



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

JESSÉ PEREIRA DE OLIVEIRA

TRANSPORTE EM UM SISTEMA
BINÁRIO DE PARTÍCULAS
AUTO-PROPELIDAS

FORTALEZA

2015

JESSÉ PEREIRA DE OLIVEIRA

**TRANSPORTE EM UM SISTEMA
BINÁRIO DE PARTÍCULAS
AUTO-PROPELIDAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Wandemberg Paiva
Ferreira

FORTALEZA

2015

JESSÉ PEREIRA DE OLIVEIRA

**TRANSPORTE EM UM SISTEMA
BINÁRIO DE PARTÍCULAS
AUTO-PROPELIDAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Cláudio Nunes Carvalho
Instituto Federal do Ceará (IFCe)

Prof. Dr. Diego Lucena Camarão
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Setorial de Física

Oliveira, Jessé Pereira de.

Transporte em um sistema binário de partículas auto-propelidas / Jessé Pereira de Oliveira. – 2015.

55 p.;il.

Dissertação de Mestrado - Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Centro de Ciências, Fortaleza, 2015.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientação: Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira

1. fluidos complexos. 2. matéria ativa. 3. não-equilíbrio. 4. simulação computacional. 5. . I.

*A Deus,
à minha esposa,
Ismar Andrade de
Alencar Oliveira,
à minha mãe,
M^ª Elizart Pereira
de Souza,
e
a toda a minha
família*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, acima de tudo, pelas forças concedidas na luta de cada dia durante todo o período do curso de mestrado.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira pelo apoio e pela orientação no curso de mestrado do departamento de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, onde obtive muitos conhecimentos e experiências como estudante e pesquisador da área.

À minha esposa Ismar Andrade Alencar Oliveira pela compreensão e pelo encorajamento durante todo o percurso que, mesmo nos momentos mais difíceis, não me deixou desanimar e sempre me incentivou a prosseguir.

À toda minha família e, em especial, à minha mãe, M^a Elizart Pereira de Souza, que durante toda a minha vida estudantil serviu como porto seguro em todos os momentos de dificuldade, sempre me apoiando e incentivando.

Ao Prof. Dr. Fabrício Potiguar, pela orientação e paciência em me mostrar os atalhos da pesquisa e ensinar-me dedicação e perseverança.

Aos meus amigos (Wendell, Thiago, André, Everton, Aesley, Jorge Luiz e Diego) do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará por termos estudado cooperativamente, pelo companheirismo e momentos de alegria.

RESUMO

Originalmente introduzidas por T. Vicsek et al. [Phys. Rev. Lett. 75, 1226 (1995)], partículas auto-propelidas (PAP) possuem uma velocidade intrínseca constante que sofre variações em sua direção como resultados de perturbações externas (outras partículas ou meio) e são usadas para modelar sistemas que apresentam efeitos de aglomeração. O conceito de PAP é aplicado para descrever e entender efeitos dinâmicos de aglomeração em sistemas naturais, tais como microorganismos vivos (bactérias, vírus, etc) e colônias de indivíduos de que se movem em bandos (peixes, ovelhas, abelhas, etc) ou, produzidos artificialmente, como sistemas coloidais especialmente preparadas em laboratório. O estudo de PAP tem sua relevância em diversas áreas do conhecimento, tais como engenharia de materiais, medicina e ciências da natureza (física, química e biologia). Na maioria dos casos, o movimento coletivo tem um comportamento bastante diferenciado dos movimentos individuais dos componentes de um dado sistema. Assim, o movimento de um certo indivíduo é influenciado pela presença dos outros constituintes do sistema, alterando o seu comportamento geral, como consequência da interação direta entre eles. Desta forma, vemos a importância da investigação e entendimento do comportamento coletivo das PAP. Nesta dissertação, estudamos um sistema bidimensional binário de PAP na presença de obstáculos rígidos com geometria anisotrópica (semi-círculos) distribuídos na forma de uma rede quadrada. Além das interações partícula-partícula e partícula-obstáculo, o movimento individual de cada PAP sofre influência de um ruído branco. O objetivo é caracterizar o transporte de PAP através do substrato bidimensional na ausência de uma força externa propulsora. Apresentamos um estudo sistemático do movimento coletivo das PAP em função das velocidades das partículas, da intensidade do ruído que define o movimento estocástico das PAP, do tamanho dos obstáculos, da densidade de PAP e da separação entre os obstáculos. Devido a anisotropia dos obstáculos, surge um movimento coletivo espontâneo e ordenado na direção normal à superfície plana dos obstáculos, caracterizado por uma velocidade média não-nula para cada tipo de PAP na ausência de força externa e que é influenciado pelos parâmetros do sistema.

Palavras-chave: fluidos complexos. matéria ativa. não-equilíbrio. simulação computacional. .

ABSTRACT

Originally introduced by T. Vicsek *et al.* [Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995)], *Self Propelled Particles* (SPP) have an intrinsic constant speed which suffer variations in its direction as results of external perturbations (another particles or system) and are used to model systems that shows agglomeration effects. The concept of SPP is applied to describe and understand dynamic effects of agglomeration in natural systems, such as living micro-organisms (bacteria, virus, etc.) and colonies of individuals which move in flocks (fishes, sheep, bees) or, artificially produced, as colloidal systems especially prepared in laboratory. The study of SPP has its relevance in several areas of knowledge, such as material engineering, medicine and sciences of nature (physics, chemistry and biology). In most of cases, the collective motion has an well-differentiated behaviour of the individual motion of the components of a given system. So, the movement of a certain individual is affected by the presence of the other elements of the system, changing its general behaviour, as direct consequences of the direct interaction between them. In this way, we see the importance of investigation and understanding of collective motion of the SPP. Especially in this dissertation, we study a binary two-dimensional system of SPP subject to the presence of rigid obstacles with anisotropic geometry (semi-circles) distributed neatly in form of a square web. Beyond the particle-particle and particle-obstacle interaction, the individual movement of each SPP suffers influence of an white noise. The objective is characterize the transport of SPP trough the two-dimensional substratum in absence of an propeller external force. We present and systematic study of collective motion of SPP in function of the speed of the particles, of the noise intensity which defines the stochastic movement of SPP, of the size of the obstacles, of the SPP density e the separation between the obstacles. Due the anisotropy of the obstacles, arise an spontaneous and ordered collective motion in normal direction of the plane surface of the obstacles, characterized by an non-null mean speed for each type of SPP in absence of an external force which in affected by the system parameters.

Keywords: complex fluids. active matter. nonequilibrium. computer simulation. .

LISTA DE FIGURAS

1	Exemplos de Movimento Coletivo. (a) À esquerda, um cardume de peixes; (b) à direita uma multidão de pessoas.	p. 12
2	Exemplos de partículas auto-propelidas.(a) À esquerda, um gafanhoto, exemplo biológico de PAP; (b) à direita, uma partícula Janus, partícula artificial criada em laboratório.	p. 14
3	Exemplos de comportamento coletivo. (a) À esquerda, um cardume de sardinhas e suas estratégias de sobrevivência; (b) à direita, um bando de pássaros em migração.	p. 15
4	Exemplos de comportamento coletivo. Tanto as bactérias quanto os seres humanos podem se reunir com o objetivo de ataque a outros sistemas. .	p. 16
5	As figuras apresentam a posição das partículas e suas respectivas velocidades (setas) em estados de simulação diferentes para cada quadro. Figura extraída da Ref. 4.	p. 17
6	As figuras apresentam o parâmetro de ordem v_a como função do ruído (η) e da densidade (ρ). Figura extraída de [4]	p. 18
7	Fotografias obtidas de vários sistemas com características distintas. As figuras da esquerda representam as simulações para sistema térmico com oscilações browniana nos eixos x e y. As figuras da direita representam as simulações de sistemas atérmicos com somente oscilações angulares na velocidade. Acima, os sistemas com baixa densidade ($\phi = 0,39$) e abaixo, alta densidades ($\phi = 0,7$). Figura extraída da Ref. [6].	p. 21
8	Em ambos os experimentos as partículas tendem a se acumularem em torno dos obstáculos independente da sua forma geométrica.	p. 22
9	Em ambos os experimentos as partículas tendem a se acumularem em torno dos obstáculos independente da sua forma geométrica.	p. 23
10	Aplicações do método de separação de partículas na medicina	p. 24

11	Visão esquemática do sistema: a rede quadrada de obstáculos semicirculares (em amarelo) e as partículas auto-propelidas do tipo 1 (azul) e do tipo 2 (vermelho). As dimensões da partícula auto-propelida e do obstáculo são também mostradas.	p. 28
12	Exemplificação acerca do tamanho da caixa de simulação em função do tamanho dos obstáculos. Figura extraída de [20].	p. 29
13	Exemplo de uma caixa de simulações onde existem condições periódicas de contorno. Figura extraída de [20].	p. 31
14	Velocidade média das partículas do tipo 1 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 1$) em função do ruído para $\phi = 0.260$ e da proporção de partículas do tipo 1.	p. 33
15	Velocidade média das partículas do tipo 2 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 2$) em função do ruído para $\phi = 0.260$ e da proporção de partículas do tipo 2	p. 33
16	Velocidade média das partículas do tipo 1 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 1$) em função do ruído para $\phi = 0.520$ e da proporção de partículas do tipo 1.	p. 35
17	Velocidade média das partículas do tipo 1 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 1$) em função do ruído para $\phi = 0.520$ e da proporção de partículas do tipo 2.	p. 36
18	Velocidade média das partículas do tipo 1 em função da velocidade de auto-propulsão das partículas do tipo 2 (v_2) para diferentes valores da fração de ocupação total.	p. 37
19	Velocidade média das partículas do tipo 2 em função da sua velocidade de autopropulsão para diferentes valores da fração de ocupação total. A velocidade de autopropulsão das partículas do tipo 1 é $v_1 = 1$	p. 38
20	Velocidade média das partículas do tipo 1 e tipo 2 em função do tamanho dos obstáculos. $\phi_1 = \phi_2 = 0.5$	p. 39
21	Velocidades médias das partículas do sistema em função da interação com os obstáculos.	p. 40

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 12
1.1	Partículas auto-propelidas	p. 13
1.2	Comportamento coletivo (<i>Flocking</i>): O modelo de Vicsek.	p. 15
1.3	Dinâmica browniana angular	p. 20
1.4	Partículas auto-propelidas em uma cadeia de obstáculos semicirculares	p. 22
2	MODELO	p. 25
2.1	Sistema binário bidimensional	p. 27
2.2	Equações do movimento das partículas auto-propelidas	p. 30
3	RESULTADOS	p. 32
3.1	Velocidade média espontânea sem drive externo	p. 32
3.1.1	Procedimento variando as proporções de partículas em função do ruído.	p. 32
3.1.1.1	Resultados para $\phi = 0.260$	p. 32
3.1.1.2	Resultados para $\phi = 0.520$	p. 35
3.1.2	Procedimento para as diferenças de velocidades entre as partículas. Resultados para $\phi = 0.260$, $\phi = 0.520$ e $\phi = 0.780$	p. 37
3.1.3	Procedimento para as diferenças no tamanho dos obstáculos. Resultados para $\phi = 0.260$	p. 39
3.1.4	Procedimento para as diferenças na interação com os obstáculos (κ). Resultados para $\phi = 0.260$, $\phi = 0.520$ e $\phi = 0.780$	p. 40
4	CONCLUSÃO	p. 41

5 APÊNDICE	p. 42
5.1 Desenvolvimento de Einstein sobre o Movimento Browniano	p. 42
5.2 Desenvolvimento de Langevin sobre o Movimento Browniano	p. 49
REFERÊNCIAS	p. 54

1 INTRODUÇÃO

Para observar o movimento coletivo basta olhar através da janela e vê-los comumente na natureza: nos enxames de abelha, nos cardumes de peixes ou nos rebanhos de gado. Às vezes esquecemos de um dos mais interessantes comportamentos coletivos da natureza, o comportamento humano em conglomerados, tais como jogos de futebol, concertos musicais e *shopping centers* [11].

A compreensão acerca do comportamento coletivo tem grande importância e aplicabilidade nos dias atuais. Compreender o comportamento de cardumes no oceano pode nos possibilitar o aperfeiçoamento das técnicas de pesca já existentes e, bem como, desenvolver outras novas para auxiliar essa prática. O estudo do comportamento coletivo dos humanos nos permite desenvolver novos métodos de evacuação de grande multidão em *shopping centers* e grandes eventos, como concertos musicais, partidas de futebol, manifestações, etc [10].



(a) Cardume. Figura extraída de www.kanso.usc.edu acesso em 31-mar-2015 às 09:50



(b) Multidão. Figura extraída de www.minarforest.com/thread-2611.html acesso em 31-mar-2015 às 09:50

Figura 1: Exemplos de Movimento Coletivo. (a) À esquerda, um cardume de peixes; (b) à direita uma multidão de pessoas.

1.1 Partículas auto-propelidas

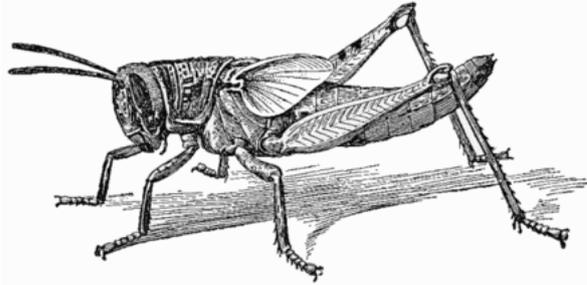
Um dos aspectos interessantes em um sistema com muitas partículas é que elas exibem um comportamento coletivo complexo durante o processo de transição de fase [1]. Estudos acerca desses sistemas no equilíbrio foram realizados ao longo das últimas décadas, com os quais, surgiram profundos conhecimentos acerca do comportamento dessas partículas interagentes. Alguns conceitos foram criados, tais como, dimensionalização, universalidade e renormalização, como resultado de uma ampla aplicabilidade desses sistemas em toda a física [2].

Há também um grande interesse em entender o rico comportamento de sistemas de partículas fora do equilíbrio. Alguns processos, tais como, agregação, fluxo viscoso, ou formações de padrões biológicos mostraram envolver *scaling* das grandezas geométricas e dinâmicas que caracterizam esses fenômenos [5]. A existência de um comportamento similar ao de uma transição de fase demonstrado em vários sistemas fora do equilíbrio, traz uma íntima similaridade com sistemas no equilíbrio, onde, as analogias com características básicas do equilíbrio representam contribuições particularmente importantes para o entendimento do comportamento complexo dos sistemas fora do equilíbrio [4].

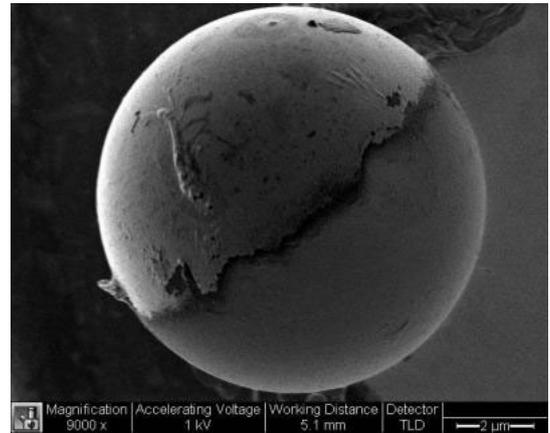
Dos vários tipos de sistemas fora do equilíbrio, queremos destacar um em particular: o sistema de partículas auto-propelidas (PAP) (do inglês *Self-Propelled Particles*). Este tipo de partícula é caracterizado, em geral, por ter a capacidade de produzir a própria energia para gerar movimento [3] [4] [9]. O termo PAP, geralmente, é associado a micro-organismos vivos, tais como bactérias ou vírus, mas o conceito de PAP pode ser estendido a sistemas macroscópicos, como, um rebanho de ovelhas, um cardume de peixes, um enxame de abelhas, ou até mesmo, uma multidão de pessoas em eventos esportivos, Shoppings Centers ou manifestações [11]. As PAP podem ser do tipo natural, como as citadas acima, ou produzidas artificialmente, como as partículas Janus, criadas em laboratório, sendo estas partículas, que podem conter duas ou mais características opostas [7] [8].

Dentre os vários modelos existentes, podemos citar dois modelos físicos que descrevem os movimentos das PAP; o modelo de *Flocking*, proposto inicialmente por Tamás Vicsek *et al.* [Phys. Rev. Lett. 75, 1226] em 1995, como sendo um caso particular do modelo coletivo comportamental de Craig W. Reynolds (1987) (ver seção sobre *flocking*) e o Movimento Browniano Angular (MBA) que descreve o movimento das partículas através de equações diferenciais estocásticas como função da aleatoriedade na direção de propagação das partículas [6] [9] (ver seção sobre MBA) que é equivalente ao modelo *Run*

and Tumble [13].



(a) Gafanhoto. Figura extraída de <http://www.wikiwand.com> acesso em 05-abr-2015 às 12:30



(b) Partícula Janus. Figura extraída de <http://www.nanowerk.com> acesso em 05-mabr-2015 às 12:50

Figura 2: Exemplos de partículas auto-propelidas. (a) À esquerda, um gafanhoto, exemplo biológico de PAP; (b) à direita, uma partícula Janus, partícula artificial criada em laboratório.

Dentre as características de um sistema de PAP podemos destacar o aparecimento espontâneo de uma movimentação direcional das partículas [4] e uma grande flutuação no sistema [6], ambas características diretamente afetadas pelos termos estocásticos das equações do movimento das partículas.

1.2 Comportamento coletivo (*Flocking*): O modelo de Vicsek.

Na natureza, o agrupamento de indivíduos de uma mesma espécie pode ser caracterizado com diversos objetivos. Um bando de pássaros se aglomeram para realizar uma migração para regiões mais quentes durante o inverno (fig. 3b). Um cardume de sardinhas se aglomeram para gerar estratégias de defesa contra grandes predadores, tais como tubarões, golfinhos e alguns pássaros (fig. 3a). Esse tipo de agrupamento de indivíduos semelhantes é caracterizado por apresentar comportamento coletivo.



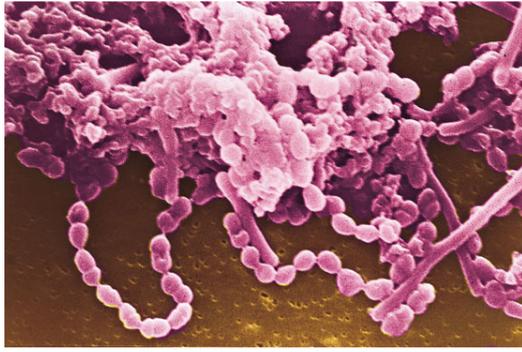
(a) Cardume de Sardinhas. Figura extraída de <http://www.photoshoot.com> acesso em 14-abr-2015 às 08:30



(b) Bando de pássaros em migração. Figura extraída de <http://www.geonature.com> acesso em 05-mabr-2015 às 08:50

Figura 3: Exemplos de comportamento coletivo. (a) À esquerda, um cardume de sardinhas e suas estratégias de sobrevivência; (b) à direita, um bando de pássaros em migração.

O comportamento coletivo também ocorre em sistemas microscópicos, tais como colônias de bactérias ou cadeias de vírus se locomovendo em seus organismos hospedeiros (fig. 4a). Nestes casos, a aglomeração de microorganismos tem como objetivos o ataque as células vivas para o seu desenvolvimento e ploriferação. Semelhante às bactérias, os seres humanos também se reúnem em aglomerados para desenvolver ataques (fig. 4b). Como exemplo temos as guerras medievais, onde exércitos eram constituídos de dezenas de milhares de soldados com o objetivo de destruir seus oponentes. Estas aglomerações são essencialmente distintas deido à "interação" (fala, visão, sinal químico) entre os componentes.



(a) Colônia de bactérias. Figura extraída de <http://www.laprensa.com> acesso em 14-abr-2015 às 08:30



(b) Guerras medievais. Figura extraída de <http://www.geonature.com> acesso em 05-mabr-2015 às 08:50

Figura 4: Exemplos de comportamento coletivo. Tanto as bactérias quanto os seres humanos podem se reunir com o objetivo de ataque a outros sistemas.

Portanto, estudos acerca do movimento coletivo tem sua importância, com aplicações em diferentes sistemas micro-, meso- e macroscópico [12].

O modelo de Vicsek consiste em introduzir um novo tipo de dinâmica, e é baseado no comportamento coletivo dos indivíduos do sistema, com o objetivo de investigar aglomerações, transporte e transição de fase em sistemas fora do equilíbrio. A velocidade das partículas é determinada por uma regra simples de flutuações aleatórias. A única regra deste modelo é que a velocidade das partículas é determinada pela média das direções das partículas presentes numa vizinhança de raio r e adicionada de uma perturbação aleatória chamada de ruído [4]. O modelo de Vicsek, ainda que simples, apresenta uma fenomenologia rica e realista da nova dinâmica. Observa-se uma transição de fase cinética de um modelo totalmente aleatório para outro com transporte efetivo finito através de uma quebra espontânea de simetria no sistema no modelo de Vicsek.

O modelo de Vicsek descreve um sistema fora do equilíbrio de modo análogo aos modelos de partículas ferromagnéticas, mas com principal diferença de ser puramente dinâmico. As suas simulações foram desenvolvidas em uma caixa quadrada de dimensões L com condições periódicas de contorno (CPC). As partículas são livres para percorrer o plano xy . No instante $t = 0$, N partículas são distribuídas aleatoriamente ao longo da célula de simulação com direção das velocidades também aleatória.

A posição das partículas no instante $t + 1$ é dada como função da sua posição no instante anterior (t) através da expressão:

$$x_i(t + 1) = x_i(t) + v_i(t)\Delta t, \quad (1.1)$$

onde Δt é um intervalo de tempo entre duas medições.

A velocidade das partículas foi construída para ter um mesmo valor absoluto v e a direção dada pelo ângulo $\theta(t + 1)$. Este ângulo é obtido por:

$$\theta(t + 1) = \langle \theta(t) \rangle_r + \Delta\theta, \quad (1.2)$$

onde $\langle \theta(t) \rangle_r$ denota a média das direções de todas as partículas contidas no raio r ao redor da partícula i (incluindo a partícula i) definido por:

$$\langle \theta(t) \rangle_r = \arctan \left[\frac{\langle \sin(\theta(t)) \rangle_r}{\langle \cos(\theta(t)) \rangle_r} \right]. \quad (1.3)$$

A distância r é a grandeza usada para medir as distâncias (ou raio) de interação com as partículas vizinhas.

Na Eq (1.2), o valor de $\Delta\theta$ é escolhido de uma distribuição de probabilidade uniforme entre $[-\frac{\eta}{2}, \frac{\eta}{2}]$, o que o caracteriza como um ruído, que deve ser uma variável relacionada com a temperatura, onde η é a intensidade do ruído.

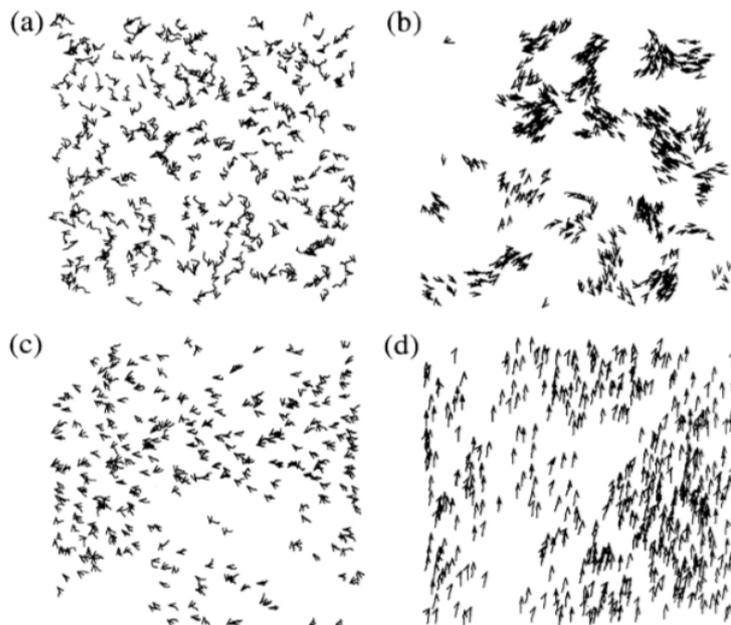


Figura 5: As figuras apresentam a posição das partículas e suas respectivas velocidades (setas) em estados de simulação diferentes para cada quadro. Figura extraída da Ref. 4.

Na figura 5 foram apresentadas fotografias do sistema em diferentes instantes. Os resultados foram obtidos por T. Vicsek *et al.* [4]. Em (a) o instante inicial ($t = 0$), onde as partículas são distribuídas aleatoriamente com direção aleatória. Em (b), para baixos ruídos e densidades, as partículas tendem a se acumularem em blocos e se moverem coerentemente. Em (c), para altos ruídos e densidades, as partículas se movem aleatoriamente com alguma correlação. Em (d), o caso mais interessante ocorre quando tem-se alta densidade e baixo ruído, pois todas as partículas tendem a se mover espontaneamente na mesma direção.

A variação no comportamento dinâmico do sistema em função do ruído e densidade é atribuída a uma transição de fase cinética. Os estudos de Vicsek acerca da natureza dessa transição de fase levaram à determinação do valor absoluto da velocidade média normalizada do sistema, definida por:

$$v_a = \frac{1}{Nv} \left[\sum_{i=1}^N v_i \right], \quad (1.4)$$

à medida em que a intensidade do ruído (η) e a densidade do sistema (ρ) variam.

Esta velocidade (v_a) é aproximadamente zero se o movimento individual das partículas for distribuído aleatoriamente, enquanto que, para a fase de movimento coerente, ou seja, com direções de velocidades ordenadas, este valor passa a ser igual a 1 ($v_a = 1$). Então, podemos considerar a velocidade média como um parâmetro de ordem.

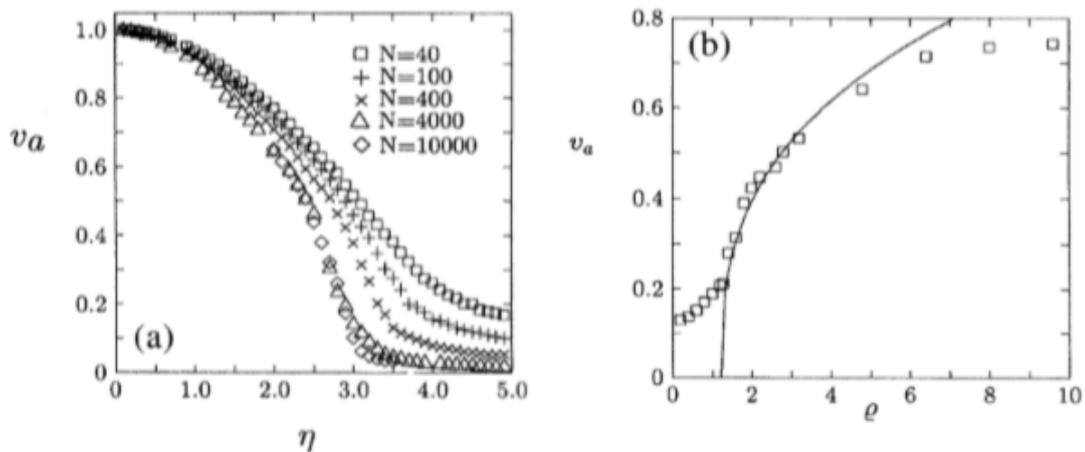


Figura 6: As figuras apresentam o parâmetro de ordem v_a como função do ruído (η) e da densidade (ρ). Figura extraída de [4]

A figura 6 (a) mostra como o parâmetro de ordem v_a varia em função do ruído (η) para diferentes quantidades de partículas (N). Neste processo Vicsek observou uma transição de uma fase com movimento totalmente desordenado para outra fase com movimento coerente entre as partículas. A figura 6 (b) mostra o comportamento de v_a se o ruído (η) é mantido constante e a densidade (ρ) varia.

O parâmetro de ordem v_a é bastante similar ao parâmetro de ordem de sistemas no equilíbrio, próximo de seu ponto crítico. Foi assumido que este modelo, no limite termodinâmico, apresenta transição de fase cinética análoga às transições de fase contínuas em sistema no equilíbrio, devido às semelhanças entre ambos.

1.3 Dinâmica browniana angular

Uma outra forma de descrever um sistema de partículas auto-propelidas é utilizando a dinâmica browniana angular (DBA) cuja principal diferença do modelo de Vicsek é fato de não conter regra de alinhamento, ou seja, as partículas se movem livremente sem se importar ou sem ser influenciada pelo movimento das outras partículas. O modelo descrito por Yaouen Fily e Cristina Marchetti [6] é um sistema onde não há conservação de momento, tais como materiais granulares ou organismos vivos. As partículas são discos moles com polaridade definida por $\hat{v}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$. A dinâmica é governada pelas equações:

$$\partial_t \vec{r}_i = v_0 \hat{v}_i + \mu \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} + \eta_i^T(t) \quad (1.5)$$

e

$$\partial_t \theta_i = \eta_i(t), \quad (1.6)$$

onde v_0 é a velocidade de auto-propulsão e μ é a mobilidade. Os ruídos translacionais e rotacionais, $\eta_i^T(t)$ e $\eta_i(t)$, são gaussianos, com média zero e são correlacionadas a partir de:

$$\langle \eta_{i\alpha}^T(t) \eta_{j\beta}^T(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t') \quad (1.7)$$

e

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2\nu_r \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (1.8)$$

onde $D = k_B T \mu$ é o coeficiente de difusão browniano e ν_r é o coeficiente de difusão rotacional.

De acordo com os resultados obtidos por T. Fily e C. Marchetti, bem como os obtidos por T. Vicsek, uma característica importante das PAPs é a sua capacidade de formar aglomerados que dependem do tipo de sistema. Uma descrição foi feita a partir das oscilações

térmicas e vibrações das partículas em função dos eixos cartesianos em comparação com sistemas atérmicos com oscilações angulares na velocidade [6].

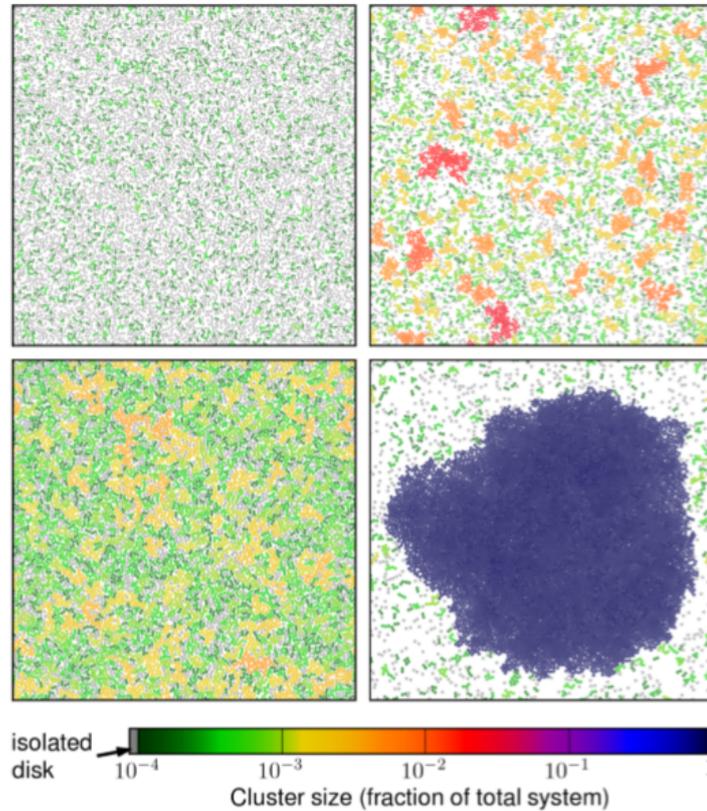


Figura 7: Fotografias obtidas de vários sistemas com características distintas. As figuras da esquerda representam as simulações para sistema térmico com oscilações browniana nos eixos x e y . As figuras da direita representam as simulações de sistemas atérmicos com somente oscilações angulares na velocidade. Acima, os sistemas com baixa densidade ($\phi = 0,39$) e abaixo, alta densidades ($\phi = 0,7$). Figura extraída da Ref. [6].

A figura (7) mostra que, independente da densidade, o sistema térmico apresenta baixa capacidade de aglomeração, enquanto que, mesmo em baixa densidade, já é perceptível a capacidade de aglomeração do sistema atérmico. Para alta densidade podemos ver a formação de mega clusters (aglomerados gigantes de partículas) mesmo sem haver interação atrativa entre as partículas.

Para melhor compreensão acerca do movimento browniano, veja o apêndice com o desenvolvimento de Einstein e de Langevin sobre o mesmo.

1.4 Partículas auto-propelidas em uma cadeia de obstáculos semicirculares

Dentre vários trabalhos recentes na área de partículas auto-propelidas podemos citar o trabalho de W. P. Ferreira e F. Potiguar, onde descreve um sistema de PAP na presença de obstáculos [9]. Dentre os vários resultados obtidos podemos ressaltar a presença de um transporte efetivo de PAP na presença desses obstáculos. Dois procedimentos foram realizados, com obstáculos circulares e semicirculares. Em ambos os procedimentos observou-se que as partículas tendem a se acumular em torno dos obstáculos mesmo havendo bastante espaço para se locomoverem (Fig. 8).

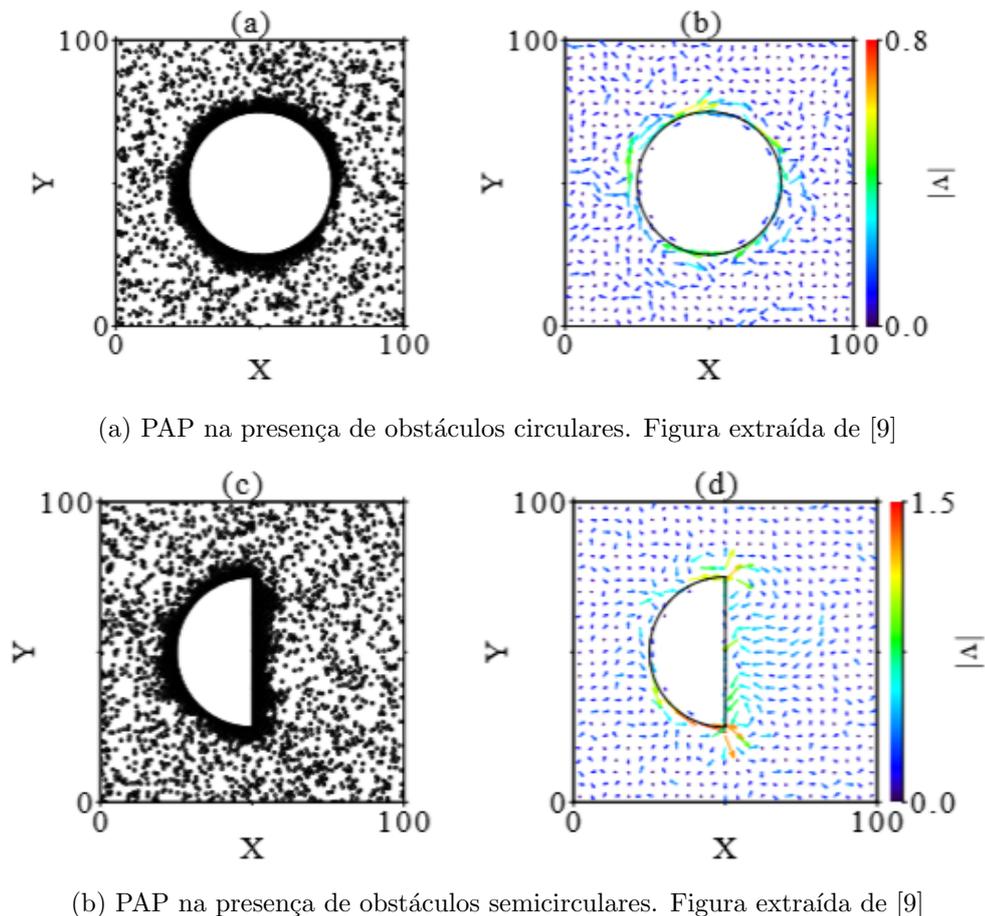
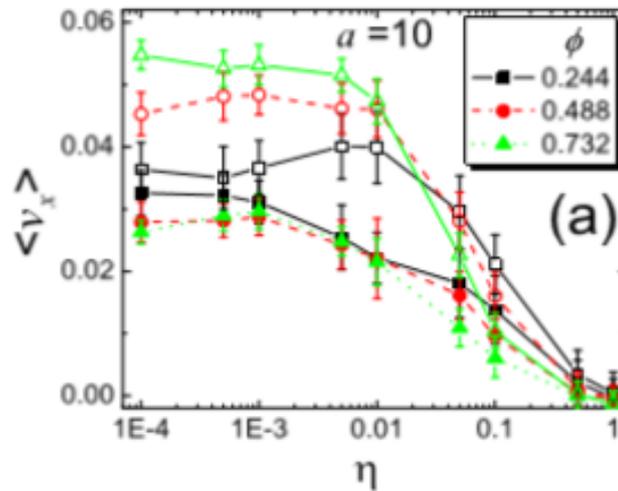


Figura 8: Em ambos os experimentos as partículas tendem a se acumularem em torno dos obstáculos independente da sua forma geométrica.

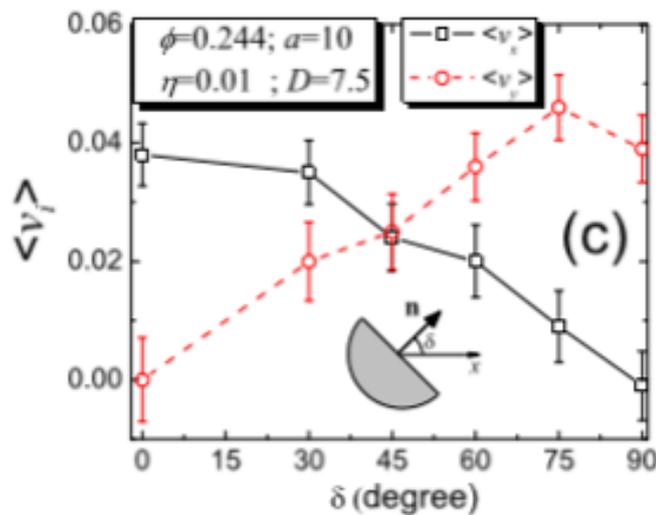
Segundo Ferreira-Potiguar, esta aglomeração de PAP em torno dos obstáculos ocorre devido o fato da colisão da partícula com o obstáculo não ser newtoniana, ou seja, não conservar energia e nem momento, a partículas só consegue se desviar do obstáculo se o ruído for alto, fazendo com que a direção da velocidade da partícula se altere significativamente

para que possa se "soltar" dos obstáculos.

É interessante observar que o trabalho de Ferreira-Potiguar mostrou, também, que, na presença de obstáculos semicirculares, as PAP adquirem velocidade média espontânea diferente de zero para baixos valores do ruído e que, à medida que este aumenta, a velocidade média tende a zero devido à grande desordem do sistema, pois as partículas podem adquirir quaisquer velocidades (9a). A velocidade média das partículas dependem, também, da direção do eixo normal à superfície plana dos obstáculos (9b).



(a) Velocidade média das PAP em função da intensidade do ruído. Figura extraída de [9]



(b) Velocidade média das PAP em função da direção dos obstáculos. Figura extraída de [9]

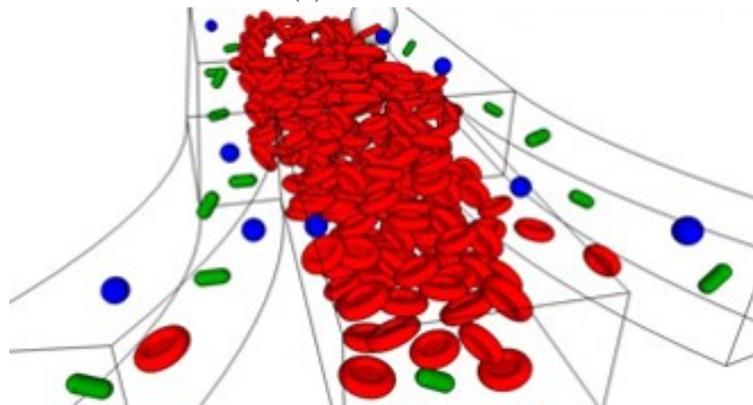
Figura 9: Em ambos os experimentos as partículas tendem a se acumularem em torno dos obstáculos independente da sua forma geométrica.

O trabalho desenvolvido por Ferreira-Potiguar serviu de inspiração para o desenvol-

vimento dessa dissertação com o objetivo de observar o comportamento de dois tipos de partículas contidas nesse mesmo tipo de sistema, bem como observar se há separação espontânea de partículas neste sistema puramente geométrico com aplicação em várias áreas da ciência, como em medicina, na separação dos tipos de células sanguíneas (diálise), ou de vírus e bactérias contidos em uma cadeia de células saudáveis, dentre outras.



(a) Hemodiálise.



(b) Separação de partículas. Método geométrico.

Figura 10: Aplicações do método de separação de partículas na medicina

Desenvolver um método puramente geométrico de diálise teria sua relevância pelo fato de tornar mais barato a hemodiálise, pois o processo seria espontâneo, gerando um baixo custo energético e financeiro.

2 MODELO

O modelo utilizado neste trabalho simula computacionalmente um sistema onde as equações do movimento das partículas são resolvidas numericamente utilizando dinâmica molecular.

A força resultante sobre a i -ésima partícula é a soma das forças atuantes sobre os j obstáculos e partículas do sistema:

$$\vec{F}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}. \quad (2.1)$$

A interação das partículas com as demais partículas e os obstáculos é do tipo disco-deformáveis, onde os obstáculos são discos semicirculares de raio D e rígidos cujo coeficiente é $\kappa_o = 1000$ e das partículas, $\kappa_p = 10$.

As forças de interação F_{ij} entre as partículas e os obstáculos são do tipo κx e são dadas por:

$$\vec{F}_{ij} = \kappa \alpha_{ij} \vec{r}_{ij}, \quad (2.2)$$

onde α_{ij} é a distância entre eles e é dada por:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - r_{ij}. \quad (2.3)$$

Para as interações partícula-partícula temos $d_i = d_j = d$. Para as interação partícula-obstáculo temos $d_i = d$ e $d_j = D$ para choques com a sua parte convexa ou $d_j = 0$ para com a parte plana.

As SSP se propagam no plano com velocidade de auto-propulsão dada por:

$$\vec{v}_i = v_0 \cos \theta_i(t) \vec{i} + v_0 \sin \theta_i(t) \vec{j}, \quad (2.4)$$

onde a direção aleatória $\theta_i(t)$ é proporcional ao ruído branco gaussiano $\eta_i(t)$ que satisfaz as seguintes expressões:

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0 \quad (2.5)$$

e

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = (2\eta \Delta t)^{\frac{1}{2}} \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (2.6)$$

onde η é a intensidade do ruído e Δt é o intervalo de tempo de integração.

2.1 Sistema binário bidimensional

Neste trabalho estudamos um sistema binário com N_1 partículas do tipo 1 e N_2 partículas do tipo 2, totalizando $N_{par} = N_1 + N_2$ partículas auto-propelidas. Cada partícula do tipo i possui diâmetro d_i e velocidade de auto-propulsão v_{0i} ($i = 1, 2$). Ambos os tipos de partículas são livres para moverem-se em um substrato plano bidimensional no qual existem obstáculos rígidos na forma de semi-círculos. Os obstáculos estão distribuídos em uma rede quadrada, conforme esquematizado na figura (8). Cada obstáculo tem diâmetro D .

A interação entre partículas, bem como entre partículas e obstáculos são repulsivas e do tipo disco deformável. Ou seja,

$$\vec{F}_{ij} = \kappa_{ij} \alpha_{ij} \vec{r}_{ij}, \quad (2.7)$$

onde κ_{ij} é uma constante associada ao tipo de interação e r_{ij} é a distância entre as entidades i e j envolvidas (partícula-partícula ou partícula-obstáculo). Por fim, α_{ij} é a deformação entre as entidades envolvidas na interação. Por exemplo, se considerarmos a interação entre uma PAP tipo 1 e uma PAP do tipo 2, a quantidade α_{ij} é dada por:

$$\alpha_{ij} = \left(\frac{d_1 + d_2}{2} - r_{ij} \right). \quad (2.8)$$

Se a interação for entre uma PAP do tipo 1 e um obstáculo, então

$$\alpha_{ij} = \left(\frac{d_1 + D}{2} - r_{ij} \right), \quad (2.9)$$

quando a PAP interage do lado convexo do obstáculo. Se a interação for com o lado plano do obstáculo, então $D = 0$.

A figura (11) exemplifica uma caixa de simulação onde temos $N_{par} = 8960$ partículas gerando uma fração de ocupação de $\phi = 0,732$. As partículas estão distribuídas em proporções iguais, ou seja, 50% das partículas têm velocidade $v_1 = 1$ (partículas em laranja/vermelho) e os outros 50% têm velocidade $v_2 = 2$ (partículas em azul).

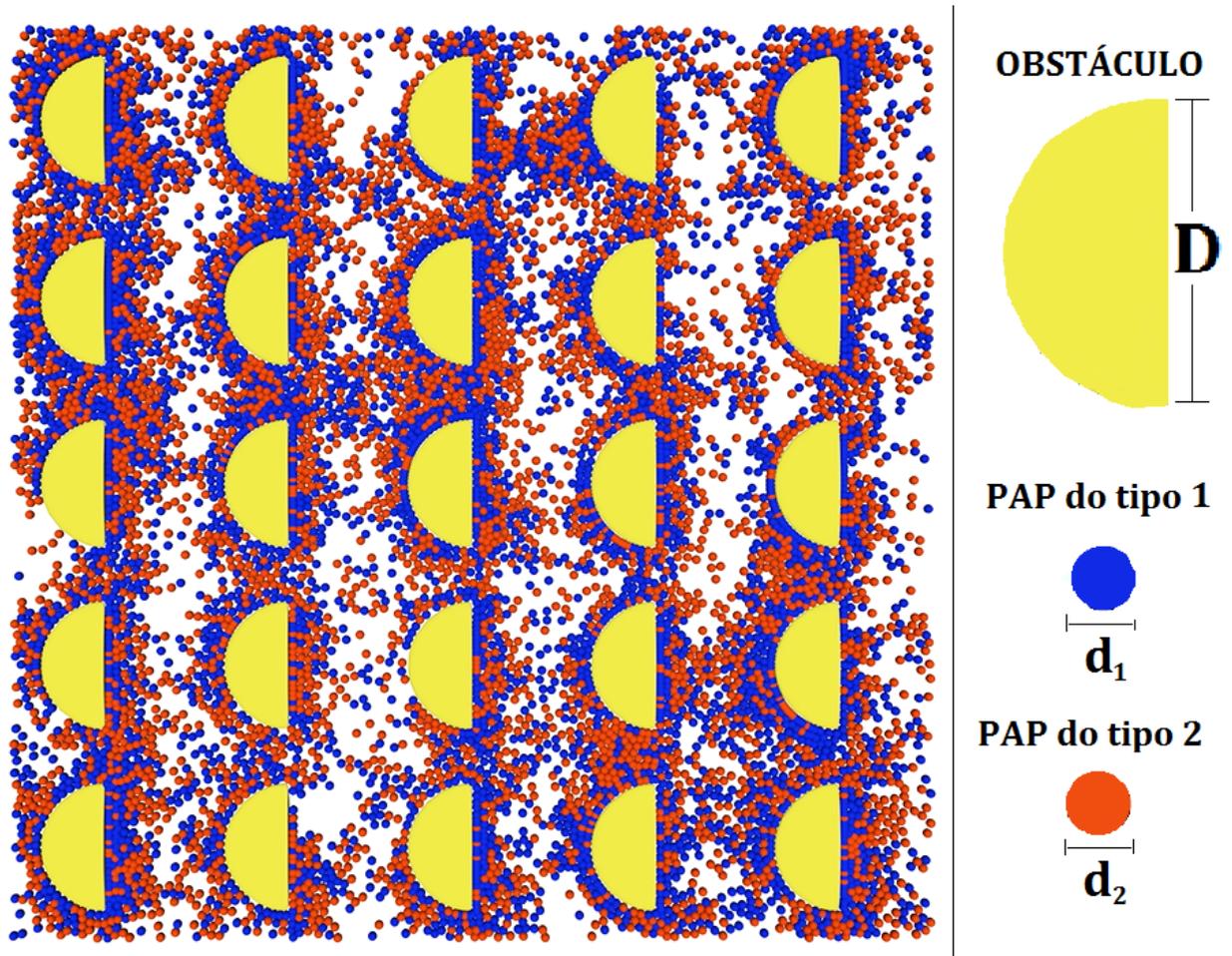


Figura 11: Visão esquemática do sistema: a rede quadrada de obstáculos semicirculares (em amarelo) e as partículas auto-propelidas do tipo 1 (azul) e do tipo 2 (vermelho). As dimensões da partícula auto-propelida e do obstáculo são também mostradas.

A caixa de simulação tem a forma quadrada onde $L_x = L_y = 100$, dividida em 100 células, também quadradas, de dimensões $l_x = l_y = 10$. No interior de cada célula temos um único obstáculo com geometria semi-circular (obstáculos em amarelo) orientados de tal forma que o vetor normal à superfície plana dos obstáculos forma um ângulo $\theta = 0$ com a direção horizontal (\vec{x}).

Para todas as simulações a seguir, mantivemos constante a distância entre os obstáculos ($a = 5$). Mesmo aumentando o tamanho das células e dos obstáculos esse valor permaneceu inalterado para que todas as simulações fossem comparáveis.

A Figura (12) mostra, em azul, os obstáculos semi-circulares. O tamanho da caixa L_x é obtido como função do tamanho do obstáculo D através da expressão:

$$L_x = a + D, \quad (2.10)$$

onde a é a distância entre os obstáculos. Em todas as simulações fizemos $a = 5$.

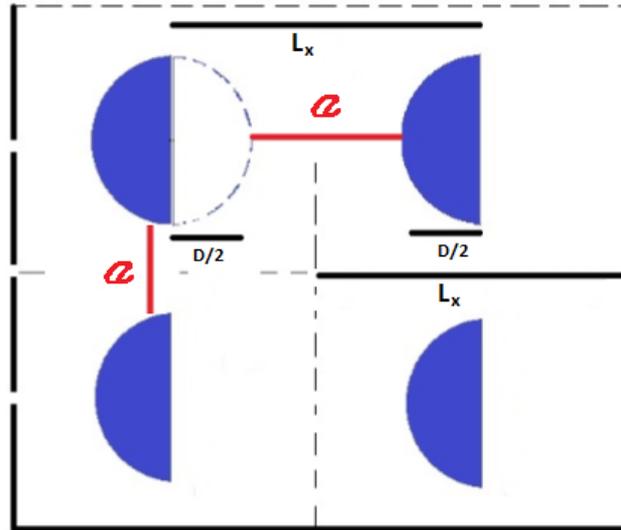


Figura 12: Exemplificação acerca do tamanho da caixa de simulação em função do tamanho dos obstáculos. Figura extraída de [20].

2.2 Equações do movimento das partículas auto-propelidas

O sistema é composto por dois tipos de partículas distintas (tipo 1 e tipo 2) com diferentes valores das suas velocidades de auto-propulsão (v_1 e v_2 , respectivamente). Estas partículas têm equações do movimento distintas e, para a i -ésima partícula do sistema, a equação do movimento é dada por:

$$\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \vec{v}_i + \mu \vec{F}_{ij} \quad (2.11)$$

e

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} = \eta_i(t), \quad (2.12)$$

onde μ é a mobilidade da partícula.

Uma grandeza a ser fixada é a fração de ocupação das partículas ϕ , ou seja, a razão entre a área ocupada pelas N_{par} partículas e a área total disponível no sistema, definida como:

$$\phi = \frac{N_{par} \pi d^2}{4(L^2 - S_T)}, \quad (2.13)$$

onde S_T é a área total ocupada pelos N_0 obstáculos, ou seja, como são semi-círculos, é dada por:

$$S_T = N_0 \frac{\pi D^2}{8}. \quad (2.14)$$

A fração de ocupação ϕ pode ser expressa diretamente como uma função da densidade ξ de partículas do sistema:

$$\phi = \pi d^2 \xi, \quad (2.15)$$

onde ξ é definido como a razão entre o número de partículas e a área total da caixa de simulação.

A fração de ocupação das PAPs do tipo 2 é definido através da fração de ocupação total e das PAPs do tipo 1, tal que:

$$\phi_T = \phi_1 + \phi_2, \quad (2.16)$$

onde $\phi_T = 1$.

Neste trabalho são aplicadas condições periódicas de contorno em todas as fronteiras da caixa de simulação para se aproximar de um sistema infinito, desprezando os efeitos de borda.

A figura (13) exemplifica uma caixa de simulação onde há condições periódicas de contorno:

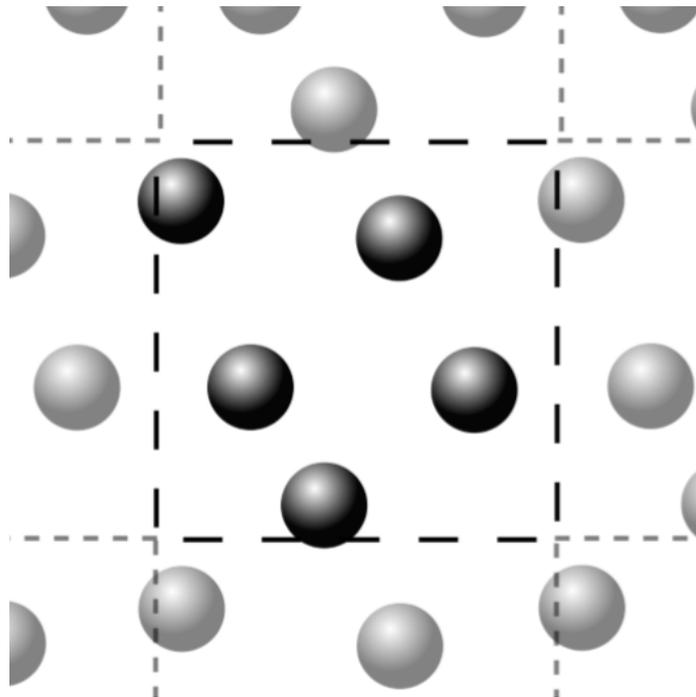


Figura 13: Exemplo de uma caixa de simulações onde existem condições periódicas de contorno. Figura extraída de [20].

Pode-se notar que, aplicadas as condições periódicas de contorno, são geradas cópias idênticas da caixa de simulação nas regiões vizinhas à mesma. Uma partícula que, em determinado tempo t , atinge uma das fronteiras da caixa de simulação imediatamente resurge na margem oposta simulando um sistema infinito.

3 RESULTADOS

Os resultados a seguir foram obtidos variando uma série de parâmetros que serão descritos em cada seção. Neste trabalho denominamos as partículas do tipo 1, aquelas com velocidade de auto-propulsão ($v_{p1} = 1$) e as partículas do tipo 2, aquelas com velocidade de auto-propulsão ($v_{p2} = 2, 3, 4$ ou 5).

3.1 Velocidade média espontânea sem drive externo

3.1.1 Procedimento variando as proporções de partículas em função do ruído.

3.1.1.1 Resultados para $\phi = 0.260$

Nesta seção as velocidades das partículas possuem valores fixos ($v_1 = 1$ e $v_2 = 2$). Variamos as frações de ocupação ϕ_1 e ϕ_2 e a intensidade do ruído angular η . Definimos como ϕ_1 e ϕ_2 as frações de ocupação das partículas do tipo 1 e tipo 2, respectivamente, em relação ao número total de partículas (N_{par}), ou seja, para qualquer quantidade de partículas (N_{par}), se 30% delas são partículas do tipo 1 teremos $\phi_1 = 0.3$ e, conseqüentemente, teremos 70% de partículas do tipo 2 com $\phi_2 = 0.7$, e vice-versa.

As figuras (14) e (15) retratam as velocidades médias das partículas em um sistema com baixa fração de ocupação ($\phi = 0.260$). Comparando os resultados obtidos com os modelos para um único tipo de partícula [9] [20] vemos que a proporção das partículas do Tipo 1 não interfere de forma significativa na velocidade média das partículas desse conjunto. Já para as partículas dos tipo 2, a diferença de proporção (ou de quantidade) interfere diretamente na velocidade média dessas partículas. Quanto maior a quantidade delas, vemos que o sistema sofre uma atraso. A grande quantidade de partículas com alta velocidade interfere negativamente para o próprio sistema, fazendo com que o mesmo tenha um deslocamento médio menor.

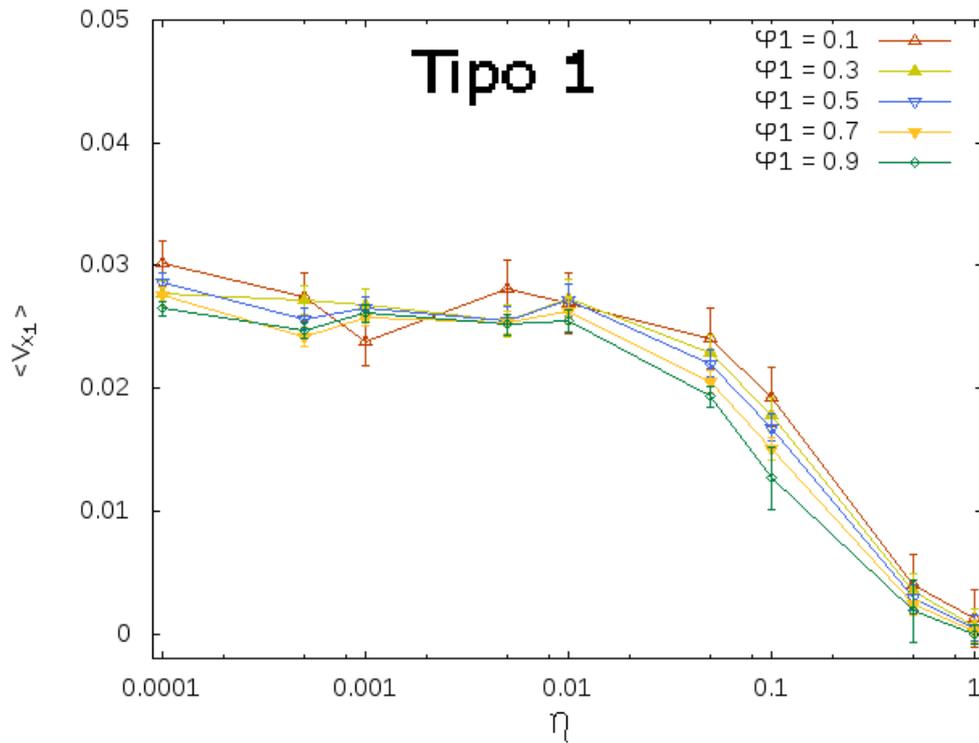


Figura 14: Velocidade média das partículas do tipo 1 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 1$) em função do ruído para $\phi = 0.260$ e da proporção de partículas do tipo 1.

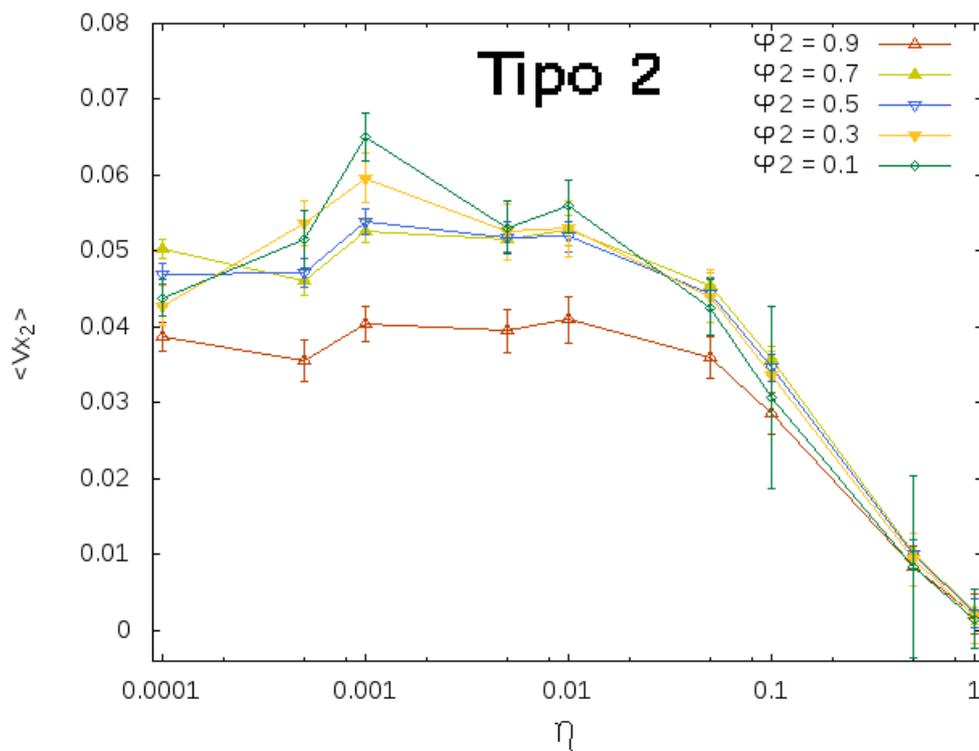


Figura 15: Velocidade média das partículas do tipo 2 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 2$) em função do ruído para $\phi = 0.260$ e da proporção de partículas do tipo 2

Fazendo uma analogia com um sistema macroscópico, imaginando uma multidão, podemos comparar as partículas com as pessoas. Se tivermos um grande número de pessoas correndo, em relação aos indivíduos que estão andando, dentro de um ambiente, podemos pensar que cada indivíduo veloz terá uma grande dificuldade ao se mover devido a outros indivíduos que também estão correndo e se opõem ao seu movimento. Já, se tivermos um número menor de indivíduos correndo, em relação aos que estão andando, a facilidade dos indivíduos mais velozes em se mover é perceptível, visto que este se locomoverá mais facilmente entre os indivíduos mais lentos.

No nosso modelo, um sistema com mais partículas velozes tem uma desordem maior fazendo com que o mesmo tenha mais dificuldades em alcançar um estado ordenado, podendo dizer que a velocidade de propulsão das partículas pode ser comparada a um ruído, que, para maiores intensidades, faz com que o sistema seja mais aleatório.

3.1.1.2 Resultados para $\phi = 0.520$

As figuras (16) e (17) retratam as velocidades médias das partículas em um sistema com fração de ocupação (ϕ) consideravelmente maior ($\phi = 0.520$).

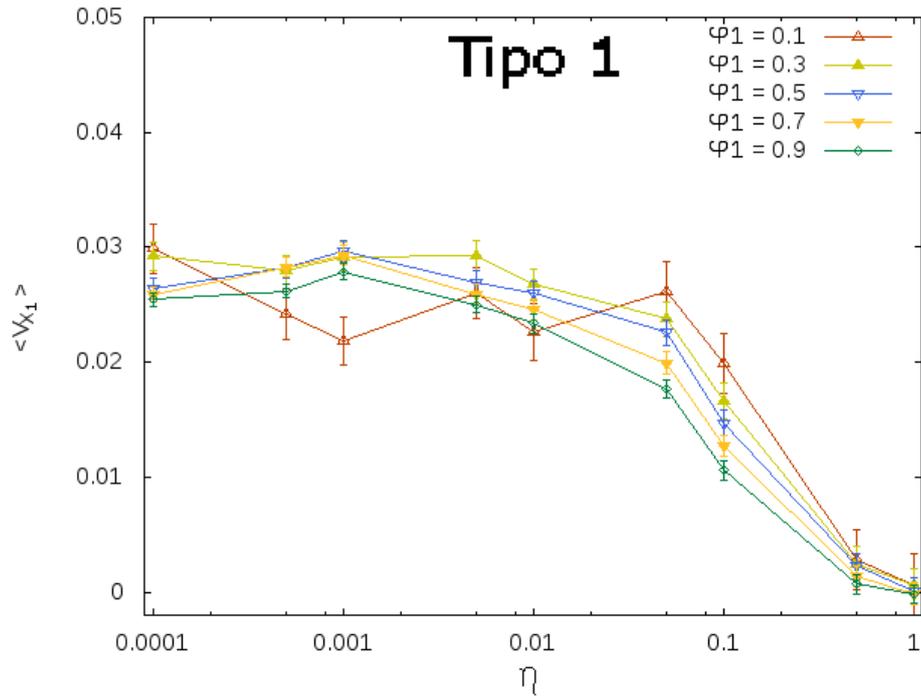


Figura 16: Velocidade média das partículas do tipo 1 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 1$) em função do ruído para $\phi = 0.520$ e da proporção de partículas do tipo 1.

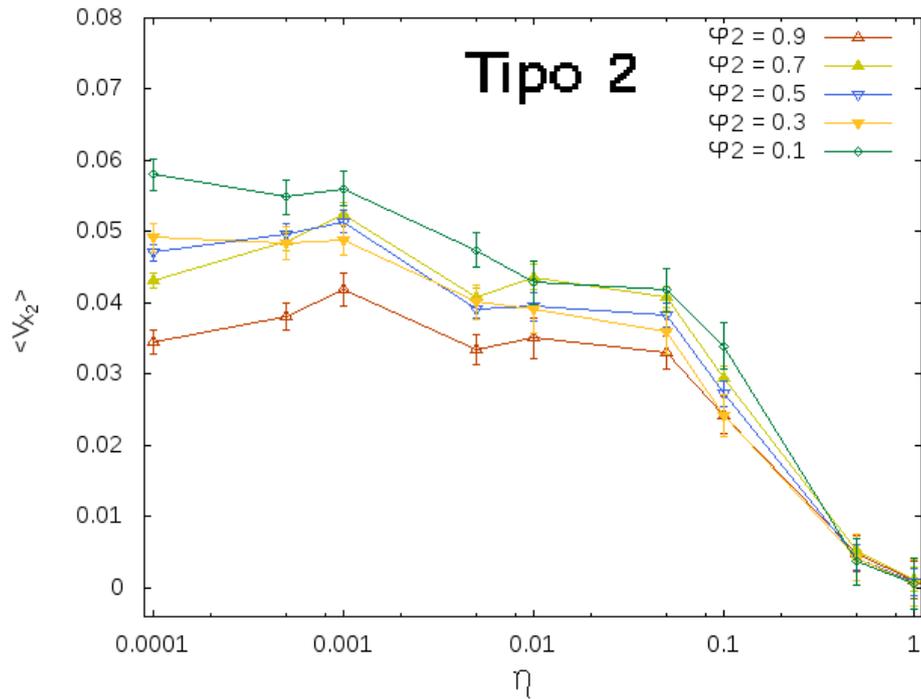


Figura 17: Velocidade média das partículas do tipo 1 (com velocidade de auto-propulsão $v_1 = 1$) em função do ruído para $\phi = 0.520$ e da proporção de partículas do tipo 2.

Vemos, portanto, que o comportamento do sistema não se altera (de forma significativa) se comparado ao resultado de baixa fração de ocupação. A relação de proporção entre as partículas do tipo 1, novamente, não interfere, ou tem uma interferência baixa, comparado às baixas frações de ocupação. As partículas do tipo 2, novamente, apresentam uma redução no valor da velocidade média quando em grandes quantidades, mostrando que uma população maior de partículas mais velozes faz com que o sistema como um todo seja mais lento.

3.1.2 Procedimento para as diferenças de velocidades entre as partículas. Resultados para $\phi = 0.260$, $\phi = 0.520$ e $\phi = 0.780$.

Os resultados a seguir foram obtidos mantendo constante a intensidade do ruído ($\eta = 0.001$), a relação de proporção entre as partículas, 50% de cada tipo, e a velocidade das partículas do tipo 1 ($v = 1$). A intensidade da velocidade das partículas do tipo 2 foram variadas de 1.5 até 5, com o passo de 0,5, mantendo o tamanho dos obstáculos constante ($D = 5$). Os procedimentos foram realizados para três frações de ocupação diferentes, $\phi = 0.260$, 0.520 e 0.780.

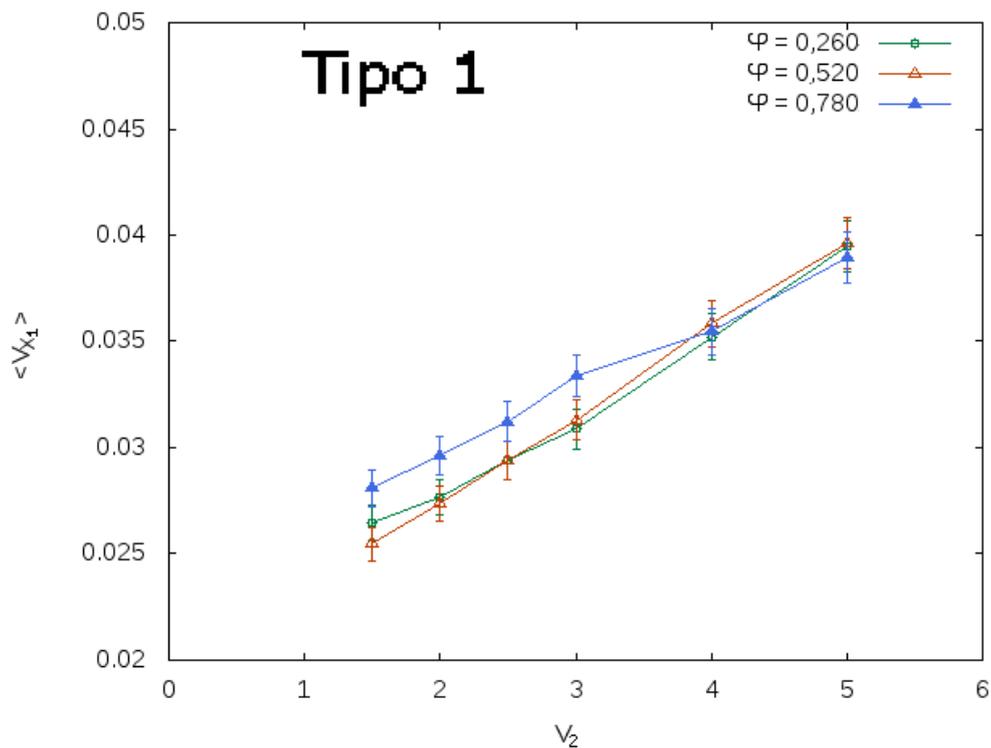


Figura 18: Velocidade média das partículas do tipo 1 em função da velocidade de auto-propulsão das partículas do tipo 2 (v_2) para diferentes valores da fração de ocupação total.

A figura (18) mostra que a intensidade da velocidade das partículas do tipo 2 interfere diretamente na velocidade média das partículas do tipo 1, pois quanto maior for essa velocidade, maior será o deslocamento das partículas do outro tipo. Comparando com os resultados obtidos para um único tipo de partícula na presença de um drive externo [20], podemos comparar a presença das partículas mais velozes com um drive externo capaz de alterar (ou impulsionar) a velocidade média das partículas mais lentas.

Vemos, também, que para frações de ocupação baixas ($\phi = 0.260$) e médias ($\phi =$

0.520), o impulso gerado pelo segundo tipo de partículas não sofre interferência alguma. Para um sistema com alta densidade ($\phi = 0.780$), a intensidade de impulso é ligeiramente maior, mas este sofre uma recessão para altos valores de velocidade das partículas mais velozes. Este efeito se deve à proximidade que as partículas têm para $\phi = 0.780$, fazendo com que o impulso gerado pelas partículas velozes sobre as lentas seja mais intenso, para baixos valores de v_2 , pois o sistema se torna mais desordenado quando este tem valores altos, fazendo com que o impulso gerado não se diferencie quando temos frações de ocupação menores.

A figura (19) mostra os resultados obtidos para as velocidades médias das partículas do tipo 2 em função de suas próprias velocidades.

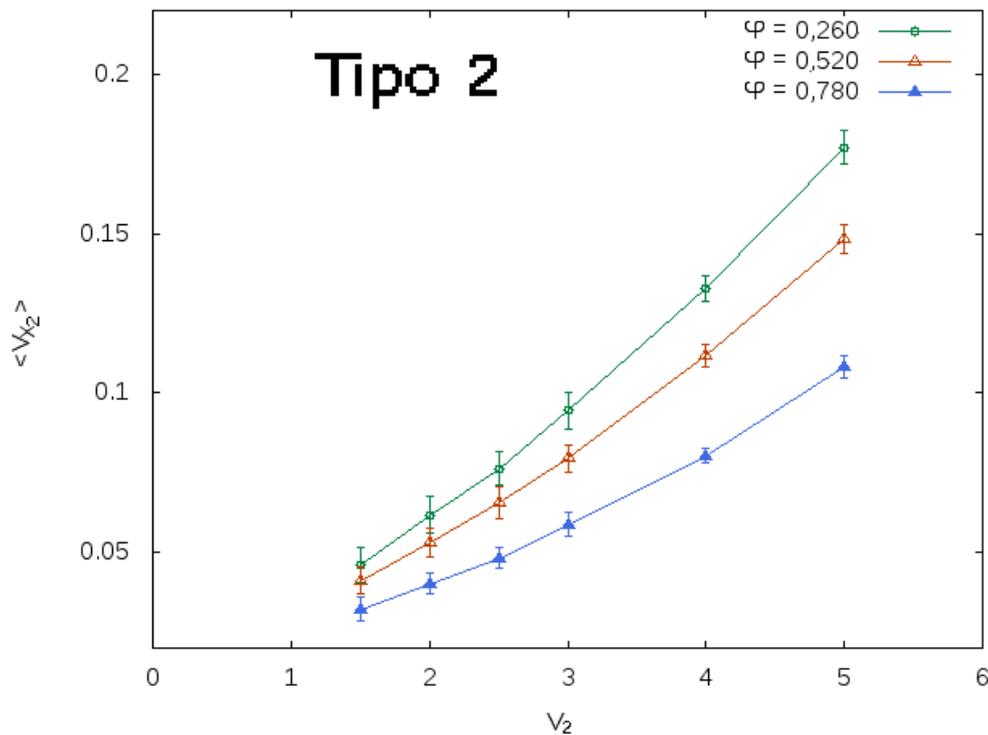


Figura 19: Velocidade média das partículas do tipo 2 em função da sua velocidade de autopropulsão para diferentes valores da fração de ocupação total. A velocidade de autopropulsão das partículas do tipo 1 é $v_1 = 1$.

Vemos pelo gráfico, que a velocidade média das partículas com alta velocidade depende da fração de ocupação do sistema. Vemos que para altas frações de ocupação, a velocidade média das partículas cresce mais devagar em comparação às baixas frações de ocupação, o que comprova os resultados anteriores sobre partículas mais velozes em grandes quantidades geram um sistema mais desordenado, no qual, se torna mais difícil obter um movimento ordenado.

3.1.3 Procedimento para as diferenças no tamanho dos obstáculos. Resultados para $\phi = 0.260$.

Os resultados a seguir foram obtidos mantendo constante a intensidade do ruído ($\eta = 0.001$), a relação de proporção entre as partículas, 50% de cada tipo, e as velocidades das partículas do tipo 1 ($v = 1$) e do tipo 2 ($v = 2$). Alteramos os valores do diâmetro dos obstáculos, fazendo-os variar de $D = 2.5$ até $D = 15$, ao passo de 2.5.

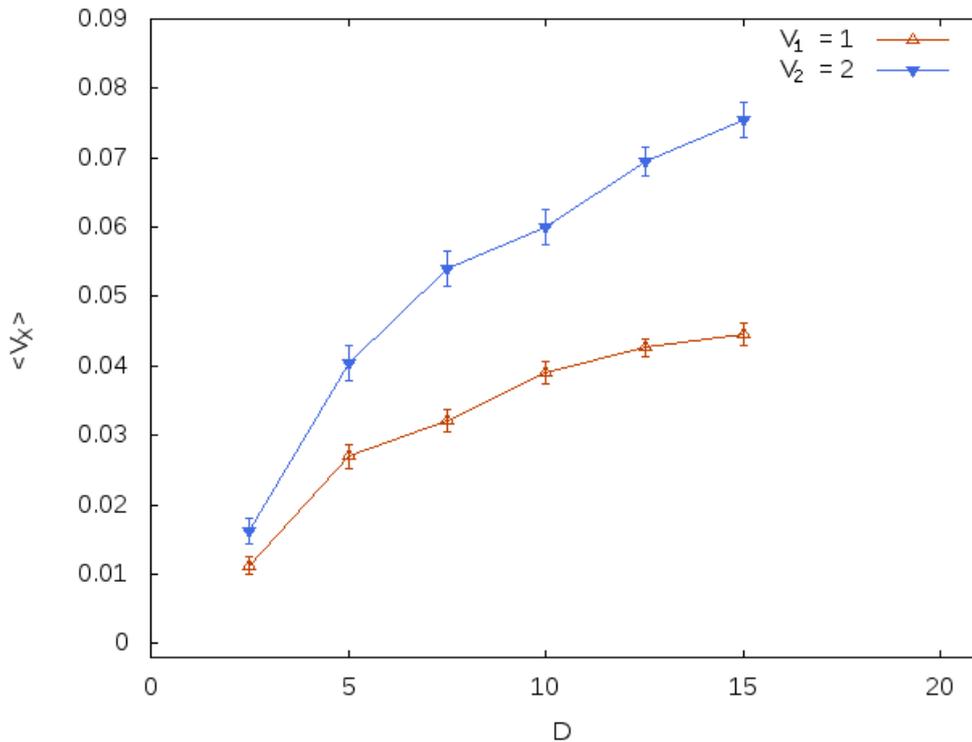


Figura 20: Velocidade média das partículas do tipo 1 e tipo 2 em função do tamanho dos obstáculos. $\phi_1 = \phi_2 = 0.5$

A figura (20) mostra que a intensidade da velocidade média do sistema sofre interferência devido ao tamanho dos obstáculos (resultado já esperado conforme [9]). Para pequenos valores de D , o sistema não sofre impulsionamento, pois os obstáculos, devido ao seu pequeno diâmetro, são comparados às partículas não gerando nenhum efeito de movimentação [20]. Esse impulsionamento dados nas partículas cresce rapidamente com o aumento do diâmetro dos obstáculos (D) mas, tem uma saturação para obstáculos com tamanhos maiores. Uma grande dificuldade em observar o comportamento do valor médio de v_x em função do diâmetro D é que, à medida em que D aumenta, o tamanho da célula (l_x e l_y) também aumenta e, para manter a densidade do sistema fixa, o número de partículas também aumenta, fazendo com que o tempo de simulação alcance valores inviáveis.

3.1.4 Procedimento para as diferenças na interação com os obstáculos (κ). Resultados para $\phi = 0.260$, $\phi = 0.520$ e $\phi = 0.780$.

Os resultados a seguir foram obtidos mantendo constante a intensidade do ruído ($\eta = 0.001$), a relação de proporção entre as partículas, 50% de cada tipo, as velocidades das partículas do tipo 1 ($v = 1$) e do tipo 2 ($v = 2$), bem como o tamanho dos obstáculos ($D_o = 5$). Variamos a forma como as partículas interagem com os obstáculos, ou seja, a intensidade do valor de κ (a constante elástica do material).

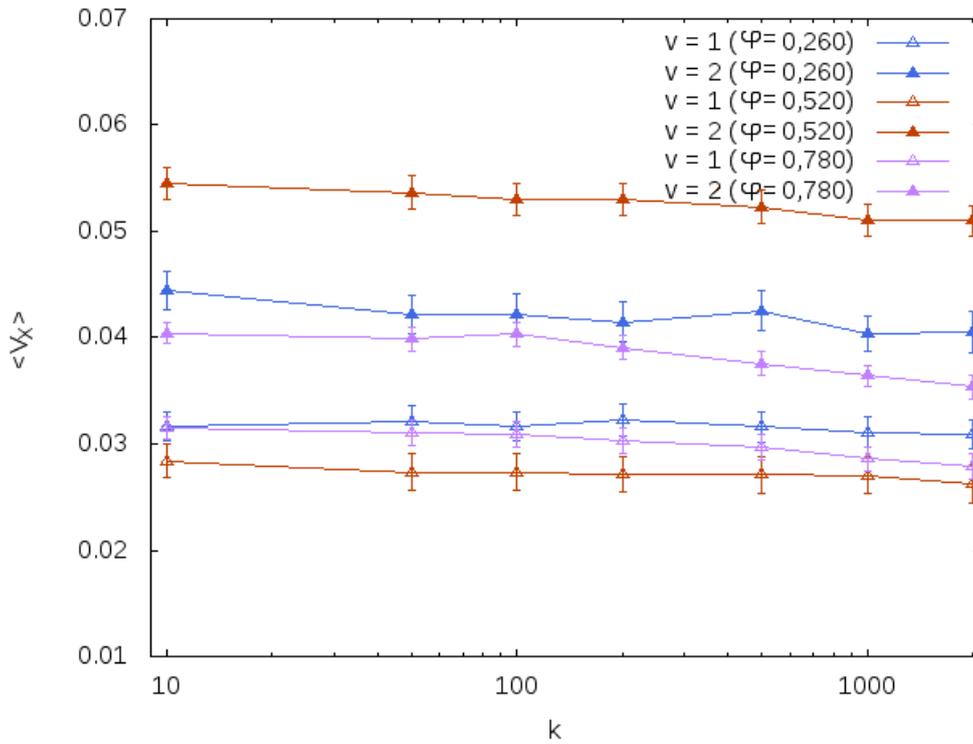


Figura 21: Velocidades médias das partículas do sistema em função da interação com os obstáculos.

Vemos, portanto, que o tipo de interação entre as partículas e os obstáculos não interfere no valor médio de v_x , apesar de ambos gráficos apresentarem um ligeiro decréscimo mas, que pode ser descartado levando em consideração à margem de erro computacional do sistema que é puramente estocástico (Figura 21).

4 CONCLUSÃO

Neste trabalho realizamos um estudo sistemático de um sistema binário de partículas com auto-propulsão (PAP) em um substrato 2D contendo obstáculos fixos e com geometria anisotrópica (semi-circular) distribuídos na forma de uma rede quadrada.

Analisamos o comportamento das PAP em um sistema com dimensão linear L . Inicialmente, em um sistema com densidade $\phi = 0.260$, alteramos a relação de proporção entre as partículas do tipo 1 e do tipo 2. Isto foi feito variando a fração de ocupação de cada tipo de PAP. Consideramos diversos valores de ruído, ou seja, 0.0001, 0.0005, 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5 e 1. As mesmas alterações foram feitas para um sistema mais denso ($\phi = 0.520$) e observamos a principal grandeza estudada: o valor médio da velocidade v_x do sistema, tanto para as partículas do tipo 1 quanto para as do tipo 2. Os resultados mostraram que as partículas com maior velocidade de auto-propulsão, quando em quantidade maior, apresentam menor velocidade média. Esse efeito é resultante da anisotropia dos obstáculos.

Observamos a relação existente entre a velocidade média das partículas do tipo 1 em função da velocidade média das partículas do tipo 2 e para isso, fizemos o valor de v_2 ser 1.5, 2, 2.5, 3, 4 e 5, para o mesmo ruído ($\eta = 0.001$). Observamos que as partículas mais rápidas acabam interferindo nas partículas mais lentas fazendo com que elas tenham uma velocidade média maior.

Observamos que a velocidade média do sistema, tanto para as PAP do Tipo 1 quanto as do Tipo 2, sofre interferência devido ao tamanho dos obstáculos. Para valores pequenos de D , as partículas "enchem" os obstáculos como se fossem outras partículas, sem sofrer nenhuma interferência do mesmo. Quando aumentamos o tamanho dos obstáculos, o valor médio de v_x cresce rapidamente, mas satura para valores grandes de D .

Por fim, ao analisarmos a velocidade média do sistema em função da interação com os obstáculos (alterando o valor de κ), percebemos que o mesmo não sofre nenhuma alteração. Observou-se um pequeno decréscimo no valor médio de v_x , mas o tal é desprezível.

5 APÊNDICE

5.1 Desenvolvimento de Einstein sobre o Movimento Browniano

O deslocamento das partículas entre x e $x + \chi$ no tempo pode ser escrito por:

$$\frac{dN}{N} = \phi(\mu)d\mu, \quad (5.1)$$

que obedece a seguinte equação de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\mu)d\mu = 1. \quad (5.2)$$

onde $\phi(\mu)$ é uma função par tal que $\phi(\mu) = \phi(-\mu)$.

A função de distribuição das partículas no instante $t + \tau$ a partir do instante t das partículas se deslocando entre x e $x + \mu$ é dada por [16]:

$$\eta(x, t + \tau)dx = dx \int_{\mu=-\infty}^{\mu=+\infty} \eta(x + \mu, t)\phi(\mu)d\mu. \quad (5.3)$$

Os valores τ e μ são muito pequenos e por isso expandimos as funções $\eta(x, t + \tau)$ e $\eta(x + \mu, t)$ em série de Taylor até segunda ordem:

$$\eta(x, t + \tau) = \eta(x, t) + \tau \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial t^2} \quad (5.4)$$

e

$$\eta(x + \mu, t) = \eta(x, t) + \mu \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x} + \frac{\mu^2}{2} \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial x^2}. \quad (5.5)$$

Substituindo as equações 5.4 e 5.5 na equação 5.3 temos:

$$\eta + \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = \eta \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mu) d\mu + \frac{\partial \eta}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \mu \phi(\mu) d\mu + \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mu^2}{2} \phi(\mu) d\mu. \quad (5.6)$$

O segundo termo do lado direito da equação é identicamente nulo, uma vez que $\phi(\mu) = \phi(-\mu)$. Assim, temos:

$$\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} + \frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} \quad (5.7)$$

onde

$$D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mu^2}{2} \phi(\mu) d\mu. \quad (5.8)$$

A equação (5.7) é uma espécie de equação generalizada de difusão. Para a abordagem de Einstein trabalhamos com o limite em que:

$$\tau \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} \ll \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (5.9)$$

assim, temos:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}. \quad (5.10)$$

Para exemplificar analisaremos o caso em que as partículas se encontram concentradas em torno da posição $x = 0$, ou seja, a equação de distribuição em função da posição e do tempo é dada por:

$$\eta(x, t = 0) = N\delta(x), \quad (5.11)$$

onde N é o número total de partículas e δ é a delta de Dirac. Assim, temos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta(x, t = 0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} N\delta(x) dx = N. \quad (5.12)$$

A equação de distribuição (5.10) pode ser obtida através das Integrais de Fourier:

$$\eta(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta_{\kappa}(t) e^{i\kappa x} d\kappa, \quad (5.13)$$

onde os coeficientes $\eta_{\kappa}(t)$ são obtidos através da transformada inversa de Fourier:

$$\eta_{\kappa}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x', t) e^{-i\kappa x'} dx'. \quad (5.14)$$

Calculando as derivadas temporal e espacial da equação de distribuição $\eta(x, t)$, temos:

$$\frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \eta_{\kappa}}{\partial t} e^{i\kappa x} d\kappa \quad (5.15)$$

e

$$\frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial x^2} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \kappa^2 \eta_{\kappa}(t) e^{i\kappa x} d\kappa. \quad (5.16)$$

Substituindo os resultados acima na equação (5.10) temos a seguinte expressão:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \eta_{\kappa}}{\partial t} + D\kappa^2 \eta_{\kappa} \right) e^{i\kappa x} d\kappa = 0 \quad (5.17)$$

Como a equação acima é válida para todo o espaço, implica que todo o integrando é nulo, ou seja:

$$\frac{\partial \eta_\kappa}{\partial t} + D\kappa^2 \eta_\kappa = 0, \quad (5.18)$$

cuja solução é da forma

$$\eta_\kappa(t) = \eta_{\kappa 0} e^{-i\kappa^2 t}. \quad (5.19)$$

Com este resultado, a equação (5.13) fica da forma:

$$\eta(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta_{\kappa 0} e^{-i\kappa^2 t} e^{i\kappa x} d\kappa. \quad (5.20)$$

Por outro lado, temos:

$$\eta(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta_{\kappa 0} e^{i\kappa x} d\kappa \quad (5.21)$$

e para a transformada inversa:

$$\eta_\kappa(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x', 0) e^{-i\kappa x'} dx'. \quad (5.22)$$

A equação (5.20) se torna, agora:

$$\eta(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x', 0) dx' \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D\kappa^2 t} e^{i\kappa(x-x')} d\kappa, \quad (5.23)$$

$$\eta(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x', 0) dx' \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D\kappa^2 t} (\cos[\kappa(x-x')] + i \operatorname{sen}[\kappa(x-x')]) d\kappa. \quad (5.24)$$

A segunda parte da equação acima é identicamente nula, pois temos o produto de uma função par por uma função ímpar, reduzindo-a a:

$$\eta(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x', 0) dx' \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D\kappa^2 t} \cos[\kappa(x - x')] d\kappa. \quad (5.25)$$

Para facilitar a integração da equação acima, fizemos $\kappa = y$, $\mu = x - x'$ e $\alpha = Dt$ e obtivemos:

$$\eta(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x', 0) e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} dx', \quad (5.26)$$

com a condição inicial $\eta(x', 0) = N\delta(x')$, temos:

$$\eta(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (5.27)$$

A equação acima mostra que as partículas se comportam com em um processo gaussiano difusivo. A distribuição de probabilidades pode obtida da seguinte forma:

$$P(x, t) = \frac{\eta(x, t)}{N} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (5.28)$$

Comparando a equação com a distribuição de probabilidade gaussiana:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}} \quad (5.29)$$

vemos que $\langle x \rangle = 0$ e a variância $\sigma^2 = 2Dt$.

As grandezas fisicamente relevantes estão diretamente relacionadas com o primeiro e o segundo momentos da distribuição que podem ser calculados a partir da expressão:

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^n P(x, t) dx. \quad (5.30)$$

Os valores de $\langle x \rangle$ e de σ^2 são dados por:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx \quad (5.31)$$

fazendo $u = x^2$, temos:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u}{4Dt}} du \\ \langle x \rangle &= \frac{-4Dt}{2\sqrt{4\pi Dt}} [e^{-\frac{u}{4Dt}}]_{-\infty}^{\infty} \\ \langle x \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (5.32)$$

e

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx. \quad (5.33)$$

Esta segunda integral é uma integral do tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{y^2} dy$$

e pode ser resolvida usando

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\alpha y^2} dy, \\ \frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \end{aligned}$$

para a nossa integral, a equação acima fica da forma

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx, \\ \langle x^2 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx, \end{aligned}$$

com $\alpha = -\frac{1}{4Dt}$. Assim:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

ou seja:

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt. \tag{5.34}$$

5.2 Desenvolvimento de Langevin sobre o Movimento Browniano

O desenvolvimento de Paul Langevin sugere tratar o movimento de uma partícula a partir de uma equação diferencial estocástica do tipo:

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \xi(t), \quad (5.35)$$

onde v é a velocidade da partícula, γ é a viscosidade do meio e $\xi(t)$ é uma força aleatória que é característica fundamental das equações diferenciais estocásticas. Esta função, conhecida como equação de Langevin, é definida a partir de duas condições:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (5.36)$$

e

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (5.37)$$

que caracterizam o chamado ruído branco.

Para determinar a solução vamos escrever a equação de Langevin da seguinte forma:

$$\frac{dv}{dt} + f(t)v = \xi(t), \quad (5.38)$$

onde $f(t)$ é uma função arbitrária. Definindo

$$f(t) = \frac{\dot{g}(t)}{g(t)}, \quad (5.39)$$

sendo $g(t)$ outra função arbitrária.

A equação (5.38) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt} \ln(vg(t)) = \frac{\xi(t)}{v}. \quad (5.40)$$

Fazendo $g(t) = e^{\gamma t}$, temos

$$\frac{d}{dt} \ln(v e^{\gamma t}) = \frac{\xi(t)}{v} \quad (5.41)$$

e fazendo a mudança de variável $u = v e^{\gamma t}$, se reduz a

$$\frac{du}{dt} = \xi(t) e^{\gamma t}, \quad (5.42)$$

cuja solução é

$$u(t) = u_0 + \int_0^t \xi(t') e^{\gamma t'} dt'. \quad (5.43)$$

Retornando para a variável original, temos

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t \xi(t') e^{\gamma t'} dt'. \quad (5.44)$$

O valor médio e a variância da velocidade devem ser calculados a partir das propriedades de $\xi(t)$. Temos:

$$\langle v(t) \rangle = v_0 e^{-\gamma t}. \quad (5.45)$$

Fazendo $v - \langle v \rangle$, podemos calcular a variância mais facilmente.

$$v - \langle v \rangle = e^{-\gamma t} \int_0^t \xi(t') e^{\gamma t'} dt' \quad (5.46)$$

e ainda

$$(v - \langle v \rangle)^2 = e^{-2\gamma t} \int_0^t \int_0^t e^{\gamma(t'+t'')} \xi(t') \xi(t'') dt'' dt'. \quad (5.47)$$

Calculando a média e integrando, a equação nos fornece

$$(\Delta v)^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}), \quad (5.48)$$

onde $(\Delta v)^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2$ é a variância.

Para tempos longos de observação, comparados ao tempos de flutuação de $\xi(t)$, temos que o valor de $\langle v \rangle$ se anula e da equação (5.48) temos:

$$\langle v \rangle^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma}. \quad (5.49)$$

O teorema da equipartição nos diz que

$$\frac{1}{2} \langle v \rangle^2 = \frac{1}{2} \kappa_B T, \quad (5.50)$$

onde $\kappa_B T$ é constante de Boltzmann. Assim, temos:

$$\frac{1}{2} \frac{\Gamma}{2\gamma} = \frac{1}{2} \kappa_B T,$$

ou seja:

$$\Gamma = \frac{2\gamma \kappa_B T}{m}. \quad (5.51)$$

Uma vez calculada a variância da velocidade é conveniente calcularmos o deslocamento quadrático médio. Sabendo que:

$$x = x_0 + \int_0^t v(t') dt', \quad (5.52)$$

onde x_0 é a posição inicial da partícula. Substituindo o valor de $v(t)$ na equação acima, temos:

$$x(t) = x_0 + v_0 \int_0^t e^{-\gamma t'} dt' + \int_0^t e^{-\gamma t} \int_0^t \xi(t') e^{\gamma t'} dt'$$

$$x(t) = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t \xi(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}), \quad (5.53)$$

onde obtemos o deslocamento médio

$$\langle x(t) \rangle = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}). \quad (5.54)$$

Para calcularmos do deslocamento quadrático médio fazemos:

$$x - \langle x \rangle = \frac{1}{\gamma} \int_0^t \xi(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}) dt'', \quad (5.55)$$

de onde obtemos

$$(x - \langle x \rangle)^2 = \frac{1}{\gamma^2} \int_0^t \int_0^t \xi(t'') \xi(t') (1 - e^{\gamma(t''-t)}) (1 - e^{\gamma(t'-t)}) dt' dt''. \quad (5.56)$$

Tirando a média e resolvendo as integrais obtemos o seguinte resultado:

$$(\Delta x)^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left[t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right]. \quad (5.57)$$

Para tempos grandes o termo dominante é o primeiro, ou seja:

$$(\Delta x)^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2} = 2 \frac{\kappa_B T}{m\gamma} t, \quad (5.58)$$

ou

$$(\Delta x)^2 = 2Dt, \tag{5.59}$$

que é a equação de Einstein.

REFERÊNCIAS

- [1] H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena* Oxford University Press, Oxford, 1971.
- [2] H.E. Stanley *Scaling Universality and Renormalization; Tree Pillars of Modern critical phenomena* Center for Polymer Studies and Department of Physics, Boston University, Boston, Massachusetts 02215.
- [3] S. Ramaswamy *The Mechanics and Statistics of Active Matter* Ann. Rev. Cond. Matt. Phys. 1, 323 (2010).
- [4] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen e O. Shochet. *Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995)
- [5] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1992.)
- [6] Y. Fily, and M. C. Marchetti, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 235702 (2012)
- [7] Scott Camazine, Jean-Louis Deneubourg, Nigel R. Franks, James Sneyd, Guy Theraulaz, e Eric Bonabeau *Self Organization in Biological Systems* Princeton University Press, Princeton, 2003
- [8] John Toner, Yuhai Tu, Siriram Ramaswamy, *Hydrodynamics and phase flocks* Institute of theoretical Science, USA Centre of condensed matter theory, India, 2005
- [9] F. Q. Potiguar, G. A. Farias, W. P. Ferreira, *Physical Review E: Stat., Nonlinear, Soft Matter Phys.*, 2014, 90, 01 2307.
- [10] Iain D. Couzin e Jens Krause *Self-Organization and collective behaviour in vertebrates* Princeton University, Princeton, New Jersey University of Leeds, Leeds LS2 9JT, United Kingdom
- [11] Christian A. Yates, Ruth E. Baker, Radek Erban e Philip K. Maini, *Refining self-propeller particle models for collective motion* Centre for Mathematical Biology, Mathematical Institute Oxford Centre for Colaborative Applied Mathematics University of Oxford, Oxford, UK
- [12] Craig W. Reynolds, *"Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model"* Symbolics Graphics Division, 1987
- [13] M. B. Wan, C. J. Olson Reichhardt, Z. Nussinov, and C. Reichhardt *Rectification of Swimming Bacteria and Self Driven Particle Systems by Arrays of Asymmetric Barriers* Phys. Rev. Lett. 101, 018102 (2008).

- [14] Albert Einstein, *On the movement of small particles suspended in stationay liquids required by themolecular-kinect theory of heat* Ansalen der Physik 17 (1905): 549 - 560
- [15] Albert Einstein, *Investigations on the Theory of the Brownian Movement* Dover Publications, 1956
- [16] J.M. Silva e J.A.S. Lima *Quatro abordagens para o movimento browniano* Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande no Norte, Natal, RN, Brasil Departamento de Astronomia, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brazil
- [17] Jean Perrin Ann. Chem. d. Phys. *Les Atomes* Librarie Alcan. Paris. 1914. 4^a Ed. *Atoms* Van Nostrand. New York. 1916
- [18] Paul Langevin *On the Theory of Brownian Motion* C. R. Acad. Sci. Paris 146, 530-533. 1908
- [19] Kishore Dutta *How Birds Fly Together* Darrang College, Tezpur, Assam, India, 2010
- [20] Borba, A. D. *Transporte de partículas com auto-propulsão em substratos 2D ordenados* Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física Fortaleza, Ceará, 2015.