



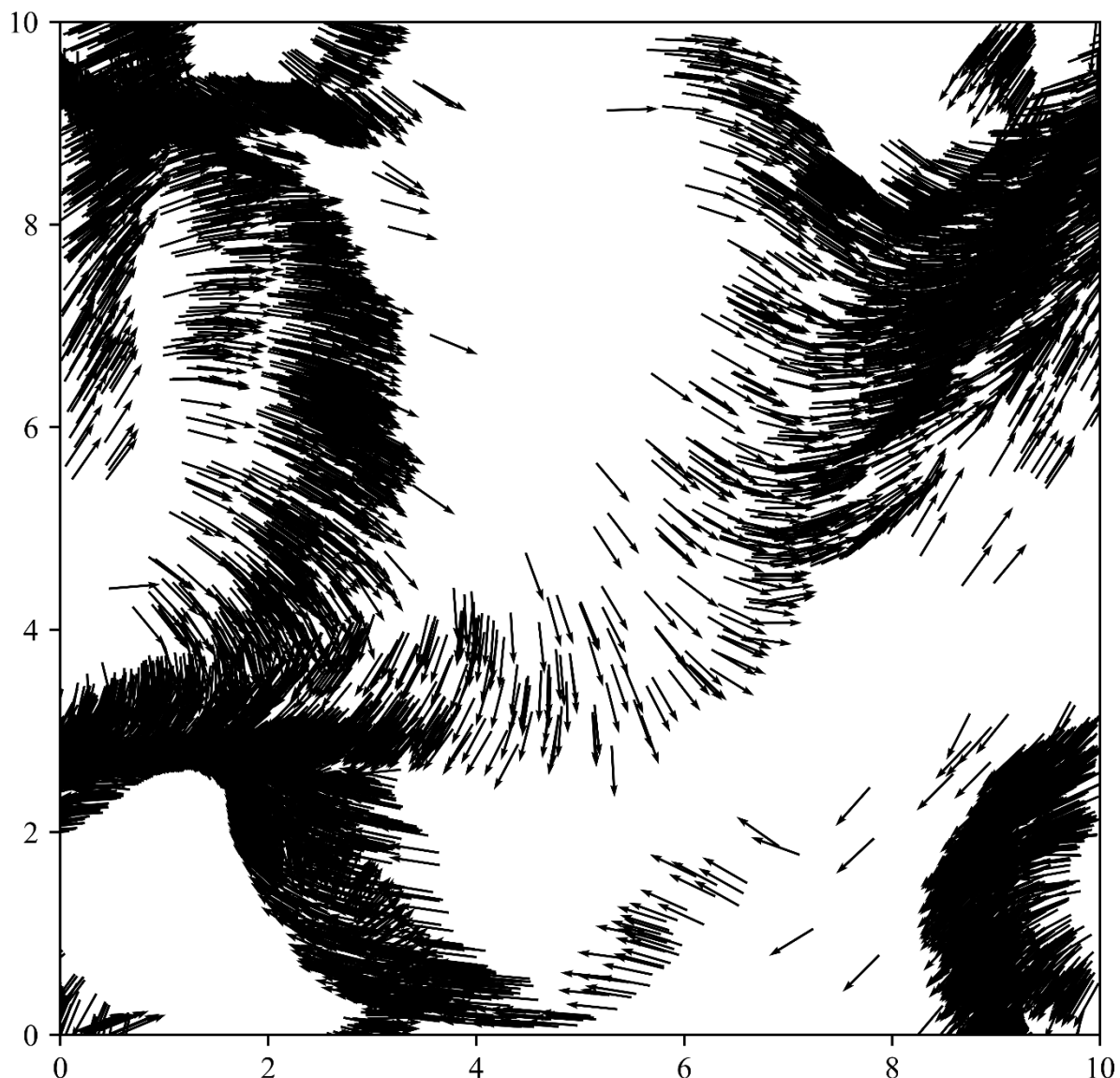
Departamento de Física

Física Estatística Computacional

Matéria Ativa e Modelo de Vicsek:

um estudo sobre a dinâmica de sistemas fora do equilíbrio.

Trabalho nº2



A50893 Paulo Rodrigues
A50893@alunos.isel.pt

Licenciatura em Engenharia Física Aplicada | dezembro de 2024

1. Introdução.

Neste trabalho foi realizado um estudo numérico para reproduzir o **modelo de Vicsek**, utilizado para descrever o movimento coletivo de indivíduos em sistemas biológicos e físicos. Esse modelo pertence ao campo da **matéria ativa**, uma área da **física estatística** fora do equilíbrio.

O comportamento do sistema foi analisado em função do aumento gradual da perturbação, bem como a evolução de sistemas para diferentes raios de interação, com o objetivo de investigar uma possível transição de fase. Além disso, foi ajustada uma lei de potência na região próxima ao ponto crítico, permitindo obter resultados consistentes com os valores reportados por T. Vicsek et al. [1].

1.1. Introdução Teórica.

A organização do mundo natural está repleta de padrões fascinantes. Seja no céu azul das aves, nos túneis escuros percorridos por formigas ou nos cruzamentos movimentados de Shibuya, encontramos sistemas compostos por indivíduos que consomem energia para locomoção e interação. Estas interações dão origem a comportamentos coletivos e auto-organizados, frequentemente observados em diversas espécies de seres vivos. Esse tipo de fenómeno descreve o conceito de matéria ativa e abre caminho para o estudo da dinâmica de sistemas que operam fora do equilíbrio termodinâmico.

1.2. Modelo de Vicsek.

Visando estudar a dinâmica de sistemas desse tipo e inspirado pelo movimento dos estorninhos, em 1955 T. Vicsek propôs um modelo de alinhamento entre partículas.

Nesse modelo, a direção (ou ângulo) de cada indivíduo em relação a um eixo x no instante seguinte dá-se pela equação:

$$(1) \quad \theta_i(t+1) = \langle \theta(t) \rangle_r + v(\eta)$$

onde $\langle \theta(t) \rangle_r$ corresponde à direção média das partículas dentro de uma região de raio r e $v(\eta)$ um valor aleatório extraído de uma distribuição uniforme $[-\eta/2, \eta/2]$, sendo η o ruído.

A posição e a direção média de cada partícula são calculadas da seguinte forma:

$$(2) \quad x(i+1) = x_i(t) + v_i(t)\Delta t$$

$$(3) \quad \langle \theta(t) \rangle_r = \arctg \left[\frac{\langle \sin(\theta(t)) \rangle_r}{\langle \cos(\theta(t)) \rangle_r} \right]$$

É relevante notar que, em seu estudo, Vicsek assumiu uma velocidade constante e uniforme para cada indivíduo, representada por v . Essa simplificação é plausível ao se considerar sistemas em condições de segurança, como nas migrações de aves durante o inverno ou no movimento coordenado de formigas em direção a um cubo de açúcar. Essa constância na velocidade das partículas justifica a expectativa de uma transição de fase cinética no sistema à medida que o ruído aumenta.

O modelo de Vicsek representa uma abordagem clássica para descrever o comportamento coletivo de partículas autopropulsionadas, sendo um exemplo emblemático de sistemas de matéria ativa.

1.2.1. Algoritmo.

Para implementar tal modelo, utilizou-se o seguinte algoritmo:

1. Inicialização

— Definem-se o número N de partículas com rapidez constante, o ruído do sistema η , o alcance de interação r e o espaço bidimensional de lado L . As posições iniciais são atribuídas aleatoriamente, assim como as suas direções iniciais, que ficam definidas entre 0 e 2π .

2. Distâncias e vizinhos.

— A cada passo de tempo, para cada partícula calcula-se a distância entre ela e as outras. Em seguida identifica-se quais estão dentro do seu raio de interação r .

3. Atualização das direções e posições.

— Para cada vizinho encontrado dentro da região de interação, incluindo a partícula central, calcula-se o ângulo médio utilizando a equação (3) e adiciona-se um ruído estocástico η , concretizando a equação (1).

— Em seguida, as novas posições são calculadas através da equação (2).

4. Iteração.

— O processo é então iterado e, a cada ciclo, volta-se à etapa 2.

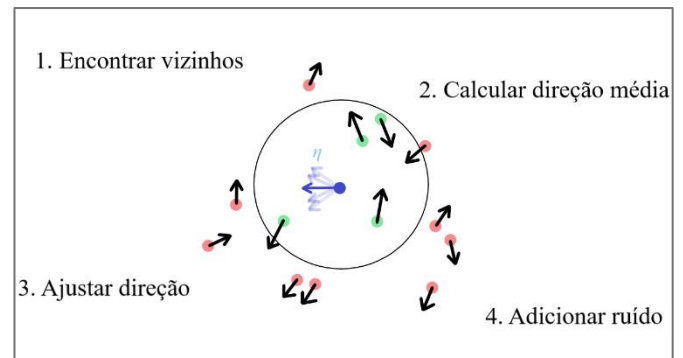


Fig. 1 Etapas do algoritmo do modelo de Vicsek.

1.3. Transição de fase

Como já mencionado, espera-se que o aumento do ruído leve a uma transição de fase auto-organizada, resultando num movimento totalmente aleatório do sistema. Para quantificar a orientação das partículas e estudar essa mudança de regime, construiu-se o seguinte parâmetro de ordem [1]:

$$(4) \quad \chi = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \frac{\vec{v}_i}{v} \right|$$

Repare que χ é levado em termos médios da soma dos vetores unitários dos N elementos do sistema. Assim, se todas as partículas, em média, tiverem a mesma direção:

$$\vec{v}_1 = \vec{v}_2 = \dots = \vec{v}_N \Rightarrow \chi = \frac{1}{N} N \left| \frac{\vec{v}_N}{v} \right| = 1$$

então diz-se que o sistema está totalmente ordenado. Em caso contrário, se, em média, todas as partículas tiverem direções distintas entre si:

$$\vec{v}_1 \neq \vec{v}_2 \neq \dots \neq \vec{v}_N \Rightarrow \left| \sum \vec{v}_i \right| \rightarrow 0 \Rightarrow \chi = 0$$

e diz-se que o sistema está totalmente desordenado ou em movimento aleatório.

1.3.1. Lei de Potência.

Para investigar o comportamento do sistema nas proximidades da transição entre as fases ordenada e desordenada, parte-se da premissa, confirmada no **capítulo 3**, de que o parâmetro de ordem segue uma lei de potência descrita da seguinte forma:

$$(5) \quad \chi(\eta) \sim (\eta_c - \eta)^\beta$$

onde η_c e β são o ruído e o expoente crítico (imediatamente antes de acontecer a transição).

A partir da expressão (5), observa-se que o parâmetro de ordem diminui progressivamente à medida que o ruído se aproxima de seu valor crítico, conduzindo o sistema a uma fase de desordem crescente.

1.3.2. Valor Crítico.

Em geral, uma transição de fase está associada a uma mudança abrupta no comportamento do sistema, que passa de um estado ordenado para um estado desordenado. No caso específico do alinhamento de partículas, essa transição não é uma exceção. Para identificar esse momento, pode-se recorrer à análise da derivada da função $\chi(\eta)$.

Geometricamente, a derivada representa a inclinação da reta tangente em um ponto específico de uma curva. Dessa forma, uma mudança abrupta no comportamento do sistema será refletida por uma

inclinação significativamente maior da função nesse ponto. Tal característica indica que a derivada atinge um máximo local, permitindo, assim, estimar o valor crítico por meio de:

$$(6) \quad \max \left[\frac{d\chi(\eta)}{d\eta} \approx \frac{\chi_{i+1} - \chi_i}{\eta_{i+1} - \eta_i} \right] = \eta_c$$

1.3.2. Expoente Crítico.

Para determinar o expoente crítico, os dados devem ser tratados de forma a linearizar a expressão (5). Para isso, tomam-se os valores próximos ao ponto crítico na fase ordenada ($\eta < \eta_c$). Em seguida, aplica-se uma transformação logarítmica, resultando na seguinte relação linear:

$$(7) \quad \log(\chi) = \beta \log(\eta_c - \eta) + \text{constante}$$

Ora, uma vez que a equação da reta é dada pela expressão $y = mx + b$, por comparação com a equação (6) conclui-se que:

$$\log(\chi) \equiv y, \log(\eta_c - \eta) \equiv x \text{ e } \beta \equiv m$$

O que permite obter o expoente crítico β através de um ajuste linear.

No trabalho *Novel type of phase transition in a system of self-driven particles* (1995) [1], T. Vicsek et al. apresentaram uma transição de fase para $\chi \sim (\eta_c - \eta)^\beta$ com um expoente $\beta \cong 0.45$.

2. Aplicação Computacional.

2.1. Considerações.

Antes de apresentar os resultados obtidos, deve-se apresentar algumas considerações ao modelo de Vicsek.

2.1.1. Raio de interação.

Neste estudo, três parâmetros essenciais foram analisados detalhadamente no comportamento do sistema: o número de partículas, o nível de ruído aplicado e o alcance de interação. Concentrando esta seção no último parâmetro, o primeiro passo foi determinar um valor de raio de interação que permitisse uma simulação mais fiel à realidade. Para isso, considerou-se um cenário em que duas partículas, inicialmente alinhadas em direções opostas (separadas por 180°), foram posicionadas nas extremidades do domínio. Ao variar o raio de interação entre 1.0 e 1.5, concluiu-se que um raio de 1.4 unidades adimensionais era o valor adequado para a uma simulação ligeiramente mais realista, apesar de o modelo de Vicsek original não levar em conta colisões entre partículas.

2.1.2. Mudança abrupta.

Já foi definido em (1) que o modelo de Vicsek estabelece que uma partícula adote imediatamente a direção média dos indivíduos situados dentro de seu raio de interação. Contudo, tal abordagem revela-se problemática para partículas cujos ângulos diferem substancialmente.

Para investigar essa limitação, posicionaram-se três partículas com inclinações de 45° , 180° e -90° em relação ao eixo x , suficientemente próximas para que experimentassem o efeito de alinhamento.

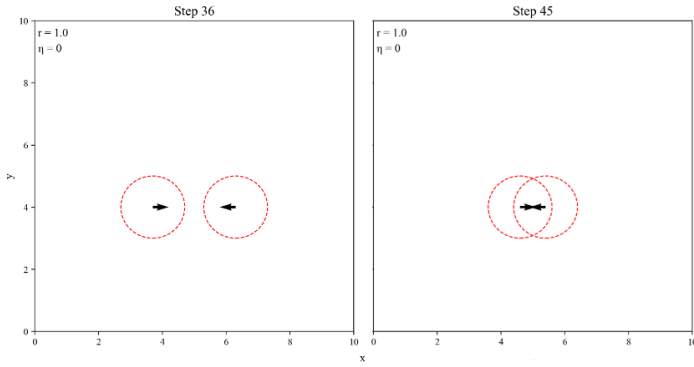


Fig. 2. Interação entre duas partículas para $r = 1$ e $\eta = 0$.

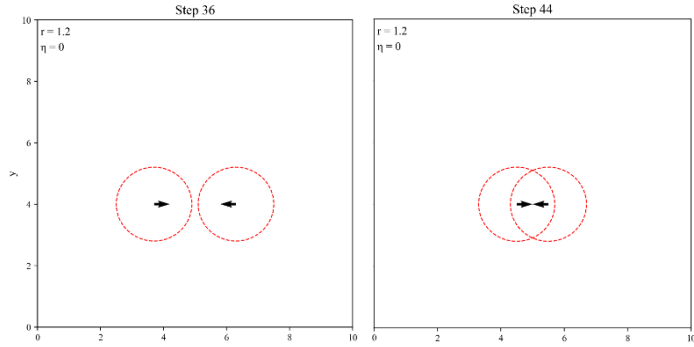


Fig. 3. $r = 1.2$ e $\eta = 0$.

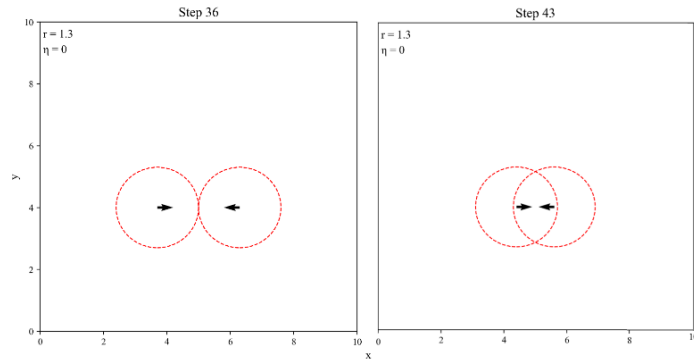


Fig. 4. $r = 1.3$ e $\eta = 0$.

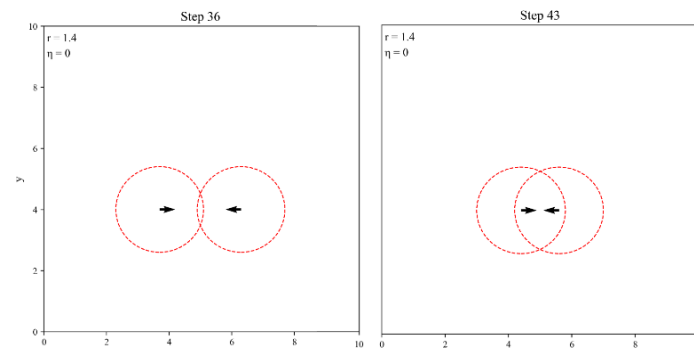


Fig. 5. $r = 1.4$ e $\eta = 0$.

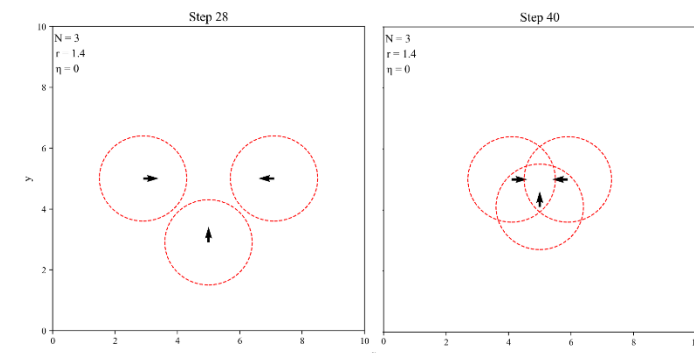


Fig. 6. $r = 1.4$ e $\eta = 0$ para três partículas.

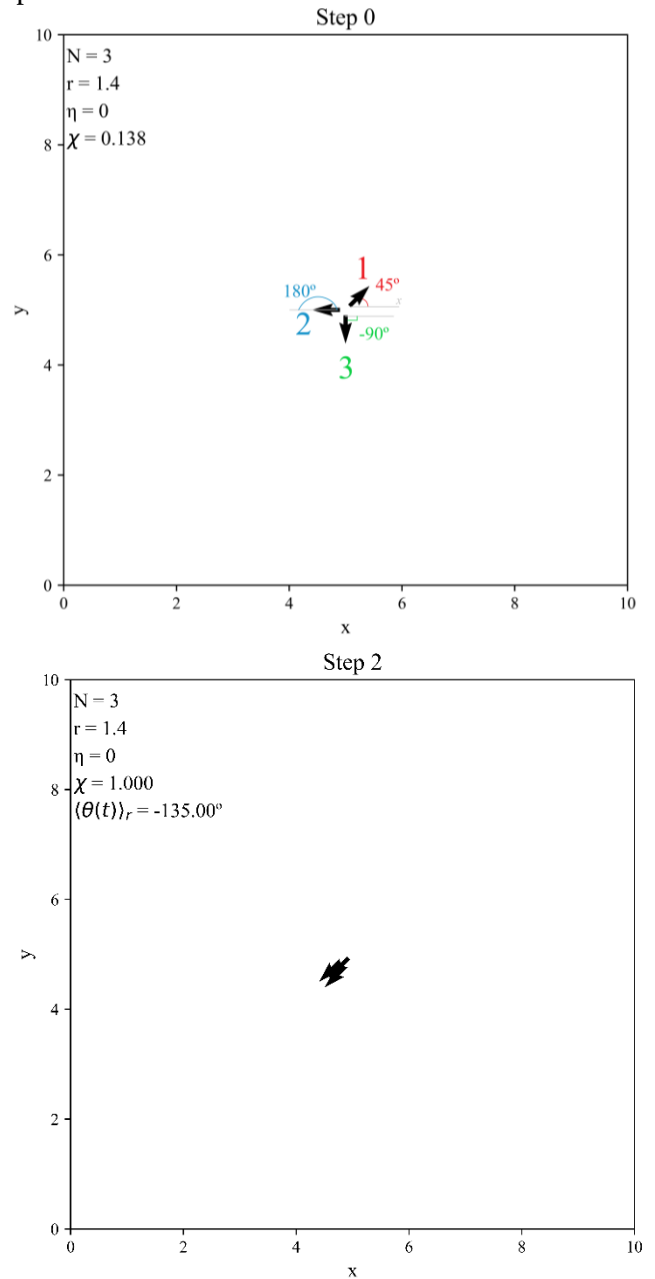


Fig. 7. Step 0: As partículas apresentam três ângulos distintos. Step 2: A partícula nº 1 “salta” numa mudança irrealista de alinhamento.

Observe que o modelo obriga a partícula nº 1 a alinhar-se com as outras duas, resultando em uma mudança totalmente irrealista para -135° . Possíveis soluções para esse tipo de limitação são discutidas na conclusão deste trabalho.

3. Simulação e Resultados.

3.1. Síntese para a Simulação.

Para simulação fez-se o máximo de iterações quanto permitidas pelo computador, para o máximo de partículas possíveis. Estes foram os parâmetros escolhidos para obter os seguintes resultados:

- Nº de partículas $N = 1000$
- Lado do domínio: $L = 10$
- Passo de tempo: $\Delta t = 1.0$
- Velocidade de cada partícula: $v = 0.1$
- Steps: 100 e 1000.

Estes valores podem ser ajustados conforme necessário. Recomenda-se, em caso de dificuldades na execução do código, a sua alteração. Tal flexibilidade também permite explorar diferentes cenários, testar a robustez do modelo e, como será visto no subcapítulo seguinte, observar como o ruído afeta o sistema em função do nº de passos, como será visto a seguir.

3.2. Resultados.

Nesta secção serão apresentados todos os resultados obtidos a partir de um código construído em *Python* implementando o modelo de Vicsek, através do algoritmo apresentado no subcapítulo 1.2.1.

3.2.1. Força do ruído.

Em primeiro lugar desejou-se verificar o efeito da “força” do ruído contra o alinhamento do sistema. Para isso, representou-se, durante 100 passos, a evolução do parâmetro de ordem na ausência de perturbações:

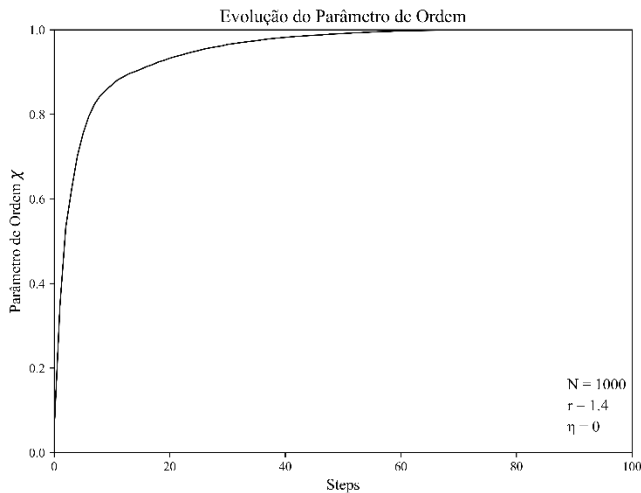


Fig. 8. Evolução do sistema na ausência de ruído. As partículas parecem alinhar-se com $\chi(t) \rightarrow (1 - e^{-t})$, uma vez que $t \propto \text{steps}$ e $t \geq 0$.

É importante destacar como a ordem do sistema, na ausência de perturbação, parece evoluir suavemente para o alinhamento total através de $\chi(t) \sim (1 - e^{-t})$.

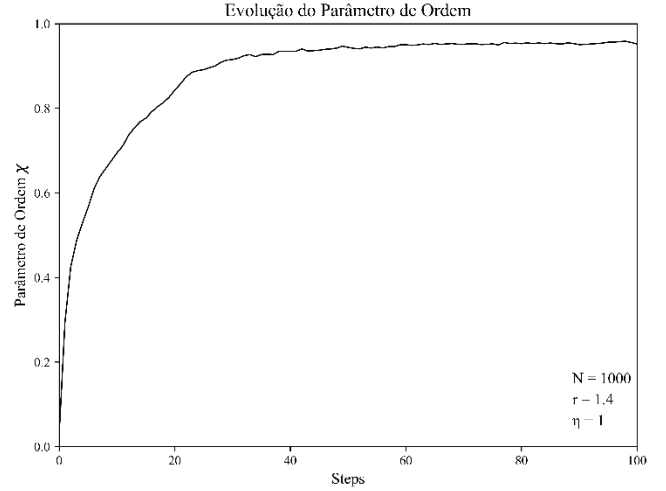


Fig. 9. Evolução do sistema para $\eta = 1$

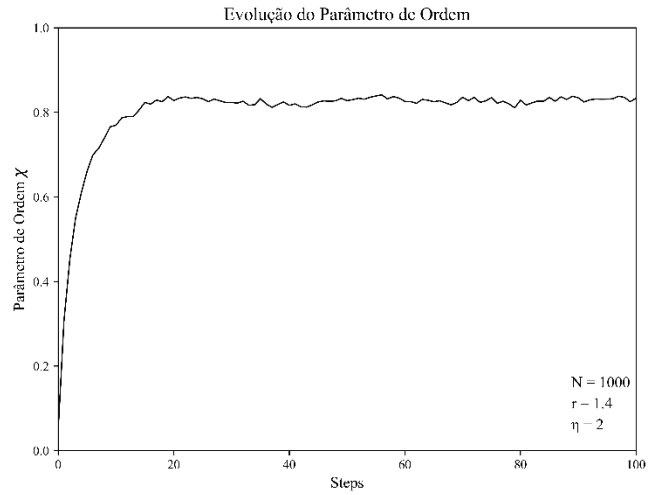


Fig. 10. Evolução do sistema para $\eta = 2$.

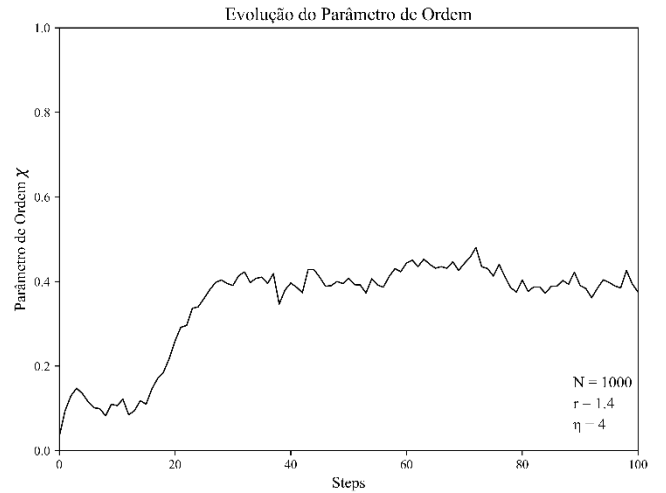


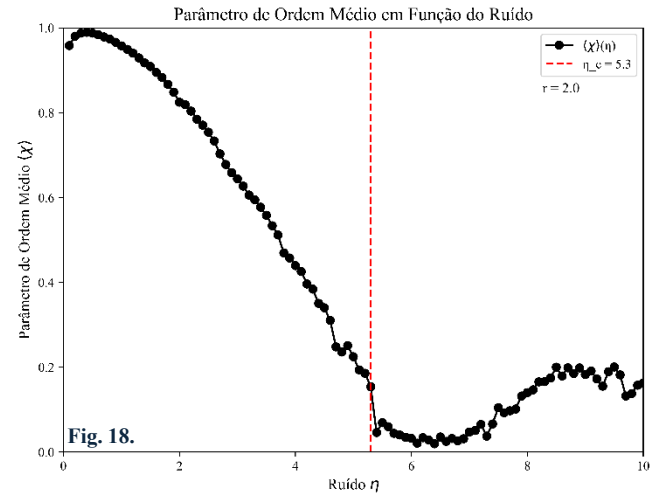
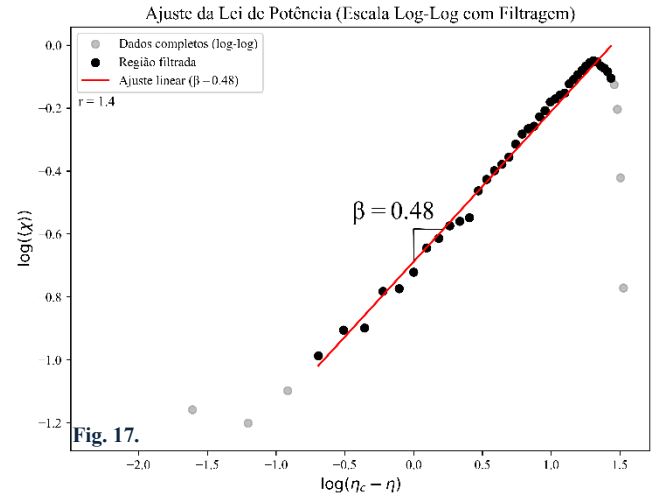
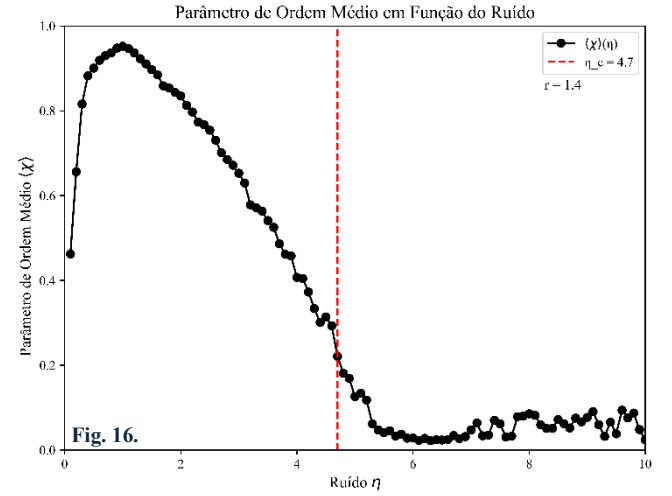
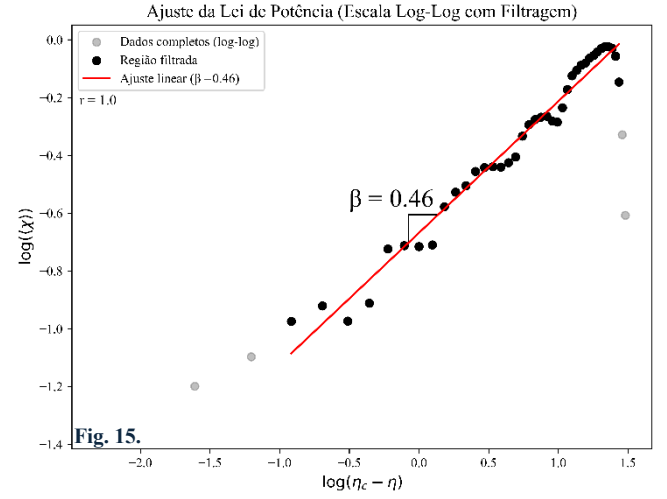
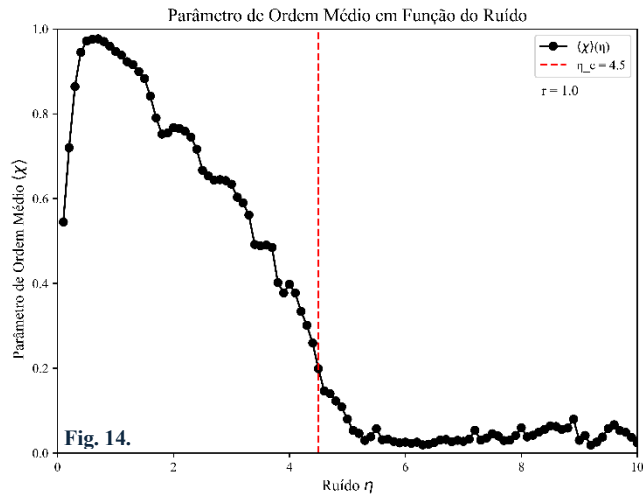
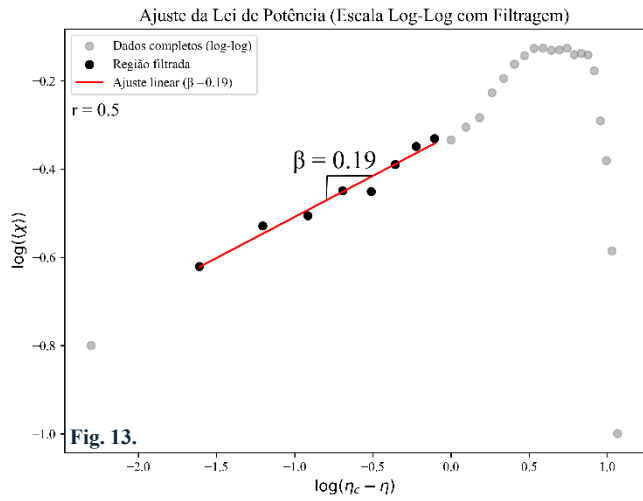
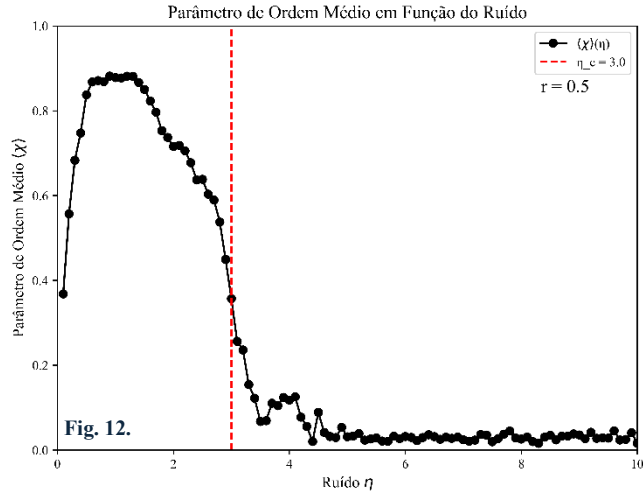
Fig. 11. Evolução do sistema para $\eta = 4$.

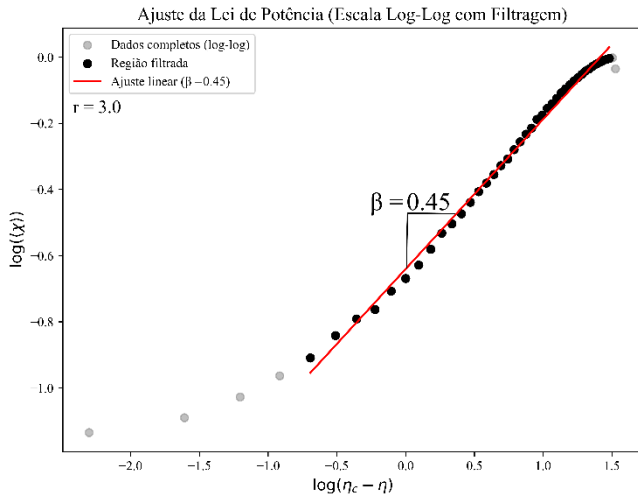
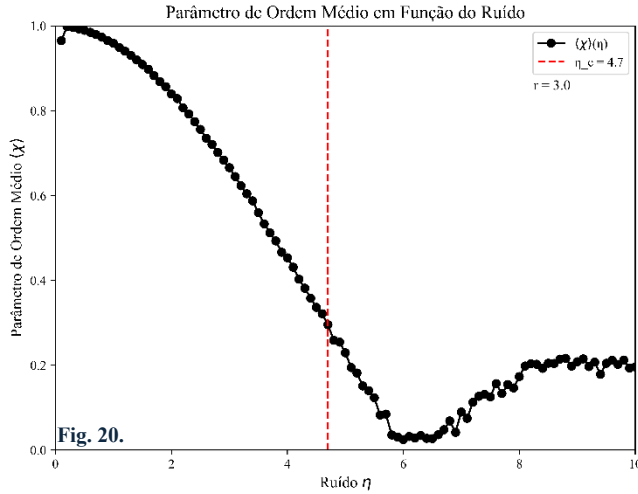
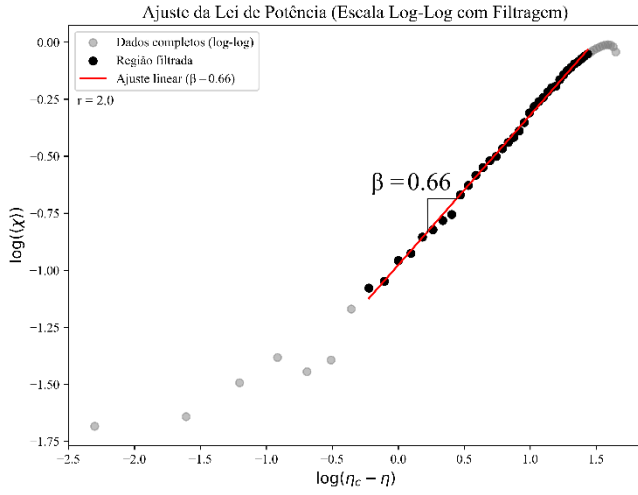
Por meio de observação, nota-se que o sistema enfrenta maior dificuldade para se organizar quando os valores de η excedem 4, sugerindo que o valor crítico η_c está situado próximo a esse limite. Esses resultados serão explorados com maior profundidade no subcapítulo 3.2.3.

3.2.2. Transição de fase.

Com uma estimativa prévia do valor aproximado de η_c , procedeu-se ao aumento gradual de η permitindo a construção da curva $\chi - \eta$ e a observação gráfica da transição de fase cinética esperada. Para uma melhor visualização, considerou-se o parâmetro de ordem em termos médios, ou seja, $\langle \chi(\eta) \rangle$.

Obtida a curva, fez-se uso da equação (6) para determinar o valor de η_c e, aplicando a transformação logarítmica (7), retirou-se o valor de β para diferentes raios de interação. Nos resultados que se seguem foram utilizados sempre 1000 passos e 1000 partículas:





3.2.3. Análise de Resultados.

Na subsecção 3.2.1, constatou-se que o sistema não conseguia manter a coesão para valores de ruído superiores a 4. No capítulo subsequente, essa observação é corroborada, dado que, em todos os casos analisados, o valor limiar situou-se, em média, entre 4 e 5. Assim, o modelo de Vicsek, nas condições consideradas, aparenta apresentar uma alteração de estado para $\eta_c \approx 4.4$. Em relação à dinâmica do sistema, observa-se que inicialmente ocorre uma organização rápida devido à elevada quantidade de partículas, decaindo rapidamente para uma fase de

desordem. Em alguns casos, o sistema parece tentar recuperar o alinhamento, mas não consegue.

É interessante observar os diferentes valores de η_c e β em função do raio das partículas. Conforme ilustrado nas **figuras 12 e 13**, o estudo inicia-se com $r = 0.5$, um valor bastante reduzido. No contexto da simulação, formam-se, localmente, pequenos aglomerados de partículas que se diferenciam entre si, deslocando-se em direções e sentidos distintos (**figura 22**). A mudança de fase ocorre com uma inclinação acentuada na curva e apresenta um expoente crítico pouco preciso.

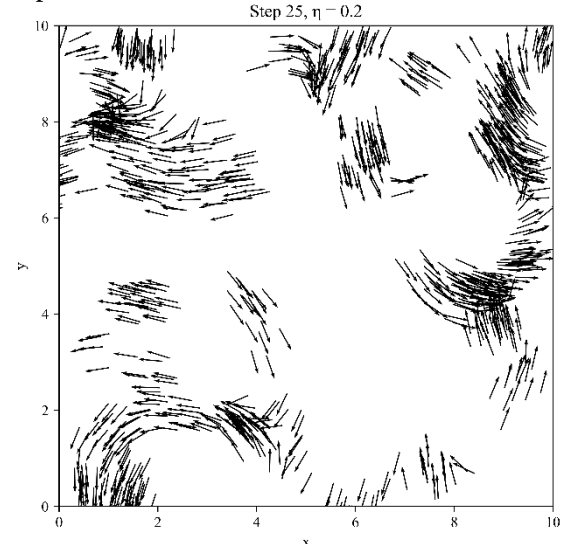


Fig. 22. Simulação para $r = 0.5$ e $N = 1000$; η aumenta com incrementos de 0.1.

Para $r = 1.0$ o sistema alinha suas partículas rapidamente, ainda apresentando uma transição de fase abrupta (**figura 14-15**). Devido ao maior raio de interação que o anterior, formam-se no início, grupos maiores de partículas alinhadas (**figura 23**). O expoente crítico toma o valor $\beta = 0.46$, mas com um mau ajuste linear.

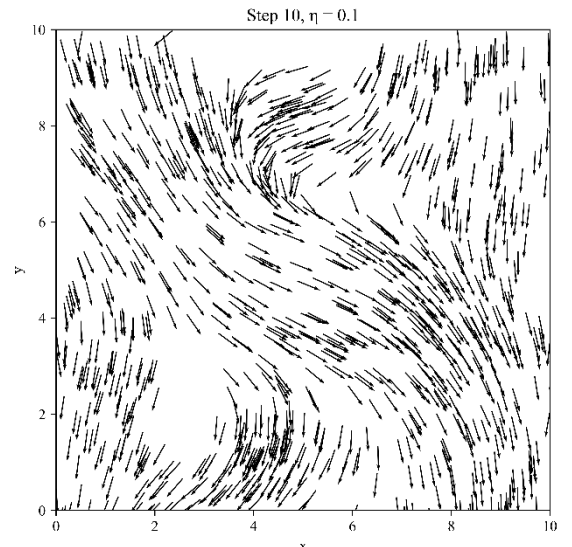


Fig. 23. Simulação para $r = 1.0$.

Seguidamente, para $r = 1.4$, valor sugerido no subcapítulo 2.1.1, mostra um comportamento similar ao estudado para um raio de uma unidade. O ajuste linear é melhor e com um valor próximo ao esperado. Utilizando $r = 3.0$, obteve-se, por um bom ajuste, um expoente crítico de $\beta = 0.45$, consistente com o reportado por Vicsek em seu estudo [1](figura 21). Um raio de interação tão elevado resulta em partículas exibindo comportamento de redemoinho no início da simulação (figura 24).

Destaca-se que a transição de fase tende a suavizar à medida que o raio aumenta, o que era esperado, uma vez que as partículas passam a exercer maior influência mútua. Essa tendência é visível nas figuras 16, 18 e 20.

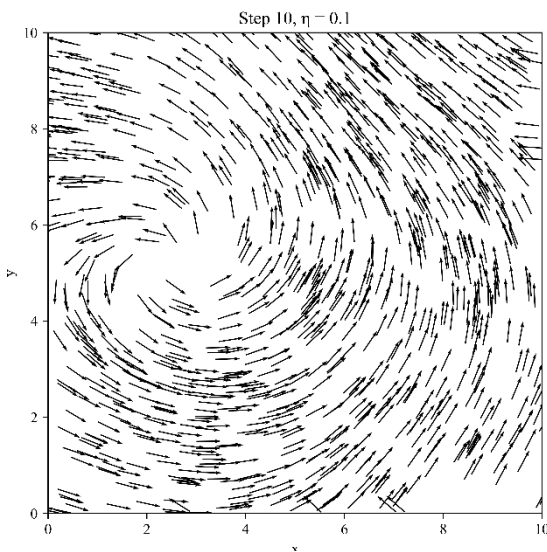


Fig. 23. Simulação para $r = 3.0$.

4. Conclusão.

Neste trabalho buscou-se reproduzir numericamente o modelo de Vicsek, explorando a dinâmica coletiva de partículas em sistemas biológicos e físicos. Focou-se, especialmente, na análise do comportamento do sistema em função do aumento da perturbação, da variação do raio de interação e na investigação de uma transição de fase, com ênfase no ajuste de uma lei de potência para caracterizar a região crítica.

Observou-se que o sistema apresenta uma transição de fase cinética ao atingir um ruído crítico médio de aproximadamente $\eta_c \approx 4.4$, com variações em função do raio de interação. Além disso, o valor do expoente crítico ajustado para diferentes raios de interação mostrou-se compatível com o divulgado no trabalho original, sendo, em média, $\beta \approx 0.45$.

Apesar de a simulação ter atendido aos objetivos iniciais, algumas limitações foram identificadas, como

a simplificação do modelo para interações de partículas com ângulos muito distintos, o que levou a comportamentos pouco realistas em certos cenários. Para mitigar esse efeito, sugere-se, por exemplo, a implementação de uma interpolação suavizada nos ângulos das partículas, incluindo restrição de variação angular máxima, o que tornaria a simulação mais realista.

Em suma, o trabalho foi bem-sucedido em reproduzir o modelo de Vicsek e em demonstrar uma transição de fase cinética.

6. Referências.

[1] T. Vicsek et al. “Novel Type of Phase Transition in a System of self-driven particles”, (1955)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.1226

[2] Patrício, P., sebenta da UC de “Física Estatística Computacional”.