



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

ANDRÉ DUARTE BORBA

TRANSPORTE DE PARTÍCULAS COM  
AUTOPROPULSÃO EM SUBSTRATOS  
2D ORDENADOS

FORTALEZA

2015

**ANDRÉ DUARTE BORBA**

**TRANSPORTE DE PARTÍCULAS COM  
AUTOPROPULSÃO EM SUBSTRATOS  
2D ORDENADOS**

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

Coorientador: Prof. Dr. Fabrício Queiroz Potiguar

**FORTALEZA**

**2015**

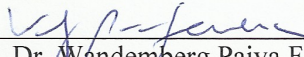
**ANDRÉ DUARTE BORBA**

**TRANSPORTE DE PARTÍCULAS COM AUTO-PROPULSÃO EM  
SUBSTRATOS 2D ORDENADOS**

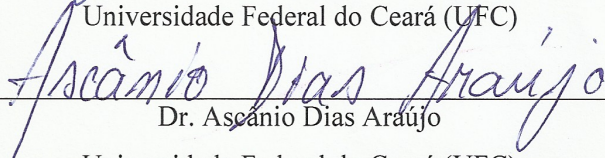
Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 30 / 01 / 2015.

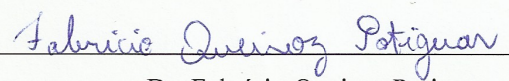
**BANCA EXAMINADORA**

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Wandemberg Paiva Ferreira (Orientador)

Universidade Federal do Ceará (UFC)

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Ascânio Dias Araújo

Universidade Federal do Ceará (UFC)

  
\_\_\_\_\_  
Dr. Fabrício Queiroz Potiguar

Universidade Federal do Pará (UFPA)

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

- 
- B718t      Borba, André Duarte  
            Transporte de partículas com autopropulsão em substratos 2D ordenados / André Duarte  
            Borba. – Fortaleza, 2015.  
            49 f.: il. algumas color. enc.; 30 cm.
- Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,  
            Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2015.  
            Orientação: Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira.  
            Coorientação: Prof. Dr. Fabrício Queiroz Potiguar.  
            Área de concentração: Física da Matéria Condensada.
1. Partículas com autopropulsão. 2. Transporte de partículas. 3. Sistema complexo.  
            I. Ferreira, Wandemberg Paiva. II. Potiguar, Fabrício Queiroz. III. Título.



*À minha Esposa*

# AGRADECIMENTOS

Primeiramente e acima de tudo, gostaria de agradecer a Deus que em todo meu trajeto na Universidade me guiou e me deu forças para terminar este curso de mestrado.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira pela dedicação, comprometimento e por ter me orientado no curso de mestrado do departamento de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, no qual pude colher muitos frutos para o meu aprendizado como estudante e como pesquisador.

À minha esposa Ilnair de Abreu Silva por ter me ajudado e embelezado minha trajetória na Pós-Graduação.

À minha mãe, Ana Célia Duarte, e ao meu Pai, Percy Borba, que sempre me apoiaram nos estudos e acreditaram no meu sucesso.

À minha tia Maria Auxiliadora Xavier Duarte Oliveira que por muitos anos custeou os meus estudos e sempre acreditou em mim como estudante.

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, Jessé, Everton, Thaís, Aesley, Diego e Vagner) do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará por termos estudado cooperativamente, pelo companheirismo e momentos de alegria.

Aos Professores Ricardo Renan Landim, Raimundo Nogueira da Costa Filho, Humberto de Andrade Carmona e André Auto Moreira por terem ministrados as disciplinas de Eletrodinâmica Clássica, Mecânica Estatística e Mecânica Quântica nas quais me empenhei ao máximo.

# RESUMO

Partículas com autopropulsão, ou do inglês *Self Propelled Particles* (SPP), são aquelas que utilizam sua energia interna para gerar movimento. O termo está originalmente associado ao modelo introduzido por T. Vicsek *et al.* [Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995)] que identifica uma transição dinâmica associada ao movimento coletivo de "indivíduos" de uma mesma espécie. Exemplos de SPP ocorrem em sistemas naturais, como microorganismos (bactérias, vírus e protozoários), ou, artificialmente, como no caso de partículas coloidais adequadamente preparadas. O estudo de SPP é importante em diversas áreas do conhecimento tais como engenharia de materiais, medicina e ciências básicas (física e química). Em geral, o movimento coletivo revela características drasticamente distintas do movimento individual dos constituintes de um dado sistema. Ou seja, a ação de um dado indivíduo é dominada pela presença de outros constituintes do sistema como resultado da interação entre eles. Desta forma, é importante o entendimento do comportamento coletivo das SPP. Em particular nesta dissertação, estudamos um sistema bidimensional de SPP sujeitas a uma força externa e na presença de obstáculos rígidos com geometria anisotrópica (semi-círculos) distribuídos ordenadamente na forma de uma rede quadrada. Além da interação entre partículas e entre partículas e obstáculos, o movimento individual de cada SPP sofre influência de um ruído branco. O objetivo é caracterizar o transporte de SPP através do substrato 2D, na ausência ou não de uma força externa propulsora. Apresentamos um estudo sistemático do movimento coletivo das SPP em função da intensidade do ruído, que define o movimento errático das SPP, do tamanho dos obstáculos, da densidade de SPP e da separação entre os obstáculos. Devido a presença de obstáculos anisotrópicos, existe um movimento coletivo espontâneo e ordenado em uma dada direção preferencial, caracterizado por velocidade média das SPP não-nula na ausência de força externa. As condições básicas para o movimento coletivo ordenado espontâneo são: ruído de baixa intensidade ( $\ll 1$ ) e densidade de SPP maior que um dado valor crítico.

**Palavras-chave:** partículas com auto-propulsão. transporte. não-equilíbrio. matéria mole. sistema complexo.

# ABSTRACT

Self-propelled particles are those that use their internal energy to generate movement. The term is originally associated with the model introduced by T. Vicsek *et al.* [Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995)] that identifies a dynamic transition associated to the collective movement of "individuals" of the same species. Examples of SPP occur in natural systems such as microorganisms (bacteria, viruses, and protozoa) or artificially as in the case of colloidal particles suitably prepared. The study of SPP is important in many fields such as materials engineering, medicine and basic sciences (physics and chemistry). In general, the collective motion reveals a dramatically different behavior as compared to the characteristics motion of individual components of a given system. That is, the action of a given individual is dominated by the presence of the other components as a result of the interaction between them. Thus, it is important to understand the collective behavior of SPP. In this dissertation, we study a two-dimensional SPP system subject to an external force and in the presence of rigid obstacles with anisotropic geometry (semi-circle) orderly distributed in the form of a square lattice. In addition to the interaction between particles and between particles and obstacles, the individual movement of each SPP is influenced by a white noise. The objective is to characterize the transport of SPP in a 2D substrate in the absence and in the presence of a driving external force. We present a systematic study of the collective motion of the SPP as a function of noise intensity, which defines the erratic movement of the SPP, the size of the obstacles, the SPP density and separation between the obstacles. Due to the presence of anisotropic obstacles, there is a spontaneous collective movement and ordered in a given preferential direction, characterized by the non-zero average velocity of SPP in the absence of the external force. The basic conditions for the spontaneous ordered collective movement are: low-intensity noise ( $\ll 1$ ) and SPP density greater than a given critical value.

**Keywords:** Self Propelled Particles. transport. nonequilibrium. soft matter. complex system.

# LISTA DE FIGURAS

- 1 Exemplos de Partículas que podem ser tratadas como uma SPP, a esquerda(a) temos a partícula Janus e a direita a figura que representa bactérias(b). (Figura a) (Durham, N.C., em: <http://today.duke.edu/2009/08/janus.html>, acesso em: 19 dezembro 2014. Figura b) em: <http://www.clickescolar.com.br/bacterias-patogenicas.htm> acesso em 19 dezembro 2014.) . . . . . p. 16
- 2 Rebanho(Ovelhas) percorrendo o pasto pode representar um tipo de movimento coletivo onde existe a presença de um movimento ordenado. (Ed Yong, em: <http://www.wired.com/2013/03/powers-of-swarms/all/> acesso 18 dezembro 2014.) . . . . . p. 18
- 3 A esquerda(a) e a direita (b) temos exemplos de movimento coletivo realizado por cardumes, nota-se o comportamento coletivo ordenado dos peixes. (em: <http://olivrodanatureza.blogspot.com.br/2013/06/cardumes.html> acesso 18 dezembro 2014) . . . . . p. 18
- 4 Caixa de Simulação, em azul estão representados os obstáculos em forma de semicírculos fixados em pontos regulares na caixa. Já em vermelho estão representadas as SPP que são livres para percorrer toda a região da caixa de simulação. . . . . p. 21
- 5 Condições Periódicas de Contorno(CPC) para uma rede de simulação em 2D. Nota-se que o sistema possui cópias idênticas às suas bordas. (Sondre K. Schnell, Finite-size scaling of thermodynamic properties in small systems. em: <http://homepages.ulb.ac.be/~mesposit/org-site-test/Kjelstrup.html>. acesso 18 dezembro 2014). . . . . p. 23
- 6 A figura acima mostra a trajetória de uma partícula submetida a um movimento irregular(movimento browniano), o movimento de partículas do tipo SPP podem ser simuladas com movimento browniano. (em: <http://encyclopedia2.thefreedictionary.com/Brownian+Movement> acesso 18 dezembro 2014). . . . . p. 24

7	Geometria da Abertura entre os obstáculos. Podemos notar através da geometria do esquema as relações entre o tamanho da célula $a$ , o diâmetro $D$ dos obstáculos e a separação $d$ entre os mesmos. . . . .	p. 26
8	$\langle v_x \rangle \times \eta$ para uma rede de obstáculos na forma de semicírculos sem força externa com (a) $D_0 = 1$ e $5$ ; (b) $D_0 = 7.5$ e $10$ . . . . .	p. 27
9	Dependência da velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) em relação ao diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ) para uma rede de obstáculos na forma de semicírculos sem força externa aplicada, e com separação entre os obstáculos $d = 5$ , número de obstáculos $N_0 = 100$ , ruído $\eta = 0.001$ e frações de ocupação $\phi = 0.950$ e $\phi = 0.244$ . . . . .	p. 28
10	Dependência das velocidades média afastadas ( $\langle v_{afas} \rangle$ ) e próximas ( $\langle v_{próx} \rangle$ ) do sistema em relação ao diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ) para uma rede de obstáculos na forma de semicírculos sem força externa com uma fração de ocupação $\phi = 0.244$ , ruído $\eta = 0.001$ , número de obstáculos $N_0 = 100$ , distância entre os obstáculos $d = 5$ e diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ) variando de 1 em 1 de 1 a 10. . . . .	p. 29
11	Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para $\eta=0.0001$ , $N_0 = 100$ , $\phi = 0.310$ , $L = 100$ , $a = 10$ , $D_0 = 5$ com Theta= $0^\circ$ (a) e Theta= $30^\circ$ (b) em relação à força externa $F_{dc}$ . . . . .	p. 31
12	Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para $\eta=0.0001$ , $N_0 = 100$ , $\phi = 0.310$ , $L = 100$ , $a = 10$ , $D_0 = 5$ com Theta= $45^\circ$ (a) e Theta= $60^\circ$ (b) em relação à força externa $F_{dc}$ . . . . .	p. 33
13	Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para $\eta=0.0001$ , $N_0 = 100$ , $\phi = 0.310$ , $L = 100$ , $a = 10$ , $D_0 = 5$ com Theta= $90^\circ$ (a) e Theta= $120^\circ$ (b) em relação à força externa $F_{dc}$ . . . . .	p. 34
14	Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para $\eta=0.0001$ , $N_0 = 100$ , $\phi = 0.310$ , $L = 100$ , $a = 10$ , $D_0 = 5$ com Theta= $150^\circ$ (a) e Theta= $180^\circ$ (b) em relação à força externa $F_{dc}$ . . . . .	p. 35
15	Comportamento da velocidade média do sistema para $F_{dc} = 0.10$ (a) e $F_{dc} = 1.0$ (b) com $\eta=0.0001$ , $N_0 = 100$ , $\phi = 0.310$ , $L = 100$ , $a = 10$ , $D_0 = 5$ com relação a variação do ângulo $\theta$ de $0^\circ$ a $180^\circ$ . . . . .	p. 37



- 16 Velocidade média do sistema para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $D_0 = 7$ ,  $a = 10$ ,  $L = 100$ ,  $d = 3$  com Theta= $60^\circ$  (a) e Theta= $90^\circ$  (b) com força externa, variando a fração de ocupação  $\phi$  em 0.310, 0.620 e 0.930. . . . . p. 39
- 17 Velocidade média do sistema para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $D_0 = 7$ ,  $a = 10$ ,  $L = 100$ ,  $d = 3$  com Theta= $120^\circ$  com força externa, variando a fração de ocupação  $\phi$  em 0.310, 0.620 e 0.930. . . . . p. 40

# LISTA DE SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
SPP	<i>Self Propelled Particles</i>
MBA	Movimento Browniano Angular
CPC	Condições Periódicas de Contorno
RK2	Runge-Kutta de 2ª Ordem

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO</b>	p. 14
<b>2</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	p. 15
2.1	Partículas com autopropulsão . . . . .	p. 15
2.2	Movimento Coletivo . . . . .	p. 17
<b>3</b>	<b>MODELO</b>	p. 19
3.1	Modelo 2D . . . . .	p. 19
3.2	Equações do movimento para as SPP . . . . .	p. 20
3.3	Condições periódicas de contorno . . . . .	p. 23
3.4	Movimento Browniano . . . . .	p. 23
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	p. 25
4.1	Rede de Semicírculos sem força externa aplicada . . . . .	p. 25
4.1.1	Resultados variando $D_0$ (Diâmetro dos obstáculos) . . . . .	p. 25
4.2	Rede de Semicírculos com força externa aplicada . . . . .	p. 30
4.2.1	Resultados para Ruído=0.0001 e $\phi=0.310$ . . . . .	p. 30
4.3	Rede de Semicírculos com força externa aplicada (Análise da dependência da velocidade média do sistema em relação $\phi$ ). . . . .	p. 38
4.3.1	Resultados para variando $\phi$ (fração de ocupação) . . . . .	p. 38
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b>	p. 41
<b>6</b>	<b>APÊNDICE</b>	p. 43

6.1	Apêndice A: Método de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco. . . . .	p. 43
6.1.1	Método da expansão de X . . . . .	p. 43
6.1.2	Propriedades de Correlação $R(\Delta t)$ . . . . .	p. 44
6.2	Extendendo o Método de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco . . . . .	p. 45

<b>REFERÊNCIAS</b>		p. 48
--------------------	--	-------

# 1 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

No capítulo 2 deste trabalho (Introdução) iremos apresentar a definição de partículas com autopropulsão ( do inglês *Self Propelled Particles* SPP) , alguns exemplos de SPP, suas características e modelos de representação. Abordaremos características que surgem em função do movimento coletivo de partículas do tipo SPP. Apresentaremos a definição de movimento coletivo, alguns exemplos onde esse tipo de movimento é predominante e quais são as consequências da coletividade.

No capítulo 3 iremos introduzir o modelo estudado neste trabalho, as equações do movimento das SPP e o algoritmo utilizado para a integração das mesmas (Runge-Kutta de 2<sup>a</sup> Ordem ou RK2 para o ruído branco). Definiremos também a velocidade das partículas, as propriedades do ruído a elas associadas, as interações consideradas no modelo (partícula-obstáculo e partícula-partícula) e as propriedades de interesse na determinação do movimento. Ainda, introduziremos as condições periódicas de contorno utilizadas em nosso modelo e discutiremos o movimento browniano apresentado pelas SPP.

No capítulo 4 apresentaremos os resultados obtidos em nossas simulações. Trataremos primeiramente o caso em que partículas do tipo SPP estão na presença de obstáculos na forma de semicírculos e estudaremos a velocidade média desse sistema com relação à intensidade do ruído branco, ao diâmetro dos obstáculos e à fração de ocupação das SPP. Posteriormente, trataremos o caso em que as SPP estão sujeitas à uma força externa (para uma dada fração de ocupação e ruído), analisando neste caso, a velocidade média do sistema em relação à intensidade da força externa aplicada e o ângulo em que a mesma faz com o eixo de referência  $x$ . Iremos comparar esses resultados para diferentes frações de ocupação de SPP.

Por fim, no capítulo 5, mostraremos as conclusões e perspectivas deste trabalho.

## 2 INTRODUÇÃO

### 2.1 Partículas com autopropulsão

Um modelo simples para a descrição da matéria ativa é composto por partículas autopropelidas ou com autopropulsão.

Partículas com autopropulsão são capazes de utilizar sua energia interna (química, por exemplo) para gerar movimento [1–4]. Podemos observar na natureza elementos que podem ser tratados como uma SPP: a) organismos naturais como microorganismos (bactérias, protozoários e vírus), que geralmente utilizam energia própria ou de células infectadas para gerar movimento através de flagelos, cílios ou até mesmo pseudópodes; b) partículas geradas por manipulação em laboratório, como as micropartículas artificiais (Janus<sup>1</sup>) [6] que são uma classe de micronadadores artificiais que podem se mover extraindo energia a partir do seu meio de suspensão. Partícula Janus possuem duas faces distintas com propriedades físicas ou químicas diferentes, gerando movimento através de indução química, gradientes de temperatura ou até mesmo diferenças de concentração na face ativa da partícula. Partículas do tipo SPP também são utilizadas para modelar sistemas macroscópicos. A exemplos desses sistemas temos: bandos, rebanhos e cardumes de animais (*flocking*) [12], ou ainda tráfego de automóveis.

Dentre as principais características de sistemas formados por SPP destaca-se o aparecimento espontâneo de ordenação no movimento coletivo [7, 8] e flutuações gigantes na densidade do sistema [8, 9]. Coleções de SPP são sistemas fora do equilíbrio cuja energia não é conservada. Sistemas de SPP exibem um comportamento coletivo [10, 11].

Dois interessantes modelos utilizados para simular sistemas com SPP são: O modelo de Vicsek [12] e o modelo do movimento Browniano angular (MBA) [13]. No presente trabalho adotaremos o modelo do MBA que será melhor abordado posteriormente no

---

<sup>1</sup>Originalmente, o termo partícula Janus foi criado por C. Casagrande em [5] para descrever partículas de vidro esféricas com um dos hemisférios hidrofílico e o outro hidrófobo. O termo refere-se ao Deus romano Janus, que representava o "início" e a "transição" (fim de um dado ciclo).



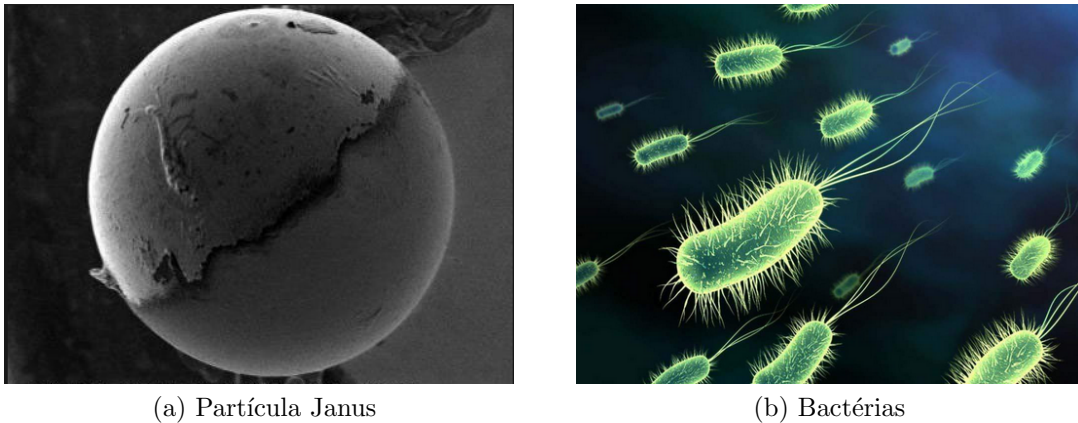


Figura 1: Exemplos de Partículas que podem ser tratadas como uma SPP, a esquerda(a) temos a partícula Janus e a direita a figura que representa bactérias(b). (Figura a) (Durham, N.C., em: <http://today.duke.edu/2009/08/janus.html>, acesso em: 19 dezembro 2014. Figura b) em: <http://www.clickescolar.com.br/bacterias-patogenicas.htm> acesso em 19 dezembro 2014.)

capítulo dedicado ao mesmo.

No modelo de [14], as perturbações nas velocidades das SPP são consequências naturais de fatores estocásticos e determinísticos que afetam o movimento dos organismos em bando levando-os a tomar direções aleatórias. Os componentes movimentam-se com velocidade absoluta  $v_o$  constante e assumem uma direção média dentro de uma dada distância  $R$ . As equações do movimento para a velocidade ( $\vec{v}_i$ ) e a posição ( $\vec{r}_i$ ) da partícula  $i$  com vizinhos  $j$  são:

$$\vec{v}_i(t+1) = v_o \frac{\langle \vec{v}_j(t) \rangle_R}{|\langle \vec{v}_j(t) \rangle_R|} + \text{perturbação}, \quad (2.1)$$

e

$$\vec{r}_i(t+1) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t+1), \quad (2.2)$$

onde  $t+1$  é o passo seguinte a  $t$  na simulação computacional,  $\langle \dots \rangle_R$  representa o valor médio das velocidades dentro de um círculo de raio  $R$  em torno da partícula  $i$ . Os parâmetros variados por Vicsek em seu modelo são a densidade  $\rho$ , a velocidade das partículas  $v_o$  e a intensidade das perturbações ( $\eta < 1$ ). No modelo de Vicsek também se utiliza um parâmetro de ordem ( $\xi$ ) para tratar movimentos coletivos, definido da seguinte forma:

$$\xi = \frac{1}{Nv_o} \left| \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \right|, \quad (2.3)$$

onde  $N$  é o número total de partículas e  $v_o$  suas respectivas velocidades médias absolutas. Se o parâmetro de ordem  $\xi$  varia de forma descontínua durante uma "transição"<sup>2</sup>, isso

<sup>2</sup>Vicsek utilizou o termo transição em seu trabalho, porém sistemas fora do equilíbrio não possuem

é caracterizado como uma transição de primeira ordem, no caso em que o parâmetro de ordem varia continuamente durante a transição isso implica uma transição de segunda ordem. Transições de fase de segunda ordem são sempre acompanhados por grandes flutuações de algumas das quantidades relevantes ao sistema [14, 15]. Como sistemas de SPP são fora do equilíbrio, Vicsek propôs tratar as transições desse sistema como se fossem transições dinâmicas e não como transições de fase para sistemas em equilíbrio.

## 2.2 Movimento Coletivo

Movimento coletivo é uma característica comum em sistemas naturais de muitos componentes . Por exemplo, em cardumes, andorinhas voando em grupo, rebanhos percorrendo o pasto, dezenas de zebras fugindo de um predador ou até mesmo centenas de pessoas deslocando-se no centro das grandes cidades ou nas saídas dos grandes estádios de futebol. Além de sistemas macroscópicos, o movimento coletivo também manifesta-se em sistemas microscópicos tais como microorganismos (bactérias, vírus, protozoários), micropartículas artificiais (Janus) e também células [21, 22].

O movimento coletivo é uma das manifestações de um fenômeno mais geral denominado comportamento coletivo [22]. Muito embora o movimento de apenas um integrante desses grupos passe despercebido e sem ordenação, podemos observar que a presença de grande quantidade desses elementos acarreta um ordenamento que revela, por exemplo, padrões estruturais e dinâmicos (comportamento coletivo). Esse comportamento manifesta-se naturalmente e é de grande importância em fluidos complexos.

Na presença de muitos indivíduos semelhantes, as interações entre os elementos podem ser simples (atração ou repulsão) ou até mesmo mais complexas, podendo ocorrer entre vizinhos no espaço ou em uma rede subjacente.

Sob certas condições, um indivíduo pode possuir um padrão de comportamento determinado pelos efeitos coletivos, ou seja, devido aos outros constituintes do sistema. A característica mais visível do comportamento coletivo é que a ação de uma unidade individual é dominada pela influência dos outros constituintes. O indivíduo comporta-se de forma inteiramente diferente da maneira como ele se comportaria sozinho [22].

Sistemas de SPP não conservam momento nas colisões, ao contrário de sistemas em equilíbrio segundo a mecânica Newtoniana, onde o momento total é conservado. Sistemas de SPP, portanto são fora do equilíbrio.

---

transições da forma usual estudada em termodinâmica, o termo é usado em analogia.



Figura 2: Rebanho(Ovelhas) percorrendo o pasto pode representar um tipo de movimento coletivo onde existe a presença de um movimento ordenado. (Ed Yong, em: <http://www.wired.com/2013/03/powers-of-swarms/all/> acesso 18 dezembro 2014.)



(a) Cardume 1



(b) Cardume 2

Figura 3: A esquerda(a) e a direita (b) temos exemplos de movimento coletivo realizado por cardumes, nota-se o comportamento coletivo ordenado dos peixes. (em: <http://olivrodanatureza.blogspot.com.br/2013/06/cardumes.html> acesso 18 dezembro 2014)

Partículas do tipo SPP possuem comportamento coletivo de grande interesse. Por se tratar de um sistema fora do equilíbrio, torna-se de grande importância esse estudo para melhor entendermos o complexo comportamento de processos fora do equilíbrio. O transporte efetivo de SPP tem sido estudado com bastante interesse [16–18], visto a quantidade de aplicações em diversas áreas da ciência, medicina [19, 20] e tecnologia.

No próximo capítulo iremos apresentar o modelo 2D proposto para as SPP.

## 3 MODELO

### 3.1 Modelo 2D

Analizamos um sistema bidimensional (2D) que contém  $N_{par}$  partículas autopropelidas (SPP), cada uma com diâmetro  $d_{par}$  e  $N_0$  obstáculos na forma de semicírculos (diâmetro  $D_0$ ), com face plana perpendicular ao eixo  $x$ . A caixa de simulação é quadrada, de lado  $L$ , com condições periódicas de contorno em ambas as direções  $x$  e  $y$ . Os obstáculos são dispostos em um arranjo regular (rede quadrada), de modo que a caixa de simulação pode ser dividida em células de lado  $a$ , cada uma contendo um obstáculo no centro [ver figura 7].

As interações SPP-SPP e SPP-obstáculo são do tipo disco-deformáveis onde os obstáculos são rígidos. As  $N_{par}$  SPP são dispostas inicialmente em posições aleatórias. As SPP descrevem um Movimento Browniano Angular (MBA).

A força  $\vec{F}_i$  é a força total sob a  $j$ -ésima SPP e é dada por:

$$\vec{F}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}, \quad (3.1)$$

essa soma é realizada sob todos os  $j$  obstáculos e partículas da rede. Como estamos considerando a interação entre partícula-obstáculo da forma  $kx$ , a força  $\vec{F}_{ij}$  será:

$$\vec{F}_{ij} = \kappa \alpha_{ij} \hat{r}_{ij}, \quad (3.2)$$

As interações com os obstáculos são da forma  $\kappa x$  (coeficiente de restituição), onde  $\kappa_0 \gg \kappa$  ou seja, estamos considerando o limite em que os obstáculos são praticamente rígidos e estáticos [23].

O termo  $\alpha_{ij}$  é a distância entre o disco  $i$  e o objeto (disco ou obstáculo respectivamente)  $j$  e é dada por:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - r_{ij}, \quad (3.3)$$

onde  $d_i = d$  (para partícula) e  $d_j = d$  ou  $d_j = D$  (para partícula ou obstáculo), e no caso de contato entre partícula e o lado plano de um obstáculo em forma de semicírculo  $d_j = 0$  e  $r_{ij}$  é a distância entre  $i$  e  $j$ .

As SPP movem-se no plano  $xy$  e possuem velocidade de autopropulsão dada por:

$$\vec{v}_i = v_o \cos \theta_i(t) \hat{i} + v_o \sin \theta_i(t) \hat{j}, \quad (3.4)$$

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

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0, \quad (3.5)$$

e

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = (2\eta \Delta t)^{\frac{1}{2}} \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (3.6)$$

onde  $\eta$  é a intensidade do ruído branco e  $\Delta t$  é passo de tempo.

Em nosso modelo, assim como em [13], as partículas não executam movimento Browniano térmico.

## 3.2 Equações do movimento para as SPP

As equações do movimento para a  $j$  - ésima SPP são dadas por:

$$\frac{\partial \vec{r}_j}{\partial t} = \vec{v}_j + \mu \vec{F}_j, \quad (3.7)$$

e

$$\frac{\partial \theta_j}{\partial t} = \eta_j(t), \quad (3.8)$$

onde  $\mu$  é a motilidade da partícula.

A figura 4 mostra um caso em que 16 obstáculos(em azul) na forma de semicírculos são dispostos na caixa de simulação e as partículas(cor vermelha) são colocadas inicialmente



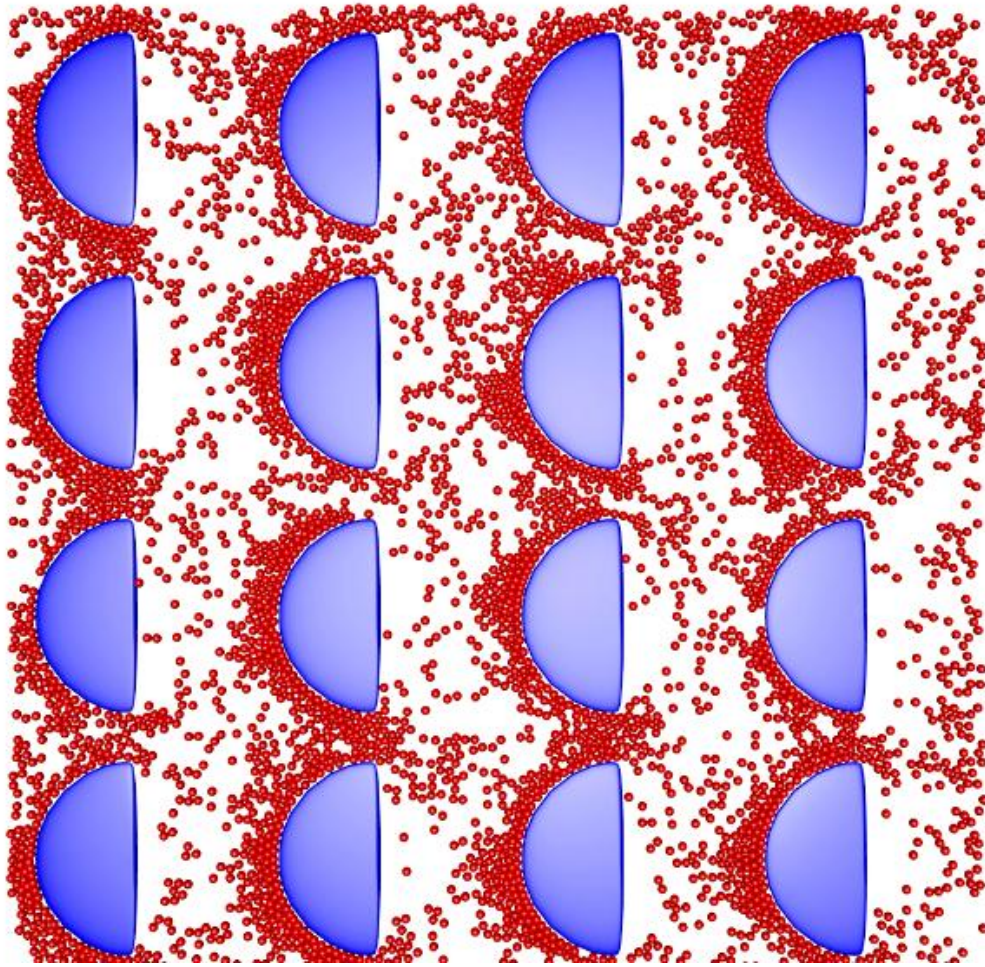


Figura 4: Caixa de Simulação, em azul estão representados os obstáculos em forma de semicírculos fixados em pontos regulares na caixa. Já em vermelho estão representadas as SPP que são livres para percorrer toda a região da caixa de simulação.

em posições aleatórias. Em nosso modelo, utilizamos uma velocidade absoluta  $v_o = 1$  para todas as partículas. Utilizamos também condições periódicas de contorno (CPC) em ambas as direções  $x$  e  $y$  da caixa de simulação. As equações do movimento são integradas usando o método estocástico do algoritmo de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco<sup>1</sup> [24].

Utilizamos como um parâmetro a ser fixado, a fração de ocupação  $\phi$ , que nada mais é do que a razão da área ocupada pelas  $N$  partículas do sistema pela área total disponível para ocupação, ou seja, a área total da caixa de simulação ( $L^2$ ) menos a área ocupada pelos obstáculos ( $S_T$ ). Desta forma,  $\phi$  é dado por :

$$\phi = \frac{N\pi d^2}{4(L^2 - S_T)}, \quad (3.9)$$

<sup>1</sup>O método de RK2 do ruído branco é apresentado em detalhes no apêndice A.



A fração de ocupação  $\phi$  está diretamente relacionada à densidade  $\rho$  de SPP no sistema, ou seja:

$$\phi = \pi d^2 \rho, \quad (3.10)$$

A presença dos obstáculos afeta a dinâmica das SPP. Devido a geometria dos obstáculos na forma de semicírculos, observamos a tendência das partículas, ao atingirem o lado convexo dos obstáculos, de movimentarem-se ao redor dos mesmos como num vórtex, porém quando as partículas atingem o lado plano o movimento ao redor é cessado e as partículas passam a se deslocarem aleatoriamente. Observa-se que a trajetória de uma só SPP não se diferencia na presença ou não dos obstáculos, esse efeito é puramente devido ao movimento coletivo e a quebra de simetria que obstáculos em forma de semicírculos impõem ao sistema. No presente modelo não consideramos interações hidrodinâmicas.

Em nosso modelo, utilizamos um número razoável de passos de simulação, da ordem de milhões. No início, definimos o que chamamos de termalização, que pode ser entendido como o tempo necessário dado ao sistema para que ele esqueça seu estado inicial, na hipótese de ele não se encontrar em um estado metaestável. O estado em que o sistema atinge após a termalização pode ser entendido como aquele em que o comportamento de interesse ao sistema não é mais afetado pela configuração inicial. Após a termalização, o sistema atinge um certo número de passos de simulação onde as posições iniciais dos obstáculos (fixos) e as posições das partículas (aleatórias) e as CPC são processadas pelo algoritmo e então começamos a coletar os resultados que nos interessa para o transporte efetivo,  $\langle v_x \rangle$  e  $\langle v_y \rangle$ , que são as médias das velocidades das SPP.

### 3.3 Condições periódicas de contorno

Para desprezarmos os efeitos de borda em nosso modelo de SPP, onde existe um número muito grande de partículas, da ordem de milhares, as condições periódicas de contorno se fazem necessárias. Ao introduzir as CPC no sistema temos uma equivalência à considerar um conjunto limitado de cópias idênticas da região simulada às bordas.

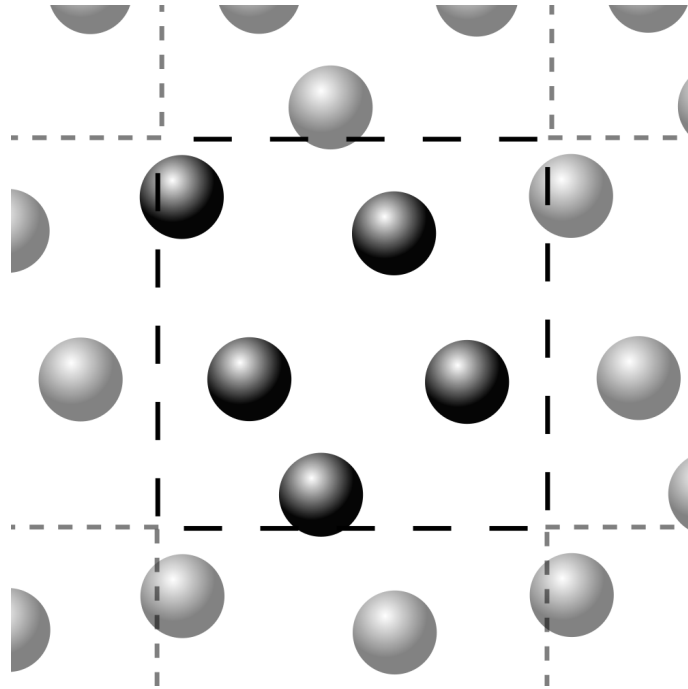


Figura 5: Condições Periódicas de Contorno(CPC) para uma rede de simulação em 2D. Nota-se que o sistema possui cópias idênticas às suas bordas. (Sondre K. Schnell, Finite-size scaling of thermodynamic properties in small systems. em: <http://homepages.ulb.ac.be/~mesposit/org-site-test/Kjelstrup.html>. acesso 18 dezembro 2014).

Ou seja, uma determinada SPP que atinge em determinado tempo  $t$  a borda esquerda da caixa de simulação, imediatamente ela aparecerá no lado oposto da caixa.

### 3.4 Movimento Browniano

O movimento individual dessas SPP pode ser considerado irregular semelhante ao que chamamos de movimento browniano. Esse tipo de movimento foi tratado primeiramente por Robert Brown, que no século 19, observou o movimento de uma suspensão de grãos de pólen em uma região com água e percebeu que esse tipo de movimento era bastante irregular. Logo depois, Brown assumiu que esse movimento era causado por organismos vivos contidos na suspensão, porém depois de realizar vários experimentos descartou essa

possibilidade.

Após vários testes, foi mostrado que esse tipo de movimento irregular se intensificava quando o sistema possuía temperatura mais elevada e quando a viscosidade diminuía. Posteriormente, Albert Einstein tratou o problema do Movimento Browniano elaborando um formalismo matemático mais sólido.

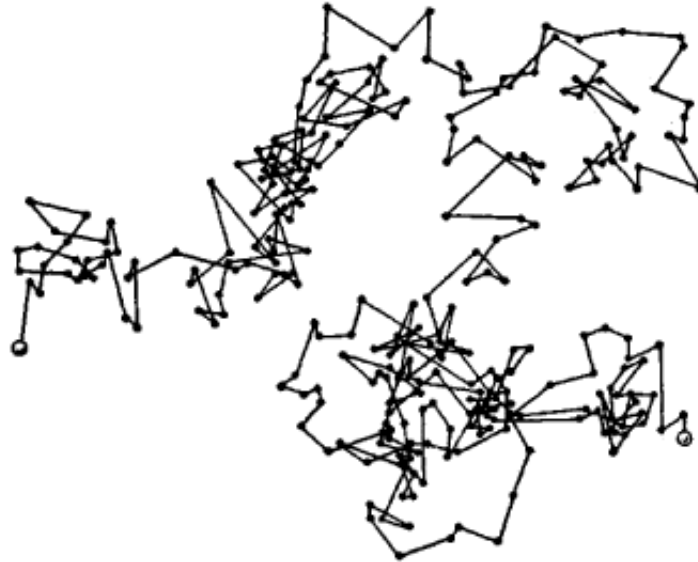


Figura 6: A figura acima mostra a trajetória de uma partícula submetida a um movimento irregular (movimento browniano), o movimento de partículas do tipo SPP podem ser simuladas com movimento browniano. (em: <http://encyclopedia2.thefreedictionary.com/Brownian+Movement> acesso 18 dezembro 2014).

Para as nossas SPP, o movimento browniano é do tipo angular, ou seja, as partículas possuem velocidade absoluta constante  $v_0$  porém possuindo uma probabilidade de mudar de direção dependendo da intensidade do ruído branco  $\eta$  aplicado cujas propriedades são dadas pelas equações (3.5) e (3.6).

Estudaremos casos em que o ruído branco aplicado é baixo ( $\eta = 0.0001$ ) e alta ( $\eta = 1.0$ ) intensidade. Veremos o comportamento do transporte efetivo em relação ao ruído.

## 4 RESULTADOS

### 4.1 Rede de Semicírculos sem força externa aplicada

#### 4.1.1 Resultados variando $D_0$ (Diâmetro dos obstáculos)

As simulações foram realizadas para uma rede quadrada  $L \times L$  com  $N_0$  obstáculos possuindo diâmetro  $D_0$  na forma de semicírculos dispostos no centro de células quadradas de aresta  $a$  com número partículas  $N_{par}$ , cada uma com diâmetro  $d_{par} = 1$ . Todas as distâncias estão em unidades do diâmetro de uma SPP  $d_{par} = 1$ . Em todos os casos consideramos  $\kappa = 10$  e  $\kappa_0 = 1000$ . Inicialmente, faremos um estudo sistemático de  $\langle V \rangle$  em função da fração de ocupação ( $\phi$ ) das SPP, do ruído angular ( $\eta$ ) e do diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ). Estudaremos os casos em que  $D_0 = 1, 5, 7.5$  e  $10$  para as frações de ocupação  $\phi = 0.1, 0.244, 0.488$  e  $0.732$ . Para cada caso consideraremos diferentes valores do ruído  $\eta = 1, 0.5, 0.1, 0.05, 0.01, 0.005, 0.001, 0.0005$  e  $0.0001$ . Fixaremos a distância entre os obstáculos ( $d$ ) em 5 unidades ( $d = 5$ ). Sendo,

$$a = D_0 + d, \quad (4.1)$$

e substituindo  $d = 5$  na equação acima e considerando os casos em que  $D_0 = 1, 5, 7.5$  e  $10$  obteremos respectivamente  $a = 6, 10, 12.5, 15$ . Ou seja, fixamos a abertura entre os obstáculos  $d = 5$  para mantermos as proporções na região de simulação. Com isso, calculamos o tamanho da célula através da equação (4.1), fixamos então o número de obstáculos  $N_0 = 100$ , que nos dá 10 obstáculos por fila, teremos então  $L = 10a$ , logo ficamos com os quatro casos:  $L = 60, 100, 125$  e  $150$ . Os resultados são apresentados na figura 8 em dois gráficos. No gráfico (a) temos a componente  $x$  da velocidade média do sistema ( $\langle v_x \rangle$ ) em relação ao ruído aplicado para os diâmetros dos obstáculos  $D_0 = 1$  e  $D_0 = 5$  com as frações de ocupação  $\phi = 0.1, 0.244, 0.488$  e  $0.732$ . Observando os resultados, verificamos que para um diâmetro  $D_0 = 1$  (Obstáculos do mesmo tamanho das partículas) a velocidade média do sistema em geral é baixa, quase nula, tanto para

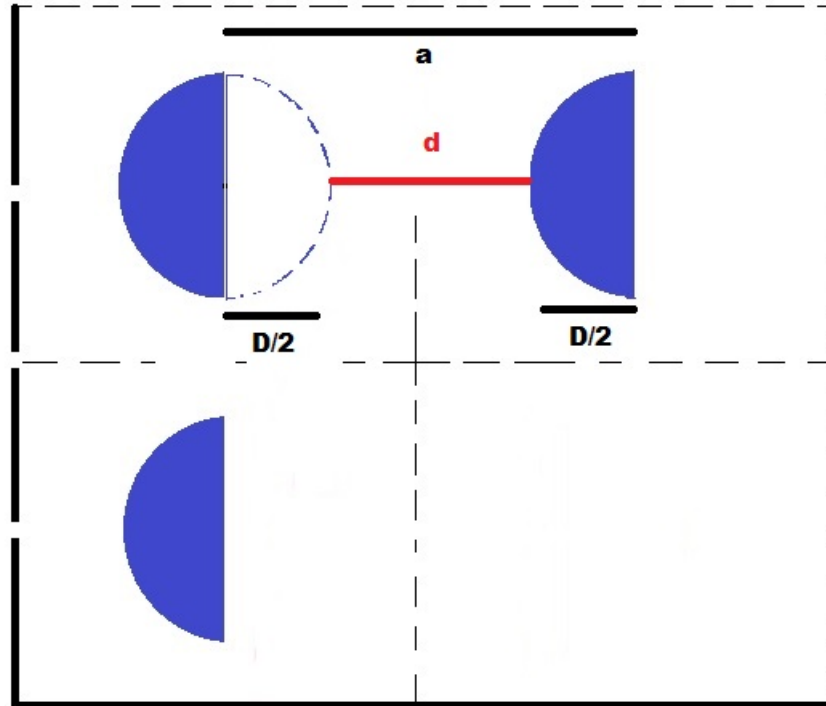


Figura 7: Geometria da Abertura entre os obstáculos. Podemos notar através da geometria do esquema as relações entre o tamanho da célula  $a$ , o diâmetro  $D$  dos obstáculos e a separação  $d$  entre os mesmos.

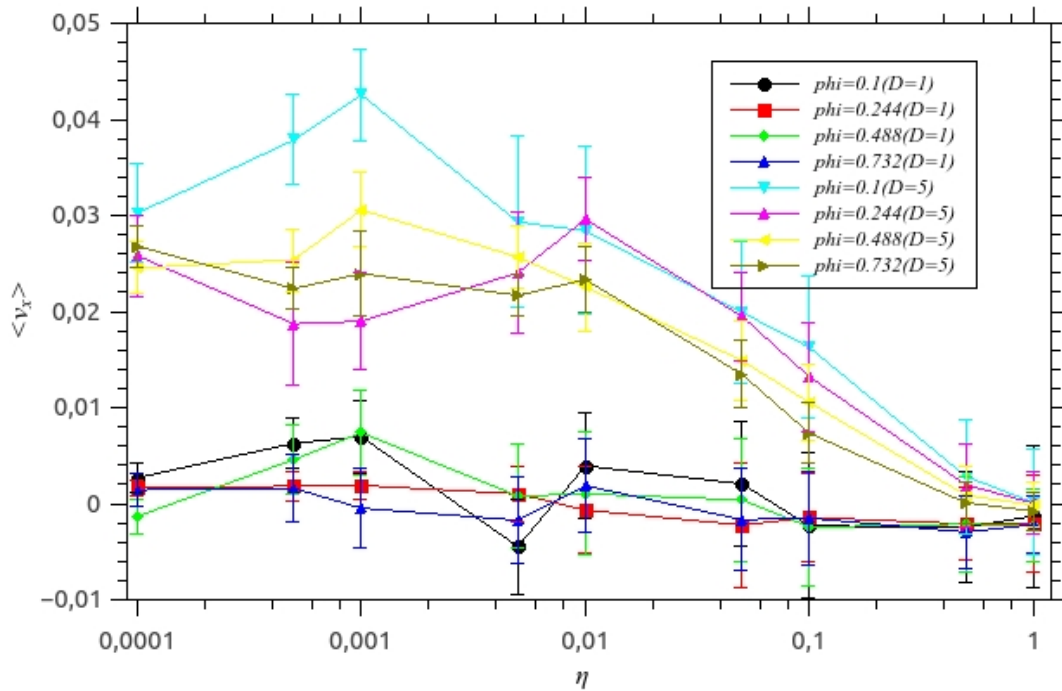
ruído pequeno quanto para ruído grande.

Para o caso  $D_0 = 5$ , a velocidade média do sistema é significativa, tendo comportamento descendente com o aumento do ruído, tanto para baixa fração de ocupação ( $\phi = 0.1$ ) quanto para frações de ocupação mais altas ( $\phi = 0.732$ ).

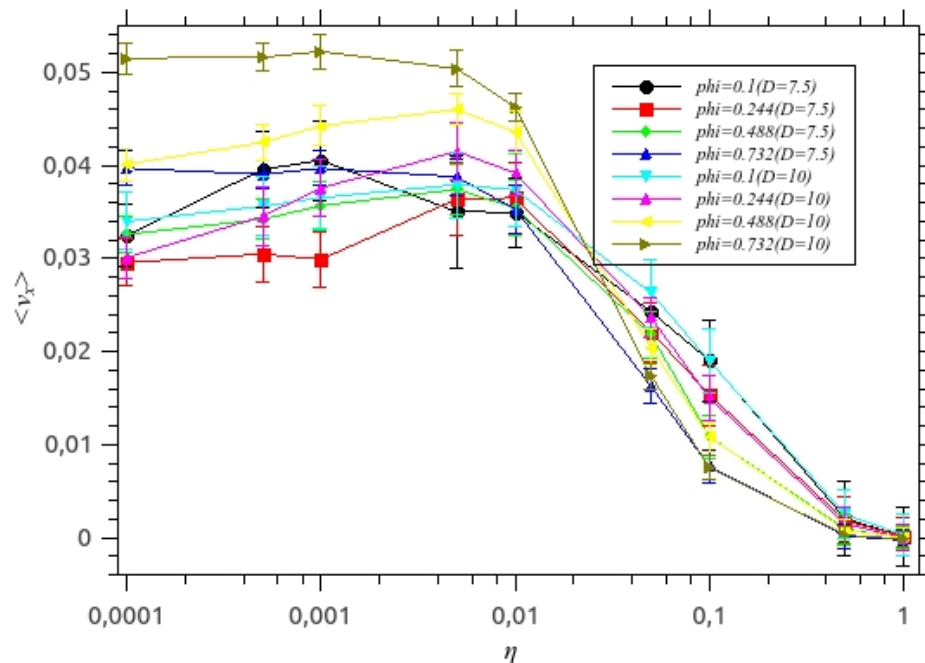
Esses resultados são interessantes para construirmos a ideia de que a velocidade média do sistema está relacionada ao tamanho dos obstáculos (inicialmente  $D_0 = 1$ ), que tendo o mesmo tamanho das partículas não contribuem para um transporte efetivo do sistema. Analisando porém o caso em que  $D_0 = 5$  notamos um considerável aumento na velocidade média do sistema, confirmando a expectativa da dependência da velocidade média do sistema com o diâmetro dos obstáculos.

No gráfico (b) (Figura 8) vemos um aumento considerável na velocidade média do sistema com os diâmetros  $D_0 = 7.5$  e  $D_0 = 10$ , porém o comportamento decrescente se manteve com o aumento do ruído. Observa-se então que a velocidade média do sistema, em geral, aumenta com o crescimento do diâmetro dos obstáculos e diminui com o aumento do ruído. Esse resultado é de grande importância para aplicação de transportes efetivos

de partículas autopropelidas.



(a)  $D_0=1$  e  $D_0=5$



(b)  $D_0=7.5$  e  $D_0=10$

Figura 8:  $\langle v_x \rangle \times \eta$  para uma rede de obstáculos na forma de semicírculos sem força externa com (a)  $D_0=1$  e  $5$ ; (b)  $D_0=7.5$  e  $10$ .

Estudaremos agora o comportamento da velocidade média do sistema com relação ao



tamanho dos obstáculos nessa faixa de ruído. Para isso realizamos diferentes simulações variando o diâmetro dos obstáculos de 1 em 1 começando por 1 até 10, matendo o número de obstáculos fixo igual a 100, a separação entre eles em 5 e analisando a região para frações de ocupação bem grandes  $\phi = 0.950$  e pequenas  $\phi = 0.244$ , o valor do ruído é fixo e igual a 0.001.

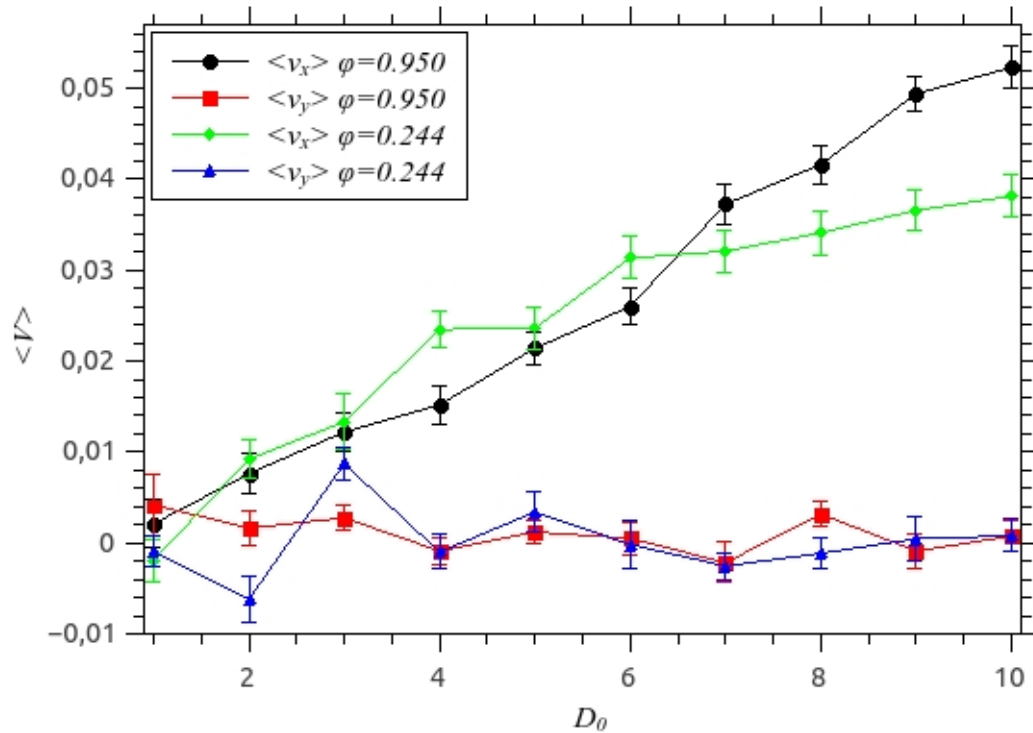


Figura 9: Dependência da velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) em relação ao diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ) para uma rede de obstáculos na forma de semicírculos sem força externa aplicada, e com separação entre os obstáculos  $d = 5$ , número de obstáculos  $N_0 = 100$ , ruído  $\eta = 0.001$  e frações de ocupação  $\phi = 0.950$  e  $\phi = 0.244$ .

Analisando o resultado da figura 9 vemos que a componente  $x$  da velocidade média do sistema cresce com o aumento do tamanho dos obstáculos tanto para  $\phi = 0.950$  como para  $\phi = 0.244$ , com um crescimento um pouco maior para fração de ocupação alta (curva preta  $\phi = 0.950$  em relação a curva verde  $\phi = 0.244$ ), porém na direção  $y$  ela oscila em torno de 0 tanto para fração de ocupação baixa ( $\phi = 0.244$ ) como para fração de ocupação alta ( $\phi = 0.950$ ). Isso nos mostra que há uma dependência no transporte efetivo na direção  $x$  de partículas com relação ao tamanho dos obstáculos, em especial, para densidade alta  $\phi = 0.950$  temos um comportamento bem próximo de linear.

Decidimos então analisar melhor o porque da influência do tamanho dos obstáculos no transporte efetivo. Para isso definimos dois tipos de movimento para as SPP, as SPP

afastadas dos obstáculos e as SPP próximas aos obstáculos.

Uma SPP afastada é aquela em que a distância entre ela e o obstáculo na célula em que a mesma se encontra seja maior que a soma de seu raio com o raio do obstáculo para o lado curvo do obstáculo ou sua posição  $x$  seja maior que a do obstáculo mais seu raio para o lado plano do obstáculo. As SPP próximas são as que não são afastadas.

O resultado abaixo (Figura 10) ilustra o caso em que investigamos as velocidades médias das partículas afastadas ( $\langle v_{xafas} \rangle$  e  $\langle v_{yafas} \rangle$ ) e das partículas próximas ( $\langle v_{xpróx} \rangle$  e  $\langle v_{ypróx} \rangle$ ) para  $\phi = 0.244$ .

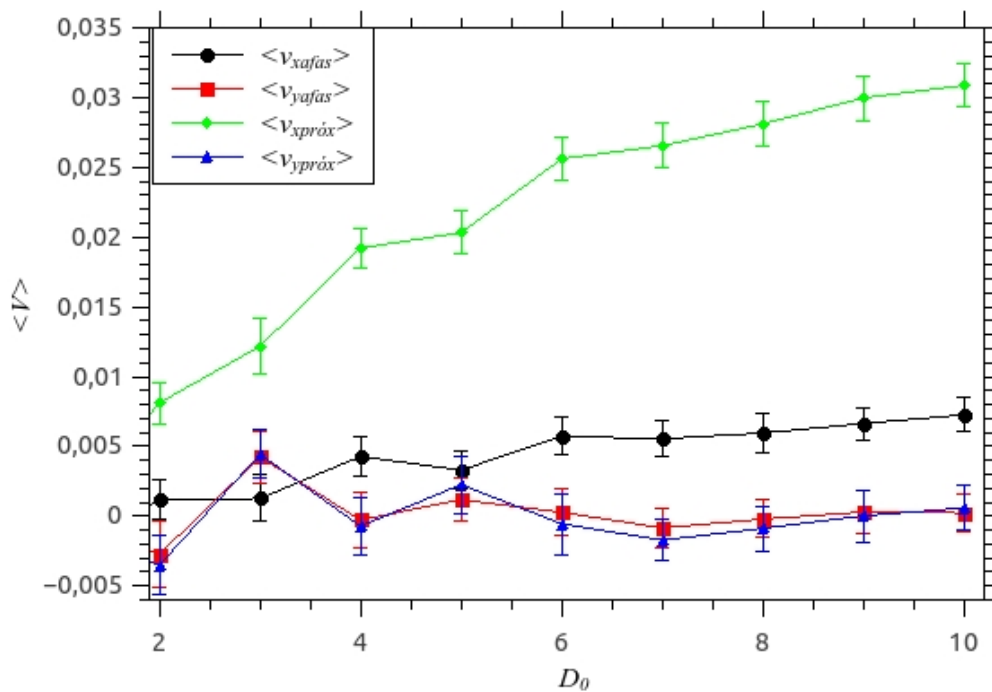


Figura 10: Dependência das velocidades média afastadas ( $\langle v_{afas} \rangle$ ) e próximas ( $\langle v_{próx} \rangle$ ) do sistema em relação ao diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ) para uma rede de obstáculos na forma de semicírculos sem força externa com uma fração de ocupação  $\phi = 0.244$ , ruído  $\eta = 0.001$ , número de obstáculos  $N_0 = 100$ , distância entre os obstáculos  $d = 5$  e diâmetro dos obstáculos ( $D_0$ ) variando de 1 em 1 de 1 a 10.

Com o resultado acima (Figura 10), podemos concluir nesse caso que as partículas ditas próximas aos obstáculos são as que contribuem com uma parcela mais significativa para o transporte efetivo. Visto que, quanto maior o diâmetro dos obstáculos, mais partículas teremos próximas ao seu redor e isso contribuirá para o transporte efetivo.

## 4.2 Rede de Semicírculos com força externa aplicada

### 4.2.1 Resultados para Ruído=0.0001 e $\phi=0.310$ .

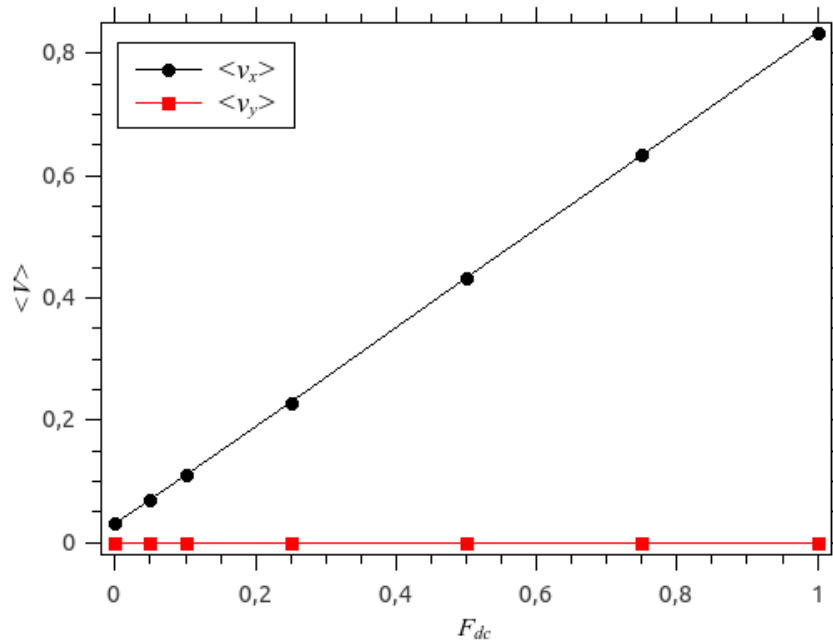
Considerando o caso em que uma força externa atuando sobre todas as SPP e de módulo constante (força externa  $F_{dc}$ ) dada por:

$$\vec{F}_{dc} = F_{dc}[(\cos \theta)\hat{i} + (\sin \theta)\hat{j}] \quad (4.2)$$

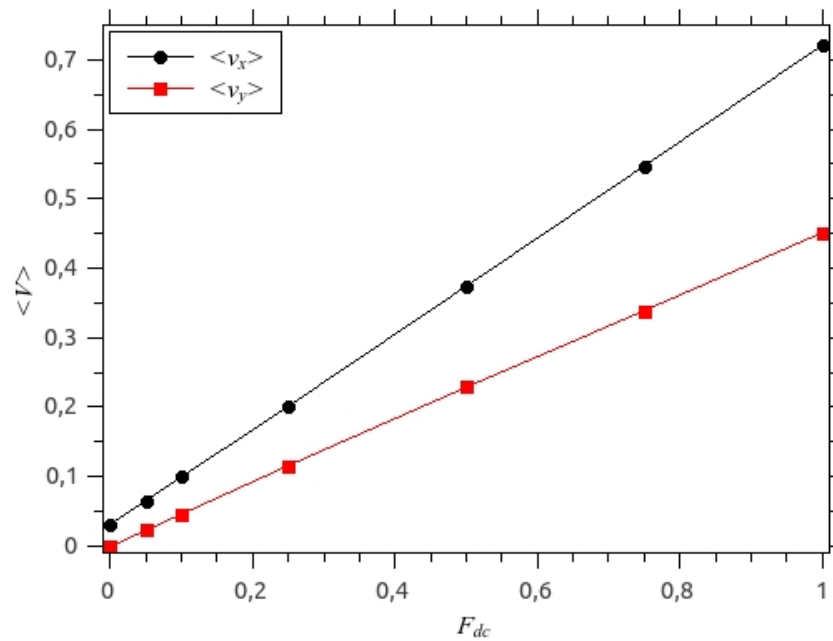
ou seja, as componentes  $x$  ( $F_{dc} \cos \theta$ ) e  $y$  ( $F_{dc} \sin \theta$ ) serão adicionadas nas equações de movimento para as SPP. O ângulo  $\theta$  é o ângulo definido entre a força externa e o eixo  $x$  da nossa caixa de simulação.

As simulações foram realizadas para uma caixa de dimensões  $100 \times 100$  com 100 obstáculos, cada um com diâmetro  $D_0 = 5$ , na forma de semicírculos dispostos no centro de células quadradas de aresta  $a = 10$  com número partícula  $N_{par} = 2420$  ( $\phi = 0.310$ ) de diâmetro  $d_{par} = 1$  cada. Primeiramente, variamos o ângulo  $\theta$  entre a força externa e o eixo  $x$  em  $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 150^\circ$  e  $180^\circ$  e variamos também a intensidade da força externa em 0, 0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 0.75 e 1.0 para cada caso. O ruído branco é fixado em 0.0001.

Para um  $\eta = 0.0001$  (figura 11 a) temos que para  $\theta = 0^\circ$  a velocidade  $\langle v_y \rangle$  do sistema possui valor nulo para todas as intensidades da força externa, enquanto que  $\langle v_x \rangle$  é linearmente crescente. Esse resultado já era esperado, uma vez que para  $\theta = 0^\circ$  a influência da força externa atua somente em  $\langle v_x \rangle$  não tendo componente na direção  $y$ .



(a) Theta=0°



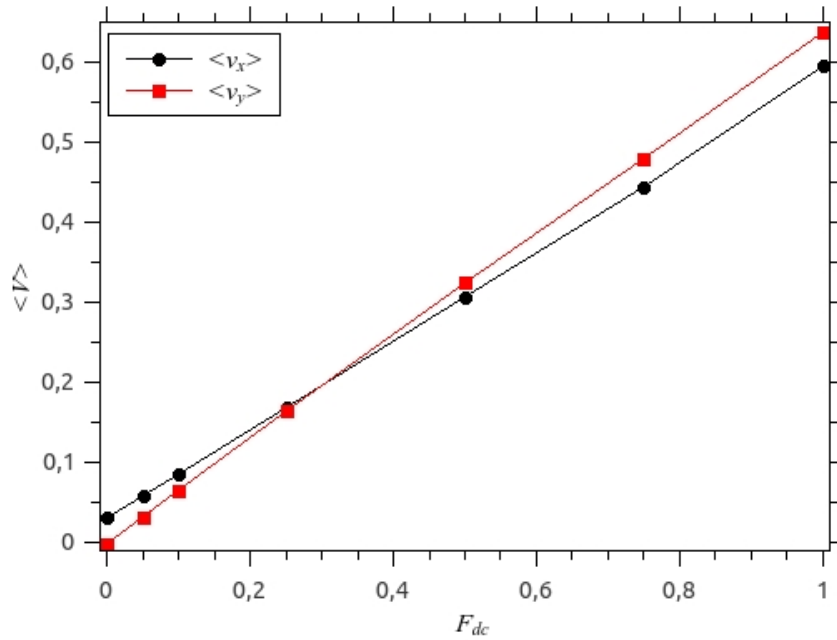
(b) Theta=30°

Figura 11: Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $\phi = 0.310$ ,  $L = 100$ ,  $a = 10$ ,  $D_0 = 5$  com Theta=0° (a) e Theta=30° (b) em relação à força externa  $F_{dc}$ .

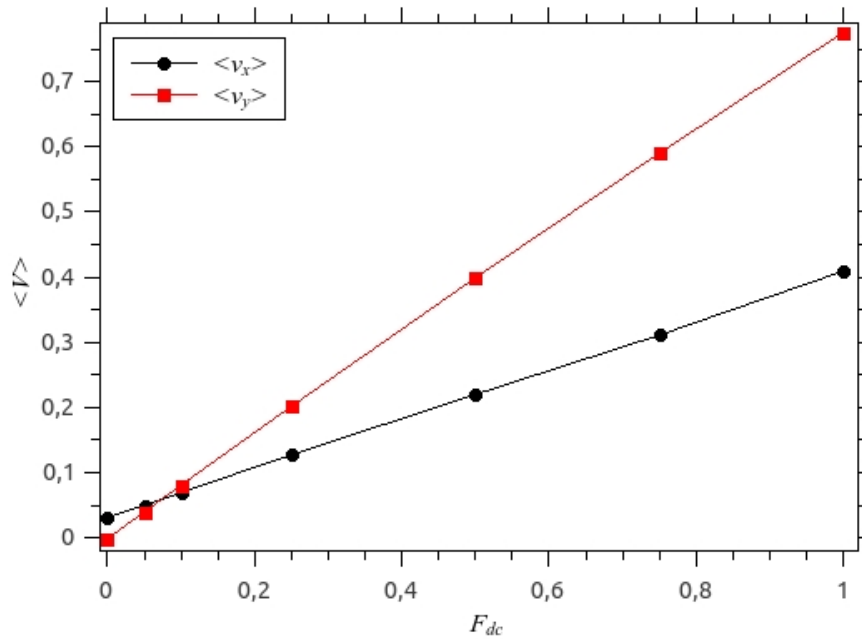
Observando agora a figura 11 (b) com  $\theta = 30^\circ$  temos o surgimento de uma componente  $F_{dc} \cdot \cos \theta$  que induz um comportamento linear crescente na velocidade  $\langle v_x \rangle$ .

Para  $\theta = 45^\circ$  (figura 12 a) temos uma comportamento interessante nas velocidades,

para uma força externa próxima a 0.35 temos que o crescimento de  $\langle v_y \rangle$  supera o de  $\langle v_x \rangle$ , isso pode ser entendido como se a geometria assimétrica dos obstáculos fosse dominante até o limite  $F_{dc} = 0.35$ . Já para  $\theta = 60^\circ$  (figura 12 b) temos esse comportamento para uma força externa próxima a 0.10.



(a) Theta=45°

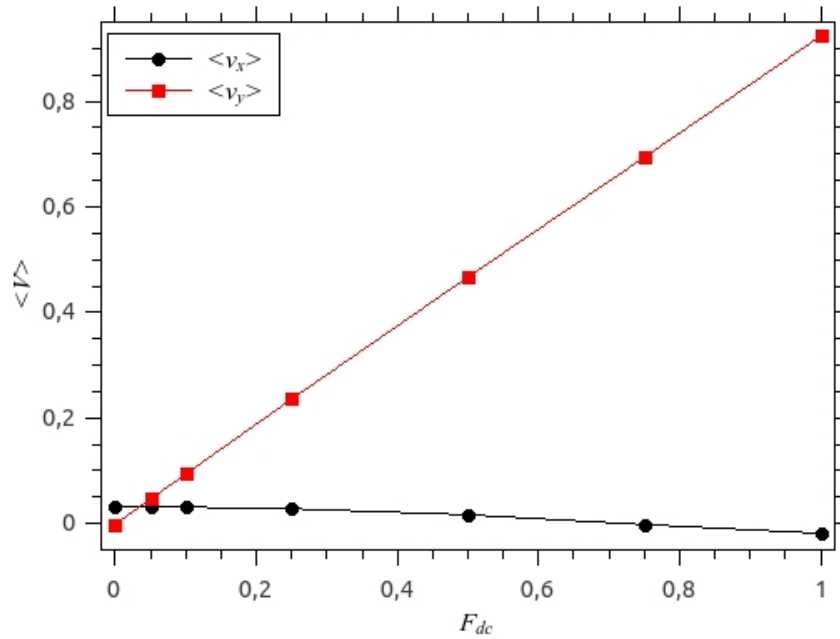


(b) Theta=60°

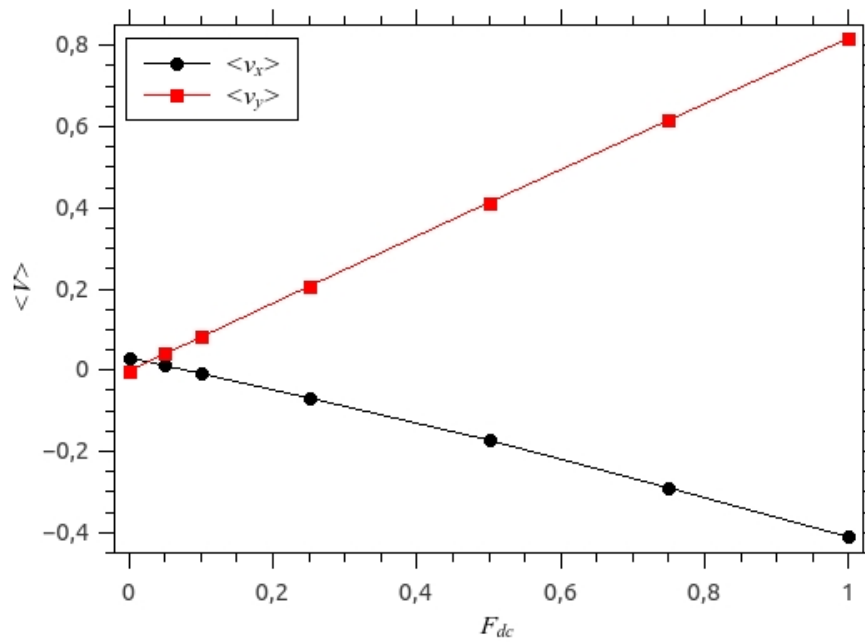
Figura 12: Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $\phi = 0.310$ ,  $L = 100$ ,  $a = 10$ ,  $D_0 = 5$  com Theta=45° (a) e Theta=60° (b) em relação à força externa  $F_{dc}$ .

Já para  $\theta = 90^\circ$  (figura 13 a) temos um comportamento praticamente nulo para a componente  $\langle v_x \rangle$ , já  $\langle v_y \rangle$  se torna máximo com o valor máximo do  $\sin \theta$ . com  $\theta = 120^\circ$  (figura 13 b) temos uma diminuição da inclinação de  $\langle v_x \rangle$  e um novo

surgimento da componente  $\langle v_y \rangle$ .



(a) Theta=90°

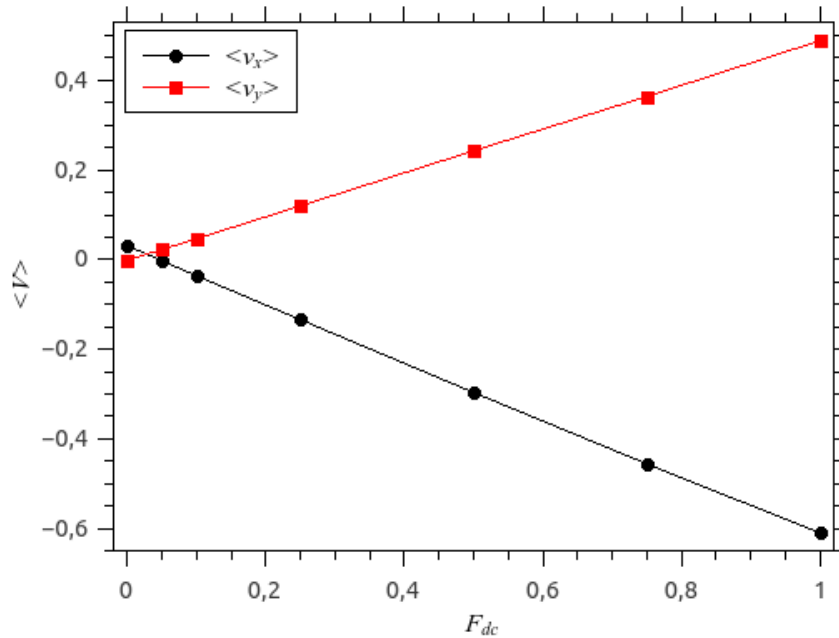


(b) Theta=120°

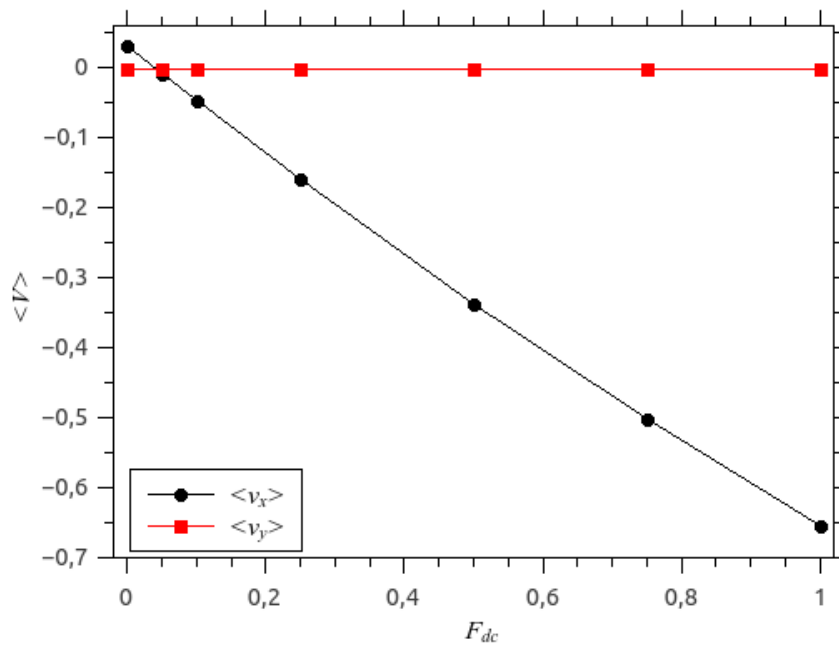
Figura 13: Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $\phi = 0.310$ ,  $L = 100$ ,  $a = 10$ ,  $D_0 = 5$  com Theta=90° (a) e Theta=120° (b) em relação à força externa  $F_{dc}$ .

Com  $\theta = 150^\circ$  (figura 14 a) temos um comportamento decrescente para a componente  $\langle v_x \rangle$  e crescente para  $\langle v_y \rangle$ , ou seja, o sistema está andando no sentido  $-x$  da caixa

de simulação. Para  $\theta = 180^\circ$  (figura 14 b) temos o anulamento da componente  $\langle v_y \rangle$  e um decrescimento máximo da componente  $\langle v_x \rangle$ , nesse caso o sistema possui transporte efetivo máximo no sentido  $-x$ .



(a) Theta=150°



(b) Theta=180°

Figura 14: Velocidade média do sistema ( $\langle V \rangle$ ) para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $\phi = 0.310$ ,  $L = 100$ ,  $a = 10$ ,  $D_0 = 5$  com Theta=150° (a) e Theta=180° (b) em relação à força externa  $F_{dc}$ .



Abaixo (figura 15), escolhemos  $F_{dc} = 0.10$  para mostrar o que acontece com o comportamento das velocidades  $\langle v_x \rangle$  e  $\langle v_y \rangle$  com a variação do ângulo  $\theta$  de  $0^\circ$  a  $180^\circ$ .

Vemos na figura 15(a) que a componente vertical da velocidade média ( $\langle v_y \rangle$ ) cresce com o aumento do ângulo  $\theta$  até atingir seu valor máximo para  $\theta = 90^\circ$  diminuindo posteriormente até chegar a  $\theta = 180^\circ$ . Já a componente horizontal da velocidade média ( $\langle v_x \rangle$ ) inicia em  $\theta = 0^\circ$  com seu valor máximo diminuindo até chegar em seu valor mínimo para  $\theta = 180^\circ$ . Já na figura 16(b), com  $F_{dc} = 1.0$ , observamos o mesmo padrão que na figura 15(a) porém  $\langle v_x \rangle$  indo a zero para  $\theta = 90^\circ$ . Esses padrões na velocidade ficam claro comparando a componente  $x$  que possui dependência com o cosseno de  $\theta$  (curva preta) e a componente  $y$  que possui a dependência com o seno de  $\theta$  (curva vermelha).

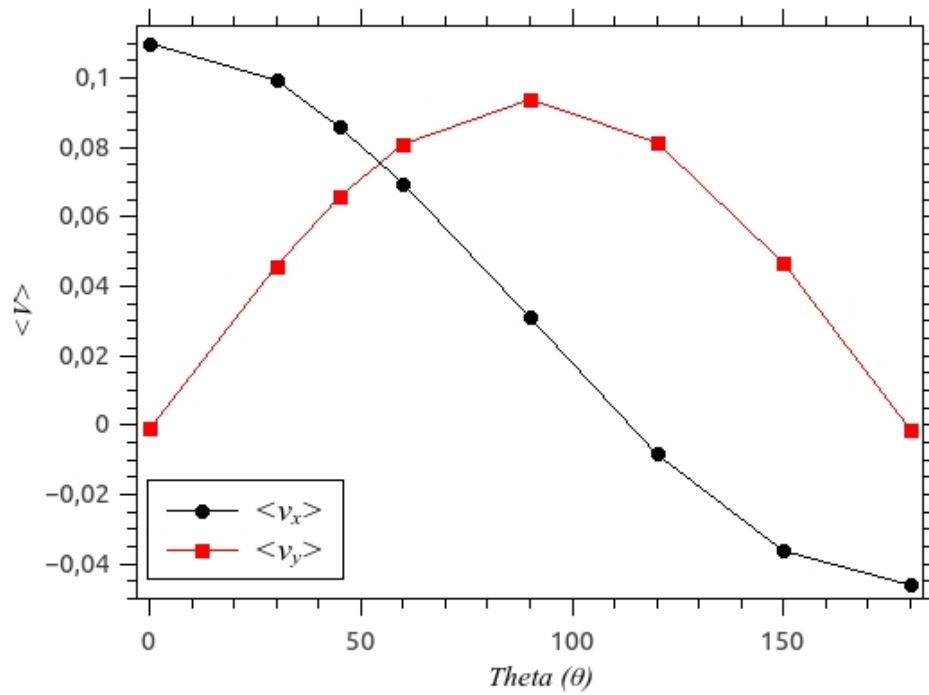
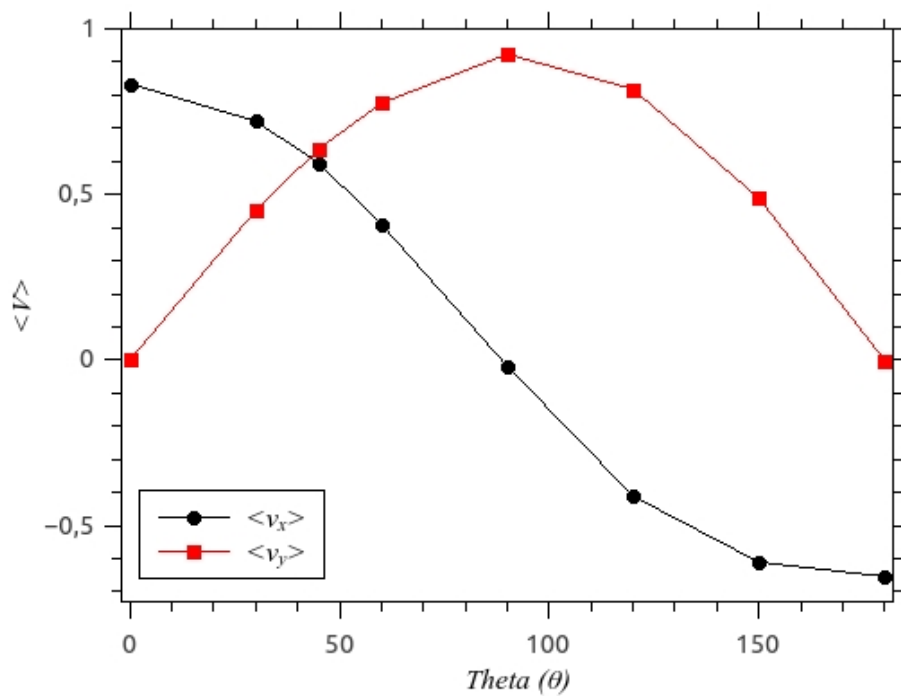
(a)  $F_{dc} = 0.10$ (b)  $F_{dc} = 1.0$ 

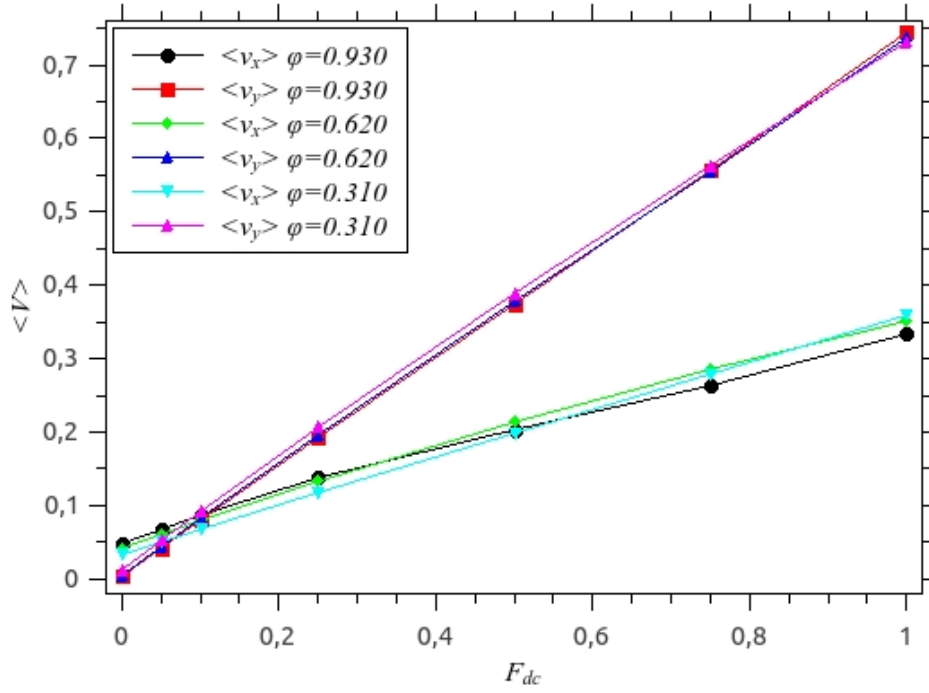
Figura 15: Comportamento da velocidade média do sistema para  $F_{dc} = 0.10$  (a) e  $F_{dc} = 1.0$  (b) com  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $\phi = 0.310$ ,  $L = 100$ ,  $a = 10$ ,  $D_0 = 5$  com relação a variação do ângulo  $\theta$  de  $0^\circ$  a  $180^\circ$ .

### 4.3 Rede de Semicírculos com força externa aplicada (Análise da dependência da velocidade média do sistema em relação $\phi$ ).

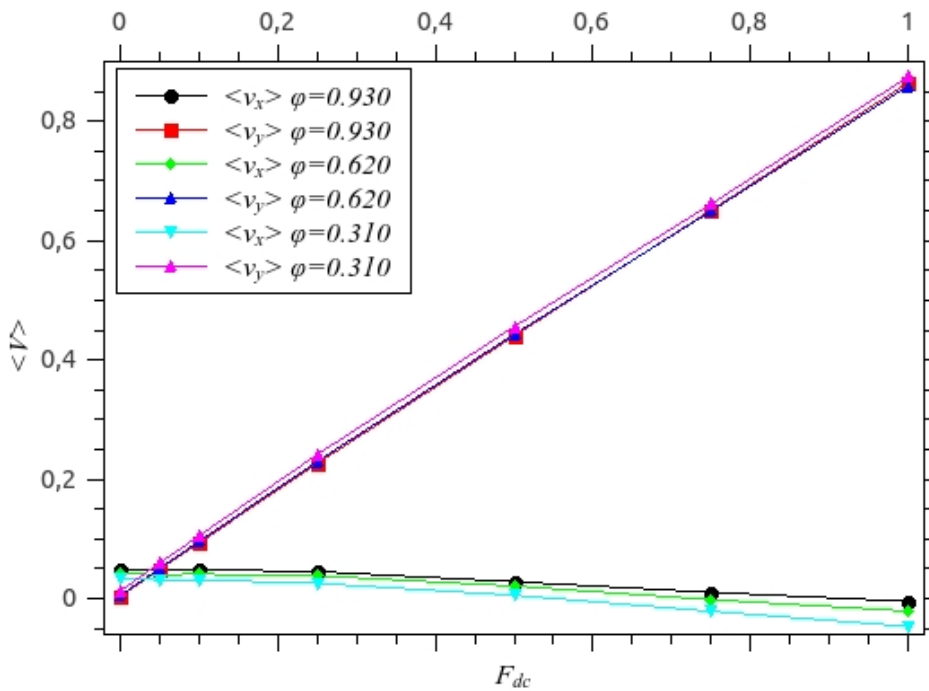
#### 4.3.1 Resultados para variando $\phi$ (fração de ocupação)

Foram feitas análises da velocidade média das SPP em função da fração de ocupação  $\phi$  mantendo o número de obstáculos constante. Analisando primeiramente os casos para  $\phi = 0.310, 0.620, 0.930$  ( $N_{par} = 2420, 4840$  e  $7260$ ). Os outros parâmetros são: número de obstáculos  $N_0 = 100$ , o ruído  $\eta = 0.0001$ , o diâmetro dos obstáculos  $D_0 = 7$  e o tamanho da célula  $a = 10$ , que resulta numa separação de 3 unidades entre os obstáculos ( $d = 3$ ). Analisamos os casos em que a direção da força externa é orientada em relação ao eixo  $+x$  pelos ângulos  $\theta = 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ .

Comparando os resultados das Figuras 16 e 17 com aqueles obtidos na secção anterior (para  $N_{par}=2420$  ou  $\phi = 0.310$ ) vemos que o comportamento da velocidade média do sistema pouco se altera com o aumento da fração de ocupação  $\phi$  das SPP na caixa de simulação, ou seja, para diferentes frações de ocupação, mantendo o número de obstáculos constante e a separação entre os mesmos também constante, a velocidade média do sistema é praticamente a mesma. Porém para  $\theta = 60^\circ$  há uma inversão do valor das velocidades médias dos casos em que  $\phi = 0.930$  e  $\phi = 0.310$ . Para  $F_{dc} < 0.55$  temos  $\langle v_x \rangle_{\phi=0.930}$  maior que  $\langle v_x \rangle_{\phi=0.310}$  já para para  $F_{dc} > 0.55$  temos  $\langle v_x \rangle_{\phi=0.930}$  menor que  $\langle v_x \rangle_{\phi=0.310}$



(a) Theta=60°



(b) Theta=90°

Figura 16: Velocidade média do sistema para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $D_0 = 7$ ,  $a = 10$ ,  $L = 100$ ,  $d = 3$  com Theta=60° (a) e Theta=90° (b) com força externa, variando a fração de ocupação  $\phi$  em 0.310, 0.620 e 0.930.

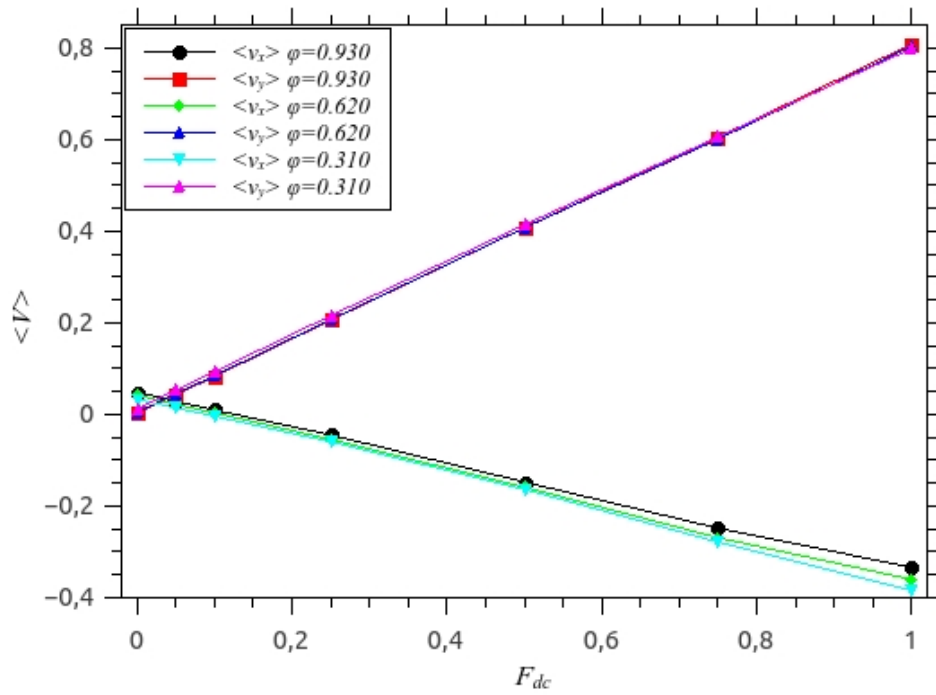


Figura 17: Velocidade média do sistema para  $\eta=0.0001$ ,  $N_0 = 100$ ,  $D_0 = 7$ ,  $a = 10$ ,  $L = 100$ ,  $d = 3$  com Theta=120° com força externa, variando a fração de ocupação  $\phi$  em 0.310, 0.620 e 0.930.

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Primeiramente, na introdução deste trabalho definimos uma partícula de autopropulsão como sendo um elemento que consome energia própria para geração de movimento e mostramos que o movimento coletivo das SPP induz um comportamento peculiar e de importância para transporte efetivo de partículas. Definimos posteriormente as equações do movimento das SPP e escolhemos o método de RK2 modificado para integração numérica das equações. Foi feito um estudo sistemático de um sistema 2D contituído de partículas com autopropulsão (SPP) na presença de obstáculos distribuídos em sítios. Os obstáculos são da forma de semicírculos. Analisamos a velocidade média do sistema em relação ao ruído, densidade de partículas, força externa aplicada, diâmetro dos obstáculos e densidade.

Apresentamos no capítulo 3 o comportamento das SPP imersas em uma rede quadrada  $L \times L$  com obstáculos na forma de semicírculos distribuídos uniformemente com diâmetro  $D_0$  (1, 5, 7.5 e 10) sepradados por uma distância  $d = 5$  e dispostos no centro de células de tamanho fixo  $a = 10$ . Analisamos a velocidade média do sistema ( $\langle v_x \rangle$  e  $\langle v_y \rangle$ ) em relação ao ruído aplicado (0.0001, 0.0005, 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1.0) e a densidade de partículas (0.1, 0.244, 0.488, 0.732) e obtemos resultados que indicaram uma velocidade média do sistema nula para um diâmetro dos obstáculos da ordem do tamanho das partículas e para os casos em que o diâmetro dos obstáculos era maior a velocidade média do sistema aumentava sempre indo a 0 para ruído grande. Analisando a faixa em que o ruído era da ordem de 0.001 e vimos que a velocidade média do sistema era mais intensa (favorecendo o transporte efetivo), isso nos motivou a analisar melhor essa faixa e concluimos que a velocidade média do sistema na direção  $x$  aumenta com o aumento do tamanho do obstáculo. Vimos também que para densidade  $\phi = 0.244$  as partículas que favorecem o transporte efetivo são as que chamamos de SPP próximas aos obstáculos.

Introduzimos então uma força externa ao sistema ( $F_{dc}$ ) variando sua intensidade (0,

0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0) e sua direção em relação ao eixo  $x$  ( $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 150^\circ$  e  $180^\circ$ ). Analisamos a velocidade média do sistema em relação à intensidade dessa força e em relação ao ângulo  $\theta$  mantendo a densidade do sistema constante ( $\phi = 0.310$  ou  $N_{par} = 2420$ ). Nos resultados observamos um comportamento praticamente linear da velocidade média do sistema tanto para  $\langle v_x \rangle$  quanto para  $\langle v_y \rangle$  e analisamos as regiões de maior transporte efetivo e de velocidade média do sistema nula.

Fomos induzidos posteriormente a analisar casos em que tivéssemos uma maior densidade, escolhemos o caso em que a força externa ( $F_{dc}$ ) fazia um ângulo de  $60^\circ, 90^\circ$  e  $120^\circ$  e surpreendentemente observamos que para densidade maiores ( $\phi = 0.620$  e  $0.930$ ) a velocidade média do sistema praticamente manteve-se igual ao caso para densidade baixa ( $\phi = 0.310$ ) indicando que, nesse caso ela independeria da quantidade de partículas submetidas à uma força externa.

Esperamos continuar o estudo com as SPP analisando o comportamento da motilidade do sistema com relação as partículas aprisionadas e as partículas canalizadas para densidades maiores analisando também a influência da variação da camada de aprisionamento. Investigaremos também o comportamento da motilidade em relação a distância entre os obstáculos ( $d$ ). Esperamos analisar também a introdução de efeitos hidrodinâmicos no sistema de SPP.

## 6 APÊNDICE

### 6.1 Apêndice A: Método de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco.

Equações diferenciais estocásticas (EDE) requerem simulações numéricas para análise completa, geralmente utilizamos um tipo de algoritmo de primeira ordem de Euler, porém para uma melhor precisão no resultado usamos o algoritmo de Runge-Kutta incluindo termos estocásticos.

A equação para o ruído branco é dada por:

$$\dot{x} = f(x) + g_w(t), \quad (6.1)$$

onde  $g_w(t)$  é o ruído branco Gaussiano cujas propriedades são:

$$\langle g_w(t) \rangle = 0, \quad (6.2)$$

e

$$\langle g_w(t)g_w(t') \rangle = 2D\delta(t - t'). \quad (6.3)$$

#### 6.1.1 Método da expansão de X

Integrando a seguinte equação:

$$\dot{x} = f(x) + g_w(t),$$

de  $t = 0$  a  $\Delta t$  obteremos:

$$x(\Delta t) = x_0 + \int_0^{\Delta t} f(x(t'))dt' + \int_0^{\Delta t} g_w(t')dt'. \quad (6.4)$$

Definindo as seguintes identidades:

$$\Gamma_0(t) = \int_0^t g_w(t')dt', \quad (6.5)$$



$$\Gamma_i(t) = \int_0^t \Gamma_{i-1}(t') dt', i = 1, 2, 3, \dots \quad (6.6)$$

com a expansão em Taylor em torno de  $x_0$  na equação (6.4) ficamos com:

$$x(\Delta t) = x_0 + \Gamma_0(\Delta t) + f\Delta t + \dots + \frac{1}{i!} f^{(i)} \int_0^{\Delta t} (x - x_0)^i dt' + \dots, \quad (6.7)$$

Inserindo a última equação nela mesma repetidamente, negligenciando termos de ordem maior que  $\Delta t^4$ , teremos :

$$x(\Delta t) = x_0 + \Gamma_0(\Delta t) + f\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t^2 f f^{(1)} + \frac{1}{6}\Delta t^3 (f f^{(1)2} + f^2 f^{(2)}) + \frac{1}{24}\Delta t^4 (f f^{(1)3} + 4f^2 f^{(1)} f^{(2)} + f^3 f^{(3)}) + R(\Delta t), \quad (6.8)$$

onde  $R(\Delta t)$  é a porção estocástica de  $x(\Delta t)$ . Depois da integração por partes, a expressão para  $R(\Delta t)$  torna-se:

$$\begin{aligned} R(\Delta t) = & \Gamma_0(\Delta t) + f^{(1)}\Gamma_1(\Delta t) + \frac{1}{2}f^{(2)}\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^2 + \left\{ \frac{1}{6}f^{(3)}\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^3 + f f^{(2)}[\Delta t\Gamma_1(\Delta t) - \Gamma_2(\Delta t)] + f^{(1)2}\Gamma_2(\Delta t) \right\} \\ & + \frac{1}{24}\left[ 12f^{(1)2}f^{(2)}\left[ \int_0^{\Delta t}(\Delta t - t')\Gamma_0^2 + \Gamma_1^2(\Delta t) \right] + 12f f^{(3)}\int_0^{\Delta t}t'\Gamma_0^2 + f^{(4)}\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^4 \right] \\ & + \left\{ f^{(1)3}\Gamma_3(\Delta t) + \frac{1}{2}f f^{(1)2}f^{(2)}[\Delta t^2\Gamma_1(\Delta t) + 2\Delta t\Gamma_2(\Delta t) - 4\Gamma_3(\Delta t)] \right. \\ & \left. + \frac{1}{6}f^{(1)2}f^{(3)}\left[ \int_0^{\Delta t}(\Delta t - t')\Gamma_0^3 + 3\Gamma_1(\Delta t)\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^2 - 3\int_0^{\Delta t}\left[ \Gamma_0\int_0^{t'}\Gamma_0^2 \right] \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}f^2 f^{(3)}[\Delta t^2\Gamma_1(\Delta t) - 2\Delta t\Gamma_2(\Delta t) + 2\Gamma_3(\Delta t)] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}f^{(2)2}\int_0^{\Delta t}\left[ \Gamma_0\int_0^{t'}\Gamma_0^2 \right] + \frac{1}{6}f f^{(4)}\int_0^{\Delta t}t'\Gamma_0^3 + \frac{1}{24}f^{(5)}\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^5 \right\} \\ & + \frac{1}{24}\left\{ 6f^{(1)2}f^{(2)}\left[ \int_0^{\Delta t}(\Delta t - t')^2\Gamma_0^2 + 4\Gamma_1(\Delta t)\Gamma_2(\Delta t) \right] \right. \\ & \left. + 3f f^{(1)2}f^{(3)}\left[ 2\int_0^{\Delta t}(2t'\Delta t - t'^2)\Gamma_0^2 + \Delta t\Gamma_1^2(\Delta t) - \int_0^{\Delta t}\Gamma_1^2 \right] \right. \\ & \left. + 6f f^{(2)2}\left[ 2\Delta t\Gamma_1^2(\Delta t) + 2\int_0^{\Delta t}\Gamma_1^2 - 4\Gamma_1(\Delta t)\Gamma_2(\Delta t) + \int_0^{\Delta t}(\Delta t^2 - t'^2)\Gamma_0^2 \right] \right. \\ & \left. + f^{(1)2}f^{(4)}\left[ \int_0^{\Delta t}(\Delta t - t')\Gamma_0^4 + 4\Gamma_1(\Delta t)\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^3 - 4\int_0^{\Delta t}\left[ \Gamma_0\int_0^{t'}\Gamma_0^3 \right] \right] \right. \\ & \left. + 2f^{(2)2}f^{(3)}\left[ 2\int_0^{\Delta t}\left[ \Gamma_0\int_0^{t'}\Gamma_0^3 \right] + 3\int_0^{\Delta t}\left[ \Gamma_0^2\int_0^{t'}\Gamma_0^2 \right] \right] \right. \\ & \left. + 6f^2 f^{(4)}\int_0^{\Delta t}t'^2\Gamma_0^2 + f f^{(5)}\int_0^{\Delta t}t'\Gamma_0^4 + \frac{1}{36}f^{(6)}\int_0^{\Delta t}\Gamma_0^6 \right\}. \end{aligned}$$

No desenvolvimento de algoritmos para integrar equações diferenciais estocásticas, a porção determinística dos algoritmos necessariamente deve acordar com (6.8). Também, a porção estocástica deve concordar com ambas a forma e as propriedades estatísticas da equação acima.

### 6.1.2 Propriedades de Correlação $R(\Delta t)$

Desde que:

$$\langle g_w(t) \rangle = 0,$$

então

$$\langle \Gamma_i(\Delta t) \rangle = 0,$$

reescrevendo

$$\Gamma_i(t) = \int_0^t \Gamma_{i-1}(t') dt', i = 1, 2, 3, \dots$$

na seguinte forma

$$\Gamma_n(t_n) = \int_0^{t_n} dt_{n-1} \int_0^{t_{n-1}} dt_{n-2} \dots \int_0^{t_2} dt_1 \int_0^{t_1} dt_0 \int_0^{t_0} g_w(\tau) d\tau, \quad (6.9)$$

aplicando a identidade abaixo n vezes

$$\int_0^a dt \int_0^t d\tau = \int_0^a d\tau \int_\tau^a dt$$

então

$$\Gamma_n(t) = \int_0^t \frac{(t-\tau)^n}{n!} g_w(\tau) d\tau. \quad (6.10)$$

As propriedades de correlação dos  $\Gamma$ 's são então dadas por

$$\langle \Gamma_m(t) \Gamma_n(s) \rangle = 2D \frac{t^{m+1}}{m!} \sum_i \frac{(s-t)^{n-i} t^i}{i!(n-i)!(m+i+1)}; (t < s) \quad (6.11)$$

onde i varia de 0 a n. Aplicando esse resultado em  $R(\Delta t)$ , sua média e variância se tornam:

$$\begin{aligned} \langle R(\Delta t) \rangle = & \frac{1}{2} \Delta t^2 D f^{(2)} + \frac{1}{6} \Delta t^3 [D(3f^{(1)}f^{(2)} + 2ff^{(3)}) + D^2 f^{(4)}] \\ & + \frac{1}{24} \Delta t^4 [D(7f^{(1)2}f^{(2)} + \frac{13}{2}ff^{(1)}f^{(3)} + 7ff^{(2)2} + 3f^2f^{(4)}) + D^2(7f^{(1)}f^{(4)} + 11f^{(2)}f^{(3)} + 3ff^{(5)}) + D^3f^{(6)}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle R^2(\Delta t) \rangle = & 2D\Delta t + 2D\Delta t^2 f^{(1)} + \frac{4}{3} \Delta t^3 [D(f^{(1)2} + ff^{(2)}) + D^2 f^{(3)}] \\ & + \Delta t^4 [D(\frac{13}{6}ff^{(1)}f^{(2)} + \frac{1}{2}f^2f^{(3)} + \frac{2}{3}f^{(1)3}) + D^2(5f^{(1)}f^{(3)} + \frac{11}{4}f^{(2)2} + ff^{(4)}) + \frac{1}{2}D^3f^{(5)}]. \end{aligned}$$

## 6.2 Extendendo o Método de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco

Para a equação

$$\dot{x} = F(x), \quad (6.12)$$

o algoritmo de Runge-Kutta de segunda ordem (RK2) é

$$x(\Delta t) = x_0 + \frac{1}{2} \Delta t (F_1 + F_2) \quad (6.13)$$

onde

$$F_1 = F(x_0), \quad (6.14)$$

$$F_2 = F(x_0 + \Delta t F_1). \quad (6.15)$$

não podemos integrar  $\dot{x} = f(x) + g_w(t)$ , tomando  $F(x) = f(x) + g_w$ , desde que a quantidade  $g_w$  tenha variância infinita. Portanto, RK não pode ser usado para integrar EDE sem alterações.

Uma opção seria tomar  $F(x) = f(x)$  e considerar

$$x(\Delta t) = x_0 + \frac{1}{2}\Delta(F_1 + F_2) + \Gamma_0(\Delta t). \quad (6.16)$$

expandindo  $F_1$  e  $F_2$  e substituindo na equação abaixo

$$x(\Delta t) = x_0 + f\Delta t + \frac{1}{2}ff^{(1)}\Delta t^2 + \Gamma_0(\Delta t). \quad (6.17)$$

para a ordem  $\Delta t^2$ , mas isso não é propriamente um algoritmo, a porção estocástica somente acorda com a ordem  $\Delta t$ . Para resolver esse problema usamos:

$$x(\Delta t) = x_0 + \frac{1}{2}\Delta t(F_1 + F_2) + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\phi_0. \quad (6.18)$$

onde

$$F_1 = f(x_0 + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\phi_1), \quad (6.19)$$

$$F_2 = f(x_0 + \Delta t F_1 + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\phi_2). \quad (6.20)$$

onde  $\phi_0, \phi_1$  e  $\phi_2$  são variáveis aleatórias. Expandindo  $F_1$  e  $F_2$ :

$$x(\Delta t) = x_0 + f\Delta t + \frac{1}{2}ff^{(1)}\Delta t^2 + R'(\Delta t), \quad (6.21)$$

onde

$$\begin{aligned} R'(\Delta t) = & (2D\Delta t)^{1/2}\phi_0 + \frac{1}{2}\Delta t(2D\Delta t)^{1/2}f^{(1)}(\phi_1 + \phi_2) \\ & + \frac{1}{2}\Delta t^2 Df^{(2)}(\phi_1^2 + \phi_2^2) \\ & + \frac{1}{2}\Delta t^2(2D\Delta t)^{1/2}[\frac{1}{3}Df^{(3)}(\phi_1^3 + \phi_2^3) + f^{(1)2}\phi_1 \\ & + \frac{1}{2}ff^{(2)}\phi_2]. \end{aligned}$$

Em comparação com os resultados do método da expansão de  $x$ , a porção determinística dessas expressões concordam, porém, queremos que as propriedades de  $R'(\Delta t)$  e  $R(\Delta t)$  concor-dem. Mas

$$\langle R'(\Delta t) \rangle = \frac{1}{2}\Delta t^2 Df^{(2)}(\langle \phi_1^2 \rangle + \langle \phi_2^2 \rangle), \quad (6.22)$$

e

$$\langle R'^2(\Delta t) \rangle = 2D\Delta t \langle \phi_0^2 \rangle + 2D\Delta t^2 f^{(1)} \langle \phi_0(\phi_1 + \phi_2) \rangle. \quad (6.23)$$

Igualando os coeficientes da equação abaixo com aqueles já vistos (propriedades de correlação), teremos

$$\langle \phi_0^2 \rangle = 1, \quad (6.24)$$

$$\langle \phi_0(\phi_1 + \phi_2) \rangle = 1, \quad (6.25)$$

$$\langle \phi_1^2 \rangle + \langle \phi_2^2 \rangle = 1. \quad (6.26)$$

Definindo  $\psi$  com  $\langle \psi \rangle = 0$ ,  $\langle \psi^2 \rangle = 1$ , e  $\phi_i = a_i$ . Escolhemos  $a_0 = 1$ ,  $a_1 = 0$  e  $a_2 = 1$ . O resultado do método estocástico de RK2 será:

$$x(\Delta t) = x_0 + \frac{1}{2}\Delta t(F_1 + F_2) + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\psi. \quad (6.27)$$

com

$$F_1 = f(x_0), \quad (6.28)$$

$$F_2 = f(x_0 + \Delta t F_1 + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\psi). \quad (6.29)$$

Para o desenvolvimento de extensões de algoritmos de RK de maiores ordens para o ruído branco, a mesma técnica pode ser aplicada.

# REFERÊNCIAS

- [1] J. Toner, Y. Tu, and S. Ramaswamy, “Hydrodynamics and phases of flocks,” *Annals of Physics*, vol. 318, no. 1, pp. 170 – 244, 2005. Special Issue.
- [2] M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, and R. A. Simha, “Hydrodynamics of soft active matter,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 85, pp. 1143–1189, Jul 2013.
- [3] S. Ramaswamy, “The mechanics and statistics of active matter,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 1, no. 1, pp. 323–345, 2010.
- [4] T. Vicsek and A. Zafeiris, “Collective motion,” *Physics Reports*, vol. 517, no. 3–4, pp. 71 – 140, 2012. Collective motion.
- [5] T. Ondarçuhu and M. Veyssié, “Dynamics of spreading of a liquid drop across a surface chemical discontinuity,” *J. Phys. II France*, vol. 1, no. 1, pp. 75–85, 1991.
- [6] P. K. Ghosh, “Communication: Escape kinetics of self-propelled janus particles from a cavity: Numerical simulations,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 141, no. 6, pp. –, 2014.
- [7] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, “Novel type of phase transition in a system of self-driven particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 1226–1229, Aug 1995.
- [8] H. Chaté, F. Ginelli, and R. Montagne, “Simple model for active nematics: Quasi-long-range order and giant fluctuations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 180602, May 2006.
- [9] S. Ramaswamy, R. A. Simha, and J. Toner, “Active nematics on a substrate: Giant number fluctuations and long-time tails,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 62, no. 2, p. 196, 2003.
- [10] Y. Fily and M. C. Marchetti, “Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 235702, Jun 2012.
- [11] S. Ramaswamy, “The mechanics and statistics of active matter,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 1, no. 1, pp. 323–345, 2010.
- [12] T. Vicsek and A. Zafeiris, “Collective motion,” *Physics Reports*, vol. 517, no. 3, pp. 71–140, 2012.
- [13] Y. Fily and M. C. Marchetti, “Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 235702, Jun 2012.
- [14] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, “Novel type of phase transition in a system of self-driven particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 1226–1229, Aug 1995.

- [15] H. E. Stanley, “Introduction to phase transitions and critical phenomena,” *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, by H Eugene Stanley, pp. 336. Foreword by H Eugene Stanley. Oxford University Press, Jul 1987. ISBN-10: 0195053168. ISBN-13: 9780195053166, vol. 1, 1987.
- [16] A. Czirók, A.-L. Barabási, and T. Vicsek, “Collective motion of self-propelled particles: Kinetic phase transition in one dimension,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, pp. 209–212, Jan 1999.
- [17] C. Torney and Z. Neufeld, “Transport and aggregation of self-propelled particles in fluid flows,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 078101, Aug 2007.
- [18] H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, and F. Raynaud, “Collective motion of self-propelled particles interacting without cohesion,” *Phys. Rev. E*, vol. 77, p. 046113, Apr 2008.
- [19] H. Ke, S. Ye, R. L. Carroll, and K. Showalter, “Motion analysis of self-propelled silica particles in hydrogen peroxide solutions,” *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 114, no. 17, pp. 5462–5467, 2010.
- [20] E. Gauger and H. Stark, “Numerical study of a microscopic artificial swimmer,” *Phys. Rev. E*, vol. 74, p. 021907, Aug 2006.
- [21] H. C. Andersen, “Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 72, no. 4, pp. 2384–2393, 1980.
- [22] T. Vicsek and A. Zafeiris, “Collective motion,” *Physics Reports*, vol. 517, no. 3–4, pp. 71 – 140, 2012. Collective motion.
- [23] F. Q. Potiguar, G. A. Farias, and W. P. Ferreira, “Self-propelled particle transport in regular arrays of rigid asymmetric obstacles,” *Phys. Rev. E*, vol. 90, p. 012307, Jul 2014.
- [24] R. L. Honeycutt, “Stochastic runge-kutta algorithms. i. white noise,” *Phys. Rev. A*, vol. 45, pp. 600–603, Jan 1992.