



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

ANDRÉ DUARTE BORBA

MATÉRIA ATIVA EM SUBSTRATOS DECORADOS

**FORTALEZA
2023**

ANDRÉ DUARTE BORBA

MATÉRIA ATIVA EM SUBSTRATOS DECORADOS

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

Orientador: Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira.

FORTALEZA
2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

B718m Borba, André Duarte.

Matéria Ativa em Substratos Decorados / André Duarte Borba. – 2023.
99 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2023.

Orientação: Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira.

1. Matéria Ativa. 2. Sistema fora do Equilíbrio. 3. Simulação Computacional. 4. Movimento Browniano.
I. Título.

CDD 530

ANDRÉ DUARTE BORBA

MATÉRIA ATIVA EM SUBSTRATOS DECORADOS

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

Aprovada em 26/07/2023.

BANCA EXAMINADORA

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

Dr. Jorge Luiz Coelho Domingos
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Fabrício Queiroz Potiguar
Universidade Federal do Pará (UFPA)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira
Universidade Federal do Mato Grosso (UFMT)

”Aqueles que são sábios reluzirão como o fulgor do céu, e aqueles que conduzem muitos à justiça serão como as estrelas, para todo o sempre.” Daniel 12:3

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, e acima de tudo, gostaria de agradecer a Deus que em todo meu trajeto na Universidade Federal do Ceará guiou-me dando forças para terminar este curso de Doutorado em Física.

A meu Orientador, professor Dr. Wandemberg Paiva Ferreira, pela dedicação, comprometimento e pela orientação na pesquisa.

Aos professores Doutores Humberto Carmona, Raimundo Nogueira, Ricardo Renan, Murilo Pereira, Nildo Loiola, Marcos Antônio, Fabrício Potiguar e Ramos Gonçalves pelas disciplinas ministradas, pelos ensinamentos e orientação.

Aos professores amigos e colegas de trabalho Nelcione, Lia, Airton, Herlen, Leliane, Vanderley, David, Enedina, Laisse, Jean, Lucas e Gadelha pelo companheirismo e pelo incentivo.

Aos meus pais, Ana Célia e Percy por terem acreditado e incentivado meu sucesso acadêmico e por toda a vida e a minha tia Maria Auxiliadora por grande ajuda nos meus estudos.

À minha amiga e esposa Flávia Alessandra pelos momentos de apoio, motivação, carinho e descontração.

Aos amigos e colegas Jessé, Everton, Danilo, Alysson, Thiago, Sofia, Maria, Ewer-ton, Diego Rabelo, Jorge Luíz e Jorge (Capuan) pela ajuda, conversas e momentos de lazer.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

O objetivo desta Tese é estudar o comportamento da Matéria Ativa em substratos padronizados e entender como a geometria controlada do ambiente pode influenciar o comportamento dinâmico desses sistemas. Mais especificamente, queremos descrever sob quais condições podemos modificar ou induzir o comportamento coletivo a fim de obter transporte de partículas. Em nossa abordagem, tratamos a Matéria Ativa como um conjunto de Partículas Autopropelidas. Consideramos também um modelo no qual as partículas são Barras Ativas. Apresentamos uma visão geral do assunto, dando atenção aos principais modelos e trabalhos mais expressivos sobre o tema. Apresentamos em detalhes os modelos fundamentais usados para estudar sistemas ativos, como, por exemplo, o modelo de Vicsek, e uma abordagem baseada em uma equação do tipo Langevin. Apresentamos nossos resultados com base em um estudo sistemático de um sistema bidimensional de Partículas ativas na presença de obstáculos assimétricos rígidos (semicirculares). O transporte de partículas no sistema é induzido localmente pelos obstáculos assimétricos e como consequência da interação entre as partículas ativas e os obstáculos. Apesar do movimento errático de cada partícula, o comportamento coletivo supera o individual, resultando em um movimento efetivo ao longo de uma direção preferencial, caracterizada pela velocidade média das partículas diferente de zero. Estudamos a corrente de partículas e barras ativas em termos da separação entre obstáculos, tamanho dos obstáculos, intensidade do ruído que define o movimento errático das partículas e a fração de ocupação. Estudamos também a probabilidade de formação de coágulos (estruturas de hiperaglomeração e captura), fenômeno esse que fora observado no sistema de barras ativas. Por fim, apresentamos os resultados dos efeitos de arranjos não ordenados de obstáculos no transporte do sistema de partículas e barras ativas e como a difusão é modificada quando o número de obstáculos é alterado, retirando-os aleatoriamente da rede ordenada.

Palavras-chave: matéria ativa; sistema fora do equilíbrio; simulação computacional; movimento browniano.

ABSTRACT

The objective of this Thesis is to study the behavior of Active Matter in standardized substrates and to understand how the controlled geometry of the environment can influence the dynamic behavior of such systems. More specifically, we want to describe under which conditions we can modify or induce the collective behavior in order to obtain particle transport. In our approach, we treat Active Matter as a set of Self-Propelled Particles. We also consider a model in which the particles are Active Rods. We present an overview of the subject, paying attention to the main models and most expressive works on the subject. We present in detail the fundamental models used to study active systems, such as, for example, the Vicsek model, and an approach based on a Langevin-type equation. We present our results based on a systematic study of a two-dimensional system of active particles in the presence of rigid asymmetric obstacles (semicircular). The transport of particles in the system is induced locally by asymmetric obstacles and as a consequence of the interaction between active particles and obstacles. Despite the erratic motion of each particle, the collective behavior outweighs the individual one, resulting in an effective motion along a preferential direction, characterized by the non-zero average velocity of the particles. We study the current of particles and active rods in terms of obstacle's separation, size of obstacles, intensity of noise that defines the erratic movement of particles and the fraction of occupancy. We also studied the probability of clogging formation (hyper agglomeration and capture structures), a phenomenon that was observed in the active rods system. Finally, we present the results of the effects of disordered arrangement of obstacles on the transport of the system of particles and active bars and how the diffusion is modified when the number of obstacles is changed, removing them randomly from the ordered network.

Keywords: active matter; system out of equilibrium; computer simulation; brownian motion.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – a) Deus Janus com suas faces coladas e distintas e b) a Partícula Janus construída em laboratório (Ben Yellen, Universidade de Duke).	18
Figura 2 – a) Bando de andorinhas, b) Rebanho de ovelhas, c) Cardume de sardinhas, d) Multidão, e) Trânsito de veículos.	19
Figura 3 – Trajetória típica de uma partícula sujeita a um movimento do tipo Browniano, o movimento de uma PA pode ser simulado através do MBA, que é resultado da velocidade de autopropulsão das partículas e de várias colisões aleatórias com as demais partículas do sistema.	22
Figura 4 – Condições Periódicas de Contorno (CPC) para uma rede de simulação bidimensional (2D). Note que o sistema tem cópias idênticas em suas bordas. . .	27
Figura 5 – Geometria da rede: a distância entre obstáculos d_{obs} de células vizinhas é dada por $d_{obs} = a - D_o$ onde a é a aresta de cada célula que contém cada obstáculo da rede e D_o é o diâmetro do obstáculo. L é o tamanho da caixa de simulação.	36
Figura 6 – Velocidade média $\langle v_x \rangle$ em função da intensidade do ruído η para uma rede ordenada de $N_o = 100$ obstáculos semicirculares com diâmetros $D_o = 1$ (da ordem do tamanho das PA) e $D_o = 5$ com quatro frações de ocupação analisadas, $\phi = 0.1; 0.244; 0.488; 0.732$ e ruído variando de $\eta = 0.0001$ a $\eta = 1.0$	38
Figura 7 – Velocidade média $\langle v_x \rangle$ em função da intensidade do ruído η para uma rede ordenada de $N_o = 100$ obstáculos semicirculares com diâmetros $D_o = 7.5$ e $D_o = 10$ com quatro frações de ocupação analisadas, $\phi = 0.1; 0.244; 0.488; 0.732$ e ruído variando de $\eta = 0.0001$ a $\eta = 1.0$	38
Figura 8 – Velocidade média $\langle V \rangle$ em função da intensidade do ruído η para uma rede ordenada de $N_o = 100$ obstáculos semicirculares com diâmetros variando de $D_o = 1$ a $D_o = 10$ com as frações de ocupação $\phi = 0.24, 0.950$ e ruído $\eta = 0.001$	39
Figura 9 – Velocidades médias das partículas afastadas ($\langle v_{xafas} \rangle$ e $\langle v_{yafas} \rangle$) e das partículas próximas ($\langle v_{xpróx} \rangle$ e $\langle v_{ypróx} \rangle$) em função do diâmetro D_o dos obstáculos, com $\phi = 0.244$, $d_{obs} = 5$ e ruído $\eta = 0.001$	40

Figura 10 – Velocidades médias das partículas afastadas ($\langle v_{xafas} \rangle$ e $\langle v_{yafas} \rangle$) e das partículas próximas ($\langle v_{xpróx} \rangle$ e $\langle v_{ypróx} \rangle$) em função do diâmetro D_o dos obstáculos, com $\phi = 0.950$, $d_{obs} = 5$ e ruído $\eta = 0.001$	41
Figura 11 – Velocidades médias das partículas em função do diâmetro D_o dos obstáculos, com $\phi = 0.244$, $d_{obs} = 5$ e ruído $\eta = 0.001$ e os três raios de corte, a linha verde representa $rc = 0$, a linha vermelha representa $rc = 1$ e a linha preta representa $rc = 2$	42
Figura 12 – Geometria no cálculo das distâncias entre partícula-obstáculo e raios de corte considerados para o cálculo das velocidades médias das partículas ao redor dos obstáculos. A linha vermelha representa o Obstáculo, A linha verde representa a primeira camada a se considerar com raio de corte $rc = 0$ (região das partículas que estão em contato com o obstáculo), a linha rosa representa $rc = 1$ e a linha azul representa $rc = 2$	43
Figura 13 – Comportamento da velocidade média do sistema de PA sujeitas a uma força adicional externa F_{dc} . Theta é o ângulo entre a força e o eixo x . Foram analisadas frações de ocupação $\phi = 0.310; 0.620; 0.930$	44
Figura 14 – Foto da simulação do sistema para uma fração de ocupação $\Phi = 0,3$ e fração de obstáculos removidos $f = 0,50$. A direção positiva da direção da corrente média de partículas (direção de fluxo positiva $+x$) também é indicada	46
Figura 15 – Corrente média líquida de partículas J_x em função de f para várias frações de área ϕ . A linha tracejada vermelha e os pontos pretos são obtidos da Eq. (A.9) para $v' = 1.50 \times 10^{-4}$, $\langle c+ \rangle = 2.00$, $\langle c- \rangle = 1.77$, e $v' = 3.00 \times 10^{-4}$, $\langle c+ \rangle = 1.35$, $\langle c- \rangle = 1.00$, respectivamente.	48
Figura 16 – Corrente média líquida de partículas J_x em função da área fração ϕ , para diferentes valores de f nos dois regimes: (a) J_x independente de ϕ e (b) J_x aumentando monotonicamente com ϕ	52
Figura 17 – Componentes x e y da corrente de partícula média, J_x e J_y , em função de f para valores distintos da fração de área ϕ . Considera-se as cunhas como obstáculos. O ângulo de abertura das cunhas é de 90°	53

Figura 18 –Componentes x e y da corrente de partícula média, J_x e J_y , em função de f para um sistema com rede desordenadas de obstáculos semicirculares de diâmetro $D = 9$ e um sistema misto de obstáculos inicialmente ($f = 0$) todos semicirculares e substituídos por obstáculos circulares (com o aumento de f).	54
Figura 19 –Duas BA que podem interagir via força restauradora (massa-mola) caso entrem em contato, a barra BA_i possui partículas $o; p; q$ e a barra BA_j as partículas s, m, n . As BA possuem diâmetro $\sigma = 1$, $N_A = 3$ e comprimento $l = 3$ e $\sigma = 3$	58
Figura 20 –Comportamento da velocidade média $\langle v_x \rangle$ em relação a intensidade do ruído $noise$ para uma rede ordenada de $N_o = 25$ obstáculos semicirculares com diâmetros $D_o = 1; 5; 10$ com três frações de ocupação analisadas, $\phi = 0.1, 0.2, 0.3$ e ruído ($noise$) variando de 0.0001 a 1.000	59
Figura 21 –Região de hiperaglomeração de BA denominada de coágulo. À esquerda temos o mapa de ocupação média das BA na caixa de simulação durante uma realização específica, à direita temos um zoom com obstáculos em vermelho e as BA em azul claro (corpo) e azul escuro (cabeça) diferenciados assim para indicar a tendência de autopropulsão (direção da velocidade). Aqui nosso sistema possui $N_o = 100$ obstáculos com uma fração de ocupação da ordem de $\phi = 0.3$ e ruído igual a 0.0001	60
Figura 22 –Probabilidades $probN$; $probF$; $prob Cox$ e $prob Coy$ para uma rede de 100 obstáculos, fração de ocupação $\phi = 0.1$ e distância entre obstáculos variando de $d = 0$ até $d = 5$. O tamanho de cada BA é $l = 5$. O diâmetro dos obstáculos é $D_o = 5$.	61
Figura 23 –Velocidade média $\langle V_x \rangle$ do sistema no estudo da percolação na direção horizontal da caixa de simulação com 100 obstáculos, inicialmente com distância $d = 0$ entre eles e retirando-os aleatoriamente com um percentual de obstáculos removidos variando de 0 a 100 por cento. Utilizamos frações de ocupação $\phi = 0.1, 0.2, 0.3$ e ruído igual a 0.0001.	63
Figura 24 –Probabilidade de ocorrência de obstáculos isolados (com diâmetro D) na rede desordenada em função de f para dois tamanhos L da caixa de simulação. Os círculos representam os dados de simulação e as linhas tracejadas representam as funções de ajuste.	75

Figura 25 –Corrente média líquida de partículas J_x em função de f para $v' = 1.0 \times 10^{-4}$, e valores distintos dos parâmetros do modelo $\langle c_+ \rangle, \langle c_- \rangle$ e $\langle c \rangle = \langle c_+ \rangle = \langle c_- \rangle$.	76
Figura 26 –Corrente média líquida de partículas J_x em função de f para $v' = 1.0 \times 10^{-4}$ e valores distintos dos parâmetros do modelo $\langle c_+ \rangle$ e $\langle c_- \rangle$.	77
Figura 27 – a) Início do passo de integração do método, b) Alinhamento médio da partícula vermelha conforme azuis no círculo de raio R considerado, c) Fim do passo de integração após o tempo δ .	79
Figura 28 –Visualização esquemática do movimento de uma partícula polar com vetores unitários das coordenadas internas $\mathbf{e}_h(t)$ e $\mathbf{e}_\phi(t)$ num determinado ponto no tempo $t = t_0$. As linhas tracejadas indicam a trajetória da partícula $l(t)$.	82
Figura 29 –Esquema gráfico representando dois entes ativos interagindo conforme modelo de Bastões Autopropelidos. A interação pode acarretar no alinhamento e movimento ordenado conforme visto acima.	83
Figura 30 –Esquematização da dinâmica do modelo <i>run e tumble</i> .	85
Figura 31 –Exemplos dos regimes de difusão que podem ser caracterizados com o DQM no tempo.	89
Figura 32 –Geometrica considerada no cálculo do Parâmetro de Ordem onde a partícula i distante $ \vec{r}_{ik} $ do centro do obstáculo k de diâmetro $\frac{D}{2}$ e raio de corte r_{cut} .	91

LISTA DE ABREVIATURAS

SA Sistemas Ativos

MA Matéria Ativa

PA Partículas Ativas

BA Barras Ativas

PJ Partículas Janus

CPC Condições Periódicas de Contorno

DQM Deslocamento Quadrático Médio

PO Parâmetro de Ordem

MBA Movimento Browniano Angular

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Matéria Ativa	15
1.2	Movimento Coletivo	18
1.3	Modelo Browniano Angular	20
2	MÉTODOS NUMÉRICOS	24
2.1	Simulação em Dinâmica Molecular	24
2.2	Método de integração de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco Gaussiano	26
2.3	Condições Periódicas de Contorno (CPC)	27
2.4	O Método de Dinâmica Molecular	27
2.5	Equação de Langevin	28
3	RESULTADOS	33
3.1	Estudo sistemático no transporte de Partículas ativas em redes de obstáculos assimétricos ordenados	33
3.1.1	<i>Modelo</i>	34
3.1.2	<i>Estudo do movimento das PA com relação a variação no tamanho dos obstáculos (D_0), fração de ocupação (ϕ) e ruído (η)</i>	37
3.2	Controle do transporte de PA em redes de obstáculos assimétricos desordenados (Efeito de inversão na corrente de partículas)	42
3.2.1	<i>Motivação</i>	42
3.2.2	<i>Modelo</i>	46
3.2.3	<i>Resultados e Discussões</i>	48
3.2.4	<i>Considerações finais</i>	55
3.3	Estudo sistemático no transporte de matéria ativa (Barras com Autopropulsão - BA) em redes de obstáculos assimétricos ordenados	57
3.3.1	<i>Modelo</i>	57
3.3.2	<i>Resultados e Discussões</i>	59
3.3.3	<i>Considerações Finais</i>	64
4	CONCLUSÕES E OBSERVAÇÕES FINAIS	65

REFERÊNCIAS	68
APÊNDICE A – DETERMINAÇÃO DE J_X EM REDE DE OBSTÁCULOS ASSIMÉTRICOS	74
APÊNDICE B – MODELOS PARA A MATÉRIA ATIVA	78
APÊNDICE C – PROPRIEDADES MEDIDAS EM MATÉRIA ATIVA	89
APÊNDICE D – TRABALHO PUBLICADO	93

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo é feita uma introdução acerca do estudo da Matéria Ativa, definição e seu desenvolvimento histórico, propriedades e modelo físico utilizado em nossos estudos. Também são referenciados os principais trabalhos nesse assunto tão amplo e de grande interesse na comunidade científica. A física da matéria ativa é recente e diversas são as tentativas de criação de modelos computacionais, analíticos e experimentos que possam descrever esses sistemas fora do equilíbrio termodinâmico. Com isso, apresenta-se nesse capítulo o referencial teórico base para o desenvolvimento da pesquisa aqui presente.

1.1 Matéria Ativa

O estudo científico relacionado aos organismos vivos muitas vezes fora um tema instigante à humanidade. Desde a revolução na ciência atribuída ao método científico, introduzido por Galileu Galilei e em sequência utilizado por Sir Isaac Newton (referência importante no estudo e desenvolvimento da Mecânica), podemos observar uma tentativa da comunidade científica em descrever plenamente o movimento dos corpos numa linguagem matemática (através das leis e equação de Newton para o movimento). Até quase no final do século XVII não se sabia ao certo prever e descrever o movimento de partículas microscópicas.

O estudo do movimento em organismos microscópicos tem uma longa história, e remonta aos primeiros cientistas e observadores que exploraram o mundo microscópico com as ferramentas disponíveis em suas respectivas épocas. Antonie van Leeuwenhoek, um cientista holandês do século XVII, é considerado um dos pioneiros nesse campo, observando e descrevendo uma variedade de microorganismos em movimento usando os microscópios que ele mesmo construiu. No século XIX, com avanços na óptica e no design dos microscópios, cientistas como Ferdinand Cohn e Louis Pasteur fizeram progressos significativos na observação e descrição de microorganismos em movimento. No século XX, com o desenvolvimento de técnicas avançadas de microscopia (como por exemplo a microscopia de fluorescência, contraste de fase, confocal, campo claro e eletrônica), os cientistas puderam estudar o movimento de organismos microscópicos em detalhes ainda maiores, levando a descobertas importantes sobre a locomoção de diferentes tipos de microorganismos e os mecanismos moleculares e celulares subjacentes. Após o advento da criação do microscópio, o ser humano, a partir do século

XVII, estava concentrando seus esforços no mundo micro, onde existe uma grande diversidade de organismos como bactérias, protozoários e vírus como motivação para esse estudo.

Um grande marco científico relacionado ao estudo do movimento ao nível microscópico é dado principalmente a Robert Brown, em sua contribuição expressiva no Movimento Browniano. Em um de seus experimentos, Brown observou o movimento de polens na superfície da água e iniciou seus estudos na tentativa de descrever tal fato. Em suas observações, Brown verificou que o movimento do pólen é determinado pelo resultado das colisões aleatórias entre o mesmo e as moléculas no meio e também um resultado das possíveis presenças de forças de tensão superficial, peso, empuxo e pressão atmosférica. Nesse momento, a visão determinística das equações de Newton passou a considerar um adicional aleatório, ou seja, um novo tipo de força, dita estocástica ou errática (que remete a uma variável estocástica ou aleatória) ¹.

Nesse sentido de desenvolvimento histórico do estudo físico do movimento de microorganismos, podemos considerar, por exemplo, o movimento de uma bactéria num meio de cultura à procura de alimento (veremos posteriormente que uma bactéria possui também termo de movimento aleatório, como o pólen de Brown, mais outro termo não aleatório devido à sua capacidade ativa de autopropulsão resultante de gastos energéticos advindos de reações químicas internas ou energia provida de interação com o meio que a contém), para isso, algumas bactérias possuem flagelos que as permitem se deslocar pelo meio, afim de fagocitar alimento e dar continuidade ao seu papel de reprodução e permanência na colônia cultivada. Na descrição desse movimento podemos considerar, numa equação de movimento, as forças advindas da viscosidade do meio, forças de autopropulsão, forças de interação da mesma com outras bactérias ou potenciais que ali possam estar atuando (presença de campos externos: gravitacional, elétrico ou magnético) e também a força aleatória resultante dos incontáveis choques com partículas do meio, e por fim, as condições ambientes (temperatura e pressão). A esse estudo, veremos que a equação de Langevin é vista como uma extensão da segunda lei de Newton, incluindo um termo de força aleatória, e funciona bem na tentativa de descrever Sistemas Ativos (SA).

Resumidamente, a equação de Langevin é uma equação diferencial estocástica usada

¹ A força estocástica é um conceito da física que descreve a influência aleatória ou imprevisível em um sistema físico. Ela está associada a processos estocásticos, que evoluem de maneira aleatória ou probabilística ao longo do tempo. A força estocástica pode ser encontrada em diversos contextos físicos, como na mecânica estatística, na mecânica quântica e na dinâmica de sistemas complexos. Ela é usada para modelar o efeito de flutuações aleatórias em sistemas físicos, como a difusão de partículas em um fluido ou a evolução temporal de sistemas quânticos. A compreensão da força estocástica é importante em muitas áreas da ciência e da engenharia, e é frequentemente estudada por meio de técnicas matemáticas e computacionais avançadas para compreender seu impacto no comportamento de sistemas complexos em diferentes escalas. (BEALE, 1996; SALINAS, 1997)

para descrever o comportamento de partículas em um meio com flutuações aleatórias. Essa equação é amplamente utilizada para modelar sistemas em que partículas estão sujeitas à forças estocásticas e determinísticas, como sistemas biológicos e sistemas de partículas em suspensão. Em sistemas ativos, que exibem comportamentos autônomos, a equação de Langevin pode ser estendida para incluir termos que descrevem a atividade intrínseca das partículas, como forças impulsivas ou dependentes da velocidade ou da posição. A equação de Langevin para sistemas ativos pode variar dependendo do sistema e do comportamento das partículas.

Agora, numa forma mais descritiva, começaremos pelas definições que aqui precisaremos entender. A Matéria Ativa (MA), em física estatística, é considerada como um sistema físico fora do equilíbrio (ZWANZIG, 2001; MAZENKO, 2008; GROOT; MAZUR, 2013). A característica unificadora da MA, desde a escala microscópica até a macroscópica, é que ela é composta de unidades autodirecionadas que podem ser tratadas fisicamente como unidades ativas ou também Partículas Ativas (PA), cada uma capaz de converter energia armazenada (energia interna) ou livre (do meio que as contém) em movimento (SCHWEITZER, 2003).

Duas propriedades físicas interessantes da MA são o movimento coletivo, dito correlacionado, e a tensão mecânica formada pela interação das PA entre si ou também com o meio em que estão dispostas (substrato). A primeira é uma propriedade que se manifesta quando há uma quantidade mínima de MA interagindo e inexistente em sistemas de unidade individual ativo ou de sistemas de baixíssima densidade. Com relação à autopropulsão das PA, sua direção é geralmente dada por sua própria anisotropia (nada mais é que a característica de um meio, ou de um material, em que certas propriedades físicas são diferentes conforme as diferentes direções, nesse caso, simetria espacial) que geralmente coincide com sua alongação geométrica (MARCHETTI *et al.*, 2013). Para aqui exemplificarmos, como já mencionado, podemos observar sistemas biológicos de MA desde o micro, como bactérias, protozoários, vírus, estruturas subcelulares como o citoesqueleto celular e os motores celulares proteicos, mas também estruturas ultracelulares como suspensões bacterianas, camadas celulares e tecidos (MARCHETTI *et al.*, 2013; RAMASWAMY, 2017; ROMANCZUK *et al.*, 2012). Outras estruturas ativas classificadas como não vivas ou artificiais por serem construídas em laboratório são, por exemplo, as partículas Janus (PJ)² ver Fig. 1.

Em geral, as partículas sintéticas/artificiais com autopropulsão podem ser feitas de

²As Partículas Janus foram nomeadas assim pelo fato do Deus romano Janus, o Deus do começo e do fim, portas e portões, possuir duas faces distintas unidas, essas faces geralmente conferem uma assimetria às partículas e adicionalmente propriedades físicas e ou químicas direcionais diferentes.

uma ampla variedade de materiais, como polímeros, metais, cerâmicas e compostos híbridos. Elas podem ter diferentes geometrias, tamanhos e funcionalidades, que influenciam suas propriedades de autopropulsão, como velocidade, direção e eficiência de movimento. Existem várias estratégias experimentais para alcançar a autopropulsão em partículas sintéticas. Alguns exemplos incluem o uso de reações químicas que geram produtos que se acumulam assimetricamente nas superfícies das partículas, causando movimento direcional; o uso de campos magnéticos ou elétricos externos para orientar as partículas (nanomotores magnéticos); e o uso de gradientes de concentração química ou física para gerar fluxos de líquido que impulsionam as partículas (MOROZOV; LESHANSKY, 2014).

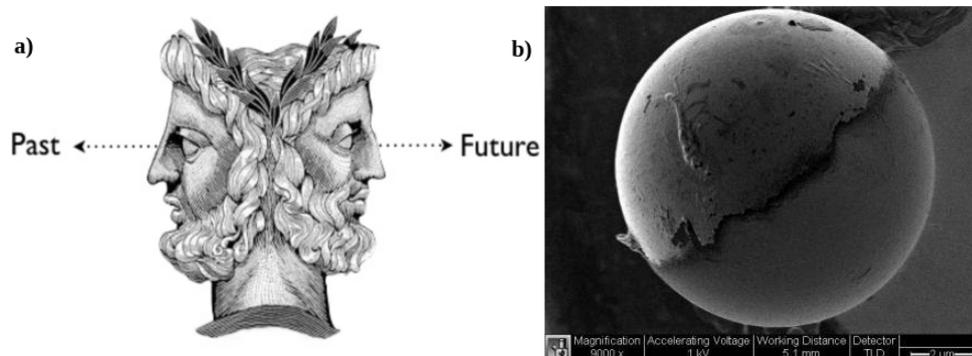


Figura 1: a) Deus Janus com suas faces coladas e distintas e b) a Partícula Janus construída em laboratório (Ben Yellen, Universidade de Duke).

Já no mundo macroscópico, podemos considerar alguns sistemas físicos formados individualmente por agentes ativos vivos, como, por exemplo, cardumes, rebanho de ovelhas, bando de aves e multidões, ou também não vivos como, por exemplo, tráfego de veículos (ver Fig. 2). Seja um bando de andorinhas voando em busca de alimento, um rebanho de ovelhas procurando pasto, cardume de sardinhas fugindo de um predador (tubarão), multidões em meio a uma superpromoção (*blackfriday*) ou dezenas de veículos tentando contornar um acidente na via, todas essas situações envolvem uma grande quantidade de indivíduos ativos que individualmente podem possuir interesses ou predisposições de deslocamento diferente mas que, em conjunto, apresentam um comportamento coletivo comum. Devido à grande quantidade de indivíduos, as unidades mais ao centro do sistema não possuem chances demasiadas de mudar suas direções de movimento, a não ser aquelas que o sistema como um todo adquira.

1.2 Movimento Coletivo

O Movimento coletivo é uma característica comum em sistemas naturais de muitos componentes. Por exemplo, em cardumes, andorinhas voando em grupo, rebanhos percor-

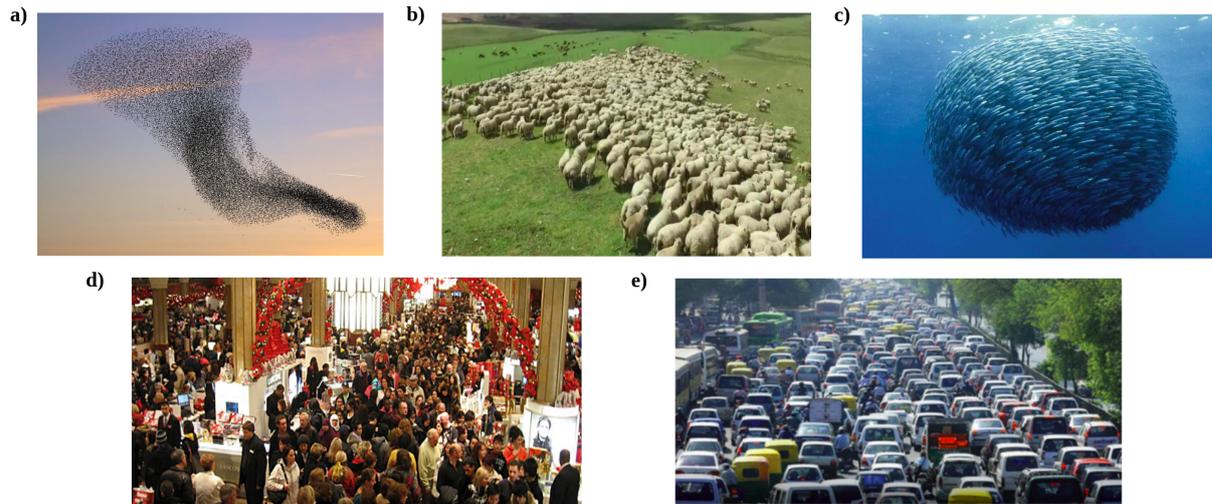


Figura 2: **a)** Bando de andorinhas, **b)** Rebanho de ovelhas, **c)** Cardume de sardinhas, **d)** Multidão, **e)** Trânsito de veículos.

rendo 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), as já mencionadas micropartículas artificiais (Janus) e também em células (ANDERSEN, 1980; VICSEK; ZAFEIRIS, 2012).

O movimento coletivo é uma das manifestações de um fenômeno denominado comportamento coletivo (VICSEK; ZAFEIRIS, 2012). Muito embora o movimento de apenas um integrante desses grupos passe despercebido e sem ordenação definida, 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 nesses sistemas e é muito importante no tratamento de fluidos complexos (PATTESON *et al.*, 2016).

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 (VICSEK; ZAFEIRIS, 2012).

Nesse sentido, em sistemas de PA, os integrantes não conservam momento nas colisões, ao contrário de sistemas em equilíbrio segundo a mecânica Newtoniana, onde o momento total é conservado. Os SA, portanto, são ditos fora do equilíbrio. As PA possuem comporta-

mento coletivo de grande interesse. Por se tratar de um sistema fora do equilíbrio, torna-se de grande importância para melhor entendermos o complexo comportamento de processos fora do equilíbrio. O transporte efetivo de PA tem sido estudado com bastante interesse (CZIRÓK *et al.*, 1999; TORNEY; NEUFELD, 2007; CHATÉ *et al.*, 2008a) visando o entendimento de suas propriedades e possíveis aplicações em diversas áreas da ciência, medicina e tecnologia (KE *et al.*, 2010; GAUGER; STARK, 2006).

Visto de forma análoga às transições de fase em sistemas em equilíbrio, as transições de fase em MA podem ser observadas e ocorrem quando há mudanças qualitativas no comportamento coletivo do sistema à medida que certos parâmetros são variados, como a densidade, a velocidade de movimento, a taxa de consumo de energia ou a interação entre as partículas ativas. Essas transições podem resultar em mudanças abruptas nas propriedades macroscópicas do SA, como a formação de padrões, alteração de um comportamento desordenado para um comportamento ordenado, emergência de fluxos direcionados ou a mudança na dinâmica de aglomerados (VICSEK; ZAFEIRIS, 2012; MARCHETTI *et al.*, 2013; POTIGUAR *et al.*, 2014).

Um exemplo bem conhecido de transição de fase em MA é a transição do comportamento desordenado para o comportamento ordenado em sistemas de PA, como os modelos de partículas de Vicsek, onde partículas que se movem a velocidades constantes ajustam sua direção de acordo com a direção média de seus vizinhos mais próximos. Aumentando a densidade ou a interação entre as partículas, pode ocorrer uma transição de fase, levando a uma formação de um comportamento coletivo ordenado, como um alinhamento global das partículas em uma mesma direção (VICSEK *et al.*, 1995a).

Outro exemplo é a transição de fase observada em sistemas biológicos, como células que exibem comportamento de enxames (como bactérias, células de tecidos biológicos ou até mesmo células cancerígenas) onde mudanças na densidade celular, consumo de energia e interações celulares podem levar a uma transição de um comportamento desordenado para um comportamento cooperativo ou coordenado (RØRTH, 2009; WEIJER, 2009).

1.3 Modelo Browniano Angular

O modelo de referência para as PA utilizado em nossos estudos é o Modelo Browniano Angular (MBA). O MBA para a matéria ativa foi proposto por Fily e Marchetti, em 2012 (FILY; MARCHETTI, 2012), e foi apresentado no contexto do estudo da dinâmica de sistemas de partículas ativas, que são partículas capazes de se moverem autonomamente, impulsionadas

por mecanismos internos. Os principais resultados obtidos com o MBA nesse trabalho incluem a compreensão do comportamento coletivo das partículas ativas. Sistemas de partículas ativas podem exibir transições de fase, formando estados de fluxo e estruturas ordenadas. Além disso, o modelo permitiu a compreensão de fenômenos como a segregação de partículas por atividade e a emergência de padrões de polarização coletiva.

No trabalho de Fily e Marchetti (FILY; MARCHETTI, 2012) foi investigado um modelo de partículas autopropelidas com formato de discos, sem regras de alinhamento (ou seja, apesar das partículas serem autopropelidas, elas não se ordenam em um estado de movimento), e foi observado que acima de uma determinada fração de empacotamento crítica (densidade crítica de partículas), o sistema passa por uma separação de fase, exibindo flutuações de número gigantescas. Os resultados mostraram que, as essas flutuações observadas nas fases ordenadas de sistemas ativos, podem ocorrer na ausência de simetria orientacional quebrada. As flutuações surgem quando a taxa de autopropulsão é suprimida, devido ao aprisionamento estérico, superando a taxa de convecção de densidade.

O conceito de angular, no MBA, está relacionado à partícula ter velocidade absoluta v_o constante, mas podendo tomar qualquer direção aleatória em um dado intervalo de tempo. Num modelo 2D (bidimensional) a velocidade de autopropulsão da i -ésima PA será dada, para o plano xy , por:

$$v_i(t) = v_o(\cos \theta_i(t)\mathbf{i} + \sin \theta_i(t)\mathbf{j}), \quad (1.1)$$

onde o ângulo $\theta_i(t)$ corresponde à direção aleatória que a i -ésima PA assume em relação ao eixo $+x$ do sistema de coordenadas cartesiano e com variação temporal proporcional ao ruído branco Gaussiano $\eta_i(t)$, que satisfaz as relações:

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0, \quad (1.2)$$

e

$$\langle \eta_i(t)\eta_j(t') \rangle = (2\eta\Delta t)^{\frac{1}{2}}\delta_{ij}\delta(t-t'), \quad (1.3)$$

onde η é a intensidade do ruído branco e Δt é o passo de tempo. Na Fig. 3, vemos um esquema típico da trajetória de uma PA modelada pelo MBA. Nesse modelo, as equações do movimento para a j -ésima PA são dadas por:

$$\frac{\partial r_j}{\partial t} = v_j + \mu F_j, \quad (1.4)$$

e

$$\frac{\partial \theta_j(t)}{\partial t} = \eta_j(t) \quad (1.5)$$

aqui, μ é a motilidade da partícula.

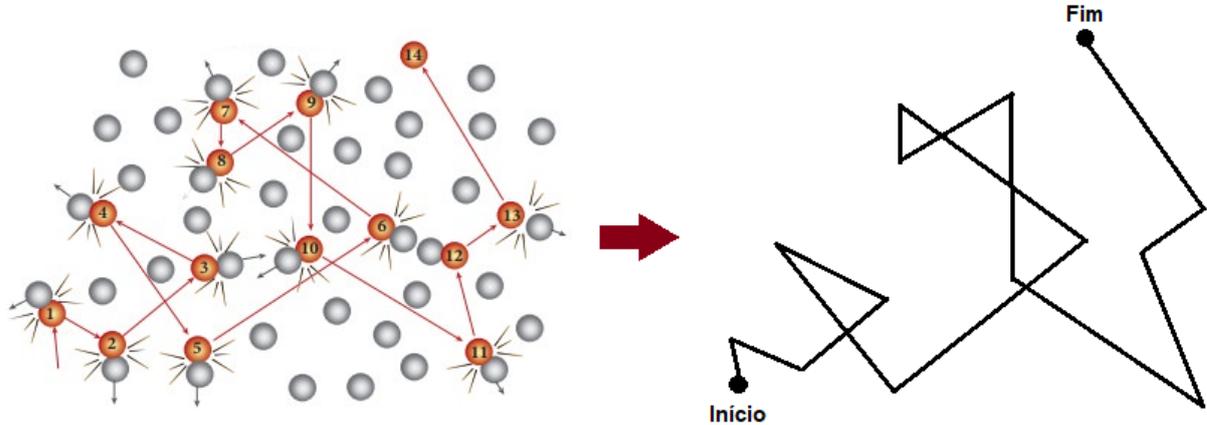


Figura 3: Trajetória típica de uma partícula sujeita a um movimento do tipo Browniano, o movimento de uma PA pode ser simulado através do MBA, que é resultado da velocidade de autopropulsão das partículas e de várias colisões aleatórias com as demais partículas do sistema.

Na seção seguinte (Métodos Numéricos), apresentaremos uma discussão acerca dos métodos computacionais utilizados em nossos estudos de MA. Nessa seção veremos o método de simulação em Dinâmica Molecular, no que ele consiste, e o passo a passo para o cálculo da evolução do sistema de MA. Apresentaremos na mesma seção o método de integração das equações com termo estocástico utilizado (método de integração de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco Gaussiano) e por fim, abordaremos a extensão das equações de Newton para o movimento com um termo de força estocástica, a famosa equação de Langevin.

Na seção 3 apresentaremos os resultados obtidos em nossos estudos das PA em meio a substratos Decorados (termo que utilizamos para representar um substrato ordenado em forma de semicírculos, representando a quebra da simetria local para um obstáculo circular). Nessa seção veremos sobre quais condições do nosso sistema podemos induzir uma corrente líquida de partículas em uma dada direção preferencial (direção da quebra da simetria local do substrato). Portanto, apresentaremos os resultados das velocidades médias do sistema de PA em função dos parâmetros de controle, como intensidade do ruído angular, fração de ocupação (que está relacionada à densidade de partículas na caixa de simulação como veremos), tamanho dos obstáculos e separação entre os obstáculos.

Na mesma seção, apresentaremos nossos resultados para a inversão na corrente líquida de PA para uma rede desordenadas de obstáculos semicirculares, veremos quais os im-

pactos da quebra da simetria local e global da caixa de simulação na velocidade média do sistema. Por fim, apresentaremos os resultados obtidos para um estudo sistemático semelhante ao que foi feito para as PA mas agora para uma modelagem de Barras Ativas. Veremos se a geometria diferenciada da nossa Partícula Ativa influencia nos resultados para a velocidade média do sistema em meio à uma rede ordenada e desordenada de obstáculos semicirculares. Veremos ainda nessa seção um efeito observado para as BA, a hiperaglomeração de Partículas que chamamos de coágulos, onde, calcularemos a probabilidade de ocorrência desse fenômeno.

No apêndice A, apresentamos nosso modelo analítico para o cálculo da curva de corrente média líquida de PA para uma rede desordenada de obstáculos semicirculares. No apêndice B mostramos os principais modelos de MA e no apêndice C trazemos o cálculo do Desvio Quadrático Médio (DQM) e do Parâmetro de Ordem (PO), que são algumas propriedades que podem ser relevantes para análise de transições de fase em MA. Por fim, no apêndice D, apresentamos nosso trabalho publicado.

2 MÉTODOS NUMÉRICOS

Sistemas de MA geralmente são compostos por dezenas de milhares de partículas, com isso, a determinação do movimento de cada ente do sistema passa a ser um laborioso trabalho. Apesar das equações serem analiticamente simples, conforme o MBA, o número muito grande de partículas faz com que os métodos de simulação computacional viabilizem a determinação da evolução de tais sistemas físicos no tempo. Portanto, os métodos numéricos utilizados nas simulações nos permitem integrar as equações do movimento para sistemas de ordem de grandeza relevante podendo prever simulações de experimentos em MA antes mesmo de sua aplicação em laboratório. No presente capítulo, discutiremos os métodos computacionais utilizados nesse trabalho. Apresentamos também uma descrição do modelo computacional de Dinâmica Molecular para sistemas ativos.

2.1 Simulação em Dinâmica Molecular

O método de Dinâmica Molecular é uma técnica computacional desenvolvida para estudo das propriedades de transporte de sistemas clássicos constituídos de muitas partículas (FRENKEL; SMIT, 2001). A dinâmica desses sistemas é regida pelas leis clássicas da mecânica. As simulações tentam replicar ao máximo as situações observadas em laboratório, como por exemplo na simulação de um sistema constituído de N partículas, prosseguimos em resolver as equações do movimento de Newton para o sistema desde que as propriedades a serem medidas estejam em uma janela de equilíbrio, ou seja, que atinjam um determinado valor no tempo. De fato, mesmo que o método computacional facilite a predição da evolução do sistema no tempo ainda existem dificuldades semelhantes aos experimentos reais desses sistemas, como por exemplo no estabelecimento das condições iniciais do sistema e nos tempos de medidas das propriedades físicas de interesse.

Para diminuir esses erros nas simulações, geralmente apela-se para uma descrição estatística dos sistemas, quer dizer, simula-se diversos sistemas (cópias) com condições iniciais diferentes para que assim abordemos e consideremos um conjunto de vários experimentos distintos do mesmo sistema. Assim, para cada cópia do sistema, fazemos uma descrição estatística e com valores médios dessas realizações distintas para podermos analisar as propriedades físicas de interesse. As equações do movimento podem ser escritas na forma fundamental das equações

de movimento de Lagrange, a saber

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (2.1)$$

aqui, q_i são as coordenadas generalizadas e \dot{q}_i as respectivas velocidades generalizadas das N (com $i = 1, 2, 3 \dots N$) partículas. O Lagrangeano do sistema é uma função do tipo $L(q_i, \dot{q}_i)$ e é definido em termos da energia cinética (K) e da energia potencial (V), a saber:

$$L = K - V. \quad (2.2)$$

Nesse ponto, é interessante reescrever nossa abordagem em termos da visão Hamiltoniana do sistema, quer dizer, fazemos uma transformação de Legendre para obter o Hamiltoniano do sistema:

$$H(q_1, q_2 \dots q_N, p_1, p_2 \dots p_N) = \sum_{i=1}^N \dot{q}_i p_i - L(q_1, q_2 \dots q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2 \dots \dot{q}_N), \quad (2.3)$$

onde o elemento p_i é o momento canônico da i -ésima coordenada definido por:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (2.4)$$

ou melhor, podemos reescrever nosso Hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1; i \neq j}^N \left[\frac{p_i^2}{m_i} + V(r_{ij}) \right], \quad (2.5)$$

onde r_{ij} é a distância entre a partícula i e a partícula j e m_i é a massa da i -ésima partícula. É sabido que as forças entre as partículas (\vec{F}_{ij}) pode ser determinada pela relação:

$$\vec{F}_{ij} = -\nabla V. \quad (2.6)$$

e para um sistema bidimensional (xy) tem componentes:

$$F_{x_i} = -\frac{\partial V(r_{ij})}{\partial x}, F_{y_i} = -\frac{\partial V(r_{ij})}{\partial y}, \quad (2.7)$$

portanto, as equações do movimento de cada partícula i será dada por:

$$m_i \left(\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \right) = \vec{F}_i = F_{x_i} \hat{\mathbf{i}} + F_{y_i} \hat{\mathbf{j}}. \quad (2.8)$$

2.2 Método de integração de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco Gaussiano

Para integrar as equações do movimento numericamente, será usado o chamado algoritmo de Runge-Kutta de segunda ordem para o ruído branco Gaussiano (HONEYCUTT, 1992) que é um método de extensão ao algoritmo determinístico padrão de Runge-Kutta incluindo termos estocásticos (Força aleatória $F(t)$ - ruído branco Gaussiano) e apresenta alta precisão mesmo com passo de integração suficientemente grande. Consideramos portanto a equação para o ruído branco em uma variável:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + g_w(t), \quad (2.9)$$

onde a função estocástica $g_w(t)$ (ruído branco Gaussiano), possui propriedades:

$$\langle g_w(t) \rangle = 0, \quad (2.10)$$

e

$$\langle g_w(t)g_w(t') \rangle = 2D\delta(t-t'), \quad (2.11)$$

integrando a equação (2.9) de $t = 0$ até Δt , obtemos:

$$x(\Delta t) = x_0 + \int_0^{\Delta t} f(x(t'))dt' + \int_0^{\Delta t} g_w(t')dt'. \quad (2.12)$$

Após fazer uma laboriosa expansão em série de Taylor de f em torno de x_0 , combinando alguns termos, desprezando termos de ordem maior que (Δt^4) e comparando os termos obtidos com uma extensão do método padrão de Runge-kutta de segunda ordem como visto em (HONEYCUTT, 1992) determina-se o método estocástico de Runge-Kutta de segunda para o ruído branco Gaussiano:

$$x(\Delta t) = x_0 + \frac{1}{2}\Delta t(F_1 + F_2) + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\psi, \quad (2.13)$$

com

$$F_1 = f(x_0), \quad (2.14)$$

$$F_2 = f(x_0 + \Delta t F_1 + (2D\Delta t)^{\frac{1}{2}}\psi), \quad (2.15)$$

sendo ψ uma variável aleatória com propriedades $\langle \psi \rangle = 0$ e $\langle \psi^2 \rangle = 1$.

2.3 Condições Periódicas de Contorno (CPC)

Afim de negligenciar efeitos nos modelos que simulam MA, onde existe um número muito grande de partículas, da ordem de milhares delas, as Condições Periódicas de Contorno se fazem necessárias. Utilizamos as CPC's também afim de gerar um sistema suficiente grande para estudar suas propriedades dinâmicas.

Na prática, para introduzir as CPC's no sistema considera-se um número limitado de cópias idênticas do sistema em suas bordas. Isso implica dizer que partículas que atingem as bordas da região de simulação que as contém aparecem imediatamente do lado oposto a região como observado na parte superior esquerda ou inferior da Figura 4.

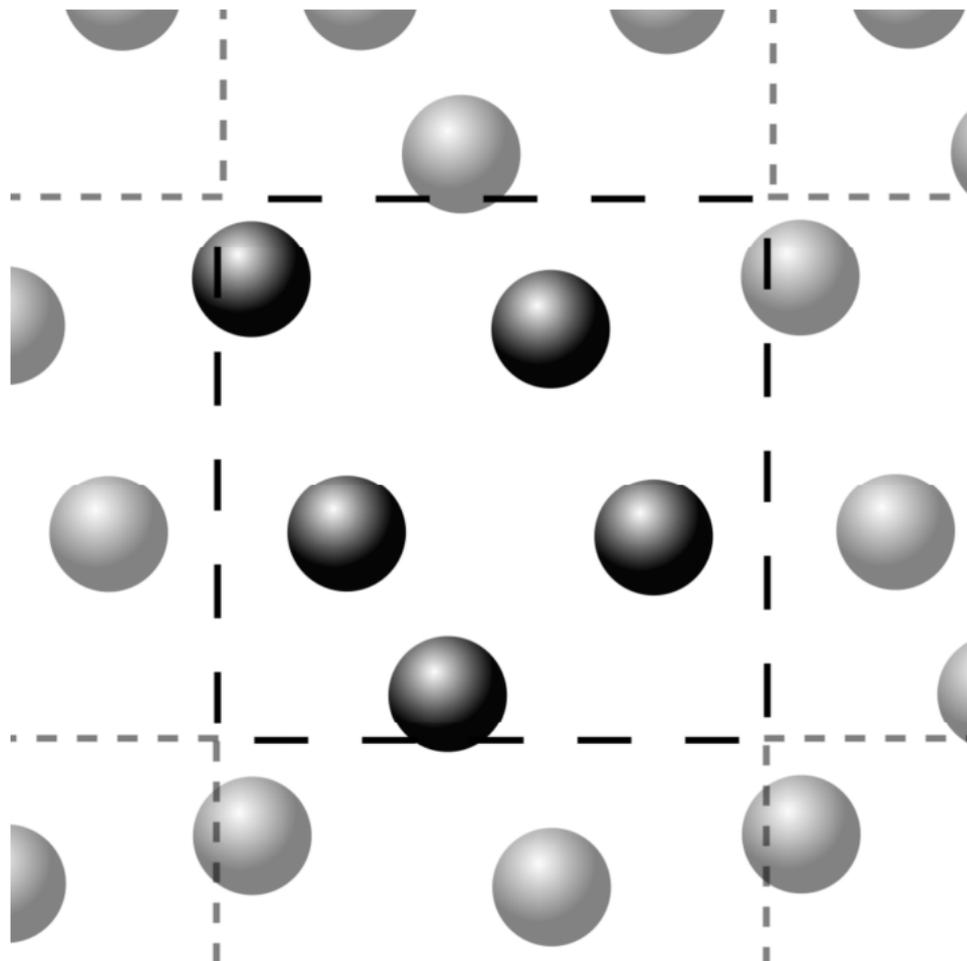


Figura 4: Condições Periódicas de Contorno (CPC) para uma rede de simulação bidimensional (2D). Note que o sistema tem cópias idênticas em suas bordas.

2.4 O Método de Dinâmica Molecular

No método de Dinâmica Molecular utilizamos uma sequência de passos em um algoritmo escrito em alguma linguagem computacional afim de determinar a evolução de um

determinado sistema físico (FRENKEL; SMIT, 2001; RAPAPORT; RAPAPORT, 2004). A saber:

1. Especificamos a temperatura inicial do sistema (T), número de partículas (N), densidade (ρ), passo de tempo (Δt);
2. Determinamos as condições iniciais do sistema físico a ser simulado, quer dizer, estabelecemos as posições e velocidades iniciais de todas as partículas do sistema, tomando os devidos cuidados com sobreposição de partículas e explosão das variáveis de força e potencial;
3. Calculamos as interações entre todos os pares de partículas;
4. Integramos as equações do movimento para um determinado passo de tempo (Δt). Esse passo continua a se repetir até que tenhamos computado a evolução temporal total do sistema;
5. Aplicam-se as condições periódicas de contorno do sistema;
6. Após tempo suficiente, fazemos as medidas das propriedades a serem investigadas e ao final determinamos uma média das quantidades.

2.5 Equação de Langevin

A equação de Langevin é uma equação diferencial estocástica usada para descrever o movimento de partículas sujeitas a um processo de ruído aleatório. Ela é amplamente usada em física estatística para modelar o comportamento de partículas em sistemas fora do equilíbrio. A equação é de primeira ordem e relaciona a taxa de mudança da velocidade da partícula com a força determinística dependente da velocidade e o termo de ruído aleatório, que representa as flutuações estocásticas no movimento da partícula. O termo de ruído é geralmente assumido como um processo de ruído branco com média zero e correlações temporais como uma delta de Dirac.

A equação de Langevin é usada em situações onde o ruído aleatório é significativo, como em estudos de transporte de partículas em meios fluidos, reações químicas, dinâmica de partículas em campos de força externos, entre outros sistemas físicos e biológicos. Existem várias abordagens matemáticas para solucionar a equação de Langevin, dependendo do contexto específico de aplicação. A seguir veremos a dinâmica de Langevin.

Dada uma partícula browniana de massa m imersa em um fluido sujeita a presença de uma força viscosa proporcional à velocidade $-\alpha v$ e uma força estocástica $F(t)$, a equação do movimento em uma dimensão será:

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F(t), \quad (2.16)$$

podemos dividir todos os termos por m , temos:

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + L(t), \quad (2.17)$$

onde α é uma constante que regula a intensidade da viscosidade da partícula com o fluido circundante, com $\alpha = m\gamma$ e $L(t) = \frac{F(t)}{m}$ a força estocástica que tem as seguintes propriedades: a) $L(t)$ é irregular e imprevisível, mas suas propriedades médias ao longo de um conjunto de sistemas semelhantes são simples. O conjunto pode consistir em muitas partículas no mesmo campo, desde que suas distâncias mútuas sejam tão grandes que não influenciem uma a outra. Também podemos imaginar $L(t)$ de uma série de observações sucessivas da mesma partícula, desde que os intervalos de tempo entre eles sejam suficientemente grande para que não influenciem cada um outro, assim $L(t)$ pode ser considerado como um processo estocástico; b) As propriedades estocásticas de $L(t)$ são dadas independentemente de v , de modo que $L(t)$ atua como uma força externa. Sua média desaparece,

$$\langle L(t) \rangle = 0, \quad (2.18)$$

c) A força $L(t)$ é causada pelas colisões das moléculas individuais do fluido circundante e varia rapidamente. Isso é expresso postulando sua função de autocorrelação:

$$\langle L(t)L(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t'), \quad (2.19)$$

onde Γ é uma constante. A ideia é que cada colisão seja praticamente instantânea e as colisões sucessivas não sejam correlacionadas. Na verdade, o lado direito deve ser uma função de $|t - t'|$ com um pico acentuado de largura igual à duração de uma única colisão. Contudo que esse tempo seja mais curto do que todos os outros tempos relevantes, pode-se usar a função delta por conveniência. A equação de Langevin é o protótipo de uma equação diferencial estocástica, ou seja, uma equação diferencial cujos coeficientes são funções aleatórias de tempo com determinadas propriedades estocásticas. Podemos analisar a solução genérica da equação de Langevin, começamos considerando $v(t) = u(t) \exp^{-\gamma t}$, onde $u(t)$ é uma função de t a ser determinada.

Introduzindo esse termo no Equação de Langevin teremos:

$$\frac{du(t)}{dt} \exp^{-\gamma t} - u(t) \gamma \exp^{-\gamma t} = -u(t) \exp^{-\gamma t} + L(t), \quad (2.20)$$

isso é,

$$\frac{du(t)}{dt} = \exp^{-\gamma t} L(t), \quad (2.21)$$

cuja solução é:

$$u(t) = u_0 + \int_0^t \exp^{-\gamma t'} L(t') dt', \quad (2.22)$$

podemos concluir portanto:

$$v(t) = v_0 \exp^{-\gamma t} + \exp^{-\gamma t} \int_0^t \exp^{-\gamma t'} L(t') dt', \quad (2.23)$$

onde v_0 é a velocidade da partícula no instante $t = 0$. Esta solução é válida para qualquer função de tempo $L(t)$. Então, vamos usar as propriedades específicas do ruído para determinar o significado e a variância da velocidade, portanto, temos:

$$\langle v(t) \rangle = v_0 \exp^{-\gamma t}, \quad (2.24)$$

então

$$v(t) - \langle v(t) \rangle = \exp^{-\gamma t} \int_0^t \exp^{-\gamma t'} L(t') dt', \quad (2.25)$$

dessa forma concluímos:

$$(v(t) - \langle v(t) \rangle)^2 = \exp^{-2\gamma t} \int_0^t \int_0^t L(t') L(t'') \exp^{-\gamma(t'+t'')} dt' dt'', \quad (2.26)$$

tomando a média e com equação (2.19) temos:

$$\langle (v(t) - \langle v(t) \rangle)^2 \rangle = \exp^{-2\gamma t} \int_0^t \Gamma \exp^{-2\gamma t'} dt', \quad (2.27)$$

onde usamos o resultado da função delta. Efetuando a integral, obtemos a variação de velocidade:

$$\langle v^2 \rangle - (\langle v \rangle)^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - \exp^{-2\gamma t}), \quad (2.28)$$

Considerando o caso estacionário, por muito tempo, onde $\langle v \rangle = 0$, a velocidade média quadrática torna-se:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2\gamma}. \quad (2.29)$$

Da teoria cinética dos gases, sabemos que

$$\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T, \quad (2.30)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Então, podemos comparar essas equações e concluir:

$$\Gamma = \frac{2\gamma K_B T}{m}, \quad (2.31)$$

onde $B = \Gamma^2$ e $\alpha = \gamma m$, então

$$B = 2\alpha k_B T. \quad (2.32)$$

Podemos obter a média de deslocamento quadrático, para isso, calculamos primeiro $x(t)$ dado por

$$x(t) = x_0 + \int_0^t v(t') dt', \quad (2.33)$$

onde x_0 é a posição da partícula em $t = 0$ ou, considerando a equação (2.23), temos:

$$x(t) = x_0 + v_0 \int_0^t \exp^{-\gamma t'} dt' + \int_0^t \exp^{-\gamma t'} \int_0^{t'} L(t'') \exp^{-\gamma t''} dt'' dt', \quad (2.34)$$

resolvendo a primeira integral e reorganizando os termos temos:

$$x(t) = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - \exp^{-\gamma t}) + \int_0^t L(t'') \exp^{-\gamma t''} \int_{t''}^t \exp^{-\gamma t'} dt' dt'', \quad (2.35)$$

integrando em t' , obtemos o resultado:

$$x(t) = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - \exp^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t L(t'') (1 - \exp^{-\gamma(t''-t)}) dt'', \quad (2.36)$$

que é válido para qualquer função de tempo $L(t)$. Semelhante ao que foi feito para a velocidade, teremos:

$$\langle x(t) \rangle = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - \exp^{-\gamma t}), \quad (2.37)$$

e a diferença

$$x(t) - \langle x(t) \rangle = \frac{1}{\gamma} \int_0^t L(t'') (1 - \exp^{-\gamma(t''-t)}) dt'', \quad (2.38)$$

onde calculamos o quadrado

$$(x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 = \frac{1}{\gamma^2} \int_0^t \int_0^t L(t') L(t'') (1 - \exp^{-\gamma(t'-t)}) (1 - \exp^{-\gamma(t''-t)}) dt' dt'', \quad (2.39)$$

pegando a média que temos

$$\langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2\gamma^2} \int_0^t (1 - \exp^{-\gamma(t-t')})^2 dt', \quad (2.40)$$

resolvendo a integral, concluímos

$$\langle (x^2) \rangle - (\langle x \rangle)^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma^2} t - \frac{2}{\gamma} (1 - \exp^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - \exp^{-2\gamma t}), \quad (2.41)$$

para tempos longos, o termo principal (dominante) é o primeiro termo, então temos

$$\langle (x^2) \rangle - (\langle x \rangle)^2 = 2Dt, \quad (2.42)$$

onde $D = \frac{\Gamma}{2\gamma^2} = \frac{B}{\alpha^2}$ é o coeficiente de difusão. Similarmente ao que foi feito anteriormente, podemos escrever:

$$D = \frac{2k_B T}{\alpha}, \quad (2.43)$$

essa é a relação de Einstein-Smoluchowski. Para partículas esféricas de raio a imersas em fluido de coeficiente de viscosidade μ , o coeficiente α é dado pela lei de Stokes:

$$\alpha = 6\pi\mu a, \quad (2.44)$$

então

$$D = \frac{k_B T}{3\pi\mu a}. \quad (2.45)$$

3 RESULTADOS

3.1 Estudo sistemático no transporte de Partículas ativas em redes de obstáculos assimétricos ordenados

Neste trabalho estudamos o movimento de partículas com autopropulsão - PA em redes de obstáculos assimétricos ordenados (BORBA, 2015). O estudo das PA é importante em diversas áreas do conhecimento tais como engenharia de materiais, medicina e ciências (KE *et al.*, 2010; GAUGER; STARK, 2006). Uma das propriedades mais instigantes de sistemas ativos, o comportamento coletivo, revela características diferentes do movimento individual dos constituintes. Ou seja, a ação de um dado indivíduo é dominada pela dinâmica coletiva de outros constituintes do sistema como resultado da interação entre eles. Em (BORBA, 2015), estudamos um sistema bidimensional ($2D$) de PA sujeitas à presença de obstáculos rígidos com geometria anisotrópica (semicírculos) distribuídos ordenadamente na forma de uma rede quadrada. Neste trabalho, assim como em outras referências (POTIGUAR *et al.*, 2014; WAN *et al.*, 2008a; GALAJDA *et al.*, 2007a; GHOSH *et al.*, 2013; REICHHARDT; REICHHARDT, 2013), observa-se também que a quebra de simetria do substrato impõe a retificação do movimento em sistemas ativos.

Além da interação entre partículas e entre partículas e obstáculos, o movimento individual de cada PA é dito estocástico (um tipo de movimento ou processo que é influenciado pelo acaso ou pela aleatoriedade) e pode muito bem ser modelado matematicamente através de um ruído branco. Uma extensão natural de nossos estudos é caracterizar a dinâmica das PA's através do substrato $2D$, na ausência ou não de uma força externa propulsora. Neste caso, realizamos um estudo sistemático do movimento coletivo em função da intensidade do ruído, que representa o movimento errático das partículas, do tamanho dos obstáculos, da densidade de partículas e da separação entre os obstáculos. Devido a presença de obstáculos anisotrópicos, surge um movimento efetivo coletivo espontâneo ao longo de uma dada direção preferencial, caracterizado por uma velocidade média não-nula das partículas, ainda que na ausência de força externa. As condições básicas para o movimento coletivo espontâneo, como veremos, depende, principalmente, dos valores do ruído e da densidade de partículas.

3.1.1 Modelo

Analisamos um sistema $2D$ contido por N_{par} partículas autopropelidas, cada uma com diâmetro d_{par} e N_o obstáculos na forma de semicírculos de diâmetro D_o , 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 quadradas de aresta a , cada uma contendo um obstáculo em seu centro. As interações entre as partículas e entre partículas e os obstáculos são modeladas através de um potencial restaurador, que confere às partículas uma modelagem do tipo disco deformável. Nesse modelo os obstáculos são considerados rígidos ($\kappa_{obs} \gg \kappa_{par}$). A Força \vec{F}_i é a força total sob a i -ésima partícula devido as j partículas e é dada por:

$$\vec{F}_i = \kappa \alpha_{ij} \hat{r}_{ij}, \quad (3.1)$$

o termo α_{ij} é a distância entre a partícula ativa i e o objeto j (partícula ativa ou obstáculo) e é dada por:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - r_{ij}, \quad (3.2)$$

onde $d_i = d$ (para partícula ativa) e $d_j = d$ ou $d_j = D_o$ (para partícula ativa ou obstáculo), quando o contato da partícula ativa é com a face plana de um obstáculo semicircular temos $d_j = 0$ e r_{ij} é a distância entre o objeto i e o objeto j . Em nosso modelo, a i -ésima partícula ativa possui velocidade de autopropulsão constante em módulo (v_o) no plano xy dada por:

$$\vec{v}_i = v_o [\cos \beta_i(t) \hat{i} + \sin \beta_i(t) \hat{j}], \quad (3.3)$$

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

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0, \quad (3.4)$$

e

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = (2\eta \Delta t)^{\frac{1}{2}} \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (3.5)$$

η é a intensidade do ruído branco e Δt é o passo de tempo. Nesse modelo as partículas executam apenas MBA, ou seja, a intensidade da velocidade de autopropulsão não muda erráticamente somente sua direção. As equações do movimento para a i -ésima partícula ativa no plano xy são

dadas por:

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = v_{x_i} + \mu F_{x_i} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = v_{y_i} + \mu F_{y_i}, \quad (3.7)$$

e

$$\frac{\partial \beta_i(t)}{\partial t} = \eta_i(t), \quad (3.8)$$

aqui μ é a motilidade da partícula, v_{x_i} e v_{y_i} são as componentes das velocidades x e y respectivamente. A fração de ocupação (ϕ) é um parâmetro que indica o espaço disponível para as partículas ativas e é definido como:

$$\phi = \frac{N_{par} \pi d_{par}^2}{4(L^2 - S_T)}, \quad (3.9)$$

onde L é a dimensão lateral da caixa de simulação (quadrada), portanto L^2 representa a área da caixa, S_T é a área ocupada pelos obstáculos e d_{par} é o diâmetro das PA. Podemos notar que a fração de ocupação ϕ está diretamente relacionada a densidade ρ de partículas do sistema, como vemos a seguir:

$$\phi = \pi d_{par}^2 \rho. \quad (3.10)$$

No presente modelo não são consideradas interações hidrodinâmicas. A presença dos obstáculos na forma de semicírculos afeta a dinâmica das partículas ativas. Devido a geometria do substrato, observamos uma tendência das partículas, ao atingirem o lado convexo dos obstáculos, de movimentarem-se ao redor dos mesmos, como num movimento em vórtex, porém quando as partículas atingem o lado plano o movimento ao redor é interrompido e as partículas desgarram dos obstáculos e passam a se deslocarem aleatoriamente (no espaço livre entre os obstáculos). Podemos notar que a trajetória média de uma só partícula não se diferencia na presença ou não dos obstáculos, esse efeito é puramente devido ao movimento coletivo em meio ao substrato e a quebra de simetria do mesmo devido a forma de semicírculos imposto ao sistema.

Em nosso sistema, os obstáculos são dispostos de forma ordenada, ou seja, com mesmo espaçamento entre eles d_s , e mesmo diâmetro D_o . Em uma caixa de simulação de comprimento L por L distribuimos N_o obstáculos (N_o deve ser um número quadrado perfeito), cada um ocupando o centro de uma célula quadrada de tamanho a por a (ver Fig. 5).

Na tentativa de realizar uma análise sistemática da dinâmica do sistema ativo em questão, decidimos primeiramente estudar o movimento em termos das variações de parâmetros

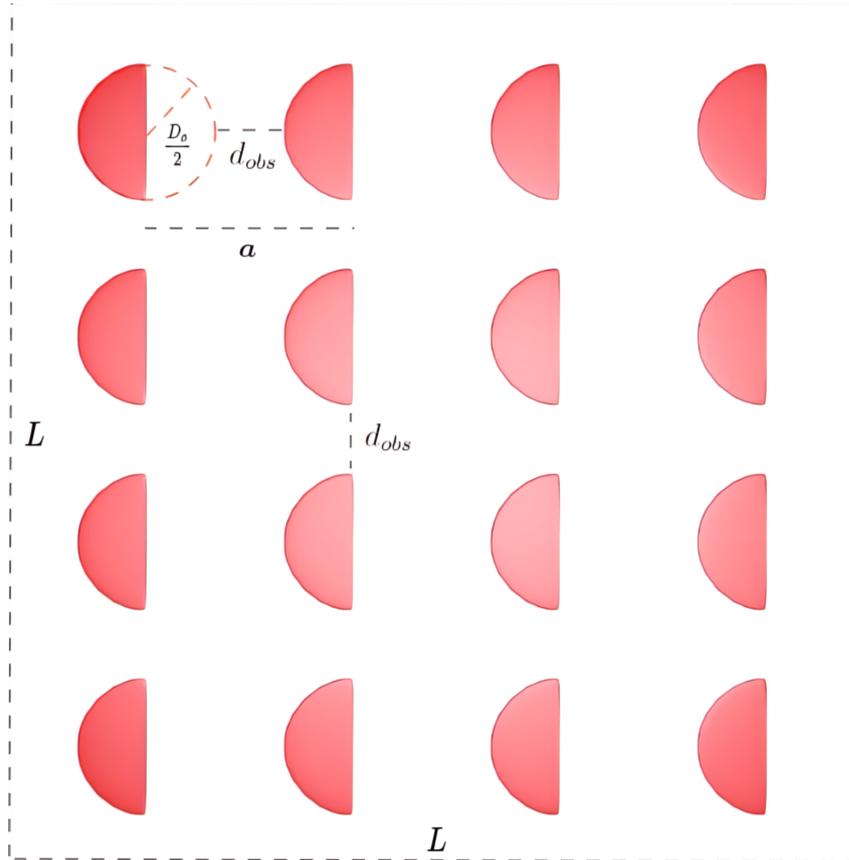


Figura 5: Geometria da rede: a distância entre obstáculos d_{obs} de células vizinhas é dada por $d_{obs} = a - D_o$ onde a é a aresta de cada célula que contém cada obstáculo da rede e D_o é o diâmetro do obstáculo. L é o tamanho da caixa de simulação.

intrínsecos da própria construção do sistema, como por exemplo o diâmetro dos obstáculos D_o , fração de ocupação ϕ , intensidade do ruído η , intensidade e direção da força externa F_{dc} e a separação entre os obstáculos na rede d_{obs} .

Com relação a simulação do sistema, inicialmente, as N_{par} partículas são dispostas em posições aleatórias na caixa de simulação, utilizamos um número de passos de simulação, da ordem de milhões, tanto para a evolução do sistema quanto na medida das propriedades de interesse. Inicialmente, definimos a termalização do sistema, que pode ser compreendida como o tempo necessário para a evolução do sistema, a partir de seu estado inicial ao regime estacionário. Após esse tempo, começamos a acumular as quantidades de interesse para a caracterização do sistema, principalmente o comportamento das velocidades médias $\langle v_x \rangle$ e $\langle v_y \rangle$ do sistema.

3.1.2 *Estudo do movimento das PA com relação a variação no tamanho dos obstáculos (D_o), fração de ocupação (ϕ) e ruído (η)*

Antes de apresentarmos os resultados e conclusões com relação ao comportamento das velocidades $\langle v_x \rangle$ e $\langle v_y \rangle$, deixemos claro que apesar do substrato aqui escolhido ser uma rede ordenada e a posição inicial das partículas ativas serem aleatórias, a geometria assimétrica (semicírculos) juntamente com um número suficiente de partículas (proporcional a ϕ) garantirá ao sistema uma direção e sentido preferencial de movimento $+x$ (desde que os obstáculos estejam fixos e dispostos com a face plana paralela ao eixo y e face curva voltada ao sentido $-x$).

Com relação aos parâmetros da simulação, fixamos a abertura entre obstáculos $d_{obs} = 5$, afim de garantir *a priori* um fluxo relevante de partículas (a escolha das dimensões do sistema deve ser bem pensada na relação entre estatística e tempo de simulação, ou seja, sistemas grandes podem gerar um número muito grande de partículas e a viabilização da simulação em termos de tempos de simulação passa a não ser tão interessante, claro que, para se ter uma estatística relevante, podemos realizar várias simulações do mesmo sistema, apenas mudando as condições iniciais do mesmo, e então, calcular uma média das realizações, podendo assim, garantir um resultado razoável, e de fato assim o fizemos, quer dizer, nossos resultados são médias de pelo menos 30 realizações diferentes com condições iniciais também diferentes mas com mesmos parâmetros do sistema).

Outros parâmetros fixados são, número de obstáculos na rede $N_o = 100$, diâmetro das PA $d_{par} = 1$, coeficientes (constantes da força restauradora) $\kappa = 10$ (para as PA) e $\kappa_o = 1000$ (para os obstáculos).

Para obstáculos do mesmo tamanho das PA ($D_o = d_{par}$), elas não experimentam de fato o efeito da quebra da simetria do substrato, pois seu tamanho ainda não é suficientemente considerado. Contudo, ao aumentarmos o diâmetro dos obstáculos, percebemos que as PA são influenciadas, de modo que, a velocidade média do sistema é retificada. Esse comportamento pode ser entendido como uma consequência do incremento da superfície de contato dos obstáculos pelas partículas, fazendo com que a quebra de simetria deles passe a influenciar na direção preferencial do movimento das partículas, como explicaremos a seguir.

Podemos analisar o comportamento da velocidade $\langle v_x \rangle$ na Fig. 6 e na Fig. 7 com relação aos diâmetros dos obstáculos. Daqui em diante, analisaremos o comportamento da velocidade $\langle v_x \rangle$, omitindo os valores de $\langle v_y \rangle$, uma vez que para todas as simulações $\langle v_y \rangle = 0$. Este resultado pode ser facilmente entendido pois, na direção y , não há preferência de movimento,

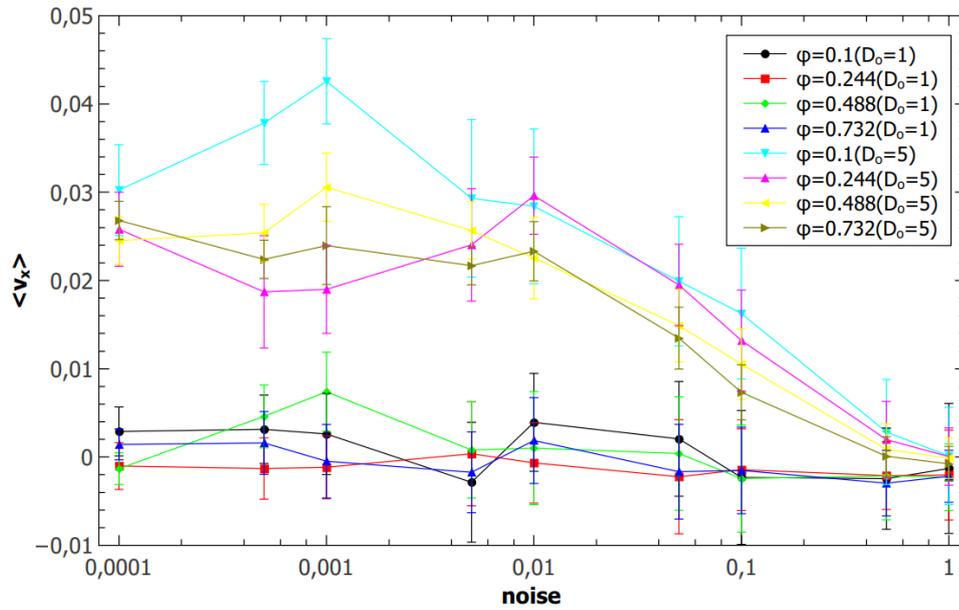


Figura 6: Velocidade média $\langle v_x \rangle$ em função da intensidade do ruído η para uma rede ordenada de $N_o = 100$ obstáculos semicirculares com diâmetros $D_o = 1$ (da ordem do tamanho das PA) e $D_o = 5$ com quatro frações de ocupação analisadas, $\phi = 0.1; 0.244; 0.488; 0.732$ e ruído variando de $\eta = 0.0001$ a $\eta = 1.0$

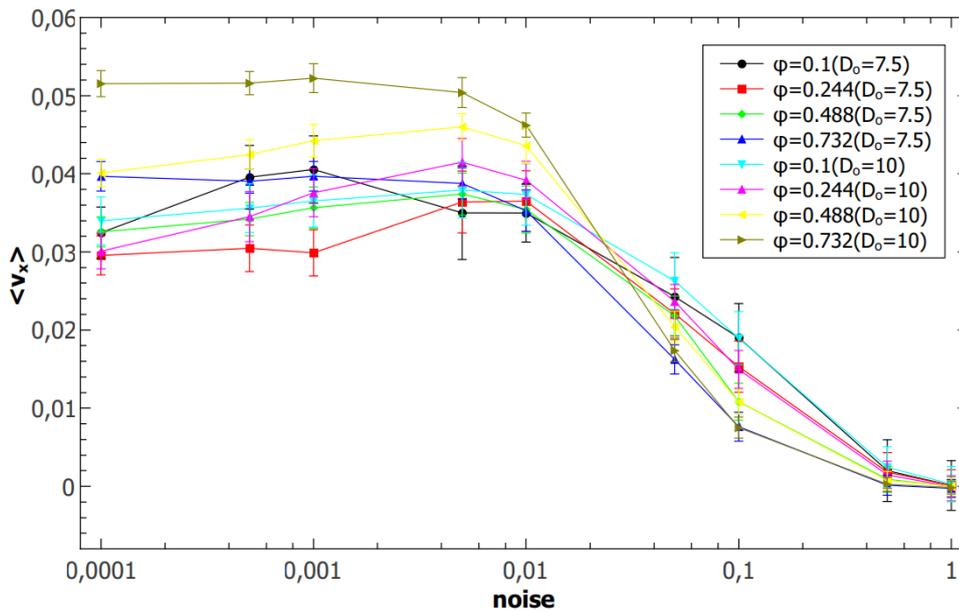


Figura 7: Velocidade média $\langle v_x \rangle$ em função da intensidade do ruído η para uma rede ordenada de $N_o = 100$ obstáculos semicirculares com diâmetros $D_o = 7.5$ e $D_o = 10$ com quatro frações de ocupação analisadas, $\phi = 0.1; 0.244; 0.488; 0.732$ e ruído variando de $\eta = 0.0001$ a $\eta = 1.0$

uma vez que os obstáculos não são assimétricos em y . Obstáculos com tamanho das partículas não contribuem para velocidade $\langle v_x \rangle$ e podemos entender que não são suficientemente grandes para as PA sentirem o efeito da quebra de simetria. Já para obstáculos maiores percebemos valores positivos de $\langle v_x \rangle$ (maiores com aumento de ϕ) e para ruídos pequenos indo a zero para ruídos maiores como observado para diâmetros $D_o = 5, 7.5, 10$. Podemos entender o incre-

mento de $\langle v_x \rangle$ com o diâmetro dos obstáculos como de fato a quebra de simetria começando a ser relevante e quando os obstáculos são maiores a tendência de partículas (para ruído baixo) em atingirem e contornarem os obstáculos da esquerda para a direita na caixa se torna maior. O fato das velocidades $\langle v_x \rangle$ irem a zero para ruído alto está relacionado com a aleatoriedade do movimento individual das partículas. Ou seja, com ruído alto as partículas tendem a mudar sua direção de movimento mais frequentemente e o efeito de contorno dos obstáculos é cessado.

Concluimos portanto, que a velocidade $\langle v_x \rangle$ depende do tamanho dos obstáculos para possuir um valor positivo, onde seu valor é máximo quando temos a presença de mais partículas (ϕ maior), e obstáculos maiores (D_o maiores) com ruído pequeno ($\eta = 0.0001$). Diante dos resultados obtidos, podemos verificar melhor o comportamento da velocidade $\langle v_x \rangle$ na faixa de ruído baixo ($\eta = 0.001$), mas agora fixando esse valor de ruído e variando o tamanho D_o .

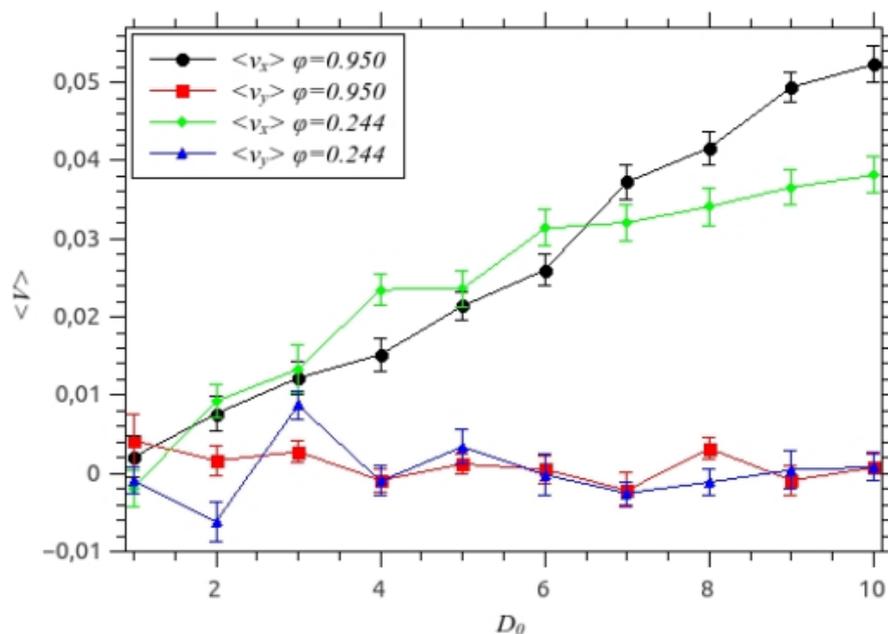


Figura 8: Velocidade média $\langle V \rangle$ em função da intensidade do ruído η para uma rede ordenada de $N_o = 100$ obstáculos semicirculares com diâmetros variando de $D_o = 1$ a $D_o = 10$ com as frações de ocupação $\phi = 0.24, 0.950$ e ruído $\eta = 0.001$

Na Fig. 8, podemos observar o comportamento crescente na velocidade $\langle v_x \rangle$ com o aumento no tamanho dos obstáculos. Também, observamos que para frações de ocupação $\phi = 0.244$ e fração de ocupação $\phi = 0.950$ o comportamento de $\langle v_x \rangle$ é semelhante, isso está relacionado à quantidade suficiente de partículas que, ao chocarem com a face curva dos obstáculos, escorregam pelos mesmos na tentativa de contorná-los, permanecendo em movimento no sentido $+x$, esse resultado pode indicar que a contribuição para esse efeito esteja de fato na contribuição das partículas mais próximas dos obstáculos (em contato ou em camadas próximas), com isso,

decidimos investigar melhor a contribuição das velocidades $\langle v_x \rangle$ nas proximidades e nas regiões mais afastadas dos obstáculos.

A partir daqui iremos analisar a velocidade $\langle v_x \rangle$ das partículas mais próximas aos obstáculos e as mais afastadas, e para isso, usaremos a seguinte definição: uma PA afastada é aquela em que a distância entre ela e o obstáculo (distância centro a centro), na célula em que a mesma se encontra, é 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, ou seja, as PA que não estão em contato com os obstáculos. As PA próximas são portanto as que não são afastadas, ou seja, as que estão em contato com os obstáculos qualquer uma de suas faces.

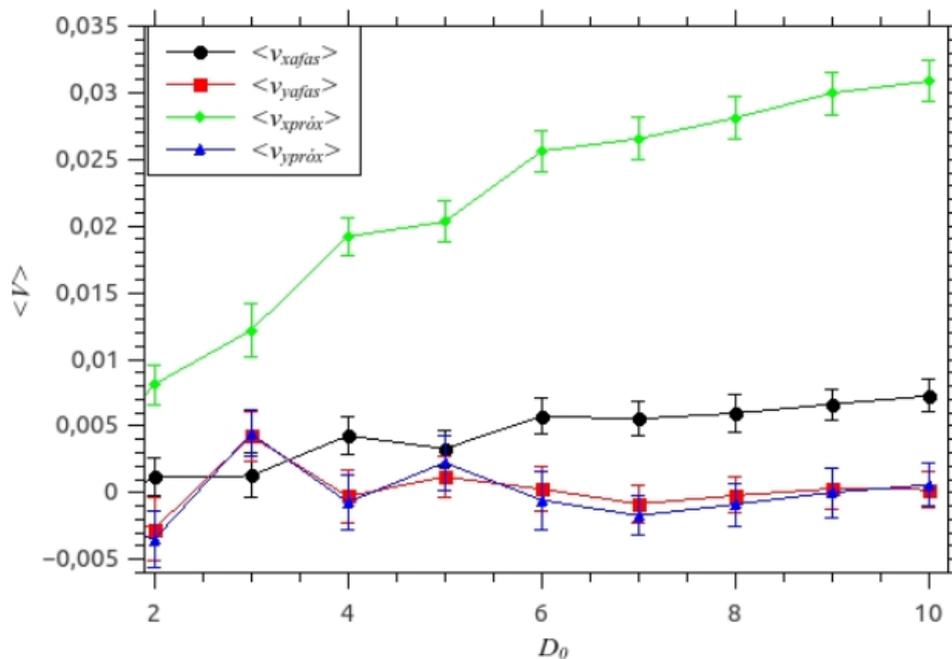


Figura 9: Velocidades médias das partículas afastadas ($\langle v_{xafas} \rangle$ e $\langle v_{yafas} \rangle$) e das partículas próximas ($\langle v_{xpróx} \rangle$ e $\langle v_{ypróx} \rangle$) em função do diâmetro D_0 dos obstáculos, com $\phi = 0.244$, $d_{obs} = 5$ e ruído $\eta = 0.001$.

A Fig. 9 mostra o comportamento das velocidades 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 fração de ocupação pequena $\phi = 0.244$. Analisando o comportamento das curvas, observamos que as partículas que mais contribuem com velocidade $\langle v_x \rangle > 0$ são as próximas aos obstáculos. Observamos também que a velocidade média $\langle v_x \rangle$ aumenta em função do aumento do diâmetro dos obstáculos, devido a uma maior quantidade de partículas capturadas na face curva dos obstáculos. Já na Fig. 10 fazemos a mesma análise considerando a fração de ocupação $\phi = 0.950$. Neste caso, a contribuição da velocidade das partículas próximas aumenta, mas há a indicação de saturação

na dependência em D_o e em termos de ϕ . Este resultado é esperado, uma vez que a área das faces curvas dos obstáculos é limitada. Para uma análise mais detalhada das partículas que de

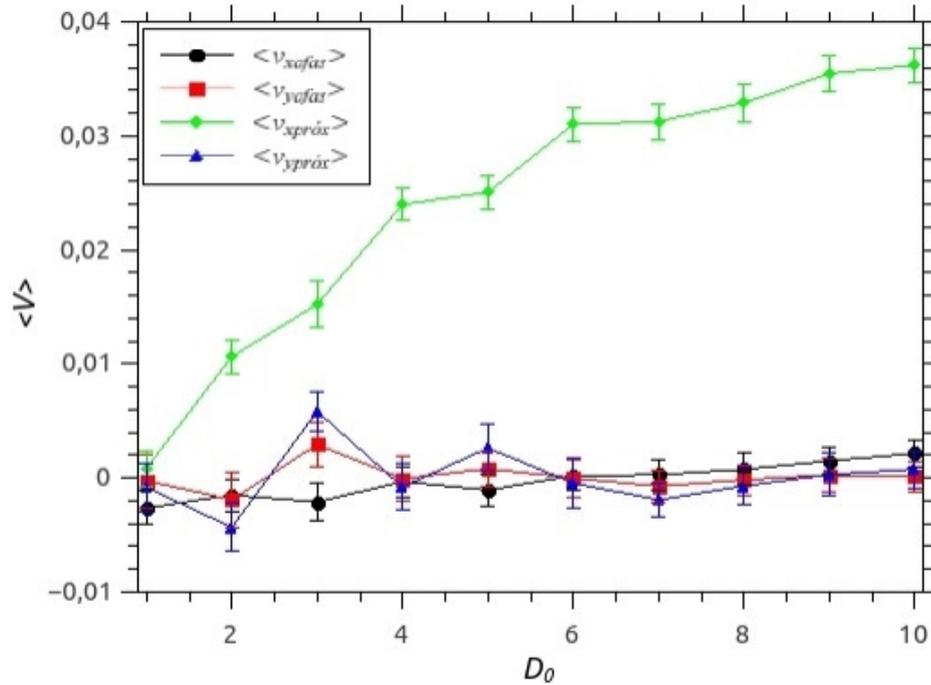


Figura 10: Velocidades médias das partículas afastadas ($\langle v_{xafas} \rangle$ e $\langle v_{yafas} \rangle$) e das partículas próximas ($\langle v_{xpróx} \rangle$ e $\langle v_{ypróx} \rangle$) em função do diâmetro D_o dos obstáculos, com $\phi = 0.950$, $d_{obs} = 5$ e ruído $\eta = 0.001$.

fato contribuem para $\langle v_x \rangle$ com relação à proximidade aos obstáculos, definimos três raios de corte (rc): $rc = 0$ significa que a distância partícula-obstáculo é $rc = (d_{par} + D_o)/2$; $rc = 1$ que significa que a distância partícula-obstáculo é até $rc = (3d_{par} + D_o)/2$; e $rc = 2$ significa que a distância partícula-obstáculo é até $rc = (5d_{par} + D_o)/2$. Comparando as velocidades médias com relação aos raios de corte escolhidos (ver Fig. 11). Os resultados indicam que apenas as partículas nas duas primeiras camadas em contato com a superfície curva dos obstáculos contribuem para a velocidade ao longo de x . Este resultado está ainda em acordo com o que foi dito anteriormente sobre o incremento na velocidade média em função do aumento de ϕ e D_o .

Na Fig. 12 apresentamos uma ilustração dos raios de corte, bem como as legendas para os raios de corte (rc) considerados. Agora, apresentamos os resultados que mostram a influência de uma força externa F_{dc} no movimento das PA. Estudamos o comportamento de $\langle v_x \rangle$, introduzindo essa força na direção $+x$ até $-x$, ou seja, variando seu ângulo de 0 a 180 em relação ao eixo x , variando também a intensidade dessa força de 0 a 1 (valor comparável a velocidade de autopropulsão v_o). Nenhum resultado relevante foi observado, quer dizer, encontramos apenas um comportamento linear, como observado na Fig. 13.

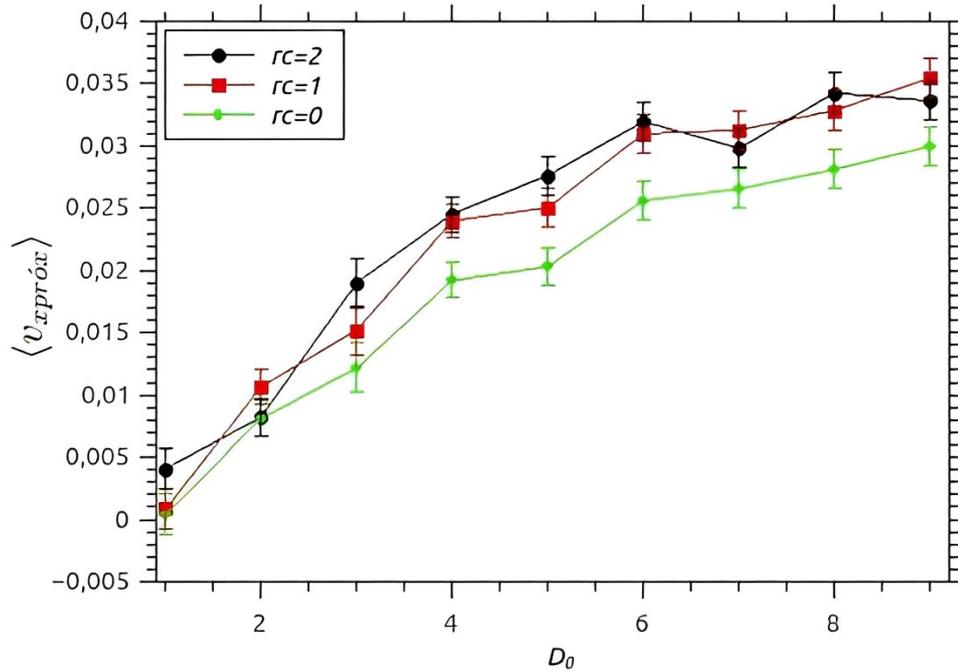


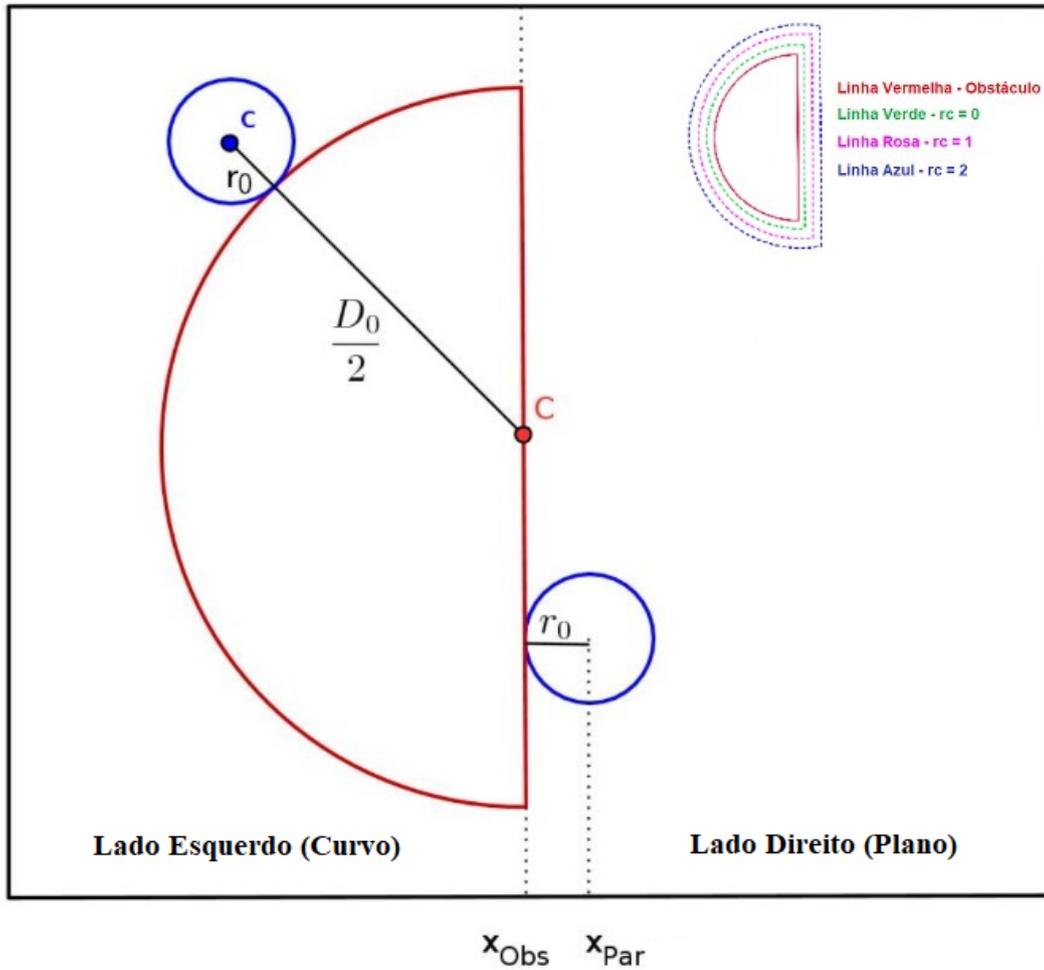
Figura 11: Velocidades médias das partículas em função do diâmetro D_o dos obstáculos, com $\phi = 0.244$, $d_{obs} = 5$ e ruído $\eta = 0.001$ e os três raios de corte, a linha verde representa $rc = 0$, a linha vermelha representa $rc = 1$ e a linha preta representa $rc = 2$.

3.2 Controle do transporte de PA em redes de obstáculos assimétricos desordenados (Efeito de inversão na corrente de partículas)

O método de Dinâmica Molecular pode ser usado para representar e simular sistemas de MA verificando suas propriedades dinâmicas em meio a redes de obstáculos. Na presente sessão, apresentaremos os resultados da investigação do transporte de MA na presença de uma rede quadrada desordenada de obstáculos, que fora construído removendo aleatoriamente uma fração deles da estrutura completa inicial. Fora obtida uma inversão espontânea da corrente de líquida de PA, em comparação com a corrente usual (a corrente obtida em trabalhos com obstáculos ordenados assimétricos) em função da fração de obstáculos removidos e a densidade de partículas. Fora observado que o regime de corrente negativa (oposto ao usual) é consequência do aprisionamento de partículas entre os obstáculos favorecendo que mais partículas se movam na direção negativa da corrente. Por fim, será apresentado um cálculo que reproduz parcialmente os resultados numéricos, com base no argumento de que a corrente média é dada pelo produto da velocidade média e o número médio de viajantes em cada direção.

3.2.1 Motivação

Matéria ativa é a definição genérica para partículas que geram movimento consumindo sua energia interna. Dentre os vários fenômenos associados a tais sistemas, as proprieda-



$$d(c, C) = r_0 + \frac{D_0}{2} \rightarrow rc = 0$$

$$d(x_{\text{Par}}, x_{\text{Obs}}) = r_0 \rightarrow rc = 0$$

Figura 12: Geometria no cálculo das distâncias entre partícula-obstáculo e raios de corte considerados para o cálculo das velocidades médias das partículas ao redor dos obstáculos. A linha vermelha representa o Obstáculo, A linha verde representa a primeira camada a se considerar com raio de corte $rc = 0$ (região das partículas que estão em contato com o obstáculo), a linha rosa representa $rc = 1$ e a linha azul representa $rc = 2$.

des de transporte são as mais investigadas atualmente. Sabe-se que é possível retificar o movimento dessas partículas quando estão em um ambiente em que existe uma assimetria intrínseca, como uma rede regular de obstáculos em forma de funil ou semicirculares (DROCCO *et al.*, 2012; WAN *et al.*, 2008b; GALAJDA *et al.*, 2007b). Os sistemas ativos possuem valiosas propriedades intrigantes ditas fora do equilíbrio, incluindo estruturas emergentes com comportamento coletivo que difere dos constituintes individuais. Mais recentemente, tem havido um interesse crescente no estudo do comportamento coletivo da MA em um ambiente desordenado, definido como um sistema no qual a invariância translacional é quebrada de alguma forma (CHEPIZHKO *et al.*, 2013; DOLAI *et al.*, 2018; CHEPIZHKO; PERUANI, 2013; REI-

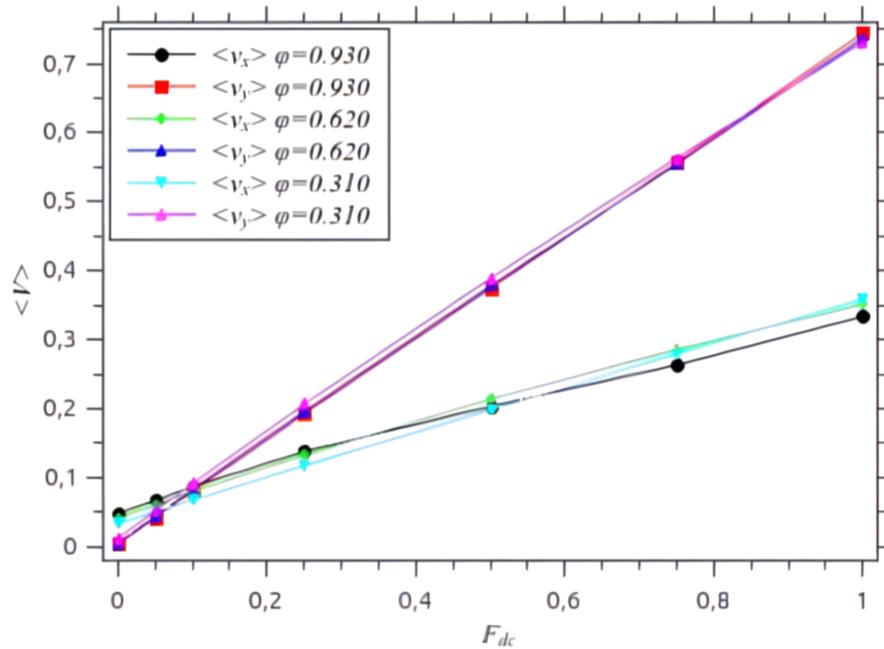
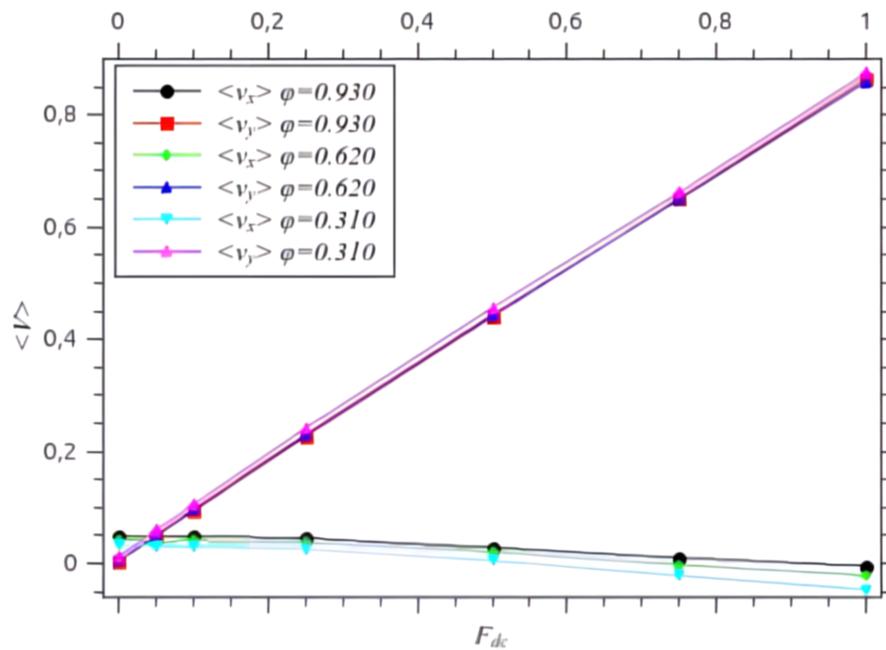
(a) $\theta = 60^\circ$ (b) $\theta = 90^\circ$

Figura 13: Comportamento da velocidade média do sistema de PA sujeitas a uma força adicional externa F_{dc} . θ é o ângulo entre a força e o eixo x . Foram analisadas frações de ocupação $\phi = 0.310; 0.620; 0.930$.

CHHARDT; REICHHARDT, 2014; YLLANES *et al.*, 2017).

Aqui, a invariância é quebrada adicionando diversos obstáculos fixos e posicionados aleatoriamente numa rede $L \times L$ (em contraste, os trabalhos (CHEPIZHKO *et al.*, 2013; DOLAI *et al.*, 2018) também lidam com obstáculos em movimento.) Outras características

interessantes são observadas, desde a existência de um valor ótimo de ruído angular que maximiza o movimento da partícula como uma função da densidade de obstáculos (CHEPIZHKO *et al.*, 2013) dificultando o movimento da partícula (aprisionamento (CHEPIZHKO; PERUANI, 2013), entupimento (REICHHARDT; REICHHARDT, 2014) e a apresentação de uma supressão de aglomeração (MORIN *et al.*, 2017)) até uma relação valiosa entre o tempo médio de busca de um alvo e a desordem (WANG *et al.*, 2017).

No presente trabalho será abordado um problema semelhante, o comportamento coletivo de PA em um ambiente desordenado. Para isso, partimos de uma rede ordenada de obstáculos e introduzimos a desordem, removendo aleatoriamente uma fração deles. O interesse principal deste trabalho é investigar o transporte de PA em uma configuração em que a invariância translacional é quebrada tanto localmente, devido aos obstáculos assimétricos, e globalmente, devido ao arranjo aleatório resultante. Em (POTIGUAR *et al.*, 2014), foi mostrado que as partículas viajam, em média, ao longo da direção do lado curvo para o lado plano dos obstáculos semicirculares (considerando aqui fluxo positivo) quando eles estão dispostos em uma rede regular. A principal característica a se observar é que, para uma baixa desordem, há uma inversão espontânea da corrente, ou seja, partículas tendem a se mover na direção do fluxo negativo sem a presença de campos externos, o que é oposto, por exemplo, ao que fora obtido em (REICHHARDT; REICHHARDT, 2013). A inversão de corrente também foi relatada em (MCDERMOTT *et al.*, 2016) para partículas que se movem em substratos periódicos em altas densidades, e para PA quírais isoladas se movendo em canais periódicos (LI *et al.*, 2014).

Os resultados apresentados aqui são relevantes para o controle de MA, por exemplo, em dispositivos microfluídicos (GALAJDA *et al.*, 2007b), ou usando redes de pinças ópticas (YANG *et al.*, 2017, 2018). Como uma extensão do presente trabalho, a classificação de partículas em um sistema binário pode ser estudada. É interessante investigar como as partículas, por exemplo, com ruídos distintos, respondem às assimetrias locais e globais, como as introduzidas aqui. As partículas de alto ruído têm menos chance de aderirem às superfícies quando comparadas às partículas de baixo ruído, sendo menos afetadas pela assimetria local e tornando possível a separação dos distintos tipos de partículas, que é um problema experimentalmente exigente. Estudos desse tipo já foram realizados usando uma única armadilha em forma de cunha (KUMAR *et al.*, 2019a), e o modelo aqui apresentado fornece um possível novo caminho para separar misturas de partículas com base em suas diferenças de ruído.

O presente capítulo é organizado da seguinte maneira: O modelo utilizado é apre-

sentado na Seção 3.2.2. Os resultados numéricos e discussões são abordados na Seção 3.2.3. As conclusões são dadas na Seção 3.2.4.

3.2.2 Modelo

O modelo do presente trabalho consiste em um sistema bidimensional (2D) de N discos ativos flexíveis em uma caixa $L \times L$, no qual existem semicírculos de diâmetro D dispostos em uma rede quadrada de comprimento de célula unitária D , inicialmente com obstáculos. Os obstáculos são orientados de tal forma que a direção do fluxo positivo é a direção $+x$. Isso significa que os obstáculos vizinhos tocam uns aos outros ao longo de seus diâmetros (eixo y), bloqueando o movimento ao longo do eixo x (ver Fig. 14). Introduzimos a desordem aleatoriamente removendo uma fração f dos obstáculos. Os discos interagem por meio de uma força

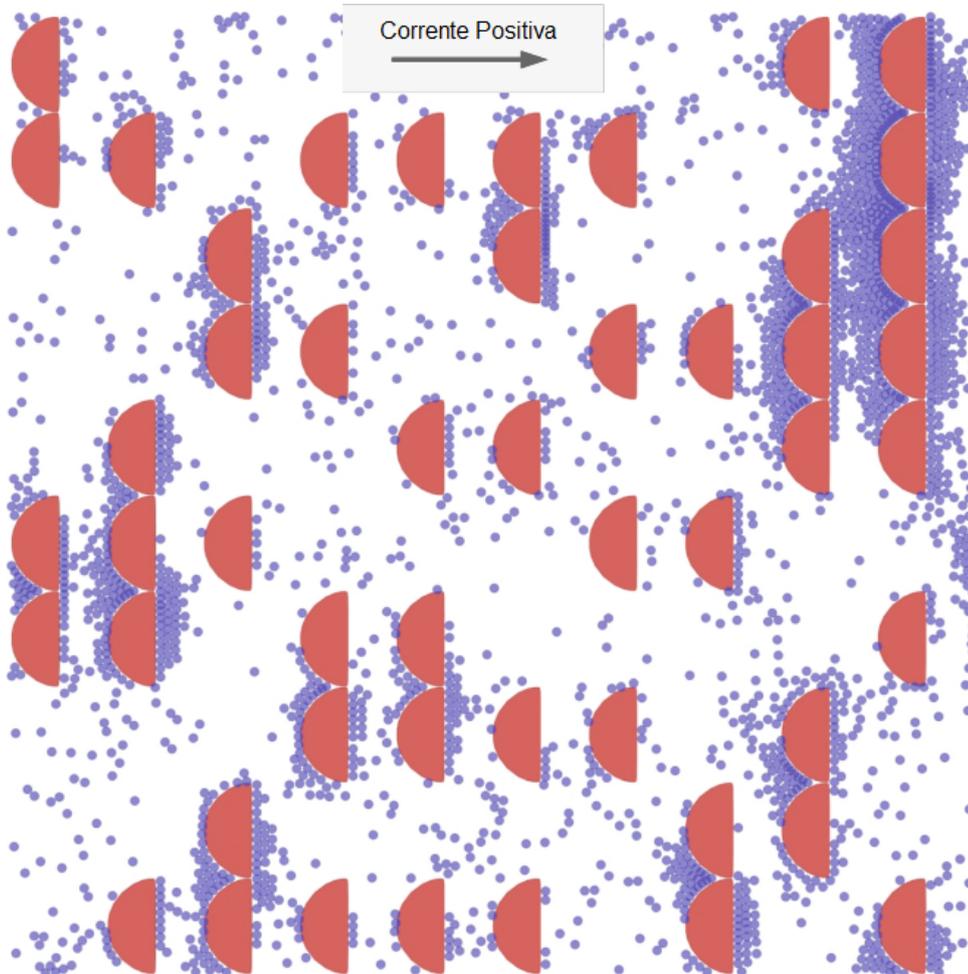


Figura 14: Foto da simulação do sistema para uma fração de ocupação $\Phi = 0,3$ e fração de obstáculos removidos $f = 0,50$. A direção positiva da direção da corrente média de partículas (direção de fluxo positiva $+x$) também é indicada

restauradora linear (do tipo massa mola) com $F_{ij} = \kappa(d_{ij} - r_{ij}) \frac{r_{ij}}{|r_{ij}|}$, para $r_{ij} < d_{ij}$ (caso contrário, $F_{ij} = 0$), com $i \neq j = [1, N]$, $r_{ij} = |r_i - r_j|$ é a distância entre as partículas, e $d_{ij} = (d_i + d_j)/2$ é

o diâmetro médio de contato, para um contato disco-disco temos que $d_{ij} = d$ e para um contato de obstáculo com disco teremos $d_{ij} = \frac{d+D}{2}$ para o contato no lado curvo do obstáculo e $d_{ij} = \frac{d}{2}$ para o lado plano. Para dar uma ideia da ordem de magnitude das dimensões envolvidas em uma realização experimental do atual estudo, podemos fazer um comparativo a estudos experimentais anteriores de hastes como o visto em (KUMAR *et al.*, 2019b) em que o comprimento típico da haste é de cerca de $d = 4,5$ mm, enquanto os braços da armadilha são 10 vezes maiores, 4,5 cm ou também um comparativo para um estudo de misturas de tais hastes e contas (KUMAR *et al.*, 2019b) em que o último têm cerca de 0,8 mm de diâmetro e finalmente no experimento de (GALAJDA *et al.*, 2007b) com bactérias, os braços das armadilhas em forma de cunha tinham 0,027 cm, daí a escala de comprimento típica para essas partículas e obstáculos está entre 1,0 m e 1,0 cm, enquanto D seria entre 10 vezes esses dois valores-limite. Os discos seguem o conjunto usual de equações de Langevin ativas. Para um determinado disco i (FILY; MARCHETTI, 2012) temos:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \mu \vec{F}_i + \vec{v}_i + \vec{\xi}_i(t), \quad (3.11)$$

e

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \eta_i(t), \quad (3.12)$$

onde μ é a motilidade, $\vec{F}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}$, $\vec{v}_i = v_o(\cos \theta_i \hat{i} + \sin \theta_i \hat{j})$ é a velocidade ativa com magnitude v_o , θ_i é a direção aleatória, $\vec{\xi}_i(t)$ é a velocidade térmica aleatória e η_i é a velocidade angular aleatória. Ambas quantidades são consideradas ruído branco Gaussiano com propriedades $\langle \vec{\xi}_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \xi_{i\alpha}(t) \xi_{j\beta}(t') \rangle = (2\xi \Delta t)^{\frac{1}{2}} \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$, $\alpha, \beta = x, y$ e $\langle \eta_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = (2\eta \Delta t)^{\frac{1}{2}} \delta_{ij} \delta(t - t')$, aqui ξ e η são as intensidades dos ruídos, considerando um modelo do tipo atérmico como em (FILY; MARCHETTI, 2012), ou seja, $\xi = 0$. Em todas as simulações, esse modelo considera Condições Periódicas de Contorno (CPC) ao longo das direções x, y . A equação 3.11 é integrada usando o algoritmo estocástico de segunda ordem de Runge-Kutta (HONEYCUTT, 1992). Os valores dos parâmetros do modelo são $d = 1$ e $v_o = 1$, que definem unidades de comprimento e tempo, $D = 10$, $\mu = 1$, $L = 100$, $\kappa = 10$ (para um contato disco-disco) e $\kappa_{obs} = 1000$ (para um contato disco-obstáculo), $f = [0,05 - 1,00]$, com $\Delta f = 0,05$ e $\eta = 0,001$. Define-se portanto uma corrente média líquida de partículas (velocidade média) como:

$$\vec{J} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{u}_i \right\rangle, \quad (3.13)$$

onde \vec{u}_i é o lado direito da equação para \vec{r}_i , os colchetes denotam médias no tempo e distintas realizações, como uma função de f , e $\phi = \frac{N\pi}{4L^2[1-\frac{(1-f)\pi}{8}]}$, em que a fração de área é definida como sendo a razão entre a área ocupada pelas partículas e a área disponível na caixa de simulação (ou seja, a área total $L \times L$ menos a área ocupada pelos obstáculos). Nas simulações, é considerado $\phi = [0.1, 0.9]$ e $\Delta\phi = 0.1$. Cada ponto das figuras 15 e 16 são a média sobre 30 realizações independentes bem como o estado inicial das partículas e os obstáculos.

3.2.3 Resultados e Discussões

Na Fig. 15 podemos ver como a componente x da corrente líquida de partículas, ou seja, J_x como uma função de f para todo ϕ . A componente média perpendicular, J_y , é zero em todos os casos o seu resultado é omitido aqui. Esse resultado indica que a desordem, não desempenha um papel significativo na geração de uma corrente líquida, apenas a forma assimétrica dos obstáculos é importante.

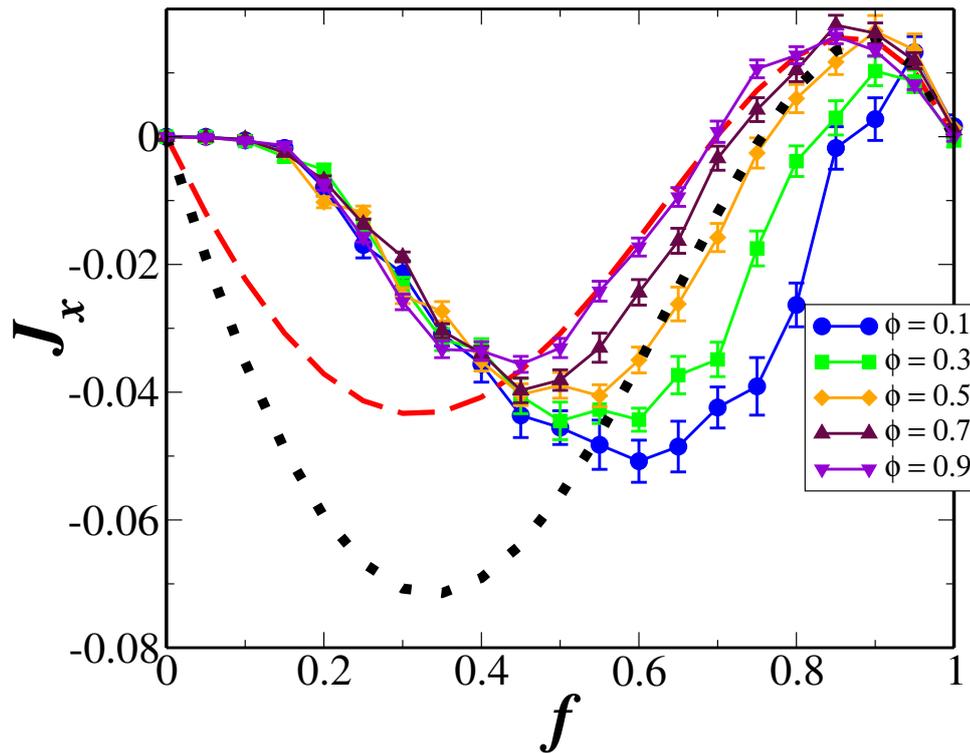


Figura 15: Corrente média líquida de partículas J_x em função de f para várias frações de área ϕ . A linha tracejada vermelha e os pontos pretos são obtidos da Eq. (A.9) para $v' = 1.50 \times 10^{-4}$, $\langle c+ \rangle = 2.00$, $\langle c- \rangle = 1.77$, e $v' = 3.00 \times 10^{-4}$, $\langle c+ \rangle = 1.35$, $\langle c- \rangle = 1.00$, respectivamente.

Como pode ser observado na Fig. 15, a corrente média possui dois regimes: o primeiro, $J_x < 0$, para f baixo e intermediário, indicando uma inversão na corrente líquida de partículas, o segundo regime é observado para f alto, onde a corrente líquida segue a direção do fluxo positivo, como relatado anteriormente (POTIGUAR *et al.*, 2014). O começo do regime

negativo é iniciado por volta de $f \approx 0.10$ para todo ϕ . Essa é uma evidência de um número mínimo de obstáculos a serem removidos em ordem para termos uma corrente não nula, uma vez que, para $f = 0$, não há espaço para as partículas se moverem através da rede (ou seja, com um caminho percolante).

Esse número mínimo, dada a estrutura quadrada da rede, é igual ao número de colunas de obstáculos. Consequentemente, para a configuração do presente modelo, temos L/D colunas e a fração mínima de que precisamos é $f_{min} = D/L = 0.10$, que está perto do valor que observamos nas simulações. Observamos que, para f ligeiramente maior que f_{min} , a corrente não deve ser muito grande, pois a maioria das redes defeituosas não terá um caminho percolado ao longo de x . Esses dois regimes, para correntes negativas e positivas, mudam continuamente, e essa mudança ocorre para uma fração dependente de ϕ , $f^*(\phi)$, que diminui com o aumento de ϕ . Além disso, os valores extremos de J_x em ambos os regimes, o mínimo negativo $J_{min} < 0$ e o máximo positivo J_{max} , também dependem de ϕ : como a fração de área aumenta, $|J_{min}|$ diminui assim como o valor de f em que ocorre, chamado $J_{mín}$. Para J_{max} , ele aumenta com ϕ apesar de não ser tão fortemente quanto a diminuição de $|J_{min}|$, e seu correspondente valor de f , chamado f_{max} , diminui com ϕ , assim como f_{min} .

Para explicar o primeiro regime ($J_x < 0$), voltamos à Figura 14. Vemos que, onde dois obstáculos se tocam, eles formam uma região onde existem, normalmente, algumas partículas: chamamos essas regiões de armadilhas. Tal acúmulo já foi verificado em estudos da força entre dois corpos em um banho de MA (NI *et al.*, 2015; LEITE *et al.*, 2016). Além disso, apenas partículas colidindo com os obstáculos e deslizando ao longo de suas superfícies, um comportamento amplamente relatado para sistemas ativos (BECHINGER *et al.*, 2016; GALAJDA *et al.*, 2007b; POTIGUAR *et al.*, 2014; VOLPE *et al.*, 2011) e também vistos em sistemas de matéria ativa (KAISER *et al.*, 2012; TAKATORI *et al.*, 2014). Do outro lado dos obstáculos existe uma situação semelhante: as partículas atingem os lados planos e deslizam ao longo deles, ou seja, ao longo das direções $\pm y$. Nesse caso, apenas partículas viajando na direção $-x$ chegarão aos lados planos dos obstáculos. Portanto, vemos que apenas aquelas partículas que não estão presas em nenhuma dessas duas estruturas irão contribuir para J_x . Portanto, pode-se inferir que há mais partículas presas entre os obstáculos (região curva) do que partículas presas nas laterais planas. Este desequilíbrio leva a mais partículas se movendo em direção $-x$, produzindo uma corrente líquida negativa.

Diante dessa ideia, pode-se obter uma expressão relacionando J_x a f com base nesse

argumento (ver detalhes no Apêndice A). Da Equação 3.13, podemos escrever a corrente líquida média x como $J_x = \langle J_+ \rangle - \langle J_- \rangle$, onde J_{\pm} são as correntes nas direções $\pm x$. Podemos assumir que tais correntes são dadas pela seguinte expressão:

$$J_x = \langle n_+ \rangle \langle v_+ \rangle - \langle n_- \rangle \langle v_- \rangle, \quad (3.14)$$

onde n_{\pm} são o número de partículas que se movem nas direções $\pm x$ e v_{\pm} suas respectivas velocidades. A equação 3.14 leva em consideração que essas duas quantidades são estatisticamente independentes. A partir dessa hipótese básica, é possível reproduzir, com valores apropriados de nossos parâmetros, o regime atual para $f \geq f_{min}$. Abaixo de f_{min} , esse cálculo falha porque, como argumentado abaixo, a independência estatística entre essas duas quantidades não ocorre. Além disso, assumiu-se que as velocidades médias positivas e negativas têm o mesmo valor. Nesse modelo, foi assumido também dependências razoáveis de f para $\langle v_{\pm} \rangle$, e foi estimado o número de partículas em cada armadilha para as camadas de partículas que se formam em torno de cada obstáculo (como visto na Figura 14), resultando em

$$J_x = v' \left(\frac{L}{D} \right)^2 (1-f)f \left[\pi \frac{D+d}{2d} (f^2 - 1) \langle c_+ \rangle + \frac{D}{d} \langle c_- \rangle \right], \quad (3.15)$$

onde v' é a componente x da velocidade de autopropulsão, $\langle c_+ \rangle$ é o número médio de camadas de partículas em torno do lado curvo, e $\langle c_- \rangle$ é o número médio de camadas de partículas em torno do lado plano de cada obstáculo. Nesse cálculo, é possível estimar o número de partículas por camada no lado curvo para o valor da primeira camada de partículas. Vale a pena notar que a resolução da corrente média em $\pm x$ componentes que levam à Equação 3.15 funcionam bem para η grande, uma vez que a corrente média desaparece, mas isso não é tão óbvio para baixo ruído. Pode-se inferir, de forma razoável, que isso é correto, pelo menos para alguma faixa dos parâmetros aqui considerados, todas as simulações estão em uma baixa intensidade de ruído, $\eta = 0.001$, e da Figura 15, observamos que esse modelo teórico reproduz os dados para a maioria das faixas de f .

Na Figura 15, também é plotado dois exemplos obtidos na Equação 3.15 que reproduz qualitativamente os resultados acima de J_{min} com $\phi = 0.90$ (tracejado em vermelho) e $\phi = 0.50$ (tracejado em preto). Os parâmetros usados para traçar os resultados teóricos são, para a curva vermelha, $v' = 1.50 \times 10^4$, $\langle c_+ \rangle = 2.00$ e $\langle c_- \rangle = -1.77$ e para a curva preta, temos $v' = 3.00 \times 10^4$, $\langle c_+ \rangle = 1.35$ e $\langle c_- \rangle = 1.00$. Podemos observar que, em ambos os casos $\langle c_+ \rangle > \langle c_- \rangle$, o que significa que mais partículas estão presas nos espaços entre os obstáculos

(lado curvo) em comparação com aquelas presas nos lados planos, o que é consistente com o argumento original do modelo. Além disso, faz-se necessário usar uma velocidade média menor para reproduzir a curva para ϕ grande, o que também é consistente com o fato que existem mais partículas no sistema, e isso irá, eventualmente, diminuir o espaço disponível para o movimento, o que pode levar a uma redução dessa velocidade. Finalmente, do fato de que a corrente desaparece em f^* , e usando a Equação 3.15 com $J_x = 0$, restando apenas um único parâmetro livre na equação para J_x , além de v' , que é $\langle c_+ \rangle$ ou $\langle c_- \rangle$. Calculando-se as razões $\frac{\langle c_- \rangle}{\langle c_+ \rangle}$ da Equação 3.15 e dos valores estimados, observa-se que eles não diferem significativamente e geram curvas semelhantes às vistas na Figura 15.

Conforme mencionado anteriormente, a Equação 3.15 não reproduz os resultados numéricos para J_x abaixo de J_{min} . Observa-se que isso é devido o colapso da primeira suposição do modelo, a independência entre $\langle n_{\pm} \rangle$ e $\langle v_{\pm} \rangle$. Pode-se entender essa quebra no modelo como a consequência do pequeno espaço livre disponível para movimento com f baixo: há uma chance maior de ocorrência de grandes aglomerados de obstáculos (ver parte superior direita da Figura 14 para um exemplo de um grupo de cinco obstáculos em sequência); dado que, a maioria das partículas estará em torno de um obstáculo, e não é capaz de se mover livremente, e isso irá tornar a suposição do modelo incorreta. Esta dependência entre $\langle n_{\pm} \rangle$ e $\langle v_{\pm} \rangle$ também explica a relação entre J_x e ϕ para baixo f .

Seguindo o mesmo raciocínio, vemos que o intervalo $J_x > 0$ pode ser visto como consequência da ocorrência mais frequente de pequenos agregados de aglomerados e obstáculos isolados. Isso pode ser verificado gerando várias redes desordenadas distintas para um determinado f e medindo a proporção de agregados de aglomerados.

Em cada uma dessas estruturas, existem menos armadilhas para impedir o movimento ao longo da direção $+x$, como já discutido, mas ainda há o lado plano para bloquear o caminho das partículas que se movem ao longo a direção $-x$. Além disso, para um obstáculo isolado, uma vez que as partículas deslizam ao longo de suas superfícies, não há restrição para movimento ao longo da direção $+x$. Portanto, neste regime de alto f , há mais partículas viajando na direção do fluxo positivo, produzindo uma corrente positiva (ver o Apêndice para outros gráficos da Equação 3.15).

Na Figura 16, observamos a dependência de J_x com ϕ . Pode-se identificar dois regimes para cada dependência: um em que a corrente é independente de ϕ , Figura 16 (a), e o outro em que J_x aumenta com o aumento de ϕ , Figura 16 (b). Para entender esses resultados,

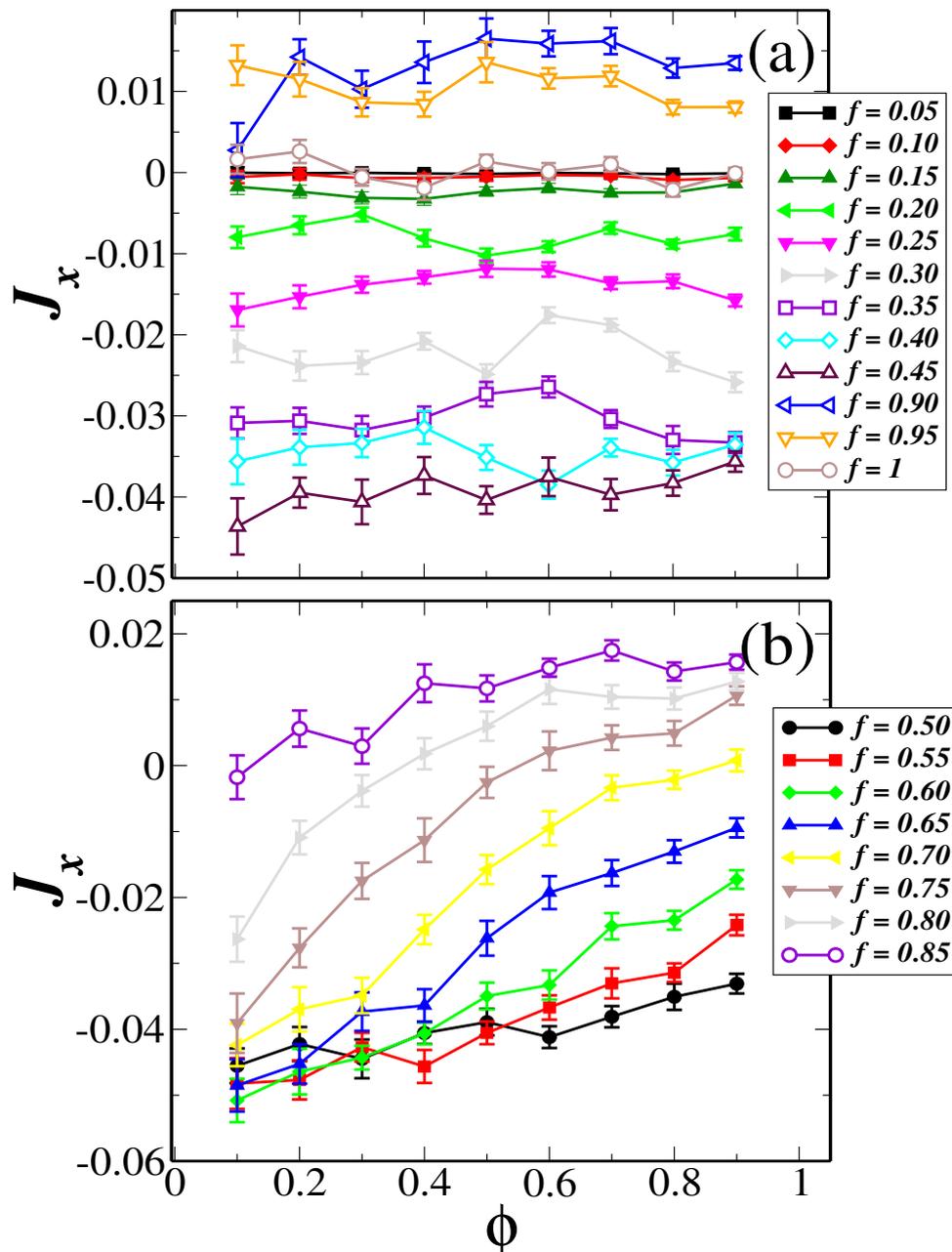


Figura 16: Corrente média líquida de partículas J_x em função da área fração ϕ , para diferentes valores de f nos dois regimes: (a) J_x independente de ϕ e (b) J_x aumentando monotonicamente com ϕ .

pode se observar que o efeito de adicionar mais partículas a este sistema é aumentar o número de partículas que contribuem a J_x , além de diminuir o espaço livre para o movimento delas, uma vez que algumas das partículas ficarão presas nas armadilhas em ambos os lados dos obstáculos. Para f baixo, o espaço livre é muito limitado, como já afirmado. Portanto, um grande número de partículas que contribuem para a corrente será compensado por uma velocidade média menor, e J_x não dependerá de ϕ . Pode-se notar que essa explicação é, essencialmente, a quebra da premissa da independência entre o número de partículas e suas velocidades. A independência de

f em ϕ também é vista em ϕ grande e f intermediário, ou para $f1$. Nesses casos, a explicação anterior não é válida. Mas, para uma desordem forte, haverá uma maioria de obstáculos isolados. Uma vez que uma corrente que não desaparece é determinada pela interação com o lado curvo (POTIGUAR *et al.*, 2014), é razoável supor que tal platô nas curvas da Figura 16 (b) são devido a uma saturação dos obstáculos isolados em sua capacidade de direcionar o movimento das partículas.

Se tivéssemos obstáculos maiores, poderíamos argumentar que tais platôs ocorreriam em ϕ maior. Para f maior, onde a agregação é menor, e há um número crescente de obstáculos isolados, como já mencionado, adicionar mais partículas não irá diminuir sensivelmente o espaço livre, e a velocidade média das partículas não será afetada por um ϕ maior. Nesse caso, antes do tal limite de saturação, a corrente aumentará com o número de partículas, ou seja, aumentará com ϕ .

Variando a forma do obstáculo afim de investigar como as simetrias locais distintas afetam os resultados para a velocidade J_x : Foram utilizados obstáculos construídos em forma de cunhas cujos lados são os de um quadrado inscrito nos semicírculos, e cuja diagonal coincide com o diâmetro dos obstáculos (isso implica em um ângulo de abertura de 90°) (Figura 17).

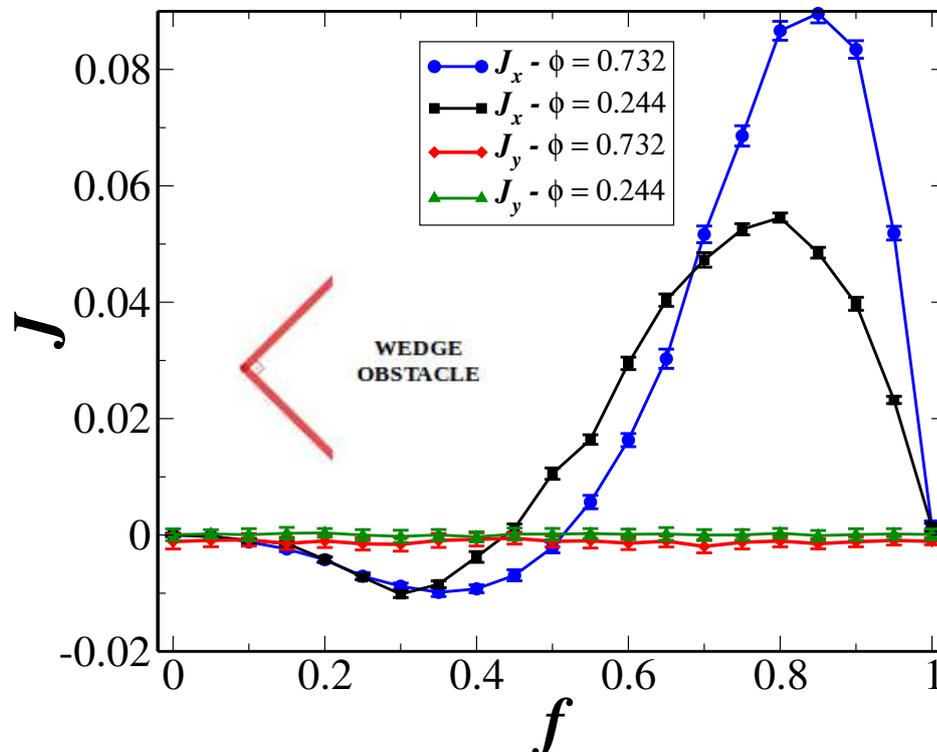


Figura 17: Componentes x e y da corrente de partícula média, J_x e J_y , em função de f para valores distintos da fração de área ϕ . Considera-se as cunhas como obstáculos. O ângulo de abertura das cunhas é de 90° .

Também foi utilizado obstáculos em forma de semicírculo de diâmetro $D = 9$, de modo que foi investigado se as armadilhas entre os obstáculos são realmente as responsáveis pela inversão de corrente vista na Figura 15. Para essa rede desordenada de semicírculos, permitindo assim espaço horizontal entre dois obstáculos, não há inversão espontânea da corrente, só se observa apenas $J_x > 0$. Utilizou-se também uma rede de obstáculos semicirculares com diâmetro $D = 9$ trocando a fração f dos semicirculos por obstáculos circulares, ou seja, diminuindo a quebra de simetria deles na rede observando assim o comportamento da corrente J_x , mesmo assim só se observa $J_x > 0$. Esses resultados são apresentados na Figura 18. Para

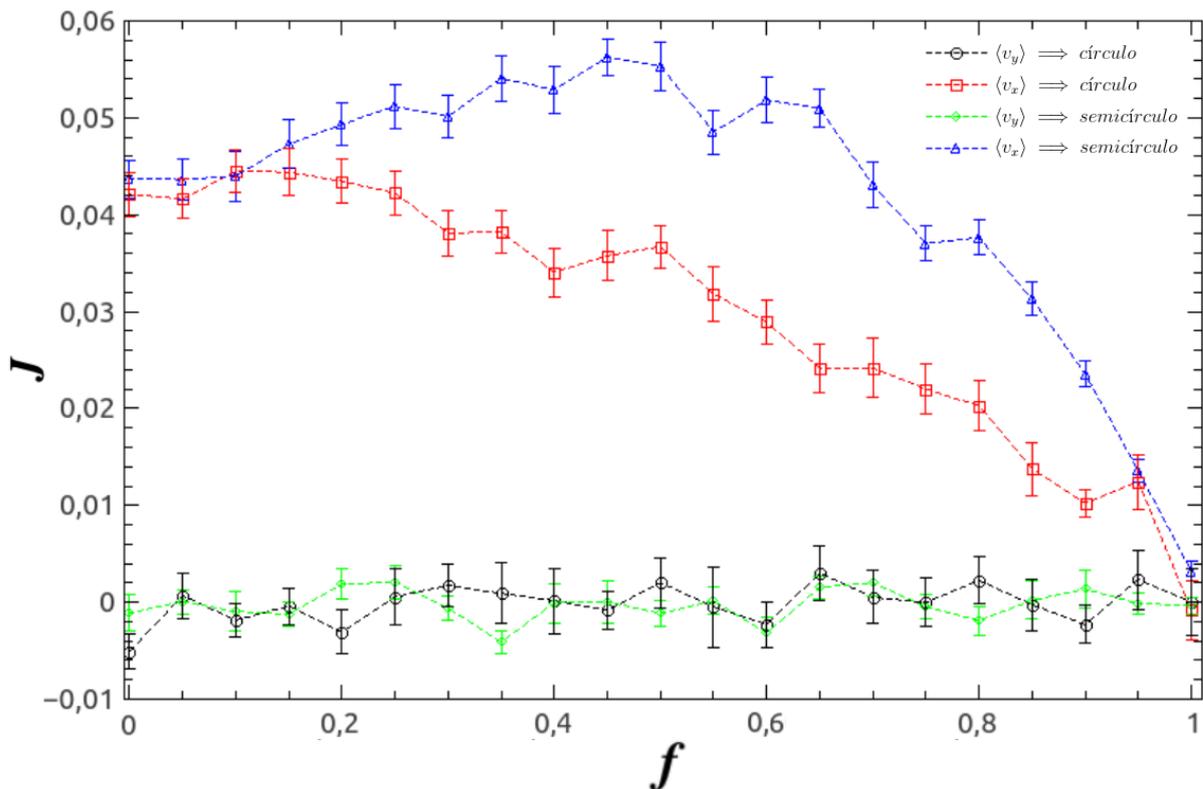


Figura 18: Componentes x e y da corrente de partícula média, J_x e J_y , em função de f para um sistema com rede desordenadas de obstáculos semicirculares de diâmetro $D = 9$ e um sistema misto de obstáculos inicialmente ($f = 0$) todos semicirculares e substituídos por obstáculos circulares (com o aumento de f).

uma rede desordenada de obstáculos apenas circulares, não há corrente líquida em qualquer caso, mesmo adicionando um campo externo, a corrente será apenas ao longo deste campo. Novamente, a simetria local é o ingrediente chave para retificar o movimento de partículas. Isso claramente valida a explicação que esse fenômeno é devido ao desequilíbrio de partículas viajando em ambas as direções devido às armadilhas fornecidas pelo obstáculos.

Para uma rede desordenada de cunhas, existe o inversão, mas a magnitude da corrente invertida (negativa) é menor do que o relatado para os semicírculos (ver Figura 17), en-

quanto que as correntes positivas são maiores do que as da Figura 15. Além disso, as correntes negativas mínimas são bastante insensíveis a variações na densidade, enquanto que as correntes positivas máximas são maiores para densidades maiores, um fato não visto na Figura 17. A razão é que o lado côncavo das cunhas prende mais partículas do que o lado plano dos semicírculos, reduzindo a corrente oposta à direção do fluxo positivo. Por outro lado, os lados convexos dos obstáculos em cunha e semicírculo apresentam contribuição semelhante para a corrente de partículas ao longo do direção de fluxo positiva. Observa-se que o ângulo de abertura das cunhas (90°) favorece o aprisionamento (KAISER *et al.*, 2012).

3.2.4 Considerações finais

Foi investigado a corrente líquida média J (velocidade média) de PA interagindo com uma rede quadrada desordenada de obstáculos em forma de semicírculos. O diâmetro dos obstáculos tinha o mesmo tamanho da rede de células unitárias, formando armadilhas entre eles. A desordem fora introduzida aleatoriamente removendo uma fração f dos obstáculos. Observa-se que a corrente líquida ao longo da direção de fluxo positiva ($+x$), ou seja, a direção ao longo da normal para os lados planos dos obstáculos, com fração de área constante, para f baixo e moderado, apresentou uma inversão, ou seja, partículas viajam no fluxo negativo de direção, enquanto que para f alto o suficiente a corrente líquida fora positiva. Argumentou-se que tal fenômeno é resultado de um desequilíbrio de partículas que ficam presas nos espaços entre os obstáculos ou ficam preso em seu lado plano.

Fora apresentado um cálculo teórico que reproduz os dados razoavelmente bem para f acima do valor para o qual a corrente tem um negativo mínimo, e foi baseado no pressuposto de estatísticas de independência entre o número de partículas e as velocidades médias. Para um f constante, a dependência de J_x em ϕ apresentou dois regimes: (i) J_x e ϕ sendo parâmetros independentes e (ii) a corrente J_x cresce com a fração de área ϕ . Inferiu-se que no primeiro regime, ao adicionar mais partículas (espaço livre menor) implicou em mais partículas contribuindo para a corrente, suas velocidades médias diminuíram e ambos os efeitos se compensaram fazendo com que corrente não mudasse com ϕ .

No segundo regime, essa relação não ocorreu porque havia mais espaço livre do que no primeiro regime, e J_x crescera com o número de partículas. Ou seja, no primeiro caso não houve independência estatística entre o número de partículas e suas velocidades, enquanto no segundo, houve uma independência.

Correntes positivas e negativas, obtidas e caracterizadas em uma rede de semicírculos,

também foram observadas em uma rede de obstáculos em forma de cunhas, nesse caso, a corrente negativa foi menor que a positiva em magnitude, que foi oposto ao comportamento da corrente na rede de obstáculos convexos (semicírculos), constatamos que isso se deve ao fato e uma maior capacidade das cunhas em reter partículas em seu lado côncavo.

3.3 Estudo sistemático no transporte de matéria ativa (Barras com Autopropulsão - BA) em redes de obstáculos assimétricos ordenados

Nesta seção, apresentamos os resultados de um modelo que permite estudar a influência da forma da partícula ativa no movimento ao longo do substrato anteriormente estudado. As partículas são consideradas na forma de Barras Ativas (BA), rígidas. No presente modelo, as barras rígidas são formadas pela junção de discos, de modo a representar um objeto ativo possuindo, portanto, um comprimento (comprimento total da junção das partículas) e largura (largura das partículas). Faremos uma sistemática de estudo semelhante ao que fora apresentado na seção 3.1. Analizamos também a percolação das barras quer dizer, retirando aleatoriamente os obstáculos (inicialmente sem abertura entre eles na rede) até observar mudanças na velocidade líquida do sistema como também estudado na seção 3.2. Por fim, devido ao surgimento de um fenômeno de hiperaglomeração de barras ativas em obstáculos, em algumas simulações, mesmo em densidades baixas e médias de partículas (diferentemente da hiperaglomeração de partículas obtida para densidades altas consideradas como uma transição de fase dinâmica em (FILY; MARCHETTI, 2012)), sendo aqui induzido pela geometria do substrato e da partícula. Estudamos a probabilidade de ocorrência de formação de coágulos (acúmulo de barras em uma região específica ao redor e entre obstáculos) usando um critério dentro de uma janela específica da simulação em cada realização.

3.3.1 Modelo

Nosso modelo é baseado em um sistema $2D$ de (BA) cuja dinâmica de movimento é dada por uma equação de Langevin, como veremos a seguir. As BA são formadas por N_A partículas de diâmetro σ coladas (quer dizer, juntas com distância fixa nula e com eixo fixo passando pelos N_A centros das mesmas, ou seja, as barras não entortam sendo sempre em linha ver Fig. 19). As BA são dispostas em meio a uma rede ordenada de N_o obstáculos em forma de semicírculos de raio D_o fixos. A razão de aspecto l das BA pode ser definida como:

$$l = \frac{N_A}{\sigma}, \quad (3.16)$$

onde em nossas simulações utilizamos $\sigma = 1$, ou seja, $l = N_A$. As BA interagem entre si por meio de uma força restauradora linear (do tipo massa mola) com

As equações do movimento para a i -ésima BA são dadas por:

$$M_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i - \Gamma_T \cdot \mathbf{v}_i + \xi_i^T(t), \quad (3.17)$$

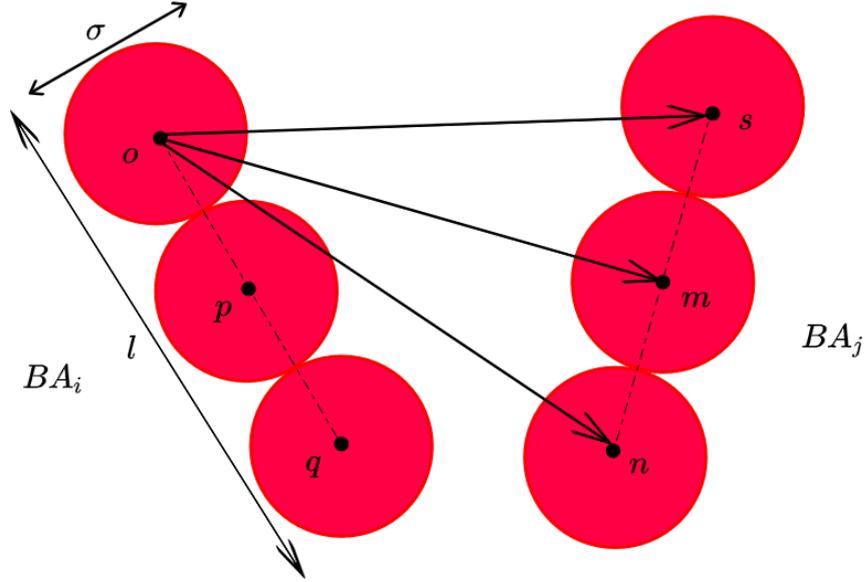


Figura 19: Duas BA que podem interagir via força restauradora (massa-mola) caso entrem em contato, a barra BA_i possui partículas $o; p; q$ e a barra BA_j as partículas s, m, n . As BA possuem diâmetro $\sigma = 1$, $N_A = 3$ e comprimento $l = 3$ e $\sigma = 3$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \mathbf{N}_i - \Gamma_R \omega_i + \xi_i^R(t), \quad (3.18)$$

onde $\mathbf{v}_i = d\mathbf{R}_i/dt$, ω_i é a velocidade angular, \mathbf{F}_i e \mathbf{N}_i são a força total e o torque atuando na barra i , respectivamente, enquanto Γ_T e Γ_R são o tensor translacional e o parâmetro de fricção rotacional. Para entes do tipo BA o tensor translacional é composto pelas componentes paralela (ζ_{\parallel}) e perpendicular (ζ_{\perp}) com respeito ao eixo da BA, que são dadas por:

$$\Gamma_T = \zeta_{\parallel} \hat{e}_{\parallel} + \zeta_{\perp} \hat{e}_{\perp} \quad (3.19)$$

$$\zeta_{\parallel} = \frac{2\pi\eta_0 l \sigma}{\ln(l) + \delta_{\parallel}}, \quad \zeta_{\perp} = \frac{4\pi\eta_0 l \sigma}{\ln(l) + \delta_{\perp}}, \quad (3.20)$$

e para rotação:

$$\zeta_r = \frac{\pi\eta_0 (l\sigma)^3}{3\ln(l) + \delta_r}, \quad (3.21)$$

onde η_0 é a viscosidade do solvente, δ_{\parallel} , δ_{\perp} and δ_r são fatores de correção para BA pequenas. ξ_i^T e ξ_i^R são a força e torque Gaussianos aleatórios, respectivamente, onde nesse estudo nós consideramos $\xi_i^T = 0$ e ξ_i^R obedecem as seguintes condições para ruído branco: $\langle \xi_i^R(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_i^R(t) \cdot \xi_j^R(t') \rangle = 2\gamma_0 \delta_{ij} \delta(t - t')$, onde γ_0 é a intensidade do ruído. No regime de superamortecimento, as equações do movimento resultam em:

$$v_{i\parallel} = \frac{F_{\parallel}}{\zeta_{\parallel}} + \frac{f_0}{\zeta_{\parallel}}, \quad v_{i\perp} = \frac{F_{\perp}}{\zeta_{\perp}}, \quad \omega_i = \frac{N}{\zeta_r} + \xi_i^R(t), \quad (3.22)$$

onde F_{\parallel} , F_{\perp} são as componentes paralela e a perpendicular da força de contato líquida respec-

tivamente, que é regida por uma lei de força de mola linear $\mathbf{F}_{ij} = \kappa(d_{ij} - r_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij}$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ é a distância entre as partículas constituintes de cada BA diferente (ver Fig. 19), as partículas constituintes das Barras BA_i interagem com as da barra BA_j e $d_{ij} = \sigma$ para a interação entre partículas das barras e $d_{ij} = (\sigma + D_o)/2$ para a interação entre barras e obstáculos de diâmetro D_o para contato com o lado curvo dos mesmos e $d_{ij} = \sigma/2$ para contato com o lado plano. $f_0/\zeta_{\parallel} = v_0$ é a velocidade de autopropulsão das BA. As unidades de espaço e tempo são σ e $\eta_0\sigma^2/f_0$ respectivamente, onde $\eta_0 = 1$.

Na Eq. (3.19), $\hat{e}_{\parallel} = \hat{s}$ e $\hat{e}_{\perp} = \hat{s} \times \hat{k}$, onde \hat{s} é o vetor unitário ao longo da barra, dada sua orientação.

3.3.2 Resultados e Discussões

Na Fig. 19 a seguir, observamos o comportamento da velocidade média $\langle V_x \rangle$ do sistema de BA em meio a uma rede regular quadrada de $N_o = 25$ obstáculos (semicírculos) em função do ruído angular, (que foi considerado no intervalo de 0.0001 a 1000). Consideramos ainda três diferentes valores da fração de ocupação das BA, ou seja $\phi = 0.1; 0.2; 0.3$, e com barras de tamanho $l = 3$ (que correspondem a 3 contas fixas de diâmetro $d = 1$ cada) para obstáculos de tamanho (diâmetro) $D_o = 1, 5, 10$. Semelhante ao comportamento visto para as

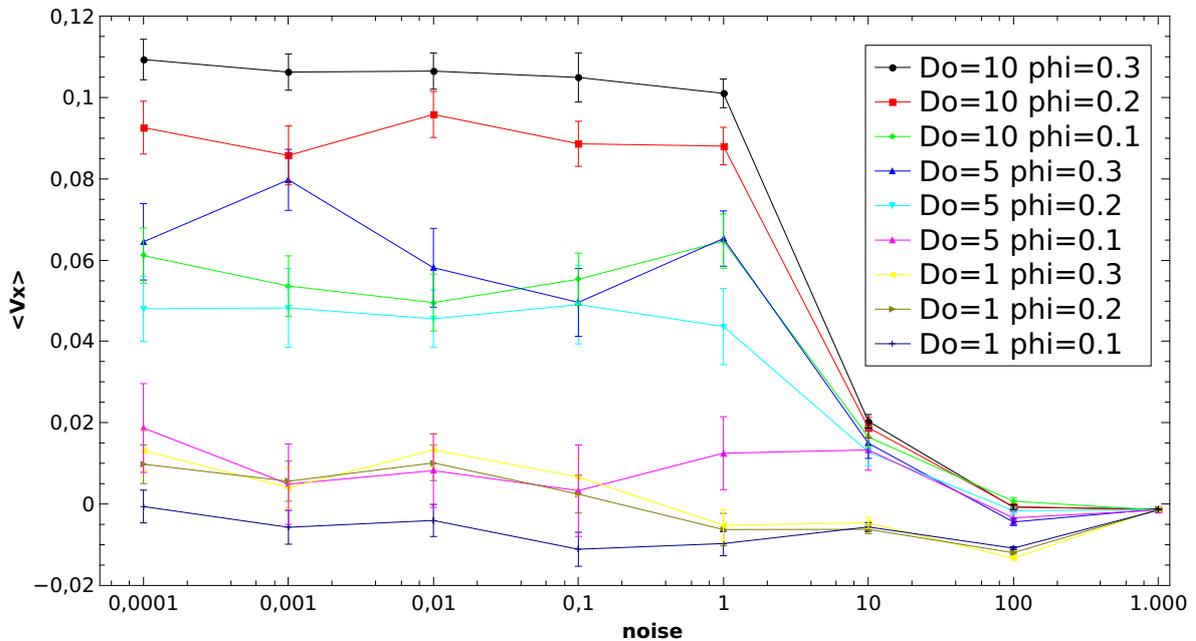


Figura 20: Comportamento da velocidade média $\langle v_x \rangle$ em relação a intensidade do ruído $noise$ para uma rede ordenada de $N_o = 25$ obstáculos semicirculares com diâmetros $D_o = 1; 5; 10$ com três frações de ocupação analisadas, $\phi = 0.1, 0.2, 0.3$ e ruído ($noise$) variando de 0.0001 a 1.000

PA, as BA também apresentam velocidade média não nula ao longo da direção x da caixa

de simulação ($\langle v_x \rangle$), no caso dos obstáculos com tamanhos $D_o = 5$ e $D_o = 10$, confirmando, portanto, a indução do movimento na direção que ocorre a quebra de simetria do substrato decorado. O valor de ruído que maximiza a contribuição de $\langle v_x \rangle$ é por volta de 0.0001, entre os valores analisados. Estamos omitindo aqui as velocidades $\langle v_y \rangle$, uma vez que em todos os casos, após considerar a média de todas as realizações com condições iniciais distintas, a velocidade $\langle v_y \rangle$ fora a zero para todos os casos aqui estudados.

Na investigação individual de algumas realizações, observamos um fenômeno adverso em relação ao que nos deparamos na seção 3.2, a formação de regiões em hiperaglomeração de partículas, que, daqui em diante, chamaremos de coágulo. Na Fig. 21, apresentamos uma fotografia obtida de nossas simulações que ilustra um desses coágulos. Na tentativa de enten-

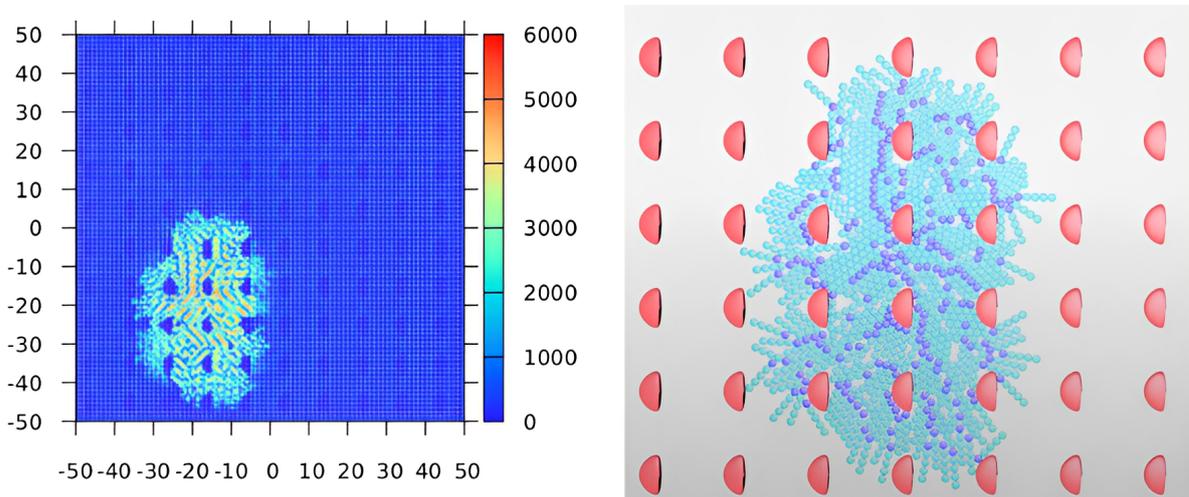


Figura 21: Região de hiperaglomeração de BA denominada de coágulo. À esquerda temos o mapa de ocupação média das BA na caixa de simulação durante uma realização específica, à direita temos um zoom com obstáculos em vermelho e as BA em azul claro (corpo) e azul escuro (cabeça) diferenciados assim para indicar a tendência de autopropulsão (direção da velocidade). Aqui nosso sistema possui $N_o = 100$ obstáculos com uma fração de ocupação da ordem de $\phi = 0.3$ e ruído igual a 0.0001

der sobre quais circunstâncias a formação de coágulos ocorre, primeiramente, vamos definir mais precisamente como identificamos um coágulo em nosso sistema, a saber: um coágulo no sistema de BA será considerado uma, ou várias regiões na caixa de simulação, onde há a hiperaglomeração e captura de BA, após um intervalo de passos de simulação t_{co} fixo. Para a medição de hiperaglomerações, vamos calcular a probabilidade de surgimento de coágulos utilizando o cálculo do centro de massa médio do sistema, verificando em cada realização, se o centro de massa do sistema está localizado, em média, em torno de um ponto fixo, quer dizer, se ele pouco se desloca durante a janela de medição dessas estruturas. O leitor deve-se pergun-

tar o porquê da utilização do centro de massa como indicativo e não a velocidade média. A explicação para isso é que a velocidade média do nosso sistema $\langle v_x \rangle$, em uma dada realização, pode ser nula, na média, durante toda a realização, porém, nesse caso, não saberíamos se esta velocidade é zero devido ao coágulo ou devido ao comportamento coletivo e influência dos obstáculos. Podemos também, por exemplo, ter uma fração próxima a metade das barras viajando em direção oposta em relação a outra metade, de modo que a velocidade média se anule. Portanto, a escolha do centro de massa torna-se uma medida sensível para a detecção de um coágulo e também nos permite estimar a localizar a concentração maior de partículas na caixa de simulação.

Para calcular a localização do centro de massa das barras ativas, realizamos as medidas em 100 realizações diferentes, fixando a fração de ocupação em $\phi = 0.1$, tamanho das barras em $l = 5$, tamanho dos obstáculos em $D_o = 5$, ruído em 0.0001, abertura entre os obstáculos variando de $d = 0$ até $d = 5.0$, $t_{co} = 90$ por cento do tempo total de simulação, ou seja, nossa janela de medições de coágulos será nos últimos 10 por cento de tempo de simulação e margem de variação do centro de massa $a = 0.2$ (variação teste para verificar o quão o centro de massa final se deslocou em relação a média na janela de medição).

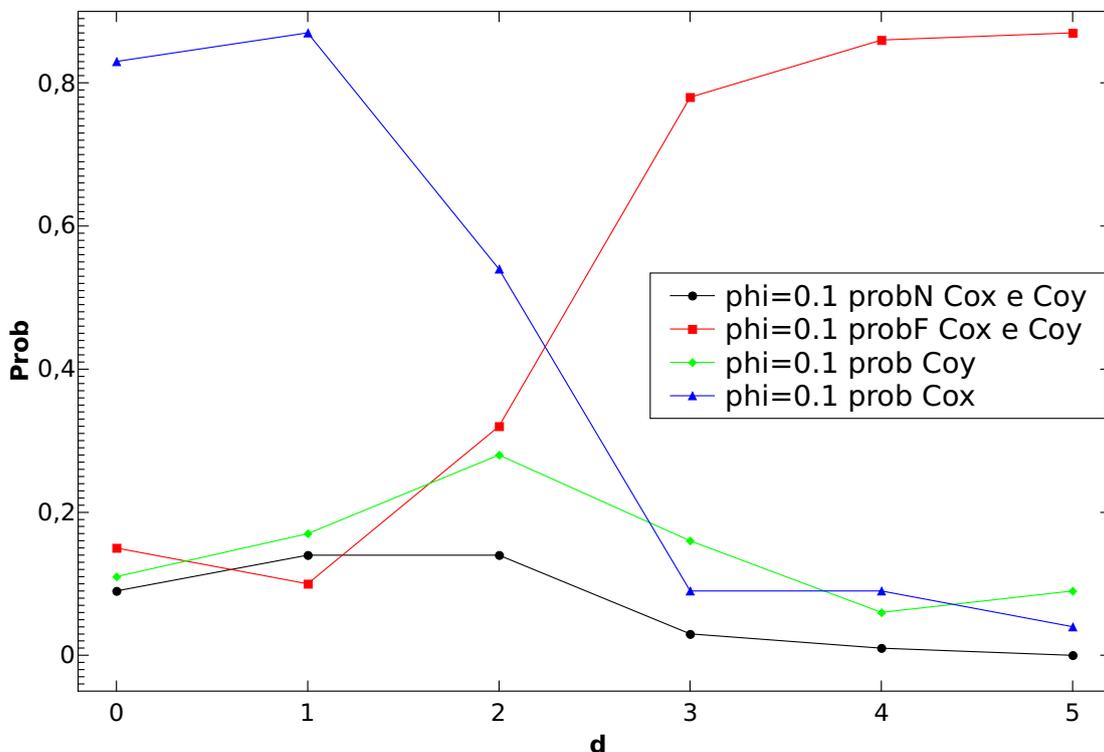


Figura 22: Probabilidades probN; probF; prob Cox e prob Coy para uma rede de 100 obstáculos, fração de ocupação $\phi = 0.1$ e distância entre obstáculos variando de $d = 0$ até $d = 5$. O tamanho de cada BA é $l = 5$. O diâmetro dos obstáculos é $D_o = 5$.

Estamos interessados em investigar a formação de coágulos em uma janela temporal específica dentro da simulação, quer dizer, portanto, que não consideraremos o aparecimento e desaparecimento de coágulos fora da janela, fixamos esse espaço temporal afim de obter uma predição de formação em uma janela de tempo específica que se encontra no fim de cada simulação (execução). Na Fig. 22 apresentamos o resultado do cálculo das probabilidades de formação de coágulos: i) probN Cox e Coy : é a probabilidade de encontrarmos o sistema coagulado tanto na direção x como na direção y ; ii) probF Cox e Cox : é a probabilidade de encontrarmos o sistema livre, quer dizer, sem coágulo em nenhuma direção; iii) prob Cox : é a probabilidade de encontrarmos o centro de massa fixo ao longo de x (CM x), mas ainda tendo partículas se movimentando em y ; iv) prob Coy : é a probabilidade de encontrarmos centro de massa fixo ao longo de y (CM y), mas ainda tendo partículas se movimentando em x .

Podemos perceber que a probabilidade máxima de encontrar coágulos no final das simulações (que perduram pelo menos durante os últimos 10 por cento de tempo de simulação) é por volta de 14 por cento para uma abertura entre obstáculos $d = 1$ e $d = 2$. Em análise, percebemos que a probabilidade de formação de coágulos probN vai a zero quando a abertura entre os obstáculos aumenta, isso está relacionado a uma maior facilidade de passagem das BA entre esses espaços. Nossos resultados são todos com base em uma média dentre 100 realizações, com condições iniciais diferentes, tempo de simulação total por volta de 11 milhões de passos e uma fração de ocupação fixa em $\text{phi} = 0.1$ ¹ e ruído igual a 0.0001.

Na Fig. 23, podemos observar o comportamento da velocidade média $\langle V_x \rangle$ do sistema de BA estudando a percolação, quer dizer, semelhante ao que estudamos na seção 3.2. Estudamos uma rede quadrada de 100 obstáculos de tamanho $D_o = 5$ com espaçamento ($d = 0$) entre eles e começamos a retirar aleatoriamente um percentual de obstáculos que varia de 0 a 100 por cento. Consideramos nesse resultado três frações de ocupação de BA: $\text{phi} = 0.1, 0.2, 0.3$ e escolhemos o ruído 0.0001 que maximiza o valor da corrente líquida de BA na direção x (ver Fig. 20) e o tamanho da BA $l = 3$.

As curvas do gráfico da Fig. 23, portanto, sugerem um comportamento similar

¹O valor escolhido da fração de ocupação foi $\text{phi} = 0.1$, ou seja, para um sistema de BA com densidade baixa, sugerindo que a formação de coágulos aqui, a priori, não está relacionado aos resultados obtidos de hiperaglomeração e transição de fase dinâmica visto em (FILY; MARCHETTI, 2012) (uma vez que, a transição obtida nesse sistema estava diretamente ligada ao comportamento coletivo visto para densidades elevadas de entes ativos). Estamos interessados em estudar a probabilidade de ocorrência desses coágulos devido as dimensões geométricas escolhidas de tamanho dos obstáculos, tamanho da barra e abertura entre os obstáculos, ou seja, no nosso sistema, estamos procurando a formação de regiões de hiperaglomeração como uma forma de captura de BA no substrato escolhido, onde o centro de massa passa ser fixo na janela temporal considerada.

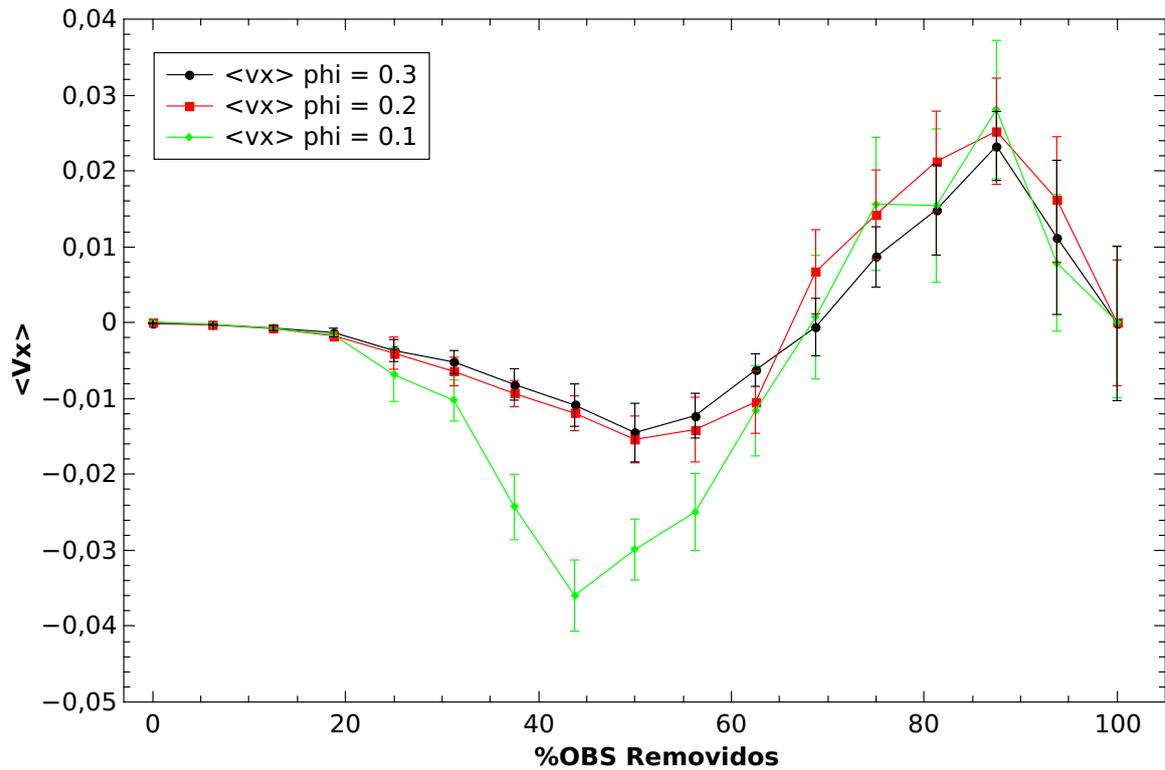


Figura 23: Velocidade média $\langle V_x \rangle$ do sistema no estudo da percolação na direção horizontal da caixa de simulação com 100 obstáculos, inicialmente com distância $d = 0$ entre eles e retirando-os aleatoriamente com um percentual de obstáculos removidos variando de 0 a 100 por cento. Utilizamos frações de ocupação $\phi = 0.1, 0.2, 0.3$ e ruído igual a 0.0001.

ao obtido na percolação de PA na seção 3.2, com diferença apenas nas amplitudes mínima e máxima obtidas. Nesses resultados consideramos uma média de 30 realizações diferentes para cada ponto. Sendo assim, podemos concluir que nosso sistema de BA possui comportamento bem semelhante ao que fora observado na seção 3.2 com as PA, mostrando que, apesar da geometria da nossa célula ativa ter sido modificada, sua velocidade média $\langle V_x \rangle$ ainda segue uma tendência similar as das PA. Vemos também no gráfico da Fig. 23 que as curvas preta e vermelha (que correspondem à velocidade $\langle V_x \rangle$ com $\phi = 0.3$ e $\phi = 0.2$) são bem próximas, quase que sobrepostas, principalmente na região entre 0 por cento e 50 por cento dos obstáculos removidos aleatoriamente, já a curva verde (que correspondem à velocidade $\langle V_x \rangle$ com $\phi = 0.1$) se distancia das demais nessa região, isso sugere um comportamento diferente do que fora visto para os discos na seção 3.2, quer dizer, para baixa densidade ($\phi = 0.1$), o sistema de BA tende a obter valores de $\langle V_x \rangle$ mais negativos.

3.3.3 Considerações Finais

Foi realizado um estudo sistemático da velocidade média $\langle V_x \rangle$ de BA interagindo com uma rede quadrada desordenada de obstáculos em forma de semicírculos. Os valores dos diâmetro dos obstáculos estudados foram $D_o = 1, 5, 10$. Os valores do ruído estavam no intervalo entre 0.0001 e 1000. Observamos, portanto, uma velocidade $\langle V_x \rangle$ positiva para obstáculos de tamanho $D_o = 5$ e $D_o = 10$, sugerindo o mesmo efeito encontrado nas PA na seção 3.1. Calculamos também a probabilidade de ocorrência da formação de coágulos (regiões de hiperaglomeração de BA) no substrato estudado, e vimos que, para obstáculos de tamanho $D_o = 5$, e a BA de tamanho $l = 5$, a probabilidade de ocorrência de coágulos é um valor próximo de 14 por cento.

Por fim, estudamos a percolação do sistema de BA com obstáculos sendo do mesmo tamanho da rede de células unitárias, formando armadilhas entre eles (espaçamento entre obstáculos $d = 0$). A desordem fora introduzida aleatoriamente removendo uma porcentagem progressiva dos obstáculos, onde observamos que $\langle V_x \rangle$ apresentou uma inversão, ou seja, mais BA viajam no fluxo negativo de direção para um certo valor de porcentagem de obstáculos removidos, e observamos fluxo positivo de direção para um percentual maior de obstáculos removidos, efeito similar ao observado na seção 3.2 para a percolação de PA.

Temos como perspectiva futura realizar mais estudos detalhados do sistema de BA, tanto na formação de coágulos, como também no estudo da percolação do sistema em meio a retirada aleatória dos obstáculos, aumentando, por exemplo, a fração de ocupação do sistema para o cálculo das probabilidades de ocorrência de coágulos, desenvolvendo também outros métodos de detecção e predição, e por fim, fazer um estudo analítico das curvas de inversão da Fig. 23, semelhante ao que fizemos na seção 3.2.

4 CONCLUSÕES E OBSERVAÇÕES FINAIS

Nessa Tese de Doutorado foi feito um estudo computacional de simulação física de SA, mais precisamente, um estudo sistemático envolvendo PA e BA através de substratos assimétricos em 2D (obstáculos semicirculares). Para isso, na seção 1 realizamos uma introdução com um estudo detalhado sobre os conceitos, propriedades e trabalhos mais importantes acerca dos sistemas fora do equilíbrio aqui em questão. No mesmo capítulo, estudamos também os principais modelos desenvolvidos correlatos ao nosso trabalho.

Na seção 2 apresentamos os métodos numéricos aqui utilizados e as propriedades medidas. Vimos que o método de dinâmica molecular é conveniente para nosso estudo de MA onde também utilizamos a abordagem angular do movimento browniano para construir nossos modelos específicos utilizados nas seções 3.1, 3.2 e 3.3.

Em sequência, na seção 3.1 apresentamos os resultados obtidos no estudo sistemático do transporte induzido de PA. Nesse trabalho nos apropriamos das principais quantidades que influenciam no controle do fluxo de partículas na direção da quebra da simetria dos obstáculos. Pudemos concluir a dependência do valor absoluto de v_x com relação ao tamanho dos obstáculos, frações de ocupação, espaçamento entre os obstáculos e ruído angular. Chegamos a conclusão que, para valores bem escolhidos, podemos induzir um movimento líquido de do SA com valores absolutos substanciais em relação a velocidade de autopropulsão de cada indivíduo. Finalmente, na seção 3.1, estudamos a influência de uma força adicional (*drive* externo) na v_x e concluimos a sua dominância em relação à força aleatória de autopropulsão. Vimos também que partículas mais próximas aos obstáculos tendem a contribuir mais com a média de v_x .

Em um trabalho mais aprofundado (seção 3.2), pudemos desenvolver previsões ao movimento percolado de PA sob a influência de obstáculos semicirculares, inicialmente sem espaçamento, e, em seguida, retirando-os, de forma aleatória, até sua ausência total na caixa de simulação. Nesse sentido, pudemos descrever exatamente a intensidade das correntes de velocidade J_x num sistema percolado, e, através da análise do comportamento de inversão do gráfico $J_x \times f$ (fração percentual de obstáculos removidos) pudemos desenvolver um estudo analítico das curvas, propondo uma equação de mesmo aspecto e comportamento.

Estudamos também o mesmo efeito com obstáculos em formato de cunha, afim de

estudar o comportamento de J_x , aqui, verificamos também um efeito de inversão semelhante ao da velocidade líquida no sistema de obstáculos semicirculares, com diferença na velocidade máxima e mínima absoluta devido ao poder de captura e aprisionamento de partículas pelas cunhas ser maior que o dos obstáculos em semicírculos. Por fim, nesse trabalho, ao invés de retirar obstáculos em semicírculos, trocamos obstáculos assimétricos (semicírculos) por obstáculos simétricos (círculos) afim de estudar o efeito da simetria dos obstáculos separados por uma distância $d = 2$ e pudemos reafirmar a positividade e maior valor absoluto de contribuição para J_x na presença de mais obstáculos assimétricos que os de aspecto circular.

Na tentativa, portanto, em descrever um modelo geométrico mais real, desenvolvemos um modelo de BA, e, na seção 3.3, fizemos um estudo sistemático semelhante ao que fora feito na seção 3.1 e 3.2 para as PA. Aqui, confirmamos o mesmo comportamento e dependência de v_x com o tamanho dos obstáculos, bem como as frações de ocupação, e vimos, dentro de certas circunstâncias, que é possível induzir uma velocidade líquida na direção da quebra da simetria dos obstáculos. Fizemos também o estudo da percolação das BA em meio a obstáculos sem espaçamento, retirando-os aleatoriamente na rede e pudemos constatar um comportamento semelhante na curva de $\langle V_x \rangle$ em relação ao que fora encontrado para a percolação de PA na seção 3.2, o efeito de inversão também fora presente, porém com valores absolutos de máximos e mínimos de v_x diferentes.

Por fim, diante da investigação de algumas realizações individuais, observamos a formação de regiões de hiperaglomeração de BA, que chamamos de coágulos. Criamos critérios de medição de coágulos e estimamos a probabilidade de surgimentos desse eventos nas simulações. Esperamos que tal estudo possa ser aplicado a trabalhos experimentais de controle e aprisionamento de MA.

Em suma, o trabalho realizado aqui em MA seguiu uma linha de complexidade, de um sistema mais simples como o das PA até um sistema mais complexo de BA, sempre na tentativa em induzir movimento líquido em uma determinada direção ou também estudar os efeitos da quebra de simetria na evolução dinâmica desses sistemas fora do equilíbrio. Tivemos várias dificuldades em relação a escolha de parâmetros, variáveis e possibilidades de estudos no nosso sistema, porém, fixando as propriedades que nos pareceram mais relevantes, pudemos extrair predições de movimento ordenado com potencial de aplicabilidade experimental razoável. Temos como perspectiva futura estudar o efeito da ação de uma força externa F_{dc} para as PA e BA variando a intensidade e direção da força focando nas regiões de intensidade

da força mais próximas da origem de grandeza das velocidades de autopropulsão das partículas afim de investigar melhor o efeito do drive externo na velocidade média do sistema. Queremos estudar o sistema binário de PA, realizando também um estudo sistemático feito como o apresentado na seção 3.1 e 3.2, estudando também o efeito gerado na velocidade média das partículas rotacionando os obstáculos em uma rede ordenada. Esperamos também melhorar nosso modelo analítico que representa o efeito de inversão da corrente líquida vista na seção 3.2 e queremos também propor um modelo análogo para as BA, cuja inversão de corrente também foi observada. Queremos dar continuidade no aprimoramento do nosso modelo de BA, com barras flexíveis, e estudar as consequências na velocidade média do sistema. Por fim, queremos também estudar e aprimorar nossos resultados para o surgimento de coágulos em sistemas de BA, aumentando a fração de ocupação do sistema e calculando a probabilidade de ocorrência dessas regiões de hiperaglomeração afim de publicarmos mais trabalhos relacionados a essa área incrível e ao mesmo tempo desafiadora da física, a Matéria Ativa.

REFERÊNCIAS

- ANDERSEN, H. C. **Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature**. [S.l.]: American Institute of Physics, 1980. v. 72. 2384–2393 p.
- ANDERSON, J. L. **Transport Mechanisms of Biological Colloids a**. [S.l.]: Wiley Online Library, 1986. v. 469. 166–177 p.
- BASKARAN, A.; MARCHETTI, M. C. **Enhanced diffusion and ordering of self-propelled rods**. [S.l.]: APS, 2008. v. 101. 268101 p.
- BEALE, P. **Statistical Mechanics**. Elsevier Science, 1996. ISBN 9780080541716. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=PIk9sF9j2oUC>. Acesso em: 13 maio 2022.
- BECHINGER, C.; LEONARDO, R. D.; LÖWEN, H.; REICHHARDT, C.; VOLPE, G.; VOLPE, G. **Active particles in complex and crowded environments**. [S.l.]: APS, 2016. v. 88. 045006 p.
- BERG, H. C. **Random walks in biology**. [S.l.]: Princeton University Press, 1993.
- BERG, H. C. **E. coli in Motion**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008.
- BERG, H. C.; BROWN, D. A. **Chemotaxis in Escherichia coli analysed by three-dimensional tracking**. [S.l.]: Springer, 1972. v. 239. 500–504 p.
- BORBA, A. D. **Transporte de partículas com autopropulsão em substratos 2d ordenados**. [S.l.: s.n.], 2015.
- CATES, M. E. **Diffusive transport without detailed balance in motile bacteria: does microbiology need statistical physics?** [S.l.]: IOP Publishing, 2012. v. 75. 042601 p.
- CHATÉ, H.; GINELLI, F.; GRÉGOIRE, G.; RAYNAUD, F. **Collective motion of self-propelled particles interacting without cohesion**. [S.l.]: APS, 2008. v. 77. 046113 p.
- CHATÉ, H.; GINELLI, F.; GRÉGOIRE, G.; PERUANI, F.; RAYNAUD, F. **Modeling collective motion: variations on the Vicsek model**. [S.l.]: Springer, 2008. v. 64. 451–456 p.
- CHEPIZHKO, O.; ALTMANN, E. G.; PERUANI, F. **Optimal Noise Maximizes Collective Motion in Heterogeneous Media**. American Physical Society, 2013. v. 110. 238101 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.238101>. Acesso em: 13 maio 2022.

CHEPIZHKO, O.; PERUANI, F. **Diffusion, Subdiffusion, and Trapping of Active Particles in Heterogeneous Media**. American Physical Society, 2013. v. 111. 160604 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.160604>. Acesso em: 13 maio 2022.

CZIRÓK, A.; BARABÁSI, A.-L.; VICSEK, T. **Collective motion of self-propelled particles: Kinetic phase transition in one dimension**. [S.l.]: APS, 1999. v. 82. 209 p.

DOLAI, P.; SIMHA, A.; MISHRA, S. **Phase separation in binary mixtures of active and passive particles**. The Royal Society of Chemistry, 2018. v. 14. 6137-6145 p. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1039/C8SM00222C>. Acesso em: 13 maio 2022.

DROCCO, J. A.; REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C. **Bidirectional sorting of flocking particles in the presence of asymmetric barriers**. American Physical Society, 2012. v. 85. 056102 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.056102>. Acesso em: 13 maio 2022.

DUNKEL, J.; HEIDENREICH, S.; DRESCHER, K.; WENSINK, H. H.; BÄR, M.; GOLDSTEIN, R. E. **Fluid dynamics of bacterial turbulence**. [S.l.]: APS, 2013. v. 110. 228102 p.

FILY, Y.; MARCHETTI, M. C. **Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment**. [S.l.]: APS, 2012. v. 108. 235702 p.

FRENKEL, D.; SMIT, B. **Understanding molecular simulation: from algorithms to applications**. [S.l.]: Elsevier, 2001. v. 1.

GALAJDA, P.; KEYMER, J.; CHAIKIN, P.; AUSTIN, R. **A wall of funnels concentrates swimming bacteria**. [S.l.]: Am Soc Microbiol, 2007. v. 189. 8704–8707 p.

GALAJDA, P.; KEYMER, J.; CHAIKIN, P.; AUSTIN, R. **A Wall of Funnels Concentrates Swimming Bacteria**. American Society for Microbiology Journals, 2007. v. 189. 8704–8707 p. Disponível em: <https://jb.asm.org/content/189/23/8704>. Acesso em: 13 maio 2022.

GAUGER, E.; STARK, H. **Numerical study of a microscopic artificial swimmer**. [S.l.]: APS, 2006. v. 74. 021907 p.

GHOSH, P. K.; MISKO, V. R.; MARCHESONI, F.; NORI, F. **Self-propelled Janus particles in a ratchet: Numerical simulations**. [S.l.]: APS, 2013. v. 110. 268301 p.

GINELLI, F. **The Physics of the Vicsek model**. [S.l.]: Springer, 2016. v. 225. 2099–2117 p.

GROOT, S. R. D.; MAZUR, P. **Non-equilibrium thermodynamics**. [S.l.]: Courier Corporation, 2013.

- HONEYCUTT, R. L. **Stochastic runge-kutta algorithms. i. white noise.** [S.l.]: APS, 1992. v. 45. 600 p.
- KAISER, A.; WENSINK, H.; LÖWEN, H. **How to capture active particles.** [S.l.]: APS, 2012. v. 108. 268307 p.
- KE, H.; YE, S.; CARROLL, R. L.; SHOWALTER, K. **Motion analysis of self-propelled Pt-silica particles in hydrogen peroxide solutions.** [S.l.]: ACS Publications, 2010. v. 114. 5462–5467 p.
- KUDROLLI, A. **Concentration dependent diffusion of self-propelled rods.** [S.l.]: APS, 2010. v. 104. 088001 p.
- KUDROLLI, A.; LUMAY, G.; VOLFSOON, D.; TSIMRING, L. S. **Swarming and swirling in self-propelled polar granular rods.** [S.l.]: APS, 2008. v. 100. 058001 p.
- KUMAR, N.; GUPTA, R. K.; SONI, H.; RAMASWAMY, S.; SOOD, A. K. **Trapping and sorting active particles: Motility-induced condensation and smectic defects.** American Physical Society, 2019. v. 99. 032605 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.99.032605>. Acesso em: 13 maio 2022.
- KUMAR, N.; GUPTA, R. K.; SONI, H.; RAMASWAMY, S.; SOOD, A. **Trapping and sorting active particles: Motility-induced condensation and smectic defects.** [S.l.]: APS, 2019. v. 99. 032605 p.
- LEE, M.; SZUTTOR, K.; HOLM, C. **A computational model for bacterial run-and-tumble motion.** [S.l.]: AIP Publishing LLC, 2019. v. 150. 174111 p.
- LEITE, L.; LUCENA, D.; POTIGUAR, F.; FERREIRA, W. **Depletion forces on circular and elliptical obstacles induced by active matter.** [S.l.]: APS, 2016. v. 94. 062602 p.
- LI, Y.; GHOSH, P. K.; MARCHESONI, F.; LI, B. **Manipulating chiral microswimmers in a channel.** [S.l.]: APS, 2014. v. 90. 062301 p.
- MANO, N.; HELLER, A. **Bioelectrochemical propulsion.** [S.l.]: ACS Publications, 2005. v. 127. 11574–11575 p.
- MARCHETTI, M. C.; JOANNY, J.-F.; RAMASWAMY, S.; LIVERPOOL, T. B.; PROST, J.; RAO, M.; SIMHA, R. A. **Hydrodynamics of soft active matter.** [S.l.]: APS, 2013. v. 85. 1143 p.
- MASOUD, H.; SHELLEY, M. J. **Collective Surfing of Chemically Active Particles.** American Physical Society, 2014. v. 112. 128304 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.128304>. Acesso em: 13 maio 2022.

- MAZENKO, G. F. **Nonequilibrium statistical mechanics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.
- MCDERMOTT, D.; REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C. **Collective ratchet effects and reversals for active matter particles on quasi-one-dimensional asymmetric substrates**. The Royal Society of Chemistry, 2016. v. 12. 8606-8615 p. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1039/C6SM01394E>. Acesso em: 13 maio 2022.
- MORIN, A.; DESREUMAUX, N.; CAUSSIN, J.-B.; BARTOLO, D. **Distortion and destruction of colloidal flocks in disordered environments**. [S.l.]: Nature Publishing Group, 2017. v. 13. 63–67 p.
- MOROZOV, K. I.; LESHANSKY, A. M. **The chiral magnetic nanomotors**. [S.l.]: Royal Society of Chemistry, 2014. v. 6. 1580–1588 p.
- NI, R.; STUART, M. A. C.; BOLHUIS, P. G. **Tunable long range forces mediated by self-propelled colloidal hard spheres**. [S.l.]: APS, 2015. v. 114. 018302 p.
- PATTESON, A. E.; GOPINATH, A.; ARRATIA, P. E. **Active colloids in complex fluids**. [S.l.]: Elsevier, 2016. v. 21. 86–96 p.
- PAXTON, W. F.; KISTLER, K. C.; OLMEDA, C. C.; SEN, A.; ANGELO, S. K. S.; CAO, Y.; MALLOUK, T. E.; LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H. **Catalytic nanomotors: autonomous movement of striped nanorods**. [S.l.]: ACS Publications, 2004. v. 126. 13424–13431 p.
- PERUANI, F. **Active brownian rods**. [S.l.]: Springer, 2016. v. 225. 2301–2317 p.
- PERUANI, F.; DEUTSCH, A.; BÄR, M. **Nonequilibrium clustering of self-propelled rods**. [S.l.]: APS, 2006. v. 74. 030904 p.
- PERUANI, F.; STARRUSS, J.; JAKOVLJEVIC, V.; SØGAARD-ANDERSEN, L.; DEUTSCH, A.; BÄR, M. **Collective motion and nonequilibrium cluster formation in colonies of gliding bacteria**. [S.l.]: APS, 2012. v. 108. 098102 p.
- POTIGUAR, F. Q.; FARIAS, G. A.; FERREIRA, W. P. **Self-propelled particle transport in regular arrays of rigid asymmetric obstacles**. American Physical Society, 2014. v. 90. 012307 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012307>. Acesso em: 13 maio 2022.
- RAMASWAMY, S. **Active matter**. [S.l.]: IOP Publishing, 2017. v. 2017. 054002 p.
- RAPAPORT, D. C.; RAPAPORT, D. C. R. **The art of molecular dynamics simulation**. [S.l.]: Cambridge university press, 2004.
- REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. **Active matter ratchets with an external drift**. American Physical Society, 2013. v. 88. 062310 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.062310>. Acesso em: 13 maio 2022.

- REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. **Active matter transport and jamming on disordered landscapes**. American Physical Society, 2014. v. 90. 012701 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012701>. Acesso em: 13 maio 2022.
- REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. O. **Active matter ratchets with an external drift**. [S.l.]: APS, 2013. v. 88. 062310 p.
- ROMANCZUK, P.; BÄR, M.; EBELING, W.; LINDNER, B.; SCHIMANSKY-GEIER, L. **Active brownian particles**. [S.l.]: Springer, 2012. v. 202. 1–162 p.
- RØRTH, P. **Collective Cell Migration**. [s.n.], 2009. v. 25. 407-429 p. PMID: 19575657. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev.cellbio.042308.113231>. Acesso em: 13 maio 2022.
- SALINAS, S. **Introdução a Física Estatística Vol. 09**. EDUSP, 1997. ISBN 9788531403866. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>. Acesso em: 13 maio 2022.
- SCHWEITZER, F. **Brownian agents and active particles: collective dynamics in the natural and social sciences**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2003.
- STANLEY, H. **Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena**. Oxford University Press, 1987. (International series of monographs on physics). ISBN 9780195053166. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=C3BzcUxoaNkC>. Acesso em: 13 maio 2022.
- STARRUSS, J.; PERUANI, F.; JAKOVLJEVIC, V.; SØGAARD-ANDERSEN, L.; DEUTSCH, A.; BÄR, M. **Pattern-formation mechanisms in motility mutants of Myxococcus xanthus**. [S.l.]: The Royal Society, 2012. v. 2. 774–785 p.
- TAKATORI, S. C.; YAN, W.; BRADY, J. F. **Swim pressure: stress generation in active matter**. [S.l.]: APS, 2014. v. 113. 028103 p.
- TORNEY, C.; NEUFELD, Z. **Transport and aggregation of self-propelled particles in fluid flows**. [S.l.]: APS, 2007. v. 99. 078101 p.
- VICSEK, T.; CZIRÓK, A.; BEN-JACOB, E.; COHEN, I.; SHOCHET, O. **Novel type of phase transition in a system of self-driven particles**. [S.l.]: APS, 1995. v. 75. 1226 p.
- VICSEK, T.; CZIRÓK, A.; BEN-JACOB, E.; COHEN, I.; SHOCHET, O. **Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles**. American Physical Society, 1995. v. 75. 1226–1229 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.1226>. Acesso em: 13 maio 2022.
- VICSEK, T.; ZAFEIRIS, A. **Collective motion**. [S.l.]: Elsevier, 2012. v. 517. 71–140 p.

- VOLPE, G.; BUTTINONI, I.; VOGT, D.; KÜMMERER, H.-J.; BECHINGER, C. **Microswimmers in patterned environments**. [S.l.]: Royal Society of Chemistry, 2011. v. 7. 8810–8815 p.
- WAN, M.; REICHHARDT, C. O.; NUSSINOV, Z.; REICHHARDT, C. **Rectification of swimming bacteria and self-driven particle systems by arrays of asymmetric barriers**. [S.l.]: APS, 2008. v. 101. 018102 p.
- WAN, M. B.; REICHHARDT, C. J. O.; NUSSINOV, Z.; REICHHARDT, C. **Rectification of Swimming Bacteria and Self-Driven Particle Systems by Arrays of Asymmetric Barriers**. American Physical Society, 2008. v. 101. 018102 p. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.018102>. Acesso em: 13 maio 2022.
- WANG, J.; ZHANG, D.; XIA, B.; YU, W. **Spatial heterogeneity can facilitate the target search of self-propelled particles**. The Royal Society of Chemistry, 2017. v. 13. 758-764 p. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1039/C6SM02679F>. Acesso em: 13 maio 2022.
- WEIJER, C. J. **Collective cell migration in development**. [s.n.], 2009. v. 122. 3215-3223 p. ISSN 0021-9533. Disponível em: <https://doi.org/10.1242/jcs.036517>. Acesso em: 13 maio 2022.
- WENSINK, H. H.; DUNKEL, J.; HEIDENREICH, S.; DRESCHER, K.; GOLDSTEIN, R. E.; LÖWEN, H.; YEOMANS, J. M. **Meso-scale turbulence in living fluids**. [S.l.]: National Acad Sciences, 2012. v. 109. 14308–14313 p.
- YANG, W.; MISKO, V. R.; MARCHESONI, F.; NORI, F. **Colloidal transport through trap arrays controlled by active microswimmers**. [S.l.]: IOP Publishing, 2018. v. 30. 264004 p.
- YANG, W.; MISKO, V. R.; TEMPERE, J.; KONG, M.; PEETERS, F. M. **Artificial living crystals in confined environment**. [S.l.]: APS, 2017. v. 95. 062602 p.
- YANG, Y.; MARCEAU, V.; GOMPPER, G. **Swarm behavior of self-propelled rods and swimming flagella**. [S.l.]: APS, 2010. v. 82. 031904 p.
- YLLANES, D.; LEONI, M.; MARCHETTI, M. C. **How many dissenters does it take to disorder a flock?** IOP Publishing, 2017. v. 19. 103026 p. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/19/10/103026>. Acesso em: 13 maio 2022.
- ZWANZIG, R. **Nonequilibrium statistical mechanics**. [S.l.]: Oxford University Press, 2001.

APÊNDICE A - DETERMINAÇÃO DE J_x EM REDE DE OBSTÁCULOS ASSIMÉTRICOS

A corrente total (velocidade) em um sistema composto por N partículas podem ser escritas como:

$$\vec{J} = \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \right\rangle, \quad (\text{A.1})$$

Para o nosso sistema, estamos interessados apenas na componente x desta quantidade, portanto, escrevemos como $J_x = J_+ - J_-$ onde J_{\pm} são as correntes ao longa das direções $\pm x$. Nós presumimos que cada uma dessas correntes é o produto do número de partículas que contribuem para o seu valor, ou seja, que são capturadas, e suas velocidades, e que ambas as quantidades são estatisticamente independentes. Portanto, temos

$$J_x = \langle n_+ \rangle \langle v_+ \rangle - \langle n_- \rangle \langle v_- \rangle, \quad (\text{A.2})$$

daqui em diante consideraremos que as médias $\pm v$ são iguais ($\pm v = v$), tais que a direção da corrente líquida é determinada apenas pela diferença entre o número de partículas que viajam em direções opostas:

$$J_x = \langle v \rangle (\langle n_+ \rangle - \langle n_- \rangle). \quad (\text{A.3})$$

Supondo que, em média, metade das partículas viaje em cada direção, podemos escrever cada um desses números médios como o diferença entre $\frac{N}{2}$ e o número de partículas que são impedidas em seu movimento devido aos obstáculos. Portanto, temos que:

$$\langle n_{\pm} \rangle = \frac{N}{2} - \langle T_{\pm} \rangle \langle p_{\pm} \rangle, \quad (\text{A.4})$$

onde T_{\pm} é o número de armadilhas nas quais uma partícula pode cair (T_+ é o número de armadilhas curvas formadas por 2 obstáculos lado a lado e T_- é o número de armadilhas planas formadas por um obstáculo) e p_{\pm} é o número de partículas em cada armadilha. O número de armadilhas, uma vez que são formadas pelos obstáculos, é um número aleatório porque depende de uma organização particular da rede de obstáculos desordenada. Para a direção negativa, onde as partículas enfrentam o lado plano dos obstáculos, uma armadilha é simplesmente essa seção de um semicírculo. Portanto, para uma dado fração de obstáculos removidos f , e desde o

início temos $(\frac{L}{D})^2$ obstáculos na rede, onde D é o diâmetro dos obstáculos, obtemos a seguinte expressão para o número de armadilhas restantes na rede:

$$\langle T_- \rangle = \left(\frac{L}{D} \right)^2 (1 - f). \quad (\text{A.5})$$

Para a direção positiva, as armadilhas são os espaços entre dois obstáculos adjacentes. Para cada obstáculo removido, uma armadilha será removida também, a menos que o obstáculo seja isolado ou colocado entre dois outros obstáculos. No primeiro caso, nenhuma armadilha será removida, enquanto no segundo, duas armadilhas serão removidas. Para levar em conta todas essas considerações, simplesmente assumimos que cada obstáculo removido corresponde a uma armadilha removida. Portanto, o número de armadilhas restantes para um determinado f é o número de obstáculos restantes. Por outro lado, sabemos de (POTIGUAR *et al.*, 2014) que obstáculos isolados não prendem nenhuma partícula no lado curvo. Na verdade, as partículas deslizando no lado curvo do obstáculo tem seu movimento retificado ao longo da direção $+x$. Com base em nossos resultados de simulação, obtivemos o probabilidade de ocorrência de

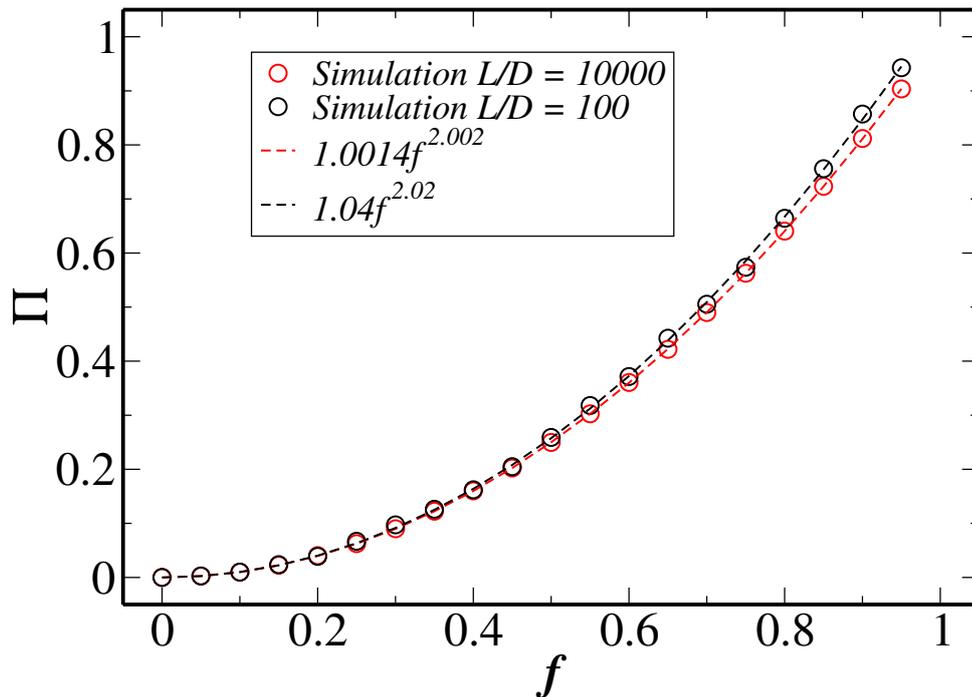


Figura 24: Probabilidade de ocorrência de obstáculos isolados (com diâmetro D) na rede desordenada em função de f para dois tamanhos L da caixa de simulação. Os círculos representam os dados de simulação e as linhas tracejadas representam as funções de ajuste.

obstáculos isolados em função da fração de obstáculos removidos f . Isso é mostrado na Fig. 24, onde observamos que a probabilidade de ocorrência de obstáculos isolados depende de f^2 . Portanto, o número médio de obstáculos isolados restantes em função de f é $(\frac{L}{D})^2 (1 - f)f^2$, e

definimos $\langle T_+ \rangle$ como a diferença entre o número total de obstáculos remanescentes e o número de obstáculos isolados:

$$\langle T_+ \rangle = \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f) - \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)f^2 = \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)(1-f^2). \quad (\text{A.6})$$

Combinando Equações (A.4)-(A.6) na Equação (A.3), temos a seguinte expressão para a corrente média líquida de partículas:

$$J_x = \langle v \rangle \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)[(f^2-1)\langle p_+ \rangle + \langle p_- \rangle]. \quad (\text{A.7})$$

Ainda precisamos formular a dependência de p_{\pm} como uma função de f a fração de área ϕ do sistema. Na busca em estimar o número de partículas por armadilha, definimos o número médio de camadas de partículas em torno da curva e lados planos de um obstáculo, como $\langle c_+ \rangle$ e $\langle c_- \rangle$, respectivamente. Portanto

$$\langle p_+ \rangle = \pi \frac{D+d}{2d} \langle c_+ \rangle, \langle p_- \rangle = \frac{D}{d} \langle c_- \rangle, \quad (\text{A.8})$$

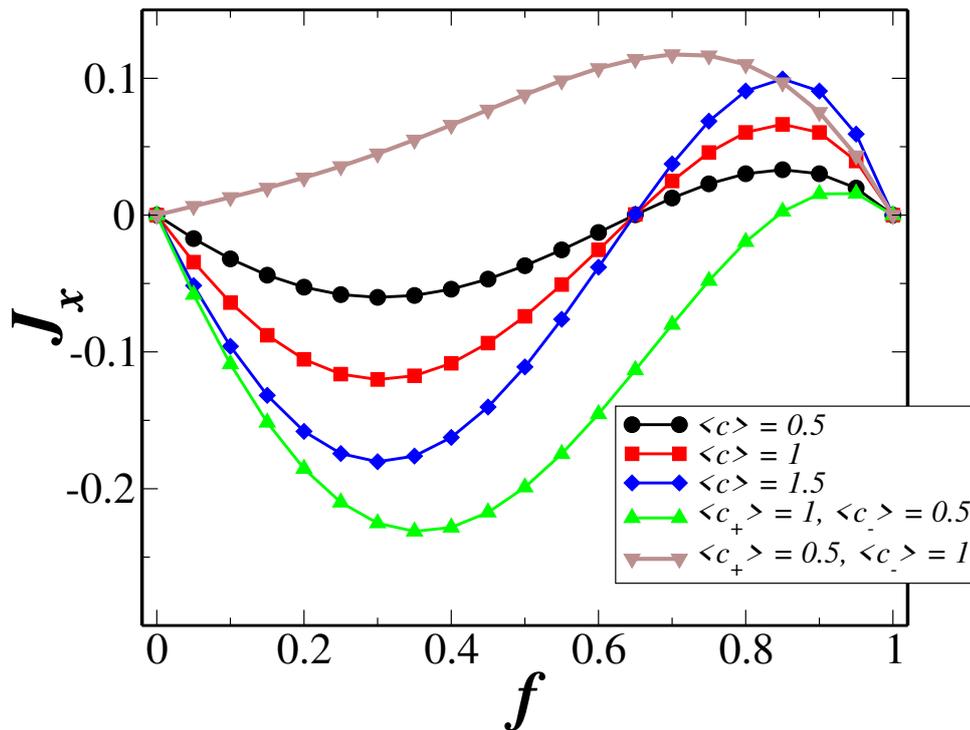


Figura 25: Corrente média líquida de partículas J_x em função de f para $v' = 1.0 \times 10^{-4}$, e valores distintos dos parâmetros do modelo $\langle c_+ \rangle$, $\langle c_- \rangle$ e $\langle c \rangle = \langle c_+ \rangle = \langle c_- \rangle$

onde ambos os coeficientes nessas expressões são o número de partículas por camada em cada lado de um obstáculo. Para o lado curvo, aproximamos o número de partículas por camada, que depende do número de camada, como o número de partículas na primeira ca-

mada. Para densidades baixas e moderadas, tal aproximação é válida. Outra suposição está relacionada ao fato que a velocidade deve depender de f , uma vez que se $f = 0$ todos os caminhos possíveis de percolação são fechados e a corrente média de partículas desaparece. Portanto, assumimos, por uma questão de simplicidade, que $\langle v \rangle = v' f$, onde v' é o componente x da velocidade de autopropulsão, que também pode depender de ϕ (nós ignoramos tal dependência neste Cálculo). Finalmente,

$$J_x = v' \left(\frac{L}{D} \right)^2 (1-f)f \left\{ [f^2 - 1] \left(\pi \frac{D+d}{2d} \langle c_+ \rangle \right) + \frac{D}{d} \langle c_- \rangle \right\}. \quad (\text{A.9})$$

Na Figura 25, ilustramos a Eq. (A.9) em função de f para a condição $\langle c \rangle = \langle c_+ \rangle = \langle c_- \rangle$. Esperamos que $\langle c_{\pm} \rangle$ seja dependente de ϕ . Comparando com nossos resultados numéricos, observamos que o valores de $\langle c_{\pm} \rangle$ que melhor reproduzem a Figura 15 são os casos em que $\langle c_+ \rangle > \langle c_- \rangle$, o que é esperado, uma vez que assumimos que as velocidades médias ao longo de cada direção são iguais. Na Figura 26, mostramos alguns casos de acordo com tal condição.

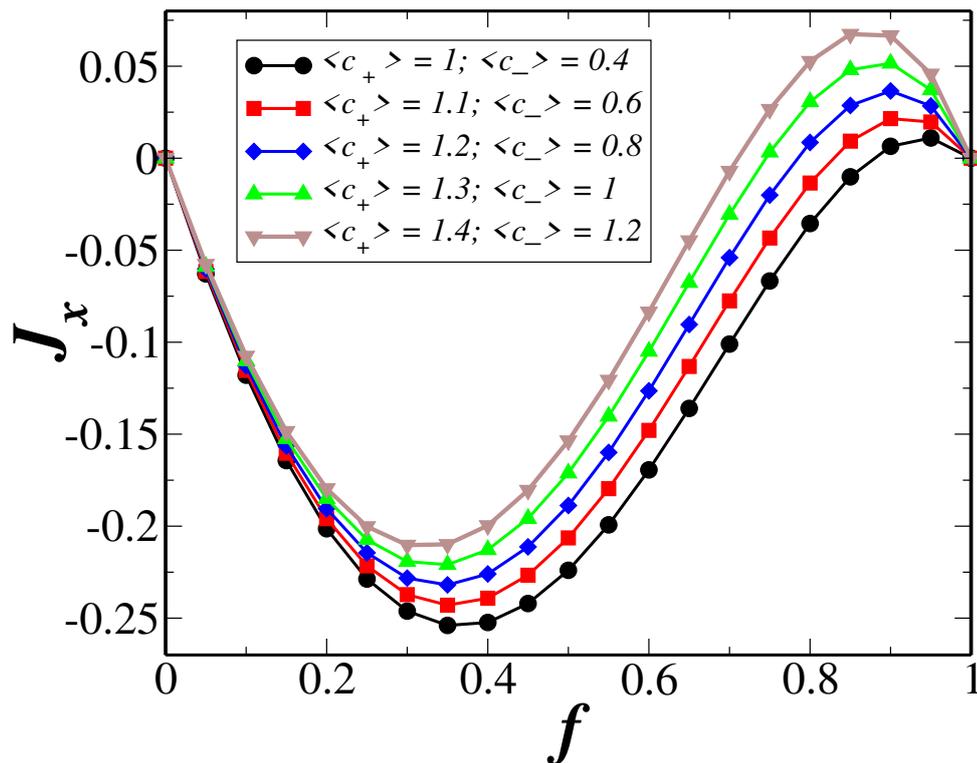


Figura 26: Corrente média líquida de partículas J_x em função de f para $v' = 1.0 \times 10^{-4}$ e valores distintos dos parâmetros do modelo $\langle c_+ \rangle$ e $\langle c_- \rangle$.

APÊNDICE B – MODELOS PARA A MATÉRIA ATIVA

- Modelos

Há diversos modelos para compreender e descrever o movimento das PA, variando desde os mais simples até os mais sofisticados. Esses modelos têm como objetivo reproduzir situações físicas específicas ou experimentos laboratoriais, permitindo uma representação precisa dos fenômenos observados. Dada a escala espacial de interesse (que vai do micro ao macro), o desenvolvimento desses modelos de MA justificam-se pela necessidade de uma abordagem mais realística.

Ao considerar a escala espacial, leva-se em conta as características do ambiente em que as PA estão presentes, como barreiras, geometrias complexas ou gradientes de concentração química. Esses elementos espaciais têm um impacto no comportamento das partículas, influenciando suas trajetórias e interações com o meio ambiente. A utilização de fenômenos físicos específicos também permite uma descrição mais detalhada e realista do movimento das PA. Por exemplo, modelos baseados em hidrodinâmica podem considerar o fluxo de fluido ao redor das partículas, levando em conta fatores como viscosidade, pressão e forças de arrasto. Modelos que incorporam fenômenos químicos podem analisar reações químicas que ocorram nas proximidades das partículas, afetando seu comportamento de maneira significativa ou até mesmo modelos em que a velocidade média de um grupo é calculada a partir de um determinado raio de inclusão, que representa bem o comportamento de pequenos grupos de animais na busca por alimento ou na fuga de um predador. Sendo assim, nesse tópico nos concentraremos em apresentar alguns dos modelos mais utilizados e publicados para a representação de sistemas de MA.

- Modelo de Vicsek

Um dos modelos mais difundido, referenciado e importante no estudo da MA é o modelo de Vicsek (CHATÉ *et al.*, 2008b; GINELLI, 2016). Nesse modelo a dinâmica de superamortecimento é considerada (quer dizer, eliminamos a força inercial $m.a$ da segunda lei de Newton em comparação às demais forças). No modelo de Vicsek, as perturbações

nas velocidades das partículas 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 (raio a se considerar). Do ponto de vista numérico, a evolução temporal das equações do movimento para a velocidade (v_i) e a posição (r_i) da partícula i com j vizinhos são:

$$v_i(t + \delta) = v_o \frac{\langle v_j(t) \rangle_R}{|\langle v_j(t) \rangle_R|} + P \quad (\text{B.1})$$

e

$$r_i(t + \delta) = r_i(t) + \Delta r_i(t + \delta), \quad (\text{B.2})$$

onde o termo $\langle v_j(t) \rangle_R$ representa o valor médio das velocidades das entidades do sistema, e $|\langle v_j(t) \rangle_R|$ o seu módulo, dentro de um círculo de raio R em torno da partícula i e P é um parâmetro de perturbação. As Eqs.(B.1) e (B.2) constituem os passos de integração para o modelo de Vicsek (ver Fig. 27).

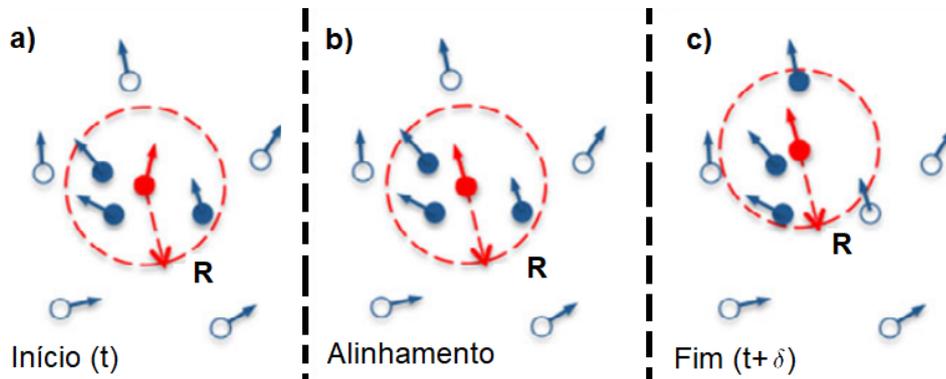


Figura 27: **a)** Início do passo de integração do método, **b)** Alinhamento médio da partícula vermelha conforme azuis no círculo de raio R considerado, **c)** Fim do passo de integração após o tempo δ .

No modelo de Vicsek, os parâmetros variados são a densidade ρ , a velocidade v_o das partículas (a velocidade tem módulo constante v_o) e a intensidade das perturbações η (com $\eta < 1$). Neste modelo, definimos o parâmetro de ordem (ξ) relacionado ao movimento coletivo do sistema como:

$$\xi = \frac{1}{N v_o} \left| \sum_{i=1}^N v_i \right|, \quad (\text{B.3})$$

onde N é o número total de entidades do sistema e v_o suas respectivas velocidades médias absolutas. Se o parâmetro de ordem ξ varia de forma descontínua durante uma transição isso 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 acompanhadas por grandes flutuações de algumas das quantidades relevantes ao sistema (VICSEK *et al.*, 1995b; STANLEY, 1987). Como sistemas de PA são fora do equilíbrio, Vicsek propôs tratar as transições desses sistemas como se fossem transições dinâmicas e não como transições de fase para sistemas em equilíbrio¹.

- Representação polar da dinâmica Browniana

Considerando a dinâmica de um SA em duas dimensões sem a ação de forças externas, uma das formas mais usuais de representar o Movimento Browniano é através de coordenadas polares. As componentes da velocidade v_x e v_y podem ser escritas em termos das coordenadas polares:

$$v_x = s(t) \cos \phi(t) \quad (\text{B.4})$$

$$v_y = s(t) \sin \phi(t) \quad (\text{B.5})$$

onde $s(t)$ é o módulo do vetor velocidade (aqui não necessariamente constante) e $\phi(t)$ é o ângulo polar que define a direção do movimento da partícula ativa, isto é, o ângulo entre o vetor velocidade e o eixo $+x$. Podemos escrever a velocidade da partícula em termos de sua posição:

$$\frac{d}{dt} \vec{r}(t) = \vec{v}(t) = s(t) \hat{e}_v(t), \quad (\text{B.6})$$

onde $\hat{e}_v(t) = (\cos \phi(t), \sin \phi(t))$ é o vetor unitário na direção da velocidade no tempo t .

As equações estocásticas correspondentes para $s(t)$ e $\phi(t)$ são:

$$\frac{d}{dt} s = -\gamma s + \sqrt{2D} \xi_s(t), \quad (\text{B.7})$$

¹As transições de fase em sistemas em equilíbrio termodinâmico referem-se à mudanças abruptas e coletivas nas propriedades físicas de um sistema quando certas condições termodinâmicas, como temperatura e pressão, são variadas. Exemplos comuns de transições de fase em sistemas em equilíbrio incluem a solidificação, a fusão, a vaporização e a condensação. Essas transições ocorrem em sistemas que estão em equilíbrio termodinâmico, ou seja, quando as grandezas macroscópicas do sistema, como temperatura e densidade, são uniformes e não variam no tempo. Por outro lado, as transições de fase dinâmica ocorrem em sistemas de MA, que são considerados sistemas fora do equilíbrio termodinâmico, nos quais as partículas individuais possuem a capacidade de converter energia em movimento ou realizar atividades autônomas. Essas PA são geralmente organismos vivos microscópicos, como bactérias, células biológicas ou robôs microscópicos. As transições de fase dinâmica em sistemas de MA estão relacionadas à mudanças coletivas e organizadas no comportamento das PA. Em sistemas de MA, as transições de fase dinâmica podem envolver fenômenos como a formação de padrões de movimento coletivo, a transição de um estado desordenado para um estado ordenado ou a ocorrência de fluxos de partículas direcionados. Essas transições são impulsionadas pelas interações entre as PA e seu ambiente, bem como pelos mecanismos de movimento individual das partículas. Além disso, as transições de fase dinâmica em sistemas de matéria ativa são frequentemente influenciadas por características específicas das partículas ativas, como sua motilidade, comportamento de interação e capacidade de auto-organização.

$$\frac{d}{dt}\phi = \frac{1}{s}\sqrt{2D}\xi_\phi(t). \quad (\text{B.8})$$

Podemos estabelecer os ruídos $\xi_s(t)$ e $\xi_\phi(t)$ como:

$$\xi_s(t) = \xi_x(t) \cos \phi + \xi_y(t) \sin(t), \quad (\text{B.9})$$

$$\xi_\phi(t) = -\xi_x(t) \sin \phi + \xi_y(t) \cos(t), \quad (\text{B.10})$$

e são estatisticamente independentes. Entretanto, em contraste ao ruído angular $\xi_\phi(t)$ o valor médio do ruído na velocidade $\langle \xi_s(t) \rangle$ não se anula.

- Coordenadas polares internas para PA

Muitas PA, tais como, por exemplo, agentes biológicos, podem ter uma estrutura corpórea assimétrica que definem a sua direção preferencial de movimento (eixo cabeça-cauda, termo advindo do inglês *head to tail*). Não é de hoje o estudo dos mecanismos físicos para transporte de MA (ANDERSON, 1986). Além disso, para as PA artificiais, tais como colóides quimicamente acionados (MASOUD; SHELLEY, 2014), pode ser natural assumir uma direção preferencial de movimento com base em seu mecanismo de autopropulsão (modelos por exemplo onde a velocidade e a força de propulsão não são paralelas). A polaridade da partícula introduz uma orientação distinta. Esta orientação é conhecida na literatura como *heading* e pode ser definida pela dependência temporal de $\mathbf{e}_h(t)$, que em 2 dimensões é inteiramente determinada pela variável angular ϕ :

$$\mathbf{e}_h(t) = (\cos \phi(t), \sin \phi(t)). \quad (\text{B.11})$$

Assim, a velocidade de uma partícula polar pode ser expressa pela sua velocidade com respeito a orientação e ao vetor correspondente $\vec{v} = v\mathbf{e}_h$. A velocidade v pode ser positiva ou negativa, que pode ser entendida como sendo a orientação de seguir na direção à frente e seguir em direção oposta ao movimento em relação à orientação. Para determinar seu movimento devemos definir um segundo vetor unitário, o qual é associado com a direção angular perpendicular à direção de orientação:

$$\mathbf{e}_\phi(t) = (-\sin \phi(t), \cos \phi(t)). \quad (\text{B.12})$$

Devemos notar que, apesar das semelhanças aparentes, essas coordenadas são diferen-

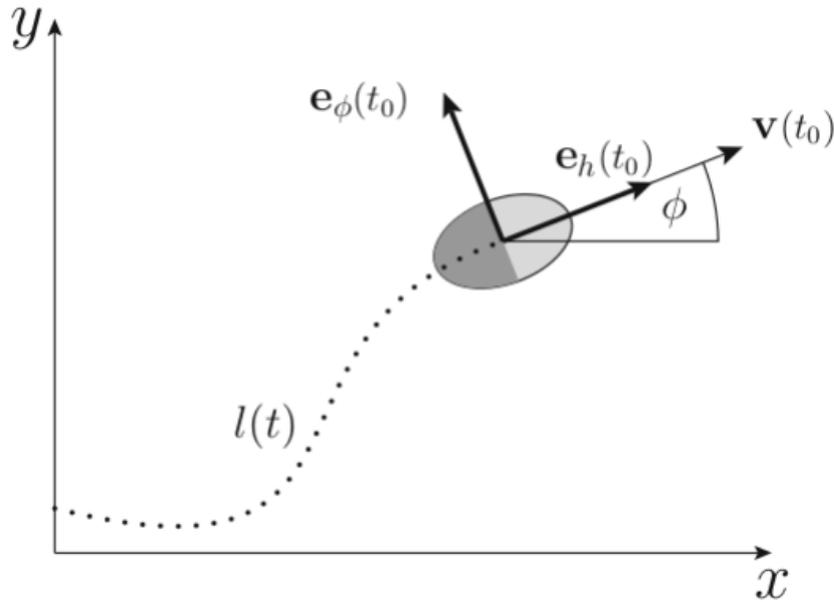


Figura 28: Visualização esquemática do movimento de uma partícula polar com vetores unitários das coordenadas internas $\mathbf{e}_h(t)$ e $\mathbf{e}_\phi(t)$ num determinado ponto no tempo $t = t_0$. As linhas tracejadas indicam a trajetória da partícula $l(t)$.

tes das coordenadas polares. Nas coordenadas polares a velocidade é sempre positiva e a orientação é definida pela direção do vetor velocidade no tempo t . Já nas coordenadas internas a velocidade de uma partícula polar pode também ser negativa, que corresponde ao movimento para trás da partícula em relação à sua posição. Além disso, o vetor orientação não depende da velocidade instantânea, mas é definido pela polaridade intrínseca da partícula. Na Figura 28 vemos o esquema do movimento de uma partícula polar e suas coordenadas internas. Podemos definir, portanto, as relações entre as coordenadas:

$$\mathbf{e}_h \cdot \mathbf{e}_v = \begin{cases} +1, v > 0 \\ -1, v < 0 \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

$$\phi = \begin{cases} \phi, v > 0 \\ \phi + \pi, v < 0 \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

- Bastões Autopropelidos

O modelo de Bastões Autopropelidos, apesar de sua grande evidência experimental no que se refere as simulações de microorganismos, especialmente bactérias, ainda está em desenvolvimento na literatura de MA mais recente. No entendimento desse modelo, os entes ativos interagem empurrando uns aos outros em um determinado substrato, esse

efeito faz com que os mesmos tenham a tendência de se alinharem localmente, e uma vez alinhados, permanecem em movimento juntos por um determinado tempo de simulação (ver Fig. 29 (PERUANI, 2016)). A tendência no alinhamento de Bastões Autopropelidos pode gerar efeitos de aglomerados e comportamento coletivo (PERUANI *et al.*, 2006; YANG *et al.*, 2010; BASKARAN; MARCHETTI, 2008). Alguns exemplos de sistemas que podem ser modelados através dos Bastões Autopropelidos são encontrados nas referências: (PERUANI *et al.*, 2012; STARRUSS *et al.*, 2012; KUDROLLI *et al.*, 2008; KUDROLLI, 2010; PAXTON *et al.*, 2004; MANO; HELLER, 2005; WENSINK *et al.*, 2012; DUNKEL *et al.*, 2013).

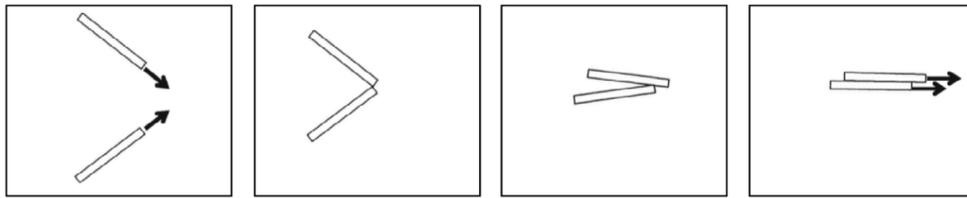


Figura 29: Esquema gráfico representando dois entes ativos interagindo conforme modelo de Bastões Autopropelidos. A interação pode acarretar no alinhamento e movimento ordenado conforme visto acima.

Consideraremos um sistema com N bastões ativos, movendo-se em duas dimensões, em uma caixa de simulação de tamanho L (caixa quadrada), com condições periódicas de contorno aplicadas. Cada bastão é submetido à uma força ativa F que é aplicada na direção que contém o mesmo, ou seja, seu eixo de formação. As interações entre os bastões são modeladas através de um potencial de repulsão, U_i é o potencial do *iésimo* bastão. Nesse modelo, consideramos que o substrato no qual os bastões estão atua como um dissipador de impulso. Essa dissipação de impulso é uma consequência das interações entre os bastões e o substrato podendo influenciar na velocidade média de movimento dos bastões, bem como a forma e o padrão dos agrupamentos formados por eles, possibilitando a ocorrência de uma redução do tempo de persistência do movimento direcional dos bastões, resultando também em trajetórias mais aleatórias. Consideramos também três coeficientes de fricção de arrasto, ζ_{\parallel} , ζ_{\perp} e ζ_{θ} que correspondem aos arrastos experimentados pelos bastões conforme movimento no substrato, seja ao longo de seu eixo, perpendicular a seu eixo ou em giro. No limite de superamortecimento, as equações do movimento do *iésimo* Bastão Autopropelido são:

$$\dot{x}_i = \mu[-\nabla U_i + F.V(\theta_i) + \sigma_i(t)], \quad (\text{B.15})$$

e

$$\dot{\theta}_i = \frac{1}{\zeta_\theta} \left[-\frac{\partial U_i}{\partial \theta_i} + \xi_i(t) \right], \quad (\text{B.16})$$

onde o termo \dot{x}_i significa a derivada temporal de x_i , x_i corresponde a posição do centro de massa da barra e θ_i a sua orientação ao longo do eixo axial. O termo U_i representa a energia potencial total da partícula i , que inclui também sua interação com outras partículas e F é o módulo da força de autopropulsão. O tensor mobilidade μ é definido como:

$$\mu = \frac{V(\theta_i)V(\theta_i)}{\zeta_{\parallel}} + \frac{V_{\perp}(\theta_i)V_{\perp}\theta_i}{\zeta_{\perp}}, \quad (\text{B.17})$$

juntamente com as propriedades $V(\theta) = (\cos(\theta), \sin(\theta))$ e o produto $V(\theta) \cdot V_{\perp}(\theta) = 0$. As equações do movimento dos Bastões Autopropelidos estão sujeitas a dois termos estocásticos (flutuações), $\sigma_i(t)$ e $\xi_i(t)$. Podemos, por simplicidade, desprezar o termo $\sigma_i(t)^2$ restando apenas o ruído escalar $\xi_i(t)$ cujas propriedades $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2D_\theta \delta_{i,j} \delta(t-t')$ são satisfeitas. As interações entre as barras são modeladas através de um potencial que não permite a sobreposição das mesmas. Para a i -ésima barra, o potencial toma a forma: $U_i = U(x_i, \theta_i) = \sum_{j=1; j \neq i}^N u_{i,j}$, onde $u_{i,j}$ representa o potencial repulsivo de interação entre a i -ésima e a j -ésima barra ativa, $u_{i,j} = u(x_i - x_j, \theta_i - \theta_j)$, ambas com comprimento l e largura w e razão de aspecto $\kappa = l/w$. No modelo de bastões autopropelidos, o potencial de repulsão desempenha um papel fundamental nas interações entre as partículas. Existem diversas formas funcionais que podem ser usadas para descrever esse potencial, como o potencial de Lennard-Jones modificado, o potencial de Yukawa e o potencial de soft-core. Cada forma funcional possui parâmetros ajustáveis que controlam a intensidade e o alcance da repulsão.

Em particular, o potencial de Lennard-Jones modificado é uma forma funcional comumente utilizada para descrever o potencial de repulsão no modelo de bastões autopropelidos. Ele é uma adaptação do potencial de Lennard-Jones clássico, que é frequentemente utilizado para descrever as interações entre átomos ou moléculas em sistemas químicos.

²No modelo de BA, a Eq. (B.15) de movimento normalmente inclui um termo estocástico para representar o ruído térmico e flutuações aleatórias que afetam o movimento dos bastões. No entanto, em certas condições específicas, é possível desprezar o termo estocástico $\sigma_i(t)$ e simplificar o modelo. Duas situações em que isso é justificado são quando o movimento coletivo dos bastões é predominante em relação ao movimento individual e quando ocorrem altas densidades de partículas, onde as interações entre os bastões são intensas. No entanto, a decisão de desprezar o termo estocástico deve ser tomada com cuidado, pois em muitos casos o ruído estocástico desempenha um papel importante na dinâmica dos bastões autopropelidos, especialmente em escalas de tempo menores ou em situações com menos movimento coletivo. A escolha de considerar ou desprezar o termo estocástico depende da relevância relativa do movimento coletivo, das interações individuais e das escalas de tempo envolvidas.

O potencial de Lennard-Jones é dado por $V(r) = \varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$, r representa a distância entre as partículas, ε é a energia de interação e σ é o parâmetro de tamanho. O termo $(\sigma/r)^{12}$ representa a contribuição repulsiva de curto alcance, enquanto o termo $(\sigma/r)^6$ descreve a contribuição atrativa de médio alcance. No contexto dos bastões auto-propelidos, comumente, o termo atrativo é ignorado, e apenas a parte repulsiva é considerada para descrever as interações repulsivas entre as partículas.

- Modelo Run-and-Tumble

Alguns microorganismos tais como, vírus, protozoários e em especial bactérias (por exemplo a *Escherichia coli* - *E. coli* (BERG, 2008)) são capazes de realizar autopropulsão para gerar movimento. O movimento individual de *E. coli* pode ser aproximado em períodos de deslocamento em linha reta (chamados de *run*) e interrompidos por breves tomadas de movimento rotacional (chamados de *tumble*) Ver Fig. 30. O tempo de *run*

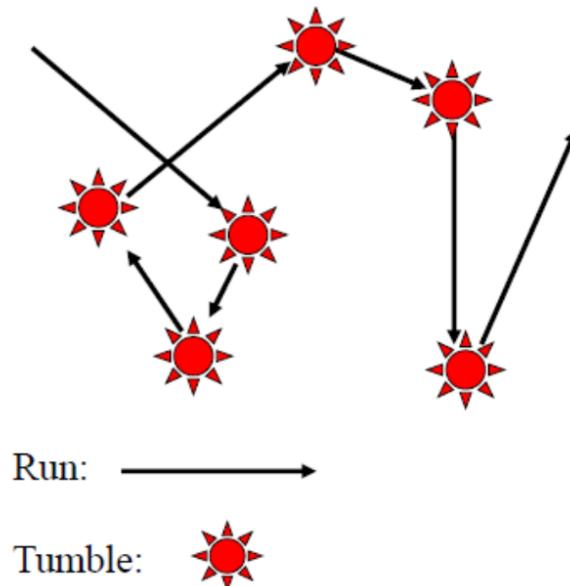


Figura 30: Esquematização da dinâmica do modelo *run* e *tumble*.

dura na média cerca de 1s e uma aproximação razoável para a duração do *run* é dada por uma distribuição de Poisson (BERG; BROWN, 1972; BERG, 1993), já o *tumble* pode ser visto como um evento aleatório ocorrendo com uma certa taxa α . Nesse modelo, na prática, pode-se considerar o tempo de duração de um *tumble* como sendo instantâneo ($\tau \rightarrow 0$) (CATES, 2012). A velocidade v de autopropulsão pode ser considerada praticamente constante e a difusão constante desse processo estocástico pode ser portanto considerada:

$$D = \frac{v^2}{\alpha d}, \quad (\text{B.18})$$

onde d é a dimensionalidade espacial.

Uma maneira importante pela qual as bactérias respondem localmente a presença de alimentos é por divisão celular (quando o alimento é abundante) ou morte celular (quando se esgota). A dinâmica resultante é frequentemente modelada por uma equação para ρ , a densidade bacteriana local, como:

$$\dot{\rho} = A\rho \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \quad (\text{B.19})$$

onde a densidade ρ_0 depende das condições ambientais e representa o mais alto nível de população sustentável nessas condições. Se a densidade for menor que ρ_0 a população cresce, se estiver acima de ρ_0 ela decai. O modelo 1D para a dinâmica *run* e *tumble* idealizado e formulado por Schnitzer será abordado agora. Consideramos uma partícula confinada ao eixo x , e sendo $R(x,t)$ e $L(x,t)$ as densidades de probabilidade de encontrá-la em x movendo-se para a direita ou para a esquerda, respectivamente. Tomamos também ambas as velocidades $v_{L,R}$ e as taxas de *tumble* $\alpha_{L,R}$ em geral diferentes para o movimento para a esquerda e direita e assumindo que a duração do *tumble* é nula. Podemos observar que metade de todos os *tumbles* são ineficazes para alterar a direção do movimento, ou seja, convertem R em L e L em R . Então, uma vez que os *tumbles* são aleatórios e eventos independentes temos:

$$\dot{R} = -(v_R R)' - \alpha_R \frac{R}{2} + \alpha_L \frac{L}{2} \quad (\text{B.20})$$

$$\dot{L} = (v_L L)' + \alpha_R \frac{R}{2} - \alpha_L \frac{L}{2} \quad (\text{B.21})$$

Podemos também obter uma equação de difusão para a densidade de probabilidade de uma partícula $p \equiv R + L$:

$$\dot{p} = (Dp' - Vp)' \quad (\text{B.22})$$

Um modelo computacional mais recente e proposto para a dinâmica do tipo *run* e *tumble* pode ser visto em (LEE *et al.*, 2019). Algumas regras para esse modelo são estipuladas:

1. A partícula autopropulsora não muda sua direção enquanto está em *run*;
2. A partícula mantém a velocidade de autopropulsão constante enquanto está em *run*;
3. A partícula não se desloca enquanto está em *tumble*;

Nesse modelo, defini-se a chamada função de massa de probabilidade (P) para uma partícula transitar entre os movimentos tipo *run* e *tumble* para um dado número de en-

saios k que é fornecido pela chamada função distribuição geométrica, que nada mais é que uma versão discreta da função distribuição radial:

$$P(k; q_{r/t}) = (1 - q_{r/t})^{k-1} q_{r/t}, \quad (\text{B.23})$$

para $k = 1, 2, 3, \dots$ e com $0 < q_{r/t} < 1$, $q_{r/t}$ é uma taxa de rescisão para um determinado estado (r para *runs* e t para *tumbles*). O número médio de ensaios ($k_{r/t}$) é:

$$\langle k_{r/t} \rangle_k = \frac{1}{q_{r/t}}, \quad (\text{B.24})$$

- Modelo de Toner-Tu

A teoria de Toner e Tu para o modelo de *flocking* de Vicsek foi proposta em 1995. O modelo de Toner e Tu considera uma coleção de PA com velocidade fixa (em módulo) exibindo um tipo de transição de fase fora do equilíbrio a partir de um estado desordenado em baixa densidade ou alto ruído para um estado dito ordenado. Toner e Tu formularam seu modelo baseando-se em considerações de simetria.

O modelo de Toner-Tu é classificado como um modelo hidrodinâmico (“wet active matter”) devido às suas semelhanças com as equações que descrevem o comportamento de fluidos na hidrodinâmica. Embora seja aplicado a sistemas de partículas autopropelidas, em vez de fluidos reais, ele compartilha certas características fundamentais com a hidrodinâmica. Uma das características essenciais do modelo de Toner-Tu é a consideração das interações de longo alcance entre as partículas. Assim como nas equações da hidrodinâmica, onde as forças de pressão atuam em um fluido e se propagam a grandes distâncias, no modelo de Toner-Tu, as partículas interagem através do alinhamento de suas direções de movimento, o que também pode ocorrer a grandes distâncias. Essa interação de longo alcance é uma propriedade chave dos sistemas hidrodinâmicos.

Além disso, o modelo de Toner-Tu incorpora uma descrição do fluxo de momento, semelhante às equações da hidrodinâmica. As partículas autopropelidas possuem velocidades e direções de movimento que podem ser modificadas pela interação com outras partículas. Essa modificação no movimento das partículas é análoga à transferência de momento em um fluido, onde o movimento das partículas individuais é influenciado pelas forças exercidas pelas partículas vizinhas. Outro aspecto que aproxima o modelo de Toner-Tu da hidrodinâmica é a capacidade de estudar fenômenos coletivos e transições de fase. As-

sim como na hidrodinâmica, onde ocorrem fenômenos como turbulência, formação de vórtices e transições de fase, o modelo de Toner-Tu também exhibe comportamentos coletivos emergentes e transições de fase quando determinadas condições são satisfeitas.

Uma vez que as partículas estão em movimento sobre um substrato por fricção, o único domínio conservado é o número de densidade $\rho(\vec{r}, t)$ de PA. Além disso, para descrever a probabilidade de estados com ordenação polar, deve-se considerar a dinâmica do vetor campo de polarização $\vec{p}(\vec{r}; t)$. Esses campos podem ser definidos em termos da posição $\vec{r}_n(t)$ de cada PA e o vetor unitário $\hat{v}_n(t)$ denotando a orientação da velocidade de cada partícula como:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)), \quad (\text{B.25})$$

$$\vec{p}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\rho(\vec{r}, t)} \sum_n \hat{v}_n(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_n(t)). \quad (\text{B.26})$$

Apesar de estarmos lidando com sistemas fora do equilíbrio, escrevemos as equações em uma forma em que os termos podem ser vistos como uma resultante de uma energia livre funcional F_p :

$$\partial_t \rho = -\nabla \cdot (v_0 \rho \vec{p}), \quad (\text{B.27})$$

$$\partial_t \vec{p} + \lambda_1 (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{p} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\delta F_p}{\delta \vec{p}} + \vec{f}, \quad (\text{B.28})$$

onde v_0 é a velocidade de autopropulsão das PA, γ é um tipo de viscosidade rotacional, e γ_1 é um parâmetro que controla a intensidade do termo $\lambda_1 (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{p}$. O último termo do lado direito da equação acima capta as flutuações e é considerado como sendo *branco*, um ruído Gaussiano, com média zero e correlações dadas por:

$$\langle f_\alpha(\vec{r}, t) f_\beta(\vec{r}', t') \rangle = 2\Delta \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (\text{B.29})$$

A energia livre F_p é dada por:

$$F_p = \int_r \left\{ \frac{\alpha(\rho)}{2} |\vec{p}|^2 + \frac{\beta}{4} |\vec{p}|^4 + \frac{K}{2} (\partial_\alpha p_\beta)^2 - v_1 \nabla \vec{p} \frac{\delta \rho}{\rho_0} + \frac{\lambda}{2} |\vec{p}|^2 \nabla \vec{p} \right\} d\vec{p}, \quad (\text{B.30})$$

onde ρ_0 é a densidade média e $\delta_\rho = \rho - \rho_0$.

APÊNDICE C – PROPRIEDADES MEDIDAS EM MATÉRIA ATIVA

- Deslocamento Quadrático Médio

Em Dinâmica Molecular, uma propriedade de medida dinâmica é uma característica do sistema que varia no tempo. Na tentativa de caracterizar a difusão do sistema, podemos calcular o chamado Deslocamento Quadrático Médio (DQM). O DQM é uma medida da capacidade de dispersão (difusão) das partículas no sistema, ela representa a média dos quadrados dos deslocamentos em relação à uma posição anterior de referência de cada partícula, a saber:

$$\langle \Delta \vec{r}(t)^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\vec{r}_i(t + \delta t) - \vec{r}_i(t)]^2 \right\rangle_{\delta t}, \quad (\text{C.1})$$

onde $\vec{r}(t)$ é a posição da *iésima* partícula do sistema no tempo t , $\vec{r}_i(t + \delta t)$ é sua posição após um tempo δt , N é o número total de partículas do sistema, e $\langle \dots \rangle_{\delta t}$ representa uma média temporal no intervalo de tempo δt . Para caracterizar qualitativamente o sistema

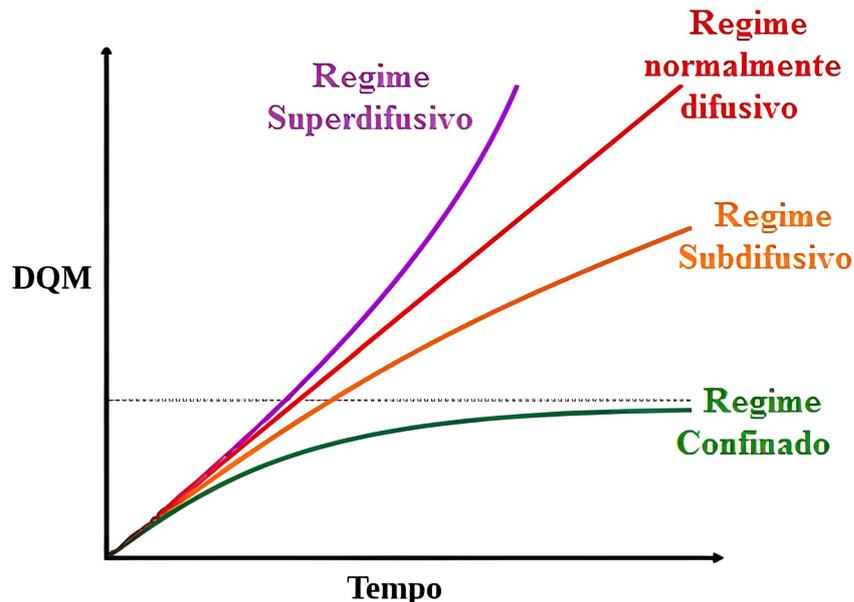


Figura 31: Exemplos dos regimes de difusão que podem ser caracterizados com o DQM no tempo.

com relação a medida do DQM, temos as seguintes faixas de regime (ver Fig. 31) e comportamento já definidos na literatura, a saber:

1. Regime Confinado

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Delta \vec{r}(t)^2 \rangle = \langle \vec{r}_c^2 \rangle,$$

2. Regime Subdifusivo

$$\langle \Delta \vec{r}(t)^2 \rangle \propto \Delta t^\alpha, 0 < \alpha < 1,$$

3. Regime de Difusão Normal

$$\langle \Delta \vec{r}(t)^2 \rangle = 2D\Delta t^1,$$

4. Regime Superdifusivo

$$\langle \Delta \vec{r}(t)^2 \rangle \propto \Delta t^\alpha, \alpha > 1,$$

- Parâmetro de Ordem (PO)

A principal motivação para cálculo do parâmetro de ordem em sistemas ativos aqui estudados é verificar a existência de alguma transição de fase cinética como a observada no estudo original de Vicsek (análise do surgimento de movimento ordenado em um sistema de PA com regra de alinhamento) (VICSEK *et al.*, 1995a).

Podemos caracterizar transições de fase dinâmica em SA afim de localizar movimento local (ordenado ou desordenado) em vórtice (partículas com movimento em torno dos obstáculos) através de um parâmetro de ordem. A ideia aqui é localizar a formação de vórtices com relação a fração de ocupação (ϕ) que nada mais é que a razão entre a área total das partículas pela área total disponível nos arredores, e a intensidade do ruído (η) das PA, mesmo na ausência de regras de alinhamento, ou seja, o parâmetro a ser calculado pode evidenciar o surgimento de vórtices em sistemas ativos apenas pelo comportamento coletivo das partículas em meio a obstáculos.

Definiremos, portanto, o parâmetro de ordem, que caracteriza o estado ordenado ou desordenado do sistema. Esse parâmetro depende da orientação da velocidade da partícula em relação ao vetor perpendicular ao vetor posição que localiza a partícula i em relação ao obstáculo k . É possível definir um parâmetro de ordem que define uma ordem dinâmica no sentido horário ou anti-horário. A análise dessa transição de fase dinâmica (cinética)

deve ser realizada principalmente no que diz respeito a disposição dos obstáculos e a fração de ocupação.

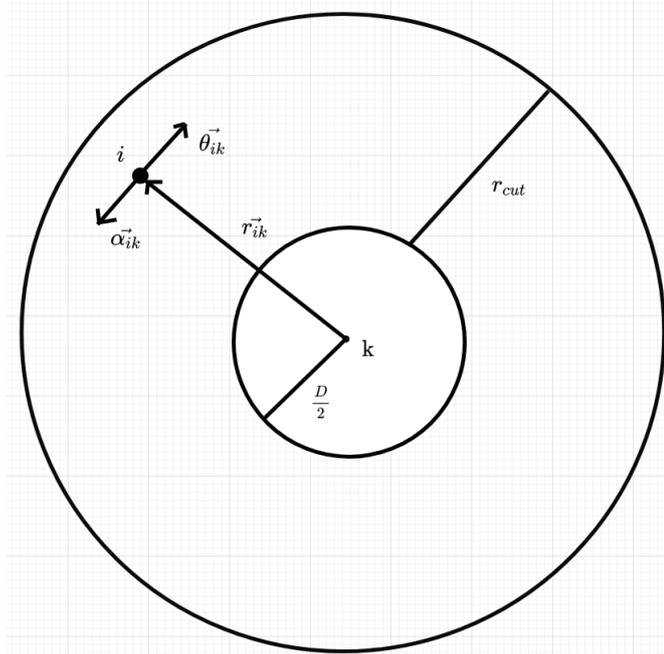


Figura 32: Geométrica considerada no cálculo do Parâmetro de Ordem onde a partícula i distante $|\vec{r}_{ik}|$ do centro do obstáculo k de diâmetro $\frac{D}{2}$ e raio de corte r_{cut} .

Para calcular o Parâmetro de Ordem usamos o seguinte método, a saber (ver Fig. 32):

1. Checamos se a partícula i está dentro do raio de corte r_{cut} ao redor do obstáculo k usando a condição:

$$(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 \leq \left(\frac{D}{2} + r_{cut}\right)^2 \quad (\text{C.2})$$

2. Calculamos o produto interno entre \vec{v}_i (velocidade da partícula i) e o vetor unitário perpendicular a \vec{r}_{ik} (vetor separação entre a partícula i e o centro do obstáculo k) $\vec{\theta}_{ik}$. Os vetores \vec{r}_{ik} , $\vec{\theta}_{ik}$ (sentido horário) e $\vec{\alpha}_{ik}$ (sentido anti-horário) são dados por:

$$\vec{r}_{ik} = (x_i - x_k)\hat{\mathbf{i}} + (y_i - y_k)\hat{\mathbf{j}}, \quad (\text{C.3})$$

$$\vec{\theta}_{ik} = (y_i - y_k)\hat{\mathbf{i}} - (x_i - x_k)\hat{\mathbf{j}}, \quad (\text{C.4})$$

$$\vec{\alpha}_{ik} = -(y_i - y_k)\hat{\mathbf{i}} + (x_i - x_k)\hat{\mathbf{j}}, \quad (\text{C.5})$$

3. O Parâmetro de Ordem que indica um movimento em vórtex ao redor do obstáculo k é definido por:

$$\Phi_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} \frac{\vec{v}_i \cdot \vec{\theta}_{ik}}{|\vec{v}_i| |\vec{\theta}_{ik}|}, \quad (\text{C.6})$$

onde N_k é o número de partículas ao redor do obstáculo k ;

4. O Parâmetro de Ordem geral (Φ) será a soma dos Φ_k 's:

$$\Phi = \frac{1}{N_{obs}} \sum_{j=1}^{N_{obs}} \Phi_j, \quad (C.7)$$

onde N_{obs} é o número de obstáculos. Pela definição, o parâmetro de ordem é um valor que pode variar no intervalo entre -1 (sentido anti-horário para valores com $\Phi < 0$) a 1 (sentido horário para valores com $\Phi > 0$).

APÊNDICE D – TRABALHO PUBLICADO

PHYSICAL REVIEW E **101**, 022601 (2020)

Controlling the transport of active matter in disordered lattices of asymmetrical obstacles

A. D. Borba¹, Jorge L. C. Domingos^{1,*}, E. C. B. Moraes^{2,3}, F. Q. Potiguar³, and W. P. Ferreira¹

¹Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia, Coordenação de Ensino Médio, Tucuruí, Pará, Brazil

³Universidade Federal do Pará, Faculdade de Física, ICEN, Av. Augusto Correa, 1, Guamá, 66075-110, Belém, Pará, Brazil

 (Received 15 August 2019; accepted 6 January 2020; published 4 February 2020)

We investigate the transport of active matter in the presence of a disordered square lattice of asymmetric obstacles, which is built by removing a fraction of them from the initial full lattice. We obtain a spontaneous inversion of the net particle current, compared to the usual sense of such a current as a function of the fraction of removed obstacles and particle density. We observed that the negative current regime is the consequence of trapping of particles among the obstacles which favors that more particles move in the negative current direction. The same reasoning applies to the positive current regime as well. We show a calculation that partially reproduces our numerical results, based on the argument that the mean current is given by the product of the mean speed and the mean number of travelers in each direction; the breakdown of this assumption is responsible for the failure of our calculation to reproduce the initial negative current regime.

DOI: [10.1103/PhysRevE.101.022601](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.022601)

I. INTRODUCTION

Active matter is the generic definition for particles that generate motion either by consuming their internal energy or even by utilizing the energy from the environment [1–5]. Physical models that simulate such particles are divided between flocking (Vicsek model) [6,7], and angular Brownian motion (ABM) types [8,9] (which also includes run-and-tumble dynamics—RTD [10,11]). Among the various phenomena associated with such systems, the transport properties are the most investigated ones. It is known to be possible to rectify these particles' motion when they are in an environment in which there is an intrinsic asymmetry, such as a regular lattice of funnel-shaped [7,10,12–14] or half-circular obstacles [15].

Active systems exhibit rich and intriguing nonequilibrium properties, including emergent structures with collective behavior distinguishing from that of the individual constituents. More recently, there has been an increasing interest in the collective behavior of active matter in a disordered environment, defined as a system in which translational invariance is broken in some way. Some examples are seen in [16–22]. Here, the invariance is broken by adding several fixed, randomly positioned, obstacles (in contrast, Refs. [16,17] also deal with moving obstacles). Other interesting features are observed, ranging from the existence of an optimal angular noise value that maximizes particle motion as a function of the obstacle density [16], hindering of the particle's motion (trapping [18], clogging [19], and flocking suppression [20]) to a rich relation between the mean search time of a target with the disorder [21]. We propose to tackle a similar problem—the collective behavior of active particles in a disordered environment. We start from an *ordered* lattice of obstacles and we introduce the disorder by randomly removing a fraction of them. Our

main interest is to investigate the transport of particles in a setup in which the translational invariance is broken both locally, due to the asymmetric obstacles, and globally, due to the resulting random arrangement of obstacles. In [15], it was shown that particles travel, on average, along the direction of the normal to the flat side of the half-circular obstacles (from now on, the positive flow direction) when they are arranged in a regular lattice. Our main observation is that, for low disorder, there is a *spontaneous inversion* of the current, i.e., particles tend to move in the negative flow direction with no external fields, which is opposite, for instance, to what was obtained in [14]. Current inversion was also reported in [23] for particles moving in periodic substrates at high densities, and for isolated chiral active particles moving in periodic channels [24].

Our results are relevant for controlling active matter, e.g., in microfluidic devices [12], or using arrays of optical tweezers [25,26]. As an extension of the present work, the sorting of particles in a binary system can be studied. It is interesting to investigate how particles, e.g., with distinct noises, respond to local and global asymmetries such as the ones introduced here. Notice that high noise particles have less chance to stick in surfaces when compared to low noise particles, being less affected by the local asymmetry and opening the possibility to separate the distinct types of particles, which is an experimentally demanding issue. Studies of such kind were already conducted using a single wedge-shaped trap [27] (under the more general characterization of trapping active particles with hard obstacles), and ours provides a possible new path for separating mixtures of particles based on their noise differences.

This manuscript is organized as follows. Our model system is presented in Sec. II. The numerical results and discussion are presented in Sec. III. Our conclusions are given in Sec. IV.

*jorgecapuan@fisica.ufc.br

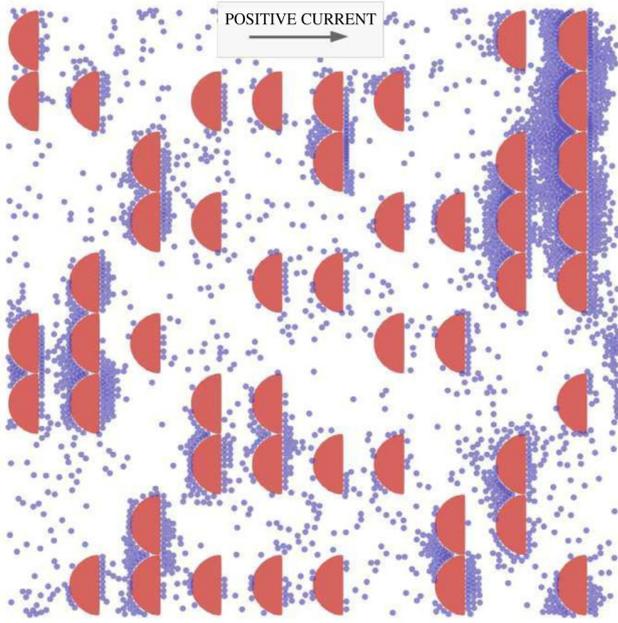


FIG. 1. Snapshot of the system for a ratio of occupied area $\phi = 0.3$ and fraction of removed obstacles $f = 0.50$. The positive direction of mean particle current (positive flow direction) is also indicated.

II. MODEL

Our model consists of a two-dimensional (2D) system of N soft active disks in a L^2 box, in which there are half-circles of diameter D arranged in a square lattice of unit cell length D , initially with $N_0 = (L/D)^2$ obstacles. The obstacles are oriented in such a way that the positive flow direction is the $+x$ direction. This means that neighboring obstacles touch each other along their diameters (y axis), blocking the motion along x axis; see Fig. 1. We introduce disorder by randomly removing a fraction f of the obstacles.

The disks interact through a linear spring force law $\mathbf{F}_{ij} = \kappa(d_{ij} - r_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij}$, for $r_{ij} < d_{ij}$ (otherwise, $\mathbf{F}_{ij} = 0$), with $i \neq j = [1, N]$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ is the distance between particles, and $d_{ij} = (d_i + d_j)/2$ is the mean diameter of a contact; for a disk-disk contact: $d_{ij} = d$; for a disk-obstacle contact: $d_{ij} = (d + D)/2$ for the curved side and $d_{ij} = d/2$ for the flat side. To give an idea of the order of magnitude of the dimensions involved in an experimental realization of our study, we compare to previous experimental studies of active rods [27] in which the typical rod length is about $d = 4.5$ mm, while the trap arms are 10 times larger, 4.5 cm; or to a study of mixtures of such rods and beads [28] in which the last ones are about 0.8 mm in diameter; finally, in the experiment of [12] with bacteria, the arms of the wedge shaped traps were 0.027 cm; hence the typical length scale for these particles and obstacles is between 1.0 μm and 1.0 cm, while D would be between 10 times those two limit values. The disks follow the usual set of active Langevin equations. For a given disk i [9]:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mu\mathbf{F}_i + \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\xi}_i(t), \quad \frac{d\theta_i}{dt} = \eta_i(t), \quad (1)$$

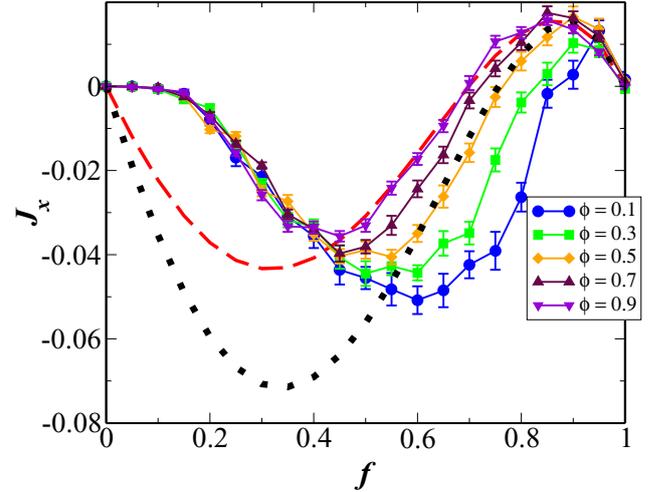


FIG. 2. Mean net particle current J_x as a function of f for several area fractions ϕ . The red dashed line and black points are obtained from Eq. (4) for $v' = 1.50 \times 10^{-4}$, $\langle c_+ \rangle = 2.00$, $\langle c_- \rangle = 1.77$, and $v' = 3.00 \times 10^{-4}$, $\langle c_+ \rangle = 1.35$, $\langle c_- \rangle = 1.00$, respectively.

where μ is the motility, $\mathbf{F}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij}$, $\mathbf{v}_i = v_o(\cos \theta_i \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta_i \hat{\mathbf{j}})$ is the active velocity, v_o is its magnitude, and θ_i is its random direction; $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ is a random thermal velocity and η_i is the random angular velocity. Both quantities are Gaussian white noises that follow $\langle \boldsymbol{\xi}_i(t) \rangle = 0$ and $\langle \xi_{i\alpha}(t) \xi_{j\beta}(t') \rangle = (2\xi \Delta t)^{1/2} \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$, $\alpha, \beta = x, y$ and $\langle \eta_i(t) \rangle = 0$ and $\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = (2\eta \Delta t)^{1/2} \delta_{ij} \delta(t - t')$; ξ and η are the noise intensities; since we consider the athermal model of [9], we set $\xi = 0$. In all simulations we employ periodic boundary conditions (PBC) along x, y directions. We integrate Eq. (1) using a second order, stochastic Runge-Kutta algorithm [29]. The values of the model parameters are $d = 1$ and $v_o = 1$, which set length and time units, $D = 10$, $\mu = 1$, $L = 100$, $\kappa = 10$ (for a disk-obstacle contact $\kappa_{\text{obs}} = 1000$), $f = [0.05, 1.00]$, with $\Delta f = 0.05$, and $\eta = 0.001$.

We define here a mean net particle current (average velocity) as

$$\mathbf{J} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i \right\rangle, \quad (2)$$

where \mathbf{u}_i is the right-hand side of the equation for \mathbf{r}_i , the brackets denote averages over time and distinct realizations, as a function of f , and $\phi = N\pi/4L^2[1 - (1 - f)\pi/8]$, which is the area fraction defined as the ratio between the area of the disks by the available area (the difference between the total area and the remaining lattice area). In our simulations, we considered $\phi = [0.1, 0.9]$ and $\Delta\phi = 0.1$. Each point in Figs. 2 and 3 is an average over 30 independent realizations of both the particles' initial state as well as the obstacle removal.

III. RESULTS AND DISCUSSION

In Fig. 2 we show the x component of the net particle current, i.e., J_x , as a function of f for all ϕ . The mean perpendicular component, J_y , is zero in all cases and its results are omitted here. This result indicates that disorder, at least the one considered here, does not play a significant

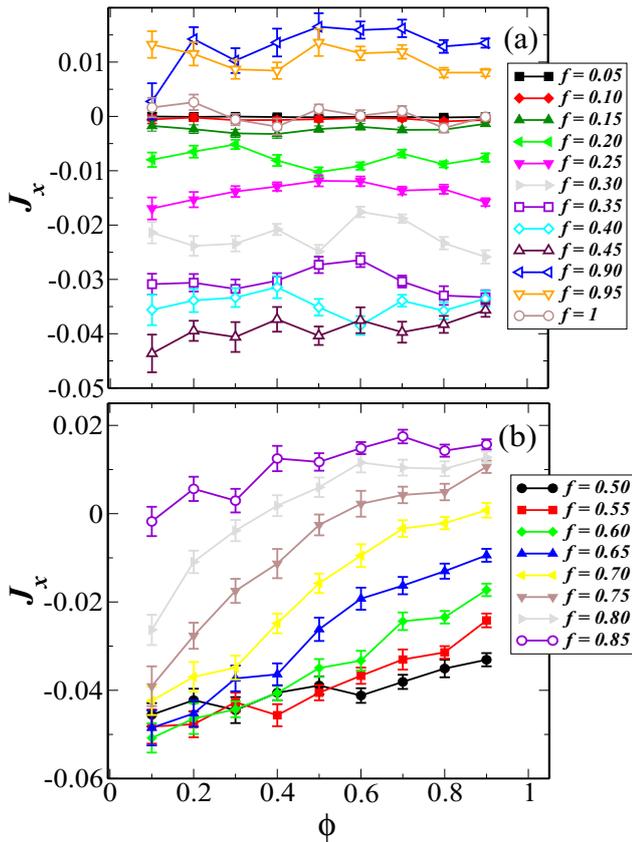


FIG. 3. Mean net particle current J_x as a function of the area fraction ϕ , for different values of f in the two regimes: (a) J_x independent of ϕ and (b) J_x monotonically increasing with ϕ .

role in generating a net current; only the asymmetric shape of the obstacles is important. As can be observed in Fig. 2, the mean current has two regimes: the first one, $J_x < 0$, for low and intermediate f , indicating an *inversion* of the net particle current; the second regime is observed for high f , where the net current follows the positive flow direction, as reported before [15]. The beginning of the negative regime has a vanishing current up to $f \approx 0.10$. This is an evidence of a minimum number of obstacles to be removed in order to have a nonvanishing current, since, for $f = 0$, there is no space for particles to move through the lattice. This minimum number, in this square lattice, equals the number of its columns. Hence, for our setup, we have L/D columns, and the minimum fraction we need is $f_{\min} = D/L = 0.10$, which is close to the value we observed in our simulations. Note that for f slightly larger than f_{\min} the current should not be very large since the majority of defective lattices will not have a percolated path along x . These two regimes, for negative and positive currents, change continuously, and it occurs at a ϕ -dependent fraction, $f^*(\phi)$, which decreases with increasing ϕ . Also, the extrema of J_x in both regimes, the negative minimum $J_{\min} < 0$ and the positive maximum J_{\max} , also depend on ϕ : as the area fraction increases, $|J_{\min}|$ decreases as well as the f value in which it occurs, namely f_{\min} . For J_{\max} , it increases with ϕ , although not as strongly as the decrease of $|J_{\min}|$, and its corresponding f value, namely f_{\max} , decreases with ϕ , just as f_{\min} .

To explain the first regime ($J_x < 0$), we go back to Fig. 1. We see that, where two obstacles touch, they form a region where there are, usually, some particles: we call these regions traps. Such accumulation was already seen in studies of the force between two bodies in a bath of active matter [30,31]. Moreover, only particles drifting in the $+x$ direction are able to reach such traps by hitting the obstacles, then sliding along their surfaces, a behavior largely reported for active matter [5,7,12,15,32–34]. On the other side of the obstacles, there is a similar situation: the particles reach the flat sides and slide along them, i.e., along the $\pm y$ directions. In this case, only particles traveling in the $-x$ direction will reach the flat sides of the obstacles. Therefore, we see that only those particles that are not trapped in any of these two structures will contribute to J_x . Therefore, we argue that there are more particles trapped in between the obstacles than the number of them stuck to the flat sides. This imbalance leads to more particles moving towards $-x$, yielding a negative net current.

In view of this idea, we obtained an expression relating J_x to f based on this argument (see details in the Appendix). From Eq. (A2), we can write the mean net x current as $J_x = \langle J_+ \rangle - \langle J_- \rangle$, where J_{\pm} are the currents in the $\pm x$ directions. We assume that such currents are given by the following expression:

$$J_x = \langle n_+ \rangle \langle v_+ \rangle - \langle n_- \rangle \langle v_- \rangle, \quad (3)$$

where n_{\pm} are the number of particles that move in the $\pm x$ directions and v_{\pm} their respective velocities. Equation (3) takes into account that these two quantities are statistically independent. From this basic hypothesis, we were able to reproduce, with appropriate values of our parameters, the current regime for $f \geq f_{\min}$. Below f_{\min} , our calculation fails because, as we argue below, the statistical independence between these two quantities does not occur. We further assume that both positive and negative mean velocities have the same value. We also assume reasonable dependencies on f for $\langle v_{\pm} \rangle$, and we estimate the number of particles in each trap to the layers of particles that form around each obstacle (as seen in Fig. 1), and we end up with

$$J_x = v' \left(\frac{L}{D} \right)^2 (1-f) f \left[\pi \frac{D+d}{2d} (f^2 - 1) \langle c_+ \rangle + \frac{D}{d} \langle c_- \rangle \right], \quad (4)$$

where v' is the x component of the self-propelling velocity, $\langle c_+ \rangle$ is the mean number of layers of particles around the curved side, and $\langle c_- \rangle$ is the mean number of layers of particles around the flat side of each obstacle. In this calculation, we estimate the number of particles per layer on the curved side to the value of the first layer of particles. It is worth noticing that the resolution of the mean current in $\pm x$ components that lead to Eq. (4) works well for large η , since the mean current vanishes, but that is not so obvious for low noise. We do feel, though, that this is correct, at least for some range of our parameters, because we performed our simulations at an already low noise intensity, $\eta = 0.001$, and from Fig. 2, we see that our theoretical formula reproduces the data for most of the range of f .

In Fig. 2, we also plot two examples obtained from Eq. (4) that qualitatively reproduce the results above J_{\min} of the

$\phi = 0.90$ (red dashed) and $\phi = 0.50$ (black dashed) curves. The parameters we use to plot the theoretical results are, for the red curve, $v' = 1.50 \times 10^{-4}$, $\langle c_+ \rangle = 2.00$, and $\langle c_- \rangle = 1.77$. For the black curve, we have $v' = 3.00 \times 10^{-4}$, $\langle c_+ \rangle = 1.35$, $\langle c_- \rangle = 1.00$. Notice that, in both cases $\langle c_+ \rangle > \langle c_- \rangle$, which means that more particles are trapped in the spaces between the obstacles as compared to those stuck on the flat sides, which is consistent with our original argument. Also, we had to use a smaller mean velocity in order to reproduce the curve for larger ϕ , which is also consistent with the fact that there are more particles in the system, and this will, eventually, diminish the space available for motion, which might lead to a reduction of such velocity. Finally, from the fact that the current vanishes at f^* , and using Eq. (4) with $J_x = 0$, we end up with a single free parameter in our formula for J_x , besides v' , which is either $\langle c_- \rangle$ or $\langle c_+ \rangle$. Calculating the ratios $\langle c_- \rangle / \langle c_+ \rangle$ from Eq. (4) and from our estimated values, we see that they do not differ significantly, and they generate similar curves to those seen in Fig. 2.

As mentioned above, Eq. (4) fails to reproduce the numerical results of J_x below J_{\min} . We argue that this is due to the breakdown of our first assumption—the independence between $\langle n_{\pm} \rangle$ and $\langle v_{\pm} \rangle$. We may understand this breakdown as the consequence of the small free space available for motion at such low f : there is a larger chance of occurrence of large obstacle clusters (see upper right of Fig. 1 for an example of a five-obstacle cluster); given that, most of the particles will be around an obstacle, and not able to freely move, and this will render our assumption incorrect. This dependence between $\langle n_{\pm} \rangle$ and $\langle v_{\pm} \rangle$ also explains the relation between J_x and ϕ at low f ; see below.

Along the same reasoning, we see that the $J_x > 0$ range can be seen as the consequence of the more frequent occurrence of small cluster aggregates and isolated obstacles. We have checked this by generating several distinct disordered lattices for a given f and measuring the proportion of cluster aggregates.

In each of such structures, there are less traps to hinder the motion along the $+x$ direction, as discussed above, but there is still the flat side to block the path of particles moving along the $-x$ direction. Also, for an isolated obstacle, since particles slide along its surfaces, there is no restriction for motion along $+x$ direction. Therefore, at this high f regime, there are more particles traveling in the positive flow direction, yielding a positive current [see the Appendix for other plots of Eq. (4)].

In Fig. 3, we show the dependence of J_x on ϕ . We identify two regimes for such dependence: one that the current is independent on ϕ , Fig. 3(a), and the other in which J_x increases with increasing ϕ , Fig. 3(b). To understand these results, we see that the effect of adding more particles to this system is to increase the number of particles that contribute to J_x , as well as decreasing the free space for motion, since some of the particles will get stuck in the traps in both sides of the obstacles. For low f , the free space is very limited, as stated above. Hence a large number of particles that contribute to the current will be compensated by a smaller mean velocity, and J_x will not depend on ϕ . Note, again, that this explanation is, essentially, the breakdown of the assumption of the independence between the number of particles and their velocities. The independence of f on ϕ is also seen at

large ϕ and intermediate f , or for $f \rightarrow 1$. In these cases, the previous explanation does not hold. But, for such a strong disorder, there will be a majority of isolated obstacles. Since a nonvanishing current is determined by the interaction with the curved side [15], it is reasonable to assume that such plateaus in the curves for Fig. 3(b) are due to a saturation of the isolated obstacles in their capacity to direct particle motion. If we had larger obstacles, we argue that such plateaus would occur at higher ϕ . For larger f , where the aggregation is smaller, and there is a growing number of isolated obstacles, as already indicated above, adding more particles will not sensibly decrease the free space, and the particle mean velocity will be unaffected by a larger ϕ . In this case, before the aforementioned saturation limit, the current will increase with the number of particles, i.e., it will increase with ϕ .

Finally, we varied the shape of the obstacle in order to investigate how distinct local symmetries affect the results: we used circles with $D = 10$, and wedges whose sides are the ones of a square inscribed in the half-circles, and whose diagonal coincides with the diameter of the obstacles (this gives an angle of aperture of 90°). We also used half-circles of diameter $D = 9$, so that we investigate whether the traps between the obstacles are really those responsible for the current inversion seen in Fig. 2. For the disordered lattice of circular objects, there is no net current in any case; even if we add an external field, the current will be only along this field. Again, local symmetry is the key ingredient to rectify the particle motion. For the disordered lattice of half-circles with $D = 9$, thus allowing horizontal space between two adjacent obstacles, there is no spontaneous inversion of the current; we only observe $J_x > 0$. This clearly validates our explanation that this phenomenon is due to the imbalance of particles traveling in both directions due to the traps provided by the obstacles. For the disordered lattice of wedges, there is the inversion, but the magnitude of the inverted (negative) current is smaller than that reported to the half-circles (see Fig. 4),

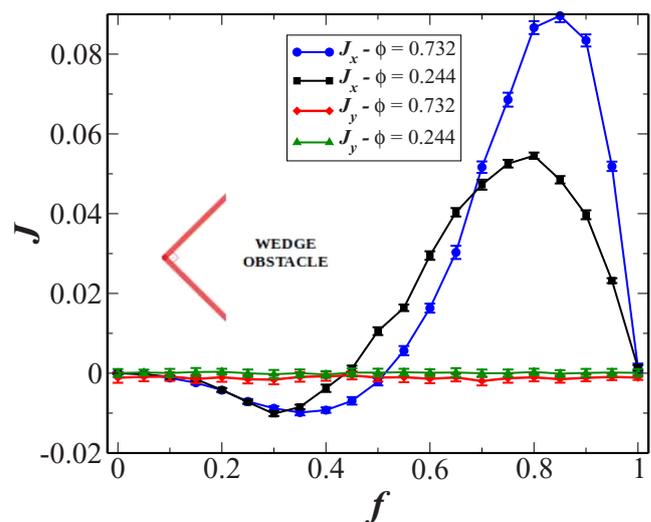


FIG. 4. x and y components of the mean particle current, J_x and J_y , as a function of f for distinct values of the area fraction ϕ . We consider wedges as obstacles. The aperture angle of the wedges is 90° .

while the positive currents are larger than those of Fig. 2. Besides, the minimum negative currents are rather insensitive to variations in density, while the maximum positive currents are larger for larger densities, a feature not seen in Fig. 4. The reason is that the concave side of the wedges trap more particles than the flat side of half-circles, reducing the current opposite to the positive flow direction. On the other hand, the convex sides of both wedge and half-circle obstacles present similar contribution for the particle current along the positive flow direction. Note that the opening angle of the wedges (90°) favors the trapping [33]. Still, in view of recent results of trapping of active matter in such funnel-shaped obstacles [27,33], there could be a richer phase diagram for this phenomenon, since the wedges have an additional degree of freedom, through their aperture angle, that can be explored.

IV. CONCLUSIONS

We investigated the mean net current \mathbf{J} (average velocity) of active particles interacting with a disordered square lattice of obstacles with the shape of half-circles. The diameter of the obstacles had the same size of the unit cell lattice, forming traps between them. The disorder was introduced by randomly removing a fraction of the obstacles. We observed that the net current along the positive flow direction, i.e., the direction along the normal to the flat sides of the obstacles, at constant area fraction, for low and moderate disorder, presented a *spontaneous inversion*, i.e., particles traveled in the negative flow direction, while at high enough disorder the net current was positive. We argued that such a phenomenon is the result of an imbalance of particles that get trapped in the spaces between the obstacles or get stuck in their flat side. We presented a theoretical calculation that reproduces the data reasonably well for f above the value for which the current has a negative minimum, and it was based on the assumption of statistical independence between particle numbers and mean velocities. For a constant f , the dependence of J_x on ϕ had two regimes: (i) J_x and ϕ are independent parameters; (ii) the current grows with the area fraction. We argued that in the first regime, adding more particles, since the free space is smaller, although that would render more particles that contribute to the current, would decrease their mean velocities in order that both effects compensate each other and the current does not change with ϕ . In the second regime, this relation did not occur because there was more free space than in the first regime, and J_x grew with the number of particles. That is, in the first case there was no statistical independence between the number of particles and their velocities, while in the second, there was such an independence. The negative and positive particle currents, obtained and characterized in more details in a lattice of half-circles, were also observed in a lattice of wedges. In this case, the negative current was smaller than the positive current, which was opposite to the behavior of the particle current in the lattice of convex obstacles (half-circles), and was a consequence of the larger capacity of the wedges to retain particles in their concave side. Our results also point out the possibility of studying such an inversion phenomenon for a lattice of wedges that, given their additional degree of freedom (degree of aperture), could lead to a richer phase diagram for J_x with f and ϕ .

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge financial support from CAPES, CNPq, FAPESP, and FUNCAP (Brazilian agencies); they also thank A. A. Moreira and J. S. Andrade, Jr. for discussions and reading of the manuscript.

APPENDIX: DERIVATION OF J_x IN DISORDERED LATTICES OF ASYMMETRICAL OBSTACLES

The total current (velocity) in a system composed of N particles can be written as

$$\mathbf{J} = \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \right\rangle. \quad (\text{A1})$$

For our system, we are only interested in the x component of this quantity; therefore, we write it as $J_x = \langle J_+ \rangle - \langle J_- \rangle$, where J_\pm are the currents along the $\pm x$ directions. We assume that each of these currents is the product of the number of particles that contribute to its value, i.e., that are trapped, and their velocities, and that both quantities are statistically independent. Therefore, we have

$$J_x = \langle n_+ \rangle \langle v_+ \rangle - \langle n_- \rangle \langle v_- \rangle. \quad (\text{A2})$$

Next, we consider that the averages of $\pm v$ are equal, such that the direction of the net current is determined only by the difference between the number of particles that travel in opposite directions:

$$J_x = \langle v \rangle (\langle n_+ \rangle - \langle n_- \rangle). \quad (\text{A3})$$

Assuming that, on average, half of the particles travel in each direction, we can write each of these average numbers as the difference between $N/2$ and the number of particles that are hindered in their motion due to the obstacles. Therefore, we have

$$\langle n_\pm \rangle = \frac{N}{2} - \langle T_\pm \rangle \langle p_\pm \rangle, \quad (\text{A4})$$

where T_\pm is the number of traps into which a particle might fall and p_\pm is the number of particles in each trap. The number of traps, since they are formed by the obstacles, is a random number because it depends on a particular realization of the disordered obstacle lattice. For the negative direction, where the particles face the flat side of the obstacles, a trap is simply such section of a half-circle. Hence, for a given fraction of removed obstacles f , and since in the beginning we have $(L/D)^2$ obstacles in the lattice, where D is the obstacle diameter, we obtain the following expression for the number of remaining traps in the lattice:

$$\langle T_- \rangle = \left(\frac{L}{D} \right)^2 (1 - f). \quad (\text{A5})$$

For the positive direction, the traps are the spaces between two adjacent obstacles. For each removed obstacle, a trap will be removed as well, unless the obstacle is isolated or placed in between two other obstacles. In the first case, no trap will be removed, while in the second, two traps will be removed. To take into account all these considerations, we simply assume that each removed obstacle corresponds to one removed trap. Therefore, the number of remaining traps for a given f is the

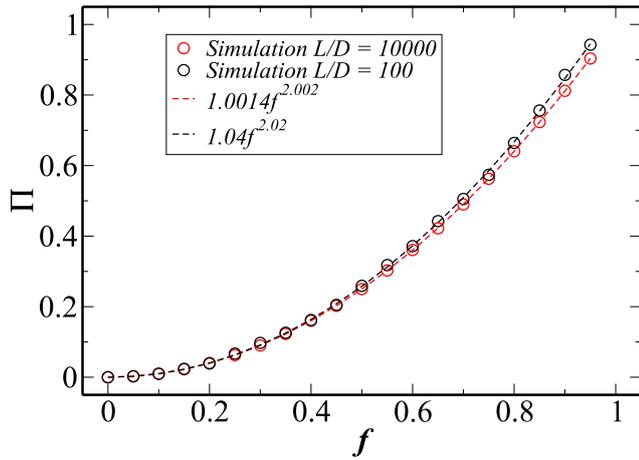


FIG. 5. Occurrence probability of isolated obstacles (diameter D) in the disordered lattice as a function of f for two sizes L of the simulation box. The circles represent the simulation data and the dashed lines represent the fitting functions.

number of remaining obstacles. On the other hand, we know from [15] that isolated obstacles do not trap any particle on the curved side. In fact, particles sliding on the curved side of the obstacle have their motion rectified along the $+x$ direction.

Based on our simulation results, we obtained the probability of occurrence of isolated obstacles as a function of the fraction of removed obstacles f .

This is shown in Fig. 5, where we observe that the probability of occurrence of isolated obstacles depends on f^2 . Therefore, the mean number of remaining isolated obstacles as a function of f is $(L/D)^2(1-f)f^2$, and we define $\langle T_+ \rangle$ as the difference between the total number of remaining obstacles and the number of isolated ones:

$$\begin{aligned} \langle T_+ \rangle &= \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f) - \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)f^2 \\ &= \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)(1-f^2). \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

Combining Eqs. (A4)–(A6) in Eq. (A3), we have the following expression for the mean net particle current:

$$J_x = \langle v \rangle \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)[(f^2-1)\langle p_+ \rangle + \langle p_- \rangle]. \quad (\text{A7})$$

We still need to formulate the dependence of p_{\pm} as a function of f and the packing fraction ϕ of the system. In order to estimate the number of particles per trap, we define the average number of layers of particles around the curved and flat sides of an obstacle, as $\langle c_+ \rangle$ and $\langle c_- \rangle$, respectively. Thus

$$\langle p_+ \rangle = \pi \frac{D+d}{2d} \langle c_+ \rangle, \quad \langle p_- \rangle = \frac{D}{d} \langle c_- \rangle, \quad (\text{A8})$$

where both coefficients on these expressions are the number of particles per layer in each side of an obstacle; for the curved side, we approximate the number of particles per layer, which depends on the layer number, as the number of particles in the first layer. For a low and moderate densities, such approximation is valid. Another assumption is related to the fact

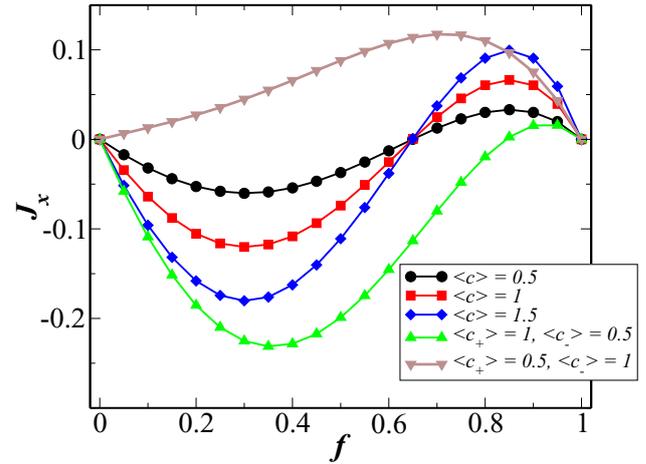


FIG. 6. Mean net particle current J_x as a function of f for $v' = 1.0 \times 10^{-4}$, and distinct values of the model parameters $\langle c_+ \rangle$, $\langle c_- \rangle$, and $\langle c \rangle = \langle c_+ \rangle = \langle c_- \rangle$.

that the velocity should depend on f , since if $f = 0$ all paths are closed and the mean particle current vanishes; therefore, we assume, for the sake of simplicity, that $\langle v \rangle = v'f$, where v' is the x component of the self-propelling velocity, which may also depend on ϕ (we ignore such a dependency in this calculation). Finally,

$$J_x = v' \left(\frac{L}{D}\right)^2 (1-f)f \left\{ [f^2-1] \left(\pi \frac{D+d}{2d} \langle c_+ \rangle \right) + \frac{D}{d} \langle c_- \rangle \right\}. \quad (\text{A9})$$

In Fig. 6 we illustrate Eq. (A9) as a function of f for the condition $\langle c \rangle = \langle c_+ \rangle = \langle c_- \rangle$. We expect $\langle c_{\pm} \rangle$ to be dependent on ϕ . Comparing with our numerical results, we observe that the values of $\langle c_{\pm} \rangle$ which better reproduce Fig. 2 are those cases with $\langle c_+ \rangle > \langle c_- \rangle$, which is expected since we assumed that the mean velocities along each direction are equal. In Fig. 7, we show some cases according to such a condition.

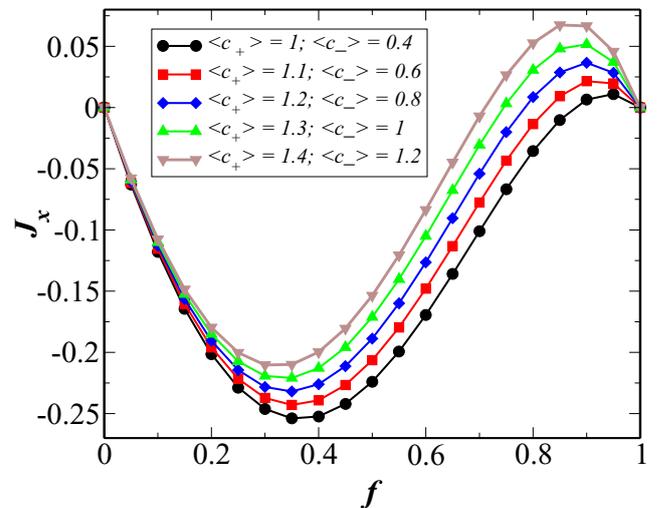


FIG. 7. Mean net particle current J_x as a function of f for $v' = 1.0 \times 10^{-4}$ and distinct values of the model parameters $\langle c_+ \rangle$, $\langle c_- \rangle$.

- [1] J. Toner, Y. Tu, and S. Ramaswamy, *Ann. Phys. (NY)* **318**, 170 (2005).
- [2] S. Ramaswamy, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 323 (2010).
- [3] T. Vicsek and A. Zafeiris, *Phys. Rep.* **517**, 71 (2012).
- [4] M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, and R. A. Simha, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1143 (2013).
- [5] C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Lowen, C. Reichhardt, G. Volpe, and G. Volpe, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 045006 (2016).
- [6] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1226 (1995).
- [7] J. A. Drocco, C. J. Olson Reichhardt, and C. Reichhardt, *Phys. Rev. E* **85**, 056102 (2012).
- [8] J. R. Howse, R. A. L. Jones, A. J. Ryan, T. Gough, R. Vafabakhsh, and R. Golestanian, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 048102 (2007).
- [9] Y. Fily and M. C. Marchetti, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 235702 (2012).
- [10] M. B. Wan, C. J. Olson Reichhardt, Z. Nussinov, and C. Reichhardt, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 018102 (2008).
- [11] J. Tailleur and M. E. Cates, *Europhys. Lett.* **86**, 60002 (2009).
- [12] P. Galajda, J. Keymer, P. Chaikin, and R. Austin, *J. Bacteriol.* **189**, 8704 (2007).
- [13] P. K. Ghosh, V. R. Misko, F. Marchesoni, and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 268301 (2013).
- [14] C. Reichhardt and C. J. Olson Reichhardt, *Phys. Rev. E* **88**, 062310 (2013).
- [15] F. Q. Potiguar, G. A. Farias, and W. P. Ferreira, *Phys. Rev. E* **90**, 012307 (2014).
- [16] O. Chepizhko, E. G. Altmann, and F. Peruani, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 238101 (2013).
- [17] P. Dolai, A. Simha, and S. Mishra, *Soft Matter* **14**, 29 (2018).
- [18] O. Chepizhko and F. Peruani, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 160604 (2013).
- [19] C. Reichhardt and C. J. Olson Reichhardt, *Phys. Rev. E* **90**, 012701 (2014).
- [20] A. Morin, N. Desreumaux, J.-B. Caussin, and D. Bartolo, *Nat. Phys.* **13**, 63 (2017).
- [21] J. Wang, D. Zhang, B. Xia, and W. Yu, *Soft Matter* **13**, 758 (2017).
- [22] D. Yllanes, M. Leoni, and M. C. Marchetti, *New J. Phys.* **19**, 10 (2017).
- [23] D. McDermott, C. Reichhardt, and C. J. O. Reichhardt, *Soft Matter* **12**, 8606 (2016).
- [24] Y. Li, P. K. Ghosh, F. Marchesoni, and B. Li, *Phys. Rev. E* **90**, 062301 (2014).
- [25] W. Yang, V. R. Misko, J. Tempere, M. Kong, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **95**, 062602 (2017).
- [26] W. Yang, V. R. Misko F. Marchesoni, and F. Nori, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 264004 (2018).
- [27] N. Kumar, R. K. Gupta, H. Soni, S. Ramaswamy, and A. K. Sood, *Phys. Rev. E* **99**, 032605 (2019).
- [28] N. Kumar, H. Soni, S. Ramaswamy, and A. K. Sood, *Nat. Commun.* **5**, 4688 (2014).
- [29] R. L. Honeycutt, *Phys. Rev. A* **45**, 600 (1992).
- [30] R. Ni, M. A. Cohen Stuart, and P. G. Bolhuis, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 018302 (2015).
- [31] L. R. Leite, D. Lucena, F. Q. Potiguar, and W. P. Ferreira, *Phys. Rev. E* **94**, 062602 (2016).
- [32] G. Volpe, I. Buttinoni, D. Vogt, H.-J. Kummerer, and C. Bechinger, *Soft Matter* **7**, 8810 (2011).
- [33] A. Kaiser, H. H. Wensink, and H. Lowen, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 268307 (2012).
- [34] S. C. Takatori, W. Yan, and J. F. Brady, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 028103 (2014).