



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

Rubens Henrique Damascena de Souza

**Dinâmica não linear e estocástica de partículas ativas confinadas**

Recife

2024

Rubens Henrique Damascena de Souza

**Dinâmica não linear e estocástica de partículas ativas confinadas**

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

**Área de Concentração:** Física Teórica e Computacional

**Orientador (a):** Clécio Clemente de Souza Silva

Recife

2024

.Catalogação de Publicação na Fonte. UFPE - Biblioteca Central

Souza, Rubens Henrique Damascena de.

Dinâmica não linear e estocástica de partículas ativas confinadas / Rubens Henrique Damascena de Souza. - Recife, 2024. 112f.: il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Pós-Graduação em Física, 2024. Orientação: Clécio Clemente de Souza Silva.

1. Partícula ativa; 2. Torque de autoalinhamento; 3. Escape entre órbitas. I. Silva, Clécio Clemente de Souza. II. Título.

UFPE-Biblioteca Central

**RUBENS HENRIQUE DAMASCENA DE SOUZA**

**DINÂMICA NÃO LINEAR E ESTOCÁSTICA DE PARTÍCULAS ATIVAS  
CONFINADAS**

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

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional

Data de aprovação: 27/09/2024.

**BANCA EXAMINADORA**

---

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

---

Prof. Dr. Mauro Copelli Lopes da Silva  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Dr. Raí Maciel de Menezes  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Dr. Giovani Lopes Vasconcelos  
Examinador Externo  
Universidade Federal do Paraná

---

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira  
Examinador Externo  
Universidade Federal do Ceará

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por ter me trazido até aqui. Embora passemos por dificuldades, a Sua palavra sempre nos conforta e nos dá forças para continuar.

Agradeço imensamente ao meu pai, Israel José de Souza, que me deu suporte físico, financeiro e psicológico durante todo esse tempo em que estou me dedicando à vida acadêmica. Embora não sejamos de uma classe social elevada, meu pai sempre lutou e ainda luta para que eu possa me dedicar aos estudos de forma integral. Também agradeço a minha mãe, Miriam Maria Damascena de Souza, e ao meu irmão, Raphael Henrique Damascena de Souza, que sempre acreditaram em mim e me incentivaram nas horas de desânimo.

Com o fim do doutorado, completo 10 anos de faculdade, tempo suficiente para nutrir amizades que certamente serão duradouras. Destaco aqui meus amigos de graduação: Jean, Erly e Glaucyevann, que sempre acreditaram que eu conseguiria concluir mais essa etapa. Agradeço também aos meus amigos do laboratório de sistemas complexos e matéria ativa: Felipe, José, Matheus e Daniel, que, além de me receberem de braços abertos no grupo de pesquisa, me auxiliaram de diversas formas durante esses anos de pós-graduação.

Não poderia deixar de agradecer aos meus orientadores, Prof. Dr. Clécio Clemente de Souza Silva e Prof. Dr. Leonardo Ribeiro, que me acompanharam durante os meus seis anos de pós-graduação e foram fundamentais para meu desenvolvimento como pesquisador. Agradeço ao Departamento de Física da UFPE pela estrutura e apoio proporcionados. Por fim, agradeço à CAPES pela bolsa concedida, um apoio que me permitiu dedicar-me completamente aos estudos.

## RESUMO

Partículas ativas são capazes de converter energia absorvida do ambiente em movimento direcionado, o que as afasta do equilíbrio. Elas têm sido usadas como sistemas modelo para o estudo de comportamentos complexos comumente observados em sistemas vivos, colóides ativos, grãos vibrantes e dispositivos automatizados com a capacidade de se autopropelir. Aqui, exploramos a dinâmica complexa de partículas ativas sujeitas a um torque de autoalinhamento dentro de potenciais confinantes. O torque de autoalinhamento acopla a força local que age sobre a partícula com sua orientação no espaço. A complexidade da dinâmica surge da interação entre o torque de autoalinhamento, a intensidade do ruído e a linearidade da força confinante. Para um potencial harmônico isotrópico, sabe-se que esse sistema exibe duas fases dinâmicas distintas: uma fase *escaladora*, onde a partícula se orienta radialmente e sofre movimento Browniano angular, e uma fase *orbital* circular. Aqui, estendemos a descrição das fases escaladora e orbital para confinamentos sem simetria radial. Neste caso, observamos uma rica diversidade de comportamentos dinâmicos. Em potenciais harmônicos elípticos, a fase orbital se fragmenta em múltiplas órbitas periódicas de várias formas, como ovais e lemniscatas, que podem coexistir e permitem transições entre si devido ao ruído. Em potenciais confinantes anarmônicos, a dinâmica evolui de periódica para caótica à medida que a intensidade do torque de autoalinhamento é variado, com o ruído desempenhando um papel crucial na indução de órbitas complexas. Isso demonstra que a combinação da forma do potencial de confinamento e do torque de autoalinhamento pode induzir uma rica variedade de estados dinâmicos não triviais de uma partícula ativa confinada.

Na segunda parte do nosso trabalho, investigamos cuidadosamente as transições (escapes) entre as órbitas como um problema estocástico de escape. Mostramos que, no regime de baixo ruído, esse problema pode ser formulado como um princípio de ação mínima, equivalente a encontrar o caminho mais provável de escape de uma órbita para a bacia de atração de outra órbita coexistente. A integral de ação correspondente coincide com a energia de ativação, uma quantidade facilmente acessível em experimentos e simulações através de dados da taxa de escape. Para demonstrar como essa abordagem pode ser aplicada à solução de problemas específicos, calculamos caminhos ótimos de escape e energias de ativação para transições induzidas por ruído entre as órbitas circulares de sentido horário e anti-horário de uma partícula ativa em confinamento com simetria radial. Investigamos também transições entre órbitas de diferentes topologias (ovais e lemniscatas) que coexistem no confinamento elíptico. Em todos

os exemplos trabalhados, os caminhos ótimos calculados e as ações mínimas estão em excelente concordância com os dados de tempo médio de escape obtidos diretamente pela integração numérica das equações de Langevin.

Por fim, apresentamos brevemente evidências de que o tempo médio de escape entre órbitas circulares pode ser aproximadamente controlado. Este fenômeno ocorre quando um sinal oscilatório senoidal com frequência bem definida é introduzido na dinâmica orientacional da partícula. Para uma intensidade de ruído específica, as transições parecem ocorrer com uma frequência aproximadamente igual à do sinal induzido. Esse fenômeno é conhecido como ressonância estocástica.

**Palavras-chaves:** Partícula ativa. Torque de autoalinhamento. Escape entre órbitas

## ABSTRACT

Active particles are capable of converting energy absorbed from the environment into directed motion, which drives them far from equilibrium. They have been used as model systems to study complex behaviors commonly observed in living systems, active colloids, vibrating grains, and self-propelled automated devices. Here, we explore the complex dynamics of active particles subjected to a self-alignment torque within confining potentials. The self-aligning torque couples the local force acting on the particle with its orientation in space. The complexity of the dynamics emerges from the interplay between the self-aligning torque, noise intensity, and the linearity of the confining force. For an isotropic harmonic potential, this system is known to exhibit two distinct dynamical phases: a *climbing phase*, where the particle is oriented radially and undergoes angular Brownian motion, and a circularly *orbiting phase*. Here, we extend the description of climbing and orbital phases to non-radially symmetric confinement. For non-radially symmetric confinement, we observed a rich diversity of dynamical behaviors. In elliptic harmonic potentials, the orbiting phase fragments into multiple periodic orbits of various shapes, such as ovals and lemniscates, which can coexist and allow transitions between each other due to noise. In anharmonic confining potentials, the dynamics evolve from periodic to chaotic as the self-alignment torque intensity is varied, with noise playing a crucial role in inducing complex orbits. This demonstrates that the combination of the shape of the trapping potential and the self-alignment torque can induce a rich variety of nontrivial dynamical states of a confined active particle.

In what can be seen as the second part of our work, we carefully investigate the transitions (escapes) between the orbits as a stochastic escape problem. We show that, in the low-noise regime, this problem can be formulated as a least action principle, which is equivalent to finding the most probable escape path from one orbit to the basin of attraction of another coexisting orbit. The corresponding action integral coincides with the activation energy, a quantity readily accessible in experiments and simulations through escape rate data. To demonstrate how this approach can be applied to solving specific problems, we calculate optimal escape paths and activation energies for noise-induced transitions between clockwise and counterclockwise circular orbits of an active particle in radially symmetric confinement. We also investigated transitions between orbits of different topologies (ovals and lemniscates) coexisting in elliptic confinement. In all the worked examples, the calculated optimal paths and minimum actions are

in excellent agreement with mean escape time data obtained from direct numerical integration of the Langevin equations.

Finally, we briefly present evidence that the mean escape time between circular orbits can be approximately controlled. This phenomenon occurs when a sinusoidal oscillatory signal with a well-defined frequency is introduced into the orientational dynamics of the particle. For a specific noise intensity, the transitions appear to occur with a frequency approximately equal to the induced signal. This phenomenon is known as stochastic resonance.

**Keywords:** Active particle. Self-alignment torque. Escape between orbits.

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Exemplos de partículas ativas. (a) Estágios de nado de uma *Chlamydomonas reinhardtii* (uma alga unicelular com dois flagelos). Em cada instante, a posição e a orientação de seu corpo são caracterizadas por sua posição central  $(x, y)$  e pelo ângulo  $\alpha$  (em nosso modelo, representado por  $\theta$ ) de seu eixo longo em relação ao referencial do laboratório. A batida de cada flagelo é caracterizada pelas fases  $\phi_L$  e  $\phi_R$ , para os flagelos esquerdo e direito, respectivamente. O movimento direcionado é o resultado da batida de seus flagelos. (b) Uma partícula de Janus esférica parcialmente revestida; a assimetria da reação química devido ao revestimento parcial resulta em movimento direcionado. (c) Um *Hexbug* com seu eixo de orientação e vetor de velocidade que não estão necessariamente sempre alinhados. O brinquedo possui um motor interno que o faz vibrar; a interação entre suas “patas” vibrantes e a superfície resulta em movimento direcionado. . . . . 20
- Figura 2 – Ilustração de uma trajetória típica para partículas run-and-tumble (a) e partículas brownianas ativas não confinadas (b). . . . . 21
- Figura 3 – Design experimental e trajetória de um ser biológico e artificial capazes de se autopropelir em confinamento circular. (a) Uma *Chlamydomonas reinhardtii* contida em um compartimento circular quase bidimensional. (b) Um hexbug nano em um prato parabólico. A trajetória ruidosa quase circular de ambos é modelada numericamente com a adição de um torque de restaurado na dinâmica orientacional da partícula ativa. . . . . 23
- Figura 4 – Potencial biestável com seus dois pontos fixos nos mínimos do potencial,  $x = \pm\sqrt{\frac{a}{b}} \equiv \pm x_m$  e seu ponto fixo instável no ponto de máximo local  $x_b = 0$ . A barreira de energia  $\Delta V = V(x_b) - V(\pm x_m) = \frac{a^2}{4b}$ , nesse caso, é a energia de ativação para o escape. . . . . 33

- Figura 5 – Trajetórias típicas (linhas azuis) de uma partícula ativa (ponto vermelho) em um potencial confinante genérico  $V(x, y)$  (gráfico de contorno) em duas situações distintas: (a) Para  $\beta < \beta^*$ , a trajetória é atraída para um dos pontos fixos estáveis (*stable fixed points*) disponíveis na isóclina crítica (curva vermelha). (b) Para  $\beta > \beta^*$ , a isóclina é formada apenas por pontos fixos instáveis (*unstable fixed points*) e a partícula é capturada por um dos atratores orbitais disponíveis, na ilustração, uma órbita periódica (*periodic orbit*). . . . . 45
- Figura 6 – Estabilidade dos pontos fixos,  $(\chi, r)$ , no potencial harmônico em função de  $\beta$ . Nos diagramas, os segmentos de pontos fixos estáveis são marcados por linhas contínuas, enquanto os segmentos instáveis são marcados por linhas tracejadas. Em particular, a bifurcação sofrida por  $\chi$  é do tipo forquilha supercrítica (STROGATZ, 2000). . . . . 52
- Figura 7 – Exemplo representativo da forma das órbitas de rotação (a)-(b) e libração L (c)-(d) no plano  $xy$  e no espaço de fase, respectivamente. As órbitas de rotação e libração foram obtidas para  $\varepsilon = 0.5$  e  $\varepsilon = 1.5$ , respectivamente. Ambas as órbitas foram obtidas numericamente para  $\beta = 10$ . . . . . 54
- Figura 8 – (a)-(d): Órbitas representativas de uma partícula ativa no potencial elíptico. (e) Diagrama de fase no plano definido pela mobilidade angular  $\beta$  e o parâmetro  $\varepsilon$  que controla a excentricidade do potencial. As tonalidades de cor indicam o estado topológico da órbita obtido a partir de condições iniciais aleatórias (ver texto), pêssego claro para rotação (R) e coral para libração (L). Linhas sólidas (tracejadas) indicam transições entre órbitas ao varrer  $\varepsilon$  da esquerda (direita) para direita (esquerda) fixando o valor de  $\beta$ . As fases são classificadas pelo índice  $Xp$  de acordo com sua topologia ( $X = R, L$ ) e o número de nós ( $p = 0, 1, 2, \dots$ ). Zonas de coexistência são marcadas com múltiplos rótulos. As linhas tracejadas vermelhas indicam o limite superior da fase escaladora ( $\beta = 1 + \varepsilon$ ) e inferior ( $\beta = 1$ ) da fase orbital (veja as seções 3.2.1 e 3.2.2.1). . . . . 57

Figura 9 – (a) Diagrama de bifurcação (parte superior) e espectro de Lyapunov (parte inferior) para o potencial anarmônico  $V_1(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^6)$ . O diagrama é gerado marcando a posição  $y$  da partícula toda vez que a posição  $x$  atinge um valor máximo ( $x_{max}$ ) durante uma varredura crescente (laranja) e decrescente (azul) em  $\beta$ . Os expoentes de Lyapunov correspondentes à varredura crescente (decrescente) em  $\beta$  são apresentados em cores claras (cores escuras). As cores vermelho, azul e verde se referem ao maior, segundo maior e menor expoente de Lyapunov, respectivamente. Em (b) e (c) temos o mesmo que em (a), entretanto, para os potenciais  $V_2(x, y) = \frac{1}{6}(2x^2 + y^2)^3$  e  $V_3(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$ , respectivamente. . . . . 62

Figura 10 – Exemplo de órbitas periódicas (linhas azuis e laranja) e caótica (linhas pretas) para a partícula autopropelida confinada aos potenciais anarmônicos: (a)-(e)  $V_1(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^6)$ , (f)-(j),  $V_2(x, y) = \frac{1}{6}(2x^2 + y^2)^3$ , e (k)-(o)  $V(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$ . O gradiente de cor ao fundo representa o potencial, com os tons claros indicando as regiões de menor potencial. As linhas tracejadas descrevem a isóclina crítica que para os valores de  $\beta$  considerados é formada apenas por pontos fixos instáveis (legendas na parte superior). Para as órbitas periódicas, (a)-(d), (f), (h), e (k), mostramos as duas trajetórias permitidas pela simetria. . . . . 63

Figura 11 – (a)-(l) Gráficos de densidade da função de distribuição de probabilidade no estado estacionário  $\mathcal{P}(x, y)$  de uma partícula ativa no potencial elíptico com  $\varepsilon = 1.0$  para diferentes valores da mobilidade angular  $\beta$  e intensidade de ruído  $D$ . Para uma melhor visualização, na primeira coluna (a, e, i) os gráficos da PDF se encontram em escala logarítmica. Em (d), (h) e (l), as linhas vermelhas contínuas (tracejadas) representam os segmentos estáveis (instáveis) da isóclina crítica, enquanto as linhas verdes são as equipotenciais de  $V(x, y)$ . As Linhas contínuas de cores suaves em (e) e (i) representam os atratores da fase orbital em  $(\varepsilon, \beta)$  quando  $D = 0$ . (m) Desvios-padrão escalados para as coordenadas  $x$  e  $y$  da partícula em função de  $\beta$ . A linha tracejada é o limite teórico para  $\beta = 0$  e  $\sqrt{2D}\sigma_y = \sqrt{2D(1 + \epsilon)}\sigma_x = 1$ , obtido a partir da equação. (4.8). . . . . 70

- Figura 12 – Gráficos de densidade da função de distribuição de probabilidade no estado estacionário  $\mathcal{P}(x, y)$  de uma partícula ativa no potencial anarmônico  $V_3(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$  para diferentes intensidades de ruído  $D$  e  $\beta = 15$  (parte superior) e 25 (parte inferior). Para uma melhor visualização, nas duas primeiras colunas (a, b, f, g) os gráficos da FDP se encontram em escala logarítmica. As linhas tracejadas vermelhas indicam a linha isóclina crítica instável. . . . . 71
- Figura 13 – A probabilidade de encontrar a partícula no conjunto caótico transiente, calculada após um tempo de espera  $\Delta t_{\text{wait}}$ , como função de  $\Delta t_{\text{wait}}$  para  $D = 0$  e  $\beta = 15$ . Inserção: função de densidade de probabilidade para  $\Delta t_{\text{wait}} = 10\tau_0$ , apresentando o conjunto caótico transiente e as órbitas periódicas. . . . . 72
- Figura 14 – (a)-(c) Mapas de densidade das funções de distribuição de probabilidade estacionária de encontrar a partícula na fase R0 (esquerda), L1 (centro), e em qualquer lugar (direita) para diferentes valores de  $\varepsilon$  na coexistência com  $\beta = 10$  e  $D = 0.05$  fixos. (d) Probabilidades totais de encontrar a partícula nas fases R0 (vermelho) e L1 (azul) em função de  $\varepsilon$  para diferentes intensidades de ruído e  $\beta = 10$  fixo. . . . . 74
- Figura 15 – (a)  $R_o\psi$  para uma partícula ativa confinada por uma parede rígida em função do ângulo de inclinação  $\chi$  para diferentes valores da mobilidade angular  $R_o\beta$  [equação (4.29)]. (b)  $R_oS_{min}$  para a mudança entre órbitas no sentido horário e anti-horário como uma função de  $R_o\beta$  [Eq.(4.30)]. Os símbolos são estimativas numéricas de  $R_o\Delta\psi$  obtidas a partir de simulações diretas das equações de Langevin. Inserção: gráfico semilogarítmico do tempo médio de escape,  $\tau_{\text{esc}}$ , em função de  $1/D$  calculado a partir de simulações (símbolos) e analiticamente usando a equação (4.31) (tracejado) para os valores selecionados de  $R_o\beta$ . Os símbolos abertos correspondem à parte linear dos dados usada para extrair a energia de ativação por um ajuste de Arrhenius (linhas sólidas). Para o intervalo selecionado  $\beta \in [0, 20]$ ,  $R_o(\beta)$  varia muito pouco,  $R_o(\beta) \simeq 0.88$ , portanto, o comportamento de  $R_o\psi$  e  $R_oS$  são similares à  $\psi$  e  $S$ , respectivamente. . . . . 79

Figura 16 – O CMPE (linha sólida) saindo da órbita no sentido anti-horário ( $+\chi_o, R_o$ ) e o caminho de relaxação (tracejado) para a órbita no sentido horário para uma partícula ativa confinada em um potencial parabólico para (a)  $\beta = 1.6$  e (b)  $\beta = 1.2$  e  $2.0$ . As linhas em escala de cinza em (a) são 50 caminhos de escape não ótimos escolhidos aleatoriamente, que minimizam a ação  $\mathcal{S}$  apenas localmente; quanto mais clara a linha, maior a ação ao longo do caminho correspondente. As linhas ruidosas transparentes em (b) representam um pequeno subconjunto de 20 trajetórias de escape obtidas pela integração numérica do problema estocástico original para  $\beta = 1.2$  (vermelho) e  $2.0$  (azul) com intensidades de ruído  $D = 0.001$  e  $D = 0.01$ , respectivamente. . . . . 81

Figura 17 – Ação mínima para a transição entre órbitas no sentido horário e anti-horário de uma partícula ativa confinada por um potencial harmônico em função de  $u = D_t/D_r$  ( $D_{trans}/D_{rot}$ ). Os símbolos correspondem às energias de ativação estimadas pelo ajuste dos dados no limite de baixo ruído obtidos diretamente de integrações das equações de Langevin. Inseção: os caminhos mais prováveis de escape no plano  $\chi r$  calculados para alguns valores selecionados de  $u$ . . . . . 82

Figura 18 – (a) Caminho de escape mais provável (linhas tracejadas pretas) da órbita  $R_+$  (laranja) e o caminho de relaxação (linhas tracejadas vermelhas) em direção a  $L_-$  (azul). Também são mostradas as órbitas  $R_-$  e  $L_+$  (linhas cinzas transparentes), que não estão envolvidas neste escape específico. Os fundos amarelo, laranja, azul e azul claro representam as bacias de atração de  $R_-$ ,  $R_+$ ,  $L_-$  e  $L_+$ , respectivamente. As bacias são projetadas no plano  $xy$  em  $\theta = 2.26$  rad, correspondendo à direção de  $\hat{n}$  no ponto onde a trajetória de escape entra pela primeira vez na bacia de atração da órbita de destino em todas as três projeções,  $xy$  (b),  $x\theta$  (c) e  $y\theta$  (não mostrado). (d) Tempo médio de escape  $\tau_{esc}$  versus  $1/D$  obtido a partir de simulações diretas de Langevin dos escapes  $R_+ \rightarrow L_{\pm}$  e  $L_- \rightarrow R_{\pm}$  (símbolos). Os símbolos abertos foram selecionados para ajustes de Arrhenius (linhas), o que nos permitiu estimar as energias de ativação  $E_{R \rightarrow L}^a = 3.5 \times 10^{-4}$  e  $E_{L \rightarrow R}^a = 2.0 \times 10^{-4}$ , notavelmente próximas das ações mínimas correspondentes,  $\mathcal{S}_{R \rightarrow L} = 3.4 \times 10^{-4}$  e  $\mathcal{S}_{L \rightarrow R} = 1.9 \times 10^{-4}$ . . . . . 84

- Figura 19 – Realizações de  $x(t)$  no potencial biestável com ruído e sinal periódico (equação (5.1)) para três intensidades de ruído  $\kappa = 2D$  (em nossa notação). Na figura, a amplitude do sinal é  $A = 0.2\Delta V$ , o período do sinal é  $T_s = 100$ ,  $\pm x_m = \pm c$  representa os mínimos do potencial e  $x_b = 0$  é o ponto de máximo. A sincronização induzida pelo ruído em  $x(t)$  com o sinal periódico varia conforme a intensidade do ruído: é fraca para o nível mais baixo (transições aleatórias raras), ótima para uma intensidade intermediária (transições quase regulares), e novamente fraca para ruído forte (transições mais frequentes porém irregulares). . . . . 90
- Figura 20 – Ilustração do mecanismo de ressonância estocástica (RE): a cada meio período do sinal, um sentido de transição é favorecido deterministicamente pelo sinal. Na ressonância estocástica, ocorre uma sincronização entre o favorecimento determinístico e o escape induzido pelo ruído, tornando os escapes aproximadamente periódicos (com metade do período do sinal). . . 91
- Figura 21 – Comportamento da amplificação espectral  $\eta$  em função da intensidade de ruído  $D$  para o potencial biestável para  $A = 0.2$ ,  $a = b = 1$  e diferentes frequências  $\Omega = 2\pi f_s$ . Quanto menor a frequência do sinal, maior é o pico de amplificação. Nessa figura,  $U(x)$  denota o potencial  $V(x)$ . . . . . 92
- Figura 22 – Comportamento da amplificação espectral  $\eta$  em função da intensidade de ruído  $D$  no potencial WCA para  $A = 0.1$ ,  $T_s = 100$ , e diferentes valores de  $\beta$ . Os dados mostram que o valor do ruído ótimo  $D_{re}$ , ou seja, o valor de  $D$  no pico de  $\eta$ , aumenta com o valor de  $\beta$ . . . . . 95
- Figura 23 – Série temporal de uma única realização de  $\chi(t)$  no potencial WCA com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para  $D_1 = 0.005$ ,  $D_2 = D_{re} = 0.034$  e  $D_3 = 0.3$ , sendo  $D_{re}$  o valor de  $D$  no pico de  $\eta$ . As linhas horizontais em roxo marcam  $\pm\chi_o$ , os valores de  $\chi$  nos pontos fixos orbitais. As linhas verticais em cinza marcam intervalos de um período do sinal  $T_s$ . Note que, para  $D = D_{re}$ , a partícula, em média, escapa (transiciona entre as órbitas) e retorna à orbita inicial dentro de um período  $T_s$ , configurando escapes quase periódicos com período  $\frac{T_s}{2}$ . . . . . 96

- Figura 24 – Série temporal assintótica  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para os mesmos valores de  $D$  descritos na figura 23. Em vermelho e cinza temos a séries temporais de  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  e do sinal senoidal  $F_s(t) = A \sin(2\pi f_s t)$ , respectivamente. Note que, para  $D = D_{re}$ , observa-se uma grande diferença entre as amplitudes de oscilação, ilustrando a amplificação máxima das amplitudes de Fourier em  $D = D_{re}$ . Assim como na figura . . . . . 97
- Figura 25 – Valor ótimo de ruído  $D_{re}$  em função de  $\beta$  para o confinamento em parede dura obtido a partir da equação 5.8 (linha sólida azul) e pela análise dos picos da ampliação espectral (pontos pretos). Mais detalhes de como as curvas foram obtidas se encontram no texto. . . . . 98
- Figura 26 – Comportamento da amplificação espectral  $\eta$  em função da intensidade de ruído  $D$  no potencial harmônico para  $A = 0.1$ ,  $T_s = 100$ , e diferentes valores de  $\beta$ . Os dados mostram que o valor do ruído ótimo  $D_{re}$  também aumenta com o valor de  $\beta$  no potencial harmônico. . . . . 98
- Figura 27 – Série temporal de uma única realização de  $\chi(t)$  no potencial harmônico com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para  $D_1 = 0.005$ ,  $D_2 = D_{re} = 0.019$  e  $D_3 = 0.1$ , sendo  $D_{re}$  o valor de  $D$  no pico de  $\eta$ . As linhas horizontais em roxo marcam  $\pm\chi_o$ , os valores de  $\chi$  nos pontos fixos orbitais. As linhas verticais em cinza marcam intervalos de um período do sinal  $T_s$ . Note que, novamente, para  $D = D_{re}$ , a partícula, em média, escapa e retorna à orbita inicial dentro de um período  $T_s$ , configurando escapes quase periódicos com período  $\frac{T_s}{2}$ . . . . . 99
- Figura 28 – Série temporal assintótica  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para os mesmos valores de  $D$  descritos na figura 27. Em vermelho e cinza temos a séries temporais de  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  e do sinal senoidal  $F_s(t) = A \sin(2\pi f_s t)$ , respectivamente. Novamente, note que, para  $D = D_{re}$ , observa-se uma grande diferença entre as amplitudes de oscilação. . . . . 100

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>18</b>
1.1	TIPOS DE PARTÍCULAS ATIVAS	19
1.2	EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA PARTÍCULAS AUTOPROPELIDAS COM TORQUE DE AUTOALINHAMENTO	21
<b>1.2.1</b>	<b>Escala característica e adimensionalização</b>	<b>24</b>
1.3	ORGANIZAÇÃO DA TESE	26
<b>2</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>27</b>
2.1	INTEGRAÇÃO DE EQUAÇÕES DE LANGEVIN	27
2.2	ESCAPE DE UMA PARTÍCULA BROWNIANA PASSIVA EM UM POTEN- CIAL BIESTÁVEL	31
2.3	O CAMINHO MAIS PROVÁVEL DE ESCAPE (CMPE)	34
<b>2.3.1</b>	<b>O CMPE em 1D</b>	<b>35</b>
<b>2.3.2</b>	<b>O CMPE em 3D</b>	<b>39</b>
<b>3</b>	<b>DINÂMICA DETERMINÍSTICA</b>	<b>41</b>
3.1	CARACTERÍSTICAS GERAIS DA DINÂMICA DETERMINÍSTICA	42
<b>3.1.1</b>	<b>Potencial confinador e isóclina crítica</b>	<b>42</b>
<b>3.1.2</b>	<b>Estabilidade da isóclina crítica e fase escaladora</b>	<b>43</b>
<b>3.1.3</b>	<b>Fase orbital e simetria de reflexão</b>	<b>45</b>
<b>3.1.4</b>	<b>Dinâmica em potenciais com simetria radial</b>	<b>49</b>
3.2	DINÂMICA EM UM POTENCIAL ELÍPTICO	52
<b>3.2.1</b>	<b>Isóclina crítica do potencial elíptico</b>	<b>53</b>
<b>3.2.2</b>	<b>Órbitas estáveis do potencial elíptico</b>	<b>53</b>
<i>3.2.2.1</i>	<i>Instabilidade da fase orbital</i>	<i>57</i>
<i>3.2.2.2</i>	<i>Área orbital e mobilidade angular</i>	<i>58</i>
<i>3.2.2.3</i>	<i>Bacia de atração das órbitas</i>	<i>59</i>
3.3	POTENCIAIS ANARMÔNICOS E CAOS	60
3.4	CONCLUSÃO DO CAPÍTULO	63
<b>4</b>	<b>DINÂMICA ESTOCÁSTICA</b>	<b>66</b>
4.1	FASES DINÂMICAS A RUÍDO FINITO	67
<b>4.1.1</b>	<b>Interação entre ruído rotacional e translacional</b>	<b>67</b>

4.1.2	<b>Transição entre comportamento ativo e passivo</b> . . . . .	<b>69</b>
4.1.3	<b>Conjunto caótico não atrativo no potencial anarmônico</b> . . . . .	<b>71</b>
4.1.4	<b>Coexistência das fases orbitais no potencial elíptico</b> . . . . .	<b>73</b>
4.2	<b>ESCAPE ENTRE ÓRBITAS PERIÓDICAS</b> . . . . .	<b>75</b>
4.2.1	<b>CMPE para a partícula autopropelida</b> . . . . .	<b>75</b>
4.2.2	<b>Transição entre órbitas circulares</b> . . . . .	<b>76</b>
4.2.2.1	<i>Confinamento em parede dura</i> . . . . .	<i>77</i>
4.2.2.2	<i>Confinamento em poço harmônico</i> . . . . .	<i>80</i>
4.2.3	<b>Transição entre órbitas não circulares</b> . . . . .	<b>83</b>
4.3	<b>CONCLUSÃO DO CAPÍTULO</b> . . . . .	<b>86</b>
<b>5</b>	<b>RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA NO ESCAPE ENTRE ÓRBITAS</b> .	<b>89</b>
5.1	RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA DE UMA PARTÍCULA BROWNIANA PAS- SIVA EM POTENCIAL BIESTÁVEL . . . . .	90
5.2	RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA DE UMA PARTÍCULA ATIVA EM CON- FINAMENTO CIRCULAR . . . . .	94
5.2.1	<b>Ressonância estocástica no confinamento em parede dura</b> . . . . .	<b>95</b>
5.2.2	<b>Ressonância estocástica em confinamento harmônico</b> . . . . .	<b>98</b>
5.3	<b>CONCLUSÃO DO CAPÍTULO</b> . . . . .	<b>101</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS</b> . . . . .	<b>103</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>106</b>

# 1 INTRODUÇÃO

Partículas ativas são capazes de converter energia absorvida do ambiente em movimento direcionado, o que as afasta do equilíbrio (RAMASWAMY, 2010). Elas têm sido usadas como sistemas modelo para o estudo de comportamentos complexos comumente observados em sistemas vivos, coloides ativos, grãos vibrantes e dispositivos automatizados com a capacidade de se autopropelir (SZABÓ et al., 2006; GIAVAZZI et al., 2018; PINÇE et al., 2016; GEYER et al., 2019; KUMAR et al., 2014; BERA; SOOD, 2020; GIOMI; HAWLEY-WELD; MAHADEVAN, 2013; SCHOLZ; ENGEL; PÖSCHEL, 2018; DEBLAIS et al., 2018), sendo elementos fundamentais da matéria ativa.

Os primeiros modelos de matéria ativa tinham como objetivo modelar o comportamento de grupos de animais, sendo o comportamento modelado através de um método computacional iterativo, em que cada indivíduo do grupo é considerado como uma partícula ativa. Destacam-se como exemplos o modelo de REYNOLDS em 1987, um dos primeiros, e o modelo de VICSEK et al. em 1995, um dos mais importantes. No modelo de (REYNOLDS, 1987), cada indivíduo de um grupo deveria seguir regras simples, como “evitar colisões”, “manter a velocidade similar à de seus vizinhos” e “permanecer junto de seus vizinhos” (REYNOLDS, 1987). No modelo de VICSEK et al., por outro lado, todos os indivíduos do grupo possuem o mesmo módulo de velocidade; entretanto, a nova orientação de cada indivíduo é definida como a orientação média de sua vizinhança, modificada pela ação de uma perturbação aleatória. Desde então, o ramo de matéria ativa vem se desenvolvendo, avançando tanto no estudo de fenômenos coletivos quanto na dinâmica individual de partículas ativas (MARCHETTI et al., 2013; BECHINGER et al., 2016).

Em particular, quando confinadas, partículas ativas podem apresentar distribuições estacionárias fora do equilíbrio<sup>1</sup> (MALAKAR et al., 2020; SANTRA; BASU; SABHAPANDIT, 2021), escapes que não podem ser descritos pela fórmula de Kramers (WOILLEZ et al., 2019; WEXLER et al., 2020; GU et al., 2020) e inversões no sentido de rotações em confinamento circular (OSTAPENKO et al., 2018; DAUCHOT; DÉMERY, 2019; CODUTTI et al., 2022). Nosso objeto de estudo nesta tese é a dinâmica de uma única partícula ativa confinada cuja orientação tende a se alinhar com a força exercida sobre ela. Como veremos ao longo dos capítulos, esse modelo de partícula ativa apresenta todas as características listadas acima.

---

<sup>1</sup> Distribuições de probabilidade estacionárias que não são do tipo Boltzmann.

Neste capítulo, iremos introduzir alguns tipos de partículas ativas, em especial as partículas brownianas ativas (seção 1.1). Em seguida, na seção 1.2, apresentaremos as equações de movimento para nossa partícula ativa de interesse: partículas ativas confinadas com torque de autoalinhamento. Por fim, na seção 1.3, descreveremos de forma breve o conteúdo presente nos próximos capítulos da tese.

## 1.1 TIPOS DE PARTÍCULAS ATIVAS

O termo “partícula ativa” refere-se de forma ampla a qualquer entidade natural ou artificial capaz de absorver energia do ambiente e gerar movimento (veja a figura 1 para alguns exemplos). Na literatura, costumam utilizar diferentes nomenclaturas para partículas ativas com o intuito de explicitar alguma propriedade ou função específica do tipo de partícula ativa. Partículas ativas cujo movimento é devido a um mecanismo interno de propulsão são comumente chamadas de “partículas autopropelidas”. Se o mecanismo de propulsão é projetado para deslocamento em um fluido, o termo “nadador ativo” é usualmente empregado.

Partículas de Janus são partículas ativas artificiais cujo movimento direcionado é proveniente de assimetrias, possuindo diversos formatos e designs para produzir esse movimento (WALTHER; MÜLLER, 2013). Um exemplo comum de partículas de Janus são partículas esféricas semi-revestidas [figura 1-(b)]; nesse caso, as interações que ocorrem na interface entre o fluido e a partícula são assimétricas devido ao revestimento parcial, resultando em movimento direcionado (LI et al., 2014; ZHANG et al., 2017; NISHIGUCHI; SANO, 2015; HOWSE et al., 2007).

O modelo de partícula ativa que adotamos (seção 1.2) pode ser visto como uma extensão do modelo de partículas brownianas ativas (PBA). Partículas brownianas ativas são modeladas como partículas autopropelidas no limite sobreamortecido, não apresentando equações para a evolução temporal de seu vetor velocidade

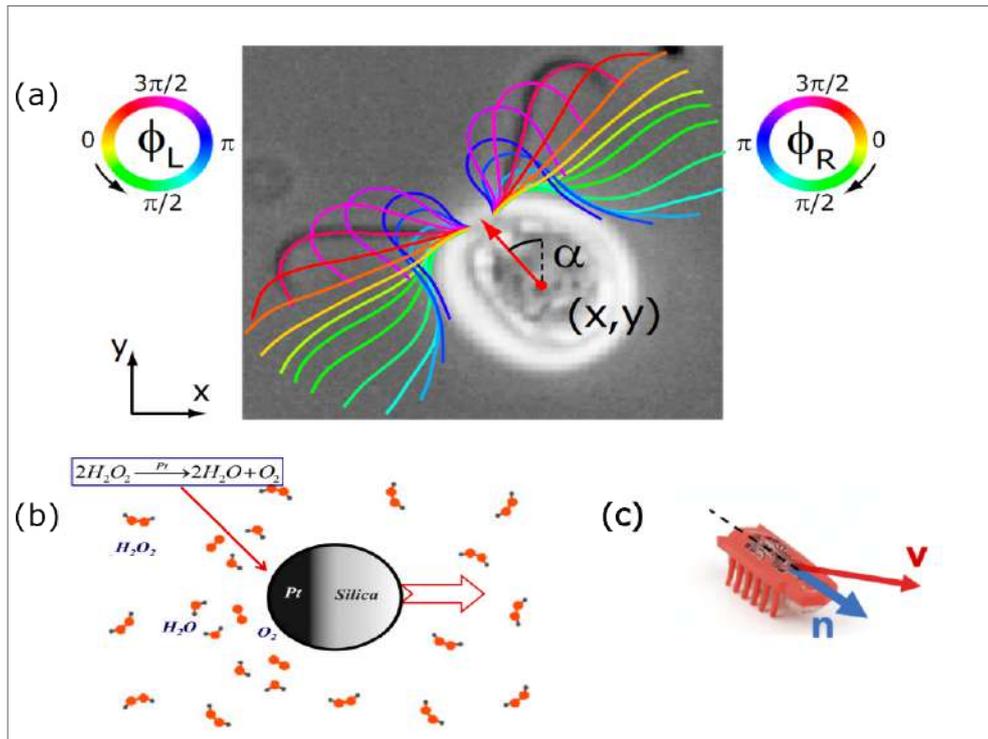
$$\dot{x} = v_0 \cos \phi + \xi_x(t), \quad (1.1)$$

$$\dot{y} = v_0 \sin \phi + \xi_y(t), \quad (1.2)$$

$$\dot{\phi} = \xi_\phi(t). \quad (1.3)$$

As funções  $\xi_x$ ,  $\xi_y$  e  $\xi_\phi$  são chamadas de ruído gaussiano branco e modelam as forças aleatórias que atuam sobre colóides em movimento browniano, descreveremos essas funções com mais detalhes na seção 2.1. No modelo, a partícula é capaz de se autopropelir com velocidade constante, com sua direção formando um ângulo  $\phi$  em relação ao eixo  $x$ . O modelo acima

Figura 1 – Exemplos de partículas ativas. (a) Estágios de nado de uma *Chlamydomonas reinhardtii* (uma alga unicelular com dois flagelos). Em cada instante, a posição e a orientação de seu corpo são caracterizadas por sua posição central  $(x, y)$  e pelo ângulo  $\alpha$  (em nosso modelo, representado por  $\theta$ ) de seu eixo longo em relação ao referencial do laboratório. A batida de cada flagelo é caracterizada pelas fases  $\phi_L$  e  $\phi_R$ , para os flagelos esquerdo e direito, respectivamente. O movimento direcionado é o resultado da batida de seus flagelos. (b) Uma partícula de Janus esférica parcialmente revestida; a assimetria da reação química devido ao revestimento parcial resulta em movimento direcionado. (c) Um *Hexbug* com seu eixo de orientação e vetor de velocidade que não estão necessariamente sempre alinhados. O brinquedo possui um motor interno que o faz vibrar; a interação entre suas “patas” vibrantes e a superfície resulta em movimento direcionado.



**Fonte:** o autor (2024), adaptada de (a) GEYER et al. (2013), (b) ZHANG et al. (2017) e (c) BACONNIER et al. (2024)

descreve partículas brownianas ativas livres; caso estejam sujeitas a um potencial  $V(x, y)$ , pode-se adicionar as componentes da força conservativa nas equações (1.1) e (1.2). Em geral, o modelo pode ser adaptado para incluir mais ingredientes à dinâmica da partícula. Entretanto, as características que se preservam nos modelos de PBA são a dinâmica sobreamortecida e a propulsão com intensidade constante e direção variável. As partículas brownianas *passivas*, por sua vez, possuem  $v_0 = 0$ , sendo seu movimento resultado apenas de choques aleatórios.

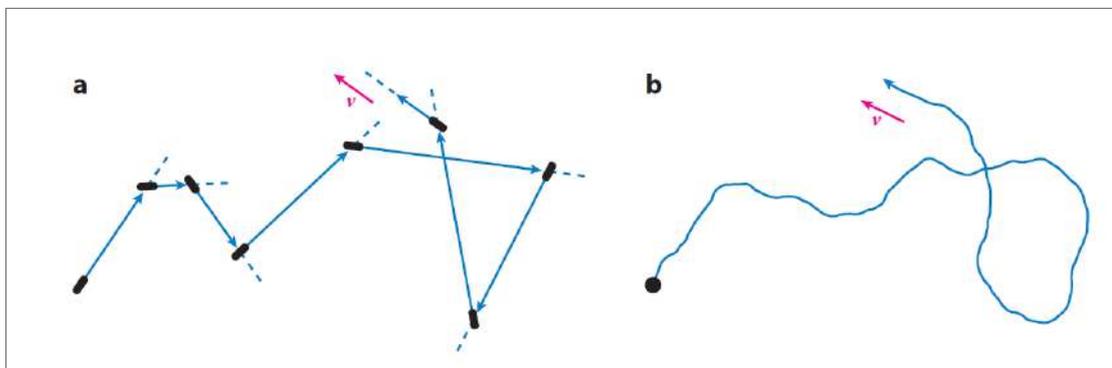
Células, bactérias e microalgas são exemplos de micronadadores que geralmente realizam seus movimentos no regime de baixo número de Reynolds<sup>2</sup>. Este é um limite onde a inércia desempenha um papel menor e o amortecimento viscoso é essencial (PURCELL, 1977; LAUGA;

<sup>2</sup> O número de Reynolds  $R_e$  é um parâmetro adimensional relevante na hidrodinâmica. Ele é definido por  $R_e = \frac{av\rho}{\mu}$ , onde  $a$  e  $v$  são o comprimento característico e a velocidade característica do nadador, respectivamente, e  $\rho$  e  $\mu$  são, respectivamente, a densidade e a viscosidade do fluido. Um baixo (alto) número de Reynolds indica que a dinâmica do nadador é dominada pelas forças viscosas (inerciais) (PURCELL, 1977).

POWERS, 2009; BECHINGER et al., 2016), tornando o modelo de partículas brownianas ativas, que é sobreamortecido, apropriado para a modelagem desses seres.

Um segundo exemplo relevante de modelo para partículas ativas é o *run-and-tumble* (uma tradução livre é correr-e-tombar). Nesse modelo, o movimento ocorre por meio de trajetórias balísticas com velocidade fixa (corridas), seguidas de mudanças abruptas e instantâneas na direção (tombos). As partículas *run-and-tumble* diferem das partículas brownianas ativas apenas na sua relaxação rotacional; em vez de difusão contínua, os eventos de reorientação são abruptos e aleatorizam completamente a direção de movimento (veja a figura 2). Esses eventos ocorrem de forma aleatória no tempo, com uma taxa média constante, sendo o tempo médio entre dois eventos de “tombo” distribuído exponencialmente. O modelo *run-and-tumble* descreve de forma satisfatória o movimento individual de algumas bactérias, como, por exemplo, a *E. coli* (BERG; TURNER, 1979). No limite de longos tempos e longas distâncias, os modelos de partícula browniana ativa e *run-and-tumble* são estatisticamente equivalentes (CATES; TAILLEUR, 2013; SOLON; CATES; TAILLEUR, 2015).

Figura 2 – Ilustração de uma trajetória típica para partículas *run-and-tumble* (a) e partículas brownianas ativas não confinadas (b).



Fonte: CATES; TAILLEUR (2015)

Em geral, ao longo da tese, utilizaremos o termo “partícula ativa” ou “partícula autopropelida” para nos referirmos à partícula ativa com torque de autoalinhamento, cujas equações de movimento serão descritas na próxima seção.

## 1.2 EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA PARTÍCULAS AUTOPROPELIDAS COM TORQUE DE AUTOALINHAMENTO

Consideramos uma partícula ativa sobreamortecida no plano  $(x, y)$  sujeita a um campo de força conservativo  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V$  e um torque normal ao plano  $(x, y)$ . A dinâmica translacional

e orientacional da partícula são modeladas pelas seguintes equações de Langevin:

$$\dot{\mathbf{r}} = v_0 \hat{\mathbf{n}} + \mu \mathbf{F} + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\zeta}(t) \quad (1.4)$$

$$\dot{\theta} = \beta \tau + \sqrt{2D_r} \xi(t), \quad (1.5)$$

Onde  $\hat{\mathbf{n}} = (\cos \theta, \sin \theta)$  é o eixo de orientação da partícula,  $v_0$  é a velocidade de autopropulsão,  $\mu$  é a mobilidade translacional, e  $\beta$  a mobilidade angular. As forças estocásticas  $\xi(t)$  e  $\boldsymbol{\zeta}(t)$  são ruídos gaussianos independentes com média nula e autocorrelação dada por:

$$\langle \zeta_\mu(t) \rangle = \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (1.6)$$

$$\langle \zeta_\mu(t) \zeta_\nu(t') \rangle = \delta_{\mu\nu} \delta(t - t'), \quad (1.7)$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \delta(t - t'), \quad (1.8)$$

onde  $\mu, \nu = x, y$ ,  $D_t$  e  $D_r$  são as constantes de difusão translacional e rotacional, respectivamente.

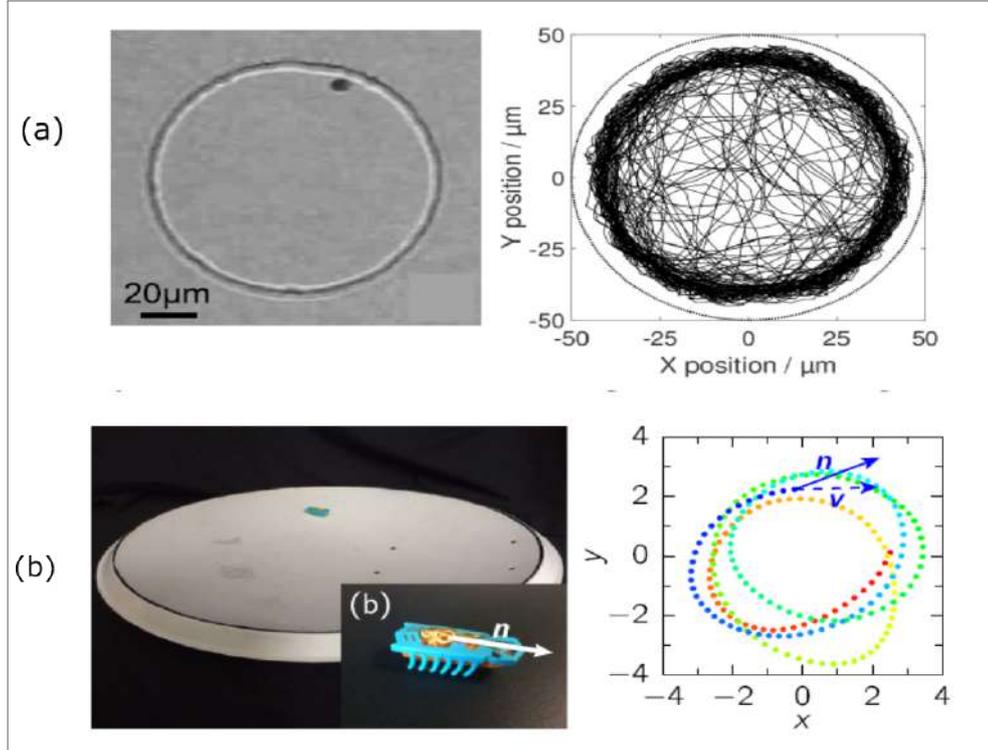
O torque  $\tau$  no qual estamos interessados é uma forma de *torque restaurador* ou *torque de autoalinhamento*. A terminologia “restaurador” (ou “autoalinhamento”) associada a esse tipo de torque decorre do fato de que ele é não nulo sempre que há um desalinhamento entre o eixo de orientação da partícula  $\hat{\mathbf{n}}$  e um outro vetor relevante para sua dinâmica. Esse torque atua no sentido de realinhar esses vetores.

No transporte forético, caracterizado pelo movimento de partículas coloidais devido à interação de um campo com suas superfícies, as partículas podem estar sujeitas a um torque que tende a alinhar seu eixo de orientação ao *gradiente do campo forético*, que pode ser um gradiente de campo elétrico, concentração de espécies químicas ou temperatura (ANDERSON, 1989; HOWSE et al., 2007; VOLPE et al., 2011; LIEBCHEN; LÖWEN, 2019; KUMAR et al., 2024).

Bactérias e algas geometricamente confinadas por uma parede circular apresentam uma trajetória ruidosa aproximadamente circular devido aos choques e reorientações quando entram em contato com a parede confinadora, podendo ainda sofrer inversões no sentido de rotação [veja figura 3-(a)]. Nesses sistemas, as reorientações e, portanto, a dinâmica são explicadas pela existência de um torque restaurador que tende a alinhar a orientação da partícula com a *força* sofrida por ela quando interage com a parede (OSTAPENKO et al., 2018; CODUTTI et al., 2022).

Um terceiro sistema cuja dinâmica é explicada pela existência de um torque restaurador é o experimento realizado por DAUCHOT; DÉMERY em 2019. No experimento, Um Hexbug, um brinquedo capaz de propelir em uma direção, é confinado à superfície de uma antena

Figura 3 – Design experimental e trajetória de um ser biológico e artificial capazes de se autopropelir em confinamento circular. (a) Uma *Chlamydomonas reinhardtii* contida em um compartimento circular quase bidimensional. (b) Um hexbug nano em um prato parabólico. A trajetória ruidosa quase circular de ambos é modelada numericamente com a adição de um torque de restaurado na dinâmica orientacional da partícula ativa.



**Fonte:** O autor (2024), adaptada de (a) OSTAPENKO et al. (2018) e (b) DAUCHOT; DÉMERY (2019)

parabólica [veja figura 3-(b)]. Como resultado das observações, foram identificadas duas dinâmicas de movimento distintas, classificadas como fase *escaladora* (*climbing* no original) e *orbital* (*orbiting* no original). As dinâmicas observadas podem ser explicadas considerando a existência de um toque que tende a alinhar o eixo de orientação com o vetor *velocidade* da partícula (DAUCHOT; DÉMERY, 2019).

Entre os diferentes tipos de partícula ativa, nosso estudo contempla os que estão sujeitos a um torque restaurador  $\tau$ , que é não nulo sempre que há um desalinhamento entre o eixo de orientação  $\hat{n}$  e a força total  $\mathbf{F}$  que atua sobre a partícula (OSTAPENKO et al., 2018; ARANSON; PIKOVSKY, 2022; CODUTTI et al., 2022; LIN; HAN; HUEPE, 2021).

$$\tau = b(\hat{n} \times \mathbf{F}) \cdot \hat{z} \quad (1.9)$$

Onde  $b$  é uma constante com dimensão de comprimento.

No limite onde o ruído translacional  $D_t$  pode ser desprezado, pode-se substituir a força total  $\mathbf{F}$  em (1.4) na definição do torque em (1.9) de modo que o torque pode ser reescrito

como:

$$\tau = \frac{b}{\mu} (\hat{\mathbf{n}} \times \dot{\mathbf{r}}) \cdot \hat{\mathbf{z}}. \quad (1.10)$$

Nesse limite, o torque definido na equação (1.9) é equivalente ao torque gerador das fases escaladora e orbital presente em (DAUCHOT; DÉMERY, 2019), sendo equivalente dizer que ele alinha força e orientação ou velocidade e orientação. Substituindo o torque de alinhamento na equação (1.5) obtemos as equações de Langevin que regem a partícula autopropelida

$$\dot{\mathbf{r}} = v_0 \hat{\mathbf{n}} + \mu \mathbf{F} + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\zeta}(t), \quad (1.11)$$

$$\dot{\theta} = \beta b (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \sqrt{2D_r} \xi(t), \quad (1.12)$$

Vale salientar que, nas equações acima optamos por descrever a evolução temporal da orientação da partícula  $\hat{\mathbf{n}}$  em termos da evolução temporal de seu ângulo em relação ao eixo  $x$ . Entretanto, na literatura também é comum o sistema de equações ser escrito em termos da evolução temporal do próprio vetor  $\hat{\mathbf{n}}$ . Nesse caso, as equações de Langevin são escritas como:

$$\dot{\mathbf{r}} = v_0 \hat{\mathbf{n}} + \mu \mathbf{F} + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\zeta}(t) \quad (1.13)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt} = \beta b (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \times \hat{\mathbf{n}} + \sqrt{2D_r} \boldsymbol{\xi}(t). \quad (1.14)$$

Em duas dimensões ambos sistema de equações são equivalentes, em três dimensões a equação (1.14) ainda é válida, entretanto,  $\mathbf{n}$  passa a ser descrito por dois ângulos.

### 1.2.1 Escala característica e adimensionalização

Podemos adotar um sistema de unidades conveniente para as grandezas associadas à partícula autopropelida. Sejam  $\tilde{t}$ ,  $\tilde{\mathbf{r}}$ ,  $\tilde{\mathbf{F}}$ ,  $\tilde{\beta}$ ,  $\tilde{D}_t$  e  $\tilde{D}_r$  as grandezas no Sistema Internacional de Unidades e  $t$ ,  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{F}$ ,  $\beta$ ,  $D_t$  e  $D_r$  suas versões adimensionais no novo sistema de unidades. A relação entre as grandezas é uma redimensionalização.

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= t_0 t, & \tilde{\mathbf{r}} &= L_0 \mathbf{r}, \\ \tilde{\mathbf{F}} &= F_0 \mathbf{F}, & \tilde{\beta} &= \beta_0 \beta, \\ \tilde{D}_t &= D_{t0} D_t, & \tilde{D}_r &= D_{r0} D_r \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde as constantes  $t_0$ ,  $L_0$ ,  $F_0$ ,  $\beta_0$ ,  $D_{t0}$  e  $D_{r0}$  são as unidades características de tempo, comprimento, força, mobilidade angular, coeficiente de difusão translacional e coeficiente de difusão

rotacional, respectivamente. Por construção, a constante  $b$  tem unidade de comprimento, portanto,  $[b] = L_0$ . Além disso, como  $\delta(t)$  tem unidade de  $\frac{1}{t_0}$ , então as forças estocásticas têm unidade de  $\frac{1}{\sqrt{t_0}^3}$ , portanto,

$$\zeta(\tilde{t}) = \frac{1}{\sqrt{t_0}} \zeta(t), \quad \xi(\tilde{t}) = \frac{1}{\sqrt{t_0}} \xi(t). \quad (1.16)$$

Finalmente, partindo das equações (1.11) e (1.12)

$$\frac{d\tilde{\mathbf{r}}}{d\tilde{t}} = v_0 \hat{\mathbf{n}} + \mu \tilde{\mathbf{F}} + \sqrt{2\tilde{D}_t} \zeta(\tilde{t}) \quad (1.17)$$

$$\frac{d\tilde{\theta}}{d\tilde{t}} = \tilde{\beta} b (\hat{\mathbf{n}} \times \tilde{\mathbf{F}}) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \sqrt{2\tilde{D}_r} \xi(\tilde{t}) \quad (1.18)$$

e aplicando a redimensionalização presente nas equações em (1.15) obtemos

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \underbrace{\left(\frac{t_0}{L_0} v_0\right)}_1 \hat{\mathbf{n}} + \underbrace{\left(\frac{t_0}{L_0} F_0\right)}_1 \mu \mathbf{F} + \sqrt{2 \underbrace{\left(\frac{t_0}{L_0^2} D_{t0}\right)}_1} D_t \zeta(t)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \underbrace{(t_0 F_0 L_0 \beta_0)}_1 \beta (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \sqrt{2 \underbrace{(t_0 D_{r0})}_1} D_r \xi(t).$$

Definindo convenientemente as unidades características

$$t_0 = \frac{L_0}{v_0}, \quad \beta_0 = \frac{\mu}{L_0^2}, \quad (1.19)$$

$$D_{t0} = v_0 L_0, \quad D_{r0} = \frac{v_0}{L_0}, \quad (1.20)$$

$$F_0 = \frac{v_0}{\mu} \quad (1.21)$$

Como  $\mathbf{F}' = \mathbf{F}(\mathbf{r}')$ , então  $F_0 = F_0(L_0)$ , de modo que o comprimento característico  $L_0$  depende da forma funcional da força, isto é, depende do potencial ao qual a partícula está sujeita.

Portanto, as equações de movimento da partícula autopropelida no sistema de unidades característico se tornam:

$$\dot{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{n}} + \mathbf{F} + \sqrt{2D_t} \zeta(t) \quad (1.22)$$

$$\dot{\theta} = \beta (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \sqrt{2D_r} \xi(t). \quad (1.23)$$

Onde a força é medida em unidades de  $\frac{v_0}{\mu}$ , o comprimento em unidades de  $L_0$ , o tempo em unidades de  $\frac{L_0}{v_0}$ , a mobilidade angular em unidades de  $\frac{\mu}{L_0^2}$ , o coeficiente de difusão translacional em unidades de  $v_0 L_0$  e o coeficiente de difusão rotacional em unidades de  $\frac{v_0}{L_0}$ .

<sup>3</sup> Nas equações (1.7) e (1.8) vemos que a unidade do produto entre as forças estocásticas tem a unidade da  $\delta(t)$ .

### 1.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE

Nesta tese, estudaremos a dinâmica determinística e estocástica de uma partícula ativa confinada capaz de se autopropelir cujo vetor de orientação tende a se alinhar com a força que atua sobre a partícula.

No capítulo 2, temos como foco apresentar de forma breve, porém clara, as equações de Langevin e como resolvê-las numericamente, além de como obter a energia de ativação de um escape quando o sistema pode ou não ser descrito em termos de uma única variável.

No capítulo 3, iremos “desligar” o ruído do sistema e estudar as estruturas atrativas presentes no espaço de fase de uma partícula ativa confinada com torque de autoalinhamento. Nesse capítulo, mostraremos que o espaço de fase possui pontos fixos, órbitas periódicas e órbitas caóticas que surgem em pares. Além disso, generalizamos o conceito de fase orbital e escaladora para potenciais não harmônicos.

No capítulo 4, o ruído é “ligado” e estudamos a dinâmica estocástica da partícula ativa. Para baixos valores de ruído, essa dinâmica pode ser vista como uma competição entre as estruturas atrativas do espaço de fase (na ausência de ruído) e o próprio ruído; já para valores muito altos de ruído, a dinâmica é dominada completamente por ele. Ainda no capítulo 4, veremos que a partícula ativa pode realizar escapes induzidos por ruído entre as órbitas periódicas, os quais, em geral, não podem ser descritos em termos de uma única variável.

No capítulo 5, mostraremos que, para um confinamento circular, a adição de um sinal periódico pode induzir ressonância estocástica no sistema. Nesse tipo de confinamento, é possível quantificar a ressonância estocástica utilizando as mesmas ferramentas aplicadas ao clássico problema de ressonância estocástica em um potencial unidimensional biestável.

Finalmente, no capítulo 6, concluímos a tese, revisando os principais resultados e apresentando as perspectivas para investigações futuras.

## 2 METODOLOGIA

Neste capítulo, nosso objetivo é apresentar de forma breve as equações de Langevin com ruído gaussiano branco, assim como o método que utilizaremos para realizar as integrações numéricas (seção 2.1). Em seguida, discutiremos o problema do escape de uma partícula passiva em uma dimensão (seção 2.2). Por fim, na seção 2.3, apresentaremos o método do *caminho mais provável de escape* (CMPE).

### 2.1 INTEGRAÇÃO DE EQUAÇÕES DE LANGEVIN

Como vimos na seção 1.2, a dinâmica de partículas brownianas é modelada por um sistema de equações diferenciais estocásticas, chamadas de equações de Langevin. Propostas inicialmente por Paul Langevin em 1908 com o intuito de descrever o movimento browniano (LEMONS; GYTHIEL, 1997), as equações de Langevin são um dos pilares da descrição de fenômenos estocásticos. De um modo geral, equações de Langevin são equações diferenciais estocásticas compostas pela soma de uma parte completamente determinística e outra estocástica, usualmente sendo escritas da seguinte forma:

$$\dot{x} = \underbrace{F(x, t)}_{\text{Termo determinístico}} + \underbrace{G(x, t)\xi(t)}_{\text{Termo estocástico}}. \quad (2.1)$$

Na equação acima, as funções  $F(x, t)$  e  $G(x, t)$  são funções determinísticas, enquanto que a “função”  $\xi(t)$  representa o chamado *ruído gaussiano branco*. No contexto de partículas brownianas,  $\xi(t)$  foi introduzido para modelar a força resultante sobre as partículas brownianas em suspensão devido a choques aleatórios com as moléculas do fluido. O ruído gaussiano branco satisfaz

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (2.2)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t'), \quad (2.3)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  representa uma média sobre realizações e  $\delta(t - t')$  é a função delta de Dirac. Uma partícula browniana em uma dimensão é descrita por uma equação de Langevin autônoma do tipo:

$$\dot{x} = F(x) + \xi(t), \quad (2.4)$$

com o ruído gaussiano satisfazendo

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (2.5)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t-t'), \quad (2.6)$$

onde  $D$  é uma constante. Quanto maior o valor da constante  $D$ , maior é a importância do termo estocástico na equação de Langevin, portanto,  $D$  é uma medida da intensidade de ruído (fator aleatório) do sistema. Para partículas brownianas em equilíbrio térmico observa-se  $D \propto T$ , sendo  $D$  chamado de coeficiente de difusão. Na literatura, é também comum explicitar a intensidade do ruído  $D$  como fator multiplicativo na própria equação 2.4, fazendo  $\xi(t) \rightarrow \sqrt{2D}\xi(t)$  e  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t-t')$ .

Em geral, um sistema de equações de Langevin autônomas com ruído aditivo é dado por:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.7)$$

onde  $\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  e  $\boldsymbol{\xi}(t) = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$  é um vetor de ruído gaussiano branco que satisfaz

$$\langle \xi_\mu(t) \rangle = 0, \quad (2.8)$$

$$\langle \xi_\mu(t)\xi_\nu(t') \rangle = 2D_\mu\delta_{\mu\nu}\delta(t-t'), \quad (2.9)$$

onde  $\mu, \nu = 1, 2, \dots, n$ . As equações de Langevin em nosso sistema de interesse (seção 1.2) são obtidas realizando as seguintes identificações,

Caso geral	Sistema de interesse
$(x, y, z)$	$(x, y, \theta)$
$(D_x, D_y, D_z)$	$(D_t, D_t, D_r)$
$F_x$	$F_x = \cos \theta - V_x$
$F_y$	$F_y = \sin \theta - V_y$
$F_z$	$F_\theta = \beta (V_x \sin \theta - V_y \cos \theta)$

Tabela 1 – Associação entre o caso geral das equações de Langevin e nosso sistema de interesse: partículas brownianas ativas confinadas a um potencial  $V(x, y)$  com torque de autoalinhamento.  $V_x$  e  $V_y$  são as derivadas parciais em relação a  $x$  e  $y$ , respectivamente.

No estudo de sistemas estocásticos, usualmente integra-se numericamente as equações de Langevin diversas vezes para as mesmas condições iniciais, sendo cada uma delas chamada de realização. Embora cada realização possua a mesma condição inicial, a evolução temporal de

cada realização é distinta. Geralmente, buscam-se comportamentos médios do sistema, obtidos ao realizar médias sobre várias realizações. No que se segue, iremos apresentar o método de integração que utilizaremos para todas as equações de Langevin presentes na tese.

Primeiramente, vamos considerar o caso unidimensional composto por apenas uma equação. Considere a seguinte equação de Langevin:

$$\dot{x} = F(x) + \xi(t), \quad (2.10)$$

onde  $\xi(t)$  representa um ruído gaussiano branco com

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (2.11)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t-t'), \quad (2.12)$$

onde, novamente,  $\langle \dots \rangle$  representa média sobre realizações e  $D$  representa a intensidade do ruído.

A equação (2.10) com  $\xi(t)$  satisfazendo as condições acima é equivalente à equação diferencial estocástica

$$dx(t) = F(x(t)) dt + \sqrt{2D} d\mathcal{W}(t), \quad (2.13)$$

onde a solução para  $x(t)$  é obtida integrando ambos os lados da equação (2.13)

$$x(t) = x_0 + \int_0^t F(x(t)) dt + \int_0^t \sqrt{2D} d\mathcal{W}(t). \quad (2.14)$$

A primeira integral do lado direito da equação (2.14) é determinística, enquanto que a segunda integral

$$I_D = \int_0^t \sqrt{2D} d\mathcal{W}(t), \quad (2.15)$$

é uma integral estocástica, onde o “diferencial”  $d\mathcal{W}(t)$  modela uma integração sob o movimento browniano. O termo  $\mathcal{W}(t)$  é chamado de processo de Wiener, uma variável aleatória dependente de  $t \in [0, T]$  que satisfaz três condições (HIGHAM., 2001):

1.  $\mathcal{W}(0) = 0$  (com probabilidade 1)
2. Para  $0 \leq s < t \leq T$ , a variação  $\mathcal{W}(t) - \mathcal{W}(s) \equiv \Delta\mathcal{W}(\Delta t)$  com  $\Delta t = t - s$ , é uma variável aleatória com distribuição normal de média zero e variância  $\Delta t$ , conseqüentemente,  $\Delta\mathcal{W}(\Delta t) \sim \sqrt{\Delta t} \mathcal{N}(0, 1)$ , onde  $\mathcal{N}(0, 1)$  é uma variável aleatória com distribuição normal de média nula e variância unitária.

3. Para  $0 \leq s < t < u < v \leq t$  as variações  $\Delta\mathcal{W}(\Delta t_1 = t - s)$  e  $\Delta\mathcal{W}(\Delta t_2 = v - u)$  são independentes.

Por fim comparando a equação (2.10) com a equação (2.13) podemos formalmente identificar

$$\xi(t) = \sqrt{2D} \frac{d\mathcal{W}}{dt}(t). \quad (2.16)$$

Discretizando o tempo  $t \in [0, T]$  em  $n+1$  partes iguais com  $t_i = i\Delta t$ , e, conseqüentemente,  $\Delta t = \frac{T}{n}$ , a trajetória discreta de  $x(t)$  é a seqüência de pontos  $\{x_i\}_{i=0}^{i=n}$ ,  $x(t_i) = x_i$ , obtida iterativamente da seguinte forma:

$$x_{i+1} = x_i + \int_{t_i}^{t_i+\Delta t} F(x(t))dt + \int_{t_i}^{t_i+\Delta t} \sqrt{2D} d\mathcal{W}(t). \quad (2.17)$$

Como o integrando da equação (2.15) é  $G(t) = 2D$ , uma constante, o termo estocástico é chamado de ruído aditivo, nesse caso, a integral é indiferente à escolha do valor de  $t^* \in [t_i, t_i + \Delta t]$  escolhido na partição da integral, pois,  $G(t^*) = 2D$  para qualquer  $t^*$ . Conseqüentemente, para as integrações numéricas que iremos realizar, não há distinção entre as integrais estocásticas de de Itô e Stratonovich (GARDINER, 1985). Partindo da equação (2.17) podemos escrever

$$x_{i+1} = x_i + I_{det}(\Delta t) + \sqrt{2D}\Delta\mathcal{W}_i(\Delta t), \quad (2.18)$$

onde  $I_{det}(\Delta t)$  é a estimativa do valor da integral determinística para  $t \in [t_i, t_i + \Delta t]$  e  $\Delta\mathcal{W}_i(\Delta t)$  é o número sorteado no passo  $i$  da distribuição normal com variância  $\Delta t$  (condição 2). Note que a seqüência de pontos da trajetória  $\{x_i\}_{i=0}^{i=n}$  depende da seqüência  $\{\Delta\mathcal{W}_i(\Delta t)\}_{i=0}^{i=n}$ , esse resultado faz parte da ideia central do CMPE que será discutido na seção 2.3. A seqüência  $\{x_i\}_{i=0}^{i=n}$  converge para a trajetória contínua de  $x(t)$  no limite onde  $n \rightarrow \infty$ . Por fim, o método de integração da equação diferencial estocástica depende de como se estima a integral determinística. No método de *Euler-Maruyama*, estimamos  $I_{det}$  escolhendo  $F(x(t)) \approx F(x(t_i))$  no intervalo  $[t_i, t_i + \Delta t]$ , portanto, temos:

$$x_{i+1} = x_i + F(x_i)\Delta t + \sqrt{2D}\Delta\mathcal{W}_i(\Delta t). \quad (2.19)$$

Para todas as integrações estocásticas realizadas na tese, usamos o método conhecido como *runge-kutta de segunda ordem estocástico* (BRÁŃKA; HEYES, 1999) (SRK2), onde  $I_{det}$  é estimado em dois passos:

$$x_i^{(1)} = x_i, \quad (2.20)$$

$$x_i^{(2)} = x_i + F(x_i)\Delta t + \Delta\mathcal{W}_i(\Delta t), \quad (2.21)$$

$$I_{det} = \frac{1}{2} [F(x_i^{(1)}) + F(x_i^{(2)})] \Delta t. \quad (2.22)$$

Portanto, a integração numérica da equação (2.10) usando o SRK2 é dada por:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2} [F(x_i^{(1)}) + F(x_i^{(2)})] \Delta t + \sqrt{2D} \Delta \mathcal{W}_i(\Delta t). \quad (2.23)$$

De um modo semelhante, para um sistema de equações de Langevin do tipo

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.24)$$

onde  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  e  $\boldsymbol{\xi}(t) = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$  é um vetor de ruído gaussiano branco que satisfaz

$$\langle \xi_\mu(t) \rangle = 0, \quad (2.25)$$

$$\langle \xi_\mu(t) \xi_\nu(t') \rangle = 2D_\mu \delta_{\mu\nu} \delta(t - t'), \quad (2.26)$$

com  $\mu, \nu = x, y, z$ , aplicamos o algoritmo do SRK2 separadamente para cada dimensão

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2} [F_x(\mathbf{r}_i^{(1)}) + F_x(\mathbf{r}_i^{(2)})] \Delta t + \sqrt{2D_x} \Delta \mathcal{W}_i^{(x)}(\Delta t), \quad (2.27)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2} [F_y(\mathbf{r}_i^{(1)}) + F_y(\mathbf{r}_i^{(2)})] \Delta t + \sqrt{2D_y} \Delta \mathcal{W}_i^{(y)}(\Delta t), \quad (2.28)$$

$$z_{i+1} = z_i + \frac{1}{2} [F_z(\mathbf{r}_i^{(1)}) + F_z(\mathbf{r}_i^{(2)})] \Delta t + \sqrt{2D_z} \Delta \mathcal{W}_i^{(z)}(\Delta t), \quad (2.29)$$

onde  $\mathbf{r}_i^{(1)} = \mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{r}_i^{(2)} = \mathbf{r}_i + \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \Delta t + \Delta \mathbf{W}_i(\Delta t)$ , e  $\Delta \mathbf{W}_i(\Delta t)$  é o “vetor” das variações do processo de Wiener dado por:

$$\Delta \mathbf{W}(\Delta t) = \left( \sqrt{2D_x} \Delta \mathcal{W}_i^{(x)}(\Delta t), \sqrt{2D_y} \Delta \mathcal{W}_i^{(y)}(\Delta t), \sqrt{2D_z} \Delta \mathcal{W}_i^{(z)}(\Delta t) \right). \quad (2.30)$$

## 2.2 ESCAPE DE UMA PARTÍCULA BROWNIANA PASSIVA EM UM POTENCIAL BIESTÁVEL

Nesta seção, abordaremos o problema clássico de escape entre mínimos de um potencial. Embora o escape em nosso sistema de interesse não possa, em geral<sup>1</sup>, ser descrito em uma dimensão, apresentaremos o caso unidimensional para estabelecer os conceitos fundamentais do problema de escape. Além disso, o estudo do escape de partículas brownianas passivas em potenciais biestáveis é um ponto de partida importante para entender o fenômeno de ressonância estocástica, que será explorado no capítulo 5.

Em uma dimensão, a dinâmica de uma partícula browniana passiva confinada a um potencial é modelada pela equação de Langevin

$$\dot{x} = -\frac{dV}{dx} + \xi(t), \quad (2.31)$$

<sup>1</sup> exceto no caso de confinamento com parede dura presente na seção 4.2.2.1

onde, novamente,  $\xi(t)$  é o ruído gaussiano branco que satisfaz:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (2.32)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t-t'). \quad (2.33)$$

Na ausência do ruído, isto é,  $\xi(t) = 0$ , os pontos fixos do sistema, caso existam, são os pontos críticos do potencial,

$$\dot{x} = 0 \implies \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_f} = 0. \quad (2.34)$$

Se existir ao menos um  $x_f$  tal que  $\left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x_f} > 0$ , então o ponto fixo  $x_f$  do sistema é estável e está localizado no ponto de mínimo local do potencial, sendo, portanto, o ponto de mínimo um atrator para a partícula.

Na ausência de ruído, se  $x(t=0) \neq x_f$ , a partícula é capturada por um dos pontos fixos estáveis, estando predestinada a permanecer em um dos mínimos do potencial. O escape em uma dimensão ocorre, por exemplo, quando, devido ao efeito do ruído, uma partícula passa de um ponto fixo estável para outro, cruzando um ponto fixo instável ou ponto de sela, que usualmente é um ponto de máximo local do potencial.

Quando a intensidade do ruído é muito baixa, o tempo médio de escape  $\tau_{\text{esc}}$  de um poço de potencial é dominado pelo fator de Arrhenius,

$$\tau_{\text{esc}} = A \exp\left(\frac{E_a}{D}\right), \quad (2.35)$$

onde  $E_a$  é a energia de ativação para o escape e  $A$  é uma constante<sup>2</sup>. Um potencial que ilustra bem esse tipo de escape em 1D é o potencial biestável definido por:

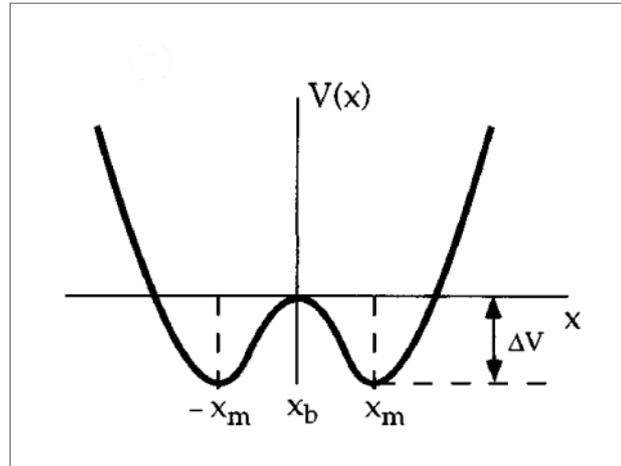
$$V(x) = \frac{bx^4}{4} - \frac{ax^2}{2}, \quad (2.36)$$

com  $a, b > 0$  e ilustrado na figura 4. A energia de ativação nesse caso, é a energia necessária para que a partícula consiga sair do ponto  $-x_m$  “escalando” a altura  $\Delta V$  do potencial para sobrepor o pico em  $x_b = 0$  e, em seguida, relaxar para o próximo ponto de mínimo  $x_m$ . A solução exata para o escape em uma dimensão entre mínimos de um potencial foi obtida por Hendrik Anthony Kramers em 1940:

$$\tau_{\text{esc}} = r_k^{-1}(D) = \frac{\sqrt{|V''(x_b)|V''(x_m)}}{2\pi} \exp\left(\frac{\Delta V}{D}\right), \quad (2.37)$$

<sup>2</sup> Na expressão (2.35) assumimos que tanto  $E_a$  quanto  $D$  se encontram em suas formas dimensionais.

Figura 4 – Potencial biestável com seus dois pontos fixos nos mínimos do potencial,  $x = \pm\sqrt{\frac{a}{b}} \equiv \pm x_m$  e seu ponto fixo instável no ponto de máximo local  $x_b = 0$ . A barreira de energia  $\Delta V = V(x_b) - V(\pm x_m) = \frac{a^2}{4b}$ , nesse caso, é a energia de ativação para o escape.



Fonte: (GAMMAITONI et al., 1998)

onde  $r_k(D)$  é a taxa de escape. A fórmula de Kramers (equação (2.37)), descreve corretamente o tempo médio de escape no limite onde  $\frac{\Delta V}{D} \gg 1$ . A demonstração da equação (2.37) parte da descrição da dinâmica estocástica de  $x$  pela sua distribuição de probabilidade  $P_x(x, t)$ , solução da equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P_x(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [V(x)P_x(x, t)] + D \frac{\partial^2 P_x(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.38)$$

A demonstração completa pode ser encontrada em (KRAMERS, 1940; RISKEN; HAKEN, 1989; GARDINER, 1985). Em particular, para o potencial biestável descrito pela equação (2.36), o tempo médio de escape é dado por

$$\tau_{\text{esc}} = r_k^{-1}(D) = \frac{a}{\pi\sqrt{2}} \exp\left(\frac{\Delta V}{D}\right). \quad (2.39)$$

Embora seja intuitivo interpretar a variável  $x$  como a posição de uma partícula sujeita a um potencial  $V(x)$ , a variável  $x$  não precisa, necessariamente, representar uma posição. Em vez disso,  $x$  pode corresponder a uma variável coletiva que descreve a dinâmica de transição em um sistema de maior dimensionalidade, onde o escape pelo potencial efetivo  $V(x)$  caracteriza essa transição. Devido à sua ampla aplicação em reações químicas, essa variável é frequentemente chamada de coordenada de reação ou variável de reação. Para uma revisão sobre tempos médios de escape/reação, veja a referência (HÄNGGI; TALKNER; BORKOVEC, 1990).

### 2.3 O CAMINHO MAIS PROVÁVEL DE ESCAPE (CMPE)

Na seção 2.2, discutimos que a fórmula de Kramers [equação (2.37)] pode ser aplicada com precisão, dentro de seu limite de validade, para estimar o tempo médio de escape ou a taxa de transição em sistemas nos quais o escape ou a transição podem ser descritos por uma única variável sob a ação de um potencial efetivo. No entanto, em estudos de junções de Josephson (KAUTZ, 1987; BLACKBURN; SMITH; GRØNBECH-JENSEN, 1996), partículas em armadilhas parametrizadas excitadas (LAPIDUS; ENZER; GABRIELSE, 1999; KIM et al., 2005), modelos neuronais excitáveis (LONGTIN; BULSARA; MOSS, 1991; KHOVANOV et al., 2013), assim como no escape entre órbitas periódicas, investigado na seção 4.2, o escape não pode ser descrito em termos de um potencial efetivo; portanto, a fórmula de Kramers não se aplica. Nesses casos, o problema de escape deixa de ser descrito por transições entre mínimos de um potencial e passa a ser descrito por trajetórias de escape de uma bacia de atração.

Embora nos casos mencionados acima a fórmula de Kramers deixe de ser válida, no limite de baixo ruído, ainda se observa uma dependência exponencial do tempo médio de escape do tipo

$$\tau_{\text{esc}} = A \exp\left(\frac{E_a}{D}\right), \quad (2.40)$$

onde a constante  $E_a$  é, por analogia, chamada de energia de ativação (KAUTZ, 1988; KAUTZ, 1987). A grandeza  $E_a$  é facilmente acessível em experimentos e simulações por meio de dados do tempo médio de escape, um dos procedimentos que usaremos para obtê-la na seção 4.2. O problema de escape entre bacias de atração, no limite de baixo ruído, pode ser formulado como um princípio de mínima ação, que consiste em encontrar o *caminho mais provável de escape* (CMPE) de uma bacia de atração para outra. Nessa formulação, a energia de ativação corresponde à integral de ação sobre o CMPE, como será detalhado nesta seção.

O método do *caminho mais provável de escape* (CMPE) tem como ideia central obter quais as trajetórias de escape de um atrator mais prováveis no limite onde  $D \rightarrow 0$ . Em geral, existem inúmeras trajetórias que levam a partícula de seu ponto inicial  $\mathbf{r}_0$ , dentro da bacia de atração, até um ponto de escape  $\mathbf{r}_{\text{esc}}$ , na separatriz entre as bacias. Cada uma dessas trajetórias de escape, como veremos, minimiza localmente um funcional  $\mathcal{S}$  que possui a mesma estrutura que a ação clássica. Dentre as inúmeras trajetórias de escape de uma bacia de atração, o CMPE é o que possui a menor integral de ação, minimizando  $\mathcal{S}$  globalmente.

Em uma dimensão, o CMPE é trivial, pois existe apenas um caminho de escape. Entretanto,

o caso em 1D é interessante para entender as ideias centrais do método. Nesse caso particular, como existe apenas uma trajetória de escape, pode-se calcular analiticamente a integral de ação sobre o CMPE, ou seja, calcular a energia de ativação nessa formulação, e verificar que o resultado é o mesmo que o obtido pela fórmula de Kramers, mostrando a consistência do método.

Na seção 2.3.1, apresentaremos uma forma de se chegar nas equações do CMPE em uma dimensão. Em seguida, na seção 2.3.2, generalizamos o resultado da seção 2.3.1 para  $n$  dimensões partindo de um sistema tridimensional.

### 2.3.1 O CMPE em 1D

Considere uma partícula cuja dinâmica é governada pela equação de Langevin

$$\dot{x} = F(x) + \xi(t), \quad (2.41)$$

onde  $\xi(t)$  é o ruído gaussiano idêntico ao estudado na seção 2.1). Como vimos, a trajetória discreta percorrida pela partícula partindo de  $(x_0, t_0)$  até  $(x_T, T)$  é a sequência  $\{x_i\}_{i=0}^{i=n}$  de pontos obtida iterativamente da equação (2.18), onde a trajetória contínua é obtida no limite onde  $n \rightarrow \infty$ , e conseqüentemente, o passo de integração  $\Delta t \rightarrow 0$ . Como já mencionado, a sequência  $\{x_i\}_{i=0}^{i=n}$  depende da sequência  $\{\Delta \mathcal{W}_i(\Delta t)\}_{i=0}^{i=n}$  de pontos sorteados a cada passo de tempo  $\Delta t$ . A ideia central para o obter os caminhos de escape consiste no fato de que *A probabilidade de uma trajetória específica ocorrer é proporcional à probabilidade de se sortear exatamente a sequência de números aleatórios que induz essa trajetória:*

$$P(\{x_i\}_{i=0}^{i=n}) \propto P(\{\Delta \mathcal{W}_i(\Delta t)\}_{i=0}^{i=n}). \quad (2.42)$$

Como já descrito na seção 2.1,  $\Delta \mathcal{W}(\Delta t)$  é variável aleatória de distribuição normal com variância  $\Delta t$  e, além disso, estatisticamente independente (itens 2 e 3). Portanto

$$P(\{\Delta \mathcal{W}_i(\Delta t)\}_{i=0}^{i=n}) \equiv P_{\Delta \mathcal{W}} = \prod_{i=0}^{i=n} N_i \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{(\Delta \mathcal{W})^2}{\Delta t} \right], \quad (2.43)$$

que pode ser reescrito como

$$P_{\Delta \mathcal{W}} = A \exp \left\{ \left[ \sum_{i=0}^{i=n} -\frac{1}{2} \left( \frac{\Delta \mathcal{W}}{\Delta t} \right)^2 \Delta t \right] \right\} = A e^{\phi}, \quad (2.44)$$

onde  $A$  é uma constante de normalização. No limite onde  $n \rightarrow \infty$  e, conseqüentemente,  $\Delta t \rightarrow 0$ , o argumento  $\phi$  da exponencial na equação (2.43) converge para

$$\phi = \sum_{i=0}^{i=n} -\frac{1}{2} \left( \frac{\Delta \mathcal{W}}{\Delta t} \right)^2 \Delta t \rightarrow \int_0^T -\frac{1}{2} \left( \frac{d\mathcal{W}}{dt} \right)^2 dt, \quad (2.45)$$

$$\phi = \int_0^T -\frac{\xi^2(t)}{4D} dt, \quad (2.46)$$

onde no último passo usamos que  $\frac{d\mathcal{W}}{dt} = \frac{\xi(t)}{\sqrt{2D}}$  [equação (2.16)]. Portanto, podemos escrever

$$P(\{x_i\}_{i=0}^{i=n}) \propto A e^{-\frac{\mathcal{S}[\Gamma]}{D}}, \quad (2.47)$$

de onde definimos o funcional  $\mathcal{S}[\Gamma]$ , que depende da trajetória  $\Gamma$  realizada pela partícula

$$\mathcal{S}[\Gamma] = \int_0^T -\frac{\xi^2(t)}{4D} dt. \quad (2.48)$$

Se um escape que inicia em  $x(t=0)$  e termina em  $x(t=T)$  por um caminho  $\Gamma$  tem probabilidade estimada pela equação (2.47), então, a probabilidade de um escape ocorrer é dada por:

$$P_{esc} \propto \sum_{\Gamma} A e^{-\frac{\mathcal{S}[\Gamma]}{D}}. \quad (2.49)$$

Por outro lado, no limite em que  $D \rightarrow 0$ , a somatória da equação (2.49) é dominada pelas trajetórias  $\Gamma$  que minimizam o funcional  $\mathcal{S}$ , portanto, nesse limite, os caminhos mais prováveis de escape minimizam o funcional  $\mathcal{S}$  enquanto obedecem a equação 2.41. Ou seja, são obtidos pela minimização do funcional sujeito à restrição imposta pela equação 2.41

$$\mathcal{S} = \int_0^T \left[ \frac{\xi^2(t)}{4} + \lambda(t) (\dot{x} - F(x) - \xi(t)) \right] dt, \quad (2.50)$$

onde  $\lambda(t) \neq 0$  é um multiplicador de Lagrange. Da equação 2.50 podemos escrever  $\mathcal{S} = \int \mathcal{L} dt$  com

$$\mathcal{L}(x, \dot{x}, \xi, \lambda) = \frac{\xi^2(t)}{4} + \lambda(t) (\dot{x} - F(x) - \xi(t)). \quad (2.51)$$

A escolha das letras  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{L}$  é intencional. De fato, a estrutura que encontraremos aqui é similar à estrutura da mecânica clássica que descreve a ação e a lagrangiana. Impondo  $\delta \mathcal{S} = 0$  obtemos

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \xi} = 0, \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = 0, \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) = 0. \quad (2.54)$$

Substituindo  $\mathcal{L}$  nas equações (2.52), (2.53) e (2.54) obtemos

$$\xi(t) = 2\lambda(t), \quad (2.55)$$

$$\dot{x} = F(x) + \xi, \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \lambda(t), \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = -\lambda(t) \frac{dF}{dx}, \quad (2.58)$$

$$\dot{\lambda} = -\lambda(t) \frac{dF}{dx}. \quad (2.59)$$

Da equação (2.57) podemos fazer a identificação de  $\lambda(t)$  como um momento generalizado conjugado de  $x$

$$\lambda(t) \equiv p_x. \quad (2.60)$$

Finalmente, os caminhos mais prováveis de escape obedecem as seguintes equações de movimento

$$\dot{x} = F(x) + 2p_x, \quad (2.61)$$

$$\dot{p}_x = -p_x \frac{dF}{dx}, \quad (2.62)$$

com ação e a lagrangiana reescritas como

$$\mathcal{L}(p_x) = p_x^2, \quad (2.63)$$

$$\mathcal{S} = \int_0^T p_x^2 dt. \quad (2.64)$$

Assim como na mecânica clássica, podemos definir uma Hamiltoniana para o sistema

$$H(x, p_x) = \dot{x}p_x - \mathcal{L}(x, p_x) = p_x F(x) + p_x^2, \quad (2.65)$$

onde é fácil ver que as equações de movimento (2.61) e (2.62) obedecem as equações de Hamilton e, além disso,  $H(x, p_x)$  é uma constante do movimento.

Seguindo uma abordagem diferente, podemos obter as mesmas equações de movimento e mostrar que os caminhos que minimizam  $\mathcal{S}$  possuem  $H = 0$ . A distribuição de probabilidade da partícula  $p(x, t)$  tem sua evolução temporal regida pela equação de Fokker-Planck associada à equação de Langevin (2.41):

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [F(x)p(x, t)] + D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.66)$$

Realizando a substituição  $p(x, t) = Ae^{-S(x, t)/D}$  na equação de Fokker-Planck obtemos

$$\frac{\partial S}{\partial t} + F(x) \frac{\partial S}{\partial x} + \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = D \left[ \frac{dF}{dx} + \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right]. \quad (2.67)$$

No limite quando  $D \rightarrow 0$ , a equação (2.67) converge para a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(x, p_x = \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0, \quad (2.68)$$

onde encontramos a mesma Hamiltoniana<sup>3</sup> da equação (2.65):

$$H(x, p_x) = F(x)p_x + p_x^2. \quad (2.69)$$

No limite onde  $D \rightarrow 0$  os eventos de escape são raros, ocorrendo após longos tempos portanto, podemos assumir que estamos no estado estacionário com  $p(x, t) = p(x)$ , logo,  $S(x, t) = S(x)$ , que leva a

$$H\left(x, p_x = \frac{\partial S}{\partial x}\right) = F(x)p_x + p_x^2 = 0. \quad (2.70)$$

Por fim, da teoria de Hamilton-Jacobi [capítulo 10 (GOLDSTEIN, 2011)],  $S = S(x, \alpha_x)$ , onde  $\alpha_x$  é constante do movimento, aplicando a derivada temporal em  $S$  obtemos

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial x} \dot{x} = p_x \dot{x} = \mathcal{L}, \quad (2.71)$$

ou seja,  $S$  é a ação  $\mathcal{S}$  minimizada anteriormente

$$\mathcal{S} = \int \mathcal{L} dt. \quad (2.72)$$

Por fim, note que, se  $F(x) = -\frac{dV}{dx}$ , onde  $V(x)$  é o potencial biestável definido na equação 2.36, o escape ocorre quando, partindo de  $x = -x_m$ , a partícula cruza o pico  $x_b$ , como descrito na seção 2.2. Em uma dimensão o CMPE é trivial, pois, existe apenas um caminho que vai de  $x = -x_m$  a  $x_b$  respeitando a restrição do potencial  $V(x)$ . Como ele é o único, é automaticamente o de menor  $\mathcal{S}$ , portanto é o CMPE. Com o auxílio da equação 2.70 temos que:

$$p_x = -F(x) = \frac{dV}{dx} = \dot{x}, \quad (2.73)$$

portanto, se a partícula inicia em  $x(t=0) = -x_m$  e escapa em  $x(t=T) = x_b$  pelo CMPE, a integral de ação se torna

$$\mathcal{S} = \int_0^T \dot{x} \dot{x} dt = \int_{-x_m}^{x_b} \dot{x} dx, \quad (2.74)$$

$$\mathcal{S} = \int_{-x_m}^{x_b} \frac{dV}{dx} dx = V(x_b) - V(-x_m) = \Delta V, \quad (2.75)$$

Portanto, o funcional  $\mathcal{S}$  ao longo do CMPE coincide com a barreira de energia do escape.

<sup>3</sup> Na literatura, a Hamiltoniana associado a esses sistemas é conhecida como a Hamiltoniana de Wentzell-Freidlin (FREIDLIN; SZUCS; WENTZELL, 2012)

### 2.3.2 O CMPE em 3D

Como mencionado ao longo do capítulo, os escapes entre órbitas periódicas, que serão discutidos na seção 4.2, não podem, em geral, ser descritos como o escape de uma única variável de reação confinada a um potencial efetivo, o que torna necessário abordar o problema de escape em termos de trajetórias de escape de uma bacia de atração. Nesta seção, considerando o caso tridimensional, obteremos as equações de movimento para os caminhos mais prováveis de escape em um sistema descrito por mais de uma equação de Langevin.

A obtenção do CMPE para mais dimensões parte de equações de Langevin do tipo:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\xi}(t), \quad (2.76)$$

onde  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  e  $\boldsymbol{\xi}(t)$  é um ruído gaussiano que satisfaz

$$\langle \xi_\mu(t) \rangle = 0, \quad (2.77)$$

$$\langle \xi_\mu(t) \xi_\nu(t') \rangle = 2D_\mu \delta_{\mu\nu} \delta(t - t'), \quad (2.78)$$

com  $\mu, \nu = x, y, z$ . Vale salientar que, para esse método, o campo vetorial  $\mathbf{F}$  não precisa ser derivado de um potencial, de modo que espera-se que o método desenvolvido nesta subseção se aplique ao nosso sistema de interesse. A probabilidade de se obter um caminho de escape específico que comece em  $\mathbf{r}_0$  e termine em  $\mathbf{r}_{esc}$  é proporcional à probabilidade de se obter a sequência exata das três variações do processo de Wiener

$$P[\Gamma = (\{x_i\}_{i=0}^{i=n}, \{y_i\}_{i=0}^{i=n}, \{z_i\}_{i=0}^{i=n})] \propto P_{\Delta\mathcal{W}_x} P_{\Delta\mathcal{W}_y} P_{\Delta\mathcal{W}_z}. \quad (2.79)$$

Sendo  $\mu = x, y, z$  e  $A_\mu$  constante, temos que

$$P_{\Delta\mathcal{W}_\mu} = A_\mu \exp \left\{ \left[ \sum_{i=0}^{i=n} -\frac{1}{2} \left( \frac{\Delta\mathcal{W}_\mu}{\Delta t} \right)^2 \Delta t \right] \right\}. \quad (2.80)$$

Seguindo os mesmos passos que o problema em uma dimensão, no limite onde  $n \rightarrow \infty$  e, conseqüentemente,  $\Delta t \rightarrow 0$ , a sequência converge para a trajetória contínua da partícula e obtemos

$$P(\Gamma) \propto A \exp \left\{ \int_0^T -\frac{1}{4} \left[ \frac{\xi_x^2(t)}{D_x} + \frac{\xi_y^2(t)}{D_y} + \frac{\xi_z^2(t)}{D_z} \right] dt \right\}, \quad (2.81)$$

onde para  $D_\mu = u_\mu D$ , podemos reescrever a equação 2.81 como

$$P(\Gamma) \propto A e^{(-\frac{S}{D})}, \quad (2.82)$$

onde a ação  $\mathcal{S}$  é dada por:

$$\mathcal{S} = \int_0^T \frac{1}{4} \left[ \frac{\xi_x^2(t)}{u_x} + \frac{\xi_y^2(t)}{u_y} + \frac{\xi_z^2(t)}{u_z} \right] dt \equiv \int_0^T \frac{1}{4} \sum_{\mu} \left[ \frac{\xi_{\mu}^2(t)}{u_{\mu}} \right] dt. \quad (2.83)$$

Para obtermos as equações de movimento, o funcional  $\mathcal{S}$  deve ser minimizado enquanto obedece as equações (2.76):

$$\mathcal{S} = \int_0^T \sum_{\mu} \left[ \left( \frac{1}{4} \frac{\xi_{\mu}^2(t)}{u_{\mu}} \right) + \lambda_{\mu}(t) (\dot{\mu} - F_{\mu} - \xi_{\mu}(t)) \right] dt \equiv \int_0^T \mathcal{L}(\{\mu, \dot{\mu}, \lambda_{\mu}, \xi_{\mu}\}) dt, \quad (2.84)$$

onde novamente iremos utilizar  $\mu, \nu = x, y, z$ . Analogamente,  $\delta\mathcal{S} = 0$  implica que

$$\xi_{\mu} = 2u_{\mu}\lambda_{\mu}, \quad (2.85)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mu}} = \lambda_{\mu} \equiv p_{\mu}, \quad (2.86)$$

e as equações de movimento para as trajetórias que minimizam o funcional  $\mathcal{S}$  são

$$\dot{\mu} = F_{\mu} + 2u_{\mu}p_{\mu}, \quad (2.87)$$

$$\dot{p}_{\mu} = - \sum_{\nu} p_{\nu} \frac{\partial F_{\nu}}{\partial \mu}. \quad (2.88)$$

Por fim, a lagrangiana, a ação e a Hamiltoniana são, respectivamente,

$$\mathcal{L} = \sum_{\mu} u_{\mu} p_{\mu}^2, \quad (2.89)$$

$$\mathcal{S} = \int_0^T \sum_{\mu} u_{\mu} p_{\mu}^2 dt, \quad (2.90)$$

$$H(\{\mu, p_{\mu}\}) = \sum_{\mu} [F_{\mu} p_{\mu} + u_{\mu} p_{\mu}^2], \quad (2.91)$$

onde  $D_{\mu} = u_{\mu} D$ .

Em suma, dada uma partícula cuja dinâmica é governada por  $n$  equações de Langevin (equação 2.76), no limite onde  $D \rightarrow 0$ , as trajetórias mais prováveis de escape são soluções do sistema determinístico de  $2n$  dimensões associado (equações (2.87) e (2.88)). Para obter o CMPE, dado um vetor posição  $\mathbf{r}_0$  contido na bacia de atração, integramos o sistema determinístico associado para diversas condições iniciais diferentes do tipo  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_{i0})$ , onde os  $\mathbf{p}_{i0}$  são as  $n$  condições iniciais para os momentos conjugados. Em nossas simulações, restringimos o sorteio a  $|\mathbf{p}_{i0}| \ll 1$ , como em (GRASSBERGER, 1989). O sorteio dos momentos realizado desse modo permite uma amostragem de diferentes direções de partidas no espaço de fase  $2n$ -dimensional. Para todos os caminhos que escaparam da bacia de atração, calcula-se  $\mathcal{S}$ , e, por fim, dentre esses caminhos, o CMPE que inicia em  $\mathbf{r}_0$  é o que possui o menor  $\mathcal{S}$ .

### 3 DINÂMICA DETERMINÍSTICA

Neste capítulo, analisaremos o limite determinístico das equações de movimento da partícula ativa. Os principais resultados obtidos neste capítulo foram publicados em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022).

Quando a intensidade do ruído sobre a partícula é baixa, a dinâmica da partícula está fortemente correlacionada à sua dinâmica determinística, ou seja, ao seu comportamento na ausência de ruído <sup>1</sup>. Portanto, um passo crucial para compreender melhor a dinâmica estocástica da partícula é, primeiramente, entender sua dinâmica determinística.

As equações que regem a dinâmica determinística da partícula autopropelida são obtidas removendo o ruído gaussiano das equações de Langevin definidas na seção 1.2. Para a análise do sistema dinâmico, adotaremos o sistema de unidades descritos na seção 1.2.1, onde a força é medida em unidades de  $\frac{v_0}{\mu}$ , o comprimento em unidades de  $L_0$ , o tempo em unidades de  $t_0 = \frac{L_0}{v_0}$  e a mobilidade angular em unidades de  $\frac{\mu}{L_0^2}$ . Nessas unidades, a dinâmica determinística é regida pelas seguintes equações:

$$\dot{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{n}} + \mathbf{F} \quad (3.1)$$

$$\dot{\theta} = \beta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot \hat{\mathbf{z}}. \quad (3.2)$$

O espaço de fase do sistema dinâmico acima é tridimensional, com duas dimensões associadas à posição  $\mathbf{r} = (x, y)$  da partícula e uma dimensão associada ao ângulo  $\theta$ , o ângulo entre o vetor de orientação  $\hat{\mathbf{n}}$  e o eixo  $x$ .

A dinâmica determinística de uma partícula autopropelida com torque de autoalinhamento confinada a um potencial é, por si só, rica. Em geral, para o que chamaremos de *potenciais confinantes*, encontramos pontos fixos e órbitas atratoras cuja estabilidade depende da mobilidade da partícula, como veremos na seção 3.1. Devido à simetria dos potenciais considerados, as órbitas atratoras surgem em pares, sendo possível a coexistência de pares de órbitas com topologias distintas, como ocorre para o potencial considerado na seção 3.2. Além disso, a presença de anarmonicidade no potencial confinante pode levar a dinâmicas caóticas, caso discutido na seção 3.3. Por fim, na seção 3.4, concluímos o capítulo com uma recapitulação dos principais resultados obtidos. Todos os resultados numéricos obtidos nesse capítulo foram

<sup>1</sup> Efeitos do ruído serão estudados no capítulo 4

obtidos via integração numérica das equações (3.1) e (3.2) usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem com passo de integração fixo em  $\Delta t = 10^{-3}$ .

### 3.1 CARACTERÍSTICAS GERAIS DA DINÂMICA DETERMINÍSTICA

#### 3.1.1 Potencial confinador e isóclina crítica

Um ponto fixo  $P_f = (x_f, y_f, \theta_f)$  no espaço de fase do sistema dinâmico definido pelas equações (3.1) e (3.2) é uma solução estática no qual tanto  $\dot{r}$  quanto  $\dot{\theta}$  são simultaneamente nulos para todo tempo  $t > 0$ . Substituindo essa condição, obtemos

$$\hat{n} = \nabla V, \quad (3.3)$$

que é uma condição de equilíbrio entre a força de propulsão e a força de confinamento da partícula no sistema unidades adotado.

$$\mathbf{F}_{propulsão} = -\mathbf{F}_{conservativa}. \quad (3.4)$$

Portanto, um ponto fixo da trajetória da partícula autopropelida é um ponto no espaço (plano  $xy$ ) onde há um equilíbrio entre a força de propulsão e a força de confinamento.

Chamaremos o potencial  $V(x, y)$  de *potencial confinador* se ele satisfizer as seguintes condições:

1. Seus pontos fixos  $P_f = (x_f, y_f, \theta_f)$ , soluções da equação (3.3), formam uma curva no espaço de fase cuja projeção no plano  $xy$  é fechada.
2.  $V(x, y)$  é localmente convexa na vizinhança de seus pontos fixos  $(x_f, y_f)$ .

Nos referiremos à curva de pontos fixos associada ao potencial confinador como *isóclina crítica*. A isóclina crítica é a curva cujo módulo da força confinadora é constante e unitária (no sistema de unidades adotado).

$$|\nabla V| = 1. \quad (3.5)$$

Na ausência de ruído, a partícula autopropelida é atraída para a isóclina crítica ou para um atrator no interior da isóclina.

### 3.1.2 Estabilidade da isóclina crítica e fase escaladora

Expressando as equações do sistema determinístico em coordenadas cartesianas obtemos

$$\dot{x} = \cos \theta - V_x, \quad (3.6)$$

$$\dot{y} = \sin \theta - V_y, \quad (3.7)$$

$$\dot{\theta} = \beta (V_x \sin \theta - V_y \cos \theta). \quad (3.8)$$

Onde estamos escrevendo a força total sobre a partícula em termos das derivadas do potencial  $\mathbf{F} = (-V_x, -V_y)$ , com  $V_\nu = \frac{\partial V}{\partial \nu}$ ,  $\nu = x, y$ . Nessas coordenadas as equações (3.3) e (3.5) que definem a condição para um ponto no espaço ser fixo se tornam:

$$V_x(x_f, y_f) = \cos \theta_f, \quad V_y(x_f, y_f) = \sin \theta_f, \quad (3.9)$$

$$V_x^2(x_f, y_f) + V_y^2(x_f, y_f) = 1. \quad (3.10)$$

Se o potencial  $V(x, y)$  é confinador, então as equações acima possuem solução e definem a isóclina crítica. Da equação (3.9) temos que a isóclina crítica pode ser parametrizada por  $\theta_f \in [0, 2\pi]$ , sendo no espaço de fase uma curva helicoidal  $C(\theta_f) = (x_f(\theta_f), y_f(\theta_f), \theta_f)$ . A projeção da isóclina no plano  $xy$ , por outro lado, é obtida diretamente pela equação (3.10).

Das equações acima observa-se que os pontos fixos dependem apenas da forma do potencial confinador. A estabilidade desses pontos, por outro lado, depende da mobilidade angular  $\beta$  da partícula, como veremos a seguir analisando a estabilidade dos pontos fixos via linearização do sistema dinâmico. A matriz jacobiana do sistema avaliada no ponto fixo  $P_f = (x_f, y_f, \theta_f)$  é expressa por:

$$\mathbf{J}_A(P_f) = \begin{bmatrix} -V_{xx} & -V_{xy} & -V_y \\ -V_{xy} & -V_{yy} & V_x \\ \beta [V_{xx}V_y - V_{xy}V_x] & \beta [V_{xy}V_y - V_{yy}V_x] & \beta \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Os autovalores  $\lambda$  da matriz jacobiana  $\mathbf{J}_A$  são as raízes do polinômio

$$P(\lambda) = \det(\mathbf{J}_A - \mathbf{1}\lambda) = 0, \quad (3.12)$$

que escrito em termos das derivadas do potencial obtemos:

$$P(\lambda) = \lambda(-\lambda^2 + p_1\lambda + p_0), \quad (3.13)$$

$$p_1 = \beta - V_{xx} - V_{yy}, \quad (3.14)$$

$$p_0 = \beta [V_{yy}V_y^2 + V_{xx}V_x^2 + 2V_xV_yV_{xy}] - V_{xx}V_{yy} + V_{xy}^2. \quad (3.15)$$

O primeiro resultado importante é que um dos autovalores  $\lambda$  é nulo e, além disso, a direção de seu autovetor é tangencial à isóclina crítica. Isso significa que o sistema é indiferente a deslocamentos infinitesimais ao longo da linha de pontos fixos. Sendo assim, a estabilidade do ponto fixo é, portanto, caracterizada pelos outros dois autovalores  $\lambda_+$  e  $\lambda_-$ . Logo, um ponto fixo  $P_f(x_f, y_f, \theta_f)$  será *estável* se a parte real de

$$\lambda_+ = \frac{p_1 + \sqrt{p_1^2 + 4p_0}}{2}, \quad (3.16)$$

$$\lambda_- = \frac{p_1 - \sqrt{p_1^2 + 4p_0}}{2}, \quad (3.17)$$

for simultaneamente negativa e *instável* se a parte real de  $\lambda_+$  ou  $\lambda_-$  for positiva. Consequentemente, o ponto fixo será *instável* se:

$$\beta > \min(\beta_1, \beta_2), \quad (3.18)$$

$$\beta_1 = V_{xx} + V_{yy}, \quad (3.19)$$

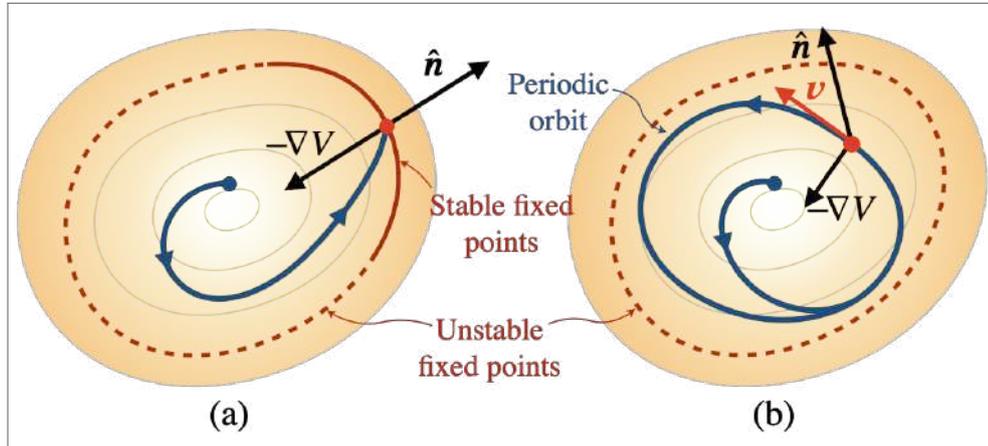
$$\beta_2 = \frac{V_{xx}V_{yy} - V_{xy}^2}{V_x^2V_{xx} + V_y^2V_{yy} + 2V_xV_yV_{xy}},$$

onde as derivadas devem ser avaliadas no ponto fixo em questão. Note que devido à convexidade requerida na vizinhança da isóclina crítica, tanto  $\beta_1$  quanto  $\beta_2$  são positivos. Dependendo do valor de  $\beta$ , existem casos em que a isóclina crítica possui segmentos onde todos os pontos fixos são estáveis e segmentos onde todos os pontos fixos são instáveis (veja ilustração na Figura 5-(a)). A condição para que todos os pontos fixos da isóclina crítica sejam *instáveis* é que:

$$\beta > \beta^* = \min[\max(\beta_1), \max(\beta_2)]. \quad (3.20)$$

A estabilidade da isóclina crítica é fundamental para a compreensão da fase escaladora. Com um nível moderado de ruído, a partícula é atraída para seus pontos fixos estáveis enquanto sofre perturbações das forças estocásticas. Quando a partícula sofre um deslocamento infinitesimal para fora da isóclina devido a uma perturbação, ela tende a ser atraída de volta

Figura 5 – Trajetórias típicas (linhas azuis) de uma partícula ativa (ponto vermelho) em um potencial confinante genérico  $V(x, y)$  (gráfico de contorno) em duas situações distintas: (a) Para  $\beta < \beta^*$ , a trajetória é atraída para um dos pontos fixos estáveis (*stable fixed points*) disponíveis na isóclina crítica (curva vermelha). (b) Para  $\beta > \beta^*$ , a isóclina é formada apenas por pontos fixos instáveis (*unstable fixed points*) e a partícula é capturada por um dos atratores orbitais disponíveis, na ilustração, uma órbita periódica (*periodic orbit*).



Fonte: DAMASCENA; CABRAL; SILVA (2022)

para os pontos fixos estáveis na isóclina. Por outro lado, deslocamentos ao longo da isóclina não encontram resistência, fazendo com que a partícula vague de um ponto fixo para outro. Portanto, a fase escaladora pode ser interpretada como um movimento browniano ao longo dos pontos fixos estáveis da isóclina crítica. Conseqüentemente, se a partícula permanece sob um ponto fixo estável ( $D = 0$ ) ou realiza movimento browniano sobre a isóclina crítica, então, dizemos que a partícula se encontra na fase *escaladora*.

### 3.1.3 Fase orbital e simetria de reflexão

Além dos pontos fixos estudados na seção anterior, o sistema dinâmico associado à partícula autopropelida também admite órbitas periódicas como solução. As chamadas órbitas periódicas são, na verdade, *ciclos limites* que podem ser estáveis ou instáveis. Quando estáveis, dada uma condição inicial, a trajetória do sistema dinâmico pode ser capturada pelo ciclo limite, permanecendo nele perpetuamente. Quando há coexistência entre pontos fixos e ciclos limites estáveis, a estrutura para a qual o sistema será capturado depende das condições iniciais. Entretanto, quando *todos* os pontos fixos da isóclina crítica são instáveis, o ciclo limite estável se torna a única opção. Diremos que a partícula está na fase *orbital* se ela é capturada por um ciclo limite estável. Na ausência de ruído ( $D = 0$ ) a partícula permanece no ciclo perpetuamente, enquanto que, para ruído moderado  $D > 0$ , a partícula sofre desvios da órbita

podendo ocorrer transições entre as órbitas estáveis coexistindo.

Exceto para o caso especial onde o potencial confinador tem simetria radial, caso estudado em detalhes na seção 3.1.4, não obtivemos expressões analíticas nem para as órbitas nem para sua estabilidade. Por outro lado, como veremos em detalhes nas próximas seções, as órbitas periódicas nos potenciais considerados aparecem sempre em pares. Mostraremos nesta seção que isso decorre de simetrias de reflexão, comuns a todos os potenciais estudados.

Por simplicidade vamos reescrever as equações (3.6), (3.7) e (3.8) em termos de vetores da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P} = \mathbf{U}(x, y, \theta), \quad (3.21)$$

onde

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ \theta(t) \end{pmatrix} \quad \mathbf{U}(x, y, \theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta - \frac{\partial V(x, y)}{\partial x}, \\ \sin \theta - \frac{\partial V(x, y)}{\partial y}, \\ \beta \left( \frac{\partial V(x, y)}{\partial x} \sin \theta - \frac{\partial V(x, y)}{\partial y} \cos \theta \right). \end{pmatrix}$$

Estamos interessados em transformações de simetria  $\hat{T}$  com  $(x', y', \theta') = \hat{T}[(x, y, \theta)]$  tais que o sistema dinâmico em (3.21) se mantém invariante, isto é:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P}' = \mathbf{U}(x', y', \theta') \implies \frac{d}{dt}\mathbf{P} = \mathbf{U}(x, y, \theta). \quad (3.22)$$

- Simetria de translação em  $\theta$  por  $2\pi$ .

Considere uma translação da variável ângulo  $\theta$  por  $2\pi$ . Seja  $\hat{T}_\theta$  tal que:

$$\hat{T}_\theta[(x, y, \theta)] = (x, y, \theta + 2\pi). \quad (3.23)$$

Como a variável ângulo aparece no sistema sempre nas formas  $\sin \theta$  e  $\cos \theta$ , pela periodicidade das funções seno e cosseno temos  $\mathbf{U}(x, y, \theta + 2\pi) = \mathbf{U}(x, y, \theta)$  e portanto o sistema é invariante a essa transformação. Embora simples, por conta dessa simetria, aplicamos condições periódicas em  $\theta$ , limitando-a ao intervalo  $\theta \in [-\pi, \pi]$  para o cálculo de bacias de atração e seleção de condições iniciais sem perda de generalidade.

- Simetria de reflexão em relação ao eixo  $x$ .

Se o potencial confinador tiver simetria de reflexão em relação ao eixo  $x$

$$V(x, -y) = V(x, y), \quad (3.24)$$

então, o sistema é invariante à transformação:

$$(x', y', \theta') = \hat{T}_x[(x, y, \theta)] = (x, -y, -\theta), \quad (3.25)$$

uma reflexão em relação ao eixo  $x$  do vetor posição e do eixo de orientação  $\hat{n}(\theta)$  da partícula.

Partindo do sistema dinâmico para as variáveis transformadas

$$\dot{x}' = \cos \theta' - \frac{\partial V(x', y')}{\partial x'}, \quad (3.26)$$

$$\dot{y}' = \sin \theta' - \frac{\partial V(x', y')}{\partial y'}, \quad (3.27)$$

$$\dot{\theta}' = \beta \left( \frac{\partial V(x', y')}{\partial x'} \sin \theta' - \frac{\partial V(x', y')}{\partial y'} \cos \theta' \right), \quad (3.28)$$

e notando que as derivadas parciais se transformam da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x'} &= \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y'} &= -\frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned}$$

Podemos escrever as derivadas do potencial confinador com a simetria de reflexão definida na equação (3.24) como:

$$\frac{\partial V(x', y')}{\partial x'} = \frac{\partial}{\partial x} V(x, -y) = \frac{\partial}{\partial x} V(x, y), \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial V(x', y')}{\partial y'} = -\frac{\partial}{\partial y} V(x, -y) = -\frac{\partial}{\partial y} V(x, y). \quad (3.30)$$

Aplicando a transformação nas equações (3.26), (3.27) e (3.28) obtemos:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \cos(-\theta) - \frac{\partial V(x, y)}{\partial x}, \\ -\dot{y} &= \sin(-\theta) + \frac{\partial V(x, y)}{\partial y} \\ -\dot{\theta} &= \beta \left( \frac{\partial V(x, y)}{\partial x} \sin(-\theta) + \frac{\partial V(x, y)}{\partial y} \cos(-\theta) \right). \end{aligned}$$

Aplicando a paridade das funções seno e cosseno, obtemos

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \cos \theta - \frac{\partial V(x, y)}{\partial x}, \\ \dot{y} &= \sin \theta - \frac{\partial V(x, y)}{\partial y} \\ \dot{\theta} &= \beta \left( \frac{\partial V(x, y)}{\partial x} \sin \theta - \frac{\partial V(x, y)}{\partial y} \cos \theta \right), \end{aligned}$$

mostrando a invariância do sistema à transformação  $\hat{T}_x$ .

- Simetria de reflexão em relação ao eixo  $y$ .

De modo análogo ao caso anterior pode-se mostrar que se o potencial confinador satisfaz:

$$V(-x, y) = V(x, y), \quad (3.31)$$

então o sistema dinâmico é invariante à transformação

$$\hat{T}_y[(x, y, \theta)] = (-x, y, -\theta + \pi), \quad (3.32)$$

uma reflexão em relação ao eixo  $y$  do vetor posição e do eixo de orientação.

- Simetria de reflexão em torno da origem ou translação em  $\theta$  por  $\pi$ .

Se o potencial confinador satisfaz:

$$V(-x, -y) = V(x, y), \quad (3.33)$$

então o sistema dinâmico é invariante às inversões sucessivas

$$\hat{T}_x[\hat{T}_y[(x, y, \theta)]] = \hat{T}_x[(-x, y, -\theta + \pi)] = (-x, -y, \theta - \pi), \quad (3.34)$$

$$\hat{T}_y[\hat{T}_x[(x, y, \theta)]] = \hat{T}_y[(x, -y, -\theta)] = (-x, -y, \theta + \pi), \quad (3.35)$$

$$\hat{T}_\pi[(x, y, \theta)] = (-x, -y, \theta \pm \pi). \quad (3.36)$$

Os potenciais confinadores considerados obedecem simultaneamente às três simetrias de reflexão. Portanto, se  $P_0 = (x_0, y_0, \theta_0)$  pertence à solução do sistema dinâmico, então, os pontos  $P_1 = (x_0, -y_0, -\theta_0)$ ,  $P_2 = (-x_0, y_0, -\theta_0 + \pi)$  e  $P_3 = (-x_0, -y_0, \theta_0 \pm \pi)$  também pertencem a solução do sistema dinâmico. Vale ressaltar que, devido à simetria de translação por  $2\pi$  em  $\theta$ ,  $P_3$  representa um único ponto no espaço de fase. Além disso, note que nesse ponto, o eixo de orientação da partícula está refletido em torno da origem

$$\hat{n}(\theta \pm \pi) = (\cos(\theta \pm \pi), \sin(\theta \pm \pi)) = -(\cos(\theta), \sin(\theta)) = -\hat{n}. \quad (3.37)$$

Em trajetórias fechadas, o sistema dinâmico satisfaz as simetrias de reflexão gerando simultaneamente *duas* órbitas atratoras. Essas órbitas são espelhadas entre si para satisfazer as simetrias de inversão no plano  $xy$  e são percorridas pela partícula autopropelida em sentidos opostos, de modo a respeitar as simetrias de inversão do eixo de orientação da partícula.

### 3.1.4 Dinâmica em potenciais com simetria radial

Se o potencial confinador é da forma

$$V(x, y) = V(r), \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad (3.38)$$

então é conveniente reescrever o sistema dinâmico em coordenadas polares. Substituindo

$$x(t) = r(t) \cos \phi(t) \quad \text{e} \quad y(t) = r(t) \sin \phi(t) \quad (3.39)$$

nas equações (3.1) e (3.2) a dinâmica da partícula autopropelida para as variáveis  $(r, \phi, \theta)$  é regida por:

$$\dot{r} = \cos \chi - V'(r), \quad (3.40)$$

$$\dot{\phi} = r^{-1} \sin \chi \quad (3.41)$$

$$\dot{\theta} = \beta V'(r) \sin \chi, \quad (3.42)$$

Onde  $\chi$  é o ângulo entre o vetor posição e o eixo de orientação,  $\chi = \angle(\hat{\mathbf{n}}, \mathbf{r}) = \theta - \phi$ , e  $V'(r) = \frac{\partial V}{\partial r}$ . Pode-se ainda descrever a dinâmica em termos das variáveis  $(\chi, r)$

$$\dot{r} = \cos \chi - V'(r), \quad (3.43)$$

$$\dot{\chi} = \left( \beta V'(r) - \frac{1}{r} \right) \sin \chi, \quad (3.44)$$

A análise dos pontos fixos do sistema acima resulta em dois tipos de pontos fixos no plano  $\chi r$ :

1. Pontos fixos da isóclina crítica:  $\dot{\phi} = 0$ .
2. Órbita circular no plano  $xy$ :  $\dot{\phi} = \omega$ .

Substituindo a condição de ponto fixo  $(\dot{\chi}, \dot{r}) = (0, 0)$  nas equações (3.43) e (3.44) obtemos:

$$\cos(\chi_f) - V'(r_f) = 0, \quad (3.45)$$

$$\left( \beta V'(r_f) - \frac{1}{r_f} \right) \sin \chi_f = 0. \quad (3.46)$$

- Pontos fixos da isóclina crítica

O primeiro tipo de ponto fixo é obtido substituindo  $\sin(\chi) = 0$  na equação (3.46), consequentemente, da equação (3.45) obtemos:

$$V'(r_f) = 1. \quad (3.47)$$

Substituindo  $\sin \chi_f = 0$  nas equações (3.41) e (3.42) obtêm-se  $\phi_f = \theta_f \in [0, 2\pi]$ . Portanto os pontos  $(r_f, \phi_f, \theta_f)$  definem uma isóclina crítica *circular* no plano  $xy$  cujo raio é definido pela equação (3.47). A representação da isóclina no plano  $\chi r$  é o ponto  $(0, r_f)$ .

Realizando um procedimento análogo ao realizado na seção 3.1.2 temos que os autovalores associados ao ponto fixo da isóclina crítica no plano  $\chi r$ ,  $P_f = (0, r_f)$  são dados por:

$$\lambda_f^{(1)} = -V''(r_f) \quad (3.48)$$

$$\lambda_f^{(2)} = \beta - \frac{1}{r_f}. \quad (3.49)$$

Como por construção o potencial é convexo na vizinhança dos pontos fixo, nesse caso na vizinhança de  $r = r_f$ , o autovalor  $\lambda_f^{(1)}$  é sempre negativo. O segundo autovalor estabelece a condição para que o ponto fixo seja estável:

$$\beta r_f < 1. \quad (3.50)$$

Note que, para esse caso particular, o ponto fixo  $P_f = (0, r_f)$  representa *todos* os pontos fixos na isóclina crítica circular de raio  $r_f$  no plano  $xy$ , portanto, todos os pontos fixos são estáveis se  $\beta r_f < 1$  e instáveis, caso contrário.

- Órbita circular no plano  $xy$ .

Retornando à equação (3.46) e considerando  $\sin \chi_f \neq 0$ , então:

$$\cos(\chi_o) = V'(R_o), \quad (3.51)$$

$$V'(R_o) = \frac{1}{\beta R_o}, \quad (3.52)$$

onde substituímos o subscrito “ $f$ ”, por “ $o$ ” pois, como veremos, esse ponto fixo é uma órbita circular no plano  $xy$ . Substituindo as equações (3.51) e (3.52) nas equações (3.41) e (3.42), verificamos a igualdade  $\dot{\theta} = \dot{\phi} = \omega$ , onde

$$\omega = \frac{1}{R_o} \sqrt{1 - \frac{1}{\beta^2 R_o^2}}. \quad (3.53)$$

Note que, as equações (3.45) e (3.46) são indiferentes à escolha  $+\chi_o$  ou  $-\chi_o$ , de modo que, no plano  $xy$  temos *duas* órbitas circulares cujo raio  $R_o$  é solução da equação (3.52) e circulações opostas com frequência  $\omega$  dada pela equação (3.53). No plano  $\chi r$  as órbitas circulares são dois pontos fixos simétricos em relação a  $\chi = 0$ ,  $P_f = (\pm\chi_o, R_o)$  com

$$\chi_o = \arccos(V'(R_o)). \quad (3.54)$$

Os autovalores dos pontos fixos orbitais são dados por:

$$\lambda_{\circ}^{\pm} = \frac{-V'' \pm \sqrt{V''^2 - 4\beta\omega^2 R_{\circ}^2 (V'' + V'/R_{\circ})}}{2}. \quad (3.55)$$

Como  $V'(R_{\circ}) > 0$  (equação (3.52)) ambos autovalores são negativos desde que  $\omega^2 > 0$ , isto é, desde que a frequência angular seja um número real. Impondo a condição na equação 3.53 devemos ter

$$\beta R_{\circ} > 1. \quad (3.56)$$

Uma observação importante é que o raio da isóclina crítica independe do valor  $\beta$  enquanto a dependência de  $R_{\circ}$  é definida pela equação (3.52).

No que se segue, vamos mostrar que as órbitas circulares e a isóclina crítica não são simultaneamente estáveis. Por construção, a dinâmica está confinada à área delimitada pela isóclina crítica, portanto,  $r_f \geq R_{\circ}(\beta)$ , isto é, dado  $\varepsilon \geq 0$  temos que

$$r_f = R_{\circ} + \varepsilon. \quad (3.57)$$

Se a isóclina crítica é estável, então a equação (3.50) é satisfeita, portanto,

$$\beta r_f < 1, \quad (3.58)$$

substituindo a equação (3.57) na condição acima obtemos,

$$\beta R_{\circ} < 1 - \beta\varepsilon \implies \beta R_{\circ} < 1, \quad (3.59)$$

como tanto  $\beta$  quanto  $\varepsilon$  são positivos, então, se a isóclina é estável as órbitas circulares são instáveis. De forma análoga, se as órbitas são estáveis, então,

$$\beta R_{\circ} > 1, \quad (3.60)$$

substituindo a equação (3.57) na expressão acima obtemos

$$\beta r_f > 1 + \beta\varepsilon \implies \beta r_f > 1, \quad (3.61)$$

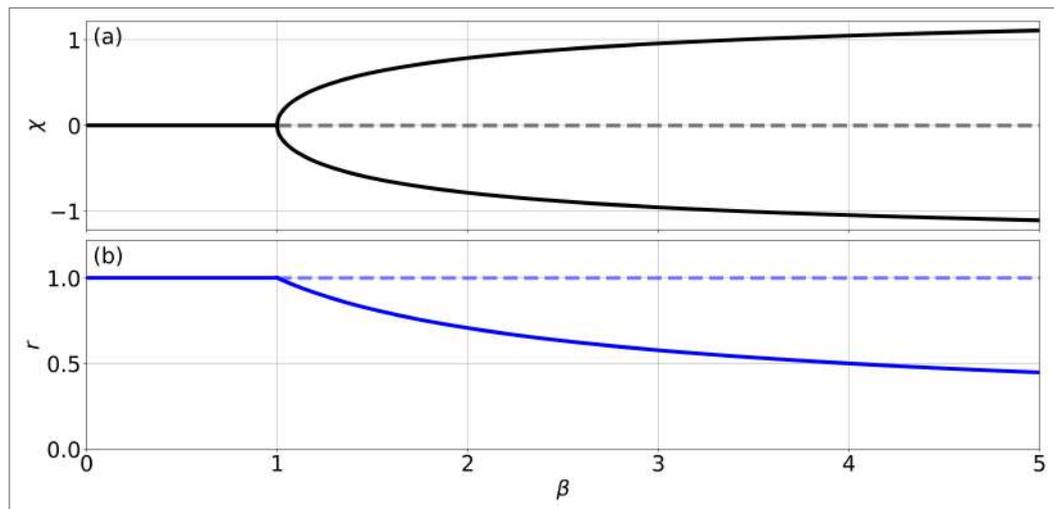
isto é, se as órbitas circulares são estáveis, os pontos fixos da isóclina crítica são instáveis. Por fim, note que da equação (3.49)  $\beta_c = \frac{1}{r_f}$  induz um equilíbrio marginalmente estável para a isóclina onde obtemos  $Re(\lambda_f^{(1)}) < 0$  e  $Re(\lambda_f^{(2)}) = 0$ . Por outro lado,  $\beta_c = \frac{1}{r_f}$  também é valor de  $\beta$  no qual  $R_{\circ} = r_f$  como podemos verificar usando as equações (3.47) e (3.52),

$$V'(r_f) = \frac{1}{\beta_c r_f} \implies \beta_c = \frac{1}{r_f}. \quad (3.62)$$

Além disso, em  $\beta_c$  a velocidade angular  $\omega$  da fase orbital é nula, de modo que,  $\beta_c = \frac{1}{r_f}$  pode ser visto como um ponto de bifurcação, entre os pontos fixos e as órbitas circulares. Na figura 6, ilustramos o comportamento dos pontos fixos em função de  $\beta$  usando o potencial harmônico como exemplo.

Em suma, potenciais com simetria radial admitem uma isóclina crítica circular de raio  $r_f$  definido pela equação (3.47) e *ao menos* um par de órbitas circulares cujo raio é definido pela equação (3.52). Os resultados presentes nessa subseção generalizam os resultados em (DAUCHOT; DÉMERY, 2019), obtidos para os casos particulares em que  $V(r)$  representa um poço harmônico ou caixa circular de parede dura.

Figura 6 – Estabilidade dos pontos fixos,  $(\chi, r)$ , no potencial harmônico em função de  $\beta$ . Nos diagramas, os segmentos de pontos fixos estáveis são marcados por linhas contínuas, enquanto os segmentos instáveis são marcados por linhas tracejadas. Em particular, a bifurcação sofrida por  $\chi$  é do tipo forquilha supercrítica (STROGATZ, 2000).



Fonte: O autor

### 3.2 DINÂMICA EM UM POTENCIAL ELÍPTICO

Em contraste aos potenciais com simetria radial, onde observamos apenas as órbitas circulares previstas pela análise realizada na seção 3.1.4, os potenciais anisotrópicos proporcionam uma variedade de órbitas fechadas complexas e propriedades topológicas específicas. Nesta seção iremos descrever a dinâmica determinística de uma partícula autopropelida no potencial confinador que chamaremos de potencial elíptico

$$V(x, y) = \frac{1}{2}[(1 + \varepsilon)x^2 + y^2], \quad (3.63)$$

já escrito nas unidades de medidas definidas na seção 1.2.1. O comprimento característico para esse potencial é

$$L_0 = \frac{v_0}{\mu k}, \quad (3.64)$$

onde  $k$  é a rigidez do potencial. O parâmetro  $\varepsilon$  define uma família de potenciais. Para  $\varepsilon = 0$ , retornamos ao potencial harmônico, que possui simetria radial. Para  $\varepsilon > 0$  a simetria radial é quebrada dando origem a isóclinas críticas e órbitas não circulares.

### 3.2.1 Isóclina crítica do potencial elíptico

Substituindo o potencial elíptico na equação (3.10), o conjunto de pontos fixos que definem a isóclina crítica satisfazem a equação:

$$(1 + \varepsilon)^2 x_f^2 + y_f^2 = 1, \quad (3.65)$$

onde cada valor de  $\varepsilon$  define uma elipse com excentricidade  $e = \sqrt{1 - (\varepsilon + 1)^{-2}}$ . Como o potencial não tem simetria radial, a análise de estabilidade deve ser feita ponto a ponto. Avaliando a equação (3.19) para um ponto fixo  $P_f = (x_f, y_f)$  obtemos

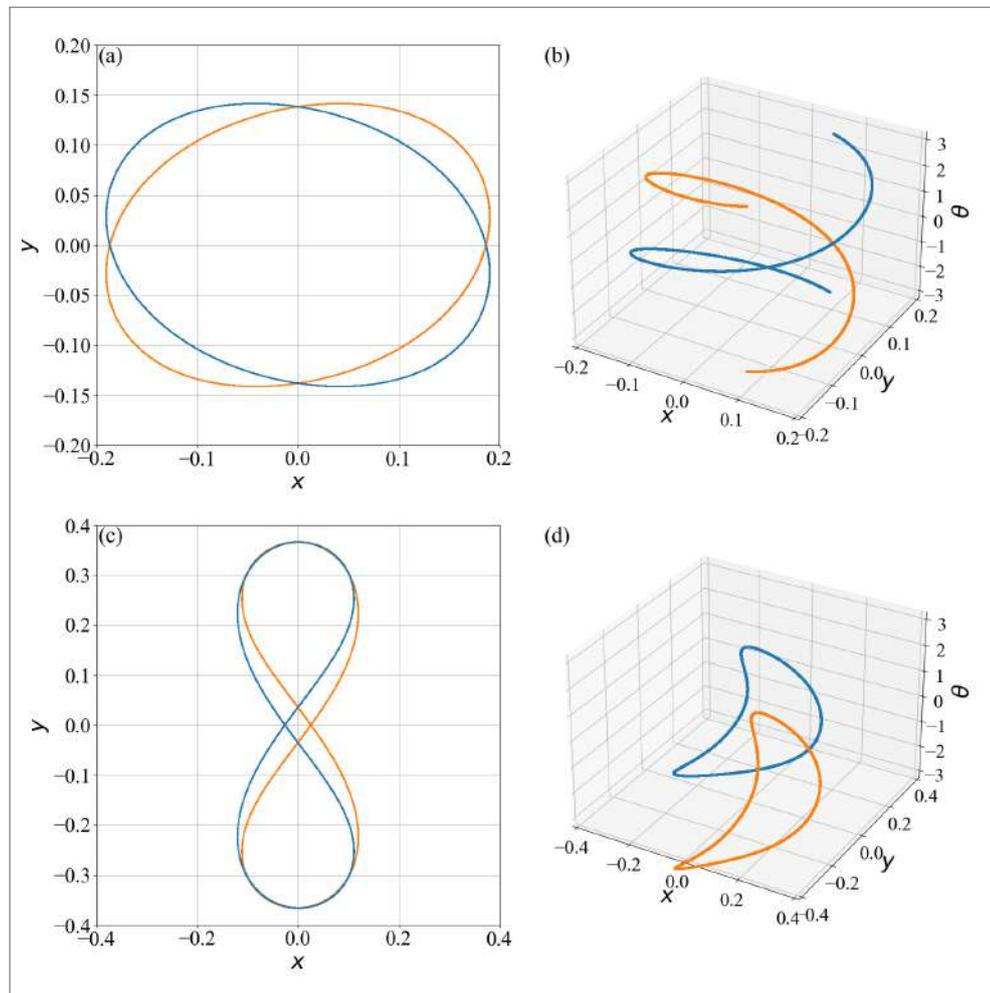
$$\beta_1 = 2 + \varepsilon, \quad \beta_2 = \frac{1 + \varepsilon}{(1 + \varepsilon)^3 x_f^2 + y_f^2}, \quad (3.66)$$

onde  $\beta_2 < \beta_1$  para qualquer ponto fixo. Os co-vértices da elipse,  $(x_f, y_f) = (\pm 1/(1 + \varepsilon), 0)$ , são os primeiros pontos fixos a se tornarem instáveis quando  $\beta = 1$ . Com o aumento de  $\beta$  mais pontos se tornam instáveis, até que os últimos pontos fixos, os vértices  $(x_f, y_f) = (0, \pm 1)$ , se tornem instáveis em  $\beta = \beta^* = 1 + \varepsilon$ . Para  $\beta > \beta^*$ , todos os pontos fixos são instáveis. Portanto, para  $\beta < 1$  todos os pontos fixos são estáveis e a fase escaladora é possível, enquanto que, para  $\beta > 1 + \varepsilon$  a fase escaladora é inacessível, conseqüentemente, a partícula só pode estar na fase orbital.

### 3.2.2 Órbitas estáveis do potencial elíptico

Embora a força confinadora ainda seja linear, o aumento da anisotropia do potencial, aumento do parâmetro  $\varepsilon$ , dá origem a órbitas que apresentam pontos de cruzamento no plano  $xy$  e propriedades topológicas específicas. Em virtude da simetria do potencial, conforme visto na seção 3.1.3, observamos pares de órbitas espelhadas com sentidos de circulação opostos.

Figura 7 – Exemplo representativo da forma das órbitas de rotação (a)-(b) e libração L (c)-(d) no plano  $xy$  e no espaço de fase, respectivamente. As órbitas de rotação e libração foram obtidas para  $\varepsilon = 0.5$  e  $\varepsilon = 1.5$ , respectivamente. Ambas as órbitas foram obtidas numericamente para  $\beta = 10$ .



Fonte: O autor

Variando  $\varepsilon$  a  $\beta$  fixo, observamos uma sequência de transições entre órbitas. Classificamos as órbitas utilizando dois critérios:

1. O número  $p$  de cruzamentos ou nós da projeção da órbita no plano  $xy$ .
2. Se o eixo de orientação  $\hat{n}$  da partícula realiza um giro completo ao realizar um ciclo na órbita.

Vale reforçar que apenas as projeções se cruzam, não havendo cruzamento no espaço de fase 3D. Indicaremos por  $R$  e  $L$  as órbitas de *rotação* e *libração*, respectivamente. Nas órbitas de rotação ( $R$ ) o eixo de orientação  $\hat{n}$  realiza uma rotação de  $2\pi$  em um período, isto é,  $\theta(t) \in [-\pi, \pi]$  para  $t \in [0, T]$ , enquanto nas órbitas de libração ( $L$ ), o eixo de orientação não realiza uma rotação completa, oscilando em torno de dois valores de  $\theta$ , isto é,  $\theta(t) \in$

$[\theta_0 - \theta_{max}, \theta_0 + \theta_{max}]$  para  $t \in [0, T]$ , onde  $\theta_{max} < \pi$ . As órbitas de rotação são helicoidais, se repetindo a cada intervalo de  $2\pi$ , por outro lado, as órbitas de libração são fechadas e limitadas em um único intervalo de  $2\pi$ , conforme mostrado nas figuras 7 (a)-(b) para as órbitas de rotação, e nas figuras 7(c)-(d) para libração.

Podemos diferenciar as fases de rotação e libração matematicamente associando uma carga topológica  $Q$  às órbitas periódicas

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_t^{t+T} d\theta, \quad (3.67)$$

onde a integração deve ser feita em um período  $T$  da órbita. Uma órbita fechada no plano  $xy$  implica  $\hat{\mathbf{n}}(t+T) = \hat{\mathbf{n}}(t)$  e, conseqüentemente,  $\theta(t+T) = \theta(T) + 2\pi k$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ . Portanto, a carga topológica  $Q$  é um número inteiro. Nas fases de libração, obtemos  $Q = 0$  devido à oscilação de  $\theta(t)$  cuja amplitude é limitada por  $\theta_{max} < \pi$ . Nas fases de rotação, por outro lado, como eixo de orientação realiza, no mínimo, uma rotação de  $2\pi$ , temos  $|Q| > 0$ . Para o potencial elíptico, em particular, observamos numericamente apenas uma rotação completa por período; portanto,  $Q = \pm 1$ , onde o sinal depende do sentido da rotação.

Nas figuras 8 (a)-(d) apresentamos algumas das órbitas estáveis do sistema. Quanto maior o valor de  $\varepsilon$ , mais intensa é a componente  $x$  da força de confinamento sofrida pela partícula, diminuindo a amplitude do movimento na direção  $x$ . O estreitamento da amplitude em  $x$ , por sua vez, induz cruzamentos na projeção no plano  $xy$ . Explorando as órbitas estáveis do potencial, verificamos uma relação entre o número  $p$  e o tipo de órbita, onde  $p$  é par para as órbitas de rotação e ímpar para as órbitas de libração. Por exemplo, nas órbitas de rotação [figura 8 (a)] e libração [figura 8 (b)] marcadas em laranja temos  $p = 0$  e  $p = 1$ , respectivamente.

A relação entre a paridade do número de cruzamentos e a carga topológica no potencial elíptico pode ser explicada qualitativamente analisando a área orientada varrida pelo vetor posição. Partindo do fato de que a carga topológica é diretamente proporcional à variação da área orientada varrida em um período (veja a seção 3.2.2.2), para um número ímpar de cruzamentos (nós), as órbitas do potencial elíptico dividem-se em um número par de ventres que são percorridos em sentidos opostos, resultando em uma área orientada nula ao fim de um período e, portanto, em uma carga topológica nula. Conseqüentemente, números ímpares de cruzamentos estão associados à carga topológica nula (órbitas de libração), e números pares à carga topológica não nula (órbitas de rotação).

Vale ressaltar que, embora as órbitas surjam em pares, dada uma condição inicial a partícula autopropelida é atraída e permanece confinada a apenas uma das órbitas<sup>2</sup>. Portanto, no sistema, temos a coexistência de no mínimo duas órbitas estáveis.

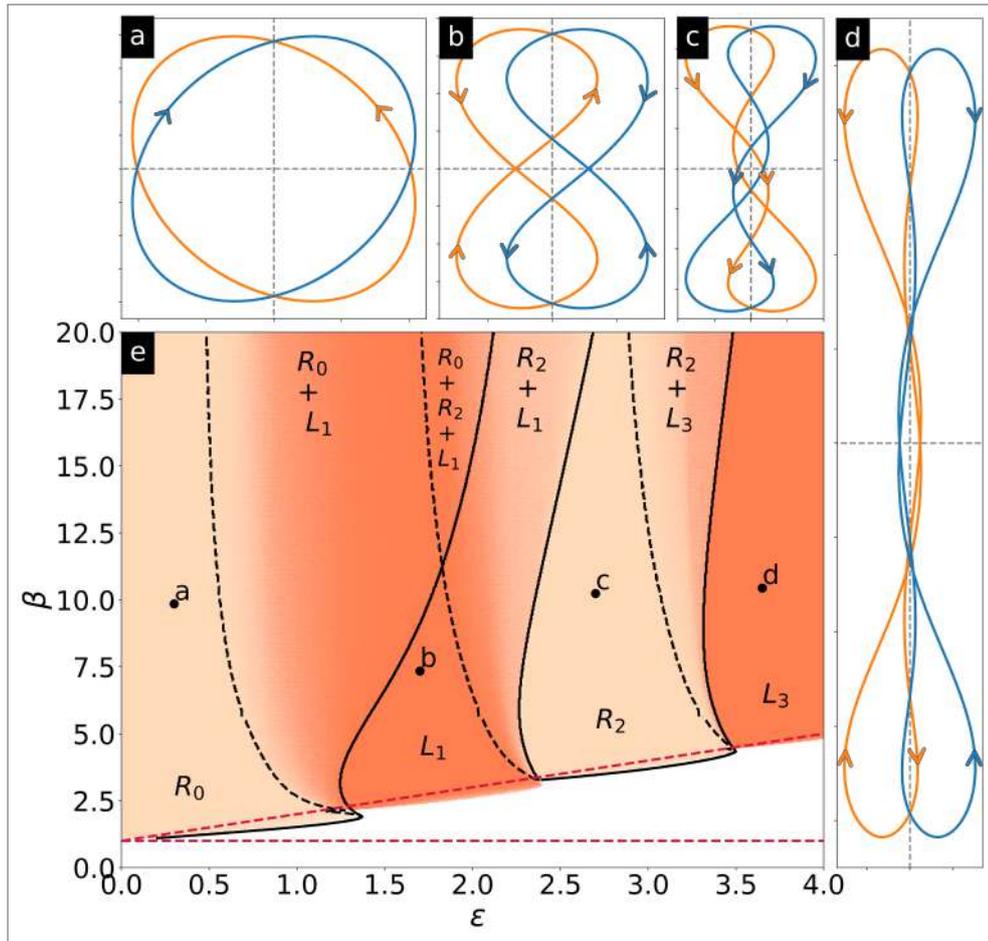
Na figura 8 (e), apresentamos um diagrama dos possíveis tipos de órbitas e das regiões de coexistência no espaço de parâmetros  $\varepsilon\beta$ . Para a construção do diagrama, primeiramente dividimos o eixo  $\beta \in [0, 20]$  em intervalos de  $\beta_{i+1} - \beta_i = \Delta\beta$ , e o eixo  $\varepsilon \in [0, 5]$  em intervalos de  $\varepsilon_{j+1} - \varepsilon_j = \Delta\varepsilon$ . Em seguida, consideramos dois conjuntos diferentes de condições iniciais:

1. Varreduras: para cada  $\beta_i$  iniciamos o sistema na fase escaladora ( $\beta_i < 1$ ) ou orbital ( $\beta_i > 1$ ) em  $\varepsilon_j = 0$  e, usando o ponto final  $P_{ij} = (x_{ij}, y_{ij}, \theta_{ij})$  da simulação de  $(\beta_i, \varepsilon_j)$  como condição inicial da simulação para  $(\beta_i, \varepsilon_{j+1})$ , realizamos uma varredura de  $\varepsilon = 0$  a  $\varepsilon = 5$ . Em seguida, retornamos de  $\varepsilon = 5$  para  $\varepsilon = 0$ . As linhas sólidas (tracejadas) na figura 8 (e) marcam as transições entre os tipos de órbitas na parte crescente (decrecente) da varredura. Para as varreduras usamos  $\Delta\beta = 0.16$  e  $\Delta\varepsilon = 0.005$ .
2. Sorteio: para cada par  $(\beta_i, \varepsilon_j)$  sorteamos 100 condições iniciais diferentes e, para cada uma delas, classificamos se a órbita resultante é de rotação (coral claro) ou libração (coral escuro), o gradiente de cor na figura 8 (e) indica a porcentagem de cada tipo de órbita dentre as 100 amostras. Para o sorteio utilizamos  $\Delta\beta = 0.038$  e  $\Delta\varepsilon = 0.01$ .

Uma característica notável no diagrama apresentado na figura 8 (e) é que algumas órbitas de diferentes tipos podem coexistir na mesma região do espaço de parâmetros. Como mostrado no diagrama, observamos que as transições apresentam histerese quando fazemos uma varredura crescente ou decrescente em  $\varepsilon$ . A histerese é mais evidente para valores altos de  $\beta$ . As transições entre as órbitas na varredura crescente (decrecente) em  $\varepsilon$  são delimitadas pelas curvas pretas sólidas (tracejadas), de modo que, olhando da esquerda para a direita, as regiões entre uma linha tracejada e uma linha sólida são regiões de coexistência, como apontado no diagrama. Observamos, também que, em geral aumentando (diminuindo)  $\varepsilon$  a  $\beta$  fixo as transições satisfazem  $p \rightarrow p + 1$  ( $p \rightarrow p - 1$ ). Além de transições entre tipos de órbitas, observamos coexistência entre as fases orbital e escaladora, embora ocorra apenas em pequenas regiões abaixo da linha  $\beta = 1 + \varepsilon$ .

<sup>2</sup> Lembrando que estamos no caso determinístico, no capítulo 4 veremos que escapes podem ocorrer devido à ação do ruído.

Figura 8 – (a)-(d): Órbitas representativas de uma partícula ativa no potencial elíptico. (e) Diagrama de fase no plano definido pela mobilidade angular  $\beta$  e o parâmetro  $\varepsilon$  que controla a excentricidade do potencial. As tonalidades de cor indicam o estado topológico da órbita obtido a partir de condições iniciais aleatórias (ver texto), pêssego claro para rotação (R) e coral para libração (L). Linhas sólidas (tracejadas) indicam transições entre órbitas ao varrer  $\varepsilon$  da esquerda (direita) para direita (esquerda) fixando o valor de  $\beta$ . As fases são classificadas pelo índice  $Xp$  de acordo com sua topologia ( $X = R,L$ ) e o número de nós ( $p = 0,1,2,\dots$ ). Zonas de coexistência são marcadas com múltiplos rótulos. As linhas tracejadas vermelhas indicam o limite superior da fase escaladora ( $\beta = 1 + \varepsilon$ ) e inferior ( $\beta = 1$ ) da fase orbital (veja as seções 3.2.1 e 3.2.2.1).



Fonte: O autor, publicada em DAMASCENA; CABRAL; SILVA (2022)

### 3.2.2.1 Instabilidade da fase orbital

Ainda no diagrama mostrado na figura 8 (e), verificamos que não há órbitas estáveis abaixo de  $\beta = 1$ . De fato, podemos mostrar que a fase orbital é proibida nesse limite para todo  $\varepsilon \geq 0$ . Para demonstrar esse resultado é conveniente considerar a evolução temporal do vetor  $\hat{n}$  ao invés da evolução temporal de seu ângulo. Portanto, representaremos a dinâmica da partícula

usando a versão adimensional das equações (1.13) e (1.14) na ausência de ruído, isto é:

$$\dot{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{n}} + \mathbf{F}, \quad (3.68)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt} = \beta(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \times \hat{\mathbf{n}}. \quad (3.69)$$

Primeiramente, note que da equação (3.68),  $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{F} = \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}$ , onde  $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}$ . Note também que a equação (3.69) pode ser reescrita como

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \beta(\mathbf{v} - (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})\hat{\mathbf{n}}). \quad (3.70)$$

Aplicando o produto interno por  $\mathbf{v}$  na equação acima obtemos

$$\left(\mathbf{v} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}\right) = \beta v^2 - \beta (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 \implies 0 \leq \left(\mathbf{v} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}\right) \leq \beta v^2, \quad (3.71)$$

onde  $v^2 = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$ . Por outro lado, derivando temporalmente ambos os lados da equação 3.68 obtemos

$$\frac{dv}{dt} = \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{F} \implies \left(\mathbf{v} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{dt}\right) = \frac{1}{2} \frac{dv^2}{dt} - (\mathbf{v} \cdot \nabla)^2 V(x, y) \quad (3.72)$$

Das equações acima podemos construir a seguinte desigualdade

$$-(\mathbf{v} \cdot \nabla)^2 V \leq \frac{1}{2} \frac{dv^2}{dt} \leq \beta v^2 - (\mathbf{v} \cdot \nabla)^2 V. \quad (3.73)$$

Finalmente, para o potencial elíptico,  $(\mathbf{v} \cdot \nabla)^2 V = v^2 + \varepsilon \dot{x}^2$ , portanto,

$$-(v^2 + \varepsilon v_x^2) \leq \frac{1}{2} \frac{dv^2}{dt} \leq (\beta - 1)v^2 - \varepsilon v_x^2. \quad (3.74)$$

Da equação (3.74), se  $\beta < 1$ , então  $\frac{dv^2}{dt} < 0 \forall t$ , isto significa que o módulo da velocidade irá eventualmente se anular. Consequentemente, não há fase orbital para  $\beta < 1$ .

### 3.2.2.2 Área orbital e mobilidade angular

Outro resultado interessante é que a área ocupada pelas órbitas é inversamente proporcional a  $\beta$ . Como ponto de partida, considere a taxa com que a área orientada  $A$  varrida pelo vetor posição  $\mathbf{r}$  da partícula muda com o tempo

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \cdot \hat{\mathbf{z}}. \quad (3.75)$$

Reescrevendo convenientemente a força devido ao potencial elíptico como

$$-\mathbf{F} = \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) \mathbf{r} + \frac{\varepsilon}{2}(x\hat{x} - y\hat{y}), \quad (3.76)$$

então, o vetor de orientação da partícula pode ser escrito como

$$\mathbf{n} = \left[ \mathbf{v} + \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) \mathbf{r} + \frac{\varepsilon}{2} (x\hat{x} - y\hat{y}) \right]. \quad (3.77)$$

Aplicando o produto vetorial  $\times \mathbf{v}$  a direita em ambos os lados da equação acima obtemos

$$\mathbf{n} \times \mathbf{v} = \left[ (2 + \varepsilon) \frac{1}{2} (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) + \frac{\varepsilon}{2} (x\hat{x} - y\hat{y}) \times \mathbf{v} \right]. \quad (3.78)$$

Aplicando o produto interno  $\cdot \hat{z}$  em ambos os lados, obtemos uma expressão para  $A(t)$  na órbita,

$$(2 + \varepsilon) \frac{dA}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\theta}{\beta} - \frac{\varepsilon}{2} xy \right), \quad (3.79)$$

isto é,

$$(2 + \varepsilon)A(t) - \frac{\theta(t)}{\beta} + \frac{\varepsilon}{2}x(t)y(t) = \text{constante}. \quad (3.80)$$

Como a equação 3.80 vale para quaisquer pontos na órbita, podemos calcular a área varrida em um loop. Se  $P_1 = (x(t_1), y(t_1), \theta(t_1))$  é o ponto inicial, e  $P_2 = (x(t_2), y(t_2), \theta(t_2))$  o ponto final do loop, então, devemos ter  $x(t_1) = x(t_2)$ ,  $y(t_1) = y(t_2)$  e  $\theta(t_1) \neq \theta(t_2)$ , onde  $t_2 > t_1$ .

Da equação 3.80 a área varrida no loop  $A_{loop} = A(t_2) - A(t_1)$  é dada por:

$$A_{loop} = \frac{\Delta\theta_{loop}}{(2 + \varepsilon)\beta}, \quad (3.81)$$

onde  $\Delta\theta_{loop}$  é a variação do ângulo no loop escolhido. Em geral  $|\Delta\theta_{loop}| < 2\pi$  para qualquer órbita com nós, e  $|\Delta\theta_{loop}| = 2\pi$  para as órbitas de rotação. Note que, independentemente da órbita em questão, quanto maior a mobilidade angular da partícula, mais compacta é a área em qualquer loop, sendo, portanto, menor a área delimitada pela órbita.

Por fim, considerando  $P_1 = (x(t), y(t), \theta(t))$  e  $P_2 = (x(t + T), y(t + T), \theta(t + T))$ , um período da órbita, podemos relacionar a área varrida em um período com a carga topológica  $Q = 2\pi [\theta(t + T) - \theta(t)]$ ,

$$Q = \frac{(2 + \varepsilon)\beta}{2\pi} [A(t + T) - A(t)]. \quad (3.82)$$

### 3.2.2.3 Bacia de atração das órbitas

Pode-se definir a bacia de atração de um atrator  $\mathcal{A}$  como o maior conjunto  $\mathcal{U}_{\mathcal{A}}$  no espaço de fase cujas trajetórias que iniciam em  $\mathcal{U}_{\mathcal{A}}$  convergem para o  $\mathcal{A}$  quando  $t \rightarrow \infty$  (STROGATZ, 2000). A bacia de atração tem papel fundamental em nossos estudos de coexistência e escape

entre as órbitas periódicas do potencial elíptico. Aqui, apresentamos brevemente detalhes de sua obtenção.

Primeiramente definimos um volume  $\mathcal{V} = [-L_x, L_x] \times [-L_y, L_y] \times [-\pi, \pi]$  no espaço de fase grande o suficiente para envolver a isóclina crítica. Em seguida, discretizamos os intervalos  $I_x = [-L_x, L_x]$ ,  $I_y = [-L_y, L_y]$  e  $I_\theta = [-\pi, \pi]$  em  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_\theta$  partes, respectivamente, totalizando  $N_{CI} = n_x n_y n_\theta$  condições iniciais regularmente espaçadas e contidas no volume  $\mathcal{V}$ . Por fim, para cada condição inicial, resolvemos as equações (3.1) e (3.2) e classificamos a condição inicial de acordo com o atrator para o qual a partícula foi capturada. Ao final do processo, obtemos as bacias de atração para cada atrator no volume  $\mathcal{V}$ .

Para o estudo das funções de distribuição de probabilidade (FDPs) na coexistência entre as fases na seção 4.1.4 temos  $N_{CI} \approx 3 \times 10^6$ . Por outro lado, no estudo de escape entre órbitas na seção 4.2.3, aumentamos a precisão da bacia, resultando em  $N_{CI} \approx 2 \times 10^8$ . Em ambos os estudos, usamos  $L_x = L_y = 1.5$ .

### 3.3 POTENCIAIS ANARMÔNICOS E CAOS

Com respeito à fase orbital, até o momento identificamos que potenciais com simetria radial geram órbitas periódicas circulares, e que a quebra dessa simetria dá origem a órbitas não circulares com propriedades topológicas diferentes. Ao substituímos o potencial harmônico pelo potencial elíptico [equação (3.63)] quebramos a simetria radial, entretanto, mesmo que anisotrópica, a força sentida pela partícula autopropelida ainda é linear. Dada a complexidade das órbitas que observamos com o potencial elíptico, como próximo passo, investigamos se potenciais cujas forças são anisotrópicas e não lineares podem induzir movimento caótico na partícula autopropelida. Testando alguns potenciais com as características mencionadas acima, encontramos atratores caóticos nos seguintes potenciais:

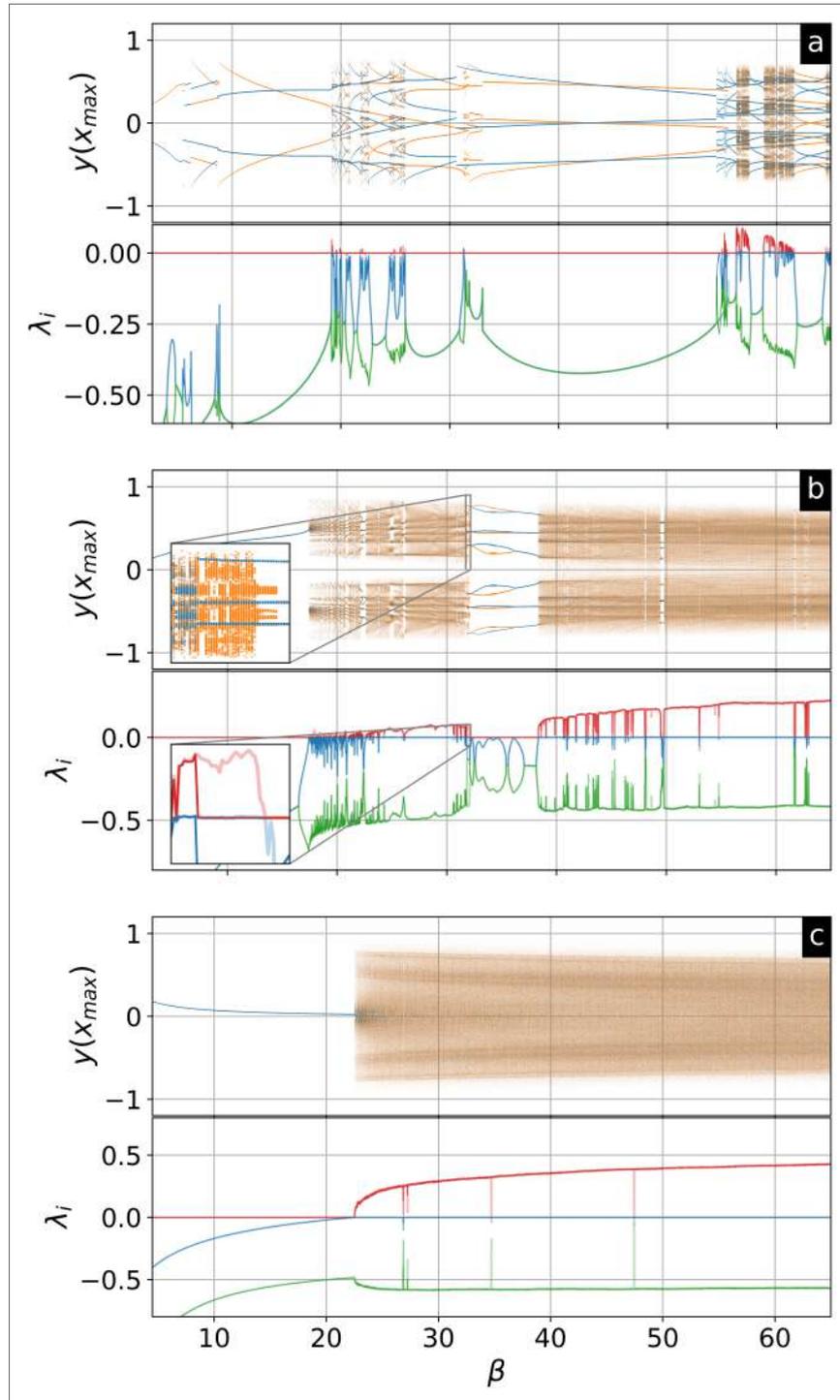
$$\begin{aligned} V_1(x, y) &= \frac{1}{2}(x^2 + y^6), \\ V_2(x, y) &= \frac{1}{6}(2x^2 + y^2)^3, \\ V_3(x, y) &= \frac{1}{6}(x^6 + y^6), \end{aligned} \tag{3.83}$$

onde os potenciais se encontram nas unidades de medida do sistema (seção 1.2.1). Como veremos a seguir, para todos os potenciais analisados, os atratores caóticos aparecem para valores altos de  $\beta$ . Esse resultado sugere que, além de uma força não linear, uma alta mobilidade angular é ingrediente necessário para o aparecimento de dinâmica caótica.

Para os três potenciais, realizamos uma varredura: iniciamos a partícula na fase escaladora em  $\beta < 1$  e incrementamos  $\beta$  até  $\beta = 80$ , em seguida, em  $\beta = 80$  realizamos o processo inverso, retornando para  $\beta = 1$  em passos de  $\Delta\beta = 0.01$ . A partícula é inicializada no último estado calculado na etapa anterior, e a cada nova inicialização, aguardamos um tempo de espera  $\Delta t_{espera} = 5 \times 10^3 t_0$  antes de avaliar a dinâmica realizada pela partícula durante um intervalo de tempo  $\Delta t_{medida} = 10^4 t_0$ . A figura 9 mostra diagramas de bifurcações e expoentes de Lyapunov para a partícula quando confinada aos potenciais anarmônicos definidos na equação (3.83). Os diagramas de bifurcação foram obtidos registrando, para cada valor de  $\beta$ , a posição  $y$  da partícula ativa toda vez que sua posição  $x$  atinge um máximo ( $x_{max}$ ). As medidas de  $y(x_{max})$  foram realizadas durante um intervalo de tempo  $\Delta t_{medida}$ , que em média cobre 500 ciclos de  $x$ . Em alguns intervalos de  $\beta$ , em especial para  $\beta$  pequeno, as medidas de  $y(x_{max})$  colapsam em um conjunto pequeno de pontos, indicando que o sistema se encontra em movimento periódico. Nas figuras 10 (a)-(d), (h) e (k), apresentamos alguns exemplos dessas órbitas. Note que algumas delas são complexas, embora perfeitamente periódicas, além disso, cada uma delas possuem uma órbita gêmea simétrica mas com circulação oposta devido à simetria de reflexão dos potenciais. Por outro lado, em alguns intervalos de  $\beta$ , usualmente valores altos, encontramos regiões onde os pontos  $y(x_{max})$  estão amplamente dispersos, comportamento que indica movimento aperiódico. Exemplos dessas trajetórias se encontram nas figuras 10 (e), (g), (i), (j), (l)-(o). Para verificar se a fase aperiódica observada é de fato caótica, calculamos os expoentes de Lyapunov para cada  $\beta$  usando o método do mapa tangente (WOLF et al., 1985). Para qualquer potencial, a fase orbital corresponde a trajetórias contidas no espaço de fase tridimensional gerado pelas variáveis  $x, y$ , e  $\theta$ . Portanto, a resposta do sistema às perturbações nessas trajetórias é descrita por três expoentes de Lyapunov. Dentre os três, um expoente é sempre nulo, refletindo a indiferença do sistema às perturbações em direção à órbita não perturbada, e devido ao fato de que a trajetória do atrator não contém pontos fixos (HAKEN, 1983). Os outros dois expoentes podem ser usados para definir se a dinâmica é regular, se ambos expoentes forem negativos, ou caótica, quando ao menos um dentre os expoentes for positivo. Quando um expoente de Lyapunov é positivo, existe uma sensibilidade exponencial às condições iniciais, ou seja, soluções que começam próximas tendem a se afastar exponencialmente, uma característica típica em dinâmica caótica. Note que todas as regiões aperiódicas mostradas na figura 9 correspondem a regiões onde um expoente de Lyapunov é positivo, conseqüentemente, a dinâmica nessas regiões é caótica.

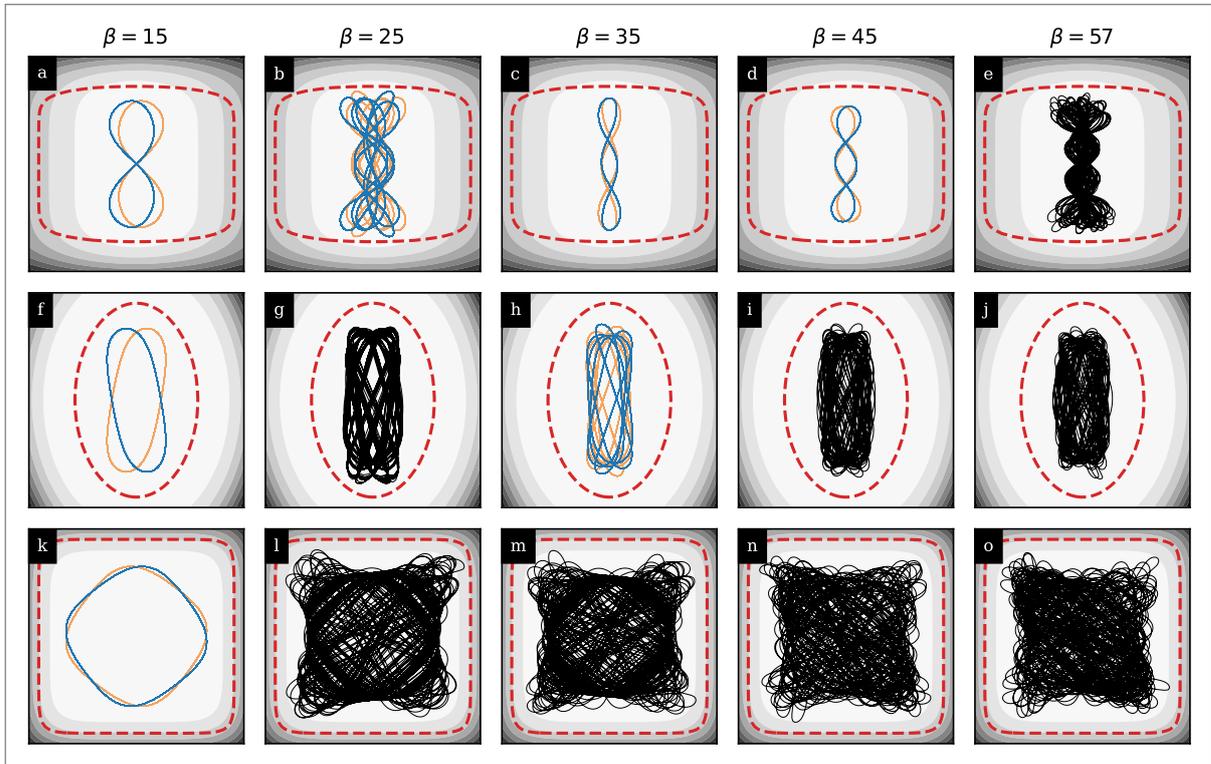
Em geral, apesar dos intervalos de comportamento periódico, a sensibilidade às condições

Figura 9 – (a) Diagrama de bifurcação (parte superior) e espectro de Lyapunov (parte inferior) para o potencial anarmônico  $V_1(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^6)$ . O diagrama é gerado marcando a posição  $y$  da partícula toda vez que a posição  $x$  atinge um valor máximo ( $x_{max}$ ) durante uma varredura crescente (laranja) e decrescente (azul) em  $\beta$ . Os expoentes de Lyapunov correspondentes à varredura crescente (decrecente) em  $\beta$  são apresentados em cores claras (cores escuras). As cores vermelho, azul e verde se referem ao maior, segundo maior e menor expoente de Lyapunov, respectivamente. Em (b) e (c) temos o mesmo que em (a), entretanto, para os potenciais  $V_2(x, y) = \frac{1}{6}(2x^2 + y^2)^3$  e  $V_3(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$ , respectivamente.



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022)

Figura 10 – Exemplo de órbitas periódicas (linhas azuis e laranja) e caótica (linhas pretas) para a partícula autopropelida confinada aos potenciais anarmônicos: (a)-(e)  $V_1(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^6)$ , (f)-(j),  $V_2(x, y) = \frac{1}{6}(2x^2 + y^2)^3$ , e (k)-(o)  $V(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$ . O gradiente de cor ao fundo representa o potencial, com os tons claros indicando as regiões de menor potencial. As linhas tracejadas descrevem a isóclina crítica que para os valores de  $\beta$  considerados é formada apenas por pontos fixos instáveis (legendas na parte superior). Para as órbitas periódicas, (a)-(d), (f), (h), e (k), mostramos as duas trajetórias permitidas pela simetria.



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022)

iniciais indicada pelos expoentes de Lyapunov tende a aumentar com  $\beta$  para os três potenciais. Isso sugere que uma partícula ativa presa por um potencial altamente não linear tende a exibir um comportamento mais caótico se possuir uma alta mobilidade angular. Por fim, olhando cuidadosamente para os diagramas na figura 9, pode-se identificar histerese em alguns intervalos de  $\beta$ . Na maioria desses intervalos, diferentes órbitas periódicas coexistem, assim como vimos com o potencial elíptico (seção 3.2). Entretanto, em intervalos pequenos pode-se observar coexistência entre órbita periódicas (ciclos limites estáveis) e atratores caóticos, como mostrado no zoom inserido na figura 9-(b).

### 3.4 CONCLUSÃO DO CAPÍTULO

Neste capítulo, estudamos a dinâmica de uma partícula ativa confinada com torque de autoalinhamento na ausência de ruído. Definimos um potencial  $V(x, y)$  como confinador se

os pontos fixos do sistema dinâmico determinístico da partícula confinada por ele forem não isolados, formando uma curva no espaço de fase cuja projeção no plano  $xy$  é fechada. Essa curva, chamada de isóclina crítica, delimita a dinâmica determinística da partícula. Deterministicamente, a partícula ou é atraída para a isóclina ou para um atrator no interior da isóclina. A forma da isóclina crítica depende apenas do potencial, entretanto, a estabilidade de seus pontos fixos depende da mobilidade angular  $\beta$  da partícula.

O sistema dinâmico determinístico também admite órbitas atratoras (ciclos-limites estáveis). Se o potencial confinador possui simetria de reflexão em relação aos eixos  $x$  e  $y$ , então essa simetria é manifestada pelo surgimento de órbitas em pares. Nos potenciais considerados ao longo da tese, encontramos tanto órbitas periódicas quanto caóticas.

A partir das estruturas atrativas estáveis presentes no espaço de fase da partícula para um potencial confinador, generalizamos as fases escaladora e orbital introduzidas por DAUCHOT; DÉMERY em 2019 para um potencial harmônico. A fase escaladora, agora para um potencial qualquer, ocorre quando a partícula ativa (agora com ruído) é atraída para a isóclina crítica, executando movimento browniano ao longo dela. A fase orbital, de modo semelhante, ocorre quando a partícula é capturada por uma órbita atratora periódica, percorrendo a órbita enquanto sofre desvios devido ao ruído. Ambas as fases só existem para níveis moderados de ruído. Para altos valores de ruído, a dinâmica estocástica se descorrelaciona completamente das estruturas atrativas do espaço de fase, como veremos no capítulo 4.

Ainda sem especificar a forma do potencial, mostramos que os potenciais do tipo  $V(x, y) = V(r)$ , com  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ , possuem tanto isóclina crítica quanto órbitas periódicas circulares. Para esses potenciais, em especial, a estabilidade da isóclina é binária: ou *todos* os pontos fixos são estáveis ou *todos* os pontos fixos são instáveis. Para esses potenciais, mostramos que a estabilidade (instabilidade) da isóclina crítica implica a instabilidade (estabilidade) das órbitas circulares. Além disso, tanto a isóclina crítica quanto as órbitas circulares de sentido horário e anti-horário são mapeadas em pontos no plano  $\chi r$ . Nesse plano, a separatriz entre as bacias de atração das órbitas é uma reta vertical em  $\chi = 0$ . Devido à simplicidade das bacias de atração e à descrição bidimensional, essas órbitas serão palco para o estudo dos escapes induzidos por ruído e para a averiguação do fenômeno de ressonância estocástica no capítulo 5.

Com o intuito de estudar a fase escaladora e orbital em potenciais sem simetria radial, consideramos inicialmente a família de potenciais elípticos,  $V(x, y) = \frac{1}{2}[(1+\varepsilon)x^2 + y^2]$ . Embora para esse potencial a força continue linear, obtivemos uma variedade de órbitas periódicas que

---

puderam ser classificadas pelo número de nós de sua projeção no plano  $xy$  e pelo número de voltas que o ângulo de orientação performa em um período. No plano  $\varepsilon\beta$ , o aumento de  $\varepsilon$  a  $\beta$  fixo promove o surgimento de órbitas com mais nós. A isóclina crítica, por outro lado, forma sempre uma elipse no plano  $xy$ ; entretanto, sua excentricidade varia com o valor de  $\varepsilon$ , tornando-se mais estreita em  $x$ . Além disso, diferente da isóclina circular, os pontos fixos se tornam instáveis gradativamente com  $\beta$ , iniciando pelo co-vértice.

Por fim, ao considerarmos potenciais sem simetria radial, agora sendo a força atuante sobre a partícula não linear, observamos a presença de caos. A presença de caos foi devidamente confirmada com a análise dos expoentes de Lyapunov. Para os potenciais analisados, identificamos caos apenas para valores altos de mobilidade angular, sugerindo que, além de uma alta não-linearidade do potencial, a alta mobilidade angular é um ingrediente importante para a presença de caos na dinâmica de uma partícula ativa. Além disso, observamos pequenas janelas de coexistência entre órbitas periódicas e caóticas.

## 4 DINÂMICA ESTOCÁSTICA

Neste capítulo, analisaremos a dinâmica da partícula ativa na presença de ruído. Os principais resultados obtidos neste capítulo foram publicados nas referências (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022; DAMASCENA; SILVA, 2023).

No capítulo anterior, capítulo 3, apresentamos as estruturas atrativas presentes no espaço de fase do sistema dinâmico determinístico. Matematicamente, as equações estocásticas de Langevin não admitem pontos fixos e ciclos limites, entretanto, observamos que, para baixas intensidades de ruído, a dinâmica estocástica da partícula pode ser interpretada como uma competição entre a ação das estruturas atrativas do sistema determinístico e os desvios aleatórios causados pelo ruído.

Como já definido na seção 1.2 a dinâmica estocástica da partícula autopropelida é regida pelas seguintes equações de Langevin:

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{n}} + \mathbf{F} + \sqrt{2D_t} \boldsymbol{\zeta}(t) \quad (4.1)$$

$$\dot{\theta} = \beta(\dot{\mathbf{n}} \times \mathbf{F}) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \sqrt{2D_r} \xi(t), \quad (4.2)$$

onde as equações foram escritas nas unidades definidas na seção 1.2.1.

Na seção 4.1 apresentaremos o comportamento das fases dinâmicas na presença de ruído. Na maior parte do estudo, consideraremos o comportamento a longo prazo de partículas ativas mais suscetíveis à ação do ruído rotacional do que à ação do ruído translacional. Portanto, em boa parte do estudo iremos considerar  $D_t = 0$  e  $D_r = D$ . Detalhes sobre a ação do ruído rotacional para tempo longo serão descritos na subseção 4.1.1. Na subseção 4.1.2, apresentamos a transição entre o comportamento ativo e passivo da partícula ativa quando a dinâmica orientacional passa a ser dominada completamente pelo ruído,  $D \gg \beta$ . Na subseção 4.1.3 exploramos uma dinâmica complexa resultante da combinação de efeitos não lineares e ruído observada em um dos potenciais anarmônicos considerados na seção 3.3. Por fim, na subseção 4.1.4 iniciaremos a descrição da coexistência entre os atratores do potencial elíptico na presença de ruído.

Na seção 4.2 temos como foco o escape induzido por ruído entre as órbitas da fase orbital. Na subseção 4.2.1, apresentamos as equações de movimento do *caminho mais provável de escape* (CMPE) para a partícula autopropelida, partindo dos resultados obtidos na seção 2.3.2. Na subseção 4.2.2 usaremos a abordagem do caminho mais provável de escape para dois po-

tenciais com simetria radial: o potencial WCA <sup>1</sup> e para o potencial harmônico. Para ambos os potenciais, comparamos os resultados do CMPE com dados obtidos integrando numericamente as equações (4.1) e (4.2). Na subseção 4.2.3, aplicamos a abordagem do CMPE para um escape entre quatro órbitas em coexistência para o potencial elíptico. Por fim, na seção 4.3, recapitulamos os principais resultados obtidos ao longo do capítulo. Todas as integrações numéricas das equações (4.1) e (4.2) foram obtidas usando o método de Runge-Kutta estocástico de segunda ordem (veja seção 2.1) com passo de integração fixo em  $\Delta t = 10^{-3}$ .

## 4.1 FASES DINÂMICAS A RUÍDO FINITO

Nesta seção, apresentamos alguns fenômenos relacionados à ação de ruído finito ( $D > 0$ ). A principal quantidade que utilizamos para identificar o efeito do ruído foi a função distribuição de probabilidade (FDP)  $\mathcal{P}(x, y)$  e  $\mathcal{P}(\theta)$ . Dado um potencial confinador e intensidade de ruído  $D$ , calculamos as FDPs realizando a média sob a dinâmica de  $10^4$  partículas ao longo de um tempo de medição de  $5 \times 10^3 \tau_0$ , e após um tempo de espera de  $10^3 \tau_0$ , a menos que indicado de outra forma.

### 4.1.1 Interação entre ruído rotacional e translacional

Em geral, uma partícula autopropelida está sujeita a dois tipos de ruído: o coeficiente de ruído translacional  $D_t$ , presente na equação (4.1), e o coeficiente de ruído rotacional  $D_r$ , presente na equação (4.2). Embora ambos coeficientes modelem a intensidade das forças estocásticas exercidas sobre a partícula, na literatura é comum o ruído translacional ser desprezado (CAPRINI; MARCONI; PUGLISI, 2020; TAKATORI et al., 2016; SANTRA; BASU; SABHAPANDIT, 2021). Nesta breve seção, discutiremos a ação do ruído rotacional  $D_r$  na dinâmica translacional da partícula e o motivo pelo qual desprezar o ruído  $D_t$  resulta em uma boa aproximação para seres vivos ou artificiais capazes de se autopropelir.

A dinâmica de uma partícula browniana ativa na ausência de potencial e torque de autoa-

<sup>1</sup> Potencial de Lennard-Jones truncado contendo apenas a parte repulsiva (WEEKS; CHANDLER; ANDERSEN, 1971)

linhamento é regida pelas seguintes equações:

$$\dot{x} = v_0 \cos \phi \quad (4.3)$$

$$\dot{y} = v_0 \sin \phi \quad (4.4)$$

$$\dot{\phi} = \sqrt{2D_r} \xi_\phi, \quad (4.5)$$

com  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t')$ . Em (BASU et al., 2018) demonstra-se que no limite em que  $t \gg D_r^{-1}$ , a partícula passa a ter comportamento difusivo no plano  $xy$  com

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \frac{v_0^2}{D_r} t \equiv 2D_{aco} t, \quad \text{se } t \gg D_r^{-1}. \quad (4.6)$$

Ou seja, a dinâmica para longos tempos é difusiva, com um coeficiente de difusão  $D_{aco} = \frac{v_0^2}{2D_r}$  devido ao acoplamento entre a dinâmica translacional e orientacional da partícula. Na presença de ruído translacional  $D_t$ , o coeficiente de difusão translacional efetivo da partícula é dado por:

$$D_{\text{eff}} = D_t + D_{aco}. \quad (4.7)$$

Observa-se experimentalmente que, para partículas ativas microscópicas, o coeficiente  $D_{aco}$  é mais relevante para  $D_{\text{eff}}$  do que o ruído translacional  $D_t$ . Por exemplo, HOWSE et al. em 2007 relata que  $D_{\text{eff}}$  para partículas de Janus revestidas, equivalentes às partículas brownianas ativas com  $D_{aco} \neq 0$ , é até 30 vezes maior que o  $D_{\text{eff}}$  para partículas não revestidas, equivalentes às partículas brownianas passivas com  $D_{aco} = 0$ . Como um segundo exemplo, DARNTON et al. em 2004 relata um aumento de aproximadamente 40 vezes na difusão de esferas micrométricas ao serem ativadas por um tapete composto por bactérias. Além disso, o modelo *run-and-tumble* que descreve de forma satisfatória o movimento individual de algumas bactérias, como por exemplo a E. Coli, é formalmente equivalente ao modelo de partículas brownianas ativas no regime de alto ruído (CATES; TAILLEUR, 2013; SOLON; CATES; TAILLEUR, 2015). Por fim, ao considerarmos seres biológicos ou artificiais no domínio macroscópico, os efeitos térmicos são pouco relevantes. Por outro lado, o próprio mecanismo de propulsão é tipicamente ruidoso, induzindo deslocamentos aleatórios na orientação da partícula (DAUCHOT; DÉMERY, 2019; LEONI et al., 2020). De modo que existem limites em que desprezar o ruído translacional, tanto no domínio microscópico quanto no macroscópico, constitui uma boa aproximação em matéria ativa. Portanto, em boa parte do que segue, consideraremos  $D_t = 0$  na equação (4.1).

### 4.1.2 Transição entre comportamento ativo e passivo

Para partículas ativas sem torque de autoalinhamento confinadas a um potencial isotrópico, a FDP para baixas intensidades de ruído  $D$  é conhecida por ser altamente localizada a uma distância finita do centro do potencial. Por outro lado, o movimento angular da partícula é difusivo, resultando em uma FDP em forma de anel no plano  $xy$ , caracterizando o chamado *comportamento ativo*. À medida que  $D$  aumenta, o anel encolhe enquanto se torna mais espesso e menos localizado, até que, para  $D$  suficientemente grande, tipicamente  $D \gg v_0/L_0$  ( $D \gg 1$ , em nossas unidades), a FDP colapsa em uma distribuição semelhante à distribuição de Boltzmann com pico no mínimo do potencial

$$\mathcal{P}(x, y) \propto \exp[-\mu V(x, y)/D_{\text{eff}}], \quad (4.8)$$

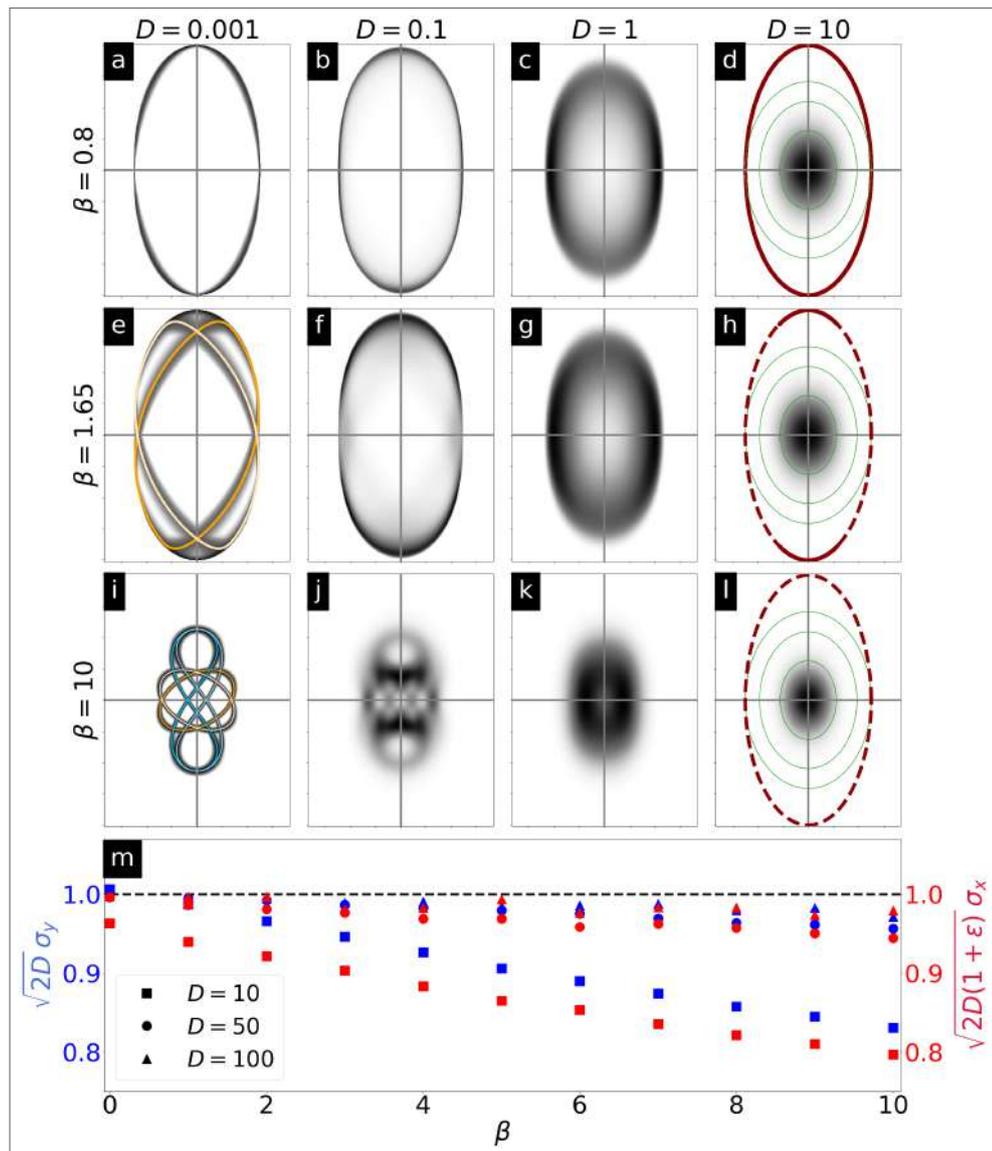
onde  $D_{\text{eff}} = v_0^2/2D$  é o coeficiente de difusão efetivo<sup>2</sup> já discutido na seção 4.1.1, caracterizando o chamado *comportamento passivo* (TAKATORI et al., 2016; MALAKAR et al., 2020).

Com o objetivo de investigar o comportamento ativo e passivo de uma partícula browniana ativa com torque de autoalinhamento confinada por um potencial elíptico anisotrópico, calculamos numericamente a FDP da partícula ativa confinada pelo potencial elíptico com  $\varepsilon = 1$ , para diferentes valores de  $D$  e  $\beta$ . Na figura 11 (a)-(l), apresentamos as FDPs para diferentes valores de  $\beta$ , variando a intensidade de ruído  $D$  de muito baixa para muito alta, considerando quatro valores representativos:  $D = \{10^{-3}, 10^{-1}, 1, 10\}$ . Na figura 11 (a)-(b), apresentamos as FDPs para  $\beta = 0.8$ , onde, conforme indicado no diagrama de fase [figura 8-(e)], a isóclina crítica é completamente estável e a fase orbital é instável. Como pode-se observar, a evolução da FDP com  $D$  segue aproximadamente a transição entre o comportamento passivo e ativo descrito acima. Entretanto, diferente do caso isotrópico, para baixos valores de  $D$ , a FDP segue aproximadamente a forma da isóclina crítica, nesse caso uma elipse com razão de aspecto  $1 + \varepsilon = 2$ . Para  $D$  grande, o aspecto da FDP passa a coincidir com o aspecto das linhas equipotenciais do potencial:  $\sqrt{1 + \varepsilon} = \sqrt{2}$  (veja a última coluna da figura 11), explicitando a convergência da FDP para uma distribuição semelhante à distribuição de Boltzmann, definida na equação (4.8) quando nos aproximamos do limite  $D \gg 1$ .

Para valores moderados de  $\beta$  ( $1 < \beta < 1 + \varepsilon$ ) a isóclina crítica não é completamente estável, podendo haver coexistência entre a fase orbital e escaladora. Nesse caso a FDP no limite de baixo ruído muda completamente. Como pode ser visto na figura 11 (e), a FDP é

<sup>2</sup> Já estamos considerando  $D_t = 0, D_r = D$

Figura 11 – (a)-(l) Gráficos de densidade da função de distribuição de probabilidade no estado estacionário  $\mathcal{P}(x, y)$  de uma partícula ativa no potencial elíptico com  $\varepsilon = 1.0$  para diferentes valores da mobilidade angular  $\beta$  e intensidade de ruído  $D$ . Para uma melhor visualização, na primeira coluna (a, e, i) os gráficos da PDF se encontram em escala logarítmica. Em (d), (h) e (l), as linhas vermelhas contínuas (tracejadas) representam os segmentos estáveis (instáveis) da isóclina crítica, enquanto as linhas verdes são as equipotenciais de  $V(x, y)$ . As Linhas contínuas de cores suaves em (e) e (i) representam os atratores da fase orbital em  $(\varepsilon, \beta)$  quando  $D = 0$ . (m) Desvios-padrão escalados para as coordenadas  $x$  e  $y$  da partícula em função de  $\beta$ . A linha tracejada é o limite teórico para  $\beta = 0$  e  $\sqrt{2D}\sigma_y = \sqrt{2D(1+\varepsilon)}\sigma_x = 1$ , obtido a partir da equação. (4.8).



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022)

altamente localizada em torno do atrator determinístico  $R_0$  e do segmento estável da isóclina crítica. Quando  $D$  aumenta, a fase escaladora parece dominar a dinâmica convergindo para o comportamento passivo em  $D \sim 10$  [veja as figuras 11 (f)-(h)].

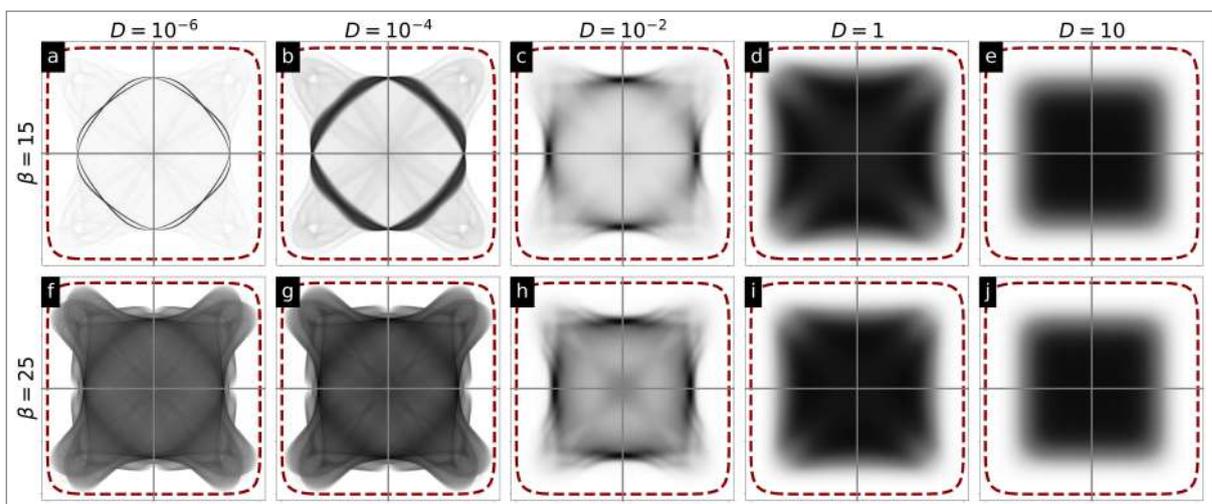
Nas figuras 11 (i)-(l), apresentamos o efeito do ruído na dinâmica de uma partícula com alta mobilidade angular  $\beta$ . Tanto para baixa ( $D \ll 1$ ) e moderada ( $D \sim 1$ ) intensidade de ruído,

a FDP segue aproximadamente os atratores do caso determinístico, revelando uma resiliência da partícula às forças estocásticas. No limite em que  $D \gg 1$ , observamos novamente uma convergência para uma distribuição semelhante à distribuição de Boltzmann. Em contrapartida, o efeito do torque de autoalinhamento ainda é perceptível mesmo para altas intensidades de ruído. Nas figuras 11 (d), (h) e (i), nota-se que, com o aumento da mobilidade angular  $\beta$ , a FDP se torna cada vez mais localizada, o que pode ser resultado da diminuição da área dos loops com o aumento de  $\beta$  (seção 3.2.2.2). Esse comportamento é evidenciado na figura 11 (m), onde o desvio padrão das coordenadas  $x$  e  $y$  da partícula decresce com o aumento de  $\beta$ , sugerindo que a difusão efetiva  $D_{\text{eff}}$  de uma partícula autopropelida com torque de autoalinhamento não é apenas função  $D$  e  $v_0$ , mas também função de sua mobilidade angular  $\beta$ .

#### 4.1.3 Conjunto caótico não atrativo no potencial anarmônico

Para  $\beta \lesssim 1$ , a dinâmica da partícula ativa com ruído finito para os potenciais anisotrópicos considerados (seção 3.3) são semelhantes à dinâmica observada no potencial elíptico. No entanto, durante a análise das FDPs para um dos potenciais anisotrópicos analisados, observamos um comportamento distinto quando  $D$  é pequeno e  $\beta$  é grande.

Figura 12 – Gráficos de densidade da função de distribuição de probabilidade no estado estacionário  $\mathcal{P}(x, y)$  de uma partícula ativa no potencial anarmônico  $V_3(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$  para diferentes intensidades de ruído  $D$  e  $\beta = 15$  (parte superior) e 25 (parte inferior). Para uma melhor visualização, nas duas primeiras colunas (a, b, f, g) os gráficos da FDP se encontram em escala logarítmica. As linhas tracejadas vermelhas indicam a linha isóclina crítica instável.

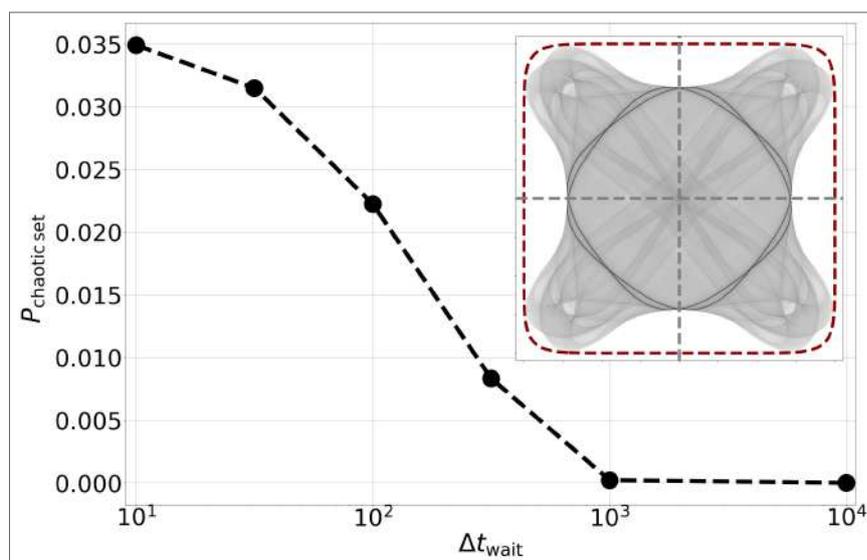


Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022)

Na figura 12, apresentamos as FDPs de uma partícula ativa confinada ao potencial  $V_3(x, y) =$

$\frac{1}{6}(x^6 + y^6)$  em função da intensidade de ruído  $D$  para dois valores de  $\beta$ . Para  $\beta = 15$ , a dinâmica determinística estacionária da partícula é periódica, enquanto que para  $\beta = 25$  é caótica, como já mostrado nas figuras 9 (c), 10 (k) e (l). Na presença de ruído observamos uma espécie de coexistência entre a órbita periódica e um conjunto complexo de pontos visitados, que se assemelha ao atrator caótico presente quando  $\beta \geq 25$ . Vale salientar que para valores baixos de  $D$ , a probabilidade de encontrar a partícula nesse conjunto complexo é muito menor do que a probabilidade de encontra-la na órbita periódica em  $\beta = 15$ . De fato, para uma boa visualização desse conjuntos foi necessário o uso da escala logarítmica [figuras 12 (a), (b), (f) e (g)]. Vale ressaltar que, embora a probabilidade de se estar nesse conjunto complexo seja baixa, esse comportamento é completamente diferente do obtido na dinâmica no potencial elíptico, onde para  $D$  pequeno a FDP se espalha suavemente em torno da órbita determinística, mesmo em escala logarítmica [figuras 11 (a), (e) e (i)]. Para  $D \gtrsim 10^{-2}$ , a similaridade entre a FDP para  $\beta = 15$  e  $\beta = 25$  pode ser observada em escala linear, uma vez que as órbitas periódicas não conseguem mais ser identificadas na PDF nesse regime de ruído. Para intensidade forte de ruído ( $D \gtrsim 1$ ) a FDP para ambos  $\beta$  assumem a forma de uma cruz de malta, figuras 12 (d) e (i), até finalmente colapsar para uma distribuição semelhante à distribuição de Boltzmann em  $D \sim 10$ , figuras 12 (e) e (j).

Figura 13 – A probabilidade de encontrar a partícula no conjunto caótico transiente, calculada após um tempo de espera  $\Delta t_{\text{wait}}$ , como função de  $\Delta t_{\text{wait}}$  para  $D = 0$  e  $\beta = 15$ . Inserção: função de densidade de probabilidade para  $\Delta t_{\text{wait}} = 10\tau_0$ , apresentando o conjunto caótico transiente e as órbitas periódicas.



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022)

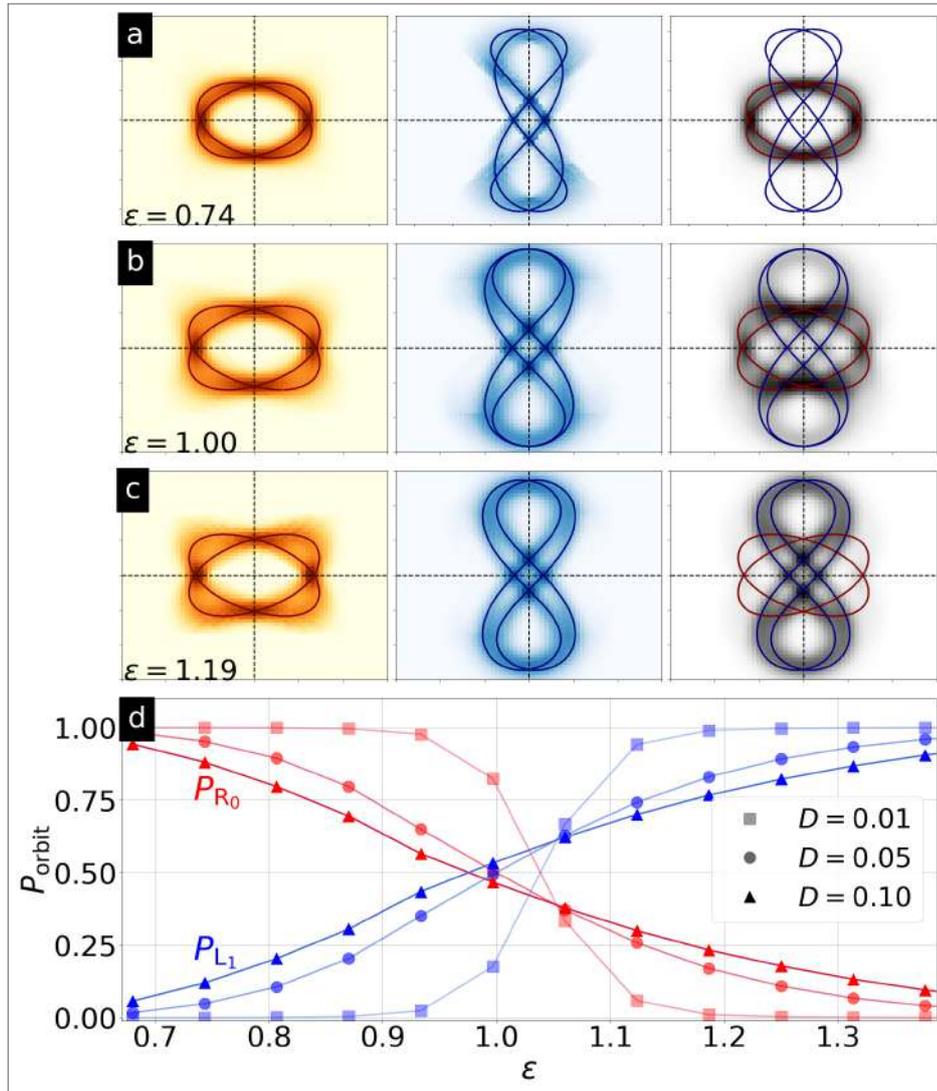
Embora os padrões observados nas FDPs para ambos valores de  $\beta$  sejam similares, existe

uma importante diferença quando consideramos a origem física desses padrões. O conjunto caótico para  $\beta = 25$  é um atrator estável no limite determinístico e domina a dinâmica da partícula autopropelida no limite de baixo ruído. Em contrapartida, ao integrar as equações determinísticas ( $D = 0$ ) com  $\beta = 15$  para  $10^5$  condições iniciais aleatórias, verificamos que as órbitas periódicas são, de fato, os únicos atratores no espaço de fase, enquanto que o conjunto complexo observado é um conjunto caótico não atrativo. Trajetórias que iniciam próximas a um conjunto caótico não atrativo podem permanecer próximas por um longo tempo, entretanto, eventualmente escapam das redondezas do conjunto não atrativo convergindo para o comportamento que irá dominar o resto da dinâmica, em nosso caso, escapam para as órbitas periódicas atrativas. Em nossa estimativa, o tempo de transiente induzido pelo conjunto caótico não atrativo é da ordem de  $10^3 t_0$  (veja figura 13). Portanto, no limite determinístico, o conjunto caótico, mostrado no quadro destacado da figura 13, domina a dinâmica apenas durante um tempo finito, enquanto o sistema não é completamente capturado pela órbita periódica. Por outro lado, para ruído suficientemente grande, os escapes da partícula da órbita periódica se tornam mais frequentes, fazendo com que ela explore o conjunto caótico, levando à dominância do conjunto sobre a dinâmica após longo tempo. Esse fenômeno é conhecido como caos induzido por ruído (TÉL; LAI; GRUIZ, 2008), um fenômeno relevante para junções Josephon (IANSITI et al., 1985), modelos neurais (RYASHKO; SLEPUKHINA, 2017), e dinâmica populacional (BILLINGS; BOLLT; SCHWARTZ, 2002).

#### 4.1.4 Coexistência das fases orbitais no potencial elíptico

No diagrama das fases orbitais presente na figura 8 (e) observam-se grandes regiões de coexistência entre órbitas periódicas com topologia diferente. Dentre as regiões, selecionamos uma zona de coexistência entre órbitas ovais (R0) e lemniscatas (L1) e estudamos a probabilidade da partícula estar nas órbitas R0 ou L1 em função do parâmetro  $\varepsilon$ . Para realizar este estudo, fixamos  $\beta = 10$  e variamos  $\varepsilon$  no intervalo  $0.7 < \varepsilon < 1.3$ , cobrindo aproximadamente toda a largura da zona de coexistência entre as órbitas. Para determinar qual órbita é mais provável e qual atrator domina a FDP da partícula quando o ruído é finito, fizemos uso das bacias de atração das órbitas R0 e L1 no espaço de fase, calculadas como descrito na seção 3.2.2.3. Com o auxílio das bacias, calculamos a FDP de encontrar a partícula em uma determinada órbita. Na figura 14 (a)-(c) apresentamos as FDPs parciais e totais para  $D = 0.05$  e três valores distintos de  $\varepsilon$ . A probabilidade de encontrar a partícula na fase R0,  $P_{R0}$ , ou na fase

Figura 14 – (a)-(c) Mapas de densidade das funções de distribuição de probabilidade estacionária de encontrar a partícula na fase R0 (esquerda), L1 (centro), e em qualquer lugar (direita) para diferentes valores de  $\varepsilon$  na coexistência com  $\beta = 10$  e  $D = 0.05$  fixos. (d) Probabilidades totais de encontrar a partícula nas fases R0 (vermelho) e L1 (azul) em função de  $\varepsilon$  para diferentes intensidades de ruído e  $\beta = 10$  fixo.



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; CABRAL; SILVA, 2022)

$L_1$ ,  $P_{L_1}$ , é apresentada na figura 14 (d) para 3 intensidades de ruído diferentes. Os resultados demonstram que, à medida que  $\varepsilon$  aumenta, a FDP que no início do intervalo é dominada pelas órbitas R0 sofre uma transição contínua, passando a ser dominada pelas órbitas L1. Além disso, quando  $D$  é aumentado,  $|P_{R_0} - P_{L_1}|(\varepsilon)$  diminui, evidenciando o aumento do número de escapes entre as órbitas R0 e L1.

## 4.2 ESCAPE ENTRE ÓRBITAS PERIÓDICAS

Nesta seção, temos como objetivo investigar os escapes induzidos por ruído entre os atratores da fase orbital. Especificamente, estamos interessados nos escapes que ocorrem em baixas intensidades de ruído. Como vimos na seção 2.3, a energia de ativação pode ser extraída a partir de dados do tempo médio de escape, ou a partir do método do caminho mais provável de escape. A seguir, estimaremos a energia de ativação para o escape entre as órbitas periódicas, no limite em que  $D \rightarrow 0$ , utilizando as duas abordagens mencionadas:

1. Calculando a energia de ativação pela integral de ação sobre o *caminho mais provável de escape* (CMPE), como descrito na seção 2.3.2
2. Calculando numericamente o tempo médio de escape  $\tau_{\text{esc}}$  entre as órbitas realizando médias sobre o escape de muitas partículas integrando as equações (4.1) e (4.2) no limite de baixo ruído. Nesse limite, a energia de ativação é extraída realizando um ajuste linear em  $\ln \tau_{\text{esc}}$ , que chamaremos de ajuste de Arrhenius.

### 4.2.1 CMPE para a partícula autopropelida

As equações de movimento para os caminhos mais prováveis de escape associado às equações 4.1 e 4.2 são obtidas usando as equações 2.87 e 2.88

$$\dot{\mu} = F_{\mu} + 2u_{\mu}p_{\mu}, \quad (4.9)$$

$$\dot{p}_{\mu} = -\sum_{\nu} p_{\nu} \frac{\partial F_{\nu}}{\partial \mu}. \quad (4.10)$$

para  $\mu = x, y, \theta$ ,  $u_x = u_y = u$ ,  $u_{\theta} = 1$  e funções determinísticas  $F_{\mu}$

$$F_x = \cos \theta - V_x, \quad (4.11)$$

$$F_y = \sin \theta - V_y, \quad (4.12)$$

$$F_{\theta} = \beta [V_x \sin \theta - V_y \cos \theta]. \quad (4.13)$$

Consequentemente, o *sistema dinâmico para os caminhos mais prováveis de escape* (SDCMPE) é dado por:

$$\dot{x} = \cos \theta - V_x + 2up_x \quad (4.14)$$

$$\dot{y} = \sin \theta - V_y + 2up_y \quad (4.15)$$

$$\dot{\theta} = \beta [V_x \sin \theta - V_y \cos \theta] + 2p_\theta \quad (4.16)$$

$$\dot{p}_x = V_{xx}p_x + V_{xy}p_y - \beta [V_{xx} \sin \theta - V_{xy} \cos \theta] p_\theta, \quad (4.17)$$

$$\dot{p}_y = V_{xy}p_x + V_{yy}p_y - \beta [V_{xy} \sin \theta - V_{yy} \cos \theta] p_\theta, \quad (4.18)$$

$$\dot{p}_\theta = \sin \theta p_x - \cos \theta p_y - \beta [V_x \cos \theta + V_y \sin \theta] p_\theta, \quad (4.19)$$

Sendo a integral de ação

$$\mathcal{S} = \int_0^T [u(p_x^2 + p_y^2) + p_\theta^2] dt, \quad (4.20)$$

calculada ao longo da trajetória. Portanto, os caminhos mais prováveis de escape de uma bacia de atração obedecem ao sistema de equações hexadimensional. Assim como nas integrações numéricas presentes no capítulo 3, todas as integrações do sistema dinâmico acima foram realizadas usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem com passo  $\Delta t = 10^{-3}$ .

#### 4.2.2 Transição entre órbitas circulares

Para os potenciais com simetria radial, como vimos na seção 3.1.4, as órbitas circulares são mapeadas no plano  $\chi r$  em dois pontos  $(\pm\chi_o, r_o)$  com  $\chi = 0$  demarcando a separatriz entre as bacias de atração. Nesta seção, calcularemos a energia de ativação para o escape entre as órbitas circulares presentes em dois tipos de confinamento com simetria radial: o confinamento de parede dura e o confinamento em poço harmônico, modelado pelo potencial harmônico. Para o confinamento de parede dura, é possível aproximar a dinâmica da partícula como sendo unidimensional, permitindo a obtenção de uma estimativa analítica para energia de ativação associada ao único caminho de escape. Para o confinamento em poço harmônico, por outro lado, a aproximação não é válida. Nesse caso, considerando o potencial harmônico, o CMPE é obtido pela dupla minimização da ação  $\mathcal{S}$ , sendo escolhido dentre diversas condições iniciais para os momentos conjugados  $p$ .

#### 4.2.2.1 Confinamento em parede dura

Consideramos uma partícula ativa de raio  $R_p$  confinada geometricamente por uma parede circular de raio  $R_w$  semelhante aos experimentos realizados com algas e bactérias nas referências (OSTAPENKO et al., 2018; CODUTTI et al., 2022). Nesse tipo de confinamento, a interação entre a parede e a partícula se dá via forças estéricas devido à aproximação com os átomos da parede. Portanto,  $V'(r)$  é essencialmente zero para  $r < R \simeq R_w - R_p$  e muito grande para  $r > R$ . Isto resulta em um  $V''(r)$  grande em torno do raio  $R_o$  da órbita, tornando esse problema essencialmente unidimensional, conforme mostraremos a seguir.

Realizando a linearização das equações 3.43 e 3.44 em torno dos pontos fixos orbitais  $(\chi_o, R_o)$  (equações 3.51 e 3.52) com  $V''(R) \gg 1/R$  obtemos o seguinte sistema linearizado:

$$\begin{bmatrix} \delta \dot{r} \\ \delta \dot{\chi} \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} -V''(R_o) & -\omega R_o \\ \omega R_o \beta V''(R_o) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta r \\ \delta \chi \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

Os autovalores e autovetores associados são dados por:

$$\mathbf{W}_+ = \frac{\omega R_o}{V''(R_o)} \hat{e}_r + 1 \hat{e}_\chi, \quad \text{com } \lambda_+ = -\beta \omega^2 R_o^2, \quad (4.22)$$

$$\mathbf{W}_- = \frac{1}{\beta \omega R_o} \hat{e}_r + 1 \hat{e}_\chi, \quad \text{com } \lambda_- = -V''(R_o). \quad (4.23)$$

A solução do sistema linear associado é dada por  $\delta \mathbf{r} = \mathbf{W}_+ e^{\lambda_+ t} + \mathbf{W}_- e^{\lambda_- t}$ , no limite onde  $V''(R_o) \gg 1$

$$\omega R_o / V'' \longrightarrow 0, \quad (4.24)$$

$$e^{-V'' t} \longrightarrow 0, \quad (4.25)$$

portanto,

$$\begin{bmatrix} \delta r \\ \delta \chi \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-\beta \omega^2 R_o^2 t} \quad (4.26)$$

isto é,  $\delta r \simeq 0$ , portanto, o movimento é efetivamente unidimensional. Nessas condições, substituindo  $V'(r) = \cos \chi$  na equação 3.44, obtemos que a dinâmica estocástica da partícula autopropelida é regida aproximadamente por:

$$\dot{\chi} = F(\chi) + \xi = \beta \sin \chi \left( \cos \chi - \frac{1}{R_o \beta} \right) + \xi(t), \quad (4.27)$$

onde  $\xi$  é ruído gaussiano branco com coeficiente de difusão  $D$ . Analogamente ao que foi feito no capítulo 2.3.1, o “potencial” associado ao escape é

$$F(\chi) = -\frac{d\psi}{d\chi} = \beta \sin \chi \left( \cos \chi - \frac{1}{R_o\beta} \right), \quad (4.28)$$

$$\psi(\chi) = \frac{\beta}{2} \cos \chi \left( \cos \chi - \frac{2}{R_o\beta} \right), \quad (4.29)$$

ao qual nos referiremos como pseudo-potencial, para evitar ambiguidade com o potencial  $V(x, y)$  que modela o confinamento. Note que  $\psi(\chi)$  passa a ter dois mínimos quando  $R_o\beta > 1$  [figura 15-(a)], capturando corretamente a condição de existência do par de pontos fixos orbitais discutida na seção 3.1.4 e ilustrando a quebra espontânea de simetria em  $R_o\beta = 1$ . Na seção 2.3.1, vimos que, em uma dimensão, a integral de ação pode ser calculada analiticamente. Assim, substituindo  $\psi(\chi)$  na equação 2.75, obtemos que a pseudo-barreira de energia associada ao escape de  $(\pm\chi_o, R_o)$  até a separatriz  $\chi = 0$  é função da mobilidade angular<sup>3</sup>  $\beta$

$$\mathcal{S} = \psi(0) - \psi(\chi_o) = \frac{\beta}{2} \left( 1 - \frac{1}{R_o\beta} \right)^2. \quad (4.30)$$

Finalmente, substituindo  $\psi(\chi)$  na equação (2.37), a fórmula de Kramers para a equação (4.27) nos dá o prefator da exponencial

$$\tau_{esc} = \frac{\beta}{2\pi} \sqrt{\left( 1 - \frac{1}{R_o\beta} \right) \left( 1 - \frac{1}{R_o^2\beta^2} \right)} \exp \left[ \frac{\beta}{2D} \left( 1 - \frac{1}{R_o\beta} \right)^2 \right]. \quad (4.31)$$

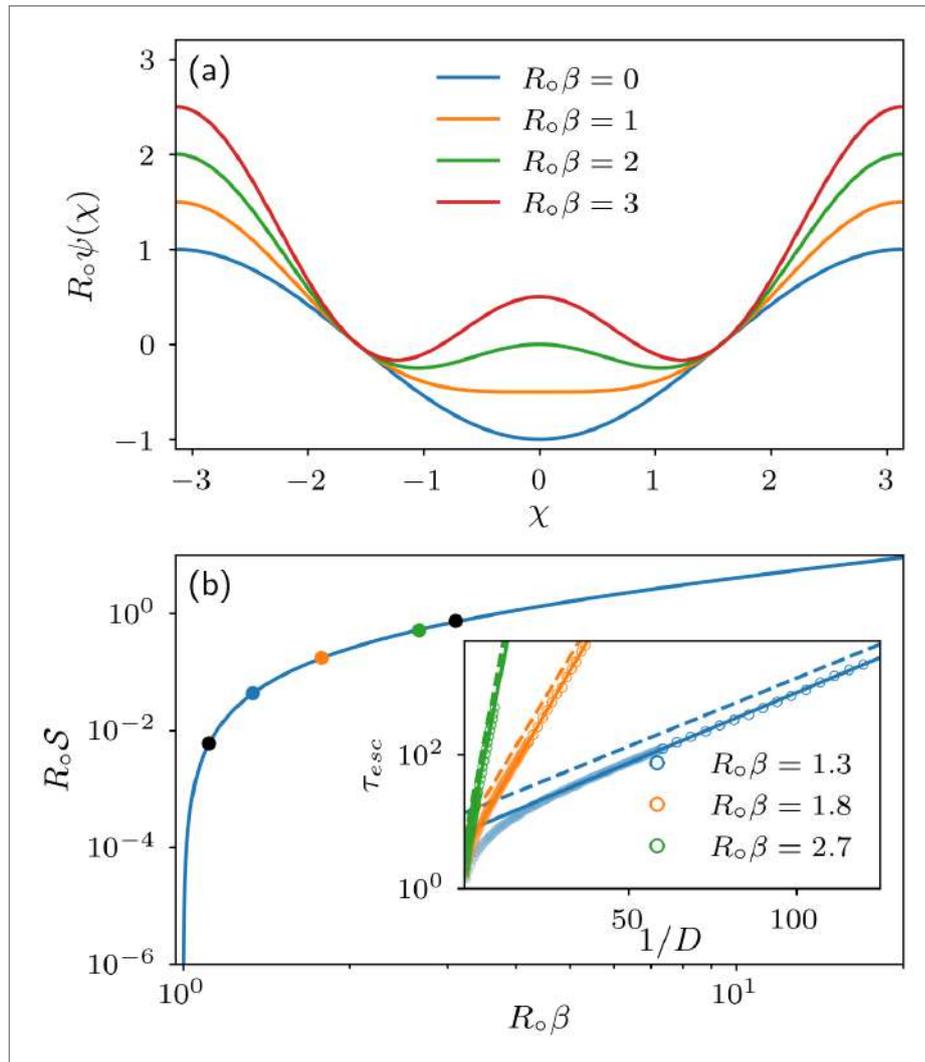
Para validar esses resultados teóricos, realizamos simulações numéricas das equações (4.1) e (4.2) para uma partícula circular de raio  $R_p$  confinada geometricamente por uma parede circular de raio  $R_w$  para diferentes valores de intensidade de ruído  $D$  e considerando as três dimensões originais do problema,  $(x, y, \theta)$ . A interação partícula-parede é modelada por um potencial de Lennard-Jones truncado (WCA) (WEEKS; CHANDLER; ANDERSEN, 1971),

$$V(d) = \begin{cases} 0, & \text{se } d > 2^{1/6}, \\ 4\alpha(d^{-12} - d^{-6}) - \alpha, & \text{se } d < 2^{1/6}, \end{cases} \quad (4.32)$$

onde  $d = (R_w - r)/R_p$  é a distância radial reduzida entre o centro da partícula e a parede. Em nossas simulações para o WCA utilizamos  $R_w = 1$ ,  $R_p = 0.1$  e  $4\alpha = 0.5$  já nas unidades adimensionais. Para cada valor de  $D$ , as equações de movimento foram integradas seguindo um algoritmo estocástico de Runge-Kutta de segunda ordem (seção 2.1), iniciando em  $(+\chi_o, R_o)$  até que a partícula cruze pela primeira vez a separatriz, que neste caso corresponde à reta

<sup>3</sup> Lembre que  $R_o = R_o(\beta)$ , equação 3.52.

Figura 15 – (a)  $R_o\psi$  para uma partícula ativa confinada por uma parede rígida em função do ângulo de inclinação  $\chi$  para diferentes valores da mobilidade angular  $R_o\beta$  [equação (4.29)]. (b)  $R_oS_{min}$  para a mudança entre órbitas no sentido horário e anti-horário como uma função de  $R_o\beta$  [Eq.(4.30)]. Os símbolos são estimativas numéricas de  $R_o\Delta\psi$  obtidas a partir de simulações diretas das equações de Langevin. Inserção: gráfico semilogarítmico do tempo médio de escape,  $\tau_{esc}$ , em função de  $1/D$  calculado a partir de simulações (símbolos) e analiticamente usando a equação (4.31) (tracejado) para os valores selecionados de  $R_o\beta$ . Os símbolos abertos correspondem à parte linear dos dados usada para extrair a energia de ativação por um ajuste de Arrhenius (linhas sólidas). Para o intervalo selecionado  $\beta \in [0, 20]$ ,  $R_o(\beta)$  varia muito pouco,  $R_o(\beta) \simeq 0.88$ , portanto, o comportamento de  $R_o\psi$  e  $R_oS$  são similares à  $\psi$  e  $S$ , respectivamente.



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; SILVA, 2023)

$\chi = 0$ . O tempo médio de escape,  $\tau_{esc}$ , foi estimado pela média do tempo de cruzamento sobre  $10^4$  realizações da força estocástica. Uma vez que  $D$  se torna baixo o suficiente, os resultados numéricos de  $\tau_{esc}(1/D)$  convergem para fórmula de Kramers [equação (4.31)], como ilustrado na inserção presente na figura 15. A inclinação da reta ajustada aos pontos no regime linear (pontos não preenchidos) é tomada como uma estimativa da energia de ativação. Finalmente, na figura 15-(b), mostramos a concordância entre a energia de ativação estimada a partir das

simulações e o resultado analítico presente na equação 4.30.

#### 4.2.2.2 Confinamento em poço harmônico

Como segundo exemplo, consideramos o confinamento em poço harmônico modelado pelo potencial harmônico

$$V(x, y) = \frac{1}{2} (x^2 + y^2) = \frac{1}{2} r^2, \quad (4.33)$$

já escrito em nossas unidades. Substituindo o potencial acima nas condições de pontos fixos presentes na seção 3.1.4 obtemos:

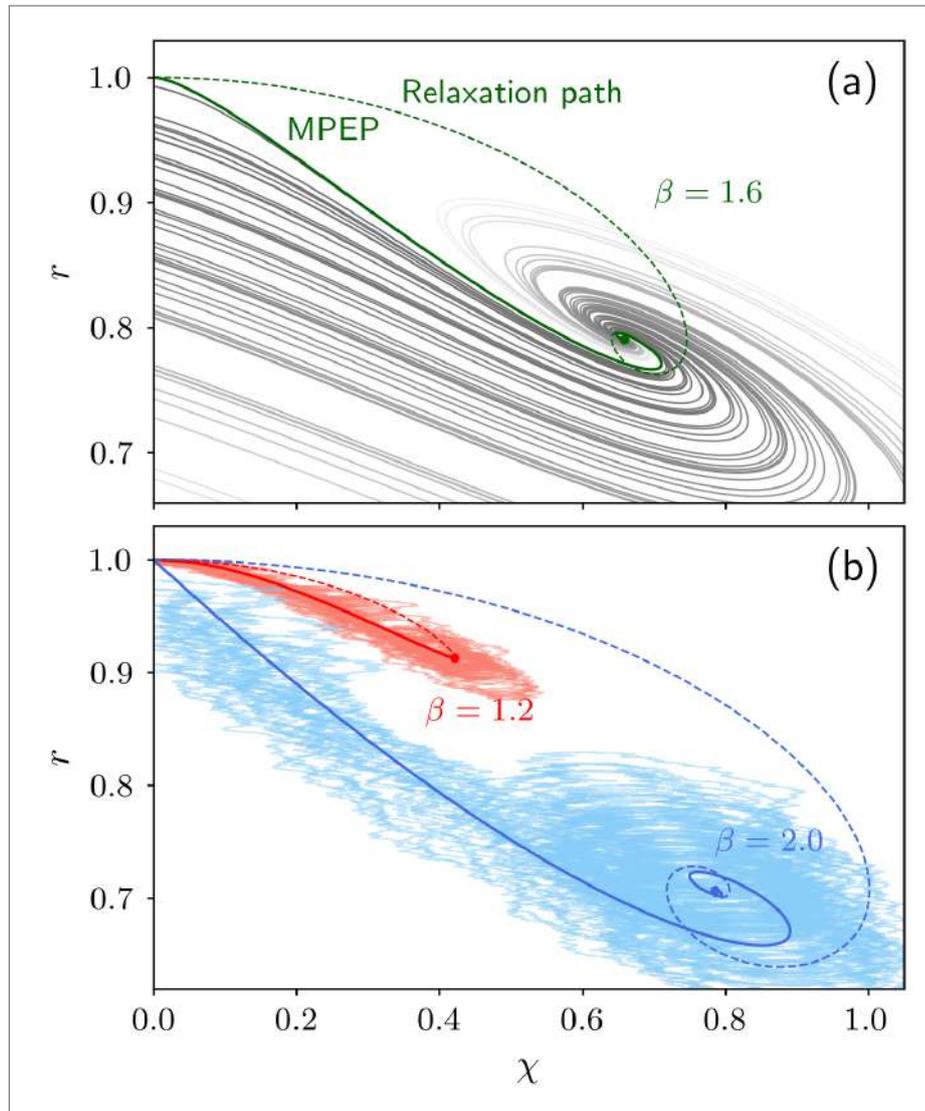
- Isóclina crítica: par  $(r_f = 1, \chi_f = 0)$  estável (instável) para  $\beta < 1$  ( $\beta > 1$ ).
- Pontos fixos orbitais: pares  $\left( R_o = \frac{1}{\sqrt{\beta}}, \chi_o = \pm \arccos \left\{ \frac{1}{\sqrt{\beta}} \right\} \right)$  estáveis (instáveis) para  $\beta > 1$  ( $\beta < 1$ ).

O problema de escape no potencial harmônico não pode ser reduzido a uma dimensão. Nesse caso, o CMPE é escolhido dentre  $N = 10^5$  trajetórias de escape, regidas pelo sistema dinâmico associado presente na seção 4.2.1 e iniciadas em  $\{(x_o, y_o, \theta_o, p_{xi}, p_{yi}, p_{\theta i})\}_{i=1}^{i=N}$ , sendo os momentos  $p_i$  distribuídos uniformemente em uma superfície esférica de raio  $10^{-6}$  centrada em  $(p_x, p_y, p_\theta) = (0, 0, 0)$ . O sorteio dos momentos realizado dessa maneira permite uma amostragem de diferentes direções de partidas para as trajetórias no espaço de fase. O CMPE é escolhido como o caminho que minimiza  $S$  globalmente, o que possui a menor ação dentre as  $10^5$  trajetórias.

Na Fig.16 apresentamos o CMPE obtido por este procedimento para  $\beta = [1.2, 1.6, 2.0]$  (em nossas unidades) e  $u = 0$  (ruído translacional desprezível). Em nossas simulações, observamos geralmente que:

1. Para valores maiores de  $\beta$ , o CMPE apresenta uma forma espiral, significando que a trajetória de escape geralmente oscila ao redor da órbita circular antes de alcançar a fronteira.
2. O CMPE termina no ponto  $(\chi, 0) = (0, r_f)$ , que é o ponto fixo instável da isóclina crítica.

Figura 16 – O CMPE (linha sólida) saindo da órbita no sentido anti-horário ( $+\chi_o, R_o$ ) e o caminho de relaxação (tracejado) para a órbita no sentido horário para uma partícula ativa confinada em um potencial parabólico para (a)  $\beta = 1.6$  e (b)  $\beta = 1.2$  e 2.0. As linhas em escala de cinza em (a) são 50 caminhos de escape não ótimos escolhidos aleatoriamente, que minimizam a ação  $\mathcal{S}$  apenas localmente; quanto mais clara a linha, maior a ação ao longo do caminho correspondente. As linhas ruidosas transparentes em (b) representam um pequeno subconjunto de 20 trajetórias de escape obtidas pela integração numérica do problema estocástico original para  $\beta = 1.2$  (vermelho) e 2.0 (azul) com intensidades de ruído  $D = 0.001$  e  $D = 0.01$ , respectivamente.

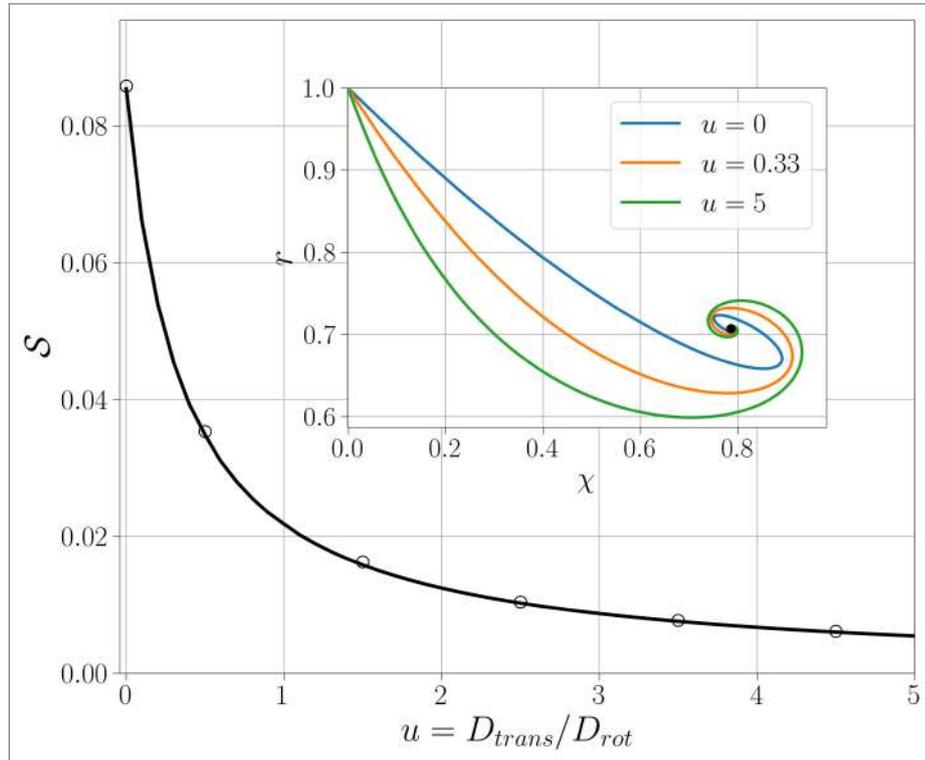


Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; SILVA, 2023)

3. A relaxação do ponto de sela para a nova órbita ou de volta para a original (linha tracejada) não é antiparalela ao caminho ótimo de escape, o que é uma consequência da irreversibilidade temporal do sistema.

Note que as tentativas de escape não ótimas [mostradas como linhas sombreadas de cinza na Fig.16-(a)] terminam em uma posição radial  $r < r_f$ . Esses caminhos possuem integral de ação mais alta (tom de cinza mais claro) e, portanto, são rotas menos prováveis.

Figura 17 – Ação mínima para a transição entre órbitas no sentido horário e anti-horário de uma partícula ativa confinada por um potencial harmônico em função de  $u = D_t/D_r$  ( $D_{trans}/D_{rot}$ ). Os símbolos correspondem às energias de ativação estimadas pelo ajuste dos dados no limite de baixo ruído obtidos diretamente de integrações das equações de Langevin. Inseção: os caminhos mais prováveis de escape no plano  $\chi r$  calculados para alguns valores selecionados de  $u$ .



Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; SILVA, 2023)

De modo análogo ao que fizemos na seção 4.2.2.1, além do CMPE, calculamos o tempo médio de escape  $\tau_{esc}$  em função da intensidade do ruído  $D$ . Como já mencionado, obtemos a média do tempo de escape simulando escapes de partículas autopropelidas regidas pelas equações de Langevin no regime de baixo ruído. A energia de ativação para o escape é extraída por ajuste linear na parte aproximadamente linear dos dados  $\log \tau_{esc}$  versus  $(1/D)$ . Novamente, as energias de ativação estimadas numericamente estão em concordância com a ação integrada ao longo do CMPE. Na Fig. 16-(b), comparamos o CMPE com 20 realizações de escape escolhidas aleatoriamente e obtidas integrando as equações de Langevin para  $\beta = 1.2$  ( $D = 0.001$ ) e  $\beta = 2.0$  ( $D = 0.01$ ). Os valores de  $D$  foram escolhidos dentro da faixa onde os dados da simulação  $\log \tau_{esc}$  escalam linearmente com  $1/D$ . Embora as trajetórias de escape sejam consideravelmente ruidosas, elas seguem, em média, o CMPE teórico e o escape através da separatriz da bacia de atração ocorre em pontos próximos ao do CMPE.

Ainda para o potencial harmônico, consideramos o caso onde o ruído translacional não é desprezível, isto é  $u \neq 0$ . Em geral, como mencionado na seção 4.1.1, em boa parte dos

sistemas de interesse o ruído rotacional é mais importante que o ruído translacional. Para partículas ativas esféricas no equilíbrio, a relação entre o ruído translacional e rotacional é dada por  $u = D_t/D_r = \sigma^2/3$ , onde  $\sigma$  é o diâmetro da partícula (BECHINGER et al., 2016). Como  $D_t = uD$  e  $D_r = D$ , o fato de que  $\sigma \ll r_f$ , isto é, a partícula ser usualmente muito menor que a região de confinamento, implica que limitar  $u < 1$  (em nossas unidades) é uma escolha mais realista. Entretanto, no que se segue, com o intuito de se ter uma visão mais ampla do efeito do ruído translacional, também consideraremos  $u > 1$ .

Para a análise do efeito do ruído translacional, calculamos a ação associada ao CMPE em função  $u$  para  $\beta$  fixo em  $\beta = 2$ . Além disso, para alguns valores de  $u$ , estimamos a energia de ativação a partir do ajuste linear em  $\ln \tau_{\text{esc}}$ , obtido via integração numérica das equações de Langevin. Os resultados dessa análise encontram-se na figura 17. Em suma, observamos novamente uma ótima concordância entre as energias de ativação obtidas pelo CMPE (linha) e pelo ajuste (pontos) no intervalo  $u \in [0, 5]$ . Os resultados evidenciam uma forte dependência do CMPE e da ação mínima correspondente em relação a  $u$ . Em geral, à medida que  $u$  aumenta, o CMPE oscila de forma mais violenta ao redor da órbita circular antes alcançar a separatriz (veja inserção), ao mesmo passo que a integral de ação correspondente diminui. Em particular, para  $u = 0.33$ , que corresponde a uma partícula esférica em equilíbrio térmico de raio  $r_f/2$ , a ação é aproximadamente metade do valor observado para o caso com difusão puramente rotacional ( $u = 0$ ).

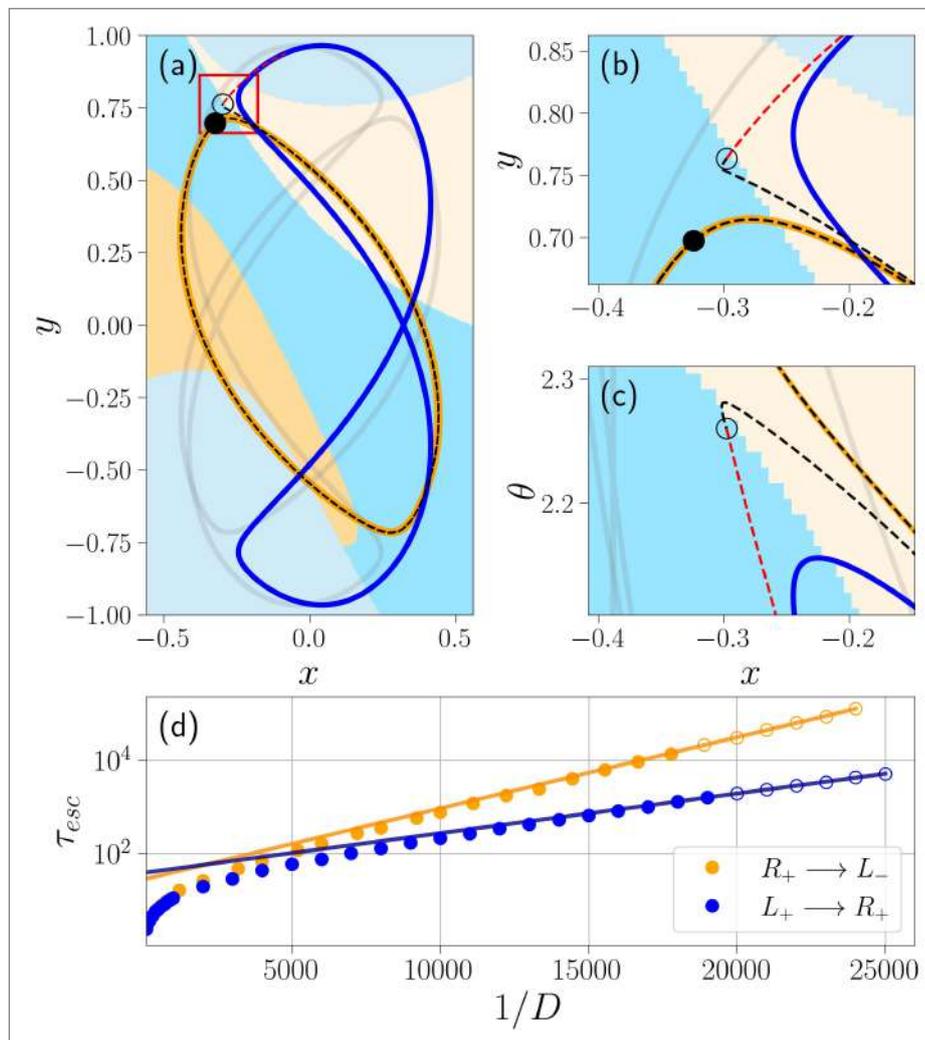
### 4.2.3 Transição entre órbitas não circulares

Nesta seção aplicaremos método do CMPE para o escape entre as órbitas do potencial elíptico

$$V(x, y) = \frac{1}{2} [(1 + \varepsilon)x^2 + y^2]. \quad (4.34)$$

Como vimos na seção 3.2, o potencial admite a coexistência entre duas órbitas de rotação,  $R_{1+} \equiv R_+$  e  $R_{1-} \equiv R_-$ , e duas de libração,  $L_{1+} \equiv L_+$  e  $L_{1-} \equiv L_-$ , para  $\beta = 2.5$  e  $\varepsilon = 1.15$  [veja figura 8-(e)]. Como já mencionado, R e L rotulam a carga topológica da órbita, enquanto o subscrito “ $\pm$ ” distingue as duas órbitas irmãs com simetria de reflexão associadas à mesma topologia. Portanto, para os valores de  $\varepsilon$  e  $\beta$  escolhidos, temos como possibilidades o escape entre órbitas de mesma topologia e o escape entre órbitas de topologias distintas. Para esse estudo iremos novamente negligenciar o ruído translacional, isto é,  $u = 0$ . O procedimento

Figura 18 – (a) Caminho de escape mais provável (linhas tracejadas pretas) da órbita  $R_+$  (laranja) e o caminho de relaxação (linhas tracejadas vermelhas) em direção a  $L_-$  (azul). Também são mostradas as órbitas  $R_-$  e  $L_+$  (linhas cinzas transparentes), que não estão envolvidas neste escape específico. Os fundos amarelo, laranja, azul e azul claro representam as bacias de atração de  $R_-$ ,  $R_+$ ,  $L_-$  e  $L_+$ , respectivamente. As bacias são projetadas no plano  $xy$  em  $\theta = 2.26$  rad, correspondendo à direção de  $\hat{n}$  no ponto onde a trajetória de escape entra pela primeira vez na bacia de atração da órbita de destino em todas as três projeções,  $xy$  (b),  $x\theta$  (c) e  $y\theta$  (não mostrado). (d) Tempo médio de escape  $\tau_{esc}$  versus  $1/D$  obtido a partir de simulações diretas de Langevin dos escapes  $R_+ \rightarrow L_{\pm}$  e  $L_- \rightarrow R_{\pm}$  (símbolos). Os símbolos abertos foram selecionados para ajustes de Arrhenius (linhas), o que nos permitiu estimar as energias de ativação  $E_{R \rightarrow L}^a = 3.5 \times 10^{-4}$  e  $E_{L \rightarrow R}^a = 2.0 \times 10^{-4}$ , notavelmente próximas das ações mínimas correspondentes,  $\mathcal{S}_{R \rightarrow L} = 3.4 \times 10^{-4}$  e  $\mathcal{S}_{L \rightarrow R} = 1.9 \times 10^{-4}$ .

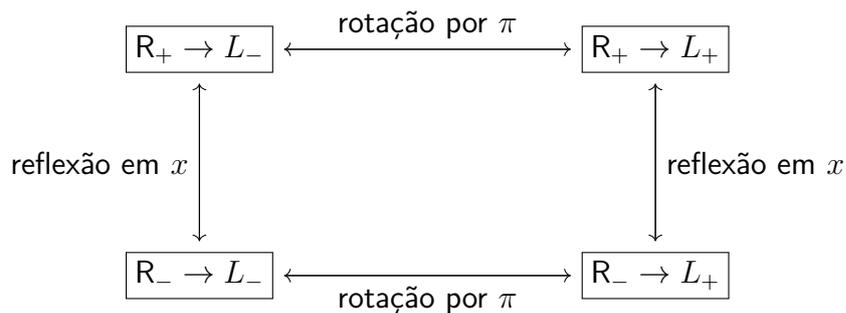


Fonte: O autor, publicada em (DAMASCENA; SILVA, 2023)

para encontrar o CMPE neste caso é consideravelmente mais desafiador do que nos exemplos anteriores. Primeiramente, as bacias de atração são altamente não triviais, tornando necessário mapeá-las numericamente, como descrito na seção 3.2.2.3. Em segundo lugar, pela falta de simetria radial, a órbita não pode ser colapsada em um único ponto no plano  $\chi r$ . Nesse caso, para obter o CMPE associado à órbita, escolhemos 100 pontos  $\mathbf{r}_j^{orbita} = (x_j, y_j, \theta_j)$  espaçados

uniformemente ao longo da órbita de origem e, para cada um deles, calculamos o CMPE dentre  $N = 10^5$  trajetórias de escape iniciadas em  $\{(x_j, y_j, \theta_j, p_{xi}, p_{yi}, p_{\theta i})\}_{i=1}^{i=N}$ , onde os  $10^5$  valores dos momentos são distribuídos uniformemente na superfície de uma esfera de raio  $10^{-6}$  e centrada em  $(p_x, p_y, p_\theta) = (0, 0, 0)$ . Conseqüentemente, o CMPE da órbita é escolhido como a trajetória de escape com menor energia de ativação dentre as  $10^7$  condições iniciais. Um exemplo de CMPE calculado seguindo este procedimento é mostrado na figura 18 para o caso em que  $R_+$  é a órbita de origem. O fundo colorido indica projeções das bacias de atração.

Em princípio, a compreensão completa das transições induzidas por ruído entre essas órbitas consistiria em investigar todas as 12 transições possíveis. Essa complexidade pode ser reduzida ao considerarmos as propriedades de simetria das equações (4.1) e (4.2). Como já visto na seção 3.1.3, o sistema dinâmico é invariante às transformações  $(x, y, \theta) \rightarrow (-x, -y, \theta + \pi)$  e  $(x, y, \theta) \rightarrow (x, -y, -\theta)$ , rotação em  $\pi$  e reflexão em relação ao eixo  $x$ , respectivamente. Portanto, para cada caminho de escape, existem outros três caminhos que podem ser mapeados exatamente para o primeiro por alguma combinação dessas operações de simetria. Por exemplo, sob uma rotação de  $\pi$ ,  $R_+$  se transforma em si mesma enquanto  $L_-$  se transforma em  $L_+$ . Isso pode ser inferido da figura 18-(a). Portanto, existe um caminho de  $R_+$  para  $L_+$  que é idêntico ao CMPE de  $R_+$  para  $L_-$  mostrado na Fig. 18, entretanto, transformado por uma rotação de  $\pi$ . Da mesma forma, os outros caminhos podem ser identificados ao aplicar operações de simetria, conforme ilustrado no diagrama a seguir.



Uma questão interessante é se todos os caminhos gerados por essas operações de simetria também minimizam a ação, ou seja, se todos eles são caminhos mais prováveis de escape. Para ser um CMPE, cada um deles deve ser solução do *sistema dinâmico para os caminhos mais prováveis de escape* (SDCMPE) presente na seção 4.2.1. Note que o SDCMPE não é invariante à transformação de rotação e reflexão definida acima. No entanto, podemos estender as transformações ao espaço de fase hexadimensional, exigindo também que  $(p_x, p_y, p_\theta) \rightarrow (-p_x, -p_y, p_\theta)$  sob rotações de  $\pi$  e  $(p_x, p_y, p_\theta) \rightarrow (p_x, -p_y, -p_\theta)$  sob reflexões em  $x$ . Dessa

forma, o SDCMPE se torna invariante, assim como a ação  $\mathcal{S}$ , uma vez que  $\mathcal{S}$  é indiferente ao sinal dos momentos conjugados. Portanto, todas as quatro transições entre órbitas de topologia diferentes são CMPEs degenerados, ou seja, possuem a mesma energia de ativação. Isso foi, de fato, verificado dentro da precisão numérica de nossos cálculos de  $\mathcal{S}_{min}$ , onde encontramos  $\mathcal{S}_{R \rightarrow L} = 3.4 \times 10^{-4}$ . Analogamente, todos os 4 CMPEs de libração para rotação também podem ser construídos a partir de um único escape, digamos, de  $L_-$  para  $R_+$ . Neste caso, nosso cálculo do CMPE leva a  $\mathcal{S}_{L \rightarrow R} = 1.9 \times 10^{-4}$ , revelando que, em geral, os escapes de R para L não são simétricos aos escapes de L para R.

Confirmamos essas observações realizando simulações diretas das equações de Langevin, que resultaram em um número semelhante de escapes de  $R_+$  para  $L_-$  e de  $R_+$  para  $L_+$  em toda faixa de valores de ruído investigados, bem como aproximadamente o mesmo valor de energia de ativação estimado a partir dos dados de  $\tau_{esc}$  no regime de baixo ruído [veja figura 18-(d)]. O mesmo se aplica para fugas de órbitas L. As energias de ativação para os escapes  $L \rightarrow R$  e  $R \rightarrow L$  foram estimadas de modo análogo ao descrito nos casos anteriores. Entretanto, nesse caso, a média foi realizada sobre  $5 \times 10^3$  escapes. Como nos exemplos anteriores, as energias de ativação estão em boa concordância com a integral de ação sobre os CMPEs correspondentes.

Por fim, calculamos os caminhos ótimos de escape entre órbitas com mesma carga topológica. Como esperado, esses escapes são simétricos, no sentido em que  $R_+ \rightarrow R_-$  tem a mesma energia de ativação que  $R_- \rightarrow R_+$ . No entanto, para os valores escolhidos de  $\beta$  e  $\varepsilon$ , as transições diretas entre órbitas com mesma carga topológica apresentaram energia de ativação consideravelmente maior:  $\mathcal{S}_{R \rightarrow R} \simeq 350\mathcal{S}_{R \rightarrow L}$  e  $\mathcal{S}_{L \rightarrow L} \simeq 10\mathcal{S}_{L \rightarrow R}$ . Portanto, no limite de baixo ruído, a transição da órbita  $R_+$  ( $L_+$ ) para sua gêmea  $R_-$  ( $L_-$ ) possivelmente só ocorre após a primeira visita à bacia de atração de uma das órbitas lemniscata (oval), ou seja,  $R_+ \rightarrow L_{\pm} \rightarrow R_-$  ( $L_+ \rightarrow R_{\pm} \rightarrow L_-$ ). De fato, em nossas simulações das equações de Langevin, transições entre órbitas de mesma carga topológica não foram observadas para  $D < 10^{-3}$ . Vale salientar que, esses resultados não são gerais, já que a hierarquia entre as transições depende das bacias de atração que, por sua vez, podem mudar completamente para outros valores dos parâmetros do sistema  $\beta$  e  $\varepsilon$ .

### 4.3 CONCLUSÃO DO CAPÍTULO

Neste capítulo, estudamos a dinâmica estocástica da partícula ativa confinada com torque de autoalinhamento. Iniciamos nosso estudo analisando a função de distribuição de probabi-

lidade (FDP) após longos tempos da partícula ativa. Como mencionado no capítulo 3, para níveis moderados de ruído, a dinâmica da partícula pode ser entendida como uma “competição” entre as estruturas atrativas presentes no espaço de fases determinístico da partícula e o ruído. A influência da “sombra” determinística na dinâmica estocástica torna-se evidente nas FDPs para ruído baixo e moderado, que assumem aproximadamente a forma da estrutura determinística estável.

Considerando uma FDP da fase orbital, quando  $D \ll 1$ , a FDP preserva a forma das órbitas periódicas atrativas da fase, indicando que a partícula segue aproximadamente a órbita. Quando  $D$  é maior, mas ainda moderado, a FDP continua semelhante à órbita, embora menos localizada sobre ela, refletindo que a partícula sofre desvios maiores em relação à órbita. Esse regime, onde a FDP ainda segue aproximadamente a forma da órbita, é denominado regime ativo. Com o aumento gradual do ruído, a FDP torna-se cada vez menos localizada, até que ocorre a transição para o regime passivo, no qual a partícula se descorrelaciona completamente das estruturas atrativas determinísticas, e sua FDP colapsa para uma distribuição semelhante à de Boltzmann.

Em especial, para o potencial  $V_3(x, y) = \frac{1}{6}(x^6 + y^6)$ , onde caos é possível, observamos um comportamento distinto de sua FDP em relação aos outros potenciais. Para um valor de  $\beta$  onde a dinâmica da partícula não é caótica e ruído moderado, sua FDP aponta uma possível coexistência entre a órbita periódica e um conjunto complexo de pontos visitados. Concluímos que esse comportamento se dá pela existência de um *conjunto caótico não atrativo*. Trajetórias que iniciam próximas a um conjunto desse tipo podem permanecer próximas a ele por um longo tempo, eventualmente escapando e convergindo para o atrator estável presente no espaço de fase. Quando desviada da órbita periódica pelo efeito do ruído, a partícula acaba explorando o conjunto caótico, podendo levar à dominância do conjunto sobre a órbita periódica, fenômeno conhecido como caos induzido por ruído.

Na segunda parte do capítulo, focamos nossa atenção nos escapes da partícula ativa entre as órbitas periódicas da fase orbital. O escape entre órbitas é configurado pela saída da partícula ativa de uma bacia de atração para outra. Nesse caso, em geral, o problema não pode ser descrito como transições entre os mínimos de um potencial efetivo e passa a ser descrito por trajetórias de escape de uma bacia de atração. Embora não seja possível aplicar a fórmula de Kramers, no limite onde  $D \rightarrow 0$ , o tempo médio de escape entre as bacias continua apresentando dependência exponencial, de onde pode-se extrair a energia de ativação  $E_a$  associada ao escape.

Por outro lado, o problema de escape entre bacias pode ser abordado de outro modo utilizando um princípio de mínima ação, que consiste em encontrar o *caminho mais provável de escape* (CMPE) da bacia de atração no limite em que  $D \rightarrow 0$ . O CMPE é obtido através da minimização global de um funcional  $\mathcal{S}$ , que possui a mesma estrutura da ação clássica, sendo a energia de ativação  $E_a$  do escape a integral de ação do funcional sobre o CMPE.

Como primeiro passo, calculamos a energia de ativação,  $E_a$ , para os escapes entre as órbitas circulares de sentido horário e anti-horário presentes no confinamento em parede dura e no confinamento harmônico. Para o confinamento em parede dura, o problema pode ser reduzido a uma dimensão, onde, em especial, a integral de ação sobre o CMPE, isto é,  $E_a$ , pode ser obtida analiticamente. Nesse caso particular, comparamos a  $E_a$  obtida analiticamente com a obtida pelos dados do tempo médio de escape. Para o confinamento harmônico, por outro lado, a integração de ação sobre o CMPE não pôde ser obtida analiticamente. Nesse caso, obtemos diversas trajetórias de escape da bacia de atração que minimizam  $\mathcal{S}$  localmente e, dentre elas, selecionamos a trajetória que minimiza  $\mathcal{S}$  globalmente, obtendo, portanto,  $E_a$  numericamente pelo princípio de mínima ação. Analogamente, calculamos  $E_a$  utilizando os dados do tempo médio de escape. Em ambos os casos, encontramos uma boa concordância entre as energias de ativação obtidas pelo CMPE e pelo tempo médio de escape. Além disso, verificamos que, no limite onde  $D \rightarrow 0$ , os eventos raros de escape, obtidos pela integração das equações de Langevin, ocorrem aproximadamente em torno do CMPE.

Em seguida, realizamos a mesma comparação para escapes na coexistência entre quatro órbitas estáveis no potencial elíptico: duas de libração (L) e duas de rotação (R). Embora, a princípio, existam quatro caminhos mais prováveis de escape entre as órbitas de libração e rotação, duas partindo de cada órbita de libração, pela simetria do sistema dinâmico, todos os quatro CMPEs podem ser obtidos a partir de um único CMPE. Esse resultado foi verificado numericamente quando calculamos  $E_a$  para os quatro caminhos. O mesmo ocorre para os CMPEs partindo das órbitas de rotação. Além disso, verificamos que os escapes entre órbitas do mesmo tipo, por exemplo,  $L_- \rightarrow L_+$  e  $L_- \rightarrow L_+$  são simétricos, possuindo mesma energia de ativação. Novamente, o cálculo da energia de ativação via CMPE e tempo médio de escape mostra boa concordância.

Em suma, além de permitir a obtenção de  $E_a$ , a abordagem do CMPE oferece uma compreensão mais profunda do problema, revelando que, no regime de baixa intensidade de ruído, o escape segue um caminho bem definido, aquele que minimiza a ação. Dessa forma, o CMPE proporciona uma intuição física mais apurada sobre o escape entre órbitas.

## 5 RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA NO ESCAPE ENTRE ÓRBITAS

Neste capítulo, mostraremos que os escapes entre as órbitas da fase orbital podem sofrer *ressonância estocástica* (RE). A discussão presente nesse capítulo ainda não foi submetida a publicação e está em processo de refinamento. Entretanto, acreditamos que os resultados são robustos o suficiente para quantificar RE entre as transições.

A ressonância estocástica (RE) é um fenômeno contra-intuitivo em que a resposta de um sistema não linear a um sinal é amplificada na presença de ruído. A amplificação da resposta no sistema ocorre devido à cooperação entre um sinal determinístico e o ruído. Quando esse fenômeno ocorre, a resposta do sistema ao sinal, em função da intensidade do ruído, exibe um comportamento semelhante à ressonância, justificando o termo "ressonância estocástica" (GAMMAITONI et al., 1998).

O primeiro relato do fenômeno é atribuído a Benzi et al., em 1981, quando foi proposto como explicação para as recorrências periódicas das eras glaciais (BENZI; SUTERA; VULPIANI, 1981; BENZI et al., 1983), sendo observado experimentalmente logo em seguida em um sistema biestável eletrônico (FAUVE; HESLOT, 1983). Desde então, a RE tem sido observada e explorada em diversas áreas, tais como em neurônios sensoriais (JUNG, 1995; DOUGLASS et al., 1993; BULSARA et al., 1991; NOZAKI et al., 1999; HÄNGGI, 2002), sistemas eletrônicos (DAI; HE, 2012; LUCHINSKY et al., 1999; HARMER; DAVIS; ABBOTT, 2002), detecção acústica (HE et al., 2013; QIU et al., 2021).

Nos exemplos listados acima, a ressonância estocástica é frequentemente modelada como o escape ressonante de uma partícula browniana de um mínimo local a outro de um potencial biestável. Na seção 5.1, revisitaremos esse problema, apresentando algumas ferramentas úteis para a medição da RE. Na seção 5.2, aplicaremos essas ferramentas para investigar a possibilidade de transições ressonantes entre as órbitas circulares metastáveis de uma partícula browniana ativa confinada. Por fim, na seção 5.3, resumimos as ideias principais apresentadas no capítulo.

## 5.1 RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA DE UMA PARTÍCULA BROWNIANA PASSIVA EM POTENCIAL BIESTÁVEL

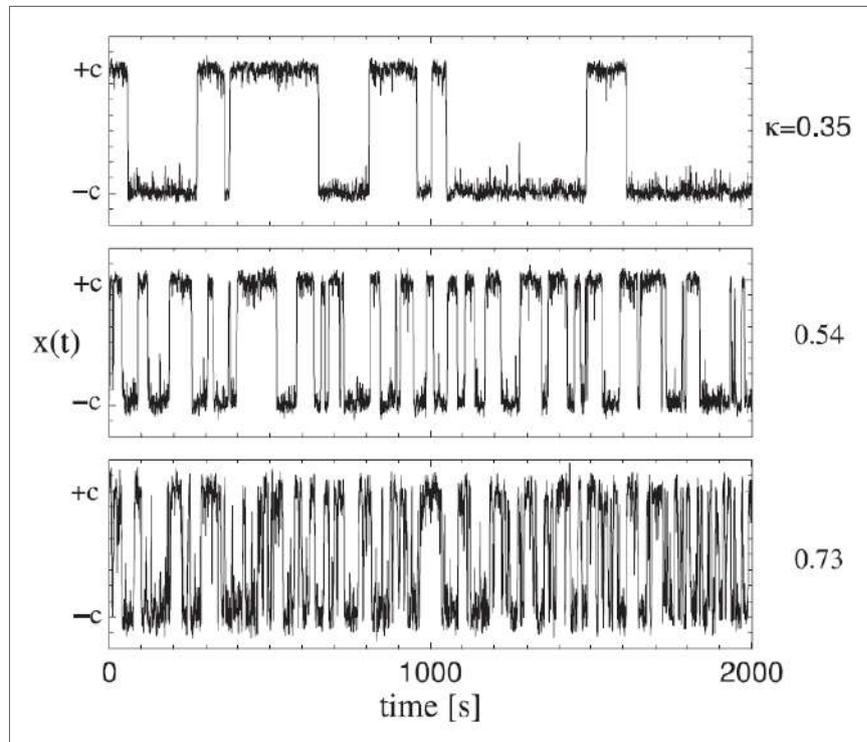
Como exemplo ilustrativo, vamos revisitar o escape descrito na seção 2.2, agora introduzindo um sinal senoidal periódico. A equação de Langevin nesse caso se torna:

$$\dot{x} = -\frac{dV}{dx} + \underbrace{\sqrt{2D}\xi(t)}_{\text{Ruído gaussiano}} + \underbrace{A \sin(2\pi f_s t)}_{\text{Sinal periódico}}, \quad (5.1)$$

onde  $f_s$  é a frequência (logo  $T_s$  é o período),  $A$  é a amplitude do sinal determinístico e o potencial biestável  $V(x)$  é definido por:

$$V(x) = \frac{bx^4}{4} - \frac{ax^2}{2}. \quad (5.2)$$

Figura 19 – Realizações de  $x(t)$  no potencial biestável com ruído e sinal periódico (equação (5.1)) para três intensidades de ruído  $\kappa = 2D$  (em nossa notação). Na figura, a amplitude do sinal é  $A = 0.2\Delta V$ , o período do sinal é  $T_s = 100$ ,  $\pm x_m = \pm c$  representa os mínimos do potencial e  $x_b = 0$  é o ponto de máximo. A sincronização induzida pelo ruído em  $x(t)$  com o sinal periódico varia conforme a intensidade do ruído: é fraca para o nível mais baixo (transições aleatórias raras), ótima para uma intensidade intermediária (transições quase regulares), e novamente fraca para ruído forte (transições mais frequentes porém irregulares).



Fonte: WELLENS; SHATOKHIN; BUCHLEITNER (2003)

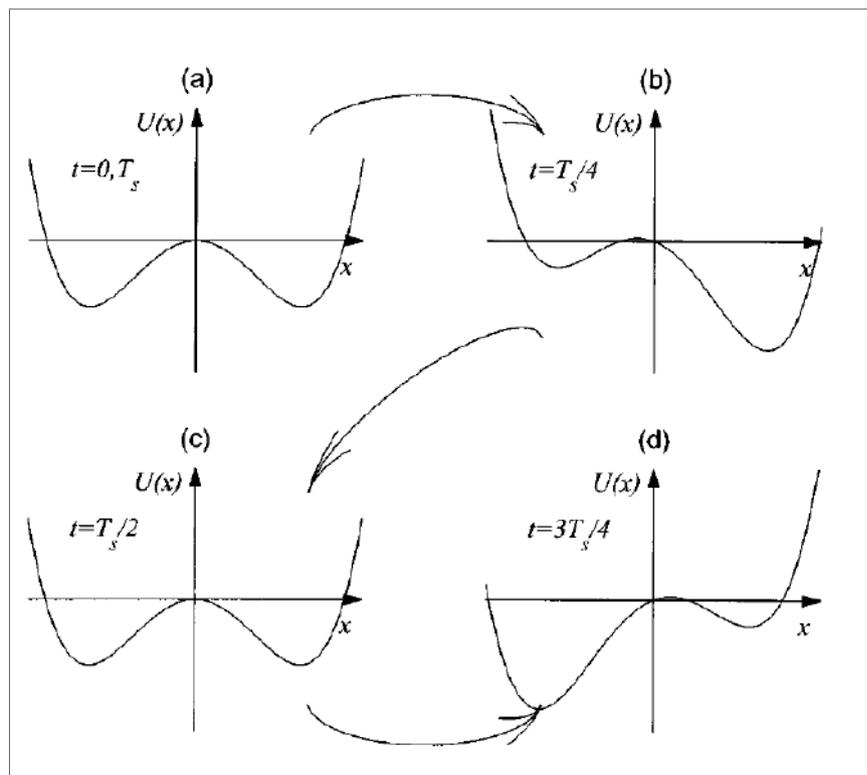
Como já discutido na seção 2.2, na *ausência* de ruído e sinal, o sistema dinâmico possui dois pontos fixos estáveis nos mínimos do potencial,  $x = \pm\sqrt{\frac{a}{b}} \equiv \pm x_m$ , e um ponto fixo instável

no ponto de máximo local  $x_b = 0$ . Na presença de ruído em baixa intensidade (ainda sem sinal), a taxa de transição ou escape da partícula segue aproximadamente a lei de Kramers:

$$r_k(D) = \frac{a}{\pi\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{a^2}{4bD}\right), \quad (5.3)$$

que, como vimos na seção 2.2, descreve de forma satisfatória a taxa de transição no potencial biestável para  $\frac{\Delta V}{D} = \frac{a^2}{4bD} \gg 1$ .

Figura 20 – Ilustração do mecanismo de ressonância estocástica (RE): a cada meio período do sinal, um sentido de transição é favorecido deterministicamente pelo sinal. Na ressonância estocástica, ocorre uma sincronização entre o favorecimento determinístico e o escape induzido pelo ruído, tornando os escapes aproximadamente periódicos (com metade do período do sinal).



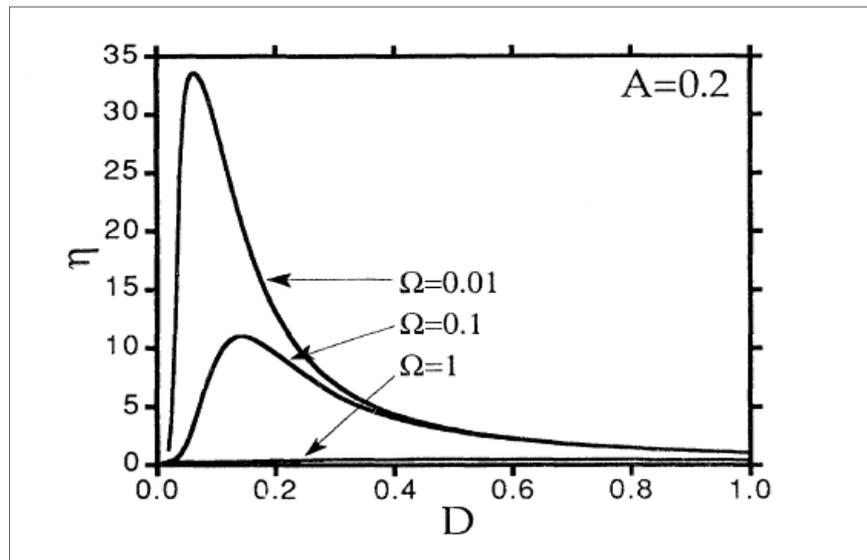
Fonte: HARMER; DAVIS; ABBOTT (2002)

O sistema descrito pela equação (5.1) é conhecido por exibir ressonância estocástica, ocorrendo para  $A < \Delta V$  e baixos valores de  $f_s$ . A figura 19 mostra a série temporal de uma realização de  $x(t)$  para três intensidades de ruído. Para  $\kappa = 2D = 0.54$ , em partes da série temporal de  $x(t)$ , as transições entre  $+c$  e  $-c$  aparentam ocorrer com período  $\frac{T_s}{2}$ . Um ponto fundamental a mencionar é que, como  $A < \Delta V$ , a amplitude do sinal é insuficiente para induzir transições periódicas por si só, isto é, na ausência de ruído ( $D = 0$ ), a partícula não é capaz de escapar, oscilando perpetuamente em torno de um dos mínimos  $\pm x_m = \pm c$ . Consequentemente, as transições quase periódicas para  $2D = 0.54$  só ocorrem devido à cooperação entre o sinal determinístico e o ruído, configurando o fenômeno de ressonância

estocástica. Na figura 20 apresentamos uma ilustração de como o sinal determinístico modifica periodicamente o potencial favorecendo transições a cada intervalo de  $T_s/2$ .

Na literatura, o fenômeno de ressonância estocástica é usualmente quantificado por duas grandezas: a razão sinal-ruído (SNR), sigla do inglês “signal-to-noise ratio”, e a amplificação espectral<sup>1</sup>  $\eta$ . Quando o fenômeno de ressonância estocástica ocorre, o gráfico de ambas as grandezas apresenta um pico em função da intensidade do ruído. Em nosso estudo, optamos por calcular a amplificação espectral  $\eta$ . Na figura 21, apresentamos, para o potencial biestável, o comportamento da grandeza em função da intensidade do ruído na presença de ressonância estocástica, conhecido na literatura.

Figura 21 – Comportamento da amplificação espectral  $\eta$  em função da intensidade de ruído  $D$  para o potencial biestável para  $A = 0.2$ ,  $a = b = 1$  e diferentes frequências  $\Omega = 2\pi f_s$ . Quanto menor a frequência do sinal, maior é o pico de amplificação. Nessa figura,  $U(x)$  denota o potencial  $V(x)$ .



Fonte: JUNG; HÄNGGI (1991)

A amplificação espectral pode ser obtida a partir da média assintótica de  $x(t)$ ,

$$\langle x(t) \rangle^{as} = \langle x(t) | x_0, t_0 \longrightarrow -\infty \rangle, \quad (5.4)$$

a média sobre realizações de  $x(t)$ , iniciadas em  $x_0$ , e acumuladas após um longo intervalo de tempo. A representação em série de Fourier da média assintótica é dada por

$$\langle x(t) \rangle^{as} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} M_n \exp\left(\frac{2\pi i n t}{T_s}\right), \quad (5.5)$$

<sup>1</sup> Também aparece na literatura como “fator de amplificação do sinal”.

de onde, para um sinal senoidal, a amplificação espectral expressa em termos das amplitudes de Fourier é dada por<sup>2</sup>

$$\eta = \frac{|M_1|^2}{|M_1^{sinal}|^2}, \quad (5.6)$$

uma razão entre o módulo quadrático da amplitude de Fourier na frequência fundamental  $f_s$  do sistema estocástico com a adição do sinal ( $M_1$ ), e o módulo quadrático da amplitude do sinal isolado ( $M_1^{sinal}$ ). Quando  $\eta > 1$ , dizemos que o sinal foi amplificado pela presença de ruído. Notando que a representação de Fourier do sinal senoidal  $F_s(t) = A \sin\left(\frac{2\pi t}{T_s}\right)$  possui apenas duas amplitudes  $M_{\pm 1}^{sinal} = \pm \frac{A}{2i}$ , podemos reescrever a equação (5.6) como

$$\eta = \frac{4|M_1|^2}{A^2}. \quad (5.7)$$

Se existe  $D_{re}$  tal que  $\eta(D_{re}) > 1$  é máximo (como na figura 21), então  $D_{re}$  é o valor ótimo de ruído, onde o sinal possui a maior amplificação. Além disso,  $D_{re}$  é o nível de ruído para o qual as transições entre os mínimos do potencial biestável mais se aproximam de transições periódicas com periodicidade  $T_s/2$ .

Para sistemas biestáveis, pode-se obter uma equação transcendental para o ruído ótimo  $D_{re}$  em função da taxa de Kramers. A expressão é dada por (GAMMAITONI et al., 1998)

$$4r_k^2(D_{re}) = (2\pi f_s)^2 \left[ \frac{\Delta V}{D_{re}} - 1 \right], \quad (5.8)$$

onde  $r_k(D)$  é a taxa de Kramers para o escape expressa pela equação (5.3). A expressão acima é proveniente de uma aproximação de primeira ordem cuja principal condição é que  $f_s$  seja pequeno. Além disso, a amplitude do sinal,  $A$ , deve ser pequena e  $\frac{\Delta V}{D_{re}} \gg 1$ , para que  $r_k(D)$  descreva corretamente o escape no sistema. Portanto, após encontrarmos o valor de  $D_{re}$ , devemos verificar se ele é consistente com os limites de validade da expressão.

Uma discussão mais completa sobre ressonância estocástica, em geral, e no potencial biestável pode ser encontrada nas referências (GAMMAITONI et al., 1998; WELLENS; SHATOKHIN; BUCHLEITNER, 2003; JUNG; HÄNGGI, 1991), que estão longe de esgotar as referências sobre o tema.

<sup>2</sup> De modo equivalente,  $\eta$  pode ser expresso em termos da razão entre a “potência” do sinal estocástico  $x(t)$  armazenada nos picos de frequência  $\pm f_s$  e a “potência” total do sinal periódico. A “potência” de um sinal  $S(t)$  é definida como  $P = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |S(t)|^2 dt$ . O termo “potência” aqui é um jargão da área de processamento de sinais.

## 5.2 RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA DE UMA PARTÍCULA ATIVA EM CONFINAMENTO CIRCULAR

Na seção 5.1, mostramos como identificar o fenômeno de RE para um sinal senoidal em sistemas onde os escapes podem ser descritos por uma única variável. Na seção 4.2.2, vimos que, para potenciais de simetria radial, o escape entre órbitas circulares é melhor descrito no plano  $\chi r$ , sendo  $\chi = 0$  a separatriz entre as bacias de atração. Além disso, vimos que, para o confinamento de parede dura circular (seção 4.2.2.1), a dinâmica pode ser aproximada como sendo unidimensional em  $\chi$ , de onde é possível definir um pseudo-potencial biestável  $\psi(\chi)$  para o escape.

As características descritas acima sugerem que o escape entre órbitas circulares é fortemente influenciado pela dinâmica orientacional. De fato, como vimos, a presença de ruído apenas na dinâmica orientacional ( $D_r \neq 0$ ,  $D_t = 0$ ) é suficiente para induzir essas transições. Portanto, considerando essas características, optamos por adicionar um sinal senoidal apenas na dinâmica orientacional da partícula autopropelida. Como veremos a seguir, ao adicionar o sinal senoidal na equação para  $\dot{\theta}$  e realizar médias assintóticas em  $\chi$ , observamos picos da amplificação espectral  $\eta$  em função do ruído rotacional  $D_r = D$ , configurando a presença de ressonância estocástica (RE) no sistema.

Com a adição do sinal senoidal as equações de Langevin se tornam:

$$\dot{x} = \cos \theta - V_x, \quad (5.9)$$

$$\dot{y} = \sin \theta - V_y, \quad (5.10)$$

$$\dot{\theta} = \beta [V_x \sin \theta - V_y \cos \theta] + \sqrt{2D}\xi(t) + A \sin(2\pi f_s t), \quad (5.11)$$

onde, novamente, estamos desprezando o ruído translacional ( $D_t = 0$ ).

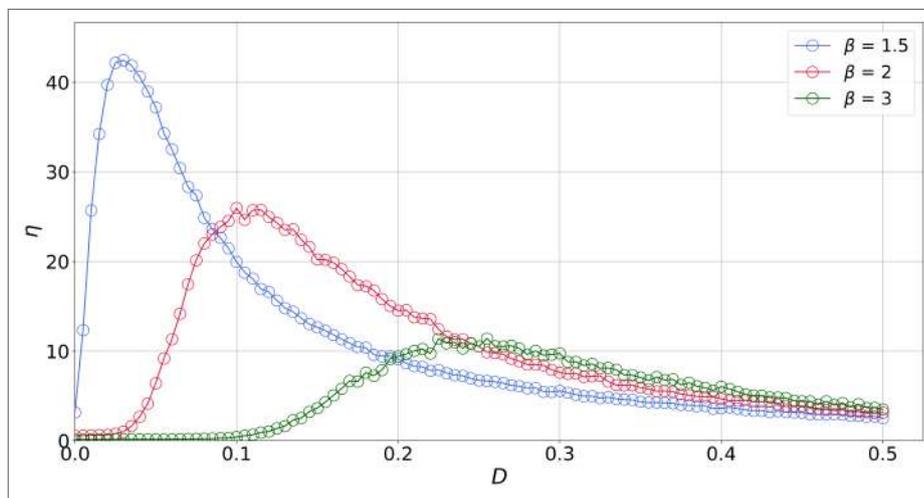
A amplificação espectral, como vimos na seção 5.1, é obtida a partir da amplitude de Fourier da média assintótica da variável de interesse, que, em nosso caso, é a variável  $\chi = \theta - \phi$ , com  $\phi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$ . Para o cálculo de  $\langle \chi \rangle^{(as)}$ , realizamos uma média sobre  $10^4$  realizações das equações de Langevin iniciadas na órbita circular horária  $(-\chi_o, R_o)$  (em ambos os potenciais), acumulando a média após  $t_{wait} = 5 \times 10^3 t_0$ .

No que se segue, investigaremos o fenômeno de RE entre as órbitas circulares presentes no confinamento em parede dura, modelado pelo potencial WCA [equação (4.32)], e no confinamento harmônico, modelado pelo potencial Harmônico [equação(4.33)], na seções 5.2.1 e 5.2.2, respectivamente.

### 5.2.1 Ressonância estocástica no confinamento em parede dura

Como já mencionado anteriormente, no confinamento em parede dura podemos aproximar a dinâmica e, conseqüentemente, o escape como sendo unidimensionais. Nesse caso, o escape entre as órbitas circulares é mapeado como um escape entre os mínimos do pseudo-potencial  $\psi(\chi)$ , sugerindo que o fenômeno de RE pode ser identificado usando as mesmas ferramentas utilizadas para o potencial biestável 5.1. As realizações da variável estocástica  $\chi(t)$  são obtidas integrando as equações (5.9), (5.10) e (5.11) para o potencial WCA.

Figura 22 – Comportamento da amplificação espectral  $\eta$  em função da intensidade de ruído  $D$  no potencial WCA para  $A = 0.1$ ,  $T_s = 100$ , e diferentes valores de  $\beta$ . Os dados mostram que o valor do ruído ótimo  $D_{re}$ , ou seja, o valor de  $D$  no pico de  $\eta$ , aumenta com o valor de  $\beta$ .

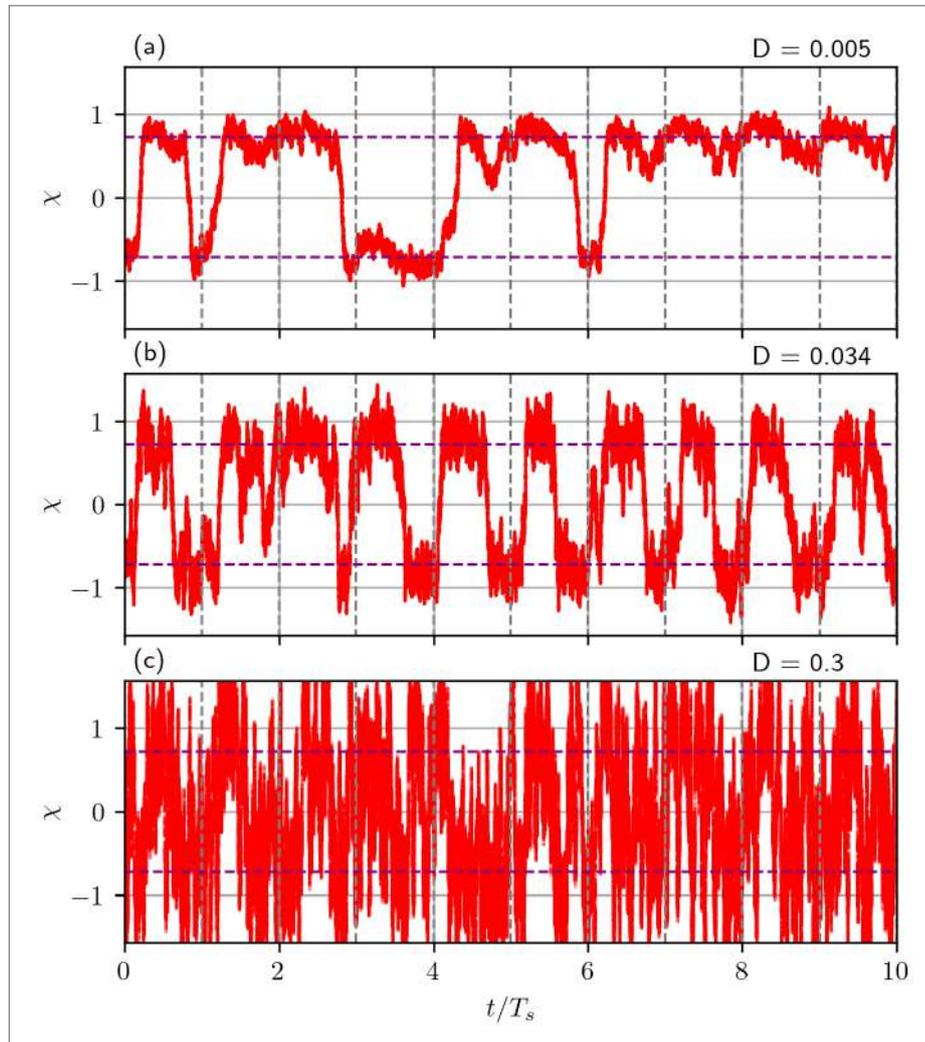


Fonte: O autor (2024)

Na figura 22, apresentamos a amplificação espectral obtida a partir da média assintótica de  $\chi$  para três valores de  $\beta$ . O comportamento de  $\eta$  em função da intensidade do ruído  $D$  é semelhante ao que vimos na RE no potencial biestável (figura 21). Na figura 23, apresentamos a série temporal de uma única realização de  $\chi(t)$  para três valores de  $D$ , dentre eles,  $D = D_{re}$ , onde  $\eta$  é máximo. Para esse valor, a partícula, em média, transita entre as órbitas, escapando e retornando à órbita inicial no intervalo de um período  $T_s$ , configurando escapes quase periódicos com um período de  $\frac{T_s}{2}$ . Na figura 24, explicitamos a amplificação do sinal apresentando a série temporal assintótica de  $\chi(t)$  para os mesmos valores de  $D$ . Na figura, mostramos a série assintótica em vermelho e o sinal em cinza. Para  $D_{re}$ , observamos a maior diferença de amplitude entre ambas séries temporais. Para os outros dois valores de  $\beta$ , observamos o mesmo comportamento presente nas figuras 23 e 24.

Vale salientar que, ao aumentarmos  $\beta$ , as curvas de  $\eta$  tornam-se menos suaves, diminuindo

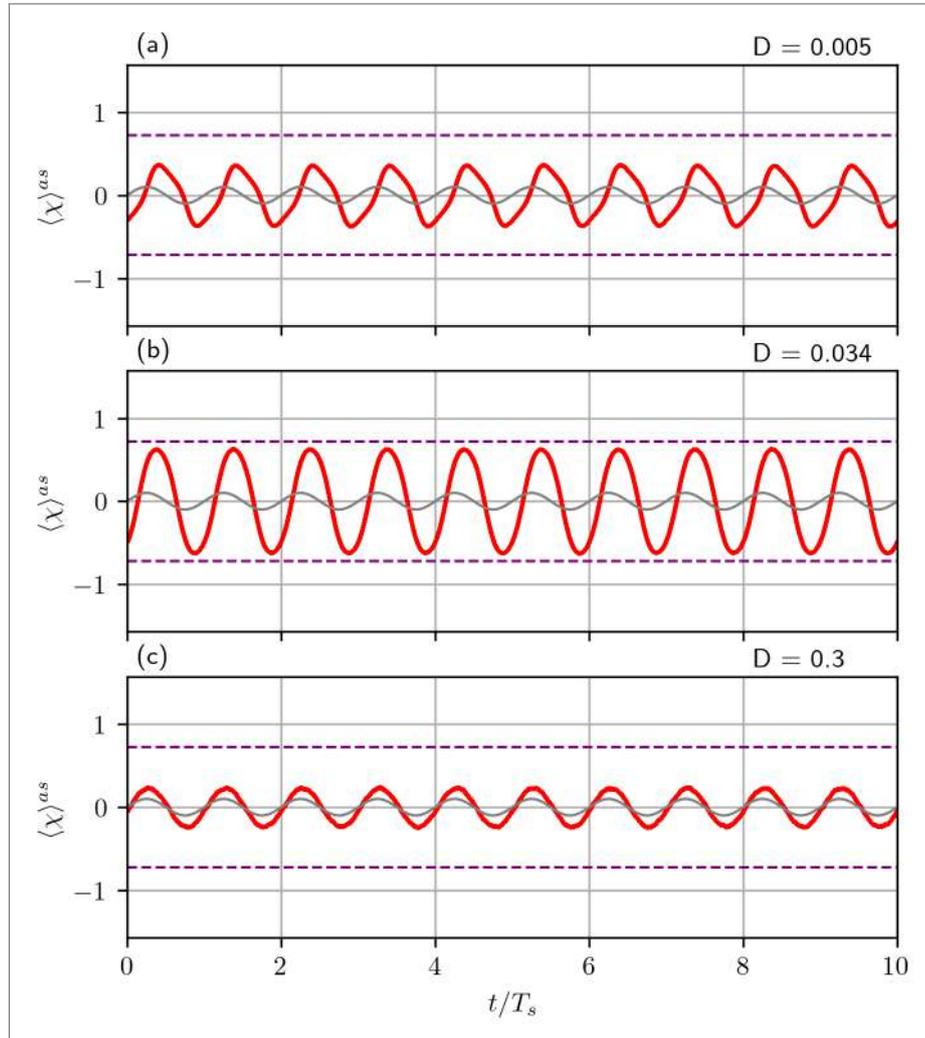
Figura 23 – Série temporal de uma única realização de  $\chi(t)$  no potencial WCA com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para  $D_1 = 0.005$ ,  $D_2 = D_{re} = 0.034$  e  $D_3 = 0.3$ , sendo  $D_{re}$  o valor de  $D$  no pico de  $\eta$ . As linhas horizontais em roxo marcam  $\pm\chi_o$ , os valores de  $\chi$  nos pontos fixos orbitais. As linhas verticais em cinza marcam intervalos de um período do sinal  $T_s$ . Note que, para  $D = D_{re}$ , a partícula, em média, escapa (transiciona entre as órbitas) e retorna à órbita inicial dentro de um período  $T_s$ , configurando escapes quase periódicos com período  $\frac{T_s}{2}$ .



Fonte: O autor (2024)

a precisão do cálculo de  $D_{re}$  (veja a curva verde na figura 22). Observamos esse comportamento tanto para o potencial WCA quanto para o potencial harmônico (seção 5.2.2). De modo geral, o padrão de crescimento, amplificação máxima e decaimento permanece; entretanto, os picos de  $\eta(D)$  tornam-se cada vez menos definidos, sugerindo a necessidade de mais tempo de espera ( $t_{wait}$ ) ou de mais realizações para obter dados mais precisos.

Figura 24 – Série temporal assintótica  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para os mesmos valores de  $D$  descritos na figura 23. Em vermelho e cinza temos a séries temporais de  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  e do sinal senoidal  $F_s(t) = A \sin(2\pi f_s t)$ , respectivamente. Note que, para  $D = D_{re}$ , observa-se uma grande diferença entre as amplitudes de oscilação, ilustrando a amplificação máxima das amplitudes de Fourier em  $D = D_{re}$ . Assim como na figura



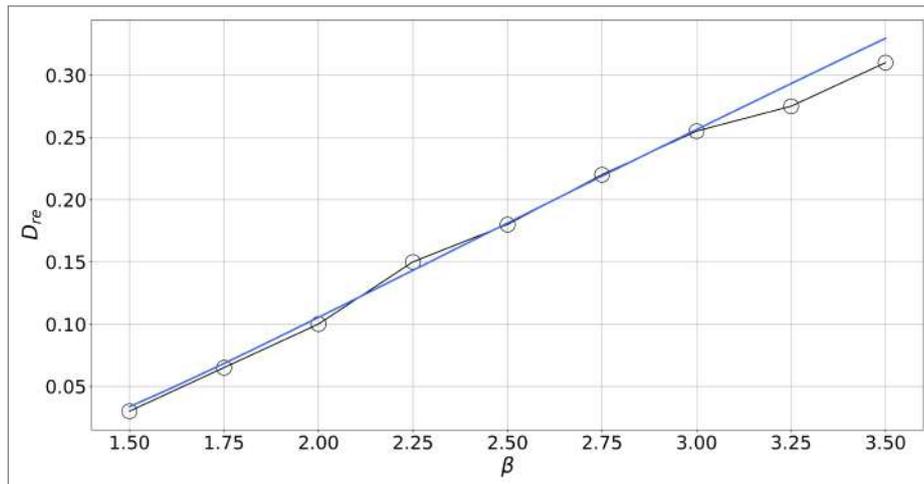
Fonte: O autor (2024)

A existência de um potencial efetivo para o escape no confinamento em parede dura nos permite comparar quantitativamente o valor de  $D_{re}$  das seguintes formas:

1. Substituindo  $\psi(\chi)$ , o pseudo-potencial associado à aproximação unidimensional do confinamento em parede dura, na fórmula de Kramers [equação (2.37)] e resolvendo a equação transcendental (5.8) em  $D_{re}$ .
2. Integrando as equações de Langevin em três dimensões para o potencial WCA, obtivemos a amplificação espectral em função da intensidade do ruído e, por fim, selecionamos  $D_{re}$  como o nível de ruído que maximiza  $\eta(D)$ .

O comportamento de  $D_{re}$  obtido de ambas as formas em função de  $\beta$  é mostrado na figura 25. Embora as curvas de  $\eta$  se tornem menos suaves com o aumento de  $\beta$ , em geral, observamos uma boa concordância nos valores de  $D_{re}$  obtidos por ambos os métodos, existindo uma discrepância maior nos dois últimos pontos.

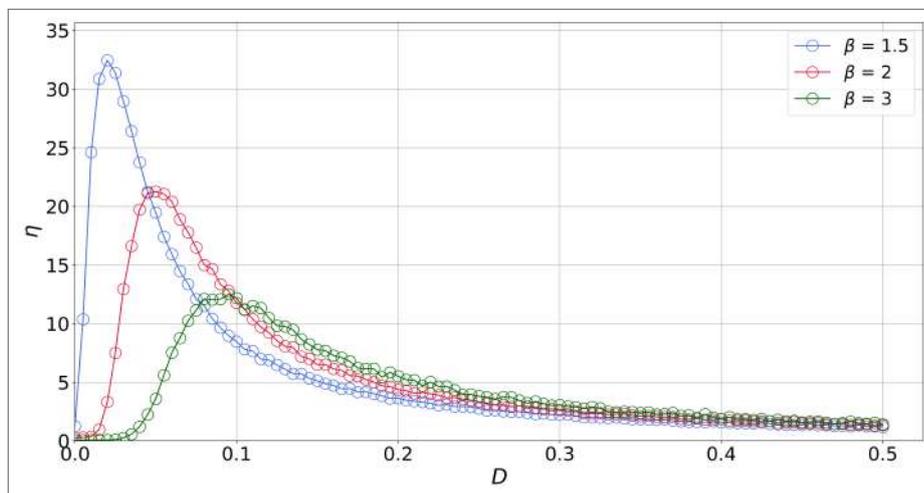
Figura 25 – Valor ótimo de ruído  $D_{re}$  em função de  $\beta$  para o confinamento em parede dura obtido a partir da equação 5.8 (linha sólida azul) e pela análise dos picos da ampliação espectral (pontos pretos). Mais detalhes de como as curvas foram obtidas se encontram no texto.



Fonte: O autor (2024)

## 5.2.2 Ressonância estocástica em confinamento harmônico

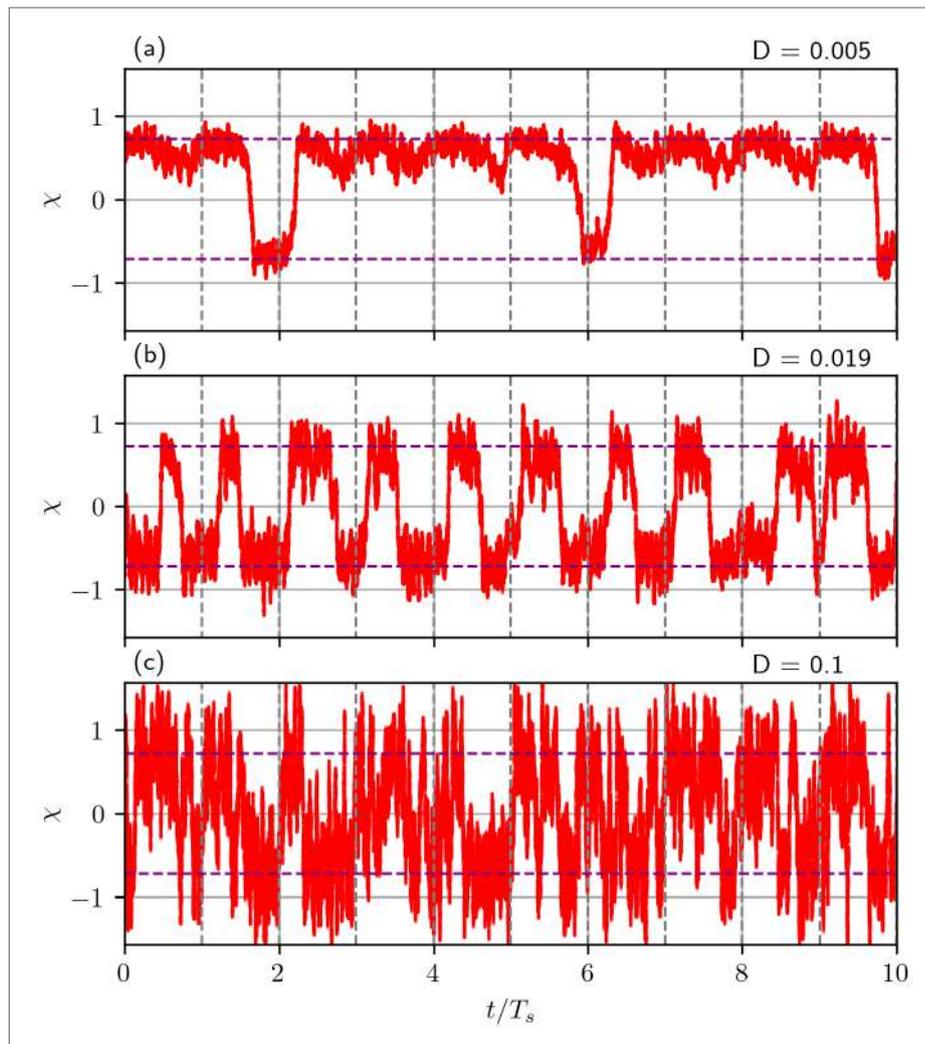
Figura 26 – Comportamento da amplificação espectral  $\eta$  em função da intensidade de ruído  $D$  no potencial harmônico para  $A = 0.1$ ,  $T_s = 100$ , e diferentes valores de  $\beta$ . Os dados mostram que o valor do ruído ótimo  $D_{re}$  também aumenta com o valor de  $\beta$  no potencial harmônico.



Fonte: O autor (2024)

Em contraste ao caso anterior, não é possível reduzir o problema de escape entre as órbitas do potencial harmônico para uma dimensão, pois como vimos na seção 4.2.2.2, as rotas de escape e relaxação seguem trajetórias complexas no plano  $xy$ . Porém, como  $\chi = 0$  demarca a separatriz entre as bacias de atração das órbitas  $(\pm\chi_o, R_o)$ , pode-se identificar de forma inequívoca a transição entre as órbitas circulares analisando apenas o comportamento de  $\chi$ , de modo que foi possível identificar o fenômeno de ressonância estocástica utilizando as mesmas ferramentas apresentadas na seção 5.1 para a variável  $\chi$ .

Figura 27 – Série temporal de uma única realização de  $\chi(t)$  no potencial harmônico com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para  $D_1 = 0.005$ ,  $D_2 = D_{re} = 0.019$  e  $D_3 = 0.1$ , sendo  $D_{re}$  o valor de  $D$  no pico de  $\eta$ . As linhas horizontais em roxo marcam  $\pm\chi_o$ , os valores de  $\chi$  nos pontos fixos orbitais. As linhas verticais em cinza marcam intervalos de um período do sinal  $T_s$ . Note que, novamente, para  $D = D_{re}$ , a partícula, em média, escapa e retorna à órbita inicial dentro de um período  $T_s$ , configurando escapes quase periódicos com período  $\frac{T_s}{2}$ .

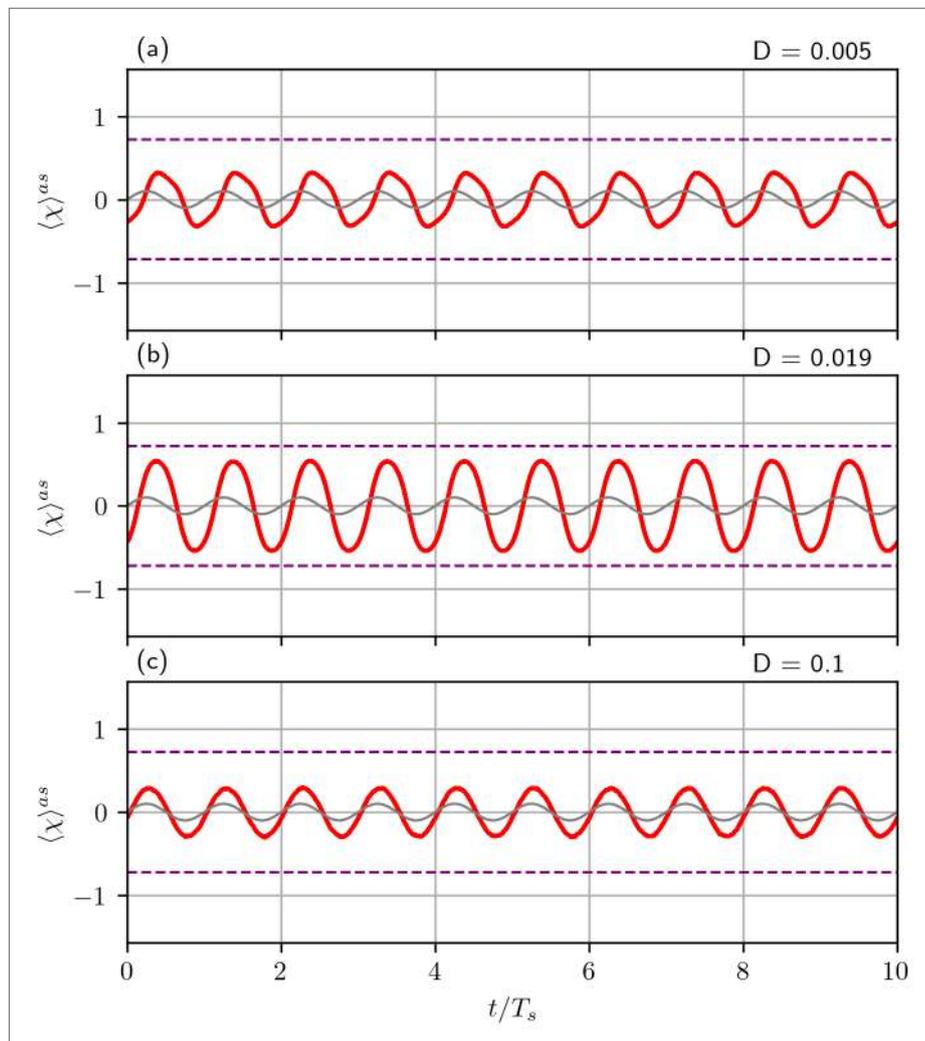


Fonte: O autor (2024)

Na figuras 26, 27 e 28, apresentamos para o potencial harmônico as amplificações espectrais, séries temporais de  $\chi$  para uma única realização e as séries temporais assintóticas para

$2 \times 10^4$  realizações, respectivamente. Analisando as figuras observamos padrões semelhantes aos observados no potencial biestável e WCA. Portanto, a inserção de um sinal periódico na dinâmica orientacional de uma partícula autopropelida pode induzir RE nas transições entre órbitas circulares. Além disso, para o potencial harmônico, mesmo que o escape não seja estritamente unidimensional, a variável  $\chi(t)$  pode ser usada como coordenada de reação para o estudo da ressonância estocástica.

Figura 28 – Série temporal assintótica  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  com  $\beta = 1.5$ ,  $A = 0.1$  e  $T_s = 100$  para os mesmos valores de  $D$  descritos na figura 27. Em vermelho e cinza temos as séries temporais de  $\langle \chi(t) \rangle^{as}$  e do sinal senoidal  $F_s(t) = A \sin(2\pi f_s t)$ , respectivamente. Novamente, note que, para  $D = D_{re}$ , observa-se uma grande diferença entre as amplitudes de oscilação.



Fonte: O autor (2024)

### 5.3 CONCLUSÃO DO CAPÍTULO

Neste capítulo, mostramos que o fenômeno de ressonância estocástica (RE) pode se manifestar nas transições entre órbitas metaestáveis de partícula ativa confinada. Partindo do exemplo clássico e didático de ressonância estocástica no potencial biestável  $V(x) = \frac{bx^4}{4} - \frac{ax^2}{2}$ , apresentamos ferramentas para quantificar a ressonância estocástica em termos da amplificação espectral, obtida a partir da média assintótica da variável de reação, nesse caso, a variável  $x$ . Adicionando um sinal periódico na dinâmica orientacional em nosso modelo de partícula ativa e considerando as condições para a manifestação de RE no potencial biestável, isto é, baixa frequência e amplitude do sinal, observamos o fenômeno tanto no confinamento em parede dura quanto no confinamento em potencial harmônico.

Para o confinamento em parede dura, como visto no capítulo 4, o problema pode ser efetivamente reduzido a uma dimensão, sendo, além disso, o potencial efetivo biestável na variável  $\chi$ . Obtendo a média assintótica de  $\chi$ , mostramos que a amplificação espectral em função da intensidade de ruído possui um padrão de crescimento, amplificação máxima e decaimento, assim como observado no exemplo do potencial biestável, configurando, portanto, a ressonância estocástica nas transições. Analisando uma realização de  $\chi$  para  $D = D_{re}$ , valor de  $D$  no pico da amplificação espectral, observamos um comportamento aproximadamente periódico, com transições entre as órbitas circulares de sentido horário e anti-horário ocorrendo aproximadamente em meio período do sinal. Além disso, comparamos o valor  $D_{re}$  em função de  $\beta$  com uma estimativa analítica, obtendo uma boa concordância, principalmente para valores baixos de  $\beta$ .

Para o confinamento harmônico, o sistema não pode ser reduzido a uma dimensão. Entretanto, como  $\chi = 0$  demarca a separatriz entre as bacias de atração das órbitas circulares, pode-se identificar de forma inequívoca a transição entre as órbitas circulares analisando apenas o comportamento de  $\chi$ . Aplicando as mesmas técnicas para quantificar a ressonância estocástica em  $\chi$ , verificamos o mesmo padrão de amplificação espectral em função de  $D$ , mostrando que a ressonância estocástica também ocorre no confinamento harmônico. Embora o escape não seja unidimensional no potencial, pode-se usar  $\chi$  como variável de reação para a análise de ressonância estocástica no potencial harmônico e para potenciais com simetria radial.

Por fim, os resultados sugerem que o escape entre as órbitas circulares de um potencial com simetria radial pode tornar-se quase periódico. Para que isso ocorra, é necessário que haja

algum mecanismo interno na partícula ou no confinamento que materialize o sinal periódico senoidal adicionado à dinâmica orientacional da partícula ativa.

## 6 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Nesta tese, investigamos a dinâmica de uma partícula ativa com torque de autoalinhamento na presença de diversos potenciais confinadores. Para um melhor entendimento da dinâmica estocástica, analisamos a dinâmica não linear da partícula na ausência de ruído no capítulo 3. O espaço de fase do sistema dinâmico determinístico da partícula é rico, possuindo linhas de pontos fixos não isolados (a isóclina crítica), ciclos-limite estáveis (órbitas atrativas periódicas) e atratores caóticos, presentes em potenciais anisotrópicos que produzem forças não lineares sobre a partícula. A mobilidade angular  $\beta$  da partícula controla o tipo de dinâmica que a partícula irá assumir, influenciando a estabilidade da isóclina crítica e das órbitas periódicas. Além disso, as janelas caóticas só foram observadas para valores altos da mobilidade angular, reforçando o impacto desse parâmetro sobre a dinâmica da partícula ativa.

A partir das estruturas atrativas presentes no espaço de fase determinístico da partícula, generalizamos a descrição das fases escaladora e orbital para um potencial confinador qualquer. A fase escaladora ocorre quando a partícula é atraída para a isóclina crítica e executa movimento browniano sobre ela, enquanto a fase orbital ocorre quando a partícula é atraída para uma órbita atratora periódica, percorrendo a órbita enquanto sofre desvios devido ao ruído. Ambas as fases dinâmicas existem apenas no regime ativo, onde ainda existe uma correlação entre sua dinâmica estocástica e determinística. Como vimos no capítulo 4, para  $D \gg 1$ , entramos no regime passivo, onde a FDP da partícula colapsa para uma distribuição semelhante à de Boltzmann, não fazendo sentido falar em fase escaladora ou orbital.

Se o potencial confinador possui simetria de reflexão, então as órbitas da fase orbital surgem aos pares. Para potenciais com simetria radial, obtemos duas órbitas circulares degeneradas, diferenciando-se apenas pelo sentido de circulação. Para o potencial elíptico, cuja excentricidade é controlada pelo parâmetro  $\epsilon$ , obtemos pares de órbitas ovais, pares de lemniscatas e órbitas que lembram lemniscatas, entretanto, com mais de um nó em suas projeções no plano  $xy$ . Como já mencionado acima, para potenciais anisotrópicos que produzem forças não lineares, encontramos atratores caóticos, devidamente classificados por seus expoentes de Lyapunov.

A presença de ruído permite transições entre as órbitas da fase orbital. Como esse escape não pode, em geral, ser descrito em termos de um potencial efetivo, abordamos esse problema de duas formas: utilizando um princípio de mínima ação, obtendo o *caminho mais provável*

de escape (CMPE) e obtendo o tempo médio de escape em função de  $D$  por integração numérica direta das equações de Langevin. Em ambas as abordagens é possível calcular a energia de ativação do escape; entretanto, ambos os métodos requerem o limite de baixo ruído ( $D \rightarrow 0$ ). Tanto para o escape entre órbitas circulares em potenciais com simetria radial quanto para o escape entre órbitas não circulares no potencial elíptico, obtivemos boa concordância entre as energias de ativação obtidas de ambos os modos. Em geral, o estudo do escape entre órbitas pelo CMPE se mostrou mais eficiente, além de fornecer a energia de ativação do escape, fornece a trajetória de escape no limite onde  $D \rightarrow 0$ .

No capítulo 5, verificamos que a adição de um sinal periódico na dinâmica orientacional da partícula pode induzir ressonância estocástica (RE). Em analogia ao exemplo clássico de RE em potenciais biestáveis, testamos essa possibilidade no confinamento em parede dura e no confinamento harmônico. No confinamento em parede dura, a existência de RE era, de certo modo, esperada, pois, como vimos no capítulo 4, o problema de escape nesse caso pode ser reduzido a uma dimensão com um potencial efetivo  $\psi(\chi)$  biestável. No potencial harmônico, isso não é possível; entretanto, como a variável  $\chi$  identifica inequivocamente transições entre as órbitas circulares em potenciais com simetria radial, aplicamos o mesmo ferramental usado no confinamento em parede dura e verificamos também a presença de RE nesse potencial. O resultado sugere que, para potenciais com simetria radial, pode-se induzir ressonância estocástica, desde que seja possível introduzir um sinal periódico na dinâmica orientacional da partícula.

Os resultados revelam que uma única partícula ativa presa em potenciais anisotrópicos pode exibir fenômenos surpreendentemente ricos, que podem ser relevantes para matéria ativa na vida real, como sistemas vivos e nanorobôs. Os resultados também abrem novas vias de pesquisa que vão além do escopo da presente tese.

A primeira delas já foi investigada em um trabalho recente de nosso grupo de pesquisa, onde analisamos a dinâmica coletiva de partículas ativas com torque de autoalinhamento no potencial harmônico (CANAVELLO et al., 2024). Além disso, pode-se realizar um estudo mais completo das simetrias presentes no sistema dinâmico determinístico da partícula. Outra direção é o estudo do efeito da inércia, que recentemente demonstrou induzir órbitas em confinamento circular mesmo na ausência de torque de autoalinhamento (LEONI et al., 2020).

No capítulo 3, identificamos pequenas janelas de coexistência entre órbitas periódicas e atratores caóticos; entretanto, ainda não investigamos o problema de escape nesse caso. A principal dificuldade desse estudo é construir de forma acurada as bacias de atração periódicas

e caóticas. Em nossas tentativas iniciais, a resolução foi um problema, fazendo com que optássemos por postergar essa análise para estudos futuros.

Por fim, não investigamos o fenômeno de ressonância estocástica (RE) para potenciais anisotrópicos. A amplificação espectral, que utilizamos para identificar a RE, é obtida através da média assintótica de uma variável que caracteriza o escape. Embora, no potencial harmônico, o escape não seja completamente caracterizado por  $\chi$ , essa variável identifica inequivocamente as transições entre as órbitas circulares, permitindo-nos usá-la para obter as amplificações espectrais. Entretanto, para potenciais sem simetria radial, ainda não encontramos uma variável que desempenhe esse papel. A análise da ressonância estocástica para potenciais anisotrópicos é uma perspectiva para futuros estudos sobre o tema.

Os resultados apresentados nos capítulos 3 e 4 foram publicados e podem ser encontrados nas seguintes referências:

- DAMASCENA, R. H.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. d. S. Coexisting orbits and chaotic dynamics of a confined self-propelled particle. *Phys. Rev. E, American Physical Society*, v. 105, p. 064608, Jun 2022.
- DAMASCENA, R. H.; SILVA, C. C. de S. Noise-induced escape of a self-propelled particle from metastable orbits. *Phys. Rev. E, American Physical Society*, v. 108, p. 044605, Oct 2023.

Em decorrência ao que foi apresentado nos capítulos 3 e 4, nosso grupo de pesquisa publicou recentemente um artigo descrevendo a dinâmica coletiva de partículas ativas com torque de autoalinhamento confinadas a um potencial harmônico. Tive o prazer de colaborar neste trabalho, que pode ser encontrado na seguinte referência:

- CANAVELLO, D.; DAMASCENA, R. H.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. de S. Polar order, shear banding, and clustering in confined active matter. *Soft Matter, The Royal Society of Chemistry*, v. 20, p. 2310–2320, 2024.

## REFERÊNCIAS

- ANDERSON, J. L. Colloid transport by interfacial forces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews, v. 21, n. Volume 21, 1989, p. 61–99, 1989. ISSN 1545-4479. Disponível em: <<https://www.annualreviews.org/content/journals/10.1146/annurev.fl.21.010189.000425>>.
- ARANSON, I. S.; PIKOVSKY, A. Confinement and collective escape of active particles. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 128, p. 108001, Mar 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.128.108001>>.
- BACONNIER, P.; DAUCHOT, O.; DÉMERY, V.; DÜRING, G.; HENKES, S.; HUEPE, C.; SHEE, A. Self-aligning polar active matter. *arXiv preprint arXiv:2403.10151*, 2024.
- BASU, U.; MAJUMDAR, S. N.; ROSSO, A.; SCHEHR, G. Active brownian motion in two dimensions. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 98, p. 062121, Dec 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/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. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 88, p. 045006, Nov 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.88.045006>>.
- BENZI, R.; PARISI, G.; SUTERA, A.; VULPIANI, A. A theory of stochastic resonance in climatic change. *SIAM Journal on applied mathematics*, SIAM, v. 43, n. 3, p. 565–578, 1983.
- BENZI, R.; SUTERA, A.; VULPIANI, A. The mechanism of stochastic resonance. *Journal of Physics A: mathematical and general*, iOP Publishing, v. 14, n. 11, p. L453, 1981.
- BERA, P. K.; SOOD, A. K. Motile dissenters disrupt the flocking of active granular matter. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 101, p. 052615, May 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.101.052615>>.
- BERG, H. C.; TURNER, L. Movement of microorganisms in viscous environments. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 278, n. 5702, p. 349–351, 1979.
- BILLINGS, L.; BOLLT, E. M.; SCHWARTZ, I. B. Phase-space transport of stochastic chaos in population dynamics of virus spread. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 88, p. 234101, May 2002. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.234101>>.
- BLACKBURN, J. A.; SMITH, H. J. T.; GRØNBECH-JENSEN, N. Chaos and thermal noise in a josephson junction coupled to a resonant tank. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 53, p. 14546–14551, Jun 1996. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.53.14546>>.
- BRAŃKA, A.; HEYES, D. Algorithms for brownian dynamics computer simulations: Multivariable case. *Physical Review E*, APS, v. 60, n. 2, p. 2381, 1999.
- BULSARA, A.; JACOBS, E.; ZHOU, T.; MOSS, F.; KISS, L. Stochastic resonance in a single neuron model: Theory and analog simulation. *Journal of Theoretical Biology*, v. 152, n. 4, p. 531–555, 1991. ISSN 0022-5193. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519305803960>>.

CANAVELLO, D.; DAMASCENA, R. H.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. de S. Polar order, shear banding, and clustering in confined active matter. *Soft Matter*, The Royal Society of Chemistry, v. 20, p. 2310–2320, 2024. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/D3SM01721D>>.

CAPRINI, L.; MARCONI, U. M. B.; PUGLISI, A. Spontaneous velocity alignment in motility-induced phase separation. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 124, p. 078001, Feb 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/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. *Europhysics Letters*, IOP Publishing, v. 101, n. 2, p. 20010, 2013.

CATES, M. E.; TAILLEUR, J. Motility-induced phase separation. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, Annual Reviews, v. 6, n. 1, p. 219–244, 2015.

CODUTTI, A.; CHARSOOGHI, M. A.; CERDÁ-DOÑATE, E.; TAÏEB, H. M.; ROBINSON, T.; FAIVRE, D.; KLUMPP, S. Interplay of surface interaction and magnetic torque in single-cell motion of magnetotactic bacteria in microfluidic confinement. *Elife*, eLife Sciences Publications Limited, v. 11, p. e71527, 2022.

DAI, D.; HE, Q. Multiscale noise tuning stochastic resonance enhances weak signal detection in a circuitry system. *Measurement Science and Technology*, IOP Publishing, v. 23, n. 11, p. 115001, oct 2012. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/23/11/115001>>.

DAMASCENA, R. H.; CABRAL, L. R. E.; SILVA, C. C. d. S. Coexisting orbits and chaotic dynamics of a confined self-propelled particle. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 105, p. 064608, Jun 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.105.064608>>.

DAMASCENA, R. H.; SILVA, C. C. de S. Noise-induced escape of a self-propelled particle from metastable orbits. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 108, p. 044605, Oct 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.108.044605>>.

DARNTON, N.; TURNER, L.; BREUER, K.; BERG, H. C. Moving fluid with bacterial carpets. *Biophysical journal*, Elsevier, v. 86, n. 3, p. 1863–1870, 2004.

DAUCHOT, O.; DÉMERY, V. Dynamics of a self-propelled particle in a harmonic trap. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 122, p. 068002, Feb 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.068002>>.

DEBLAIS, A.; BAROIS, T.; GUERIN, T.; DELVILLE, P. H.; VAUDAINE, R.; LINTUVUORI, J. S.; BOUDET, J. F.; BARET, J. C.; KELLAY, H. Boundaries control collective dynamics of inertial self-propelled robots. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 120, p. 188002, May 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.188002>>.

DOUGLASS, J. K.; WILKENS, L.; PANTAZELOU, E.; MOSS, F. Noise enhancement of information transfer in crayfish mechanoreceptors by stochastic resonance. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 365, n. 6444, p. 337–340, 1993.

FAUVE, S.; HESLOT, F. Stochastic resonance in a bistable system. *Physics Letters A*, v. 97, n. 1, p. 5–7, 1983. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960183900865>>.

FREIDLIN, M.; SZUCS, J.; WENTZELL, A. *Random Perturbations of Dynamical Systems*. Springer New York, 2012. (Grundlehren der mathematischen Wissenschaften). ISBN 9781468401769. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?id=3H\\\_gBwAAQBAJ](https://books.google.com.br/books?id=3H\_gBwAAQBAJ)>.

GAMMAITONI, L.; HÄNGGI, P.; JUNG, P.; MARCHESONI, F. Stochastic resonance. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 70, p. 223–287, Jan 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.223>>.

GARDINER, C. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry, and the Natural Sciences*. Springer-Verlag, 1985. (Proceedings in Life Sciences). ISBN 9783540113577. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=cRfvAAAAMAAJ>>.

GEYER, D.; MARTIN, D.; TAILLEUR, J.; BARTOLO, D. Freezing a flock: Motility-induced phase separation in polar active liquids. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 9, p. 031043, Sep 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.9.031043>>.

GEYER, V. F.; JÜLICHER, F.; HOWARD, J.; FRIEDRICH, B. M. Cell-body rocking is a dominant mechanism for flagellar synchronization in a swimming alga. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 110, n. 45, p. 18058–18063, 2013.

GIAVAZZI, F.; PAOLUZZI, M.; MACCHI, M.; BI, D.; SCITA, G.; MANNING, M. L.; CERBINO, R.; MARCHETTI, M. C. Flocking transitions in confluent tissues. *Soft Matter*, The Royal Society of Chemistry, v. 14, p. 3471–3477, 2018. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C8SM00126J>>.

GIOMI, L.; HAWLEY-WELD, N.; MAHADEVAN, L. Swarming, swirling and stasis in sequestered bristle-bots. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 469, n. 2151, p. 20120637, 2013.

GOLDSTEIN, H. *Classical Mechanics*. Pearson, 2011. ISBN 9788131758915. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=tVeFlb9tTxcC>>.

GRASSBERGER, P. Noise-induced escape from attractors. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 22, n. 16, p. 3283–3290, aug 1989. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0305-4470/22/16/018>>.

GU, S.; QIAN, T.; ZHANG, H.; ZHOU, X. Stochastic dynamics of an active particle escaping from a potential well. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 30, n. 5, p. 053133, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5140853>>.

HAKEN, H. At least one lyapunov exponent vanishes if the trajectory of an attractor does not contain a fixed point. *Physics Letters A*, v. 94, n. 2, p. 71 – 72, 1983. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960183902098>>.

HÄNGGI, P.; TALKNER, P.; BORKOVEC, M. Reaction-rate theory: fifty years after kramers. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 62, p. 251–341, Apr 1990. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.62.251>>.

HARMER, G. P.; DAVIS, B. R.; ABBOTT, D. A review of stochastic resonance: Circuits and measurement. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, IEEE, v. 51, n. 2, p. 299–309, 2002.

HE, Q.; WANG, J.; HU, F.; KONG, F. Wayside acoustic diagnosis of defective train bearings based on signal resampling and information enhancement. *Journal of Sound and Vibration*, v. 332, n. 21, p. 5635–5649, 2013. ISSN 0022-460X. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022460X13004859>>.

HIGHAM, D. J. An algorithmic introduction to numerical simulation of stochastic differential equations. *SIAM Review*, v. 43, n. 3, p. 525–546, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/S0036144500378302>>.

HOWSE, J. R.; JONES, R. A.; RYAN, A. J.; GOUGH, T.; VAFABAKHSH, R.; GOLESTANIAN, R. Self-motile colloidal particles: from directed propulsion to random walk. *Physical review letters*, APS, v. 99, n. 4, p. 048102, 2007.

HÄNGGI, P. Stochastic resonance in biology how noise can enhance detection of weak signals and help improve biological information processing. *ChemPhysChem*, v. 3, n. 3, p. 285–290, 2002. Disponível em: <<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/1439-7641%2820020315%293%3A3%3C285%3A%3AAID-CPHC285%3E3.0.CO%3B2-A>>.

IANSITI, M.; HU, Q.; WESTERVELT, R. M.; TINKHAM, M. Noise and chaos in a fractal basin boundary regime of a josephson junction. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 55, p. 746–749, Aug 1985. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.55.746>>.

JUNG, P. Stochastic resonance and optimal design of threshold detectors. *Physics Letters A*, v. 207, n. 1, p. 93–104, 1995. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596019500636H>>.

JUNG, P.; HÄNGGI, P. Amplification of small signals via stochastic resonance. *Physical review A*, APS, v. 44, n. 12, p. 8032, 1991.

KAUTZ, R. L. Activation energy for thermally induced escape from a basin of attraction. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 125, n. 6-7, p. 315–319, 1987.

KAUTZ, R. L. Thermally induced escape: The principle of minimum available noise energy. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 38, p. 2066–2080, Aug 1988. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.38.2066>>.

KHOVANOV, I. A.; POLOVINKIN, A. V.; LUCHINSKY, D. G.; MCCLINTOCK, P. V. E. Noise-induced escape in an excitable system. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 87, p. 032116, Mar 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.032116>>.

KIM, K.; HEO, M.-S.; LEE, K.-H.; HA, H.-J.; JANG, K.; NOH, H.-R.; JHE, W. Noise-induced transition of atoms between dynamic phase-space attractors in a parametrically excited atomic trap. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 72, p. 053402, Nov 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.72.053402>>.

KRAMERS, H. A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, Elsevier, v. 7, n. 4, p. 284–304, 1940.

KUMAR, M.; MURALI, A.; SUBRAMANIAM, A. G.; SINGH, R.; THUTUPALLI, S. Emergent dynamics due to chemo-hydrodynamic self-interactions in active polymers. *Nature Communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 1, p. 4903, 2024.

- KUMAR, N.; SONI, H.; RAMASWAMY, S.; SOOD, A. Flocking at a distance in active granular matter. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 1, p. 1–9, 2014.
- LAPIDUS, L. J.; ENZER, D.; GABRIELSE, G. Stochastic phase switching of a parametrically driven electron in a penning trap. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 83, p. 899–902, Aug 1999. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.899>>.
- LAUGA, E.; POWERS, T. R. The hydrodynamics of swimming microorganisms. *Reports on Progress in Physics*, v. 72, n. 9, p. 096601, aug 2009. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/72/9/096601>>.
- LEMONS, D. S.; GYTHIEL, A. Paul Langevin's 1908 paper "On the Theory of Brownian Motion" ["Sur la théorie du mouvement brownien," C. R. Acad. Sci. (Paris) 146, 530–533 (1908)]. *American Journal of Physics*, v. 65, n. 11, p. 1079–1081, 11 1997. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.18725>>.
- LEONI, M.; PAOLUZZI, M.; ELDEEN, S.; ESTRADA, A.; NGUYEN, L.; ALEXANDRESCU, M.; SHERB, K.; AHMED, W. W. Surfing and crawling macroscopic active particles under strong confinement: Inertial dynamics. *Phys. Rev. Research*, American Physical Society, v. 2, p. 043299, Dec 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.043299>>.
- LI, J.; SINGH, V. V.; SATTAYASAMITSATHIT, S.; OROZCO, J.; KAUFMANN, K.; DONG, R.; GAO, W.; JURADO-SANCHEZ, B.; FEDORAK, Y.; WANG, J. Water-driven micromotors for rapid photocatalytic degradation of biological and chemical warfare agents. *ACS Nano*, v. 8, n. 11, p. 11118–11125, 2014. PMID: 25289459. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/nn505029k>>.
- LIEBCHEN, B.; LÖWEN, H. Which interactions dominate in active colloids? *The Journal of Chemical Physics*, v. 150, n. 6, p. 061102, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5082284>>.
- LIN, G.; HAN, Z.; HUEPE, C. Order–disorder transitions in a minimal model of active elasticity. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 23, n. 2, p. 023019, feb 2021. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/abe0da>>.
- LONGTIN, A.; BULSARA, A.; MOSS, F. Time-interval sequences in bistable systems and the noise-induced transmission of information by sensory neurons. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 67, p. 656–659, Jul 1991. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.67.656>>.
- LUCHINSKY, D.; MANNELLA, R.; MCCLINTOCK, P.; STOCKS, N. Stochastic resonance in electrical circuits. ii. nonconventional stochastic resonance. *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Analog and Digital Signal Processing*, v. 46, n. 9, p. 1215–1224, 1999.
- MALAKAR, K.; DAS, A.; KUNDU, A.; KUMAR, K. V.; DHAR, A. Steady state of an active brownian particle in a two-dimensional harmonic trap. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 101, p. 022610, Feb 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.101.022610>>.
- MARCHETTI, M. C.; JOANNY, J. F.; RAMASWAMY, S.; LIVERPOOL, T. B.; PROST, J.; RAO, M.; SIMHA, R. A. Hydrodynamics of soft active matter. *Rev.*

*Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 85, p. 1143–1189, Jul 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.1143>>.

NISHIGUCHI, D.; SANO, M. Mesoscopic turbulence and local order in janus particles self-propelling under an ac electric field. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 92, p. 052309, Nov 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.92.052309>>.

NOZAKI, D.; MAR, D. J.; GRIGG, P.; COLLINS, J. J. Effects of colored noise on stochastic resonance in sensory neurons. *Physical review letters*, APS, v. 82, n. 11, p. 2402, 1999.

OSTAPENKO, T.; SCHWARZENDAHL, F. J.; BÖDDEKER, T. J.; KREIS, C. T.; CAMMANN, J.; MAZZA, M. G.; BÄUMCHEN, O. Curvature-guided motility of microalgae in geometric confinement. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 120, p. 068002, Feb 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.068002>>.

PINÇE, E.; VELU, S. K.; CALLEGARI, A.; ELAHI, P.; GIGAN, S.; VOLPE, G.; VOLPE, G. Disorder-mediated crowd control in an active matter system. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 1, p. 1–8, 2016.

PURCELL, E. M. Life at low Reynolds number. *American Journal of Physics*, v. 45, n. 1, p. 3–11, 01 1977. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://doi.org/10.1119/1.10903>>.

QIU, Y.; YUAN, F.; JI, S.; CHENG, E. Stochastic resonance with reinforcement learning for underwater acoustic communication signal. *Applied Acoustics*, v. 173, p. 107688, 2021. ISSN 0003-682X. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003682X20307921>>.

RAMASWAMY, S. The mechanics and statistics of active matter. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Annual Reviews, v. 1, n. Volume 1, 2010, p. 323–345, 2010. ISSN 1947-5462. Disponível em: <<https://www.annualreviews.org/content/journals/10.1146/annurev-conmatphys-070909-104101>>.

REYNOLDS, C. W. Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. In: *Proceedings of the 14th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 1987. (SIGGRAPH '87), p. 25–34. ISBN 0897912276. Disponível em: <<https://doi.org/10.1145/37401.37406>>.

RISKEN, H.; HAKEN, H. *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications Second Edition*. [S.l.]: Springer, 1989.

RYASHKO, L.; SLEPUKHINA, E. Noise-induced torus bursting in the stochastic hindmarsh-rose neuron model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 96, p. 032212, Sep 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.96.032212>>.

SANTRA, I.; BASU, U.; SABHAPANDIT, S. Direction reversing active brownian particle in a harmonic potential. *Soft Matter*, The Royal Society of Chemistry, v. 17, p. 10108–10119, 2021. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/D1SM01118A>>.

SCHOLZ, C.; ENGEL, M.; PÖSCHEL, T. Rotating robots move collectively and self-organize. *Nature communications*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–8, 2018.

SOLON, A. P.; CATES, M. E.; TAILLEUR, J. Active brownian particles and run-and-tumble particles: A comparative study. *The European Physical Journal Special Topics*, Springer, v. 224, n. 7, p. 1231–1262, 2015.

- STROGATZ, S. H. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*. [S.l.]: Westview Press, 2000.
- SZABÓ, B.; SZÖLLÖSI, G. J.; GÖNCI, B.; JURÁNYI, Z.; SELMECZI, D.; VICSEK, T. Phase transition in the collective migration of tissue cells: Experiment and model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 74, p. 061908, Dec 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.74.061908>>.
- 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. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/ncomms10694>>.
- TÉL, T.; LAI, Y.-C.; GRUIZ, M. Noise-induced chaos: a consequence of long deterministic transients. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, World Scientific, v. 18, n. 02, p. 509–520, 2008.
- VICSEK, T.; CZIRÓK, A.; BEN-JACOB, E.; COHEN, I.; SHOCHET, O. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 75, p. 1226–1229, Aug 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.1226>>.
- VOLPE, G.; BUTTINONI, I.; VOGT, D.; KÜMMERER, H.-J.; BECHINGER, C. Microswimmers in patterned environments. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry, v. 7, n. 19, p. 8810–8815, 2011.
- WALTHER, A.; MÜLLER, A. H. E. Janus particles: Synthesis, self-assembly, physical properties, and applications. *Chemical Reviews*, v. 113, n. 7, p. 5194–5261, 2013. PMID: 23557169. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/cr300089t>>.
- 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*, v. 54, n. 12, p. 5237–5247, 06 1971. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1674820>>.
- WELLENS, T.; SHATOKHIN, V.; BUCHLEITNER, A. Stochastic resonance. *Reports on progress in physics*, IOP Publishing, v. 67, n. 1, p. 45, 2003.
- WEXLER, D.; GOV, N.; RASMUSSEN, K. O.; BEL, G. Dynamics and escape of active particles in a harmonic trap. *Phys. Rev. Research*, American Physical Society, v. 2, p. 013003, Jan 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.013003>>.
- WOILLEZ, E.; ZHAO, Y.; KAFRI, Y.; LECOMTE, V.; TAILLEUR, J. Activated escape of a self-propelled particle from a metastable state. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 122, p. 258001, Jun 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.258001>>.
- WOLF, A.; SWIFT, J. B.; SWINNEY, H. L.; VASTANO, J. A. Determining lyapunov exponents from a time series. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Elsevier, v. 16, n. 3, p. 285–317, 1985.
- ZHANG, J.; ZHENG, X.; CUI, H.; SILBER-LI, Z. The self-propulsion of the spherical pt–sio2 janus micro-motor. *Micromachines*, v. 8, n. 4, 2017. ISSN 2072-666X. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2072-666X/8/4/123>>.