SHEN, E. et al. Superfluid transport of information in turning flocks of starlings. *arXiv preprint arXiv:1303.7097*, 2013.
- [21] REYNOLDS, C. Boids background and update. <http://www.red3d.com/cwr/boids/>, 2001.
- [22] BEATRICE, C. P. Análise da segregação celular: modelos estatísticos e simulações. 2014.
- [23] SHIRAZI, M. J.; ABAID, N. Comparing the effects of intrinsic and extrinsic noise on the vicsek model in three dimensions. In: . c2017. p. V002T14A010–V002T14A010.
- [24] BRAMWELL, S.; FORTIN, J.-Y.; HOLDSWORTH, P.; PEYSSON, S.; PINTON, J.-F.; PORTELLI, B.; SELKITO, M. Magnetic fluctuations in the classical xy model: The origin of an exponential tail in a complex system. *Physical Review E*, v. 63, n. 4, p. 041106, 2001.
- [25] BAGLIETTO, G.; ALBANO, E. V. Computer simulations of the collective displacement of self-propelled agents. *Computer Physics Communications*, v. 180, n. 4, p. 527–531, 2009.

- [26] GRÉGOIRE, G.; CHATÉ, H.; TU, Y. Moving and staying together without a leader. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 181, n. 3-4, p. 157–170, 2003.
- [27] GRÉGOIRE, G.; CHATÉ, H. Onset of collective and cohesive motion. *Physical review letters*, v. 92, n. 2, p. 025702, 2004.
- [28] PIMENTEL, J. A.; ALDANA, M.; HUEPE, C.; LARRALDE, H. Intrinsic and extrinsic noise effects on the phase transition of swarming systems and related network models. *arXiv preprint arXiv:0802.3879*, 2008.