



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Daniel Canavello Moura de Araújo

Fases Coletivas Emergentes de Matéria Ativa Browniana: Efeitos do Torque Restaurador

Recife
2021

Daniel Canavello Moura de Araújo

Fases Coletivas Emergentes de Matéria Ativa Browniana: Efeitos do Torque Restaurador

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional

Orientador: Prof. Dr. Clécio Clemente de Souza Silva

Recife
2021

Catálogo na fonte
Bibliotecário Cristiano Cosme S. dos Anjos, CRB4-2290

A663f Araújo, Daniel Canavello Moura de
Fases coletivas emergentes de matéria ativa browniana: efeitos do torque restaurador / Daniel Canavello Moura de Araújo. – 2021.
52 f.: il., fig.

Orientador: Clécio Clemente de Souza Silva.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN, Física, Recife, 2021.

Inclui referências.

1. Física Teórica e Computacional. 2. Matéria ativa. 3. Sistemas interagentes. 4. Movimento browniano. I. Silva, Clécio Clemente de Souza (orientador). II. Título.

530.1

CDD (23. ed.)

UFPE- CCEN 2021 - 123

DANIEL CANAVELLO MOURA DE ARAÚJO

**FASES COLETIVAS EMERGENTES DE MATÉRIA ATIVA BROWNIANA: EFEITOS
DO TORQUE RESTAURADOR**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 25/06/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Clécio Clemente de Souza Silva
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Paulo Roberto de Araujo Campos
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Alexandre da Silva Rosas
Examinador Externo
Universidade Federal da Paraíba

À minha mãe, Fátima.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Clécio, que esteve comigo desde o começo.

À minha família, que sempre me apoiou em todas minhas decisões.

Aos meus colegas de laboratório, Matheus Valença, Fillipe Oliveira, José Ferreira, Rubens Henrique, Raí Menezes e Emerson Freitas.

Aos meus amigos de fora da universidade, em especial os da SNF.

E a todos membros do Departamento de Física da UFPE.

Computational processes are abstract beings that inhabit computers. As they evolve, processes manipulate other abstract things called data. The evolution of a process is directed by a pattern of rules called a program. People create programs to direct processes. In effect, we conjure the spirits of the computer with our spells (ABELSON; SUSSMAN, 1996).

RESUMO

Sistemas fora do equilíbrio estão presentes em toda natureza, no entanto o nosso conhecimento destes é limitado. Ainda assim, é possível os separar em categorias de acordo com os comportamentos que apresentam. Uma de tais categorias é conhecida como “matéria ativa”, caracterizada por possuir um mecanismo de auto-propulsão para realizar movimento direcionado. Em tais sistemas, cada constituinte continuamente consome energia, tanto armazenada quanto do meio, para se afastar do equilíbrio térmico, que dá origem a uma abundância de novos fenômenos. Matéria ativa pode ser usada para modelar uma ampla variedade de sistemas, abrangendo revoadas de pássaros e cardumes de peixes a tecidos celulares e movimento de bactérias. Nesta dissertação investigamos propriedades de Partículas Brownianas Ativas (conhecidas como ABPs em inglês) sobrearmortecidas. Primeiramente fazemos uma revisão de resultados conhecidos, começando de como, na ausência de confinamento, uma partícula ativa isolada é equivalente a uma partícula Browniana passiva em grandes escalas de espaço e tempo. Discutimos então resultados recentes da literatura sobre o fenômeno de separação de fases em ABPs interagentes e as propriedades de ABPs isoladas em um potencial harmônico. Continuamos então com uma análise dos efeitos combinados de um torque intrínseco de auto-alinhamento e repulsão entre as partículas na dinâmica de muitas partículas ativas. Enquanto no sistema sem o torque não existe uma ordem polar global, apesar de apresentar uma separação de fase sob certas condições, com o torque o sistema passa a exibir uma fase com transporte líquido finito para baixas temperaturas. Ao confinar tal sistema num potencial harmônico, novos comportamentos aparecem, o mais notável entre eles sendo um onde as partículas passam a se separar em clusters, agrupamentos de partículas que se comportam como uma só entidade, que orbitam o potencial sem mudar de forma. Com a introdução de um parâmetro de anisotropia, a fase de cluster tem um dobramento de período e a trajetória do centro de massa muda de uma órbita elíptica para uma lemniscata. No caso de potenciais altamente anisotrópicos, mais uma fase aparece, na qual o sistema alterna entre um estado cristalino e um fluido ao longo da órbita, dependendo se as partículas estão em regiões de alta ou baixa curvatura do potencial confinador.

Palavras-chave: matéria ativa; sistemas interagentes; movimento Browniano; separação de fases.

ABSTRACT

Non-equilibrium systems are ubiquitous in nature, however, our understanding of them is still limited. Nevertheless, it is possible to separate them into categories depending on their behavior. One such category is called “active matter”, which is characterized by having a self-propulsion mechanism to achieve directed motion. In such systems, each constituent continuously consumes energy, either stored or from the environment, to drive themselves far from thermal equilibrium, giving rise to a plethora of new phenomena. Active matter can be used to model a wide range of systems, from flocks of birds and school of fishes to cellular tissues and bacterial motion. In this dissertation we investigate the properties of overdamped Active Brownian Particles (ABPs). First, we review some well-known results, beginning with how an isolated active particle is equivalent to a passive Brownian particle at large time and length scales when not confined. We also discuss recent results in the literature about phase-separation phenomena of interacting ABPs and the properties of isolated ABPs in a harmonic potential. Then we proceed with the analysis of the combined effects of built-in self-alignment torque and interparticle repulsion on the dynamics of many interacting active particles. Whereas in the torque-free system there is no global polar order, despite showing a phase separation under certain conditions, in the presence of a torque the system exhibits a phase with finite net transport for low temperatures. By confining such a system in a harmonic potential new behaviors emerge, most notably one where the particles separate into clusters that proceed to orbit the potential without changing their shape. When introducing an anisotropy parameter, the cluster phase undergoes period doubling, where the trajectory of its center of mass changes from an elliptical orbit to a lemniscate. For highly anisotropic potentials, another new phase appears, in which the system alternates between crystalline and fluid states along the orbit as the particles visit regions of high and low curvature of the confining potential.

Keywords: active matter; interacting systems; Brownian motion; phase separation.

LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 1 – Exemplos das trajetórias de partículas ativas com os modelos de (a) Partícula Browniana Ativa (b) Correr-e-Guinar e (c) partículas ativas de Ornstein–Uhlenbeck. Cada ponto representa a posição da partícula após um intervalo de tempo fixo. Note como os pontos não são igualmente espaçados em (c).</p>	13
<p>Figura 2 – Ilustração esquemática do algoritmo DBSCAN. Neste caso $minPts=4$ e os pontos vermelhos representam <i>core points</i> enquanto os amarelos são os <i>reachable points</i>. O ponto azul N é um <i>outlier</i> que não faz parte do cluster.</p>	19
<p>Figura 3 – Exemplo da separação de fases para um sistema com 10^4 componentes com fração de empacotamento $\phi = 0.39$ em cima e $\phi = 0.7$ embaixo. Na esquerda temos um sistema passivo com $k_B T = 0.1$ e na direita um sistema ativo com $v_0 = 1$ e $D_R = 5 \times 10^{-3}$, que possui um $D_{eff} = v_0^2/D_R = 0.1$.</p>	25
<p>Figura 4 – (Acima) Variação da velocidade média $\langle v \rangle$ em relação a D_R. (Abaixo) Desvio padrão da orientação θ das partículas em relação a D_R.</p>	27
<p>Figura 5 – Variação do D_{crit} em relação a β. Tracejado em vermelho representa um ajuste de curva igual a $y(x) = -0.3e^{-0.2x} + 0.3$.</p>	29
<p>Figura 6 – (a) Diagrama de fase mostrando as regiões ativas e passivas para a distribuição radial de partículas ativas. λ representa a razão entre a velocidade de autopropulsão v_0 e D_R, com $\lambda = 0$ correspondendo ao caso passivo e $\lambda \rightarrow \infty$ ao caso sem ruído térmico. β é proporcional a k/D_R. (b) Distribuição de probabilidade radial para $\lambda = 4$ onde fica evidente a mudança entre o regime passivo (com pico em $r = 0$), para o ativo (com pico em $r > 0$) e de volta para o passivo.</p>	32
<p>Figura 7 – Estados dinâmicos para uma partícula ativa em um poço harmônico. (a-c) Regime escalador. (d-f) Regime orbital. (a, d) Distribuição de probabilidade no plano $x - y$ (b, e) Distribuição da distância ao centro. (c, f) Velocidade azimutal v_θ em função do tempo.</p>	34
<p>Figura 8 – Trajetórias (em verde) para uma partícula (em vermelho) em um potencial. (a) Potencial com parte instável e parte estável, neste caso a partícula vai ficar “presa” na parte estável que é mais fechada. (b) Caso no qual todos os pontos fixos são instáveis, de forma que a partícula não consegue ficar em um só ponto e passa a orbitar o sistema.</p>	35

Figura 9 – (A, B, C) Sistemas com 32 partículas. (D) Sistema com 64 partículas. Cada partícula é representada por uma seta apontando na direção da orientação θ de cada partícula. A trajetória do centro de massa do sistema está em vermelho. Em (A) temos um cluster com três pontos dissidentes, em (B) dois clusters com três pontos dissidentes e em (C) três clusters sem nenhum ponto dissidente; os clusters estão circulosados em preto. Em todas figuras $D_R = 0.001$ e $\beta = 5$	37
Figura 10 – (A, C) Histogramas para as orientações θ e velocidade angular ω , respectivamente, de cada partícula na configuração de 3 clusters vista na figura 9C. (B, D) Similarmente, histogramas para θ e ω na fase de moagem vista na figura 9D.	38
Figura 11 – Número médio de clusters em um potencial elíptico em função do número de partículas, com uma linha tracejada em vermelho para 1.	39
Figura 12 – Número médio de clusters para um potencial simétrico ($\varepsilon = 0$) para três valores distintos do tamanho das partículas σ	40
Figura 13 – Fase escaladora para sistema com $N = 64$ e $\beta = 0.1$	41
Figura 14 – Variação da velocidade angular média do sistema em relação à β para $N = 64$	42
Figura 15 – Trajetória do centro de massa para um sistema com $N = 32$ e $D_R = 0.001$ com (A) $\varepsilon = 0.80$, (B) $\varepsilon = 1.2$, (C) $\varepsilon = 2.0$ e (D) $\varepsilon = 3.0$. Em (A) o sistema realiza um movimento orbital de período simples em forma de elipse, enquanto em (B, C) há um movimento orbital de período duplo. Para (D) temos uma órbita de período simples, mas deformada. Todos os pontos são tomados em intervalos de tempo iguais, de forma que para os pontos com maior espaçamento denotam regiões onde o sistema é mais rápido. Órbitas espelhadas também são vistas para ambos casos.	43
Figura 16 – Fase de moagem anisotrópica para sistema com $N = 32$, $\varepsilon = 1.20$ e $D_R = 0.001$. O tracejado laranja “separa” as partículas que se movem para cima do potencial e as que vão para baixo. Na figura menor temos a trajetória de uma partícula, que não é fechada e não possui velocidade constante.	44
Figura 17 – Quatro <i>snapshots</i> para o fase fluida intermitente. Foram utilizadas cores para diferenciar as partículas. Tempos estão em unidades de T_0 e $D_R = 0.001$	46
Figura 18 – Desvio padrão das distâncias entre pares para $D_R = 0.001$ com variação de N e ε . Cores mais intensas representam maior desvio padrão.	47

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	MODELOS DE MATÉRIA ATIVA	13
1.2	ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	14
2	METODOLOGIA	15
2.1	PARTÍCULAS BROWNIANAS ATIVAS COM AUTO-ALINHAMENTO	15
2.2	INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES ESTOCÁSTICAS	16
2.3	ALGORITMO DE CONTAGEM DE CLUSTERS: DBSCAN	18
3	PARTÍCULAS ATIVAS NÃO CONFINADAS	20
3.1	PARTÍCULA ATIVA ISOLADA	20
3.2	SISTEMA INTERAGENTE: SEPARAÇÃO DE FASE INDUZIDA PELA MOTILIDADE	23
3.3	INFLUÊNCIA DO TERMO DE AUTO-ALINHAMENTO	25
4	DINÂMICA DE PARTÍCULAS AUTOPROPELIDAS CONFINADAS	31
4.1	ESTADO ESTACIONÁRIO DE UMA PARTÍCULA ATIVA CONFINADA	31
4.2	EFEITOS DO TERMO DE AUTO-ALINHAMENTO PARA UMA PARTÍCULA CONFINADA	32
4.3	SISTEMAS INTERAGENTES CONFINADOS	35
4.3.1	Potencial radialmente simétrico	36
4.3.1.1	<i>Papel do parâmetro β na fase de moagem</i>	41
4.3.2	Efeitos da anisotropia	42
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	48
	REFERÊNCIAS	49

1 INTRODUÇÃO

Sistemas fora do equilíbrio estão presentes em toda a natureza, de fato, grande parte do que vemos no dia a dia não está em equilíbrio térmico, sendo o maior exemplo de tais sistemas os seres vivos. Na física, estes sistemas estão presentes em diversas áreas, como no funcionamento de um laser, em transições de fase de não equilíbrio ou no estudo de processos de transporte em geral. Apesar desses sistemas existirem em várias escalas e com diferentes fenomenologias, ainda assim é possível dividir os que apresentam características semelhantes em classes mais gerais. Uma dessas classes incluem sistemas que estão relaxando para o equilíbrio térmico, que pode ser rápido como num gás ideal ou devagar, como num vidro. Outra classe envolve sistemas que não conseguem atingir o equilíbrio devido ao meio no qual se encontra, como um objeto conectado a dois reservatórios térmicos em temperaturas diferentes, que sempre vai ter uma fluxo diferente de zero (CATES; TAILLEUR, 2015).

Uma terceira classe de sistemas fora do equilíbrio é conhecida como “matéria ativa”, no qual os componentes individuais do sistema exibem a propriedade de usar a energia do meio para constantemente se afastar do equilíbrio térmico. Alguns dos comportamentos compartilhados por esta classe incluem o agrupamento dos constituintes e alinhamento de suas direções. Um exemplo importante de matéria ativa são sistemas autopropelidos, que são capazes de converter energia interna armazenada em movimento, e este modelo pode ser usado para representar a dinâmica de diversos fenômenos tais como movimento de bactérias (DELL’ARCIPRETE et al., 2018), cardumes de peixes (WARD et al., 2008), enxames de insetos (ATTANASI et al., 2014) e revoada de pássaros (BALLERINI et al., 2008). Nos últimos anos houve um grande esforço da comunidade científica em avançar esse campo de pesquisa, tanto na exploração de aplicações quanto na busca de um arcabouço teórico comum para tais sistemas.

Historicamente a análise de partículas autopropelidas teve um foco em modelar sistemas biológicos. O estudo do Reynolds (1987) introduziu o modelo de *Boids* para simular o comportamento coletivo de pássaros e outros animais em programas de computador a partir de um pequeno número de regras que cada componente deve obedecer. Mais tarde, Vicsek et al. (1995) introduziu o modelo epônimo dele como um caso especial, onde cada partícula do sistema possui um módulo de velocidade constante, mas se alinham com a média da orientação de suas vizinhas (BECHINGER et al., 2016).

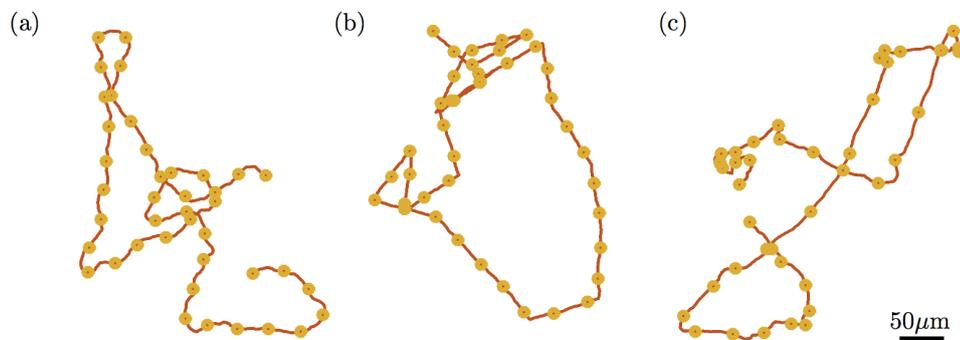
Tais sistemas apresentam uma gama de novos fenômenos emergentes e muitos trabalhos foram dedicados a estudar sistemas autopropelidos com uma ordem polar, sendo tanto aplicados para modelar sistemas naturais quanto para criar novos sistemas artificiais. Entre os novos comportamentos que surgem em tais modelos, um dos mais particulares é a separação de fases entre um estado gasoso e um sólido. Como visto por Fily e Marchetti (2012), tal separação ocorre mesmo com interações puramente repulsivas e sem alinhamento

explícito entre as partículas, ao contrário de outros sistemas.

1.1 MODELOS DE MATÉRIA ATIVA

Existem vários modelos diferentes para descrever a dinâmica de uma única partícula ativa, cada um com suas diferentes características apropriadas para o sistema que está sendo estudado. Vamos aqui rapidamente ver as principais propriedades de três modelos.

Figura 1 – Exemplos das trajetórias de partículas ativas com os modelos de (a) Partícula Browniana Ativa (b) Correr-e-Guinar e (c) partículas ativas de Ornstein–Uhlenbeck. Cada ponto representa a posição da partícula após um intervalo de tempo fixo. Note como os pontos não são igualmente espaçados em (c).



Fonte: Bechinger et al. (2016)

O primeiro modelo é o de Partículas Brownianas Ativas (*Active Brownian Particles* ou ABPs), neste modelo, a partícula tem uma velocidade com módulo constante v numa certa direção θ , que varia de acordo com uma difusividade angular D_R . Este modelo é apropriado para descrever sistemas como coloides Janus ou objetos com um eixo de orientação e um “motor” que faça com que a velocidade seja constante (ROMANCZUK et al., 2012).

Outro modelo é o de Correr-e-Guinar (*Run-and-Tumble Particle* ou RTP), cujo movimento é descrito por trajetórias balísticas de velocidade fixa v (corridas), pontuadas por mudanças abruptas e instantâneas na direção (guinada) que ocorrem com frequência constante α . Tal dinâmica foi originalmente introduzida para estudar o movimento de bactérias *E. coli*, que é caracterizada por essas repentinas mudanças de direção (BERG; TURNER, 1979). Apesar do comportamento microscópico ser completamente diferente, as dinâmicas *coarse grain*¹ de ABPs e RTPs são estritamente equivalentes (CATES; TAILLEUR, 2013).

¹ Método para a análise de sistemas complexos que consiste em dividir o sistema em “grãos” de menor resolução de forma a simplificar fenômenos que o sistema pode apresentar, em troca de detalhes das dinâmicas individuais de cada constituinte do sistema.

Um terceiro modelo é o de partículas ativas de Ornstein–Uhlenbeck (*Active Ornstein–Uhlenbeck Particle*, ou AOUP) ou dinâmica de ruído Gaussiano. Este modelo difere dos dois anteriores pois cada componente cartesiano da velocidade segue um processo de Ornstein–Uhlenbeck, que descreve o movimento de uma partícula browniana em um fluido viscoso. Desta forma, o módulo da velocidade não é constante no tempo e tal variação torna esse modelo bom para casos onde o meio altera não só a direção como a amplitude da velocidade, tais como o movimento de partículas dentro de um banho de bactérias ou o transporte de partículas sobre barreiras de potencial assimétricas (KOUMAKIS; MAGGI; LEONARDO, 2014).

Nestes três modelos, apesar das dinâmicas microscópicas serem fundamentalmente distintas, ainda é possível observar semelhanças para escalas de tempo grandes (neste caso muito maiores que $1/D_R$ do modelo ABP ou $1/\alpha$ do modelo RTP). Por exemplo, o deslocamento médio quadrático para uma partícula isolada é uma quantidade que apresenta o mesmo comportamento assintótico em todos os modelos, de forma que o movimento delas é indistinguível daquele de uma partícula Browniana passiva, mas com uma difusividade que depende dos parâmetros de cada modelo. No entanto, para curtas escalas temporais, assim como para as dinâmicas coletivas emergentes de cada sistema podem surgir grandes diferenças entre os modelos descritos, de forma que as peculiaridades de cada um têm grande importância nas dinâmicas que podem aparecer.

1.2 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Na presente dissertação, estudamos as fases que surgem para sistemas compostos de matéria ativa Browniana na presença de um termo de auto-alinhamento entre os vetores velocidade e orientação. A presença deste termo gera um torque restaurador que é responsável por uma grande variedade de novos fenômenos. Os capítulos consistem então em uma revisão dos resultados já conhecidos da literatura assim como a análise dos resultados originais obtidos ao longo deste trabalho.

No capítulo 2 vemos o modelo matemático utilizado para modelar o sistema, assim como, de maneira sucinta, as ferramentas utilizadas. Posteriormente, estudamos no capítulo 3 o sistema livre, na ausência de forças confinadoras, começando por uma revisão de uma partícula isolada e de um sistema interagente. Depois, estudamos os resultados obtidos para tal sistema na presença do termo de auto-alinhamento. As propriedades do sistema confinado são vistas no capítulo 4, onde similarmente ao capítulo anterior, começamos com revisões de um sistema isolado e de um interagente, para então ver os resultados obtidos para o caso interagente com termo de auto-alinhamento. Por fim, temos a conclusão e considerações finais no capítulo 5.

2 METODOLOGIA

Esta parte é dedicada em explicar as ferramentas que serão utilizadas nesta dissertação. Primeiramente, vamos ver a origem da equação de movimento que usaremos e a técnica utilizada para a integração numérica da mesma. Depois, vamos abordar de maneira sucinta o algoritmo de contagem de *clusters* que foi empregado.

2.1 PARTÍCULAS BROWNIANAS ATIVAS COM AUTO-ALINHAMENTO

O modelo utilizado neste trabalho é o de ABPs sobrearmortecidas (sem termo de inércia) com termo de auto-alinhamento, regido pelas equações:

$$\gamma \dot{x}_i = F_0 \cos \theta_i - \partial_x V(x_i, y_i) + \sum_{i \neq j}^N F_{ijx}(r_{ij}), \quad (2.1a)$$

$$\gamma \dot{y}_i = F_0 \sin \theta_i - \partial_y V(x_i, y_i) + \sum_{i \neq j}^N F_{ijy}(r_{ij}), \quad (2.1b)$$

$$\dot{\theta}_i = \beta_0 (\dot{y}_i \cos \theta_i - \dot{x}_i \sin \theta_i) + \sqrt{\frac{2\alpha}{\tau^2}} \xi_i(t). \quad (2.1c)$$

Nestas equações, a orientação da partícula i é dada por \hat{n}_i , que é um vetor unitário que aponta na direção θ_i , ou seja, $\hat{n}_i = \cos \theta_i \hat{e}_x + \sin \theta_i \hat{e}_y$. Para as equações translacionais (de \dot{x} e \dot{y}), os constituintes são: a força de autopropulsão da partícula ao longo de uma direção, dada por F_0 , que é essencial para descrever a dinâmica de matéria ativa; um atrito viscoso representado por γ ; $V(x, y)$, que representa um potencial confinador no qual o sistema se encontra, e será nulo no caso de um sistema livre; e a força de interação entre as partículas i e j , dada por $F_{ij}(r_{ij})$.

Para a terceira equação, referente à dinâmica da orientação da partícula, temos um torque restaurador de intensidade β_0 que tenta alinhar o vetor orientação \hat{n}_i com a velocidade e o termo estocástico, composto por $\xi_i(t)$, que é um ruído branco Gaussiano com correlação $\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle = \delta(t - t')$, e um coeficiente difusivo α/τ^2 , sendo τ o momento de inércia.

Estas equações foram primeiramente propostas por Dauchot e Démery (2019) para descrever o movimento de um *hexbug*, um brinquedo robótico capaz de se propelir numa direção, se movendo sob uma parábola. Observando o brinquedo, foi visto que existem dois tipo de movimento realizados, um no qual ele tenta fugir do potencial e outro no qual ele passa a orbitar o centro da parábola. Foi então visto que ao introduzir o parâmetro β_0 nas simulações, é possível replicar numericamente estas duas fases observadas. Estas fases são vistas em mais detalhes na seção 4.2.

A fim de adimensionalizar as equações, para diminuir o número de parâmetros, podemos realizar as seguinte mudanças: $x', y' = \frac{x, y}{L_0}$, $t' = \frac{t}{T_0}$, $V' = \frac{V}{V_0}$, $F' = \frac{F}{\Phi_0}$ onde T_0 , L_0 , V_0 e Φ_0 são, respectivamente, o tempo, comprimento, potencial e força de interação características do sistema, de forma que as equações se tornam:

$$\frac{\gamma L_0}{F_0 T_0} \frac{dx'_i}{dt'} = \cos \theta_i - \frac{V_0}{F_0 L_0} \frac{d}{dx'} V'(x'_i, y'_i) + \sum_{i \neq j}^N \frac{\Phi_0}{F_0} F'_{ijx}(r_{ij}), \quad (2.2a)$$

$$\frac{\gamma L_0}{F_0 T_0} \frac{dy'_i}{dt'} = \sin \theta_i - \frac{V_0}{F_0 L_0} \frac{d}{dy'} V'(x'_i, y'_i) + \sum_{i \neq j}^N \frac{\Phi_0}{F_0} F'_{ijy}(r_{ij}), \quad (2.2b)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt'} = \beta_0 L_0 \left(\cos \theta_i \frac{dx'_i}{dt'} - \sin \theta_i \frac{dy'_i}{dt'} \right) + \sqrt{\frac{2\alpha T_0^2}{\tau^2}} \xi_i(t). \quad (2.2c)$$

Para a parte translacional definimos $\frac{\gamma L_0}{F_0 T_0} = \frac{V_0}{F_0 L_0} = \frac{\Phi_0}{F_0} = 1$. Similarmente, definimos para a equação angular $\beta_0 L_0 \equiv \beta$, $\alpha T_0^2 / \tau^2 \equiv D_R$. Desta forma, obtemos o sistema de equações adimensional:

$$\dot{x}_i = \cos \theta_i - \partial_x V(x, y) + \sum_{i \neq j}^N F_{ijx}(r_{ij}), \quad (2.3a)$$

$$\dot{y}_i = \sin \theta_i - \partial_y V(x, y) + \sum_{i \neq j}^N F_{ijy}(r_{ij}), \quad (2.3b)$$

$$\dot{\theta}_i = \beta (\dot{y}_i \cos \theta_i - \dot{x}_i \sin \theta_i) + \sqrt{2D_R} \xi_i(t), \quad (2.3c)$$

onde os ' foram omitidos de forma a deixar a notação mais clara. Em coordenadas polares, teremos:

$$\dot{\vec{r}}_i = \hat{n}_i - \vec{\nabla} V + \sum_{i \neq j}^N F_{ij}, \quad (2.4a)$$

$$\dot{\theta}_i = \beta (\hat{n}_i \times \dot{\vec{r}}_i) \cdot \hat{e}_z + \sqrt{2D_R} \xi_i(t), \quad (2.4b)$$

no qual apesar de utilizarmos o vetor \hat{e}_z , vale ressaltar que todos os sistemas tratados nesta dissertação são bidimensionais.

Para tratar das interações entre dois corpos foram utilizadas interações estéricas. Tais interações são essencialmente forças que aparecem devido ao fato que as partículas ocupam espaço e que há um custo energético associado para se aproximar de outras partículas. Forças de Lennard-Jones e o princípio de exclusão de Pauli são exemplos de interações estéricas.

2.2 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES ESTOCÁSTICAS

Existem vários métodos para se tratar de equações diferenciais estocásticas, tais quais as integrais de Stratonovich ou de Itô, que neste caso são equivalentes dado que o ruído

utilizado é aditivo e não multiplicativo (OKSENDAL, 2013). Queremos no entanto mostrar, de maneira sucinta, a integração numérica para uma equação de Langevin sobrearmortecida, que descreve o movimento de uma partícula com massa desprezível num meio viscoso, sendo este o caso abordado nesta dissertação. Assim, temos para um sistema unidimensional:

$$\lambda \frac{dx}{dt} = F(t) + \eta(t). \quad (2.5)$$

No qual λ representa a viscosidade do meio, $F(t)$ uma força externa, que supomos ser bem comportada, e $\eta(t)$ um ruído branco com $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2k_B T \lambda \delta(t - t')$. Discretizamos o tempo de integração $[0, T]$ em intervalos regulares Δt de forma que $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$ e $\Delta t = T/N$. Integrando a equação (2.5) entre os instantes t_n e t_{n+1} temos:

$$\lambda \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \frac{dx}{dt} = \lambda [x(t_{n+1}) - x(t_n)] = \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt F(t) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \eta(t). \quad (2.6)$$

Aproximando o primeiro termo do lado direito da equação temos que:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} dt F(t) = F(t) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (2.7)$$

Para o segundo termo, definimos:

$$\Omega(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \eta(t), \quad (2.8)$$

de forma que a média é:

$$\langle \Omega(t_n) \rangle = \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \langle \eta(t) \rangle = 0, \quad (2.9)$$

e a correlação temporal:

$$\langle \Omega(t_n) \Omega(t_k) \rangle = \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt' \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2k_B T \lambda \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt' \delta(t - t'). \quad (2.10)$$

A integral da função delta de Dirac é a função teta de Heaviside, que neste caso, será 1 se, e somente se, alguma parte do intervalo $[t_k, t_{k+1}]$ estiver contido dentro do intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ (e vice versa). Como os intervalos são discretos e sem superposição, temos então que o valor desta integral será 0 quando $n \neq k$ e 1 caso contrário. É possível então representar essa relação com um delta de Kronecker $\delta_{n,k}$. Ao realizar a segunda integral, temos a integração de uma constante no intervalo de tamanho $t_{n+1} - t_n = \Delta t$, portanto, a correlação se torna:

$$\langle \Omega(t_n) \Omega(t_k) \rangle = \lambda^2 D \Delta t \delta_{n,k}. \quad (2.11)$$

Usamos aqui a relação de Einstein para o coeficiente de difusão D . Levando isso em conta, temos uma variável gaussiana de média $\langle \Omega(t_n) \rangle = 0$ e variância $\langle \Omega(t_n)^2 \rangle = \lambda^2 D \Delta t$, que pode então ser reescrita como:

$$\Omega(t_n) = u(t_n) \sqrt{\lambda^2 D \Delta t}, \quad (2.12)$$

onde $u(t_n)$ é um número aleatório com distribuição de probabilidade gaussiana de média zero e variância 1. Portanto, em primeira ordem, podemos integrar numericamente a equação de Langevin com:

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + \frac{F(t_n)}{\lambda} \Delta t + u(t_n) \sqrt{D \Delta t}. \quad (2.13)$$

Desta forma o termo estocástico aparece com sua característica de ir com a raiz do intervalo de tempo, ao contrário de variáveis determinísticas que vão linearmente com o intervalo. Esta técnica é conhecida como o método de Euler-Maruyama (JAHNKE; UDRESCU; MIKL, 2012).

2.3 ALGORITMO DE CONTAGEM DE CLUSTERS: DBSCAN

Uma das ferramentas utilizadas neste trabalho é o algoritmo DBSCAN (*Density-based spatial clustering of applications with noise*, ou agrupamento espacial baseado na densidade de aplicações com ruído) onde a partir de um par de parâmetros definidos pelo usuário, sendo estes a distância máxima para que dois pontos sejam considerados vizinhos (denotado por ϵ) e o número mínimo de pontos em um dado cluster (denotado por *minPts*), é possível determinar o número de clusters para uma dada configuração espacial.

Originalmente desenvolvido por Ester et al. (1996), o algoritmo apresenta, no pior caso, complexidade $\mathcal{O}(n^2)$ para um número de pontos n e, apesar de ser antigo, continua sendo amplamente utilizado em áreas como física e aprendizado de máquinas (*machine learning*) (SCHUBERT et al., 2017). Por se tratar de um algoritmo antigo e popular, existem várias implementações em diversas linguagens de programação, tais quais o pacote `dbscan` em R ou a biblioteca `scikit-learn` para Python.

Ao contrário de outros algoritmos de clustering, como o algoritmo de maximização de expectativa ou o *k-means*, por exemplo, não é necessário informar o número de clusters que vão aparecer a priori, o que torna DBSCAN mais apropriado para o caso onde tal número pode variar de acordo com os parâmetros das simulações, que é o caso visto neste estudo.

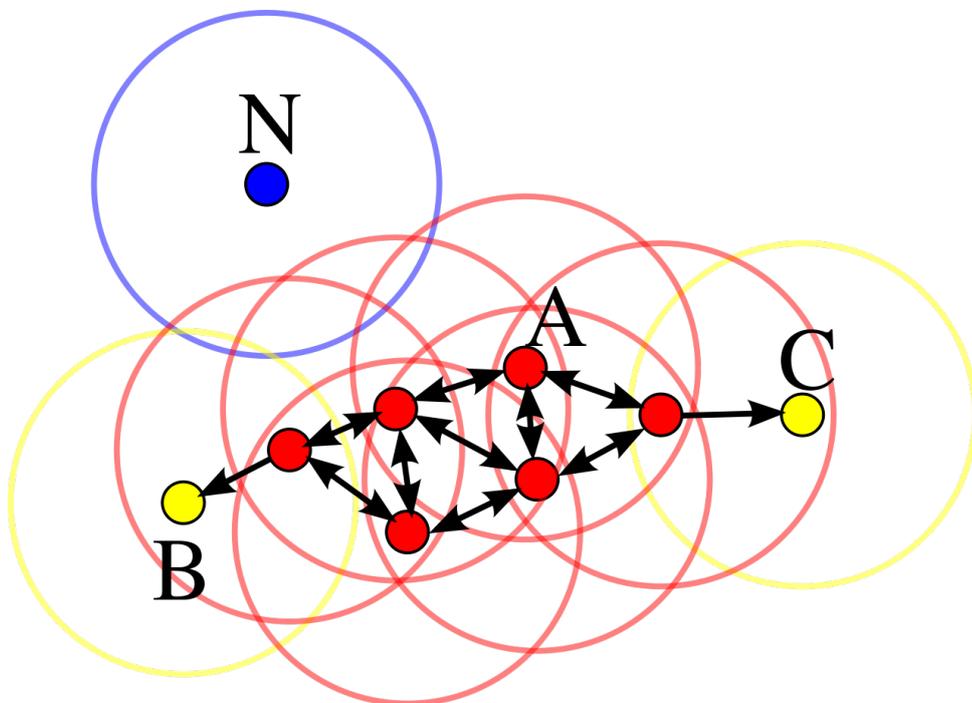
Este algoritmo funciona classificando cada ponto como *core point* (ponto central), *reachable point* (ponto alcançável) e *outlier* (ponto isolado). Um ponto é dito central caso possua *minPts* pontos num raio ϵ dele (incluindo o próprio ponto) e é dito alcançável caso exista um caminho de pontos centrais que chegue até ele, de forma que um ponto alcançável conta como parte do cluster apesar de não possuir *minPts* vizinhos. Por fim, um ponto isolado é então aquele que não é nem central nem alcançável. Ao término da execução, o programa retorna ao usuário uma lista indicando a qual cluster cada partícula pertence, sendo possível contar o número total de clusters no sistema ao olhar tais rótulos.

A partir deste algoritmo foi possível fazer uma média do número de clusters que um sistema interagente confinado apresenta. Com uma análise desta média de acordo com o

número de partículas presente no sistema foi identificada a transição entre comportamentos distintos, sendo estes regimes sem clusters, regimes com vários clusters pequenos e um regime que apresenta só um cluster abrangendo todas (ou quase todas) partículas do sistema. Esta parte é vista em mais detalhes na seção 4.3.

Temos um exemplo de como o algoritmo funciona na figura ??, onde vemos as três classificações possíveis para os pontos: em vermelho, temos os *core points*, que possuem $minPts$ vizinhos dentro de um raio ϵ (neste caso $minPts=4$); os *reachable points*, em amarelo, não satisfazem este número mínimo de vizinhos, mas é possível chegar em tais pontos a partir de *core points*; por fim, em azul temos um ponto que não faz parte do cluster, por não ter $minPts$ vizinhos e por não estar próximo de um ponto que tenha. Os pontos alcançáveis, por estarem na fronteira dos clusters podem, em princípio, fazer parte de outro cluster, dependendo da ordem no qual os dados são interpretados pelo algoritmo. Isso é, um ponto que está entre dois clusters pode fazer parte de ambos, a depender de como a varredura dos pontos é feita. No entanto, tais casos são excepcionais e não ocorrem no âmbito que foi utilizado aqui. Tal ambiguidade não ocorre para *core points* (RHYS, 2020).

Figura 2 – Ilustração esquemática do algoritmo DBSCAN. Neste caso $minPts=4$ e os pontos vermelhos representam *core points* enquanto os amarelos são os *reachable points*. O ponto azul N é um *outlier* que não faz parte do cluster.



Fonte: Schubert et al. (2017)

3 PARTÍCULAS ATIVAS NÃO CONFINADAS

Na física, o estudo de uma partícula ou de um conjunto delas em um sistema livre de potenciais externos é sempre algo de interesse, principalmente para novos sistemas. A partir desta análise, é possível estudar as dinâmicas em meios mais complexos e entender o que ocorre devido a interações intrínsecas e o que é causado pelo meio.

Aqui, vamos estudar o comportamento coletivo de partículas interagentes num sistema bidimensional com condições de contorno periódicas. Primeiramente será feita uma revisão do caso sem o torque de auto-alinhamento e em seguida apresentaremos resultados para o caso onde esse termo é presente.

3.1 PARTÍCULA ATIVA ISOLADA

Sem o termo de auto-alinhamento, temos um sistema mais simples, já que a variação temporal da coordenada angular depende apenas da difusão Browniana. É interessante olhar o comportamento de partículas Brownianas ativas para que possamos comparar com os casos que possuem termo de auto-alinhamento não-nulo. Esta seção é baseada no trabalho de Basu et al. (2018), o qual mostra que, na ausência de interações entre partículas, a partícula ativa se comporta como uma partícula Browniana passiva após um tempo grande. Primeiramente vamos provar que existe uma relação entre a difusividade rotacional D_R do sistema ativo com uma difusividade Browniana efetiva D_{eff} , isso pode ser demonstrado a partir das equações:

$$\dot{x} = v_0 \cos \theta(t) = \frac{v_0}{2}(e^{i\theta(t)} + e^{-i\theta(t)}) = \xi_x(t), \quad (3.1a)$$

$$\dot{y} = v_0 \sin \theta(t) = \frac{v_0}{2i}(e^{i\theta(t)} - e^{-i\theta(t)}) = \xi_y(t), \quad (3.1b)$$

$$\dot{\theta} = \sqrt{2D_R}\xi_\theta(t), \quad (3.1c)$$

onde $\xi_{x,y}$ é o ruído efetivo, θ o ângulo que a orientação da partícula faz com o eixo x e $\xi_\theta(t)$, similarmente ao visto no capítulo anterior, é um ruído branco Gaussiano com correlação $\langle \xi_\theta(t)\xi_\theta(t') \rangle = \delta(t - t')$. Realizamos agora a mudança $\theta(t) \rightarrow \theta_t$ de forma a deixar mais clara a notação utilizada. Para encontrar a covariância $\text{cov}(\theta_{t_1}, \theta_{t_2})$, partimos da definição:

$$\text{cov}(\theta_{t_1}, \theta_{t_2}) = \langle [\theta_{t_1} - \langle \theta_{t_1} \rangle] \cdot [\theta_{t_2} - \langle \theta_{t_2} \rangle] \rangle = \langle \theta_{t_1} \cdot \theta_{t_2} \rangle, \quad (3.2)$$

no qual foi usado que θ tem média zero. Assumindo, a princípio, que $t_1 \leq t_2$, realizamos a substituição $\theta_{t_2} \rightarrow (\theta_{t_2} - \theta_{t_1}) + \theta_{t_1}$ e chegamos em:

$$\langle \theta_{t_1} \cdot \theta_{t_2} \rangle = \langle \theta_{t_1} \cdot [(\theta_{t_2} - \theta_{t_1}) + \theta_{t_1}] \rangle, \quad (3.3)$$

$$\langle \theta_{t_1} \cdot \theta_{t_2} \rangle = \langle \theta_{t_1} \cdot (\theta_{t_2} - \theta_{t_1}) + \theta_{t_1}^2 \rangle, \quad (3.4)$$

$$\langle \theta_{t_1} \cdot \theta_{t_2} \rangle = \langle \theta_{t_1} \cdot (\theta_{t_2} - \theta_{t_1}) \rangle + \langle \theta_{t_1}^2 \rangle. \quad (3.5)$$

Como cada incremento é independente e identicamente distribuído, $\theta_{t_1} - \theta_{t_0} = \theta_{t_1}$ e $\theta_{t_2} - \theta_{t_1}$ também são independentes, propriedade característica de uma cadeia de Markov, onde eventos futuros dependem apenas do estado atual no qual o sistema está¹. Isso torna possível a separação de $\langle \theta_{t_1} \cdot (\theta_{t_2} - \theta_{t_1}) \rangle$ em $\langle \theta_{t_1} \rangle \cdot \langle \theta_{t_2} - \theta_{t_1} \rangle$ que é 0. Assim, obtemos que a covariância é dada por $\langle \theta_{t_1}^2 \rangle$ que é justamente a variância no tempo $t = t_1$. Levando em conta o termo multiplicativo em $\dot{\theta}$ e o caso onde $t_1 > t_2$, chegamos na covariância, dada por $\langle \theta_{t_1} \theta_{t_2} \rangle = 2D_R \min(t_1, t_2)$.

De fato, a evolução de $\dot{\theta}$ é um processo de Wiener, que descreve o movimento Browniano de uma partícula com função densidade de probabilidade dada por uma distribuição Gaussiana com variância igual ao tempo t e covariância entre t_1 e t_2 dada por $\min(t_1, t_2)$.

Assumindo então, sem perda de generalidade, que $\theta(0) = 0$ e utilizando a propriedade da função característica conjunta de distribuições gaussianas (ROSS et al., 1996, p. 17-19):

$$\left\langle \exp \left(i \sum_j b_j \theta_{t_j} \right) \right\rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j,k} b_j b_k \text{cov}(\theta_{t_j}, \theta_{t_k}) \right), \quad (3.6)$$

é possível obter o desvio de x e y . Para isso, primeiramente precisamos das médias e correlações. Usamos então a identidade acima para $\langle \frac{v_0}{2} e^{\pm i\theta_t} \rangle$, neste caso $b_1 = \pm 1$ e $b_j = 0$ para $j > 1$. Com isso, o lado direito da identidade se torna simplesmente $\frac{v_0}{2} \exp(-\frac{1}{2} \langle \theta_t \theta_t \rangle) = \frac{v_0}{2} \exp(-D_R t)$, de forma que as médias são:

$$\langle \xi_x(t) \rangle = v_0 e^{-D_R t}, \quad (3.7a)$$

$$\langle \xi_y(t) \rangle = 0. \quad (3.7b)$$

As correlações são encontradas de maneira similar:

$$\langle \xi_x(t_1) \xi_x(t_2) \rangle = \frac{v_0^2}{2} \left[e^{-D_R |t_1 - t_2|} + e^{-D_R(t_1 + t_2 + 2 \min(t_1, t_2))} \right], \quad (3.8a)$$

$$\langle \xi_y(t_1) \xi_y(t_2) \rangle = \frac{v_0^2}{2} \left[e^{-D_R |t_1 - t_2|} - e^{-D_R(t_1 + t_2 + 2 \min(t_1, t_2))} \right]. \quad (3.8b)$$

Calculando então os deslocamentos médios, encontramos:

$$\langle x(t) \rangle = \int_0^t ds \langle \xi_x(s) \rangle = \frac{v_0}{D_R} (1 - e^{-D_R t}), \quad (3.9a)$$

$$\langle y(t) \rangle = \int_0^t ds \langle \xi_y(s) \rangle = 0. \quad (3.9b)$$

Para achar o segundo momento, primeiro realizamos as seguinte integrais:

¹ Como θ_{t_2} depende do valor de θ_{t_1} estas grandezas não são independentes; θ_{t_2} tem uma distribuição com média dependente de θ_{t_1} .

$$\begin{aligned}
& \int_0^t ds_1 \int_0^t ds_2 e^{-D_R|s_1-s_2|} = \\
& \int_0^t ds_1 \left[\int_0^{s_1} ds_2 e^{-D_R(s_1-s_2)} + \int_{s_1}^t ds_2 e^{-D_R(s_2-s_1)} \right] = \\
& \frac{1}{D_R} \int_0^t ds_1 \left[2 - e^{-D_R s_1} - e^{-D_R(t-s_1)} \right] = \\
& \frac{1}{D_R} \left[2t + \frac{1}{D_R} (2e^{-D_R t} - 2) \right].
\end{aligned}$$

E para o segundo termo do lado direito da equação 3.8:

$$\begin{aligned}
& \int_0^t ds_1 \int_0^t ds_2 e^{-D_R(s_1+s_2+2\min(s_1,s_2))} = \\
& \int_0^t ds_1 \left[\int_0^{s_1} ds_2 e^{-D_R(s_1+3s_2)} + \int_{s_1}^t ds_2 e^{-D_R(3s_1+s_2)} \right] = \\
& \frac{1}{D_R} \int_0^t ds_1 \left[\frac{e^{-D_R s_1}}{3} + \frac{2e^{-4D_R s_1}}{3} - e^{-D_R(3s_1+t)} \right] = \\
& \frac{1}{6D_R^2} [3 - 4e^{-D_R t} + e^{-4D_R t}].
\end{aligned}$$

Com esses resultados, obtemos:

$$\begin{aligned}
\langle x^2(t) \rangle &= \int_0^t ds_1 \int_0^t ds_2 \langle \xi_x(s_1) \xi_x(s_2) \rangle \\
&= \frac{v_0^2}{D_R} t + \frac{v_0^2}{12D_R^2} [e^{-4D_R t} + 8e^{-D_R t} - 9],
\end{aligned} \tag{3.12a}$$

$$\begin{aligned}
\langle y^2(t) \rangle &= \int_0^t ds_1 \int_0^t ds_2 \langle \xi_y(s_1) \xi_y(s_2) \rangle \\
&= \frac{v_0^2}{D_R} t - \frac{v_0^2}{12D_R^2} [e^{-4D_R t} - 16e^{-D_R t} + 15].
\end{aligned} \tag{3.12b}$$

sendo os desvios padrão definidos por $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ e $\sigma_y^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$, temos:

$$\sigma_x^2 = \frac{v_0^2}{D_R} t + \frac{v_0^2}{12D_R^2} [e^{-4D_R t} - 12e^{-2D_R t} + 32e^{-D_R t} - 21], \tag{3.13a}$$

$$\sigma_y^2 = \frac{v_0^2}{D_R} t - \frac{v_0^2}{12D_R^2} [e^{-4D_R t} - 16e^{-D_R t} + 15]. \tag{3.13b}$$

Tomando o limite $t \gg D_R^{-1}$, temos $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \frac{v_0^2}{D_R} t$. Comparando com a difusão do movimento Browniano, dada por $\sigma^2 = 2Dt$, achamos que $D_{\text{eff}} = v_0^2/2D_R$. De fato, para uma dimensão espacial arbitrária d temos que $D_{\text{eff}} = v_0^2/d(d-1)D_R$ (CATES; TAILLEUR, 2015). É interessante ver que, para tempos muito curtos $t \ll D_R^{-1}$, o sistema é altamente

anisotrópico, ao contrário de um movimento Browniano passivo. Isso pode ser visto ao expandir em série até quarta ordem e encontrar:

$$\sigma_x^2 \approx \frac{1}{3}v_0^2 D_R^2 t^4, \quad (3.14a)$$

$$\sigma_y^2 \approx \frac{2}{3}v_0^2 D_R t^3 - \frac{5}{6}v_0^2 D_R^2 t^4, \quad (3.14b)$$

indicando uma forte anisotropia para curtos tempos, assim como comportamento não difusivo.

No caso acima, assumimos que $\theta_0 = 0$ e por isso que a anisotropia existe ao longo do eixo x . Para um θ_0 arbitrário, a anisotropia será na direção inicial que a partícula se encontra, para o qual pode ser feita de uma rotação global do sistema ou uma redefinição dos eixos $x - y$ de forma a retomar os resultados obtidos.

O deslocamento quadrático médio radial também pode ser encontrado a partir de $\langle r^2(t) \rangle = \langle x^2(t) \rangle + \langle y^2(t) \rangle = \frac{2v_0^2}{D_R}t + \frac{2v_0^2}{D_R^2}(e^{-D_R t} - 1)$, resultado que já é conhecido a muito tempo (HOWSE et al., 2007). Neste caso também há uma linearidade com t para $t \gg D_R^{-1}$, assim como um regime superdifusivo com $\langle r^2(t) \rangle \propto t^2$ quando $t \ll D_R^{-1}$, que é visto ao expandir a expressão até segunda ordem: $\langle r^2(t) \rangle \approx \frac{2v_0^2}{D_R}t + \frac{2v_0^2}{D_R^2}(1 - D_R t + \frac{D_R^2 t^2}{2} - 1) = v_0^2 t^2$.

Com esses resultados é possível entender o porquê de ignorar o termo difusivo translacional, presente no movimento Browniano passivo. No regime de baixo numero de Reynolds, ou seja, num sistema não turbulento, podemos relacionar as duas difusividades a partir de $D_R = 3D_T/\sigma^2$ (REDNER; HAGAN; BASKARAN, 2013), no entanto, vimos que é possível relacionar a parte ativa, que depende de v_0 com uma difusão translacional efetiva. Tomando, por exemplo, $v_0 = 1$, $\sigma = 0.1$, $D_R = 0.1$, temos um $D_T \approx 0.0003$ e um $D_{\text{eff}} = 5$, que nos dá uma diferença na ordem de 10^4 . Em muitos casos experimentais, como em bactérias, essa diferença é muitas vezes de três ou quatro ordens de grandeza, e isso faz com que esse termo seja omitido tanto na interpretação de experimentos quanto em simulações (CATES; TAILLEUR, 2013).

3.2 SISTEMA INTERAGENTE: SEPARAÇÃO DE FASE INDUZIDA PELA MOTILIDADE

Nesta seção, estamos interessados em estudar o efeito apenas da interação sobre um sistema de matéria ativa. Para isso, usamos $\beta = V = 0$ nas equações 2.3. Vamos ver que mesmo na ausência de regras explícitas de alinhamento, tais como o acoplamento entre θ e v para $\beta > 0$ ou com uma interação do tipo Vicsek, onde θ é definido a partir do θ médio da vizinhança da partícula, ainda existe uma separação de fase líquida e gasosa para certos sistemas. Tal fenômeno é conhecido como *Motility Induced Phase Separation* (Separação de Fase Induzida pela Motilidade) ou MIPS e está presente em vários sistemas diferentes. As únicas condições necessárias para que um sistema apresente essa separação de fase são a autopropulsão e as interações, que podem ser puramente repulsivas (para partículas

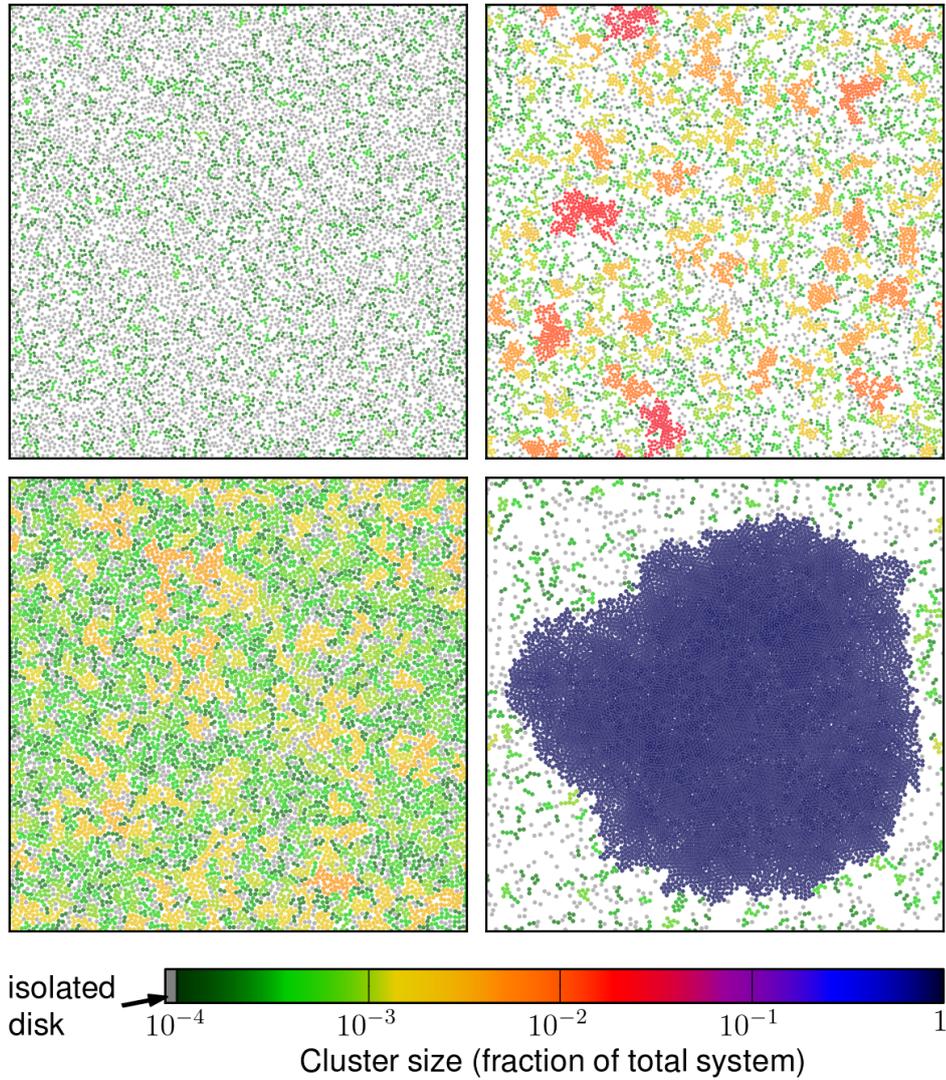
passivas não é possível que uma separação de fases ocorra na ausência interações atrativas). Isso ocorre pois em regiões de maior densidade é de se esperar que colisões sofridas pelas partículas diminuam a velocidade das mesmas, que por sua vez aumenta a densidade local, formando um feedback positivo, de maneira similar a um congestionamento de carros (STENHAMMAR et al., 2014).

De forma analítica, é possível realizar um mapeamento (para grandes escalas temporais e espaciais) da dinâmica de um sistema ativo em um fluido Browniano passivo no equilíbrio com interações atrativas. Esta equivalência é válida desde que exista um funcional para a velocidade em função da densidade local do sistema $v([\rho], \mathbf{r})$ e que o logaritmo de tal funcional seja integrável (CATES; TAILLEUR, 2015). Quando uma aproximação local é utilizada, esse é sempre o caso e é possível encontrar a densidade de energia livre efetiva do sistema $f(\rho)$. Tal aproximação consiste em assumir que a velocidade de uma partícula depende apenas da densidade local, de forma que termos de ordem maior são ignorados.

Sendo intrinsecamente relacionado com a densidade do sistema, a separação de fase é dependente da fração de empacotamento do sistema ϕ , que representa a razão entre a área ocupada pelas partículas com o espaço total disponível. No estudo numérico de Fily e Marchetti (2012), foi encontrado uma fração de empacotamento crítica $\phi_c \approx 0.4$ para o qual o MIPS acontece, onde o comportamento do sistema muda abruptamente ao ultrapassar esse valor. Isto é evidenciado na parte superior da figura 3, onde é possível ver que mesmo para valores próximos, mas abaixo de ϕ_c , não ocorre a coexistência entre a fase diluída e a fase densa. Apesar disso, ainda é possível ver que o sistema forma mais *clusters* de alta densidade que um sistema térmico “equivalente”, indicando que as dinâmicas ativas não podem ser reproduzidos apenas com uma temperatura efetiva.

Nestes sistemas, apesar de existirem duas fases distintas, não existe uma polarização global, de forma que o movimento médio do sistema é zero, que pode ser facilmente constatado notando que os θ_i de cada partícula dependem apenas de um ruído Browniano. Isso faz com que a fronteira entre as fases não se mova como um todo e esteja sempre mudando, com partículas constantemente transitando entre ambas regiões. Apesar de não apresentar uma polarização em larga escala, ao observar os vetores velocidade ao invés dos eixos de autopropulsão θ existem domínios com alinhamento de velocidade ou com estruturas tipo vórtices dentro da fase densa. Tais domínios crescem com $1/D_R$. No entanto, ao considerar a fase densa como um todo a velocidade total é 0 (CAPRINI; MARCONI; PUGLISI, 2020).

Figura 3 – Exemplo da separação de fases para um sistema com 10^4 componentes com fração de empacotamento $\phi = 0.39$ em cima e $\phi = 0.7$ embaixo. Na esquerda temos um sistema passivo com $k_B T = 0.1$ e na direita um sistema ativo com $v_0 = 1$ e $D_R = 5 \times 10^{-3}$, que possui um $D_{\text{eff}} = v_0^2 / D_R = 0.1$.



Fonte: Fily e Marchetti (2012)

3.3 INFLUÊNCIA DO TERMO DE AUTO-ALINHAMENTO

No trabalho aqui realizado, foi feita uma análise um sistema interagente com a presença do termo de auto-alinhamento mas na ausência de um potencial externo. Para isso, utilizamos as equações 2.3 com $V = 0$, isso é:

$$\dot{x}_i = v_0 \cos \theta_i + \sum_{i \neq j}^N F_{ijx}, \quad (3.15a)$$

$$\dot{y}_i = v_0 \sin \theta_i + \sum_{i \neq j}^N F_{ijy}, \quad (3.15b)$$

$$\dot{\theta}_i = \beta(y_i \cos \theta_i - x_i \sin \theta_i) + \sqrt{2D_R} \xi_i(t). \quad (3.15c)$$

A interação entre as partículas é dada pelo potencial WCA, que é similar a um potencial de Lennard-Jones com um cutoff no mínimo do potencial, de forma que ficamos com a parte puramente repulsiva (WEEKS; CHANDLER; ANDERSEN, 1971):

$$U(r_{ij}) = U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad r_{ij} < 2^{\frac{1}{6}} \sigma \quad (3.16a)$$

$$U(r_{ij}) = 0 \quad r_{ij} > 2^{\frac{1}{6}} \sigma \quad (3.16b)$$

r_{ij} sendo a distância entre duas partículas, dada por $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$. Assim, definimos as forças entre as partículas por $F_{ijx,y} = -\partial_{x,y} U(r_{ij})$. Foi utilizado $U_0 = 0.1$ e $\sigma = 0.2$ para as simulações feitas.

Na ausência de forças interativas ($F = 0$), retomamos ao caso visto na seção 3.1, que é rapidamente visto ao substituir as expressões para \dot{x} e \dot{y} na equação de $\dot{\theta}$, isso é:

$$\dot{\theta}_i = \beta(v_0 \sin \theta_i \cos \theta_i - v_0 \cos \theta_i \sin \theta_i) + \sqrt{2D_R} \xi_i(t) = \sqrt{2D_R} \xi_i(t). \quad (3.17)$$

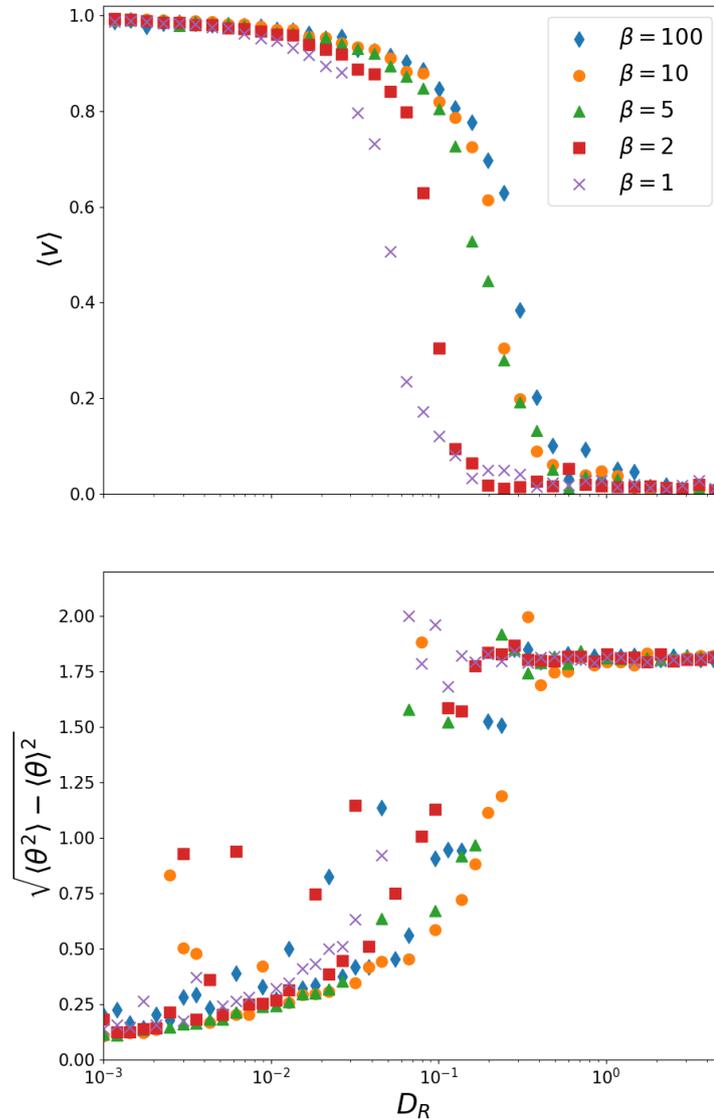
que faz com que o termo de auto-alinhamento β seja irrelevante para as dinâmicas do sistema na ausência de um potencial confinador e interações entre as partículas.

Na presença de um termo de alinhamento entre a orientação e a velocidade, observamos dois comportamentos distintos, sendo estes um com ordem polar e translacional, no qual o sistema se move como um todo ao longo de uma única direção, e o regime fluido, onde os valores de θ_i de cada partícula estão descorrelacionados e o sistema se comporta como um gás, assim como no caso visto na seção 3.2. Esta transição contrasta com o MIPS, que não possui ordem polar ou translacional. A partir da integração numérica das equações 3.15 para uma caixa periódica de lado $L = 8L_0$ e $N = 256$ partículas², fizemos a análise do comportamento do sistema após um tempo de relaxação igual a $10^3 T_0$, muito acima da duração do estado transiente, de forma que o mesmo é desconsiderado.

Primeiramente, calculamos a velocidade média em função de D_R para vários sistemas com β fixo. Podemos ver na figura 4 a mudança do $\langle v \rangle$ de 1, que representa o módulo da velocidade de autopropulsão de cada partícula e é portanto o limite superior da velocidade, para quase 0 mostrando que o sistema não possui ordem translacional, comportando-se

² De forma que a fração de empacotamento é de aproximadamente $\approx 12.5\%$, consideravelmente abaixo da fração crítica para que ocorra a separação de fases vista na seção anterior. Assim, os resultados desta seção são dependentes apenas no termo de auto-alinhamento.

Figura 4 – (Acima) Variação da velocidade média $\langle v \rangle$ em relação a D_R . (Abaixo) Desvio padrão da orientação θ das partículas em relação a D_R .



Fonte: Produzido pelo autor

então como um gás. Esta mudança indica uma transição contínua entre uma fase sem transporte líquido ($\langle v \rangle = 0$) para uma fase que possui transporte finito e não-nulo, a partir de uma quebra espontânea da simetria rotacional. Na parte inferior, é possível ver o desvio padrão da orientação das partículas do sistema, que é baixo quando o sistema está alinhado, visto que todas as partículas apontam na mesma direção e portanto possuem a mesma orientação, e que aumenta juntamente com a difusividade D_R . É interessante notar que os valores atingem um platô em ≈ 1.75 que, ao comparar as velocidades médias, ocorre juntamente quando o sistema se torna completamente descorrelacionado (gasoso).

Para entender esse alinhamento em larga escala, que acontece apesar da dinâmica de $\dot{\theta}$ não depender (explicitamente) de outros corpos, podemos considerar, por exemplo, um

sistema onde duas partículas se encontram, isso é, a distância entre as duas é $< 2^{\frac{1}{6}}\sigma$. A autopropulsão de ambas vai as empurrar ao longo de um eixo que depende da orientação inicial na qual elas estavam e com um módulo de velocidade total reduzido (que neste caso será menor que 1). Em contrapartida, isso faz com que a velocidade e a orientação não estejam mais alinhados, gerando um torque para restaurar o alinhamento. Para um caso onde D_R é nulo ou desprezível, o par de partículas vai eventualmente se mover numa única direção com velocidade 1, e o tempo para alinhar dependerá de $1/\beta$.

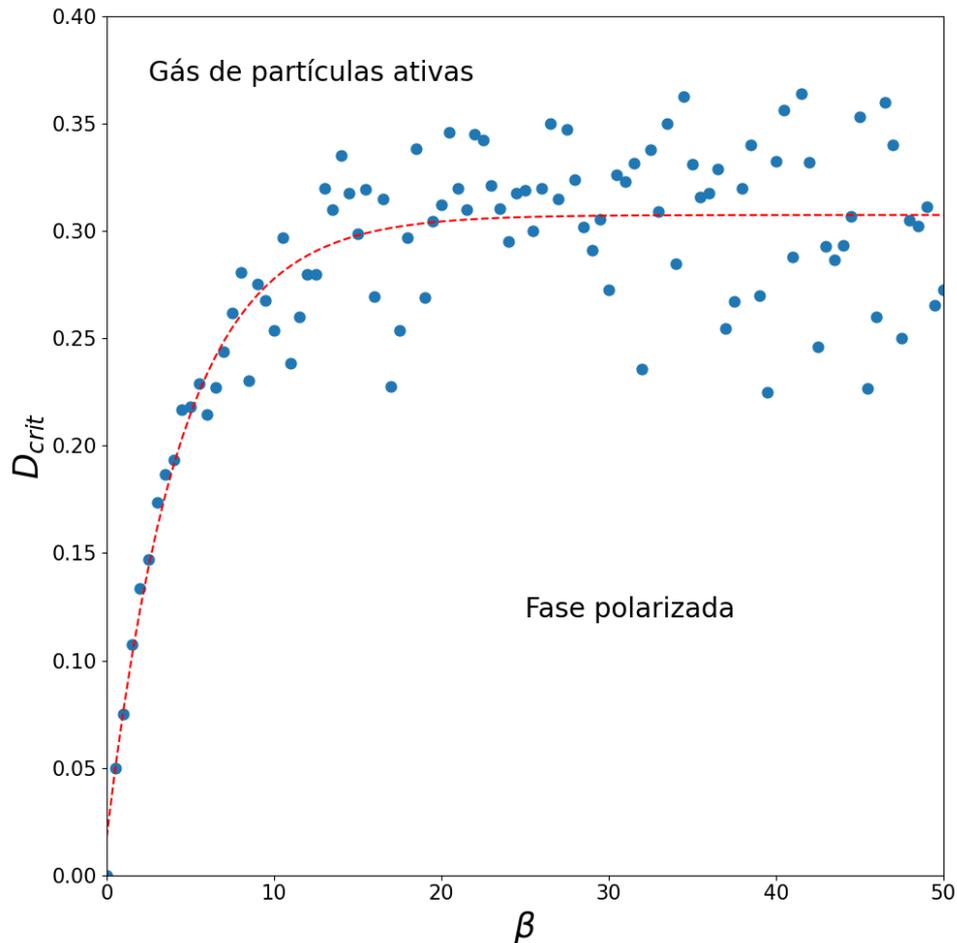
No caso sem o termo de auto-alinhamento, isso é $\beta = 0$, vimos anteriormente que cada partícula se difunde de maneira passiva para largas escalas temporais e, como as únicas interações são estéricas, não existe nenhum mecanismo para alinhar as partículas, de forma que a velocidade média do sistema é sempre zero, independente do valor de D_R . A velocidade média, no entanto, não caracteriza a separação de fase que foi vista anteriormente, de forma é que necessário observar quantias tais como a densidade espacial ou o desvio padrão do número de partículas N em uma região do sistema (FILY; MARCHETTI, 2012). As consequências da coexistência de um alinhamento entre as partículas junto com interações de dois corpos ainda não é completamente entendida (BARRÉ et al., 2014), podendo existir casos onde o alinhamento facilita o MIPS (SESE-SANSA; PAGONABARRAGA; LEVIS, 2018) e casos onde dificulta a separação de fases (LINDEN et al., 2019).

Na figura 4, vemos que valores maiores de β estão relacionados com maior velocidade média para um mesmo valor de D_R , indicando uma maior tendência para o sistema se manter alinhado. No entanto, a diferença entre $\beta = 10$ e $\beta = 100$ é pequena, indicando a existência de um certo limite superior ou assíntota para a difusividade rotacional D_R (que está relacionada com a temperatura) de transição. Um gráfico semelhante pode ser encontrado em sistemas com interações do tipo Vicsek com a densidade do sistema no lugar do β , mostrando esta transição entre uma fase desordenada e uma coerente mesmo para sistemas com outros mecanismos de alinhamento (VICSEK et al., 1995).

Depois foi realizada uma varredura do parâmetro β e da difusividade rotacional D_R para observar quando a transição entre as fases ocorre. A condição utilizada para determinar a mudança entre o regime ordenado e o isotrópico foi $\langle v \rangle < 0.1$ e para cada configuração diferente o ponto de partida das posições e orientações das partículas foi randomizado. Neste estudo não foi observada diferença significativa nos resultados entre uma varredura deste tipo e uma que mantivesse as posições das partículas durante a variação dos parâmetros e.g. um *annealing* que conserva, no qual o D_R do sistema progressivamente diminui.

Ao buscar o D_R de transição para vários valores de β obtemos o gráfico na figura 5, onde na região abaixo dos pontos existe o regime ordenado e acima a fase gasosa. Para $\beta = 0$ temos $D_{\text{crit}} = 0$, resultado consistente com o que foi visto anteriormente já que nunca há polarização global neste caso. Ao aumentar o β , e portanto a intensidade do auto-alinhamento, vemos que o D_{crit} aumenta, indicando maior tendência do sistema a ficar em um estado ordenado. O valor de D_{crit} mostra um rápido aumento mas que satura

Figura 5 – Variação do D_{crit} em relação à β . Tracejado em vermelho representa um ajuste de curva igual a $y(x) = -0.3e^{-0.2x} + 0.3$.



Fonte: Produzido pelo autor

ao invés de crescer infinitamente, que é comportamento também visto na figura 4 onde a curva para $\beta = 100$ não está muito longe das outras. Neste estudo, encontramos um D_{crit} máximo da ordem de ≈ 0.35 .

Esta saturação pode ser entendida a partir do termo $\sqrt{2D_R}\xi_\theta(t)$ da equação angular. Tomando um valor de D_R igual a 0.4, por exemplo, temos uma distribuição gaussiana com desvio padrão $\sqrt{2D_R} \approx 0.9$, ou seja, após um intervalo igual a uma unidade de tempo do sistema (T_0), 62% das partículas têm um desvio maior que 0.45rad (aproximadamente 26°) e 32% maior que 0.9rad ($\approx 52^\circ$). Mesmo para $\beta \gg 1$, onde o alinhamento entre a velocidade e orientação da partícula ocorre muito rápido, a reorientação aleatória é muito expressiva para que partículas vizinhas consigam se alinhar. Isso é, mesmo que para um certo instante de tempo um grupo de partículas esteja alinhado, a variação aleatória na orientação é muito alta para que essa ordem consiga se manter temporalmente, de forma que o grupo rapidamente passa a ficar desalinhado. Para o sistema como um

todo, isso significa que não é possível ter uma correlação orientacional global duradoura. De fato, para um valor de D_R muito grande, o sistema de partículas Brownianas ativo apresenta comportamento idêntico ao caso passivo. Isso é, para densidades baixas existe um regime desordenado, e uma rede hexagonal para altas densidades (DIGREGORIO et al., 2018). Mesmo com alinhamento entre as partículas, ainda existe um “congelamento” do sólido ativo para densidades elevadas, onde as orientações se tornam descorrelacionadas e o movimento coletivo do sistema é nulo (GEYER et al., 2019).

4 DINÂMICA DE PARTÍCULAS AUTOPROPELIDAS CONFINADAS

Um dos potenciais mais comuns na natureza é sem dúvidas o harmônico, que está presente em muitos sistemas seja em sua forma exata ou em aproximações. Neste capítulo, vamos estudar o comportamento de uma partícula em um potencial harmônico, para então considerar o caso de sistemas interagente em potenciais harmônicos anisotrópicos (elípticos).

4.1 ESTADO ESTACIONÁRIO DE UMA PARTÍCULA ATIVA CONFINADA

No capítulo anterior, vimos como o comportamento de uma partícula Browniana ativa isolada é idêntico ao de uma partícula Browniana passiva após um longo tempo. No entanto, ao confinar a partícula em um potencial, isso não é (sempre) o caso. A introdução de um termo de autopropulsão gera uma rica dinâmica e o entendimento analítico para uma única partícula pode ser útil para o entendimento de sistemas interagentes (POTOTSKY; STARK, 2012).

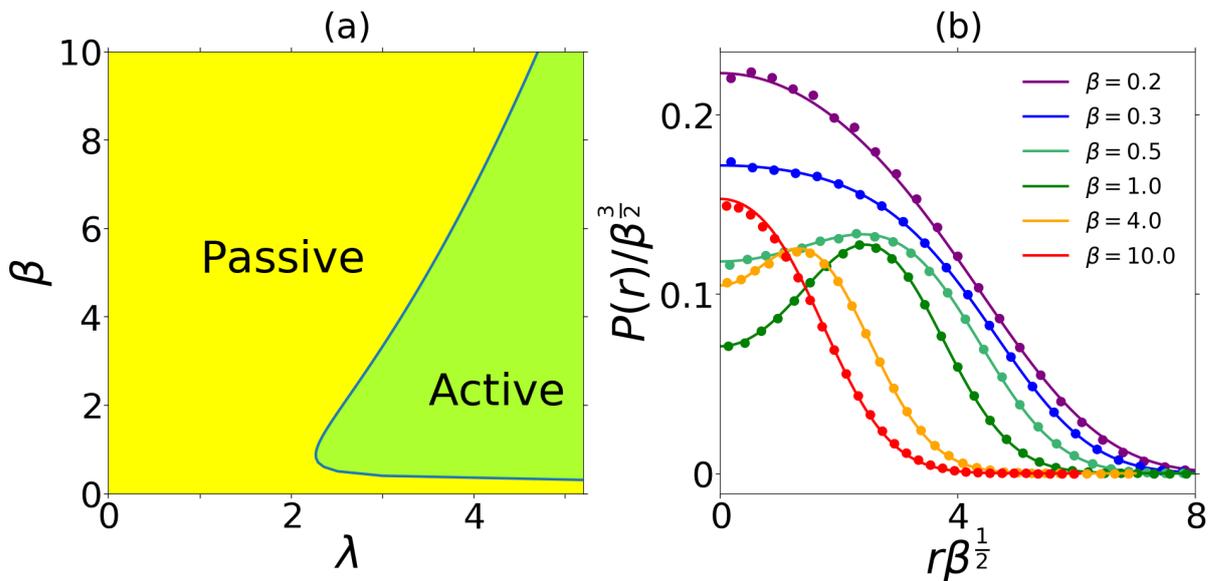
Inicialmente, podemos considerar um caso com muitas simetrias, de forma a facilitar a separação entre os efeitos causados devido ao potencial e os que ocorrem por conta da autopropulsão. Para isso, tomamos o potencial harmônico $U(r) = \frac{1}{2}kr^2$, onde k é a rigidez do potencial e r a distância até a origem do sistema de coordenadas. Quando temos D_R muito grande, há um retorno ao caso passivo, pois as dinâmicas estocásticas dominam sobre o termo de autopropulsão. Neste regime, a função de distribuição radial segue a de Boltzmann; $P(r) \propto \exp(-U(r)/k_B T)$, que no caso do potencial harmônico é uma distribuição gaussiana $P(r) \propto \exp(-kr^2/2k_B T)$. Neste regime, a orientação da partícula não contribui em nada para as dinâmicas vistas, assim, a posição é independente da orientação individual da partícula. Porém, ao diminuir o D_R , um novo comportamento aparece: a partícula passa a apontar para fora do potencial ao longo de seu eixo de orientação, tentando escapar do confinamento (WEXLER et al., 2020). Isso faz com que a distribuição de probabilidade radial passe a ter o máximo fora do centro. Neste caso, existe uma forte correlação entre a orientação θ da partícula e sua posição angular ϕ , isto é: $\theta \sim \phi$.

Um fenômeno único para tal sistema é que, ao aumentar a rigidez (o k) do potencial, o sistema volta a seguir uma distribuição de Boltzmann, mas dessa vez com a orientação das partículas semelhante ao caso ativo, ou seja, fortemente correlacionada com a posição angular. Assim, o sistema apresenta uma mudança de regime passivo quando k é muito baixo, que corresponde ao caso visto na seção 3.1, para um regime ativo e para um regime semelhante ao passivo, mas polarizado (MALAKAR et al., 2020). Estes resultados são sumarizados na figura 6, onde no painel da esquerda mostra as regiões onde existe o regime passivo (em amarelo) e o regime ativo (em verde). Neste caso, fica clara as regiões

onde tal reentrância para o regime passivo ocorre. Na figura da direita temos a distribuição da probabilidade radial das partículas, que no caso passivo tem um pico para $r = 0$, sendo a função monotonicamente decrescente, enquanto que no caso ativo o pico está em $r > 0$.

Foi visto, a partir de um estudo analítico, que esta transição passivo-ativo-passivo ocorre de maneira similar para sistemas d -dimensionais (CHAUDHURI; DHAR, 2021). Também foi observado tal comportamento em experimentos com armadilhas acústicas (TAKATORI et al., 2016) e ópticas (SCHMIDT et al., 2021).

Figura 6 – (a) Diagrama de fase mostrando as regiões ativas e passivas para a distribuição radial de partículas ativas. λ representa a razão entre a velocidade de autopropulsão v_0 e D_R , com $\lambda = 0$ correspondendo ao caso passivo e $\lambda \rightarrow \infty$ ao caso sem ruído térmico. β é proporcional à k/D_R . (b) Distribuição de probabilidade radial para $\lambda = 4$ onde fica evidente a mudança entre o regime passivo (com pico em $r = 0$), para o ativo (com pico em $r > 0$) e de volta para o passivo.



Fonte: Malakar et al. (2020)

4.2 EFEITOS DO TERMO DE AUTO-ALINHAMENTO PARA UMA PARTÍCULA CONFINADA

Ao introduzir um acoplamento entre a velocidade e a direção da partícula (denotado pelo parâmetro β neste trabalho, distinto do β visto na seção anterior), o sistema passa a apresentar novos comportamentos. No trabalho de Dauchot e Démery (2019), foram observados dois estados dinâmicos para uma partícula em um poço parabólico: um que é semelhante ao regime ativo discutido na seção anterior, denotado como *estado escalador*, e

um novo chamado de *estado orbital*¹.

No primeiro estado, uma partícula vai escalar para fora do potencial, e vai realizar somente um movimento difusivo na direção perpendicular à sua orientação devido ao D_R . Já no outro estado observado, que ocorre quando β é maior que um certo valor, o ângulo entre o vetor velocidade \vec{v} e a orientação \hat{n} passa a assumir um valor não-nulo. Consequentemente, o torque de alinhamento β gera uma velocidade angular e a partícula passa a apresentar um movimento circular centrado na origem do potencial, como é de se esperar do nome *orbital* deste regime. Como o potencial é radialmente simétrico, o movimento pode ser tanto horário quanto anti-horário e mudanças entre ambos sentidos ocorrem. A velocidade azimutal vai então oscilar temporalmente entre dois valores, representando ambos sentidos, enquanto que no caso escalador temos um ruído que possui média zero, como pode ser visto na figura 7, que reflete o movimento Browniano angular da partícula. Na figura temos as distribuições das posições e velocidades em ambos regimes, de modo que a distinção fica clara. Para o estado escalador, a partícula está sempre a uma mesma distância da origem e sua velocidade angular é dada puramente pelo ruído térmico, já no regime orbital a distância radial da partícula passa a ser uma distribuição, de forma que a coordenada radial r da partícula passa a ter mais liberdade de valores que pode assumir enquanto que a velocidade azimutal, apesar de também possuir ruído térmico, está mais nitidamente concentrada entre dois valores (± 1).

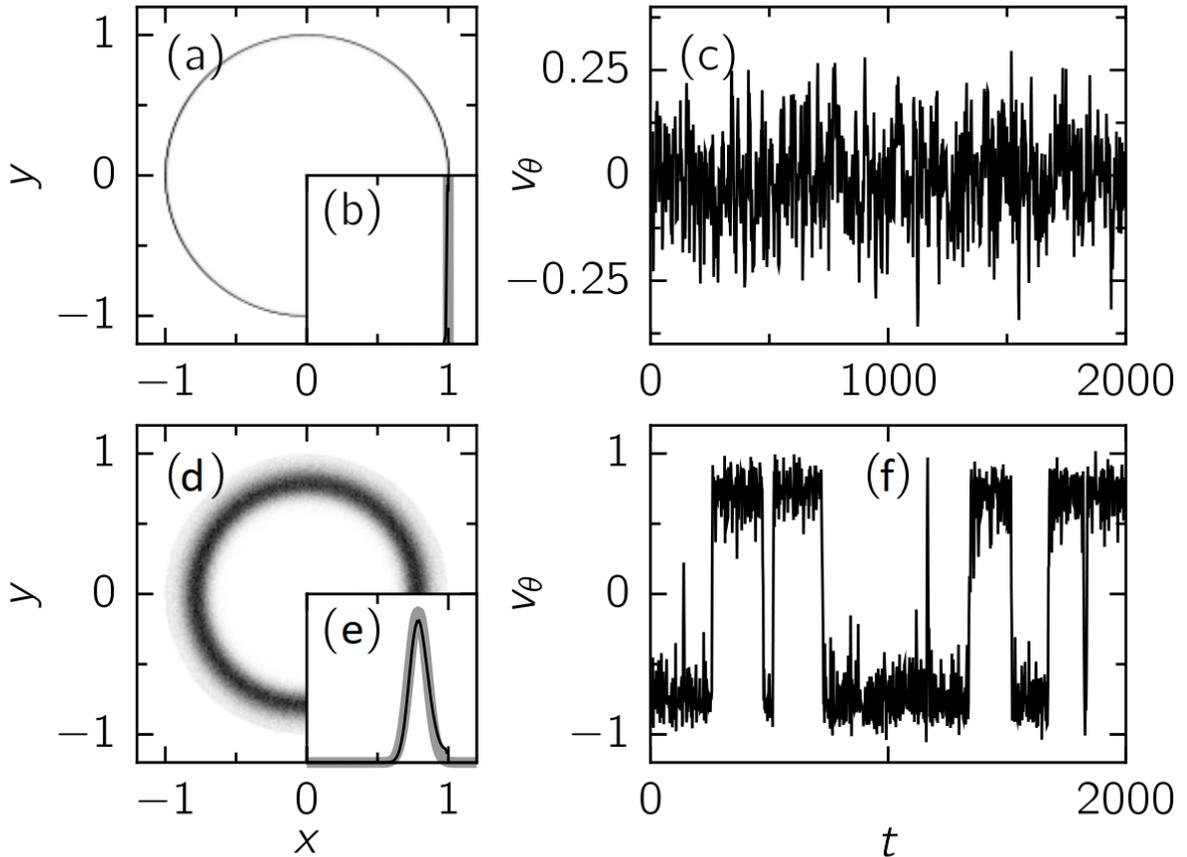
Para melhor entender os estados, primeiro é preciso ver que, para um potencial confinador, existirá pelo menos uma curva que satisfaz a condição $\nabla V(x, y) = \hat{n}$, isso é, uma curva limite até onde a partícula consegue chegar sem conseguir ultrapassar tal curva. Para um potencial harmônico, por exemplo, tal curva será um círculo de pontos fixos, pois quando a partícula chega em um deles o movimento do sistema cessa na ausência de ruído térmico. Ou seja, a partícula simplesmente escala o potencial e para. Enquanto que o formato da curva em si depende apenas do potencial confinador, a estabilidade dos pontos na curva está relacionada com o valor de β da partícula.

Quando β é pequeno, os pontos fixos para a curva limite são todos estáveis e o sistema não apresenta regime orbital. No entanto, a partir de um certo beta crítico β^* , que a princípio pode ser distinto para cada ponto da curva e que depende da forma exata do potencial, o ponto da curva limite torna-se instável, de maneira que caso a partícula chegue em um desses pontos as flutuações térmicas dão origem a uma velocidade perpendicular à curva fazendo com que a partícula saia do ponto fixo no qual estava.

Para potenciais com simetria radial, β^* é o mesmo para todos pontos da curva limite, que vão se tornar instáveis simultaneamente, que explica a transição abrupta entre o movimento escalador e o orbital descritos previamente. No entanto, em um potencial anisotrópico, tal qual o elíptico por exemplo, os pontos ficam instáveis primeiro nos co-vértices, ao longo do eixo menor, com os vértices, de maior curvatura, ficando instáveis

¹ A partir daqui assumiremos que a partícula esteja no regime ativo.

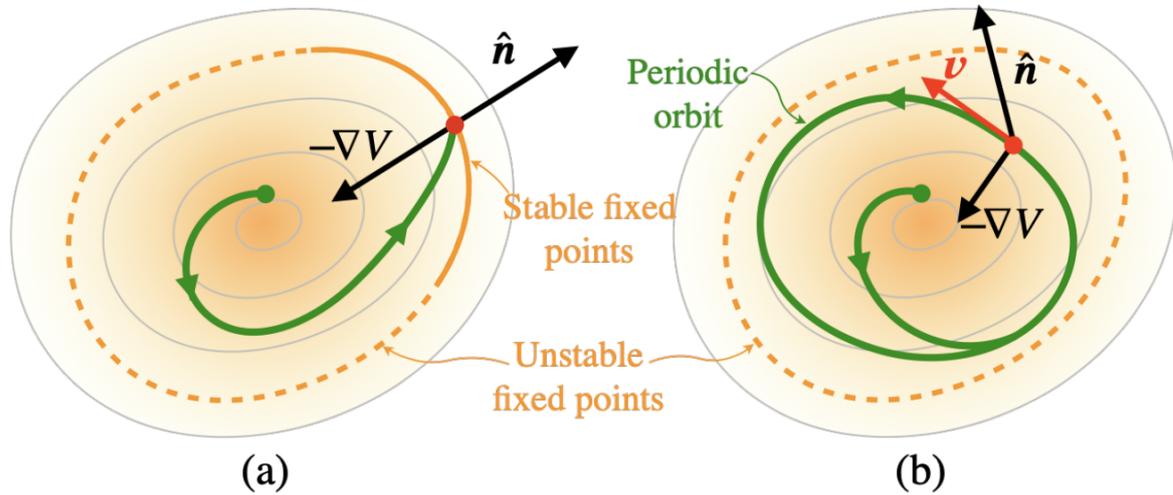
Figura 7 – Estados dinâmicos para uma partícula ativa em um poço harmônico. (a-c) Regime escalador. (d-f) Regime orbital. (a, d) Distribuição de probabilidade no plano $x - y$ (b, e) Distribuição da distância ao centro. (c, f) Velocidade azimutal v_θ em função do tempo.



Fonte: Dauchot e Démery (2019)

por último. Neste caso, existirá então um intervalo de β no qual parte dos pontos da curva limite são instáveis e parte é estável, algo que pode ser visto na figura 8, onde na figura da esquerda parte da curva está estável (linha preenchida) e parte instável (linha tracejada). Já na figura da direita, toda a curva é instável, de forma que a partícula não tem outra alternativa que não circular o potencial. Neste tipo de potencial também pode existir o dobramento de período na órbita da partícula (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2021).

Figura 8 – Trajetórias (em verde) para uma partícula (em vermelho) em um potencial. (a) Potencial com parte instável e parte estável, neste caso a partícula vai ficar “presa” na parte estável que é mais fechada. (b) Caso no qual todos os pontos fixos são instáveis, de forma que a partícula não consegue ficar em um só ponto e passa a orbitar o sistema.



Fonte: Damascena, Cabral e Silva (2021)

4.3 SISTEMAS INTERAGENTES CONFINADOS

Nas seções anteriores foram estudados os casos de partículas não-interagentes, primeiro sem o efeito de auto-alinhamento e depois com esse termo. Ao incluir interação entre as partículas, a combinação dos termos de autopropulsão, interação entre as partículas e alinhamento polar em um potencial externo dá origem a novos fenômenos, como por exemplo a formação de bombas hidráulicas, onde há um alinhamento espontâneo das direções no qual as partículas apontam (HENNES; WOLFF; STARK, 2014). Nesta seção apresentamos resultados originais obtidos a partir da análise numérica realizada em sistemas interagentes de partículas Brownianas ativas com termo de auto-alinhamento e confinadas em um potencial elíptico da forma

$$V(x, y) = \frac{x^2 + (1 + \varepsilon)y^2}{2}, \quad (4.1)$$

onde o ε , representando a excentricidade da elipse, foi tomado como um dos parâmetros livres para as simulações computacionais, assim como número de partículas N e a difusividade rotacional D_R . Para todos os casos descritos aqui foi utilizado o mesmo potencial de interação WCA da seção 3.3, com $\sigma = 0.2$ ² e intensidade de auto-alinhamento $\beta = 5$,

² Como veremos a seguir, para valores muito baixos de σ , é difícil de se observar transição entre os regimes coletivos, enquanto que para valores altos cada partícula ocupa uma área muito grande no espaço acessível para as partículas (definido pela curva limite vista na seção 4.1), de forma que com poucas partículas o potencial “enche”

visando evidenciar os efeitos causados por tal termo, exceto onde notado o contrário. Todas as simulações tiveram um tempo de relaxação igual a $1500T_0$, de forma a obter o sistema no estado estacionário.

4.3.1 Potencial radialmente simétrico

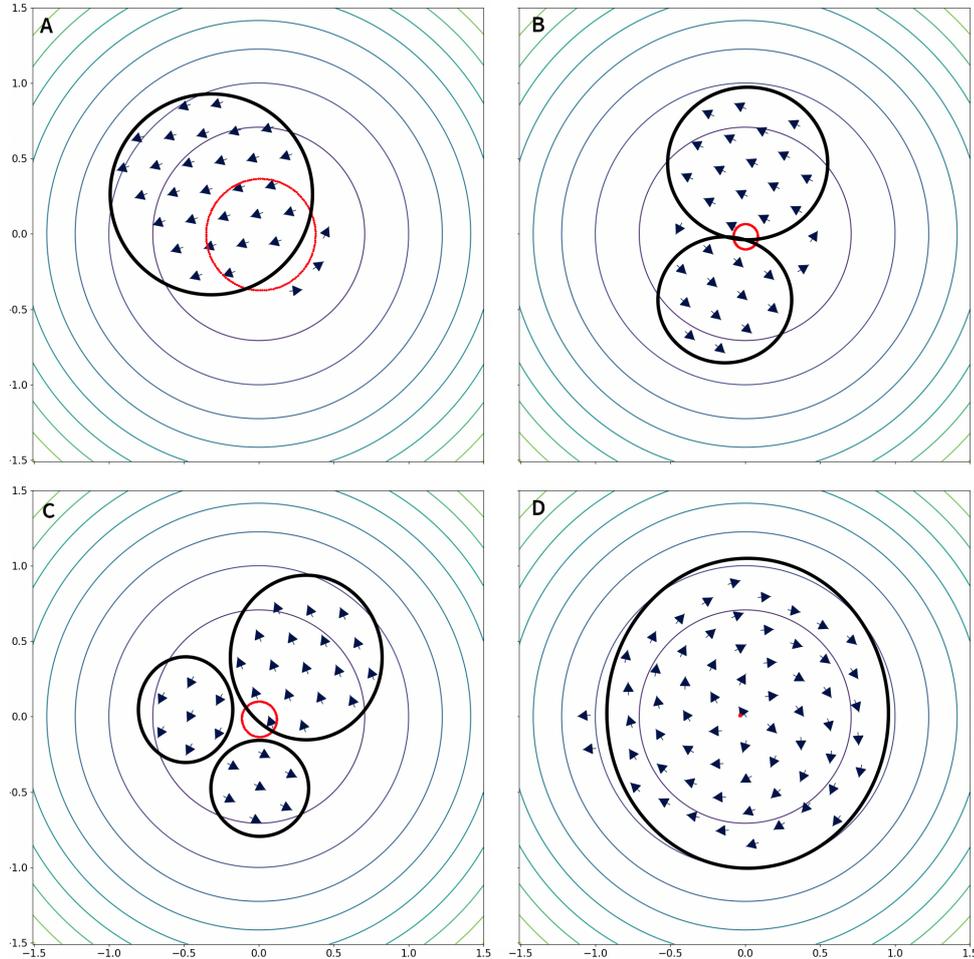
Ao analisar o caso mais simples, isso é, com simetria radial ($\varepsilon = 0$), a característica mais marcante é que, após um tempo de relaxação, o sistema se separa em *clusters*, grupos de partículas que se movem como um só corpo, mesmo sem interações atrativas entre as partículas. Os clusters então passam a realizar um movimento semelhante à fase orbital, descrita na seção anterior, no entanto, sem inversão no sentido de rotação. Neste caso, o movimento do centro de massa do sistema se torna um círculo centrado na origem do potencial.

Na ausência de ruído térmico, $D_R = 0$, a configuração final do sistema depende apenas das condições iniciais (neste trabalho, as posições e orientações iniciais das partículas foram uniformemente distribuídas ao longo do potencial). Ainda mais, quando D_R é pequeno (< 0.01), a quantidade e o tamanho de clusters que o sistema possui não varia com o tempo. Porém nem todas as partículas fazem parte de um cluster, estas são designadas como pontos dissidentes. Tais pontos desenvolvem dinâmica própria e não se juntam a outro cluster no decorrer do tempo. Tanto os clusters quanto os pontos dissidentes se movem no mesmo sentido e com a mesma velocidade, de forma que o sistema não apresenta colisões entre as partículas.

Ao aumentar o número de partículas no sistema, uma nova fase aparece na qual as partículas se agrupam em um só cluster e o sistema passa a se mover como um disco, rodando em torno de seu próprio eixo, similar a uma roda ou um disco de vinil. Esta fase também é vista em outros sistemas autopropelidos e é conhecida como moagem (do inglês *milling*). Tal regime surge para altas densidades em um sistema confinado, onde o potencial confinador juntamente com as interações repulsivas entre as partículas são mais fortes que a autopropulsão delas, forçando o sistema a assumir uma estrutura cristalina (DESEIGNE et al., 2012). Existe então uma saturação do poço harmônico para uma alta densidade, que faz com que a trajetória do centro de massa das partículas se torne um ponto.

Na figura 9 vemos exemplos das duas fases para sistemas com 32 e 64 partículas para um potencial radialmente simétrico. Nas imagens A, B e C temos configurações de 1, 2 e 3 clusters, respectivamente, para um sistema com $N = 32$. Como notado anteriormente, a única diferença entre os três casos são as condições iniciais do sistema. Neste casos, os clusters realizam um movimento orbital no potencial sem nenhuma rotação relativa ou alteração na estrutura interna. Para a imagem 9D temos um sistema de 64 partículas, das quais 62 fazem parte de uma dinâmica coletiva (moagem) enquanto duas

Figura 9 – (A, B, C) Sistemas com 32 partículas. (D) Sistema com 64 partículas. Cada partícula é representada por uma seta apontando na direção da orientação θ de cada partícula. A trajetória do centro de massa do sistema está em vermelho. Em (A) temos um cluster com três pontos dissidentes, em (B) dois clusters com três pontos dissidentes e em (C) três clusters sem nenhum ponto dissidente; os clusters estão circulado em preto. Em todas figuras $D_R = 0.001$ e $\beta = 5$.

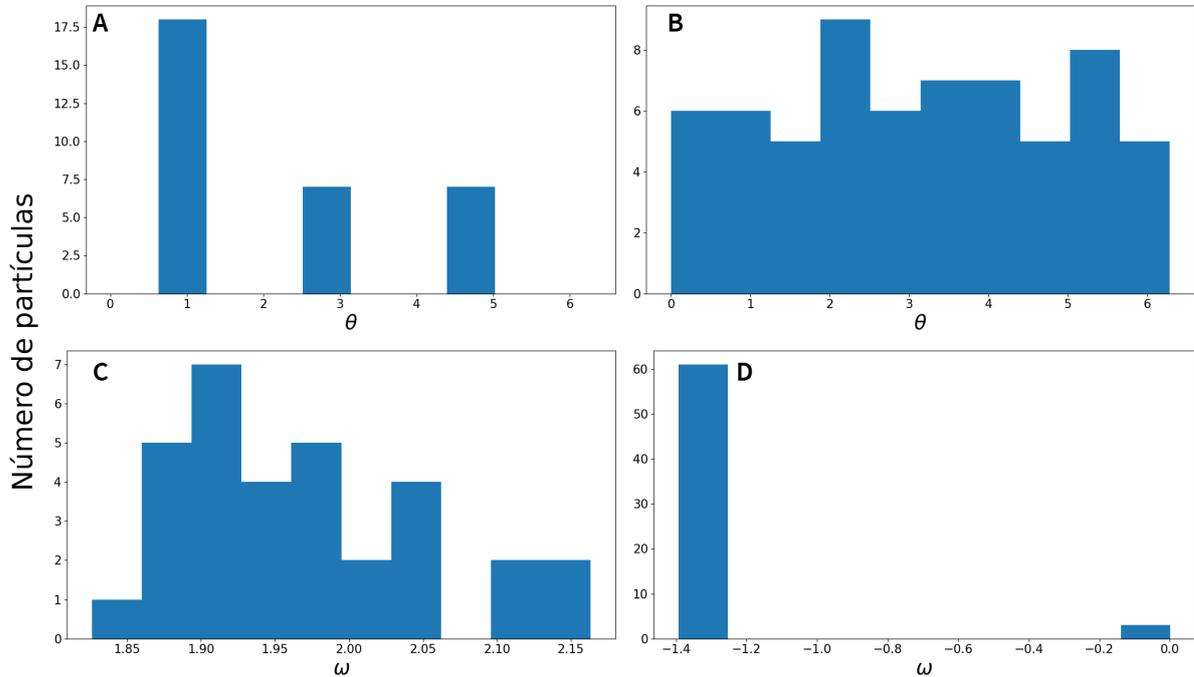


Fonte: Produzido pelo autor

estão removidas do movimento. Todos os pontos centrais se movem como uma entidade sem nenhum movimento relativo entre estas partículas, isso é, todas as camadas tem a mesma velocidade, e não há nenhum cisalhamento entre elas. Os dois pontos dissidentes não participam dessa dinâmica, ficando essencialmente parados por estarem “presos” entre o potencial harmônico que os empurra para o centro e a força repulsiva do grande cluster os empurrando para fora.

Temos os histogramas da orientação θ e velocidade angular ω das partículas na configuração com três clusters (figura 9C) e da fase de moagem (figura 9D) na figura 10. Nela, vemos a forte correlação das orientações dentro de cada cluster, gerando uma polarização denotada pelos três picos, enquanto a fase de moagem possui uma distribuição

Figura 10 – (A, C) Histogramas para as orientações θ e velocidade angular ω , respectivamente, de cada partícula na configuração de 3 clusters vista na figura 9C. (B, D) Similarmente, histogramas para θ e ω na fase de moagem vista na figura 9D.



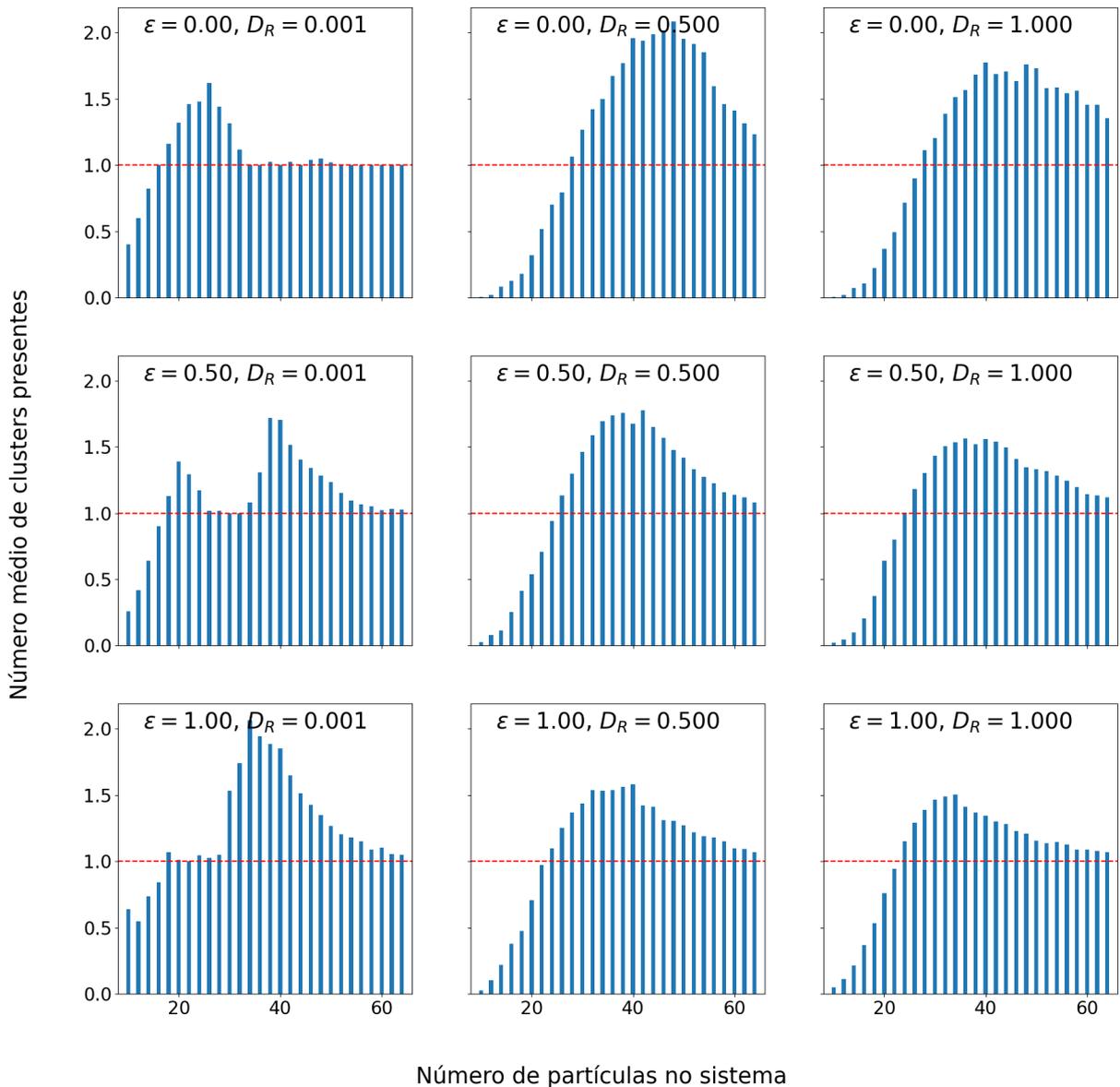
Fonte: Produzido pelo autor

quase uniforme, que mostra o ordenamento tipo vórtice das partículas. Para a velocidade angular, dada por $\vec{\omega}_i = \vec{v}_i \times \vec{r}_i / r_i^2$, vemos que existe uma certa dispersão ao redor de um valor para a fase de clusters, enquanto que no regime de moagem todo o sistema possui a mesma velocidade angular (exceto a barra localizado na origem, com $\omega = 0$, representando os pontos dissidentes e o ponto que pode ficar muito próximo do eixo de rotação).

A fim de estudar as diferentes configurações que cada sistema pode apresentar, foi utilizado o algoritmo DBSCAN (visto em mais detalhes na seção 2.3) para contar o número médio de clusters que uma configuração (sistemas com mesmo D_R , N e ε) apresenta. Como a distância entre as partículas é da ordem de σ (do potencial WCA) o valor de ε para o DBSCAN foi tomado como 1.25σ , pois foi visto que com este valor os clusters são identificados corretamente. O valor de $minPts$ utilizado foi 6, maior do que o valor tomado como regra geral, que é duas vezes a dimensão dos dados (SANDER et al., 1998), no entanto, tal valor não alterou os resultados significativamente.

Com 100 testes para cada configuração, de forma que primeiro foi tomada uma média temporal e então de ensemble, obtemos os resultados na figura 11. Para o caso $\varepsilon = 0$ e $D_R = 0.001$, no canto superior esquerdo, temos o comportamento que foi descrito anteriormente. Para poucas partículas, o número médio de clusters sobe junto com a quantidade de partículas. Valores abaixo de 1 indicam que existem mais configurações

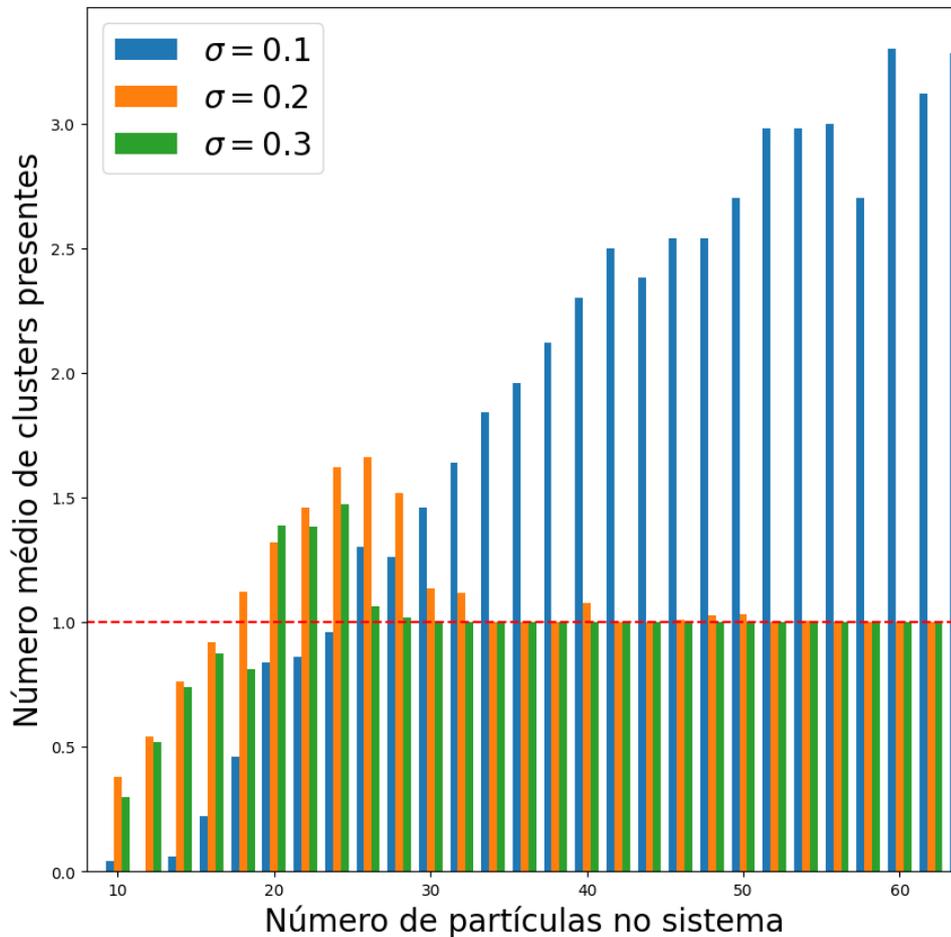
Figura 11 – Número médio de clusters em um potencial elíptico em função do número de partículas, com uma linha tracejada em vermelho para 1.



Fonte: Produzido pelo autor

sem a presença de clusters (todas partículas são dissidentes) do que sistemas com a formação de clusters. No entanto, após um certo valor de N a média de clusters vai para 1, representando a saturação do potencial e a mudança da fase com movimento orbital para a fase de moagem. O aumento de D_R está associado com maior liberdade para as partículas do sistema, fazendo com que o ponto de saturação para a fase de moagem seja maior. O número médio de clusters também sobe, indicando que o sistema se divide em mais clusters do que o caso com D_R pequeno. Similar a um derretimento, as estruturas cristalinas antes vistas não existem mais pois o sistema passa a mostrar movimento relativo entre as partículas dentro dos clusters.

Figura 12 – Número médio de clusters para um potencial simétrico ($\varepsilon = 0$) para três valores distintos do tamanho das partículas σ .

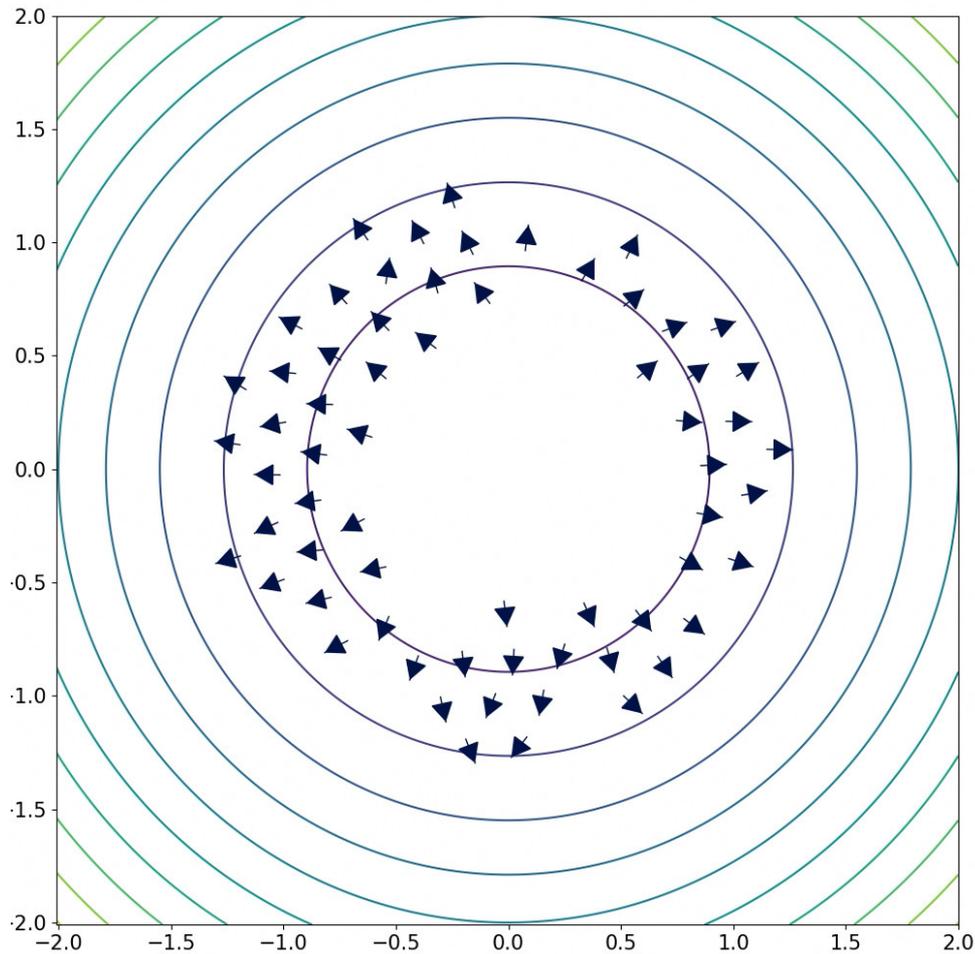


Fonte: Produzido pelo autor

Ao modificar o tamanho das partículas, representado por σ , o número máximo de partículas que o sistema comporta antes de ir para um regime de moagem também muda. A figura 12 ilustra tal comportamento, onde quanto maior o σ do sistema, mais rápido a média vai para zero, representando uma transição para a fase de moagem. Para $\sigma = 0.1$, o número médio de clusters que o sistema apresenta continua crescendo depois que os outros saturam. O número médio de clusters também é maior que nos outros casos, de fato, é possível ver configurações com muito mais clusters do que em sistemas com σ maior. Não foi observada transição para a fase de moagem em $\sigma = 0.1$ mesmo para valores mais altos de N (foram analisados sistemas de até $N = 108$). Tal fenômeno ocorre pois quando a área ocupada por cada partícula muda, o número máximo de partículas que podem ocupar a região acessível do potencial também muda, de forma que uma partícula com $\sigma = 0.1$ ocupa 1/4 da área de uma partícula com $\sigma = 0.2$ e isso faz com que o potencial comporte mais partículas antes de saturar.

4.3.1.1 Papel do parâmetro β na fase de moagem

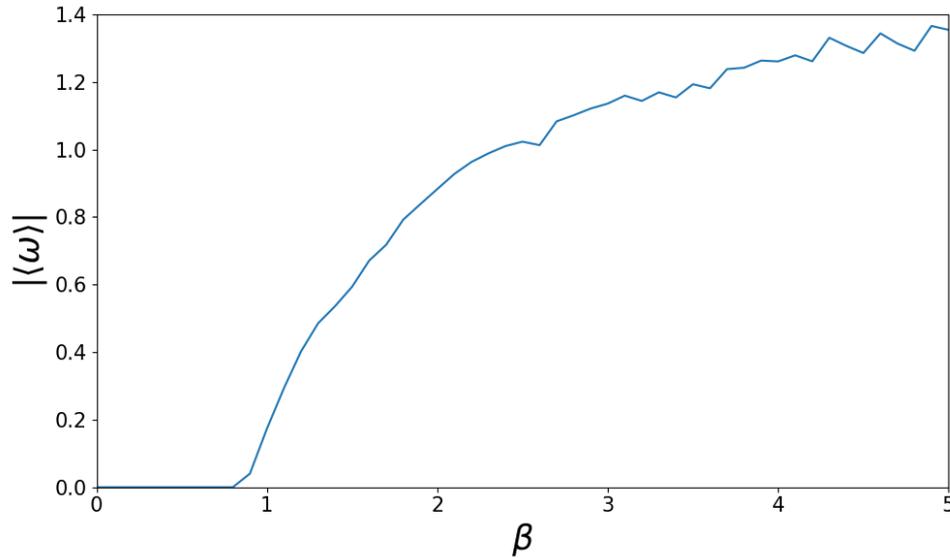
Figura 13 – Fase escaladora para sistema com $N = 64$ e $\beta = 0.1$.



Fonte: Produzido pelo autor

Como vimos na seção 4.2, quando β é baixo demais o sistema não apresenta uma fase orbital, apenas escaladora. Em sistemas interagentes isso também é verdade, de forma que sem um torque de auto-alinhamento e com interações estéricas as partículas do sistema tentam apenas fugir do potencial. Na figura 13 temos um sistema interagente na fase escaladora, no qual tanto a tendência das partículas de se afastarem do centro quanto a correlação entre a orientação θ das partículas e sua posição angular ϕ (como mencionado no início do capítulo) ficam evidentes. Neste caso o torque de auto-alinhamento é muito fraco para que a fase orbital ou de moagem apareçam, assim, as dinâmicas vistas são dominadas pelas forças de repulsão entre as partículas e pelo ruído térmico, com o sistema ficando completamente estático na ausência de ruído. O comportamento visto é praticamente independente do número de partículas no sistema, com o aumento do mesmo servindo apenas para ocupar mais espaço.

Figura 14 – Variação da velocidade angular média do sistema em relação à β para $N = 64$.



Fonte: Produzido pelo autor

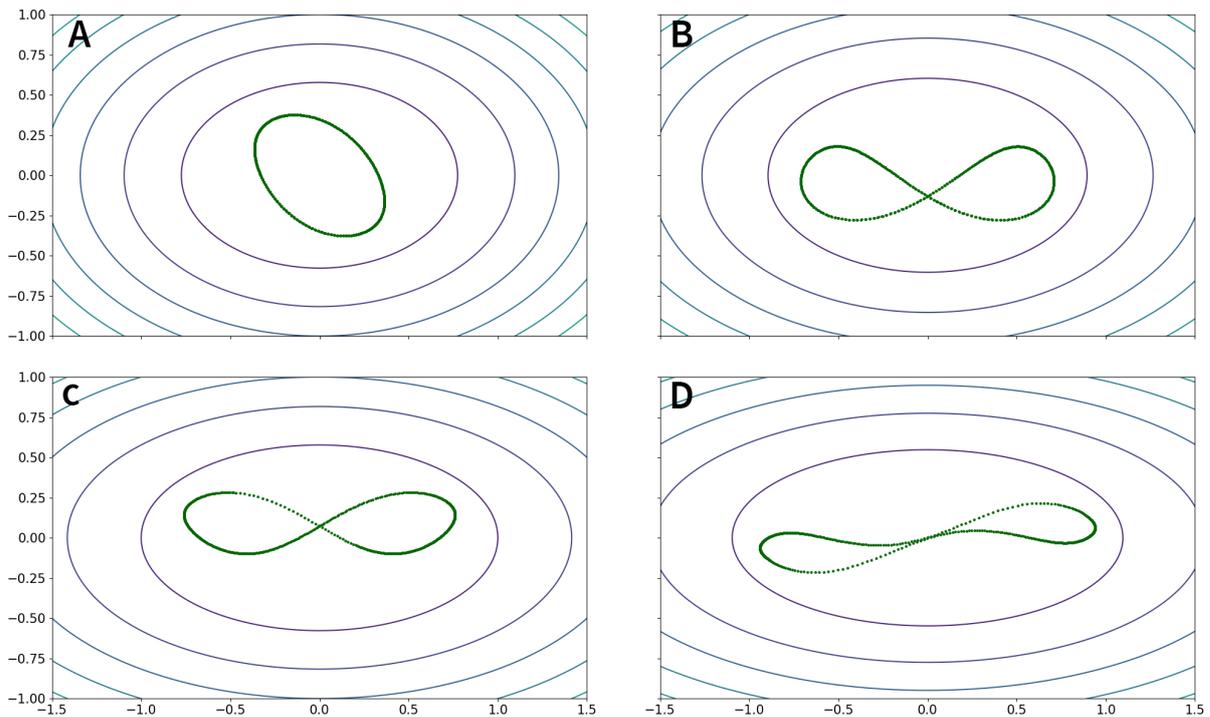
Contudo, na fase de moagem vista previamente, existe uma ordem polar onde todas partículas rodam com mesma velocidade angular. Foi então realizada uma análise da velocidade angular média $\langle \omega \rangle$ de um sistema com 64 partículas em relação ao parâmetro β . Intuitivamente, esperamos que para $\beta = 0$ o valor de $\langle \omega \rangle$ também seja 0, e que para $\beta = 5$, que é o caso estudado neste capítulo, seja aproximadamente ≈ 1.4 , como pode ser visto na figura 10D. A figura 14 confirma tais suposições, e vemos que para $\beta < 1$ a velocidade angular média do sistema é praticamente zero e a partir deste valor a velocidade média passa a aumentar, indicando um $\beta_{\text{crit}} \simeq 1.0$ para que exista a fase colativa de moagem ao invés de cada partícula realizar um movimento escador.

Tal transição pode ser utilizada para entender os resultados da fase de moagem vistas nos experimentos de Deseigne et al. (2012), onde para altas densidades, as paredes no qual o sistema está confinado passam a ter maior importância para as dinâmicas coletivas, e o termo de alinhamento polar das partículas por sua vez faz com que o sistema passe a ter uma velocidade angular média não-nula, dando origem ao regime de moagem.

4.3.2 Efeitos da anisotropia

Com a quebra da simetria radial, $\varepsilon > 0$, o sistema passa a apresentar novos comportamentos. A fase orbital, como discutida acima, ainda é presente de maneira similar, onde as partículas percorrem uma trajetória fechada e a posição relativa entre as partículas não muda com o tempo. No entanto para valores de $\varepsilon \lesssim 1$, a trajetória que antes era circular sofre um “achatamento” transformando-se numa elipse. Ao aumentar ε acima de 1 há um

Figura 15 – Trajetória do centro de massa para um sistema com $N = 32$ e $D_R = 0.001$ com (A) $\varepsilon = 0.80$, (B) $\varepsilon = 1.2$, (C) $\varepsilon = 2.0$ e (D) $\varepsilon = 3.0$. Em (A) o sistema realiza um movimento orbital de período simples em forma de elipse, enquanto em (B, C) há um movimento orbital de período duplo. Para (D) temos uma órbita de período simples, mas deformada. Todos os pontos são tomados em intervalos de tempo iguais, de forma que para os pontos com maior espaçamento denotam regiões onde o sistema é mais rápido. Órbitas espelhadas também são vistas para ambos casos.



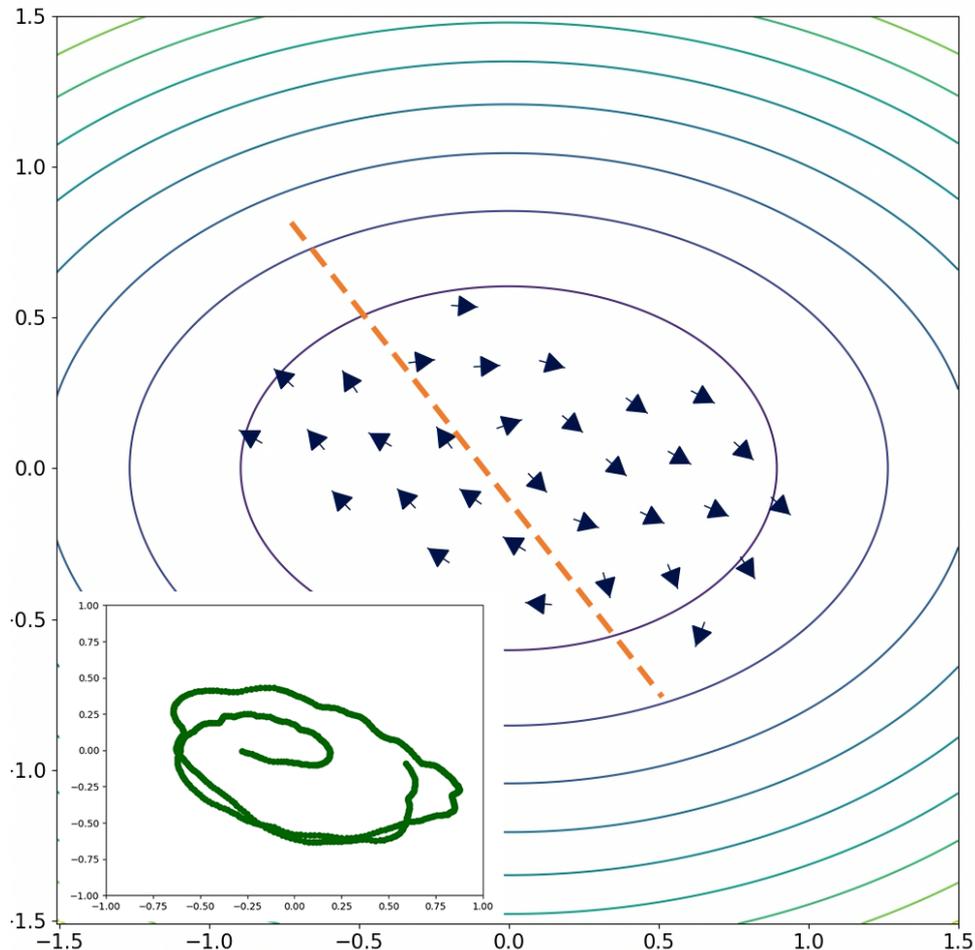
Fonte: Produzido pelo autor

dobramento de período e a trajetória das partículas se torna um oito. Na figura 15 temos trajetórias para sistemas com período simples e duplo para quatro valores diferentes de ε . Em todas imagens as partículas se movimentam de maneira similar, isso é, como um só cluster³ sem modificações em sua estrutura interna, contudo, para potenciais mais anisotrópicos, as velocidades das partículas nas pontas é menor que na região próxima da origem, que está ilustrado no distanciamento entre os pontos. Isso se deve à maior curvatura nas vértices, que força o sistema a passar mais tempo nestas regiões. Para valores mais altos de ε , é possível que existam períodos maiores, que são vistos no caso de uma só partícula (DAMASCENA, 2020). Apesar disso, tais órbitas não foram observadas claramente.

A fase de moagem que aparecia para sistemas com N alto não aparece mais. Em seu

³ Foram encontrados configurações no qual existem mais de um cluster para potenciais anisotrópicos, semelhantemente ao caso isotrópico, os clusters percorrem a mesma órbita sem colidir. No entanto, tais casos ficam cada vez mais raros conforme ε aumenta, pois o “estreitamento” na região central faz com que seja cada vez mais difícil evitar colisões.

Figura 16 – Fase de moagem anisotrópica para sistema com $N = 32$, $\varepsilon = 1.20$ e $D_R = 0.001$. O tracejado laranja “separa” as partículas que se movem para cima do potencial e as que vão para baixo. Na figura menor temos a trajetória de uma partícula, que não é fechada e não possui velocidade constante.



Fonte: Produzido pelo autor

lugar existe um comportamento que de maneira similar roda em torno do próprio eixo, com o centro de massa reduzido a um ponto, mas as partículas não possuem velocidade angular constante. Então, ao contrário dos casos já vistos, neste fase de moagem anisotrópica existe um movimento relativo entre as partículas e a velocidade radial das mesmas é diferente de zero. Uma outra diferença é que este caso ocorre para números menores de partículas, isto é, um mesmo sistema com N e ε iguais pode evoluir tanto para a fase de moagem anisotrópica quanto para a fase orbital.

Tal comportamento está ilustrado na figura 16 onde temos um sistema com $N = 32$ e $\varepsilon = 1.20$. Neste caso, as partículas sobem do lado esquerdo da linha tracejada laranja e descem na direita enquanto o centro de massa do sistema se mantém praticamente parado com a passagem do tempo. Uma outra diferença desta fase em relação às outras é que as trajetórias individuais de cada partícula não são fechadas, demonstrando o comportamento

errático de cada partícula.

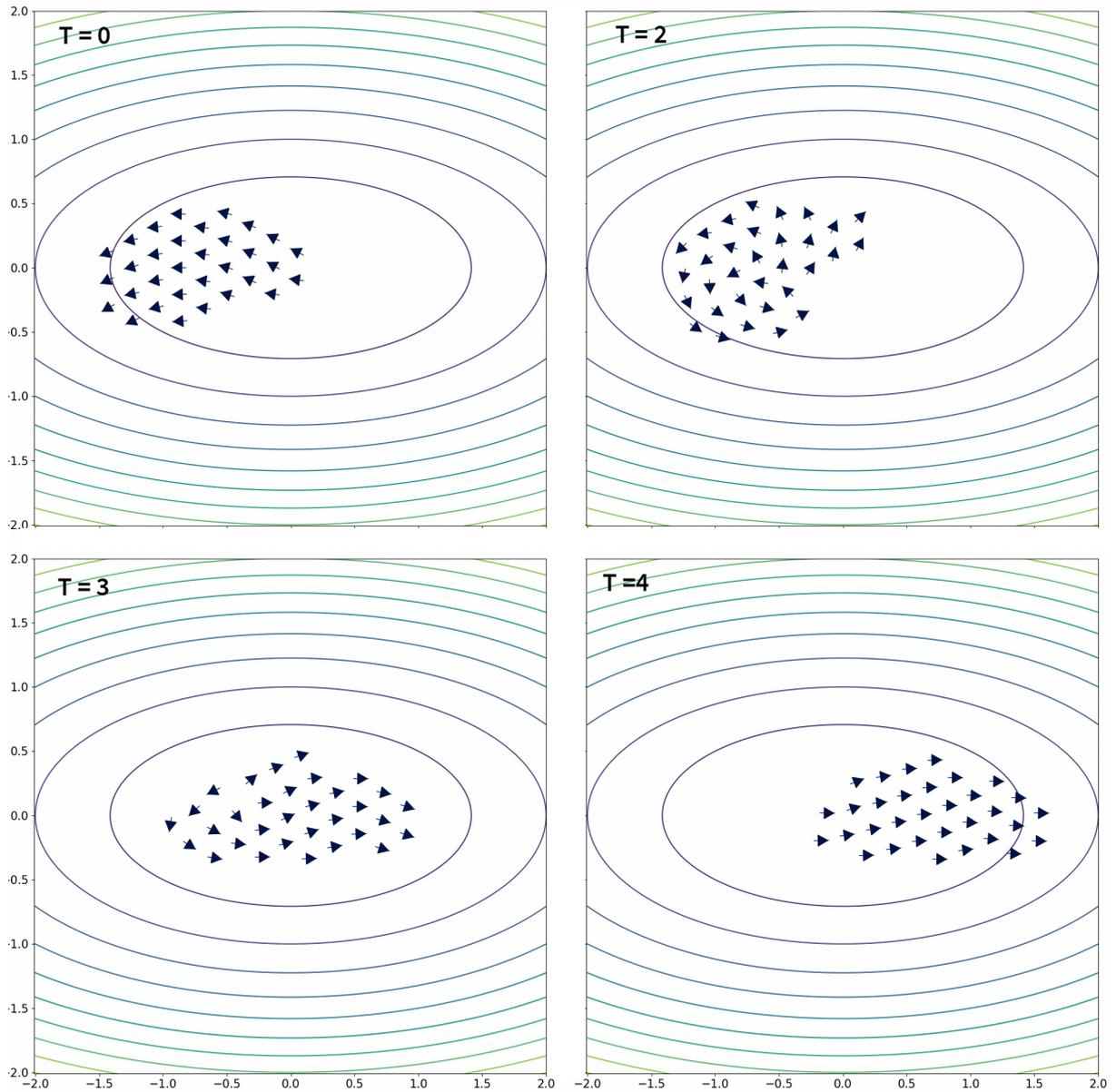
Uma terceira fase surge para sistemas com ε mais altos (neste estudo foi observado para valores $\varepsilon \gtrsim 3$) que aparece como um meio-termo entre as outras duas. Neste regime que chamaremos de *fluido intermitente* as partículas se comportam como um fluido quando estão na parte central do potencial (no qual a velocidade é mais alta, fenômeno também visto na figura 15) mas ao chegar nos vértices do potencial, o sistema “condensa” em um cluster. Nas extremidades do potencial, o cluster realiza uma rotação e cisalha, semelhantemente à uma onda do mar, movendo-se para o outro vértice da elipse e repetindo o processo. Assim, o sistema periodicamente oscila entre um estado cristalino e um fluido. O movimento do centro de massa neste caso é uma linha ao longo dos focos da elipse, diferenciando esta fase das outras vistas. Esta fase ocorre mesmo quando D_R é muito baixo, sendo esta uma característica intrínseca das partículas dentro do potencial.

A dinâmica típica para a fase fluida intermitente está na figura 17, onde temos 4 instantes de tempo mostrando as diferentes partes desta fase. No instante inicial temos o sistema em um dos vértices. Em seguida, as partículas realizam uma rotação no sentido anti-horário e então “escoam” para o outro vértice, no qual condensam novamente, reiniciando o ciclo. Assim, podemos classificar o sistema nos vértices ($T = 0$ e $T = 4$) como uma fase sólida, onde todas as partículas movem como um só corpo e sem movimento entre as partículas, enquanto que no meio do potencial ($T = 2$ e $T = 3$) o sistema está se reconfigurando, apresentando um movimento relativo entre as partículas, similar a um fluido.

A fim de classificar se o sistema está numa fase sem movimento interno dentro dos clusters ou numa fase fluida, foi medido o desvio padrão da média temporal entre as distâncias para cada par de partículas no sistema. Desta forma, para uma estrutura cristalina, tal qual a fase de moagem isotrópica, este desvio será zero, enquanto que para os casos com movimento relativo entre as partículas vai ser maior que zero.

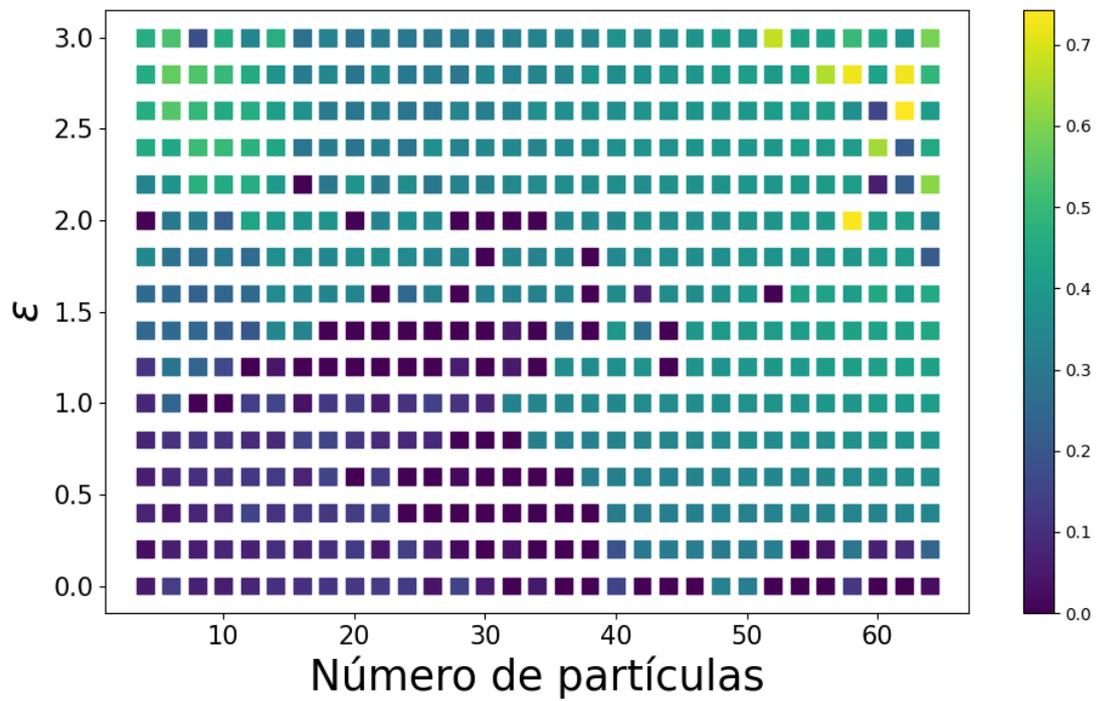
Na figura 18 temos o diagrama de fases construído desta maneira. Este resultado mostra que o regime cristalino é afetado tanto pela excentricidade do potencial quanto pelo número de partículas no sistema. O aumento de ε está associado com o aumento do desvio padrão já que a região acessível para as partículas fica cada vez mais estreita, impossibilitando a realização dos movimentos de revolução coletiva vistos nos potenciais isotrópicos (orbital e de moagem) sem que o sistema perca a estrutura interna por conta das forças exercida pelo potencial externo. Já o aumento de N gera uma maior nuvem de partículas cuja repulsão força o sistema a ocupar regiões onde o potencial externo é mais intenso, que por sua vez faz com que as fases cristalinas tenham mais dificuldade em se manter.

Figura 17 – Quatro *snapshots* para o fase fluida intermitente. Foram utilizadas cores para diferenciar as partículas. Tempos estão em unidades de T_0 e $D_R = 0.001$.



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 18 – Desvio padrão das distâncias entre pares para $D_R = 0.001$ com variação de N e ε . Cores mais intensas representam maior desvio padrão.



Fonte: Produzido pelo autor

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação estudamos a dinâmica de partículas Brownianas ativas em várias situações diferentes a partir de simulações numéricas. Tais partículas são caracterizadas por ter uma direção para a qual elas se propelem. Neste estudo consideramos sistemas nos quais há interações entre as partículas.

Inicialmente foi feita uma revisão de resultados já conhecidos para sistemas de partículas ativas na ausência de forças externas, na qual a equivalência entre sistemas ativos e passivos para grandes escalas espaciais e temporais foi vista, assim como a separação de fases que aparece em sistemas interagentes, que é uma característica peculiar de sistemas ativos. Quando confinado em um potencial harmônico, foi feita uma revisão para a nova fase dinâmica que surge na presença de um termo de auto-alinhamento entre a velocidade e a orientação, onde a partícula passa a realizar um movimento orbital na armadilha.

Quanto aos resultados originais desta dissertação, foram explorados os efeitos combinados entre o torque de auto-alinhamento e interações repulsivas entre as partículas. Para sistemas livres, foi observada uma transição para uma fase que possui polarização global e transporte líquido não-nulo, fenômeno que não é visto para sistemas sem o alinhamento das orientações. Ao introduzir um potencial confinador harmônico novos comportamentos aparecem, o mais notável entre estes sendo a divisão do sistema em clusters de tamanhos diversos que realizam orbitas ao redor do potencial. Na presença de uma anisotropia, a órbita se transforma em uma elipse e então sofre um dobramento de período, transformando-se numa lemniscata. Novas fases dinâmicas também emergem, entre elas uma onde todo o sistema roda como um só corpo rígido, similar a um disco, e outra onde o sistema intermitentemente oscila entre uma fase cristalina e uma fase fluida.

Por fim, este trabalho pode ser continuado com um estudo detalhado sobre a presença do termo de auto-alinhamento nas dinâmicas coletivas de sistemas ativos. Tais desdobramentos podem focar tanto em métodos menos arbitrários para a determinação da transição de fase vista na seção 3.3, tais quais a susceptibilidade da velocidade média ou o cumulante de Binder, como a busca de outras fases dinâmicas que podem emergir em potenciais confinadores diferentes.

REFERÊNCIAS

- ABELSON, H.; SUSSMAN, G. J. *Structure and interpretation of computer programs*. [S.l.]: The MIT Press, 1996.
- ATTANASI, A.; CAVAGNA, A.; CASTELLO, L. D.; GIARDINA, I.; MELILLO, S.; PARISI, L.; POHL, O.; ROSSARO, B.; SHEN, E.; SILVESTRI, E. et al. Finite-size scaling as a way to probe near-criticality in natural swarms. *Physical review letters*, APS, v. 113, n. 23, p. 238102, 2014.
- BALLERINI, M.; CABIBBO, N.; CANDELIER, R.; CAVAGNA, A.; CISBANI, E.; GIARDINA, I.; LECOMTE, V.; ORLANDI, A.; PARISI, G.; PROCACCINI, A. et al. Interaction ruling animal collective behavior depends on topological rather than metric distance: Evidence from a field study. *Proceedings of the national academy of sciences*, National Acad Sciences, v. 105, n. 4, p. 1232–1237, 2008.
- BARRÉ, J.; CHÉTRITE, R.; MURATORI, M.; PERUANI, F. Motility-induced phase separation of active particles in the presence of velocity alignment. *Journal of Statistical Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 158, n. 3, p. 589–600, May 2014. ISSN 1572-9613. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10955-014-1008-9>>.
- BASU, U.; MAJUMDAR, S. N.; ROSSO, A.; SCHEHR, G. Active brownian motion in two dimensions. *Physical Review E*, American Physical Society (APS), v. 98, n. 6, Dec 2018. ISSN 2470-0053. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.98.062121>>.
- BECHINGER, C.; LEONARDO, R. D.; LÖWEN, H.; REICHHARDT, C.; VOLPE, G.; VOLPE, G. Active particles in complex and crowded environments. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 88, n. 4, Nov 2016. ISSN 1539-0756. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.88.045006>>.
- BERG, H. C.; TURNER, L. Movement of microorganisms in viscous environments. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 278, n. 5702, p. 349–351, 1979.
- CAPRINI, L.; MARCONI, U. M. B.; PUGLISI, A. Spontaneous velocity alignment in motility-induced phase separation. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 124, n. 7, Feb 2020. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.078001>>.
- CATES, M. E.; TAILLEUR, J. When are active brownian particles and run-and-tumble particles equivalent? consequences for motility-induced phase separation. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 101, n. 2, p. 20010, Jan 2013. ISSN 1286-4854. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/101/20010>>.
- CATES, M. E.; TAILLEUR, J. Motility-induced phase separation. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Annual Reviews, v. 6, n. 1, p. 219–244, Mar 2015. ISSN 1947-5462. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031214-014710>>.
- CHAUDHURI, D.; DHAR, A. Active brownian particle in harmonic trap: exact computation of moments, and re-entrant transition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2021, n. 1, p. 013207, Jan 2021. ISSN 1742-5468. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/abd031>>.

DAMASCENA, R. H. *Dinâmica não-linear de uma partícula autopropelida em armadilhas bidimensionais*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Sep 2020.

DAMASCENA, R. H.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. de S. Competing orbits and chaotic dynamics of a confined self-propelled particle. Em preparação. 2021.

DAUCHOT, O.; DÉMERY, V. Dynamics of a self-propelled particle in a harmonic trap. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 122, n. 6, Feb 2019. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.068002>>.

DELL'ARCIPRETE, D.; BLOW, M.; BROWN, A.; FARRELL, F.; LINTUVUORI, J. S.; MCVEY, A.; MARENDUZZO, D.; POON, W. C. A growing bacterial colony in two dimensions as an active nematic. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–9, 2018.

DESEIGNE, J.; LÉONARD, S.; DAUCHOT, O.; CHATÉ, H. Vibrated polar disks: spontaneous motion, binary collisions, and collective dynamics. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry, v. 8, n. 20, p. 5629–5639, 2012.

DIGREGORIO, P.; LEVIS, D.; SUMA, A.; CUGLIANDOLO, L. F.; GONNELLA, G.; PAGONABARRAGA, I. Full phase diagram of active brownian disks: From melting to motility-induced phase separation. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 121, n. 9, Aug 2018. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.098003>>.

ESTER, M.; KRIEGEL, H.-P.; SANDER, J.; XU, X. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. In: . [S.l.]: AAAI Press, 1996. p. 226–231.

FILY, Y.; MARCHETTI, M. C. Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 108, n. 23, Jun 2012. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.235702>>.

GEYER, D.; MARTIN, D.; TAILLEUR, J.; BARTOLO, D. Freezing a flock: Motility-induced phase separation in polar active liquids. *Physical Review X*, American Physical Society (APS), v. 9, n. 3, Sep 2019. ISSN 2160-3308. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevX.9.031043>>.

HENNES, M.; WOLFF, K.; STARK, H. Self-induced polar order of active brownian particles in a harmonic trap. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 112, n. 23, Jun 2014. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.238104>>.

HOWSE, J. R.; JONES, R. A. L.; RYAN, A. J.; GOUGH, T.; VAFABAKHSH, R.; GOLESTANIAN, R. Self-motile colloidal particles: From directed propulsion to random walk. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 99, n. 4, Jul 2007. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.048102>>.

JAHNKE, T.; UDRESCU, T.; MIKL, M. Numerical methods in mathematical finance. 2012.

- KOUMAKIS, N.; MAGGI, C.; LEONARDO, R. D. Directed transport of active particles over asymmetric energy barriers. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry (RSC), v. 10, n. 31, p. 5695–5701, 2014. ISSN 1744-6848. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C4SM00665H>>.
- LINDEN, M. N. van der; ALEXANDER, L. C.; AARTS, D. G.; DAUCHOT, O. Interrupted motility induced phase separation in aligning active colloids. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 123, n. 9, Aug 2019. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.098001>>.
- MALAKAR, K.; DAS, A.; KUNDU, A.; KUMAR, K. V.; DHAR, A. Steady state of an active brownian particle in a two-dimensional harmonic trap. *Physical Review E*, American Physical Society (APS), v. 101, n. 2, Feb 2020. ISSN 2470-0053. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.101.022610>>.
- OKSENDAL, B. *Stochastic differential equations: an introduction with applications*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- POTOTSKY, A.; STARK, H. Active brownian particles in two-dimensional traps. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 98, n. 5, p. 50004, 2012.
- REDNER, G. S.; HAGAN, M. F.; BASKARAN, A. Structure and dynamics of a phase-separating active colloidal fluid. *Biophysical Journal*, Elsevier BV, v. 104, n. 2, p. 640a, Jan 2013. ISSN 0006-3495. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.bpj.2012.11.3534>>.
- REYNOLDS, C. W. Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. In: *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. [S.l.: s.n.], 1987. p. 25–34.
- RHYS, H. *Machine Learning with R, the tidyverse, and mlr*. [S.l.]: Simon and Schuster, 2020.
- ROMANCZUK, P.; BÄR, M.; EBELING, W.; LINDNER, B.; SCHIMANSKY-GEIER, L. Active brownian particles. *The European Physical Journal Special Topics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 202, n. 1, p. 1–162, Mar 2012. ISSN 1951-6401. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjst/e2012-01529-y>>.
- ROSS, S. M.; KELLY, J. J.; SULLIVAN, R. J.; PERRY, W. J.; MERCER, D.; DAVIS, R. M.; WASHBURN, T. D.; SAGER, E. V.; BOYCE, J. B.; BRISTOW, V. L. *Stochastic processes*. [S.l.]: Wiley New York, 1996. v. 2.
- SANDER, J.; ESTER, M.; KRIEGEL, H.-P.; XU, X. Density-based clustering in spatial databases: The algorithm gdbscan and its applications. *Data mining and knowledge discovery*, Springer, v. 2, n. 2, p. 169–194, 1998.
- SCHMIDT, F.; ŠÍPOVÁ-JUNGOVÁ, H.; KÄLL, M.; WÜRGER, A.; VOLPE, G. Non-equilibrium properties of an active nanoparticle in a harmonic potential. *Nature Communications*, Nature Publishing Group, v. 12, n. 1, p. 1–9, 2021.
- SCHUBERT, E.; SANDER, J.; ESTER, M.; KRIEGEL, H. P.; XU, X. Dbscan revisited, revisited: Why and how you should (still) use dbscan. *ACM Trans. Database Syst.*, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 42, n. 3, Jul 2017. ISSN 0362-5915. Disponível em: <<https://doi.org/10.1145/3068335>>.

SESÉ-SANSA, E.; PAGONABARRAGA, I.; LEVIS, D. Velocity alignment promotes motility-induced phase separation. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 124, n. 3, p. 30004, Dec 2018. ISSN 1286-4854. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/124/30004>>.

STENHAMMAR, J.; MARENDUZZO, D.; ALLEN, R. J.; CATES, M. E. Phase behaviour of active brownian particles: the role of dimensionality. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry (RSC), v. 10, n. 10, p. 1489–1499, 2014. ISSN 1744-6848. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C3SM52813H>>.

TAKATORI, S. C.; DIER, R. D.; VERMANT, J.; BRADY, J. F. Acoustic trapping of active matter. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 1–7, 2016.

VICSEK, T.; CZIRÓK, A.; BEN-JACOB, E.; COHEN, I.; SHOCHET, O. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 75, n. 6, p. 1226–1229, Aug 1995. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.1226>>.

WARD, A. J.; SUMPTER, D. J.; COUZIN, I. D.; HART, P. J.; KRAUSE, J. Quorum decision-making facilitates information transfer in fish shoals. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 105, n. 19, p. 6948–6953, 2008.

WEEKS, J. D.; CHANDLER, D.; ANDERSEN, H. C. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids. *The Journal of chemical physics*, American Institute of Physics, v. 54, n. 12, p. 5237–5247, 1971.

WEXLER, D.; GOV, N.; RASMUSSEN, K. Ø.; BEL, G. Dynamics and escape of active particles in a harmonic trap. *Physical Review Research*, American Physical Society (APS), v. 2, n. 1, Jan 2020. ISSN 2643-1564. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.013003>>.