UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-graduação em Física

Tiago Venzel Rosembach

# MATÉRIA ATIVA EM REDE:
## Um modelo do tipo Vicsek com volume excluído

Belo Horizonte
2024

Tiago Venzel Rosembach

# MATÉRIA ATIVA EM REDE:
# Um modelo do tipo Vicsek com volume excluído

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Ronald Dickman

Belo Horizonte

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

R812m Rosembach, Tiago Venzel.
Matéria ativa em rede: um modelo do tipo Vicsek com volume excluído / Tiago Venzel Rosembach. – 2024.
188 f. : il.

Orientador: Ronald Dickman.
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.
Bibliografia: f. 91-97.

1. Matéria. 2. Gás de rede. 3. Transição de fase. I. Título. II. Dickman, Ronald. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 539.2 (043)

Ficha catalográfica elaborada por Romário Martins Ribeiro – CRB6 3595
Biblioteca Professor Manoel Lopes de Siqueira – Departamento de Física - UFMG

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**FOLHA DE APROVAÇÃO**

A presente dissertação, intitulada **"Matéria ativa em rede: Um modelo do tipo Vicsek com volume excluído"** de autoria de **TIAGO VENZEL ROSEMBACH** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em vinte e seis de setembro de 2024.

Belo Horizonte, 26 de setembro de 2024.

Prof. Ronald Dickman
Orientador do estudante
Departamento de Física/UFMG

Prof. Lucas Alvares da Silva Mól
Departamento de Física/UFMG

Prof. Lucas Lages Wardil
Departamento de Física/UFMG

Prof. Nuno Miguel Azevedo Machado de Araújo
Universidade de Lisboa

Prof. Fabrício Queiroz Potiguar
Instituto de Ciências Exatas e Naturais/UFPA

**Candidato:** Tiago Venzel Rosembach

Documento assinado eletronicamente por **Fabrício Queiroz Potiguar**, **Usuário Externo**, em 26/09/2024, às 14:04, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020.

Documento assinado eletronicamente por **Lucas Alvares da Silva Mol**, **Professor do Magistério Superior**, em 26/09/2024, às 14:06, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020.

Documento assinado eletronicamente por **Nuno Miguel Azevedo Machado de Araujo**, **Usuário Externo**, em 26/09/2024, às 15:23, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020.

Documento assinado eletronicamente por **Lucas Lages Wardil**, **Professor do Magistério Superior**, em 27/09/2024, às 15:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020.

Documento assinado eletronicamente por **Ronald Dickman**, **Professor do Magistério Superior**, em 10/10/2024, às 13:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020.

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **3587709** e o código CRC **07F0F2FF**.

*Dedico este trabalho à minha família e ao Ronald Dickman, por me ajudarem a chegar até aqui. Em especial, o dedico ao meu saudoso tio e professor Edison Adir Venzel (in memoriam), um grande exemplo de ser humano íntegro, ético e altruísta.*

# Agradecimentos

Sem dúvidas aqui jaz um dos momentos monumentais na escrita de uma tese. Pois, ao longo de anos de estudos, aprendizados e ensino, somos capazes de lograr êxodo, e, talvez, até como um carma, devolvemos para a sociedade um pouco daquilo de mais importante que ela realmente nos deu ao longo de todo esse árduo processo: o conhecimento.

Nesse processo de caminhada, várias são as pessoas que cruzam os nossos caminhos e, por sorte (ou bênção), a quantidade de coisas boas que elas nos somam, acabam sobressaindo às que eventualmente são ruins. Mas mesmos nessas ruins, evoluímos. Sendo assim, acredito que todos que participaram desse longo processo devem ser agradecidos, portanto: meu obrigado a todos!

Existem aqueles que se destacam e que precisamos mencioná-los nominalmente, mesmo que isso possa levar a uma grande injustiça, pois como nesta altura do jogo a mente não é mais a mesma, vou esquecer alguém (já deixo as minhas mais profundas desculpas).

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus pela vida e todas as bençãos concedidas.

Gostaria de agradecer aos meus pais, Atamir Rosembach e Eva da C. Venzel, que foram os meus pilares. Pessoas de jeito simples, mas que sempre me mostraram que para seguir em frente precisamos de esforço e trabalho. Sempre torceram por mim e me apoiaram, mesmo que em vários momentos eles ficassem se perguntando o que é que eu estava fazendo.

Agradeço aos meus amigos de graduação, fomos amigos e nos ajudamos por quase toda a minha vida acadêmica. Em especial ao Wilder, Maria Helga, Vinícius e toda a galera do 1532. Infelizmente, não sei mais por onde andam, mas espero que estejam bem.

Agradeço aos amigos que encontrei na pós, o Zé (não tem como deixar de falar da teoria da Sociodinâmica quântica), da Luana, do Leonardo Calazans, do Guilherme (valeu pela força), e do Ariltinho. Não posso esquecer dos momentos na república ‘VidaLoka

Também Ama' (abraço ao Emílio, ao Alan e ao Wifi). Até onde me consta todos estavam bem até a escrita deste agradecimento.

Agradeço aos professores e todos os servidores que fazem parte das nossas instituições federais de ensino, que seguem garantindo oportunidades e construindo o futuro desse país, mesmo quando o contexto é adverso. Em especial agradeço a todos os funcionários do Departamento de Física da UFMG, pois sem eles seria impossível que esta etapa fosse concluída. De lá, veio tudo que se espera de uma instituição de ensino (além de muito café). Aqui dou meu 'Aló!' a todos do Clube do Café e da Sala do Café do departamento de Física da UFMG.

Neste ponto preciso (rsrsrs) agradecer imensamente ao meu orientador Ronald Dickman por, sobretudo, ter aceitado uma pesquisa em um tema um pouco fora da sua área de atuação. Durante esses anos, você foi meu mentor. Auxiliou e direcionou vários aspectos da forma como enxergo a física, sobretudo na área de física estatística de não equilíbrio. Agradeço ainda a paciência e a resiliência que teve nesse processo.

Agradeço às nossas agências de fomento CAPES e CNPQ, que apesar de toda austeridade, conseguem manter o subsídio e a pesquisa deste país. No meu caso vocês foram responsáveis por termos alguns dos equipamentos necessário nas simulações e pelas minhas bolsas.

Agradeço (por força de Lei, kkkkkk) a quem hoje é a minha esposa e mãe do meu filho, Glaucia de Morais. Inicialmente, frequentando os mesmos espaços em Viçosa, depois nos tornando amigos (apesar do estranhamento inicial), namorados, casados e, por fim, pais... Nossa história (in)felizmente conflui com todo estes caminhos que percorri ao longo dos estudos. Foi na ajuda mutua e no companheirismos, que tivemos as bases que nos permitiu chegar até aqui.

Por fim, não poderia deixar de agradecer ao meu filho, Arthur, que apesar de me dar uma nova profissão ao longo do doutorado (a de pai), tornou o final dessa etapa muito mais emocionante (né Gatinha).

*"L'essentiel est invisible pour les yeux."*

*(O Pequeno Príncipe, de Antoine de Saint-Exupéry)*

# Resumo

Nas últimas décadas, o estudo do movimento coletivo vem despertando grande interesse da comunidade científica. A aplicação de técnicas da mecânica estatística levou a uma melhor compreensão de sistemas que exibem esse tipo de movimento, abordadas na área de matéria ativa. Através de modelos computacionais, aliados aos conceitos de transições de fase, características comuns e independente de escala foram estabelecidos para a matéria ativa. Nesse contexto, o modelo proposto por Vicsek *et al.* (1995), apesar de sua simplicidade, é usado como ponto de partida para várias generalizações e variações que vêm sendo aplicadas em uma grande variedade de problemas.

Com o objetivo de auxiliar na compreensão do limite de aplicabilidade da classe de universalidade de Vicsek, propusemos um modelo que segue as regras básicas do modelo original implementadas em um sistema de matéria ativa em rede (triangular), onde as partículas podem assumir três velocidades e os sítios podem ser ocupados por até uma única partícula (volume de exclusão). Simulações de Monte Carlo revelaram que, ao variar a densidade e a intensidade do ruído, diversos padrões espaciais emergem nos estados estacionários. Estados ordenados ocorrem na forma de estruturas condensadas, que, exceto na rede completamente ocupada, coexiste com um vapor de baixa densidade. Por outro lado, essas estruturas se desfazem para ruídos suficientemente grandes.

Além disso, caracterizamos o parâmetro de ordem associado e desenvolvemos um estudo detalhado da transição ordenado-desordenado para (i) densidade igual a 0.1 e (ii) rede completamente cheia. No primeiro caso, verificamos que a transição é descontínua, com curvas de histerese, comportamentos não monotônicos para o cumulante de Binder, entre outros. No segundo caso, verificamos uma transição de fase contínua, com expoentes críticos $\beta/\nu = 0.138(3)$ e $\gamma/\nu = 1.70(2)$, consistente com os do modelo de Potts de três estados.

**Palavras-chave**: matéria ativa, gás em rede ativo, diagrama de fase, transição de fase.

# Abstract

In recent decades, the study of collective motion has garnered significant interest from the scientific community. The application of statistical mechanics techniques has led to a better understanding of these types of systems, known as active matter. Through computational models, combined with nonequilibrium phase transition concepts, common characteristics, that are independent of scale, have been established for active matter. In this context, the model proposed by Vicsek *et al.* (1995), despite its simplicity, serves as a starting point for various generalizations and variations that have been applied to a wide range of different problems.

Aiming to understand the applicability limits of the Vicsek universality class, we proposed a model that follows the basic rules of the original model, implemented in an active matter system on a triangular lattice, where the particles can only assume three velocities and the sites can only be occupied by a single particle (exclusion volume). Monte Carlo simulations revealed that, varying the density and noise intensity, our model exhibits a variety of spatial patterns in the stationary states. Ordered states occur in the form of condensed structures, which, except in a fully occupied lattice, coexist with a low-density vapor and eventually disband for sufficiently large noise.

Additionally, we use the order parameter to conduct a detailed study of the ordered-disordered transition for (i) a density equal to 0.1 and (ii) a fully occupied lattice. In the first case, we found that the transition is discontinuous, with hysteresis curves, non-monotonic behavior for the Binder cumulant, among others. In the second case, we observed a continuous phase transition, with critical exponents $\beta/\nu = 0.138(3)$ and $\gamma/\nu = 1.70(2)$, consistent with those of the three-state Potts model.

**Keywords**: active matter, active lattice gas, phase diagram, order-disorder phase transition.

# Lista de abreviaturas e siglas

| | |
|---|---|
| AL | Aleatória |
| DA | *Disorded aggregates* (agregados desordenados, em tradução livre do inglês) |
| GL | *Gliders* (planadores, em tradução livre do inglês) |
| IB | *Immoble bands* (bandas imóveis, em tradução livre do inglês) |
| MC | Monte Carlo |
| MB | *Mobile bands* (bandas móveis, em tradução livre do inglês) |
| MBI | *Mobile bands - type I* (bandas móveis do tipo I, em tradução livre do inglês) |
| MBII | *Mobile bands - type II* (bandas móveis do tipo II, em tradução livre do inglês) |
| TB | *Transverse band* (banda transversa, em tradução livre do inglês) |
| TJ | *Traffic jams* (congestionamento, em tradução livre do inglês) |
| TJI | *Traffic jams - type I* (congestionamento do tipo I, em tradução livre do inglês) |
| TJII | *Traffic jams - type II* (congestionamento do tipo II, em tradução livre do inglês) |

# Sumário


**1 INTRODUÇÃO . . . . . 14**

**2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA . . . . . 19**

**2.1 Matéria ativa . . . . . 19**

**2.2 Modelo de Vicsek . . . . . 23**

2.2.1 Modelo original de Vicsek . . . . . 23

2.2.2 Um olhar crítico acerca do ruído vetorial *vs* ruído angular . . . . . 29

2.2.3 Análise hidrodinâmica do modelo de Vicsek . . . . . 34

2.2.4 A classe de Vicsek . . . . . 38

**2.3 Modelos de matéria ativa no espaço discreto . . . . . 39**

2.3.1 Modelo de Ising Ativo . . . . . 40

2.3.2 Modelos de Potts ativo de quatro e seis estados . . . . . 46

2.3.3 Modelo de Peruani *et al.* . . . . . 47

**3 MODELAGEM COMPUTACIONAL . . . . . 53**

**3.1 O modelo de gás em rede ativo de três estados . . . . . 54**

3.1.1 Definição do modelo . . . . . 54

3.1.2 Implementação do modelo . . . . . 56

**3.2 Considerações acerca do modelo . . . . . 56**

**4 RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . . 60**

**4.1 Classificação das configurações . . . . . 60**

**4.2 Os estados estacionários . . . . . 67**

**4.3 Coexistência entre condensados e DA . . . . . 72**

**4.4 Parâmetro de ordem . . . . . 75**

**4.5 Natureza da transição ordem-desordem . . . . . 79**

4.5.1 Rede cheia . . . . . 80

4.5.2 Baixa densidade . . . . . 84

**5 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS . . . . . 88**

**REFERÊNCIAS . . . . . 91**

**APÊNDICES 98**

**APÊNDICE A – DISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIA DE $\delta\theta$ . . . . 99**

**APÊNDICE B – CÓDIGO FONTE DO MODELO . . . . . 100**

**APÊNDICE C – MAPAS DE CONFIGURAÇÕES PARA VÁRIOS $L$ 158**

**APÊNDICE D – VÍDEOS DE COMPORTAMENTOS TÍPICOS . 163**

**APÊNDICE E – PARÂMETRO DE ORDEM . . . . . 167**

**ANEXOS 173**

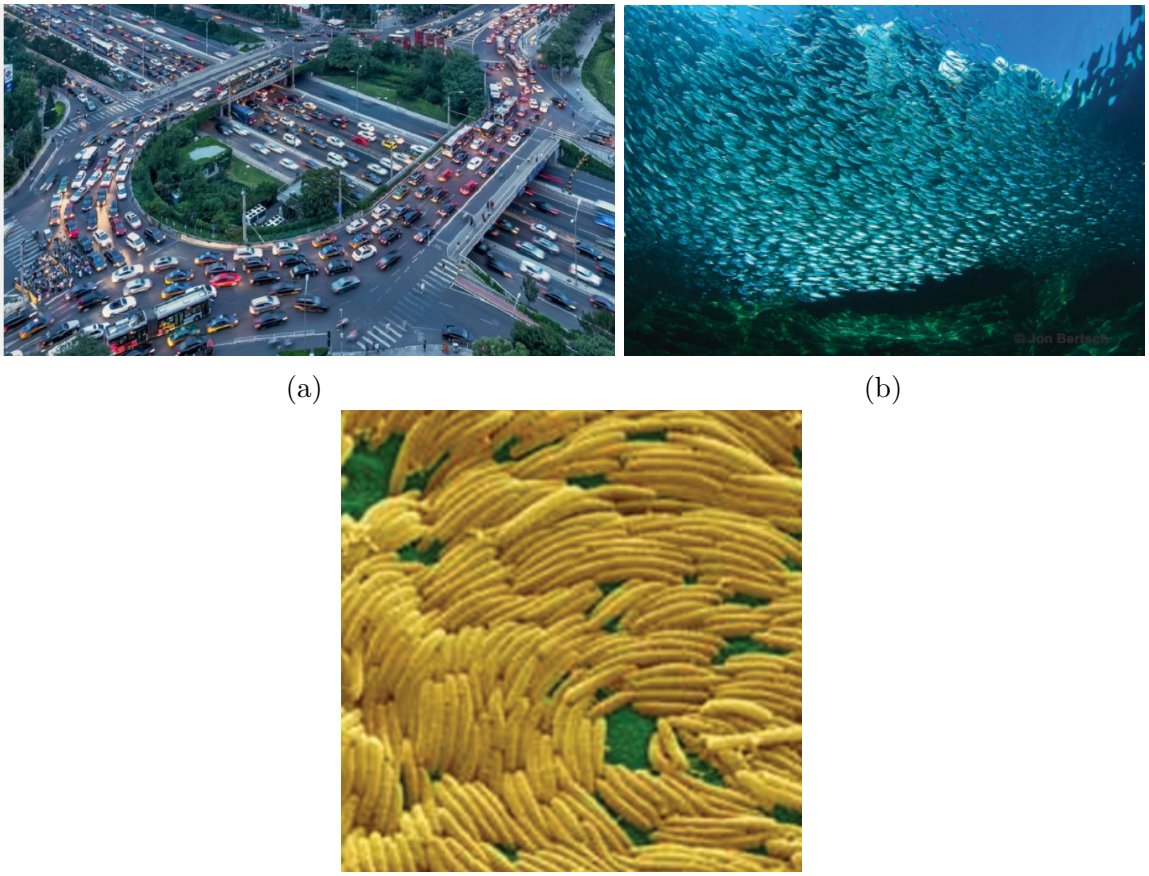
**ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO . . . . . 174**

# 1 Introdução

Desde o surgimento do modelo que leva a um movimento auto-organizado composto por agentes autopropelidos, proposto por Vicsek *et al.* há quase trinta anos [1], a matéria ativa vem sendo o foco de estudos teóricos, simulacionais e experimentais, por parte de um grande número de pesquisadores, sobretudo, da área da física estatística. O interesse pela matéria ativa, entendida como um conjunto de partículas interagentes, na qual cada uma consume algum tipo de energia livre para se autopropelir, se dá-se pelo fato de o sistema ser intrinsecamente fora do equilíbrio termodinâmico. De maneira geral, exemplos de matéria ativa engloba grupos de macro ou micro-organismos que se organizam coletivamente . A Figura 1 mostra alguns exemplos desses tipos de sistemas e, como pode-se notar, eles abrangem tanto seres vivos quanto não-vivos, mono ou pluricelulares, sintéticos ou naturais, entre outros. [2, 3].

O modelo de Vicsek, introduzido em 1995, utiliza regras simples para descrever a dinâmica de partículas ativas em espaço contínuo, alinhando sua direção de movimento com a dos seus vizinhos, levando a uma transição de fase entre movimento coletivo em alta densidade e baixo ruído e movimento desordenado no limite oposto [1]. Estudos subsequentes mostraram que os modelos tipo Vicsek exibem um regime marcado pela coexistência de uma fase condensada e ordenada e um vapor desordenado, levando a uma transição ordem-desordem descontínua. Essa coexistência é caracterizada por uma fase ordenada que se move através de uma fase gasosa desordenada [5]. O modelo de Vicsek modela um tipo de matéria ativa diluída, uma vez que interações do tipo volume excluído entre partículas são ignoradas.

Uma das questões que surge naturalmente é se essas características ocorrem em sistemas semelhantes em espaço discreto; de fato, elas são encontradas no modelo de Ising ativo [6, 7], assim como em diversos modelos de rede. Semelhante ao modelo de Vicsek (espaço contínuo), as fases ordenadas e desordenadas (homogênea) são separadas, no



(a) (b)

(c)

Figura 1 – Exemplos de sistemas de matéria ativa. (a) Tráfego de veículos na cidade de Pequim em um dos dias de maior movimento. (b) Um grande cardume de peixes. (c) Ordenamento tipo líquido-cristalino que a Myxococcales é capaz de exibir. As imagens (b)-(c) foram extraídas de [4] e (a) foi extraída de `https://www.gearrice.com/update/applications-to-avoid-traffic-jams-on-your-trip/`, último acesso 24/06/2024.

plano densidade/intensidade de ruído, por uma região de coexistência. Trabalhos recentes, investigando uma generalização do modelo de Ising ativo, o modelo de Potts ativo com $q$ estados, mostram que, mesmo não havendo restrição no número de partículas por sítio da rede, a coexistência de fases também é observada [8, 9]. Outro modelo de matéria ativa em espaço discreto é o modelo de relógios ativos com $q$ estados. Similar ao observado no modelo de Vicsek e no modelo de Potts ativo com $q$ estados, o modelo de relógio ativo exibe uma transição do tipo líquido-vapor. A região de coexistência do modelo de relógios ativos apresenta separação de fases macroscópica para pequenos valores de $q$ e separação microscópica para valores grandes de $q$, como no modelo de Vicsek [10, 11].

Em sistemas reais, tais como bandos de aves e cardumes de peixes, o espaço disponível ao longo do movimento pode ser reduzido pela simples presença dos entes. Dessa forma, é importante compreender como a organização é afetada por interações do tipo volume excluído. Em modelos de matéria ativa com volume excluído, a mobilidade das partículas é reduzida pelo aumento da densidade, levando a estruturas congestionadas[1]. Esse engarrafamento é observado, por exemplo, no tráfego de veículos, embriogênese, formação de tumores e estouro de manadas [12–15].

Sendo assim, em sistemas nos quais as partículas são autopropelidas e com volume excluído, espera-se observar fases semelhantes às encontradas tanto no modelo de Vicsek (e modelo de Ising ativo), quanto às fases congestionadas discutidas acima , acrescida de configurações que são misturas delas. De fato, esses padrões foram observados nos estudos de modelos de matéria ativa com volume excluído, como por exemplo, o modelo tipo Potts ativo de quatro estados, proposto por Peruani *et al.* [16]. Nesse modelo, um parâmetro $g$ determina a intensidade do alinhamento entre partículas ocupando sítios vizinhos; à medida que $g$ é aumentado (com densidade de partículas fixa), o sistema exibe três fases: agregados desordenados para alinhamento fraco, uma fase com ordenamento local caracterizada por engarrafamentos e planadores [2] (um tipo de engarrafamento com dois subdomínios de orientações diversas que movem-se juntos pelo espaço) e bandas imóveis, que surgem quando a interação de alinhamento é forte.

Motivado pelo interesse em caracterizar as fases e as transições de fase associadas em um modelo com possibilidade de movimento ainda mais restrito e com volume excluído, foi proposto um novo modelo, denominado gás em rede ativo de três estados. Como é mais eficiente tratar a exclusão de volume em espaço discreto, estudamos um gás de rede em que as velocidades das partículas são limitadas, no interesse da simplicidade, a três direções na rede triangular. Além disso, esse modelo inclui uma interação de alinhamento do tipo Vicsek que favorece a formação de grupos ordenados; essa tendência, que segue um esquema de voto majoritário é, no entanto, frustrada pela mobilidade reduzida das

[1] Tradução livre do termo em inglês *traffic jams.*
[2] Tradução livre do termo em inglês *gliders.*

partículas em regiões densas, levando ao surgimento de estruturas condensadas que podem ser caracterizadas como bandas ou "engarrafamentos".

Usando simulação numérica, descobrimos que o modelo exibe uma variedade de estados estacionários dependendo dos parâmetros (densidade, intensidade de ruído, tamanho do sistema) e da configuração inicial. Descobrimos que a configuração mais estável em baixa intensidade de ruído é uma banda imóvel e engarrafada, em que as partículas movem-se na mesma direção. Em altas intensidades de ruído, o estado estacionário é desordenado, com frações médias iguais de partículas nas três direções e espacialmente uniforme. Cada uma dessas configurações será discutida em detalhes na Sec. 4.1.

O modelo exibe uma ou mais transições de fase à medida que se aumenta a intensidade do ruído com a densidade fixa. De fato, os resultados nos mostram a existência de uma única transição de fase do tipo ordem-desordem nos limites de baixa densidade e rede está cheia, vide Sec. 4.5, e que essa transição aparenta ser descontínua na maior parte do intervalo de densidades [3]. Além disso, no caso limite de rede cheia, todas as partículas estão imóveis e o modelo possui a simetria do modelo de Potts de 3-estados. Descobrimos que, conforme esperado, a transição de fase pertence à classe de universalidade do modelo de Potts de 3-estados nesse limite.

No próximo capítulo, serão definidos alguns conceitos e toda a terminologia necessária para a compreensão dos resultados do nosso modelo. Para isso será feita uma breve descrição acerca de matéria ativa. Uma abordagem acerca do modelo original de Vicsek, trazendo uma visão dos seus principais resultados e a relação com outros modelos em espaço contínuo. Por fim, abordaremos alguns modelos de matéria ativa no espaço discreto; indicando a relação existente entre eles, e deles com o modelo original.

A descrição do nosso modelo será feita no Cap. 3. Serão definidos os parâmetros do modelo e o seus comportamentos esperados. Os resultados serão apresentados no Cap. 4. Discutiremos acerca do diagrama de fase do modelo, a natureza da transição de fase do

[3] Conforme será discutido ao londo do Cap. 4, não foram realizadas análises sistemáticas para densidades intermediarias que pudessem determinar a existência de mais fases em casos onde há o surgimento de outras configurações com condensados, que não seja a IB, ao longo da transição da fase IB para a fase DA.

tipo ordem-desordem, além de comparar os resultados com outros trabalhos já conhecidos na literatura.

Por fim, no quinto e último capítulo é feita uma breve conclusão sobre os achados do trabalho e alguns apontamentos de trabalhos futuros.

# 2 Revisão bibliográfica

Neste capítulo, nosso objetivo é introduzir o leitor ao campo de estudo da matéria ativa. Faremos isso definindo conceitos fundamentais, revisitando o desenvolvimento histórico e explorando as propriedades e modelos físicos que formam a base de nossa pesquisa.

O estudo da matéria ativa tem experimentado um rápido crescimento nos últimos anos, impulsionado em grande parte pela ampla gama de aplicações potenciais de suas propriedades, particularmente em áreas multidisciplinares. Isso despertou um grande interesse na comunidade científica, resultando em avanços significativos.

Como parte desse esforço científico, é comum a criação de modelos computacionais, analíticos e experimentais. Esses não apenas descrevem tais sistemas fora do equilíbrio, mas também buscam validar os limites de suas aplicabilidade, identificando semelhanças e diferenças com áreas já bem estabelecidas da física.

Ao longo deste capítulo, apresentaremos algumas das principais referências no campo, destacando a importância de tais trabalhos para o avanço de nosso entendimento da matéria ativa. Esperamos que este capítulo sirva como um ponto de partida para aqueles interessados nesse campo de estudo.

## 2.1 Matéria ativa

O *movimento coletivo* é uma característica comumente observada na natureza. Esse tipo de movimento é gerado pelos mais variados tipos de entes. Em sistemas biológicos podemos observá-lo desde a escala microscópica, como por exemplo, em microfilamentos [17] e em bactérias [18], até sistemas que podem se estender por quilômetros, tais como, nuvens contendo milhares de insetos [19] ou extensos cardumes de peixes [20]. Além disso, o movimento coletivo também é observado em sistemas sintéticos, tais como coloides [21],

hastes vibratórias e sistemas de robôs [22, 23].

O que é comum a todos esses sistemas é o fato do movimento coletivo emergir mesmo sem a liderança de um indivíduo específico ou força externa, ocorrendo apenas por causa da interação entre indivíduos e da natureza de não equilíbrio do sistema como um todo. O estado de não equilíbrio deste sistemas advém da autoprodução de energia de cada ente do sistema [24].

Esse comportamento coletivo pode ser estudado sobre várias perspectivas. Biólogos estão mais interessados na natureza precisa das interações, a nível individual, que levam ao complexo direcionamento do movimento dos seres. Físicos, por outro lado, geralmente procuram compreender os mecanismos que levam ao movimento coletivo independentemente da especificidade dos seres envolvidos, ou seja, estão interessados em encontrar a quais classes de universalidades pertencem os mais variados tipos de movimento coletivo.

Nessa perspectiva, um grande avanço foi obtido na compreensão de movimentos coletivos efetuados, sobretudo, por seres vivos, na medida que eles passaram a serem vistos como um material constituído por partículas ativas[1], ou seja, como matéria ativa. Essa nova abordagem vem possibilitando uma descrição mais eficaz e sistemática das características fundamentais, aos moldes da ciência de materiais e da física estatística. Dessa forma, uma crescente grupo de pesquisadores, composto principalmente por físicos, vem trabalhando em torno dessa "atividade" e aproximando problemas de diferentes escalas de comprimento. Esses esforços visam, dentre outras coisas, a criação de uma teoria que proporcione uma melhor compreensão desse tipo de matéria condensada, categorizando os seus comportamentos genéricos, tais como o próprio movimento coletivo, as fases e transições nesses sistemas fora de equilíbrio, as suas correlações e suas respostas associadas. Tudo isso nos permite criar e entender modelos mais sofisticados e que são capazes de capturar a complexidade dos sistemas reais, sendo eles biológicos ou não [25, 26].

Hoje, entende-se como matéria ativa os sistemas dirigidos onde as partículas (ou

[1] Os materiais compostos por seres vivos são chamado de matéria ativa viva. Caso contrário, utiliza-se a denominação de matéria ativa não-viva.

entes) que a constituem, muitas vezes chamadas na literatura de partícula ativa ou *birds*[2], são capazes de usar energia livre para gerar movimento de auto-propulsão e sistemático (isto é, não térmico) [3, 5, 30, 31]. O uso desta energia para direcionar o movimento pode ocorrer em diversas escalas, indo desde sistemas microscópicos, até sistemas que podem ter dezenas de metros, tal qual, discutido acima. Em todos estes sistemas as partículas ativas precisam de estruturas, tais como, ribossomo, flagelos, membranas, assas, patas, motores, rodas, dentre outras, que possam viabilizar o uso da energia livre, permitindo que a direção do movimento seja dada por uma orientação da própria partícula e não por campo externo. Este grau de liberdade interno acaba proporcionando aos sistemas compostos por este tipo de partículas ficarem intrinsecamente longe do equilíbrio [3, 5, 25, 30].

Um ponto importante é que nem todos os sistemas de matéria ativa possuem as mesmas características (e/ou simetrias), sendo necessário observar algumas propriedades que podem levar a comportamentos distintos. Por exemplo, quando as partículas estão suspensas em um fluido, ativas ou não, elas estão sujeitas a uma força de arrasto que, devido à viscosidade, tende a eliminar o movimento relativo entre as partículas e o fluido. Esse arrasto uniformiza as flutuações nas velocidades e conserva o momento das partículas e do fluido, uma vez que as forças envolvidas formam pares de ação e reação. Em outros casos, as partículas permanecem em contato com um substrato, restringindo seu movimento a uma superfície ou entre dois planos próximos, ou movem-se em um meio poroso, arrastando-se sobre o substrato sem deslizamento. Isso pode ocorrer, por exemplo, pela formação e quebra de ligações entre as partículas e o substrato. Nesses casos, o momento da partícula mais o substrato pode não ser conservado. Portanto, a matéria ativa precisa ser classificada não apenas pela distinção entre sistemas vivos e não-vivos, mas também pela maneira como as partículas interagem com o meio. Essas interações podem resultar em movimento de natureza "amortecida", onde, em uma primeira análise,

[2] Em tradução direta do inglês, quer dizer pássaros. Esta nomenclatura remete a alguns dos primeiros trabalhos onde os autores faziam analogia às características deste tipo de sistemas aos bandos de aves. Além de *birds*, é comum encontrar autores usando *boids* (abreviação para *birds-oid*), um termo cunhado a partir de um trabalho de modelagem computacional feito por C. Reynolds (1986). Ele tentava simular o comportamento do movimento de aves gerados inteiramente por computadores, este termo acabou sendo usado posteriormente por Vicsek *et al.* (1995) para denominar tais partículas e, consequentemente, por inúmeros trabalhos subsequentes [5, 27–30].

não há conservação do momento. Essa classificação é crucial para entender as dinâmicas específicas de cada tipo de sistema e para desenvolver modelos teóricos que capturam a essência dos comportamentos observados. Partículas ativas em um fluido viscoso que experimentam uma força de arrasto por conta do atrito com o fluido podem ser descritas como um sistema que pode ou não conservar o momento, dependendo de parâmetros físicos como a densidade de partículas ativas e o tamanho da escala de interesse. Se o meio onde as partículas estão inseridas puder ser tratado como inerte, gerando apenas atrito para as partículas, e se é o conjunto de partículas ativas que transferem momento para o fluido, permitindo modelá-lo como superamortecido ou sem conservação de momento, classificamos esse sistema como matéria ativa seca. Já para os casos em que as interações hidrodinâmicas mediadas pelos solventes são importantes, a hidrodinâmica do fluido onde as partículas estão em suspensão precisa ser incorporada no modelo e/ou uma descrição para a suspensão das partículas no fluido deve ser desenvolvida, classificando esse sistema como matéria ativa molhada [3, 4, 25].

Essa distinção entre secos e molhados é crucial, pois essas interseções levam ao surgimento de diferentes classes de universalidades para a matéria ativa, devido à quebra de uma lei de conservação, no caso a conservação (ou não) do momento total (fluido mais partículas) [4]. Outro fator importante que pode levar a tipos distintos de classes de universalidade é a presença de algum tipo de anisotropia, como por exemplo, o uso de entes em forma de bastões (ao invés de circulares) ou partículas nemáticas, quebrando a simetria radial do sistema de partículas, ou usando algum tipo de campo/fluxo externo para facilitar o alinhamento em uma direção específica. A dependência da classe de universalidade devido a fatores geométricos já é conhecida em sistemas clássicos, geralmente descritos por uma termodinâmica de equilíbrio e, novamente se mostra presente na matéria ativa, um sistema termodinâmico de não-equilíbrio [3, 4, 32].

## 2.2 Modelo de Vicsek

O Modelo de Vicsek, proposto por Vicsek *et al.* em 1995 [1], é reconhecido como um dos principais modelos de matéria ativa. O uso de conceitos clássicos, como pontencial, hamiltoniano ou força, é comumente utilizado para a definição dos modelos em equilíbrio. Por exemplo, esse é o caso de modelos populacionais, epidêmicos, de catálise, entre outros. Todos em equilíbrio. Por outro lado, o modelo de Vicsek não se basea em tais conceitos clássicos como base da evolução espaço-temporal das partículas. Em vez disso, utiliza um conjunto simplificado de regras para reproduzir várias das características observadas em movimentos coletivos. Por exemplo, o modelo de Vicsek foi capaz de descrever o alinhamento de bandos de pássaros, células e outros fenômenos de movimento de organismos [31, 33].

Essencialmente, o modelo de Vicsek tem como regra única a seguinte: as velocidades das partículas evoluem a fim de que se alinhem com a velocidade média das partículas em sua vizinhança. Contudo, esse alinhamento não é perfeito devido à ação de um ruído que tende a suprimir a informação sobre a velocidade média. A competição entre a interação de alinhamento e a perda de informação é, portanto, a responsável pelos diversos fenômenos emergentes, sendo o ingrediente fundamental dos modelos tipo Vicsek[3].

Nas últimas décadas, diversas modificações do modelo foram propostas com o objetivo de ampliar a compreensão dos limites do modelo de Vicsek na modelagem e caracterização dos diversos tipos de matéria ativa observados na natureza. Essas modificações incluem a variação do tipo de ruído, das interações e das características do espaço, entre outros. Como resultado, uma nova classe de universalidade foi identificada para esses modelos [31].

### 2.2.1 Modelo original de Vicsek

O modelo de Vicsek é composto de $N$ partículas auto-propelidas com velocidades de módulo ($|\mathbf{v}_i(t)| = v_\circ$), movendo em um espaço contínuo (*off-lattice*) bidimensional de tamanho $L \times L$ com condições de contorno periódicas e tempo discreto [1].

[3] Tradução livre da expressão *Vicseklike models*.

A cada intervalo de tempo $\Delta t$, as posições e direções de movimento das partículas são atualizadas sincronicamente conforme a equação dinâmica,

$$\begin{cases} \mathbf{r}_i(t+\Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + v_\circ \hat{\mathbf{e}}[\theta_i(t+\Delta t)]\Delta t \\ \theta_i(t+\Delta t) = \overline{\theta}_i(t) + \eta\zeta_i(t) \end{cases}, \tag{2.1}$$

onde $\mathbf{r}_i(t)$ é a posição da $i$-ésima partícula no instante $t$, $\hat{\mathbf{e}}(\theta)$ é um vetor unitário com ângulo polar $\theta$, $\theta_i(t)$ é o ângulo [polar] da direção de movimento da $i$-ésima partícula no instante $t$, $\overline{\theta}_i(t) = \arg\left[\sum_{j\in\mathcal{R}_i} e^{\mathbb{i}\theta_j(t)}\right]$ é o ângulo da velocidade média de todas as partículas em um círculo de raio $\mathcal{R}$ centrado na $i$-ésima partícula (*incluído ela própria*), $\{\zeta_i(t)\}$ é uma coleção de variáveis aleatórias mutualmente independentes distribuídas uniformemente[4] em $(-\pi, \pi]$ e, por fim, $\eta \in [0, 1]$ é um parâmetro responsável por controlar a intensidade do ruído.

É importante frisar que esse é um modelo de matéria ativa seca, polar (em contraponto a sistemas nemáticos, nos quais existem uma simetria $\pi$-radianos) e métrico, uma vez que a escolha da sua vizinhança é baseada na noção métrica de distância. Todas essas características são ingredientes importantes para a classe de universalidade do modelo de Vicsek.

Como o modelo de Vicsek é tido com um análogo dinâmico do modelo de *spin* $XY$ [34], é comum o estudo do movimento coletivo usando um parâmetro de ordem associado ao módulo da velocidade média das partículas, $\phi(t) \equiv \frac{1}{Nv_\circ}\left|\sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i(t)\right|$, muito semelhante a definição do módulo da magnetização do modelo de *spin*. Dessa forma, em um estado no qual as partículas estão com velocidades aleatórias, a média temporal desse parâmetro tende a se anular, $\langle\phi\rangle_t = 0$, vide Fig. 3(c). Por outro lado, se todas as partículas se movem no mesmo sentido (com a mesma velocidade) a média temporal desse parâmetro tende a unidade, $\langle\phi\rangle_t = 1$.

Vicsek *et al.* (1995) estudaram o comportamento de $\phi$ (no estado estacionário) para configurações iniciais totalmente aleatórias e observaram que o parâmetro de ordem decai continuamente com o aumento de $\eta$, vide Fig. 2. Além disso, verificou-se que o sistema

[4] Dessa forma temos que $\mathrm{COV}[\eta\zeta_i(t), \eta\zeta_j(t')] = \frac{\pi^2\eta^2}{3}\delta_{i,j}\delta_{t,t'}$.

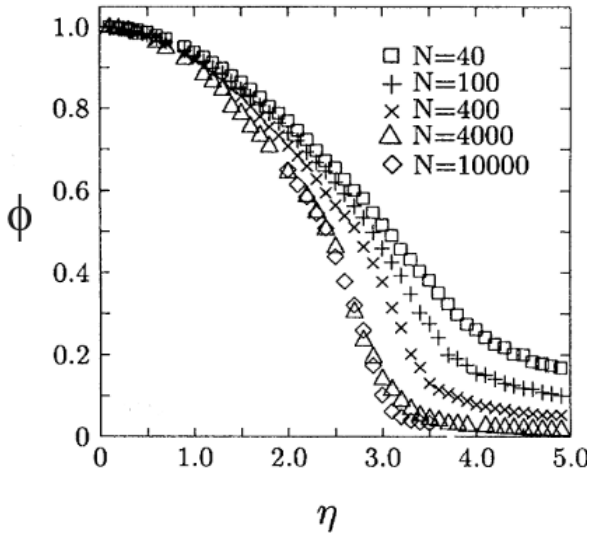



Figura 2 – Gráfico do parâmetro de ordem como função de $\eta$. Imagem adaptada do trabalho original de Vicsek *et al.* (1995) [1].

evoluía para uma de três configurações, a depender da densidade de partículas $\rho$ e da amplitude do ruído $\eta$ (por simplicidade usaram $\mathcal{R} = \Delta t = 1$ e, sem perda de generalidade, $v_\circ = 0.003$).

A primeira configuração ocorre tipicamente para valores baixos de $\rho$ e $\eta$, nela apareciam pequenos grupos densos movendo coerentemente, mas em direções aleatórias, vide Fig. 3(a). A configuração, que ocorre para valores altos de $\rho$ e baixos de $\eta$, é caracterizada pela formação de um estado ordenado em que, exceto por pequenos desvios, todas as partículas alinham suas velocidades em uma mesma direção estabelecida de forma *espontânea*, vide Fig. 3(b). Por outro lado, se $\rho$ é pequeno e $\eta$ é grande, observa-se um estado totalmente desordenado, conforme mostra a Fig. 3(c). Essa dependência das configurações com a densidade, de certa forma esperada, vem do fato de que se a densidade for alta, quase todas as vizinhanças das partículas em um círculo arbitrário de raio $\mathcal{R}$ acaba se sobrepondo e, pela construção do tipo de interação, a informação do alinhamento se dissemina facilmente ao longo do sistema, suprimindo, até certo ponto, a perda de informação originada pelo ruído. Por outro lado, se $\rho \to 0$, as vizinhanças ficam esvaziadas, ou até mesmo isoladas, fazendo com que a perda de informação seja o agente dominante na dinâmica da partícula.

Um próximo avanço significante foi feito por G. Grégoire e H. Chaté (2004) [35] ao

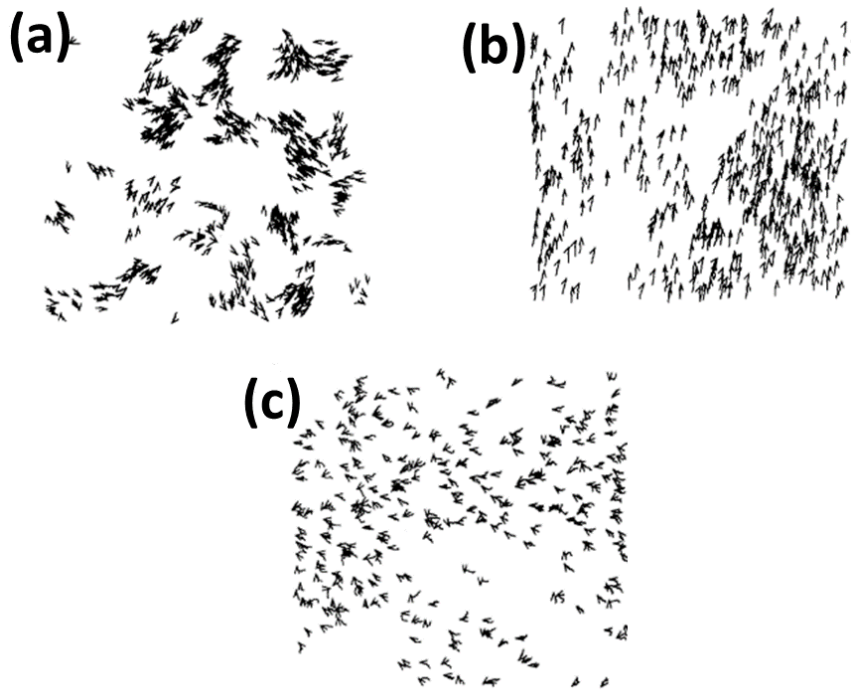



Figura 3 – Os três padrões observadas no modelo original. (a) Grupos de partículas que se movem coerentemente, mas em direções aleatórias; ocorre para valores de $\rho$ e $\eta$ pequenos. (b) Ocorre em sistemas com valores de $\rho$ grande e $\eta$ pequeno; sua principal característica é que todas as partículas se alinham, exceto por pequenos desvios, na mesma direção. (c) Nesse caso, todas as partículas se movem em direções aleatórias (sem coerência); esta configuração ocorre para valores de $\eta$ grande e baixa densidade $\rho$ [sabemos hoje que esta última exigência não é realmente necessária]. Esta imagem remover foi adaptada do trabalho original de Vicsek *et al.* (1995) [1].

estudarem o modelo de Vicsek alterando a forma de implementar o ruído na dinâmica, o chamado ruído vetorial. Com este ruído a evolução temporal do ângulo polar é igual a

$$\theta_i(t+\Delta t) = \arg\left[\sum_{j\in\mathcal{R}_i}\left(e^{\mathrm{i}\theta_j(t)} + \eta e^{\mathrm{i}\zeta_i(t)}\right)\right] = \arg\left[\sum_{j\in\mathcal{R}_i} e^{\mathrm{i}\theta_j(t)} + \eta\, n_i(t) e^{\mathrm{i}\zeta_i(t)}\right], \qquad (2.2)$$

onde $n_i(t)$ é o número de vizinhos da $i$-ésima partícula no instante $t$. Vale salientar que $\eta$ e $\zeta_i$ gozam das mesmas propriedades descritas no modelo original, apesar de serem usados de forma distinta aqui.

Olhando para a Eq. (2.2) fica entendido que o oso da termologia vetorial vem do fato que, a partícula vai se mover para a direção de um tipo de vetor (representação complexa) obtido pela soma de dois termos do tipo vetores (também na representação complexa), $\sum_{j\in\mathcal{R}_i} e^{\mathrm{i}\theta_j(t)}$ e $\eta\, n_i(t) e^{\mathrm{i}\zeta_i(t)}$.

O modelo de Vicsek com ruído vetorial apresenta, ainda que para sistemas pequenos ($L \approx 32$), uma variação abrupta no parâmetro de ordem próximo ao $\eta = \eta_c$, região da transição ordem-desordem, vide Fig. 4(a). Além disso, o autor mostrou que nessa mesma região, o cumulante de Binder de quarta ordem,

$$U_4 \equiv 1 - \frac{\langle \phi^4 \rangle_t}{3 \langle \phi^2 \rangle_t^2} , \tag{2.3}$$

cai abruptamente para valores negativos, Fig. 4(b). Esse comportamento do $U_4$ é um forte indício de uma transição de fase *descontínua*, uma vez que, o valor negativo aponta para a existência de uma distribuição bimodal do parâmetro de ordem $\phi$, característica de coexistência de fases [36] [5].

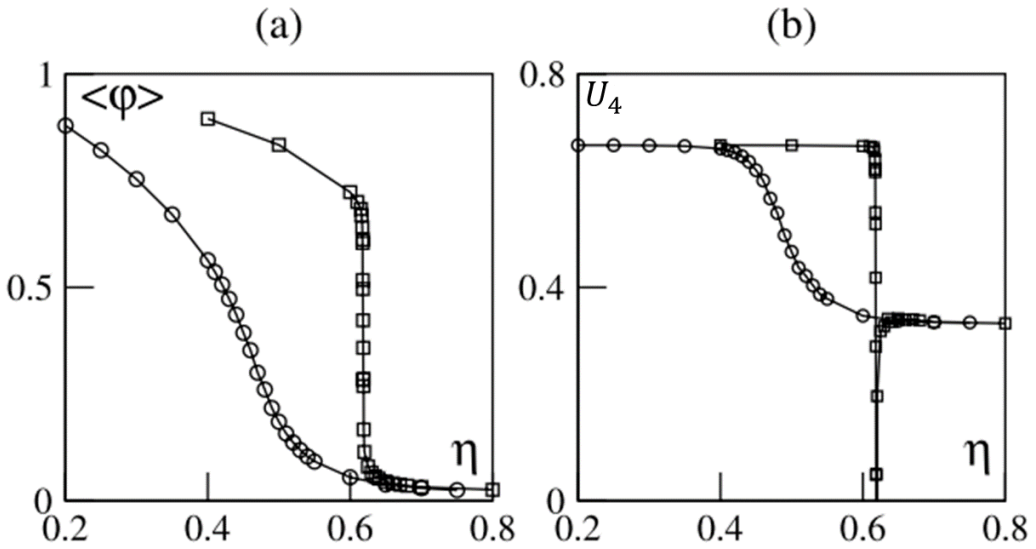



Figura 4 – Estudos realizados na proximidade de $\eta_c$, ou seja, no limite de existência do movimento coletivo. (a) Variação do parâmetro de ordem $\phi$ e (b) o cumulante de Binder de quarta ordem $U_4$ como funções de $\eta$. Os círculos mostram os resultados para o modelo de Vicsek original e os quadrados ao modelo com ruído vetorial. Parâmetro das simulações: $v_\circ = 0.5$, $L = 32$, $\rho = 2$ e estatísticas equivalentes para ambos os modelos. Imagem adaptada de [35].

O fato do modelo de Vicsek com ruído angular aparentar exibir uma transição contínua enquanto a sua versão vetorial (assim uma versão com coesão entre partículas, também discutida em [35]) exibir uma transição descontínua, motivou a reanalise do modelo original, uma vez que a mudança no tipo do ruído não altera as simetrias. Na

[5] É fácil computar que para um estado completamente ordenado $U_4 \approx 2/3$, enquanto que para um estado desordenado e com uma simetria contínua de rotação o $U_4 \approx 1/3$ em $d = 2$ e $U_4 \approx 4/9$ em $d = 3$.

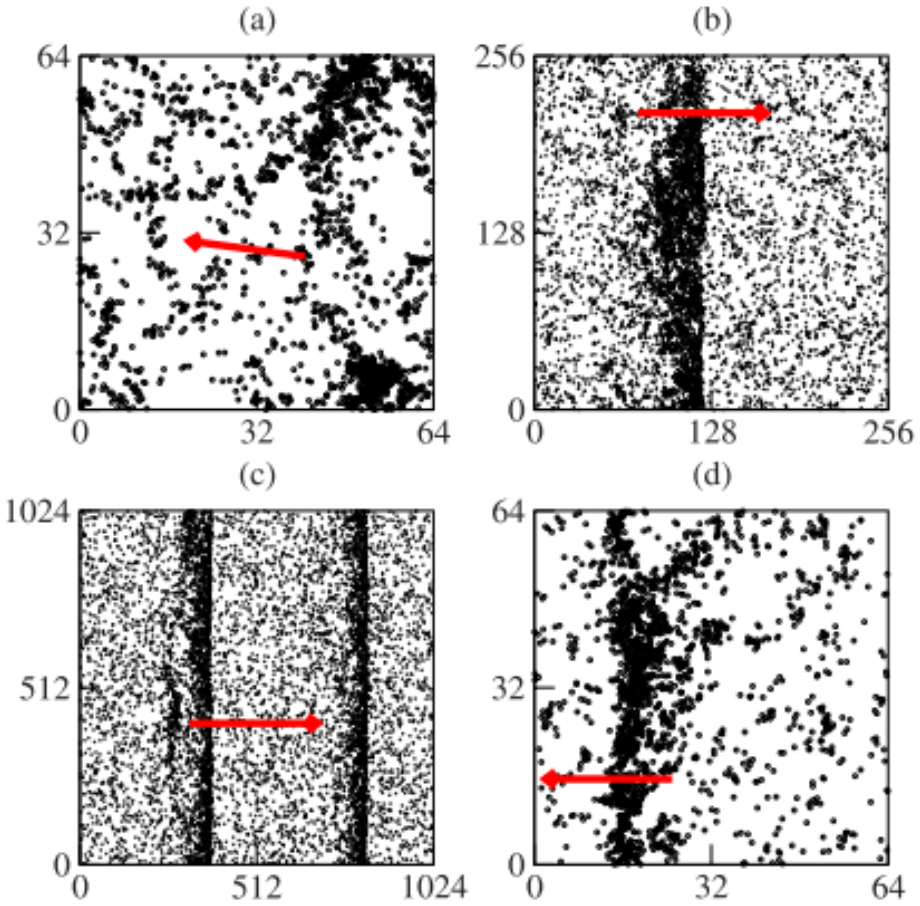



Figura 5 – Configurações típicas obtidas em simulações. Os pontos representam as posições das partículas e as setas vermelhas a direção de movimento global do sistema (dos bandos). Para (a)-(c) foram usados o ruído angular, $\rho = 1/2$, $v_\circ = 0.5$, $\eta = 0.3$ e tamanhos crescentes $L = \{64, 256, 1024\}$, respectivamente. Em (d) usou-se o ruído vetorial, $\rho = 1/2$, $v_\circ = 0.5$, $\eta = 0.55$ e $L = 64$. A imagem foi extraída de [5].

reanalise do modelo de Vicsek original, os autores utilizaram sistemas maiores ($L \leq 1024$), observando uma transição de fase ordem-desordem descontínua, intermediada por uma fase em que as partículas passam a andar em bandos densos que se movem perpendicularmente ao próprio bando e que coexiste com uma fase de gás menos denso e desordenado. A Figura 5 mostra exemplos de configurações para sistemas no estado ordenado e o aparecimento desses bandos tanto para o caso do ruído angular (b)-(c) (só ocorre para $L \geq 256$), quanto para o ruído vetorial (d). O perfil de densidade desses bandos densos são assimétricos, se aproximando a uma onda de choque na parte frontal com uma inclinação suave na parte de trás, vide a discussão da Fig. 13(b) de [5].

Esses resultados reforçam que mudar o tipo de ruído não altera a classe de univer-

salidade, inclusive alguns autores atuais os consideram como realmente sendo o mesmo modelo, porém evidencia que quando os sistemas têm ruído angular, são mais susceptíveis a efeitos de tamanhos finitos quando comparados aos que possuem ruído vetorial. Dessa forma, a transição de fase pseudo-contínua obtida no modelo de Vicsek original ocorreu pelo fato dos autores só terem utilizado redes pequenas, sendo que para se observar a verdadeiro natureza da transição tamanhos a partir de $\mathcal{O}(256)$ são necessários. Esses resultados nos levam a crer que o ruído vetorial, na medida em que faz a partícula central ter o mesmo erro na avaliação da direção de cada vizinho, confere coerência ao movimento. Uma discussão crítica acerca do ruído vetorial será feita na Subsec. 2.2.2.

Além dos valores negativos do $U_4$, há evidências da existência de uma curva de histerese nas proximidades de $\eta_c$ para ambos os tipos de ruído [5]. Esse comportamento reforça o fato de que a transição de fase ordem-desordem é *descontínua*.

Uma outra propriedade interessante aparece ao estudar o comportamento da flutuação do número de partículas em uma sub-região do sistema ($\Delta N$) no estado uniforme. Essa flutuação é dada por uma lei de potência no número médio de partículas, ou seja, $\Delta N \propto < N >^{\alpha}$. Vale ressaltar que, em modelos de equilíbrio, o valor de $\alpha = 1/2$, porém Chaté *et al.* (2008) mostram que no caso do modelo de Vicsek o valor de $\alpha \approx 0.8$, tanto em duas quanto em três dimensões [5]. Esse comportamento, chamado *giant number fluctuations* (flutuações gigantes do número [de partículas], em tradução livre), foi previsto inicialmente por Ramaswamy e colaboradores (2003) para um sistema de matéria ativa nemático [37], mas foi observado também em matéria ativa polar e hoje já é observado em vários modelos de matéria ativa sem volume excluído [38].

### 2.2.2 Um olhar crítico acerca do ruído vetorial *vs* ruído angular

Em contraste com as demais seções destes capítulo, esta subseção traz resultados e discussões inéditas, que pretendemos publicar posteriormente. Por isso, optamos por colocar toda essa discussão separada dos resultados reportados na literatura do modelo de Vicsek e que foram discutidos na seção anterior.

As discussões sobre a melhor forma de estudar a natureza da transição no modelo de Vicsek frequentemente ocultam um ponto importante e pouco debatido na literatura: o tipo de ruído a ser utilizado na elaboração de um modelo, especialmente na área de matéria ativa. Do ponto de vista teórico-simulacional, o uso de um parâmetro semelhante à temperatura (*temperature-like*) para gerar flutuações e simular o caráter estatístico de um sistema com um grande número de partículas é típico na abordagem da física estatística. Em contraste, nos sistemas reais, os mecanismos que os agentes utilizam para interagir e gerar movimento coletivo são diversos e podem apresentar um caráter estocástico.

Por exemplo, células podem sintetizar e liberar substâncias químicas (sinais quimiotáxicos) para orientar e alertar células próximas [39, 40]. Esses sinais, uma vez liberados, estão sujeitos a alterações na sua difusão causadas pela dinâmica do meio, gerando imprecisões na informação originalmente emitida, já que as flutuações na velocidade do fluido podem modificar as concentrações dessas substâncias (as quais são interpretadas pela célula receptora). Além disso, o movimento coletivo de agentes mais complexos, como humanos, que não usam apenas mecanismos básicos como sinais e gestos, mas também processos sociais, são passíveis de imprecisão na hora de recepcionar a informação emitida por outros humanos.

Portanto, não é de se esperar que os diversos mecanismos de interação que levam a movimentos coletivos resultem no mesmo tipo de imprecisão ou erro. Por isso, a investigação de diferentes formas de ruído tem um apelo mais amplo que o puramente teórico, podendo ser importante para reproduzir os mais variados processos reais.

Quando consideramos o tipo de ruído implementado por Vicsek *et al.* (1995), vemos que os agentes conseguem determinar com 100% de precisão a direção da velocidade média das partículas, mas posteriormente, quase por um processo interno, desviam dessa direção. Para exemplificar, podemos pensar em um bêbado usando um GPS de um celular moderno: ele tem a informação da direção com alta precisão, mas, ao se mover, desvia sua rota de modo aleatório. Por outro lado, ao considerarmos o ruído vetorial introduzido por Grégoire *et al.* (2004), podemos pensar em um tipo de erro sistemático, mas que dura apenas um

único intervalo de tempo. Um exemplo real desse ruído não é claro, mas acreditamos que possa ser comparado ao alinhamento de células via quimiotaxia, no qual a informação precisa se difundir por um meio fluido e as flutuações na velocidade do fluido podem, momentaneamente, modificar as informações das velocidades das células na vizinhança por um mesmo fator, resultando em um erro na soma das velocidades das células na vizinhança. Tal erro é proporcional ao número de vizinhos multiplicado por um vetor aleatório que escala com a flutuação da velocidade do meio.

Do ponto de vista estatístico, esses dois ruídos são muito distintos. No caso do ruído angular, os desvios da direção de movimento em relação à velocidade média da vizinhança, $\delta\theta_i(t+\Delta t) \equiv \theta_i(t+\Delta t) - \overline{\theta}_i(t)$, geram uma distribuição uniforme entre $(-\eta\pi, \eta\pi]$, que é independente do tamanho da rede ($L$) e da densidade ($\rho_\circ = N/L^2$) do sistema. Além disso, é fácil mostrar que $\langle\delta\theta\rangle = 0$ e $\mathrm{Var}[\delta\theta] = \eta^2\pi^2/3$.

Já para o caso do ruído vetorial, resultados preliminares mostram que o comportamento de $\delta\theta$ possui uma forte dependência com $\rho_\circ$ e $\eta$. A Figura 6 mostra a frequência com que $\delta\theta$ é distribuído ao longo de $10^4$ passos MC no estado estacionário para $\rho_\circ = 2.0$. Como pode-se perceber na Fig. 6(a)-(b), a distribuição tem uma forma semelhante ao "perfil do Batman" para valores de ruídos menores que $\eta_c$, mas que se alarga com o aumento do ruído. Para ruídos baixos, os valores de $\delta\theta$ têm amplitude visivelmente menor que no caso do ruído angular ($\eta\pi$), mas para $\eta$ maiores que $\eta_c$, o vale diminui e a distribuição passa a ter uma forma mais próxima a de uma distribuição normal, vide Fig. 6(d).

A variância de $\delta\theta$ varia de aproximadamente 0.05 (para $\eta = 0.05$) a 2.5 (para $\eta = 1.0$), apresentado um indício de descontinuidade na vizinhança de $\eta_c$. Em geral, no caso do ruído vetorial $\langle\delta\theta\rangle = 0$ e variância é menor que a do ruído angular na maioria dos casos (única exceção observada até o momento foi em $\rho_c irc = 2.0$ e $\eta = 0.65$, onde a $\mathrm{Var}(\delta\theta) \approx 1.9$; cerca de 20% a mais que no caso do ruído angular). Esse comportamento é muito semelhante para o caso de $L = 64$ e $\rho_\circ = 1.0$ e, para $L = 128$ e $\rho = 2.0$ (o último caso reforça o fato de que esse tipo de ruído é pouco susceptível a efeitos de tamanho finito). Já para $L = 64$ e $\rho_\circ = 0.5$ a distribuição do tipo "Batman" permanece para valores

de $\eta \sim 0.9$ e tem uma forma muito distinta da distribuição normal no limite de $\eta = 1.0$, como mostrado no Apêndice A.

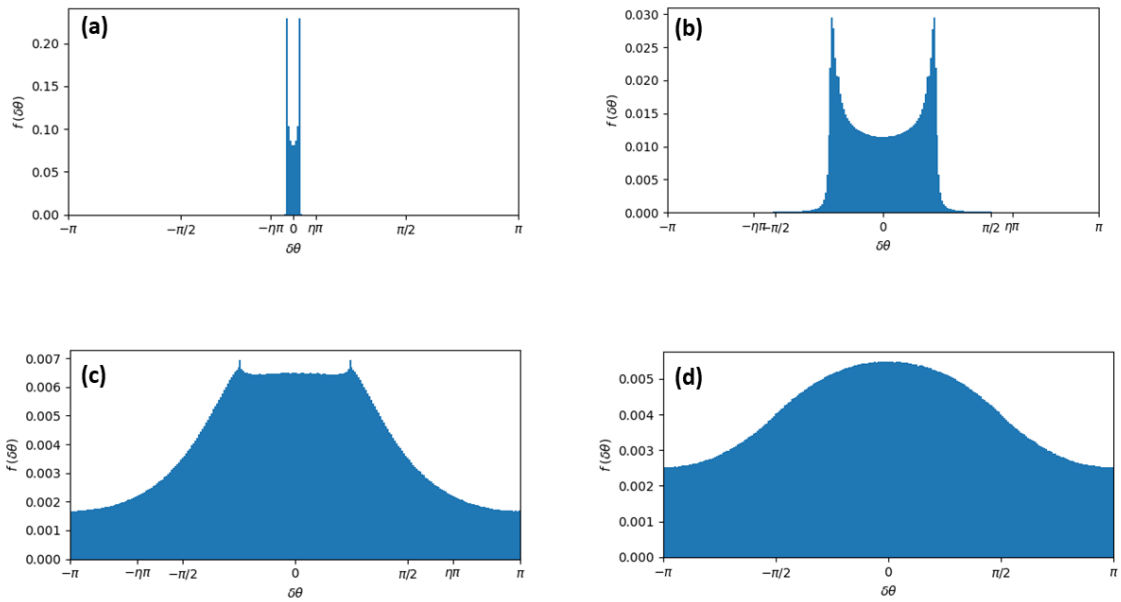



Figura 6 – Distribuição da frequência com que o valor $\delta\theta$ aparece ao longo de $10^4$ passos Monte Carlo (MC) para o caso do ruído vetorial. **(a)** $\eta = 0.1$ (estado ordenado), **(b)** $\eta = 0.6$ (banda), **(c)** $\eta = 0.65$ (desordenado com *giant number fluctuations*) e **(d)** $\eta = 1.0$ (desordenado longe transição). Para todos os casos foram usados $L = 64$, $v_\circ = 0.5$ e $\rho_\circ = 2.0$. Foram usadas 250 caixas para fazer essas distribuições.

A Figura 7 mostra um exemplo de uma soma fasorial para o caso de três partículas na vizinhança e um ruído do tipo vetorial. Nessa representação fica evidente que o fasor resultante (**R**) se desvia da direção da soma da velocidade da vizinhança (**V**)[6] por um ângulo $\delta\theta$. Pode-se notar que a norma do fasor associado a soma dos ruídos (**E**), vide Fig. 7(b), é o raio do círculo centrado na extremidade **V**, no qual o vetor **E** gira dependendo do valor $\xi_i$ [7] .

A representação fasorial nos auxilia a compreender o comportamento do valor máximo de $\delta\theta$ observados na Fig. 6. Para ruídos muito baixos o sistema é fortemente ordenado, logo $|\mathbf{V}| \sim v_0\ n_i(t) > \eta\ n_i(t) = |\mathbf{E}|$. Uma vez que $|\mathbf{V}| > |\mathbf{E}|$, o valor máximo do desvio em relação a **V** é igual a $\delta\theta_{max} \simeq \arctan\left(\frac{|E|}{|V|}\right) \propto \arctan\left(\frac{\eta}{v_0}\right)$, ou seja, para o caso

[6] Consequentemente, também da direção da velocidade média da vizinhança, uma vez que a diferença entre os dois é uma constante igual $1/N$.

[7] Os valores de $\eta$ e $n_i(t)$ vão interferir somente na norma de **E** ($|\mathbf{E}| = \eta\ n_i(t)$ )

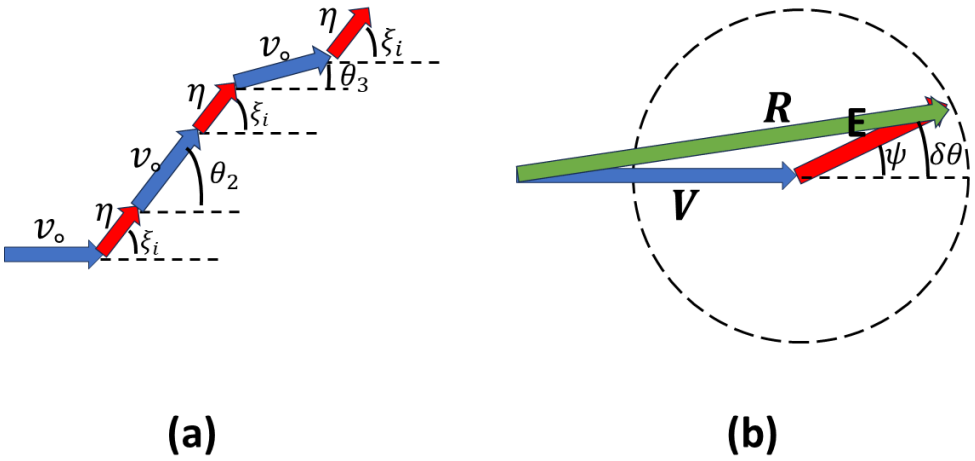



Figura 7 – Representação do ruído vetorial usando a técnica de soma fasorial. Em **(a)** representamos cada uma das velocidades dos vizinhos (em azul) e os vetores associados ao ruído (em vermelho) e **(b)** indicamos o fasor resultante (em verde), como a soma de duas resultantes: uma obtida com a soma das velocidades da vizinhança, **V** (azul), e e outra com a soma dos ruídos, **E** (vermelho). Note que $\delta\theta$ é o ângulo entre **V** e **R** e, $\psi$ o ângulo entre **V** e **E**.

do sistema fortemente ordenado espera-se que a distribuição de $\delta\theta$ fique mais larga com o aumento da intensidade do ruído. Por outro lado, para valores de $\eta$ suficiente grandes, o sistema fica desordenado e $|\mathbf{V}| \sim 0$. Dessa forma, $\mathbf{R} = \mathbf{V} + \mathbf{E} \sim \mathbf{E}$, então $\delta\theta \sim \xi_i$, ou seja, a distribuição de $\delta\theta$ passa a ter uma forma semelhante a do $\xi_i$ então $\delta\theta_{max} = \pi$ [8].

Para compreender o surgimento da distribuições do tipo Batman, vide Fig. 6(b), precisamos lembrar que o vetor **E** assume uma direção aleatória dentro do círculo (dependendo unicamente de $\xi_i$) e que $\delta\theta$ tem uma dependência trigonométrica (não trivial) com a direção deste vetor com o vetor **V**, $\delta\theta = \arctan\left(\frac{E_\perp}{V+E_\parallel}\right) = \arctan\left[\frac{E\sin(\psi)}{V+E\cos(\psi)}\right]$ ( $E_\perp$ e $E_\parallel$ são as componentes perpendiculares e paralelas do vetor **E** em relação ao vetor **V**, respectivamente). Numericamente, é fácil mostrar que, quando $|\mathbf{E}| < |\mathbf{V}|$ e a direção de **E** é escolhida de forma uniforme e aleatória em $(-\pi, \pi]$, a distribuição de $\delta\theta$ tem forma semelhante do Batman, com a diferença da curva de distribuição ser mais suavizada nas proximidades dos valores de frequência máxima. Analiticamente, pode-se observar que $\frac{d(\delta\theta)}{d\psi} = 0$ para $\psi = \pi/2 + \delta\theta$, o que acaba gerando o máximo da distribuição de $\delta\theta$ (a

[8] Uma vez que $\xi_i$ uniformemente distribuído em $(-\pi, \pi]$.

singularidade na distribuição do Batman).

Por fim, apesar dessas diferenças, o ruído vetorial é capaz de reproduzir a física do modelo de Vicsek, tal qual a descrita com o ruído angular, mas com a vantagem de se observar as propriedades de forma adequada em sistemas relativamente menores, como por exemplo a natureza descontínua da transição de fase do tipo ordem-desordem. Finalmente, uma análise mais sistemática está em curso, mas não foi concluída até o fim da escrita desta tese.

### 2.2.3 Análise hidrodinâmica do modelo de Vicsek

No mesmo ano de publicação do modelo de Vicsek original, vieram as primeiras tentativas de compreender as propriedades gerais do movimento coletivo, incluindo o próprio modelo de Vicsek, através de uma teoria hidrodinâmica em espaço contínuo. Um dos principais trabalhos foi feito por J. Toner e Y. Tu (1995) que, ao se basear exclusivamente nas simetrias do modelo desenvolveu uma equação semelhante a de Navier-Stokes [28]. A saber,

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \\ \partial_t \mathbf{v} + \lambda(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} = (\alpha - \beta|\mathrm{v}^2|)\mathbf{v} - \nabla P + D_L \nabla(\nabla\cdot\mathbf{v}) + D_1\nabla^2\mathbf{v} + D_2(\mathbf{v}\cdot\nabla)^2\ \mathbf{v} + \mathbf{f} \end{cases}, \tag{2.4}$$

onde $\rho$ e $\mathbf{v}$ são os campos densidade e velocidade[9], respectivamente. Os coeficientes $\beta$, $D_1$, $D_2$, $D_3$ e $D_L$ são positivos. Já $\alpha < 0$ para fase desordenada e $\alpha > 0$ para fase ordenada. Os termos $\alpha$ e $\beta$ são responsáveis por levar a um $\mathbf{v}$ local não nulo e com magnitude igual a $\sqrt{\alpha/\beta}$ na fase ordenada. $D_{L,1,2}$ são constantes difusivas e $\mathbf{f}$ é um ruído branco vetorial gaussiano $[\langle f_i(\mathbf{r},t) f_j(\mathbf{r}',t')\rangle \propto \delta_{ij}\delta^d(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t')]$ ($i$ e $j$ representando as componentes do vetor $\mathbf{r}$) . Por fim, P é uma pressão descrita na forma de expansão,

$$P = P(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(\rho - \rho_\circ)^n\ , \tag{2.5}$$

[9] Note que estes campos são tidos nesta aproximação hidrodinâmica como a média em uma pequena área do sistema, ou seja, aproximação tipo *coarse-grained*.

onde os $a_n$ são coeficientes da expansão e, $\rho$ e $\rho_\circ$ são as densidades local e média do sistema, respectivamente. Assim, $P$ é o excesso da pressão em relação a $P_\circ$, a pressão para a densidade $\rho_\circ$.

A primeira parte da Eq. (2.4), é a equação de continuidade, uma vez que, nesta análise o número de partículas é conservado. Já na segunda equação, precisamos destacar a presença do coeficiente $\lambda$ junto ao termo convectivo, que não é explicitado inicialmente, mas é adicionado *ad hoc* ao longo das análises. O autor argumenta que, como o sistema não conserva momento, por ser matéria ativa seca, a contribuição da convecção precisa ser atenuada. Dessa forma, conclui-se que, $\lambda < 1$ no modelo de Vicsek, podendo ser igual a unidade somente em modelos de matéria ativa molhada (com conservação de momento) [28].

Todos os termos da Eq. (2.4) foram obtidos exclusivamente a partir das simetrias do modelo microscópico[10] , sendo que a dependência dos coeficientes com os diferentes parâmetros do modelo é totalmente desconhecida. Por exemplo, nas seções anteriores a transição de fase ordem-desordem no modelo de Vicsek depende da densidade média e do ruído. Dessa forma, o coeficiente $\alpha$ deve depender desses parâmetros, de modo que mude de sinal nas proximidades de $\eta_c$.

Usando uma análise por grupo de renormalização, Toner e Tu mostraram que, dentre outras coisas, sistemas em $d \geq 2$ apresentam ordem de longo alcance, e que, para $d \leq 4$ o sistema tem expoentes de escala, discutidos abaixo, que são diferentes dos valores previstos por uma teoria de campo médio. Para analisar os efeitos das não-linearidades para comprimentos de onda e tempos longos em $d \leq 4$, Toner e Tu reescalaram tempo, comprimentos e os campos $\mathbf{v}_\perp$ e $\delta\rho$, introduzindo um comprimento $b$ e vários expoentes de

[10] A saber, simetrias sob rotações. Mas vale ressaltar que a equação não satisfaz a invariância galileana.

escala,

$$\begin{aligned} t &\to b^z t \\ \mathbf{v}_\perp &\to b^\chi \mathbf{v}_\perp \\ \delta\rho &\to b^{\chi_\rho}\delta\rho\,, \\ \mathbf{x}_\perp &\to b\mathbf{x}_\perp \\ \mathbf{x}_\parallel &\to b^\zeta \mathbf{x}_\parallel \end{aligned} \tag{2.6}$$

onde $\mathbf{v}_\perp \equiv \mathbf{v} - (\mathrm{v}_o + \delta v_\parallel)\hat{x}_\parallel$ é a flutuação da velocidade na direção perpendicular à da velocidade média (nas proximidades do estado ordenado)[11], $\delta\rho = \delta\rho(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) - \rho_\circ$ é a flutuação no campo densidade e, $\mathbf{x}_\perp$ e $\mathbf{x}_\parallel$ as coordenadas nas direções perpendicular e paralela a velocidade média, respectivamente.

Os expoentes de escalas são obtidos, ao fazer alguns termos difusivos constantes ($D_1, D_\parallel = D_1 + D_2$ e $D_\perp = D_1 + D_L$) e um parâmetro $\Delta$, chamado de força do ruído, fixo. Segundo os autores, essas escolhas (coeficientes de difusão constante e $\Delta$ fixo), se dá pelo fato de que, são estes quatro parâmetros que determinam por completo o tamanho das flutuações em tempos iguais na teoria linear[12]. Partindo desses argumentos é possível obter as seguintes relações para os expoentes críticos,

$$z = \tfrac{2(d+1)}{5} \quad \zeta = \tfrac{d+1}{5} \quad \chi = \tfrac{3-2d}{5} \quad . \tag{2.7}$$

Em estudo posterior Y. Tu *et al.* (1998) [41], ao realizarem análises de um modelo tipo Vicsek bidimensional[13] ($d = 2$), obtiveram resultados consistentes com os previstos pela teoria hidrodinâmica. Por exemplo, os autores obtiveram $\zeta \approx 0.6$ e $z \approx 1.23$, muito próximos dos previstos pela Eq. (2.7). Outro resultado importante que vai de encontro às previsões da teoria hidrodinâmica, é que a maioria dos parâmetros de escala neste modelo são anisotrópicos, sendo diferentes na direção do movimento e perpendicular a ele. Por

[11] Note que, Toner e Tu neste ponto da análise estão olhando as flutuações do campo velocidade em relação à velocidade média do sistema, ou seja, $\mathbf{v} = \mathrm{v}_\circ\hat{x}_\parallel + \delta\mathbf{v}$. Desta forma, qualquer componente perpendicular a direção média é tratado como uma flutuação, apesar dos autores terem omitido o $\delta$, ou seja, $\mathbf{v}_\perp = \delta\mathbf{v}_\perp$.

[12] A título de curiosidade, a autocorrelação das flutuações em tempos iguais no espaço de Fourier pode ser escrito como [28]: $\left\langle v_i^\perp(\mathbf{q},t)v_j^\perp(-\mathbf{q},t)\right\rangle = \frac{\Delta}{2}\left(\frac{q_i^\perp q_j^\perp}{\left(D_\perp q_\perp^2 + D_\parallel q_\parallel^2\right)} + \frac{q_\perp^2\delta_{ij}^\perp - q_i^\perp q_j^\perp}{\left(D_1 q_\perp^2 + D_\parallel q_\parallel^2\right)q_\perp^2}\right)$.

[13] Neste modelo eles acrescentaram um termo atração/repulsão $\propto (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)[(l_\circ/r_{ij})^3 - (l_\circ/r_ij)^2]$ adicionalmente ao ruído vetorial, descrito na seção anterior, a fim de evitar a formação de aglomerados de partículas no regime ordenado [41].

exemplo, a função de autocorrelação de densidade $C_\rho(\mathbf{r})$ escala com $q_\parallel^{-2}$ na direção do movimento e $q_\perp^{-6/5}$ na direção perpendicular. Além disso, quando analisada a velocidade de propagação de ondas sonoras ($v_s$), foi possível mostrar a existência de dois valores distintos , $v_s$ e $\lambda v_s$, para direções distintas. Esse $\lambda$ é o coeficiente do termo convectivo da Eq. (2.4), com o valor igual 0.75 neste modelo. Conforme já discutido, no modelo de Vicsek não existe conservação de momento, então $\lambda$ realmente deve ser menor que a unidade e, segundo o autor, isso implica a existência de duas velocidades de som distintas [41].

Esses resultados não apenas sugerem que o modelo de Vicsek possui um ordenamento de longo alcance, mas também evidenciam a possibilidade da existência de uma estrutura no estado ordenado, similar à observada por Chaté et al. (2008), devido às correlações anisotrópicas entre as partículas.

Por fim, precisamos destacar que, apesar dos autores demostrarem originalmente uma relação exata para os expoentes de escala para $d \leq 4$, os estudos posteriores mostraram que tal igualdade só poderia ser válida para modelos de matéria ativa com dinâmica populacional, ou seja, nos quais o número de partículas não é constante [42]. Já para casos em que o número de partículas é conservado, as igualdades [vide Eq. (2.7)] não seriam válidas para $d = 2$ e tais expoentes só poderiam ser obtidos por aproximação numérica [43]. Essas reanálises mostraram que as não linearidades na Eq. (2.4) são incapazes de estabilizar o ordenamento de longo alcance em $d = 2$, sendo necessário a inclusão de outros termos permitidos na simetria do problema: um termo de pressão anisotrópico $\mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \nabla P_2)$ e dois termos convectivos, $\lambda_2(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{v}$ e $\lambda_3 \nabla(\mathrm{v}^2)$ [43].

Toner (2012) mostra que os novos termos levam à estabilidade do ordenamento, inclusive, para $d = 2$ (modelo tipo Vicsek). Nesse caso, os expoentes de escala não são obtidos exatamente, mas têm valores próximos aos já previstos na Eq. (2.7). Tal resultado é importante, pois mostra que são os termos não possíveis em uma equação hidrodinâmica de equilíbrio, que possibilitam a quebra espontânea de uma simetria contínua no modelo de Vicsek. Isso encerra uma longa discussão associada ao teorema de Mermin-Wagner [44] e matéria ativa, uma vez que torna evidente que estes modelos são essencialmente fora de

equilíbrio e, portanto, não são, necessariamente, sujeitos ao teorema.

### 2.2.4 A classe de Vicsek

F. Ginelli (2016) traz uma pequena revisão acerca da física do modelo de Vicsek [31]. Ele elenca o que entendemos atualmente como sendo as três principais propriedades essenciais à *classe de Vicsek*.

A primeira delas diz respeito ao surgimento espontâneo de um ordenamento polar. A Eq. (2.1) é isotrópica no espaço, não tendo, a priori, uma direção preferencial. Contudo, na parte de evolução temporal de $\theta$ há um termo de alinhamento (tipo ferromagnético). Se a intensidade do alinhamento é suficiente para superar o ruído, o sistema pode evoluir para um ordenamento orientacional global de forma a exibir comportamento coletivo. Esse estado é caracterizado por um parâmetro de ordem polar,

$$\vec{\phi}(t) = \frac{1}{Nv_\circ} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i(t) \ , \tag{2.8}$$

um análogo da magnetização total em sistemas de *spin*. O seu módulo é, essencialmente, determinado por três parâmetros de controle $\rho_\circ$, $\eta$ e $v_\circ$ (eventualmente o seu valor pode depender de $L$ por causa dos efeitos de tamanho finitos, uma vez que, na fase desordenada, a soma sobre todos os vetores não se anula completamente, levando a $|\phi(t)| \sim 1/\sqrt{N}$). Por fim, a média temporal do módulo é usada para descrever a quebra espontânea de simetria, com $\phi = \langle \phi(t) \rangle_t > 0$ na fase ordenada. Como não existe direção preferencial no ordenamento na fase ordenada, isto é, existe simetria rotacional para o parâmetro de ordem, na transição para o movimento coletivo uma simetria contínua é quebrada de forma espontânea.

A segunda propriedade se relaciona à auto-propulsão e à interação de alinhamento. As partículas são auto-propelidas e se movem conforme a Eq. (2.1). Elas se movem na direção do seu ordenamento, um grau de liberdade interno da própria partícula. Esse direcionamento interno, se dá através de uma matriz de conectividade que não é estática, mas que muda ao longo do tempo de uma forma não trivial, levando ao que H. Chaté (2020) [38], chama de acoplamento entre os campos densidade e velocidade. É neste ponto

que a natureza de não equilíbrio, ou melhor, longe do equilíbrio, característica do modelo de Vicsek se manifesta. É claro que a dinâmica temporal da matriz de conectividade só ocorre como consequência da mobilidade se a interação de alinhamento for local, ou seja, se $\mathcal{R} << L$. Nesse ponto inclusive, há uma necessidade de melhor compreensão de como interações não-métricas podem alterar as propriedades do modelo de Vicsek, ou seja, modelos onde a delimitação da vizinhança não depende de um parâmetro métrico fixo. Um exemplo desse tipo de modelo é discutido em [45].

Por fim, o terceiro ponto versa sobre as grandezas conservadas. Fica evidente nas discussões das seções anteriores que a única lei de conservação do modelo de Vicsek se dá sobre o número de partículas. Não existindo, sobretudo, conservação de momento, o que leva à quebra da invariância de Galileu. De fato, tanto a fórmula explicita da dinâmica do modelo de Vicsek de Vicsek, Eq. (2.1), quanto a equação hidrodinâmica, Eq. (2.4), não se mostram invariantes sobre a adição de uma vetor constante e arbitrário na velocidade.

## 2.3 Modelos de matéria ativa no espaço discreto

Apesar de poucos sistemas físicos reais serem de natureza discreta a nível macroscópico, a aproximação de modelos contínuos por análogos discretos se mostra uma grande aliada para o avanço na compreensão de fenômenos reais. Um dos exemplos mais conhecidos na área de física é o modelo de Ising[14] [47]. Nesse modelo, um conjunto de $N$ partículas são mantidas fixas em uma rede e podem variar os seus estados em dois níveis, $s = \{-1, 1\}$, tendo como hamiltoniano $\mathcal{H}_I = -\frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{i\sim j}^{N} s_i \cdot s_j + \mathcal{H}_\circ$, o somatório em $j$ se dá sobre as partículas consideradas vizinhas da $i$-ésima partícula e $J$ está associado a uma energia devido a interação de troca, sendo $J > 0$ para sistemas ferromagnéticos e $J < 0$ para sistemas antiferromagnéticos. Além disso, na maioria dos trabalhos e exemplos de aplicação, a evolução temporal usada no modelo de Ising se dá por intermédio do algoritmo de Metropolis [47], que discretiza, também, o tempo. Essas discretizações simplificam, sobretudo, a modelagem computacional e a abordagem analítica do problema

[14] Vale lembrar que o modelo de Ising é igual ao modelo Potts de dois estados [46].

e, em contrapartida, fornecem resultados compensatórios acerca da descrição quantitativa de vários fenômenos magnéticos, tais como domínios e propriedades críticas, ao permitir análises de sistema significativamente maiores que os análogos em tempo e espaço contínuo.

Tendo em vista o que já é observado em sistemas tradicionais, um dos processos naturais na investigação de modelos de matéria ativa passa pela validação e verificação dos limites de aplicabilidade, por exemplo, da classe de universalidade de Vicsek em modelos em rede, tendo espaço e/ou tempo discretos.

Nesta seção, discutiremos alguns dos principais modelos de Vicsek em espaço discreto e que foram usados como base para propor o modelo tema desta tese.

### 2.3.1 Modelo de Ising Ativo

O modelo de Ising Ativo foi proposto por Solon e colaboradores em 2013 [6]. Inicialmente, foi desenvolvido um modelo unidimensional, mas em um trabalho posterior o modelo foi ampliado para uma versão, até certo ponto, bidimensional, mas que mantém a sua essência e preserva as propriedades do modelo original [7]. Em ambos os trabalhos, os autores dividem as análises do modelo de Ising ativo em duas frentes principais: análises de modelos através de simulações e por meio de uma teoria de campo médio.

No modelo de Ising ativo, $N$ partículas são distribuídas em uma rede quadrada bidimensional de tamanho $L_x \times L_y$ sítios e com condições de contorno periódicas. Cada uma dessas partículas possui um grau de liberdade interno chamado, oportunamente, de *spin* e que assume dois valores possíveis, $s = \{-1, 1\}$, associados à direção que tendem a se mover na rede. Assim como ocorre no modelo de Vicsek, nesse modelo não há nenhum tipo de interação que restrinja a quantidade de partículas que pode ocupar uma dada posição, ou seja, não há a implementação de uma interação tipo volume excluído no modelo. A dinâmica das partículas ocorre a partir de dois processos estocásticos. O primeiro deles é a possibilidade da partícula trocar o seu *spin*, ou seja, $s \to -s$. Esse processo ocorre com uma taxa

$$W(s \to -s) = \gamma \exp\left(-s\beta \frac{m_i}{\rho_i}\right) , \tag{2.9}$$

sendo $\gamma$ um parâmetro ajustável do modelo, $\beta \equiv T^{-1}$ é um parâmetro que faz um papel semelhante ao [inverso do] ruído no modelo de Vicsek (é análogo ao inverso da temperatura no caso do modelo de Ising clássico), $m_i$ e $\rho_i$ são iguais à diferença e soma do número de partículas com *spins* positivos ($n_i^+$) e negativos ($n_i^-$) no $i$-ésimo sítio da rede, respectivamente, ou seja, $m_i = n_i^+ - n_i^-$ e $\rho_i = n_i^+ + n_i^-$. Segundo os autores, a escolha da taxa $W(s \to -s)$ faz com que, no limite onde não há mobilidade ($D = 0$, vide próximo parágrafo), este modelo é equivalente a $L^d$ modelos Ising independentes e completamente conectados.

O segundo processo está relacionado com a difusão ao longo da rede, o que possibilita as partículas efetuarem saltos em cada uma das direções, com as seguintes taxas,

$$\begin{array}{l} \text{direita} : D(1 + s\epsilon) \\ \text{esquerda} : D(1 - s\epsilon) \\ \text{cima} : D \\ \text{baixo} : D \end{array}, \tag{2.10}$$

onde $D$ é um parâmetro que controla o processo de difusão e $\epsilon$ é um parâmetro responsável por fazer o processo de difusão ser tendencioso. Vale frisar que, ambos os parâmetros são maiores ou iguais a zero e, no caso unidimensional, os dois últimos termos da listagem acima não existem. A Figura 8 mostra um esquema desses dois processos.

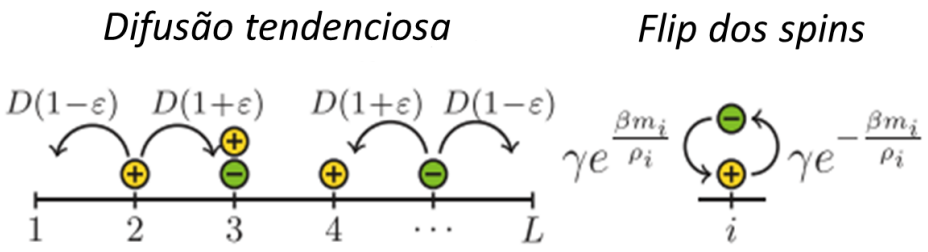



Figura 8 – Esquema mostrando os dois processos estocásticos e as taxas em que eles ocorrem no modelo de Ising ativo. A interação tipo ferromagnética ocorre exclusivamente no sítio, por meio do processo com *flip* dos *spins* (W), e as partículas podem se difundir livremente pela rede (não há volume de exclusão no modelo). Além das difusões tendenciosas mostradas aqui, na versão bidimensional do modelo, as partículas podem saltar para cima ou para baixo, simetricamente, com uma taxa igual a D. Imagem adaptada de [7].

Uma atenção especial deve ser dada ao analisar os parâmetros do modelo e fazer uma comparação direta com o modelo de Vicsek. Os próprios autores afirmam que o parâmetro $\epsilon$ é o responsável por controlar a autopropulsão da partícula, tal qual o $v_\circ$ faz no modelo de Vicsek, e seguem classificando, segundo a intensidade de $\epsilon$, os tipos de movimento do modelo em quatro : quando $\epsilon = 0$ o processo é puramente difusivo; quando $\epsilon \sim 1/L$, o sistema fica fracamente autopropelido; $\epsilon \in (0, 1)$ o sistema fica autopropelido e quando $\epsilon = 1$ o sistema é totalmente autopropelido. Vale notar que, para $\epsilon = 0$ as partículas se autopropelem (permanecem saltando na rede) e o sistema continua fora de equilíbrio, uma vez que, ao não satisfazer o critério de Komogorov [48], também não satisfaz balanço detalhado [7] e o sistema permanece fora do equilíbrio. No entanto, para esse regime, a partícula perde a capacidade de auto-direcionar o seu movimento, ou seja, ela "perde" a informação sobre o grau de liberdade interno.

Entretanto, apesar dessas diferenças, os autores argumentam que para $\epsilon = 0$ e no limite termodinâmico, o sistema acaba pertencendo à classe de universalidade de Ising. Por outro lado, se $D = 0$, independentemente do valor de $\epsilon$, o sistema volta a ser de equilíbrio, tornando-se equivalente ao modelo de Ising, assim como para $v_\circ = 0$ o modelo de Vicsek equivale ao modelo $XY$. Nesse sentido, a analogia mais adequada a $v_\circ = 0$ seria com o parâmetro $D = 0$. Já uma das possíveis interpretações para o $\epsilon$ seria algo análogo ao parâmetro que controla a reversão na velocidade no caso de modelos descritos em [49, 50] [15].

Segundo os autores, os resultados, tanto simulacionais quanto da teoria de campo médio, indicam que esse modelo exibe três fases com características semelhantes as configurações observadas no modelo de Vicsek original. A Figura 9 mostra essas fases. Podemos observar uma fase homogênea desordenada, comumente chamada neste contexto de gás, uma fase homogênea e ordenada, chamada de líquido, e, uma situação onde ambas as fases coexistem, formando uma banda que é perpendicular à direção de propagação das partículas, tal qual, a observada no modelo de Vicsek. O interessante é que a coexistência

[15] Uma revisão interessante sobre três tipos de matéria ativa seca e diluída, incluindo a relacionada ao efeito da reversão para entes extensos, é feita em [38].

também ocorre na região de transição de fase e leva a uma transição descontínua (se $D > 0$ e $\epsilon > 0$)[16]. Outro resultado interessante é que os valores máximos da densidade e

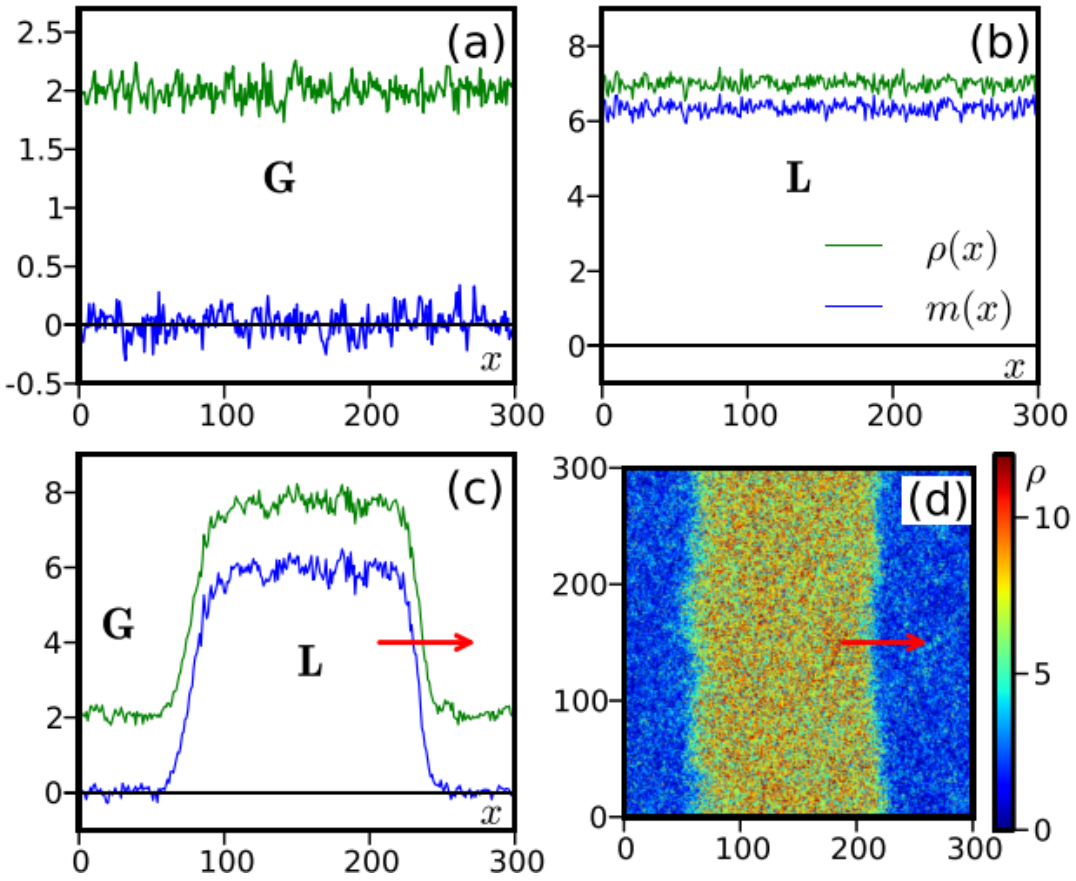



Figura 9 – As três fases existentes no modelo de Ising ativo. São mostrados em linhas verdes e azuis a média dos valores da densidade ($\rho_i$) e da magnetização ($m_i$), respectivamente, ao longo da direção vertical para as três fases. (a) Fase homogênea e completamente aleatória (gás desordenado), $\beta = 1.4$ e $\rho_\circ = 2$. (b) Fase homogênea e ordenada (líquido polar), $\beta = 2$ e $\rho = 7$. (c) Banda transversal (Coexistência de líquido-gás), $\beta = 1.6$ e $\rho = 5$. (d) Imagem mostrando uma configuração típica de (c). Em todos os casos $D = 1$, $\epsilon = 0.9$ e $L_x = L_y = 300$. Imagem extraída de [7].

da magnetização, $\rho_l$ e $m_l$, assim como os seus valores mínimos, $\rho_g$ e $m_g$, são independentes de $\rho_\circ$ e $\epsilon$. Dessa forma ao aumentar $\rho_\circ$ mantendo $\beta$ constante, simplesmente aumenta-se a espessura das bandas, veja Fig. 4 de [7].

O diagrama de fase desse modelo, vide Fig. 10 mostra que a temperatura crítica ($T_c$) e a densidade crítica ($\rho_c$) divergem com a existência da fase líquido-gás no modelo

[16] Vale frisar que no caso específico do $\epsilon = 0$, por causa de efeitos de tamanho finito, para que o sistema deixe de exibir características de uma transição de fase contínua os trabalhos usam tamanhos maiores, $\mathcal{O}(L) \sim 1000$.

de Ising ativo (não é observado no análogo clássico), ou seja, $T_c \to \infty$ e $\rho \to \infty$. Dessa forma, não é possível levar continuamente o sistema do estado de líquido [ordenado] para o gás [desordenado] sem passar pelo estado líquido-gás, tendo sempre uma transição de fase líquido-gás descontínua. A única exceção é quando consideramos $\epsilon = 0$, pois neste caso, $\rho_g = \rho_l = \rho^*$ e o sistema passa a ter uma transição de fase contínua.

Além disso, a observação da evolução temporal das fases permitiu evidenciar a existência de ambos os processos que levam à separação e à formação do estado líquido-gás: a nucleação e a decomposição espinodal [51]. Esse resultado é corroborado pela teoria de campo médio (refinada), ao mostrar que existe uma região de metaestabilidade para uma solução homogênea dos campos densidade e/ou magnetização, delimitada pelas curvas contínuas, vide imagem inferior da Fig. 10, levando ao aparecimento de uma distribuição bimodal do parâmetro de ordem.

Entretanto, além dessa região de metaestabilidade, existe uma região onde a solução homogênea é linearmente instável, ou seja, não são observada as fases homogêneas (gás e líquido), a delimitação dessa região é indicada pela curva tracejadas na mesma imagem. Um comportamento muito semelhante foi verificado no caso do modelo de Vicsek, vide Fig. 1(a) de [38]. Além disso, observa-se a existência de histerese na região de transição de fase.

A comparação entre o modelo de Ising ativo e o modelo de Ising fica mais evidente quando utiliza-se a teoria de escala de tamanho finito padrão de sistemas magnéticos na região crítica [52]. É conhecido que, para regiões críticas, os parâmetros de ordem ($\langle m \rangle$), a susceptibilidade ($\chi \equiv L^2 \left\langle (m - \langle m \rangle)^2 \right\rangle$) e o cumulante de Binder ($U_4$) de quarta ordem obedecem as seguintes relações de escala,

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= L^{-\beta/\nu} F_m(tL^{1/\nu}) \\ \chi &= L^{-\gamma/\nu} F_\chi(tL^{1/\nu}) \quad , \\ U_4 &= F_{U_4}(tL^{1/\nu}) \end{aligned} \tag{2.11}$$

onde $t \equiv (T - T_c)/T_c$ é temperatura crítica reescalada, as $F$'s são as chamadas funções genéricas de escala, os expoentes $\beta$, $\gamma$ e $\nu$ são os expoentes críticos, comumente utilizados na

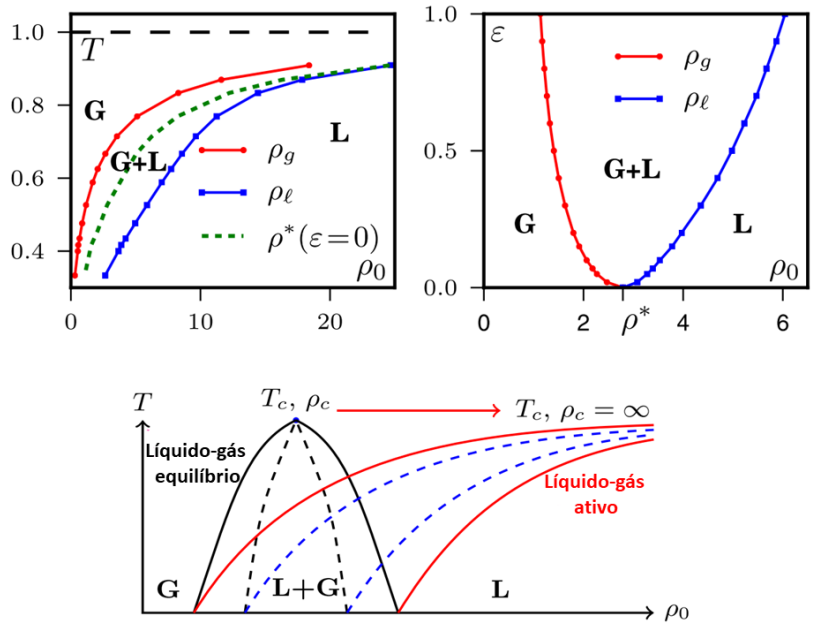



Figura 10 – Diagrama de fases para o modelo de Ising ativo. Superior: mostra o diagrama de fases no plano $(T - \rho_\circ)$ (esquerda) e no plano $(\epsilon - \rho_\circ)$ (direita). Inferior: Esquema comparando o comportamento do diagrama de fases entre o modelo de Ising de equilíbrio e o Ising ativo. As curvas contínuas mostram os limites de coexistências dos estados e as tracejadas (na figura inferior) mostram o limite de estabilidade linear dos campos densidade e/ou magnetização (transição espinodal). Essas figuras foram extraídas de [7]

investigação de classes de universalidade e, os colchetes angulares indicam a média temporal sobre o estado estacionário. Vale salientar que, no caso da análise da transição do modelo de Ising ativo, os autores fazem analogia com a transição de fase tipo líquido-gás, dessa forma é mais comum o uso da densidade média como parâmetro ajustável, $t(T) \to t(\rho_\circ)$. A Figura 11 mostra o comportamento das grandezas descritas pela Eq. (2.11) após realizar a reescala e usando os expoentes críticos do modelo de Ising bidimensional, a saber: $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ e $\nu = 1$. Além disso, a curva obtida a partir dos dados de tamanhos diferentes se cruzam em $t = 0$ para um valor universal de $U_4(t = 0) \approx 0.61$, característico da classe de universalidade de Ising em duas dimensões. Dessa forma, fica evidente que modelo de Ising ativo pertence a classe de universalidade de Ising no limite onde $\epsilon = 0$. Apesar das curvas para tamanhos diferentes se sobreporem ao ponto de, visivelmente, verificarmos a concordância dos modelos, não foi possível encontrar na literatura trabalhos analisando diretamente os valores dos expoentes críticos a partir dos dados do modelo de Ising ativo, sendo esse um possível trabalho a ser desenvolvido.

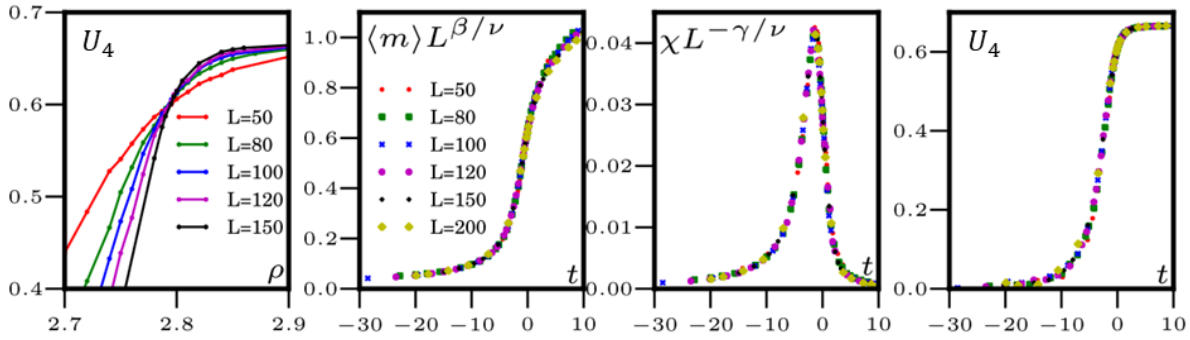



Figura 11 – À esquerda: Cumulante de Binder como função da densidade, usado para encontrar o valor crítico da densidade $\rho = \rho^* = 2.798(2)$. As outras figuras: são os colapsos dos dados nas funções universais de escala, $F_m$, $F_\chi$ e $F_{U_4}$, após os dados serem reescalados usando os expoentes críticos do modelo Ising bidimensional, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ e $\nu = 1$. Os parâmetros usados na simulação são: $D = 1$, $\epsilon = 0$ e $\beta = 1.9$. No trablho original há um valor de $\epsilon = 0.9$, mas ao ler as discussões acerca da figura, fica claro que o valor correto é $\epsilon = 0$. Imagem adaptada de [7].

Por fim, os resultados obtidos para a $\Delta n$ no modelo de Ising ativo mostram um comportamento muito distinto do observado no modelo de Vicsek. No caso do modelo de Ising ativo, verificou-se que $\Delta n \sim \langle n \rangle^{1/2}$ para as duas fases homogêneas (líquido e gás), ou seja, tanto o modelo de não-equilíbrio quanto o seu análogo de equilíbrio, possuem o mesmo comportamento, diferentemente do modelo de Vicsek [7, 53].

### 2.3.2 Modelos de Potts ativo de quatro e seis estados

O modelo de Potts ativo de quatro estados, pode ser visto como uma extensão do modelo de Ising ativo. Resumidamente, nesse modelo as partículas podem assumir quatro estados distintos, associados às quatro possíveis direções dos saltos das partículas em uma rede quadrada [8]. De forma semelhante ao modelo de Ising ativo, no modelo de Potts ativo de quatro estados há dois tipos de processos estocásticos que ditam a dinâmica do sistema: um relacionado com a probabilidade da partícula mudar o *spin* e um processo de difusão tendencioso, porém com a tendência ocorrendo nas quatro direções (e não mais em duas, como ocorria no modelo de Ising ativo), de tal forma a forçar as partículas a saltarem na direção associada ao seu estado. Esse modelo exibe os mesmos comportamentos observados para o modelo de Ising ativo, exceto pelo aparecimento de uma nova fase caracterizada por uma banda densa que coexiste com um gás, mas com o ordenamento longitudinal (além

das fases já observadas no modelo de Ising ativo). Segundo o autor, essa nova fase aparece para valores de $\epsilon$ tipicamente maiores ($\epsilon \approx 2.5$) aos que levam ao aparecimento das bandas transversais ($\epsilon \approx 0.7$) (considerando os valores dos parâmetros usados em [8]), mas ambas levam a uma transição de fase do tipo líquido-gás semelhante à discutida para o modelo de Ising ativo. Um comportamento semelhante foi observado para o caso do modelo de Potts ativo de seis estados. Esse modelo, apesar de estar definido em uma rede triangular, reproduziu as quatro fases do modelo de Potts ativo de quatro estados, com a diferença de que a banda longitudinal ocorre para valores significativamente maiores de $\epsilon$ ($\approx 4$) [9].

É importante ressaltar que há uma grande diferença entre os modelos de Potts ativos e o modelo de Ising ativo no que diz respeito ao comportamento em $\epsilon = 0$. Conforme discutido na Sec. 2.3.1, no regime puramente difusivo o modelo de Ising ativo pertence à mesma classe de universalidade do modelo de Ising, já para os casos de Potts ativo de quatro e seis estados a equivalência entre o modelo de equilíbrio e os ativos não é observada. Por exemplo, M. Mangeat *et al.* (2020) mencionam que ao realizar uma análise de escala, em conformidade com o descrito pela Eq. (2.11), usando os expoentes críticos do modelo de Potts, não foi possível observar o colapso dos dados de vários tamanhos de sistema. Além disso, o comportamento da magnetização, da susceptibilidade e do cumulante de Binder apontam para uma transição descontínua mesmo para $\epsilon = 0$, o que não é observado para o modelo de Potts de $q$ estados, com $q \leq 4$ (rede quadrada) e $q \leq 3$ (rede cúbica) [9, 46, 54].

### 2.3.3 Modelo de Peruani *et al.*

Em uma tentativa de aproximar os modelos de matéria ativa à sistemas reais, Peruani *et al.* (2011) propôs um modelo, chamado aqui simplesmente de modelo de Peruani (MP), que visa incluir uma interação tipo volume excluído. Esse tipo de interação, segundo o autor, vem na tentativa de reproduzir o fato de, em sistemas reais, os constituintes da matéria ativa ocuparem um volume no espaço e, ao tentarem se mover na mesma direção, geram congestionamentos no sistema e, consequentemente, uma redução na mobilidade das partículas, ou seja, na sua "atividade". Dessa forma, os autores optam por trabalhar

com um modelo em rede, onde a implementação de uma interação tipo volume excluído é mais eficiente, pois pode-se fazê-la simplesmente limitando o número de partículas nos sítios da rede [16].

Nesse modelo, $N$ partículas se movem em uma rede quadrada com $L \times L$ sítios, com condições de contorno periódicas e podem assumir quatro possíveis orientações, relacionadas com a direção para qual a partícula tentará saltar: *para cima*, *para baixo*, *para esquerda* e *para direita*, relacionados com os vetores $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$, $\mathbf{v}_3$ e $\mathbf{v}_4$, respectivamente. Dessa forma, o estado de uma partícula é descrito pela sua posição na rede, bem como a sua orientação.

A dinâmica, tal qual ocorria nos modelos descritos nas subseções anteriores, ocorre através de dois processos estocásticos: (i) as partículas alteram suas orientações e (ii) as partículas saltam no sentido de sua orientação. Cada um desses processos estão associados a taxas de transição que especificam o número médio de vezes que cada um desses eventos ocorrem por unidade de tempo. Primeiramente, a taxa com que uma partícula na posição $\mathbf{x}$ tende a mudar a sua orientação de $\mathbf{v}_i$ para $\mathbf{v}_j$ é dada por

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i \to \mathbf{v}_j) = \exp\left(g \sum_{\mathbf{y}\in\mathcal{R}(\mathbf{x})} \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{V}(\mathbf{y})\right), \tag{2.12}$$

onde a soma ocorre sobre todos os sítios primeiros vizinhos ao sítio $\mathbf{x}$, representado pela região $\mathcal{R}(\mathbf{x})$. A função $\mathbf{V}(\mathbf{y})$ retorna a orientação da partícula na posição $\mathbf{y}$, se o sítio estiver ocupado, e o vetor nulo, caso o sítio esteja vazio. Fica evidente que, da forma como $W$ foi definida, $g$ controla a sensibilidade ao alinhamento e que, para $g > 0$ esse processo estocástico leva a um mecanismo de alinhamento tipo ferromagnético.

A taxa relacionada ao processo de mobilidade é definida como

$$W_M(\mathbf{x} \to \mathbf{y}, \mathbf{v}_i) = \begin{cases} v_\circ, & \text{se o sítio } \mathbf{y} \text{ estiver vazio} \\ \\ 0, & \text{se o sítio } \mathbf{y} \text{ estiver cheio} \end{cases}. \tag{2.13}$$

Dessa forma uma partícula em $\mathbf{x}$ que aponta para para a direção $\mathbf{v}_i$ migra para a posição $\mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{v}_i$ com taxa $v_\circ$ se, e somente se, o sítio alvo estiver vazio. Caso o sítio $\mathbf{y}$ esteja ocupado, a partícula não salta, tendo como única ação possível, atualizar a sua orientação.

Vale salientar que no estudo [16] os $\mathbf{v}$'s e $\mathcal{R}(\mathbf{x})$ foram definidos de tal forma que os saltos e a interação de alinhamento só envolvem os primeiros vizinhos de cada sítio.

Já para a evolução temporal, os autores usaram uma adaptação do algoritmo de Gillespie [55] para sistemas interagentes, a fim de obter uma solução mais próxima a de tempo contínuo (não há detalhamento de como foi implementada essa adaptação). Além disso, essa forma de implementar os saltos é bem diferente das usadas no modelo de Ising ativo e nos modelo de Potts ativo de quatro/seis estados, uma vez que no caso do modelo de Peruani as partículas sempre vão tentar pular na direção associada ao seu *spin* (a critério de comparação, no modelo de Peruani seria equivalente a usar $\epsilon = 1$, acrescido da regra de ocupação máxima do sítio), não havendo a possibilidade de salto em um sentido contrária.

Como resultado, foi possível verificar que o modelo de Peruani exibe quatro padrões espaciais auto-organizados típicos, vide Fig. 12. O primeiro padrão, chamado de agregados desordenados (DA, do termo em inglês *disorded aggregates*), ocorre quando as partículas são pouco sensíveis ao termo de alinhamento, ou seja, para valores "pequenos" de $g$, e é caracterizado pela falta de ordenamento de longo alcance, de tal modo que temos pequenos grupos de partículas próximas (aglomerados) com orientações iguais, mas cada um desses aglomerados possuem uma orientação média independente do outro.

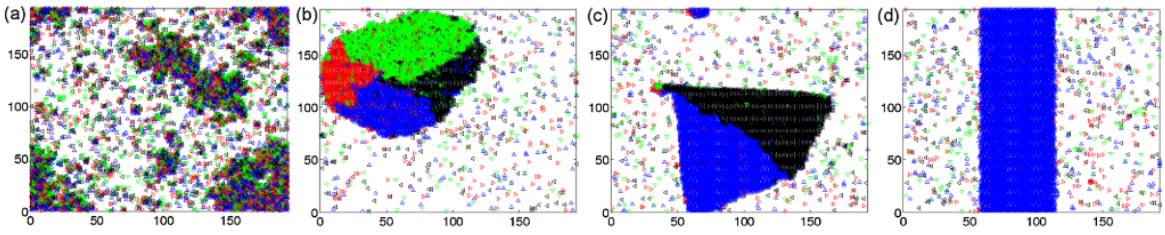



Figura 12 – Exemplos dos padrões que aparecem no modelo de Peruani. (a) aglomerados desordenados (DA), (b) congestionamento (TJ), (c) planadores e (d) banda (IB). A orientação de cada partícula está indicada por pequenos triângulos e pelo esquema de cores: *para cima* (azul), *para baixo* (verde), *para esquerda* (preto) e *para direita* (vermelho). Esta imagem foi extraída de [16].

Já no limite oposto, ou seja, quando o valor de $g$ é "grande", observa-se o aparecimento de banda(s). Essas são configurações em que as partículas se organizam em uma região (ou regiões) densa(s) onde, basicamente, todas elas possuem a mesma orientação,

que é longitudinal à própria banda. Existe também uma região de baixa densidade que circunda as bandas, onde as partículas não exibem ordenamento[17].

Um ponto interessante a se ressaltar sobre essas bandas é que, apesar da estrutura ser semelhante às bandas longitudinais observadas nos modelos de Potts ativo, vide Sec. 2.3.2, a interação do volume excluído existente no modelo de Peruani faz com que a maioria das partículas dentro das regiões densas não consigam se mover. Dessa forma, a mobilidade acada ocorrendo, por via de regra, nas fronteiras da banda e na região de baixa densidade. Sendo assim, podemos ver essas bandas no modelo de Peruani como regiões que não se movem[18] e, onde as partículas ficam congestionadas e, por isso, pode-se melhor denominar esse tipo de estrutura como bandas imóveis (IB, do termo em inglês *immoble bands*).

Por fim, os padrões chamados de engarrafamento (TJ, do termo em inglês *traffic jams*) e planador (GL, do termo em inglês *gliders*), aparecem em valores intermediários de $g$. No que diz respeito à organização em si, essas configurações se caracterizam pela formação de aglomerados densos de partículas, tipicamente maiores que os observados no DA, com velocidades distintas, mas que permanecem juntos. Na questão de mobilidade, esses dois padrões são essencialmente distintos, pois os TJ executam pequenos deslocamentos erráticos e, quando avalia-se o deslocamento do centro de massa do sistema, vemos que ele executa um movimento browniano. Por outro lado, os GL move-se persistentemente no sentido oposto ao da velocidade média das partículas que o constituem, fazendo com que o centro de massa tenha um movimento balístico. Dessa forma, podemos concluir que os GL são notavelmente diferentes dos estados congestionados observados nos modelos de tráfico bidimensional [56, 57]. Essa diferença se dá essencialmente por causa da interação de alinhamento do modelo de Peruani [16].

Para classificar as fases, usa-se uma grandeza chamada de magnetização ($m$), mas que é definida da mesma forma que o parâmetro de ordem $\phi(t)$, vide Sec. 2.2. A Figura 13

[17] Apesar desse padrão como um todo ser classificado como banda (gás mais região densa), na maioria das vezes se refere somente à região densa como a banda propriamente dita.

[18] Ocorrem em alguns pontos no espaço de parâmetros, onde as bandas aparentemente são instáveis e no processo de nucleação/destruição de uma nova banda, elas são formadas em outras posições e/ou orientações. Os autores em [16] mencionam que não observaram deslocamento dessas bandas.

mostra o valor médio desse parâmetro no estado estacionário como função de $g$. A Fase I ocorre para $g < g^*$ e é caracterizada por não exibir um ordenamento macroscópico, sendo observado essencialmente os padrões do tipo DA, descrito no parágrafo anterior, que tem valores de $m \approx 0$.

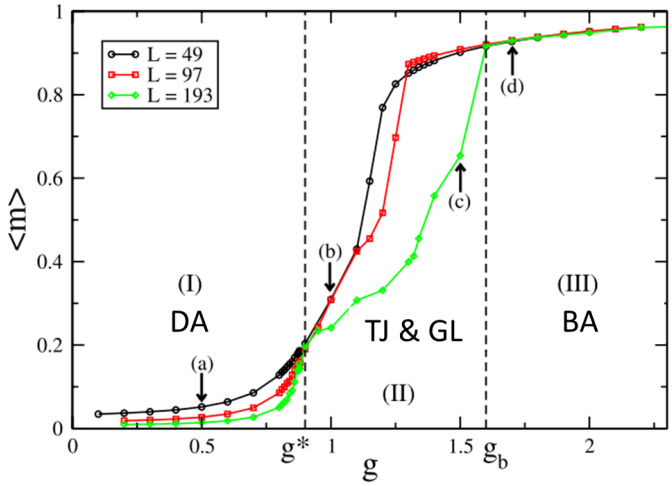



Figura 13 – Valor médio de $m$ como função de $g$, mantendo fixos $\rho = 0.3$ e a taxa de migração $v_\circ = 100$. As simulações foram feitas usando $2 \times 10^7$ passos de tempo. Cada curva representa um tamanho $L$ diferente. O limítrofe entre as fases I e II, $g^*$, e entre as fases II e III, $g_b$, são indicados pelas linhas verticais tracejadas. As marcações (a)-(d) referem-se aos padrões descritos na Fig. 12. O BA indicado na figura equivale, nos termos do presente, ao padrão IB. Esta figura foi extraída de [16].

A Fase II é caracterizada pelo aparecimento de estruturas com ordenamento local, basicamente TJ e GL, sendo que para valores maiores de $g$ pode surgir IB, com tempo de vida menores que o tempo da simulação. É interessante destacar que na Fase II o sistema apresenta um processo dinâmico, em que se observa uma espécie de competição entre regiões com velocidade distintas para "capturar" as partículas uma das outras. Com isso, observa-se que na Fase II, os padrões ficam mudando de tamanho, se movendo no espaço e inclusive alternando entre os padrões TJ-GL-IB, sendo que o tempo que o sistema permanece em cada uma deles depende do valor de $g$ (para valores de $g$ próximos de $g^*$ o sistema permanece mais tempo no TJ, já para valores de $g$ próximos de $g_b$, ele fica predominantemente no GL).

Por isso, essa fase apresenta um valor de $m$ que varia significativamente no tempo, refletindo cada um dos padrões que ocorrerem: $m$ menores indicam o TJ, $m \sim 1/\sqrt{2}$ os

GL, $m \gtrsim 0.9$ para os IB instáveis. A Fase II aparece para valores de $g^* < g < g_b$.

Por fim, na Fase III há bandas ordenadas que são estáveis ao longo do tempo. Assim, $g^*$ e $g_b$ marcam as transições entre as Fases I-II e as Fases II-III, respectivamente.

As fronteiras de fase $g^*$ e $g_b$ possuem algumas propriedades interessantes. A primeira delas, mostrada por Peruani *et al.* (2011), é que $g^*$ independe do tamanho e da densidade do sistema, sendo que no caso de rede cheia, $\rho \equiv N/L^2 = 1$, esse é um ponto crítico. Além disso, para $g = g^*$, mais de 85% das partículas formam um grande agregado. Por outro lado, o $g_b$ é sensível aos valores de $L$ e $\rho$, e não é bem definido se $\rho = 1$.

As evidências de uma distribuição aparentemente bimodal dos valores de $m$ em $g = g^*$, indicam que a transição é descontínua para $\rho < 1$. Já no limite da rede cheia, o sistema sofre uma transição contínua, até porque, como não há mais saltos, o sistema satisfaz o balanço detalhado e a dinâmica torna-se equivalente a do modelo de Potts de quatro estados [16]. Não foi possível encontrar na literatura algum trabalho com uma análise mais sistemática que investigue a natureza da transição do modelo de Peruani. Também não há maiores detalhes sobre o tipo de transição observada em $g_b$.

Finalmente, Karmarkar *et al.* (2023) [58] publicaram um trabalho mais detalhado sobre um modelo semelhante ao modelo de Peruani. Nesse trabalho, eles relaxam a restrição do volume excluído, ao permitir um número máximo de partículas por sítio diferente de um, aproximando, portanto, dos modelos de Potts ativos. De fato, também usam parâmetros comum a tais modelos, como $\epsilon$, $\beta$, entre outros. Por ter comportamentos semelhantes aos do modelo de Peruani, apesar da maior riqueza de configurações e maior quantidade de parâmetros ajustáveis, não foi usado como base para o desenvolvimento da nossa pesquisa e, portanto, não será discutido em detalhes nesta tese. Entretanto, é definitivamente uma leitura interessante para subsidiar trabalhos futuros.

# 3 Modelagem computacional

O presente trabalho teve como principal metodologia o uso de simulações de Monte Carlo (MC) para investigar as propriedades de um modelo tipo Vicsek em que as partículas possuem um conjunto restrito de possibilidades de movimento e uma interação do tipo volume excluído. Para tal, foi proposto um modelo e realizou-se simulações de MC para diversos pontos no espaço de parâmetros. A quantidade de amostras para cada um desses pontos foi variável, de tal modo que se obtenham resultados com um certo grau de relevância estatística (sobretudo ao investigar os valores médios de algumas das grandezas que iremos discutir na próxima seção). Já os pontos nos espaço de parâmetros foram selecionados de tal modo a permitir a adequada caracterização do comportamento do modelo.

Seguindo a linha de investigação das propriedades de modelos tipo Vicsek em rede, conforme descrito na Sec. 2.3, foi proposto um modelo de gás em rede que, além de seguir as principais propriedades da classe de Vicsek, incorpora dois "ingredientes" adicionais: uma interação de volume excluído e um conjunto reduzido de direções nas quais as partículas podem saltar. Por uma questão prática, optou-se por modelar os sistemas em uma rede triangular, uma vez que ela possibilita o uso de um conjunto restrito – mas interessante – de direções de salto e uma forma eficaz de implementar a interação de volume excluído (através da restrição do número máximo de partículas por sítio). Na rede triangular, o uso de três velocidades equidistantes em 120°permite que uma partícula alcance qualquer sítio com aproximadamente $n \sim \mathcal{O}(L)$ saltos, independentemente das condições de contorno periódicas.

Como o modelo é longe do equilíbrio, evitou-se neste trabalho a utilização de conceitos e/ou propriedades que só são bem definidas em um contexto de sistemas em equilíbrio, como por exemplo, ruídos que dependem de um fator tipo Boltzmann ou de uma temperatura (como usado nos modelos de Ising ativo, de Potts ativo com quatro/seis

estados, e modelo de Peruani).

Neste capítulo, vamos definir o modelo de matéria ativa em rede e objeto de estudo desta tese, juntamente com todos os parâmetros e características do modelo.

## 3.1 O modelo de gás em rede ativo de três estados

### 3.1.1 Definição do modelo

Para este modelo, nós consideramos que um conjunto de $N$ partículas se move em uma rede triangular com $L \times L$ sítios e com condições de contorno periódicas (desta forma, todos os sítios possuem o mesmo número de vizinhos). Além disso, a distância entre os sítios foi mantida constante e igual a um (constante de rede $a = 1$). Nesta rede, cada sítio possui um total de $z = 6$ vizinhos próximos, mas restringimos as possíveis direções de saltos a um conjunto de *três* vetores unitários: $\hat{\mathbf{v}}_1 = \hat{\imath}$, $\hat{\mathbf{v}}_2 = -\hat{\imath}/2 + \sqrt{3}/2\hat{\jmath}$ e $\hat{\mathbf{v}}_3 = -\hat{\imath}/2 - \sqrt{3}/2\hat{\jmath}$. Este conjunto de velocidades é o menor número de direções que permite a uma partícula viajar da origem a qualquer outro sítio da rede com $n \sim \mathcal{O}(L)$ saltos, independentemente das condições de contorno periódicas. Já para implementar a interação tipo volume excluído, optamos por permitir que no máximo uma partícula possa vir a ocupar um sítio na rede. A Figura 14 mostra um exemplo de uma rede com $L = 7$ e os três vetores velocidades mencionados acima.

As regras de atualização das posições e velocidades são essencialmente as mesmas usadas no modelo de Vicsek, mas adaptadas ao fato de que neste modelo temos posições e velocidades discretas. Um outro ponto que precisou de adaptação foi o movimento síncrono das partículas, por conta da limitação de no máximo uma partícula por sítio. Desta forma, a cada evento elementar da dinâmica, uma partícula $i$ com velocidade $\mathbf{v}_i$ e na posição $\mathbf{x}_i$ é escolhida aleatoriamente, e tem a sua velocidade atualizada para $\mathbf{v}'_i$. Se o sítio vizinho na direção de $\mathbf{v}'_i$ estiver vazio, a partícula salta para este sítio, mudando a sua posição para $\mathbf{x}'_i$. Caso contrário, a $i$-ésima partícula mantém $\mathbf{v}'_i$ como a sua velocidade e permanece na mesma posição $\mathbf{x}_i$. Nós assumimos que cada um destes eventos de atualização ocorre

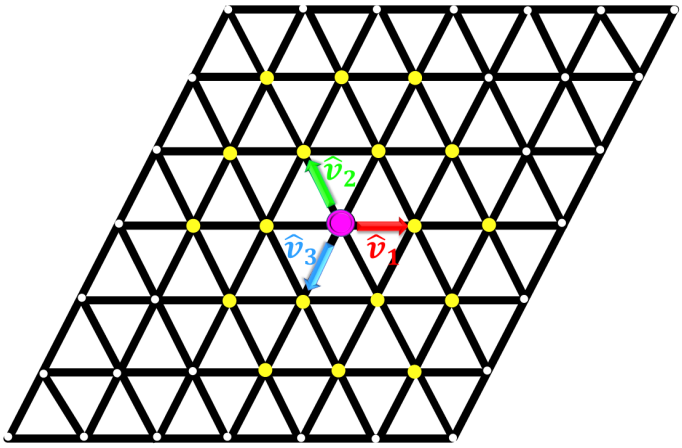



Figura 14 – Esquema do modelo de gás em rede de três estados. Os sítios em amarelo correspondem aos primeiros, segundos e terceiros vizinhos mais próximos do sítio marcado em roxo, ou seja, todos os sítios cuja distância é menor que 2 (em unidades adequadas de medida). Este conjunto de 19 sítios, o roxo e os amarelos, constituem todos os sítios vizinhos do sítio em roxo. As setas em vermelho, verde e azul correspondem as velocidades $\hat{\mathbf{v}}_1$, $\hat{\mathbf{v}}_2$ e $\hat{\mathbf{v}}_3$, respectivamente.

em um intervalo de tempo igual $\Delta t = \tau = 1/N$. Desta forma, em uma unidade de tempo MC (também chamado na literatura de um passo MC) há a chance de que, cada uma das partículas possam ser sorteadas.

Assim como nos modelos do tipo Vicsek, a atualização da velocidade da $i$-ésima partícula no nosso modelo depende das velocidades de todas as partículas em sua vizinhança, doravante representada por $\mathcal{R}(\mathbf{x}_i)$. Baseando-se em simulações prévias, optamos por utilizar uma vizinhança estendida[1], composta pelos primeiros, segundos e terceiros sítios vizinhos, além do sítio onde a própria partícula $i$ se encontra, totalizando dezenove sítios. Se, por um lado, o uso da interação de alinhamento com uma vizinhança estendida melhora a estatística na simulação, reduzindo a probabilidade de não se definir claramente a direção de uma maioria. Por outro lado, isso não deve alterar significativamente as características e propriedades do modelo. Vale notar que, como a própria $i$-ésima partícula faz parte da vizinhança, essa nunca fica vazia.

Para decidir a nova velocidade, a $i$-ésima partícula verifica quantas partículas em $\mathcal{R}(\mathbf{x}_i)$ estão com cada uma das três velocidades, efetuando uma espécie de "censo". Porém,

[1] Estendida em comparação à vizinhança que comumente é utilizada nestes tipos de modelo e que engloba somente os primeiros vizinhos e o sítios da própria partícula.

toda vez que ela verifica a velocidade de uma partícula $j$ em sua vizinhança, ela tem a probabilidade $\eta$ de cometer um erro: em vez de contabilizar como tendo a velocidade $\mathbf{v}_j$ (probabilidade $1-\eta$), acaba contabilizando-a como tendo uma das outras duas velocidades (com igual probabilidade de $\eta/2$). Ao fim, a nova velocidade $\mathbf{v}'_i$ da $i$-ésima partícula é escolhida de modo a apontar na direção percebida como sendo a da maioria de suas vizinhas. No caso de empate entre mais de uma velocidade (como sendo a da maioria), seleciona-se, com igual probabilidade, qualquer uma delas.

### 3.1.2 Implementação do modelo

O Algoritmo 1 exemplifica uma forma de implementar o processo elementar da dinâmica. No caso, um sistema em uma dada configuração $\mathcal{C} = \{N, \mathcal{P}, \mathbf{O}, \mathcal{S}\}$ é caracterizado por quatro variáveis de estado nas quais: $N$ é o número de partículas do sistema, $\mathcal{P}(i)$ retorna o valor da posição $\mathbf{x}$ da $i$-ésima partícula do sistema, $\mathbf{O}(\mathbf{x})$ assume os valores de 0 ou 1 e indica se o sítio na posição $\mathbf{x}$ está vazio ou ocupado (respectivamente) e, por fim, a variável $\mathcal{S}$ armazena o mapeamento das três velocidades possíveis em uma grandeza de estado $s$, do tipo *spin*, para todas as partículas da rede, de tal modo que: $s = 1 \leftrightarrow \hat{\mathbf{v}}_1$, $s = 2 \leftrightarrow \hat{\mathbf{v}}_2$ e $s = 3 \leftrightarrow \hat{\mathbf{v}}_3$. Desta forma, uma dada configuração $\mathcal{C} \to \mathcal{C}'$ em um intervalo de tempo $\Delta t = \tau$ , através de uma simulação de Monte Carlo[2]. No Apêndice B há uma cópia de uma das versões do código fonte escrito em Fortran 90 para algumas das medidas realizadas.

## 3.2 Considerações acerca do modelo

É evidente que $\eta$ controla a intensidade de um ruído que, por sua vez, controla a capacidade das partículas de seguirem na direção da maioria. Neste sentido, quando $\eta$ é pequeno, os erros cometidos ao verificar as velocidades das partículas na vizinhança são pequenos, o que possibilita às partículas efetivamente seguirem a direção da maioria.

[2] Pode-se notar o uso das mesmas regras de condições de contorno periódicas típicas de uma rede quadrada com $L \times L$ sítios neste algoritmo. Apesar de em um primeiro momento poder causar estranheza, este procedimento é largamente mencionado na literatura e pode ser feito, já que a rede triangular pode mapeada em uma rede quadrada com um conjunto ampliado de elos.

**Algoritmo 1:** Processo elementar da dinâmica ($\tau = 1/N$)

**Data:** $N$, $\mathcal{P}$, $\mathcal{S}$, $\mathbf{O}$ ▷ Estado do sistema no instante $t$
**Result:** $N$, $\mathcal{P}'$, $\mathcal{S}'$, $\mathbf{O}'$ ▷ Estado do sistema no instante $t + \tau$

$i \leftarrow \text{Int}(N * \zeta)+1$ ▷ $\zeta$ é sorteada uniformemente em $(0, 1)$
$\mathbf{x} \leftarrow \mathcal{P}[i]$

*Determinando a direção da maioria*

$\mathbf{v}_m \leftarrow [0, 0, 0]$
**forall** $j \in \mathcal{R}(\boldsymbol{x})$ **do** ▷ $j$ na vizinhança da $i$-ésima partícula
  $s \leftarrow \mathcal{S}[j]$
  $r \leftarrow \overline{\zeta}$ ▷ $\overline{\zeta}$ é sorteada uniformemente em $(0, 1]$
  **if** $r < (1 - \eta)$ **then** ▷ Aplicando o erro na contabilização da velocidade
    $\mathbf{v}_m[s] \leftarrow \mathbf{v}_m[s] + 1$
  **else**
    $s \leftarrow \overline{s}$ ▷ $\overline{s} \neq s$, sorteando alguma das outras duas velocidades
    $\mathbf{v}_m[s] \leftarrow \mathbf{v}_m[s] + 1$
  **end**
**end**
$s' \leftarrow \text{PosMax}(\mathbf{v}_m)$ ▷ PosMax retorna a entrada que tem o maior valor*
$\mathcal{S}[i] \leftarrow s'$

*Realizando a tentativa do salto*

$\mathbf{x}' \leftarrow \mathbf{x}$
**if** $s' = 1$ **then**
  $\mathbf{x}'[1] \leftarrow \mathbf{x}'[1] + 1$
  **if** $\boldsymbol{x}'[1] = L + 1$ **then** $\mathbf{x}'[1] \leftarrow \mathbf{x}'[1] - L$ ▷ Aplicando as condições de contorno
**else if** $s' = 2$ **then**
  $\mathbf{x}'[1] \leftarrow \mathbf{x}'[1] - 1$
  $\mathbf{x}'[2] \leftarrow \mathbf{x}'[2] + 1$
  **if** $\boldsymbol{x}'[1] = 0$ **then** $\mathbf{x}'[1] \leftarrow \mathbf{x}'[1] + L$ ▷ Aplicando as condições de contorno
  **if** $\boldsymbol{x}'[2] = L + 1$ **then** $\mathbf{x}'[2] \leftarrow \mathbf{x}'[2] - L$ ▷ Aplicando as condições de contorno
**else**
  $\mathbf{x}'[2] \leftarrow \mathbf{x}'[2] - 1$
  **if** $\boldsymbol{x}'[2] = 0$ **then** $\mathbf{x}'[2] \leftarrow \mathbf{x}'[2] + L$ ▷ Aplicando as condições de contorno
**end**
**if** $O[\boldsymbol{x}'] = 0$ **then** ▷ Verificando se o sítio alvo está livre
  $O[\mathbf{x}] \leftarrow 0$
  $\mathcal{P}[i] \leftarrow \mathbf{x}'$
  $O[\mathbf{x}'] \leftarrow 1$
**end**

$\mathcal{P}' \leftarrow \mathcal{P}$
$\mathcal{S}' \leftarrow \mathcal{S}$
$\mathbf{O}' \leftarrow \mathbf{O}$

Isso leva a um processo dinâmico em que todas as partículas passam a se mover como a mesma velocidade. Por outro lado, se o valor de $\eta$ se torna grande, as partículas não conseguem determinar de forma correta a direção da maioria das partículas e elas não se movem de forma coerente. Fica evidente que, se $\eta = 2/3$, a partícula tem a probabilidade de $1/3$ de aferir corretamente a velocidade de cada uma de suas vizinhas e a mesma probabilidade de contabilizar qualquer uma das outras duas velocidades, ou seja, neste valor de $\eta$ toda a informação acerca da velocidade da maioria é perdida, desabilitando o processo de alinhamento. Neste caso, o modelo se assemelha a uma coleção de caminhantes aleatórios sujeitos à interação de exclusão de volume.

Quando olhamos o efeito da densidade no modelo, podemos notar algo semelhante com que ocorre no próprio modelo de Vicsek: se a densidade for alta, quase todas as vizinhanças das partículas acabam se sobrepondo e pela construção do tipo de interação, acaba disseminando a informação do alinhamento facilmente ao longo do sistema, suprimindo, até certo ponto, a perda de informação originada pelo ruído. Porém, como neste modelo temos o volume de exclusão, a maior densidade ($\rho = N/L^2$) do modelo é 1. Além disso, em $\rho = 1$ não é possível haver saltos na rede e o sistema se torna um modelo de voto majoritário de três estados (tradução livre de *three-state majority-vote model*) [59], que também admite uma fase ordenada para $\eta < \eta_c$, pertencendo a mesma classe de universalidade do modelo de Potts. Fica claro que, conforme discutido no Cap. 2, o caso da rede cheia não pode ser considerado matéria ativa, uma vez que não há auto-propulsão. Contudo, o estudo da transição de fase neste caso é interessante por se tratar de um caso limítrofe do nosso modelo. Por outro lado, no limite em que $\rho \to 0$ uma partícula executa uma caminhada aleatória persistente, com um tempo de persistência de $1/\eta$ para valores pequenos de $\eta$, e uma caminhada completamente aleatória para $\eta = 2/3$.

Comparando o modelo de gás em rede ativo de três estados com outros modelos de matéria ativa em rede, vide Sec. 2.3, vemos que, em suma, as características comuns a todos eles são: a tendência (eventualmente frustrada) da partícula alinhar a sua velocidade como a direção de movimento da sua vizinhança e que, no contexto de rede, temos simetrias

discretas (sobre tudo no que diz respeito a rotação e a translação). Fica evidente que, o modelo de gás em rede ativo de três estados é muito similar ao modelo de Peruani, discutido em detalhes na Sec. 2.3.3: ambos os modelos estudam o comportamento de matéria ativa em uma rede discreta e implementam uma interação tipo volume excluído, limitando a um o número máximo de partículas por sítio[3]. Apesar das redes e o número de estados (velocidades) serem diferentes, o modelo de Peruani tem uma característica que o difere em muito do modelo de gás em rede ativo de três estados e do modelo de Vicsek: as regras de atualização das velocidades são dependentes de um fator tipo Boltzmann. Conforme discutido no capítulo anterior, a probabilidade da partícula trocar a sua velocidade $\mathbf{v}$ para uma velocidade $\mathbf{v}'$ é proporcional a exponencial do produto escalar entre essas duas velocidades (vide Eq. 2.12). A ponderação dessa troca é controlada pelo parâmetro $g$. Essa diferença não nos permite fazer um mapeamento completo entre esses dois modelos, podendo fazê-lo só para os casos em que $\eta = 0$ ($g \to \infty$) e $\eta = 2/3$ ($g = 0$).

É incerto os efeitos que as diferenças destacadas acima irão ocasionar nas características e como elas poderiam modificar o diagrama de fases, ambos conhecidos para modelo de Peruani. De fato, conforme será discutido no próximo capítulo, mesmo usando uma configuração inicial totalmente aleatória, similar a usada no trabalho original de Peruani *et al.* (2011), observamos que no nosso modelo o sistema assume um conjunto maior de configurações nos estados estacionários. Além disso, não encontramos indícios de existência da configuração tipo GL, observadas na Fase II do modelo de Peruani. Vale notar que essa quantidade maior de configurações acaba surgindo para um modelo no qual o conjunto de velocidades possíveis é menor.

[3] O que é bem diferente dos casos de modelo de Ising ativo e modelo de Potts ativo de quatro/seis estados, nos quais o número de partículas em um sítio da rede é ilimitado.

# 4 Resultados e discussões

Neste capítulo, vamos relatar e discutir as propriedades e características do modelo de gás em rede ativo de três estados. Muitas dessas discussões seguem conforme o artigo, resultado desta tese, intitulado: "*Three-state active lattice gas: A discrete Vicsek-like model with excluded volume*" [60]. Vide Anexo A.

Ao longo deste capítulo falaremos sobre as configurações e os estados estacionários do modelo de gás em rede ativo de três estados. Além disso, vamos mostrar o diagrama de fase deste modelo, caracterizar a natureza e as propriedades associada à transição de fase do tipo ordem-desordem do modelo.

## 4.1 Classificação das configurações

Conforme se pode perceber ao longo da discussão do Capítulo 2, um modelo ao seguir parcialmente as propriedades essenciais da classe de Vicsek, pode exibir variações em algumas das suas características, como por exemplo, as configurações observadas em cada uma das fases do modelo de Peruani com aquelas no modelo de Vicsek[1]. Desta forma, optamos por inicializar a caracterização do modelo de gás em rede ativo de três estados com a investigação dos padrões auto-organizados que surgem, sobretudo, no estado estacionário. Para tal, em um conjunto de estudos preliminares usando $10^5$ passos de Monte Carlo (MC), nós simulamos sistemas com tamanhos $L = \{33, 65, 129, 257, 513\}$ e três tipos de configurações iniciais: bandas imóveis (IB), bandas transversais (TB, do inglês *transverse band*) e aleatórias (AL) (veja a Fig. 15). A investigação sobre os diversos tamanhos visava orientar sobre os efeitos de tamanho finito. Já o uso de diversas configurações iniciais nos orientava a respeito do tempo de relaxação e as configurações iniciais mais convenientes

[1] Quando contrastamos os resultados do modelo de Vicsek com o modelo de Peruani, observa-se que as configurações e os estados estacionários são muito distintos, devido essencialmente, a inclusão da interação tipo volume excluído, ainda que mantidas as regras que levam a interação do tipo alinhamento e a competição com o ruído.

para uma determinada análise. Para cada conjunto de variáveis[2] foram usadas de cinco a sessenta realizações independentes, tendo em vista os resultados finais. Por exemplo, se os estados finais apresentassem mais de uma configuração e/ou se nos instantes finais as propriedades entre realizações apresentassem grandes variações, como o valor do parâmetro de ordem (que será discutido com mais detalhes a frente, mas é definido da mesma forma que $\phi$ no modelo de Vicsek). Além da configuração inicial padrão AL, optou-se por usar a configuração inicial do tipo TB, uma vez que em sistemas de matéria ativa no espaço contínuo a transição de fase ordem-desordem do modelo de Vicsek é intermediada pela configuração da banda perpendicular, descrita por Grégoire *et al.* (2004) e que, elas acabam sendo muito similares. Mas os nossos resultados apontam que para o caso do modelo de gás em rede ativo de três estados tal configuração não existe no estado estacionário. Ao invés dela, observou-se que eram as IBs (contendo uma ou mais faixas) que geralmente apareciam no estado ordenado, o que nos motivou a focar os estudos usando a configuração inicial IB com uma única faixa, veja Fig. 15(c).

Seguimos o tipo de classificação feita por Peruani *et al.* (2011), em que os autores agrupam as configurações dos estados estacionários segundo a forma e/ou a mobilidade das partículas e/ou dos bandos. Com isso pudemos agrupar todas as configurações finais em seis tipos: um tipo de manda imóvel (IB), dois tipos de congestionamentos (TJI e TJII), dois tipos de bandas móveis[3] (MBI e MBII) e os agregados desordenados (DA). A Figura 16 mostra exemplos de cada um dos tipos de configurações finais. Esse modelo leva a um conjunto de cinco tipos padrões, que podemos chamar de condensados, onde há a formação de estruturas densas e ordenadas, e um único padrão onde as partículas se distribuem de modo homogêneo e desordenado. Não se observou indícios de um estado estacionário que fosse homogêneo e ordenado, tal qual a fase líquida do modelo de Ising ativo, para os casos onde a rede não esteja completamente cheia ou além de um caso específico de configuração inicial com um valor de $\eta = 0$[4].

[2] Entenda como variáveis os parâmetros dos modelo e a configuração inicial.

[3] Usarei como abreviação MB para se referir às bandas móveis, mantendo a coerência das nomenclaturas das configurações a partir da escrita em língua inglesa, a saber, *mobile bands*.

[4] A configuração inicial em questão é um caso especial em que a densidade é $\rho = 0.25$ e as partículas são colocadas na rede de tal modo que: todos os primeiros sítios vizinhos de uma dada partícula fiquem

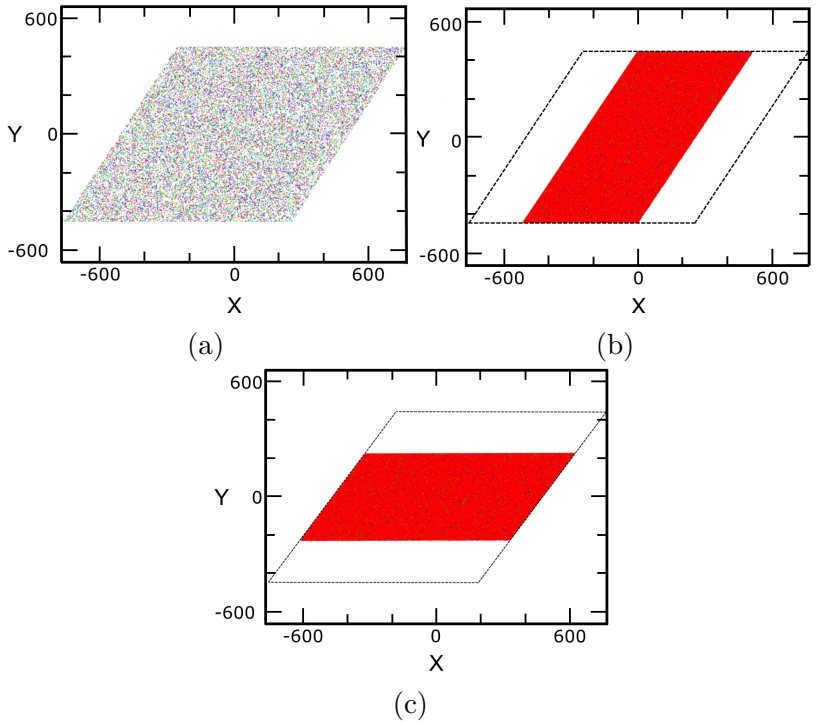



Figura 15 – Exemplos dos três tipos de configuração inicial usadas para determinar as configurações que poderiam aparacer no estado estacionário. (a) aleatória, (b) banda transversal e (c) banda imóvel. Apesar destas imagens serem para $L = 1024$ e $\rho = 0.5$, elas são similares para outros tamanhos e densidades. Na configuração aleatória, tanto as velocidades, quanto as posições são escolhidas aleatoriamente, levando em consideração que $\mathbf{v}$ só pode assumir alguma das três velocidades e pode haver no máximo uma partícula por sítio. Já nas configurações tipo TB e IB as partículas assumem a mesma velocidade (que por livre escolha foi usado $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}_1$) e são compactadas em uma faixa que, a depender da densidade, podem transpassar por todo o sistema (considerando as condições de contorno periódicas). Foi usado o mesmo esquema de cores da Fig. 14 para indicar a velocidade das partículas, ou seja, vermelho para $\hat{\mathbf{v}}_1$, verde para $\hat{\mathbf{v}}_2$ e azul para $\hat{\mathbf{v}}_3$.

A fase desordenada acaba exibindo a configuração DA, ela é caracterizada pelo aparecimento de agregados desordenados e é observada quando a intensidade do ruído é grande e/ou a densidades pequena. Neste estado, cada partícula acaba assumindo a velocidade de forma quase que independente da suas vizinhas, mas que, por causa do volume excluído e as flutuações, acabam formando pequenos agregados – não há correlação entre eles – que aparecem e desaparecem em um curto período de tempo. A similaridade entre o vapor que acaba aparecendo junto com os estados condensados e um estado homogêneo DA, nos levou a acreditar que se tratava de uma mesma fase. De fato são,

vazios.

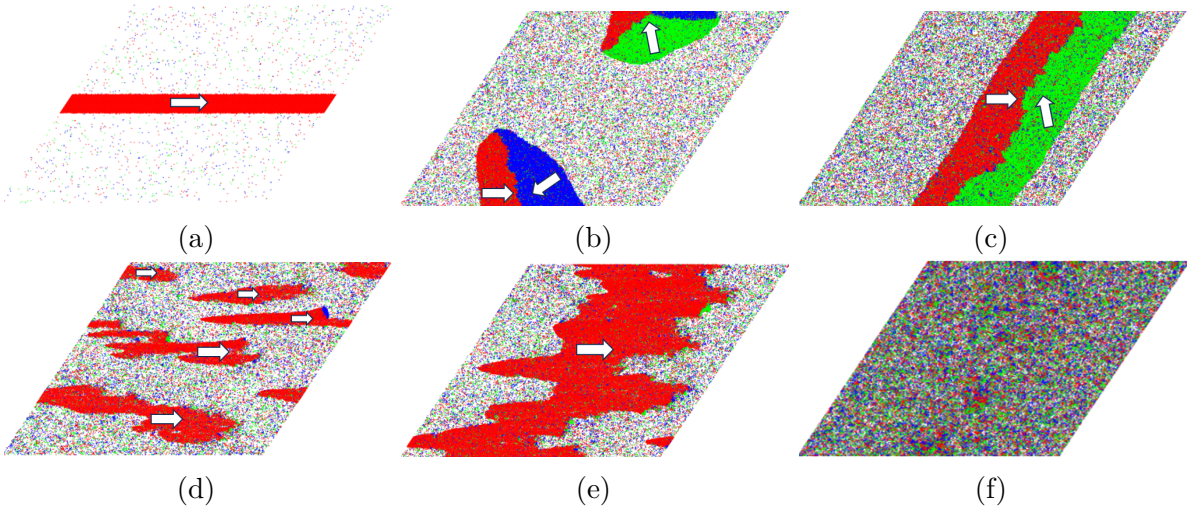


Figura 16 – Exemplos das configurações finais observadas após um intervalo de $10^5$ passos de MC e $L = 513$: (a) IB em $\rho = 0.1$ e $\eta = 0.2$, (b) TJI em $\rho = 0.3$ e $\eta = 0.42$, (c) TJII com $\rho = 0.5$ e $\eta = 0.44$, (d) MBI em $\rho = 0.3$ e $\eta = 0.38$, (e) MBII em $\rho = 0.5$ e $\eta = 0.4$, e (f) DA com $\rho = 0.5$ e $\eta = 0.458$. Para auxiliar a compreensão foram colocadas as setas brancas na direção da velocidade da maioria em cada uma das regiões condensadas. Foi usado o mesmo esquema de cores da Fig. 14 para indicar a velocidade das partículas, ou seja, vermelho para $\mathbf{v}_1$, verde para $\mathbf{v}_2$ e azul para $\mathbf{v}_3$.

discutiremos em detalhes nas próximas seções.

A IB ocorre na fase ordenada e em regiões onde a interação de alinhamento é forte (se comparada à perda da informação causada pelo ruído), ou seja, ela ocorre para valores pequenos de $\eta$ e grandes de $\rho$. Nestas regiões, o processo dinâmico leva uma parcela das partículas a alinhar as suas velocidades e tentarem se mover de forma coerente e na mesma direção; com isso, há o aparecimento de uma ou mais faixas densas[5] , com grande grau de alinhamento e paralelas às velocidades das partículas, mas que por causa do volume excluído, não conseguem se mover. Deste modo, a dinâmica ocorre essencialmente nas bordas desta(s) estrutura(s) densa(s) e em uma região de baixa densidade e sem ordenamento, chamada de vapor. Em essência, a IB observada como estado final e a IB usada com configuração inicial são iguais, exceto pelo fato de que no primeiro caso podemos ter mais de uma faixa e que os dois só devem coincidir no limite de $\eta = 0$. Além

[5] Excepcionalmente, os IB com mais de uma faixa aparecem para valores de ruídos longe da transição e com o uso das configurações iniciais TB e AL. Nestes casos, vemos que a quantidade de faixas pode ir de algumas dezenas (para $\eta \sim 0$) até uma única faixa ($\eta \to \eta^-$) — $\eta^-$ será definida com mais detalhes à frente, mas de forma resumida é o maior valor de $\eta$ onde só se observa IB no estado estacionário – indicando que, o IB com uma única faixa é a configuração mais estável para um estado de maior ordenamento.

disso, esta configuração é muito semelhante à IB observada no modelo de Peruani, vide Sec. 2.3.3. Por fim, na rede cheia a fase ordenada possui um valor médio para as orientações não nulo e pode ser visto como um IB que ocupa todo o sistema.

Os demais estados condensados ocorrem em regiões cujo os valores da intensidade do ruído são tipicamente maiores do que os observados na IB. No caso das MBI, se observa uma tendência global de todas as partículas alinharem as suas velocidades e formarem um grande bando[6], mas devido as flutuações, aparecem bandos que são menores, com velocidades distintas e com tempo de vida curto, o que acaba congestionando temporariamente o movimento de parte das partículas que formam os bandos maiores (eventualmente estes bandos menores passam a fazer parte dos maiores após um intervalo de tempo). Apesar destes congestionamentos temporários não serem suficientes para impedir a tendencia de ordenamento global, eles acabam por impedir a formação das IB. Um processo semelhante ocorre no MBII, mas neste caso os bandos menores tem um tempo de vida médio ainda curto, fazendo com que as suas partículas sejam facilmente incorporadas ao bando maior. Isso gera uma banda que transpassa o sistema em uma direção distinta ao seu movimento e com bordas irregulares (com várias reentrâncias). Vale destacar que apesar de alguma similaridade entre as MBII e as bandas observadas no modelo de Vicsek, vemos que nas MBII as bordas flutuam muito mais e no interior é mais congestionado, quando contrastadas com as bordas suaves e um movimento relativamente uniforme das partículas nas bandas sem volume excluído.

Por fim, as duas últimas configurações condensadas, TJI e TJII, têm como característica principal o engarrafamento formado por bandos com velocidades distintas, que se "encontram" e bloqueiam o movimento um dos outros. No caso do TJI, dois ou mais bandos com velocidades distintas se encontram, levando ao surgimento de estruturas ovais. Isso nos leva a crer que o sistema está apresentando uma correlação de curto alcance, o que gera um ordenamento local. Nos estados onde este tipo de configuração aparece, a interação de alinhamento leva os bandos a "capiturarem" novas partículas na proximidade (inclusive

[6] Como são chamados no contexto de matéria ativa ativa estes aglomerados de partículas que se movem juntas e de forma coesa.

dos outros bandos), o que leva a um processo dinâmico de evaporação e condensação constante, tal qual acontece no TJ do modelo de Peruani. Com uma certa frequência, observa-se configurações do tipo MBI antes do surgimento de um TJI, assim como alguns estados estacionários onde ambas as configurações passam a coexistir. Já as configurações do tipo TJII, aparecem em sistemas com densidades maiores ($\rho \geq 0.5$) e se caracterizam pela formação de duas faixas (que transpassam pelo sistema) com velocidades distintas e impedem a movimentação uma da outra. Diferentemente dos estados do tipo TJI, nos estados onde observamos os TJIIs, o processo de condensação-evaporação é visualmente mais lento, sugerindo que o tempo de vida típico dos TJIIs acaba sendo significativamente maior que os do TJI.

Foi no intuito de orientar a construção do diagrama de fases deste modelo que mapeamos o aparecimento de cada uma destas configurações como estado final após $10^5$ passos MC em um plano $\rho - \eta$, em uma espécie de diagrama de fases para tamanho finito. A Figura 17 mostra o resultado deste estudo para $L = 513$ e os três tipos de configurações iniciais. Para outros tamanhos consultar o Apêndice C.

A análise da Fig. 17 nos mostra que, para certos pontos no plano $\rho - \eta$, mais de uma configuração surge no estado final a depender da configuração inicial; esta multiplicidade é mais comum para o caso configuração inicial AL e próximos dos valores de $\eta$ a partir do qual só teremos estados desordenados. Além disso, independentemente da densidade e da configuração inicial, existe um valor máximo para a amplitude do ruído ($\eta \approx 0.45$) em que não se observa a formação de estruturas condensadas e ordenadas, ou seja, a configuração final é sempre caracterizado por DA. Os valores de $\eta$ que caraterizam a transição entre um DA e uma estado ordenado crescem rapidamente com o valor de $\rho$ (em baixa densidades) e satura para $\rho \to 1$[7].

Como mencionado acima, o uso de uma configuração inicial aleatória leva a uma grande variedade de estados condensados, além de uma maior quantidade de configurações não unívocas para os mesmos valores dos parâmetros. Essa variabilidade aumenta como o

[7] Visivelmente, o valor de $\eta$ que marca a transição quase não se altera $\rho \gtrsim 0.4$.

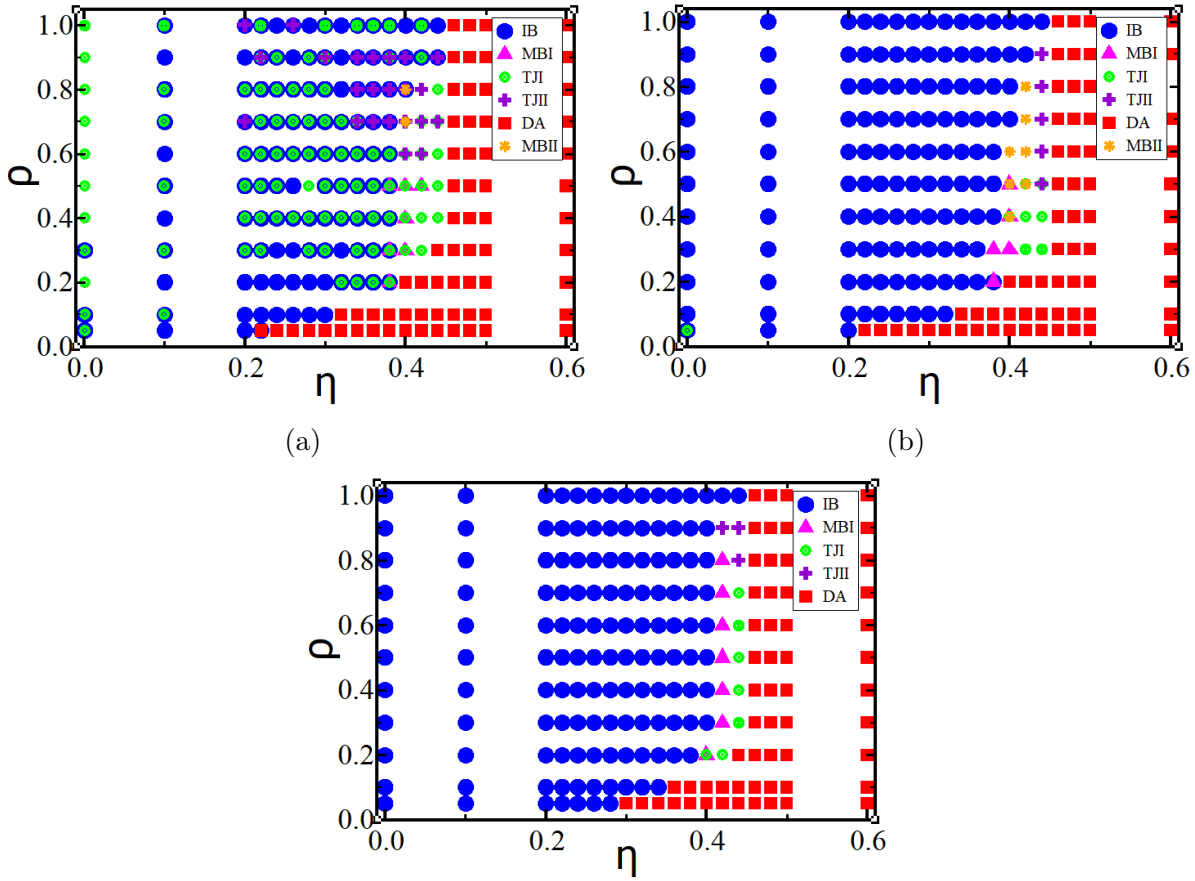



Figura 17 – O mapa mostrando a ocorrência de cada uma das configurações como estado final após $10^5$ passos MC com $L = 513$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Note que em alguns pontos mais de um tipo de configuração final acabou aparecendo, desta forma há mais de um símbolo sobre o mesmo ponto, sobre tudo no caso AL.

tamanho do sistema, sugerindo que o sistema acaba ficando preso em estados metaestáveis que possuem um tempo de vida que cresce com o tamanho do sistema. Um comportamento similar ocorre para o caso de configuração inicial TB. Essa hipótese sobre a variabilidade de configurações no suposto estado estacionário é reforçada pela observação de que, quando usamos uma TB como configuração inicial, estados "estacionários" tipo MBII serão observados só em sistemas grandes. Neste caso, o tempo de vida para a devida relaxação dessa configuração deve exceder o tempo de simulação (os $10^5$ passos MC). Esta questão será discutida na próxima seção.

Quando comparamos os estados observados para baixa intensidade, podemos notar que configurações iniciais aleatórias e de bandas transversas podem levar a estados

com múltiplas bandas imóveis, onde o número de faixas pode variar entre realizações independentes e tendem a diminuir com o aumento de valor de $\eta$, o que não ocorre quando usamos IB como configuração inicial, neste caso a configuração final acaba sendo IB com uma única faixa que vai diminuindo a espessura com o aumento do ruído (até que outra configuração emerge a partir de um dado $\eta$). Por exemplo, para uma configuração inicial AL, $L = 513$, $\rho = 0.1$ e $\eta = 0.1$, foi observado em torno de quinze faixas, enquanto que, para um ruído próximo ao da transição ($\eta \approx 0.32$) uma única banda é encontrada. Estes achados nos permitem assumir que o estado mais estável para baixos valores de amplitude de ruído deveria ser do tipo IB com uma única faixa e, por isso, iremos usá-la como configuração inicial para maior parte das análises.

## 4.2 Os estados estacionários

Os resultados discutidos na seção anterior podem ser considerados como uma etapa inicial para caracterizar o diagrama de fases. Para se obter um diagrama mais preciso, nós usamos longos tempos de simulação ($10^7$ passos de MC) e optamos por usar IB como configuração inicial, por causa da relativa simplicidade do mapa de configurações e aparente estabilidade que esta se mostrou ter. Por causa dos prazos, optou-se por deixar a repetição desta análise para todos as condições analisadas com $10^5$ passos de MC para um trabalho futuro.

A fim de determinar os limites de estabilidade dos estados IB e DA, foram definidas duas grandezas: $\eta^-(\rho, L)$ representando o maior valor da intensidade de ruído em que a configuração estacionaria é sempre uma IB e, $\eta^*(\rho, L)$ representado o menor valor em que somente a configuração DA é observada. A Figura 18 mostra estes limites de estabilidade para $L = 129$. Para determinar estes pontos foram realizadas investigações do comportamento de ao menos 10 realizações independentes, podendo chegar a 35, para valores de $\eta$ na proximidade de cada um destes limiares. Além disso, pode-se notar que estes resultados reproduzem qualitativamente os resultados usando $10^5$ passos de MC, vide Fig. 17(c). Na região entre os dois limites de estabilidade, outros estados condensados podem

aparecer, a depender da densidade. Nós notamos que as configurações MBII não foram observadas nos estudos com $10^7$ passos de MC e, desta forma, acabaram sendo descartadas como possível configuração em um estado estacionário. Todas as demais configurações observadas em $10^5$ passos de MC[8] também foram observadas nestes estudos de tempos longos.

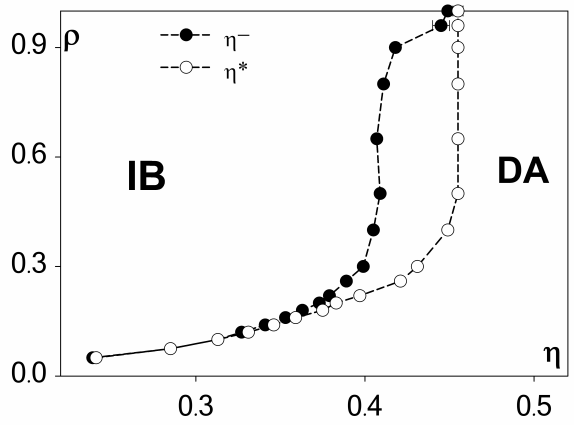



Figura 18 – Valores de $\eta^-$ e $\eta^*$ obtidos com o uso de simulações de tempos longos ($10^7$ passos de MC) como função de $\rho$ para $L = 129$ . As linhas tracejadas que conectam os pontos são meramente para auxiliar na visualização.

A análise de tempos longos, nos permitiu evidenciar de forma clara a biestabilidade que eventualmente ocorre para valores $(\rho, \eta)$ localizados entre as duas curvas de estabilidade; neste caso, o estado estacionário alterna entre duas ou mais configurações ao longo do tempo. Para baixas densidades, nós encontramos séries temporais em que IB e DA se alternam, na Sec. 4.4 discutiremos algumas delas. Já para densidades maiores, nós encontramos series temporais com alternância entre as seguintes configurações: IB-DA, IB-MBI, IB-TJI, MBI-TJII, TJI-DA, MBI-DA, TJI-TJII, e, a mais frequente, MBI-TJI. Uma determinação sistemática do tempo de vida entre estas trocas, assim com o do MBII, não foi possível de ser executada em tempo hábil, sendo considerada para um trabalho futuro.

As Figuras 19(a) e 19(b) mostram o comportamento de $\eta^-(\rho)$ e $\eta^*(\rho)$, respectivamente, como função do tamanho do sistema e para baixa densidade. Os valores de $\eta^-$ se ajustam muito bem a uma reta. Por outro lado, é possível ver a existência de uma

[8] Para alguns casos específicos, como a investigação da estabilidade da MBII, foram usadas outras configurações iniciais além da IB.

curvatura positiva para $\eta^*$. Acreditamos que esta curvatura positiva está associada ao fato de que, com o aumento do ruído e para densidades superiores, o sistema acaba passando por vários estados estacionários[9] distintos durante a transição de fase $IB - DA$ e como os estados intermediários (caracterizados pelas configurações MBI, TJI e TJII) só são facilmente nucleados em densidades maiores, isso faz com que a estabilidade das fases ordenadas ocorra para intensidades de ruídos maiores. Além disso, com o aumento do ruído e o surgimento de configurações do tipo TJ's nos estados que antecedem a transição para o DA, fica mais difícil de determinar com clareza quando estamos tendo TJI pequenos ou agregados desordenados um pouco maiores, o que também leva a um certa imprecisão na determinação do $\eta^*$. A Figura 19(c) mostra a extrapolação do valores de limite de estabilidade. A diferença dos valores de $\eta^-$ e $\eta^*$ acabam ocorrendo até para alta densidade ($\rho = 0.96$, a maior densidade estudada); o quê sugere que a transição de fase ordem-desordem deve ser descontínua para qualquer densidade menor que a unidade.

Estes resultados, somados aos achados para um tempo de simulação reduzido, discutidos na seção anterior, nos permitem concluir que o diagrama de fase genérico deve ser conforme a Fig. 20. Podemos verificar que para baixa densidade há uma mudança direta de um estado caracterizado pela configuração IB para um caracterizado pela configuração DA. Com o aumento da densidade, outras configurações (além da IB) com estruturas condensadas aparecem antes da transição do tipo ordem-desordem. Porém, no limite $\rho \to 1$ e com o aumento do ruído, vemos a mudança de uma fase tipo IB para DA. Mas com a diferença de que neste limite as partículas não podem se mover, ou seja, indicando uma possível alteração na natureza da transição. Além disso, foi observado que existe um valor de intensidade de ruído a partir do qual não se observa a formação de estruturas condensadas.

Para melhor compreender o comportamento do sistema na região de transição para baixa densidade ($0.1 \leq \rho \leq 0.2$), realizamos simulações para $L = 65, 129, 257$ e 513 usando os mesmos $10^7$ passos de MC e um incremento de densidades de $\Delta\rho = 0.02$, afim de fazer

[9] Neste sentido entendemos que cada estado acaba sendo caracterizado por um conjunto típico de configuração quando o sistema atinge o estado estacionário.

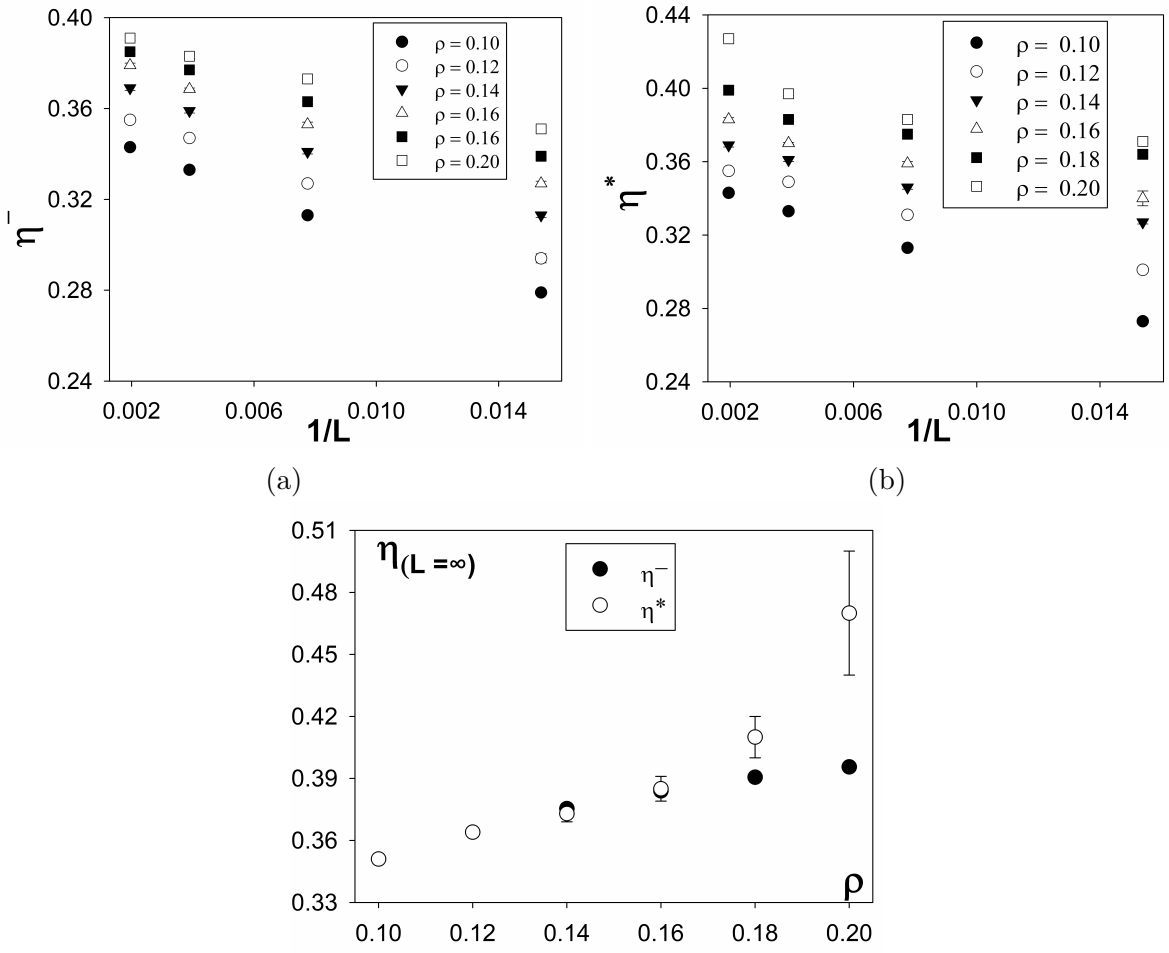



Figura 19 – Gráficos de (a) $\eta^-$ e (b) $\eta^*$ como função de $1/L$ para baixa densidade. Em (c) vemos a estimativa de $\eta^-$ e $\eta^*$ no limite termodinâmico, ou seja, para $L \to \infty$.

um tipo de mapa de configuração para longos tempos de simulação. A Figura 21 ilustra os estados finais observados para $L = 513$ (para outros tamanhos consultar Apêndice C). É evidente que, com o aumento da densidade e na proximidade da transição de fase, o número de possíveis configurações nos estados estacionários também cresce. Em vários pontos o sistema exibe uma pluralidade de configurações finais, com uma alternância entre configurações, confirmando a biestabilidade, tal qual já indicada anteriormente. Em geral a sequencia de configurações que aparecem no estado estacionário com o aumento do ruído é: $IB \to MBI \to TJI \to DA$. Longe dessa região os estados são únicos.

Finalmente, estudos realizados usando $L = 129$, densidade $\rho = 0.5$ e ruídos próximos ao $\eta^*$, mostram o aparecimento de TJII como configuração final. O fato dele aparecer

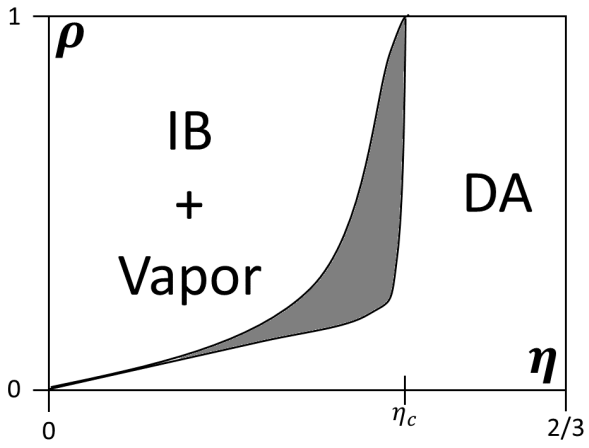



Figura 20 – Diagrama de fase genérico no plano $\rho - \eta$ para o modelo de gás em rede ativo de três estados. A região em cinza é delimitada pelas curvas $\eta^-$ e $\eta^*$, e indica a região em que há o aparecimento de outras configurações condensadas (na presença de vapor) além da própria IB. Eventualmente, observa-se nesta regão a coexistência de mais de uma configuração no estado estacionário. Além disso, é indicado o valor de $\eta_c \approx 0.45$, a partir do qual não são observadas estruturas condensadas, independentemente do tamanho ou densidade do sistema.

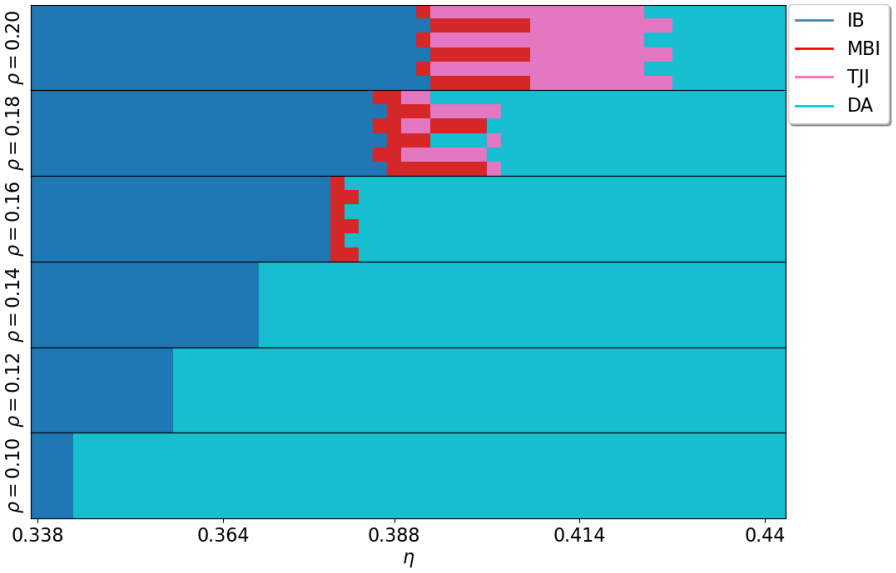



Figura 21 – Mapa de configurações para valores de parâmetros próximos a transição de fase usando um longo tempo de simulação, em $L = 513$ e baixa densidade ($0.1 \leq \rho \leq 0.2$). O número de vezes que uma configuração é indicada em um ponto não está relacionado com a frequência que ela ocorre.

para densidades maiores, ainda que usando um tempo de simulação maior, era previsível, uma vez que, essa configuração envolve o aparecimento de duas faixas com velocidade distintas que transpassam por todo o sistema, o que exige uma quantidade tipicamente maior de partículas na sua formação. Além disso, foi possível verificar que nestas regiões, a transição é governada por um processo de evaporação-condensação que alternam com a configuração TJI. Esta dinâmica persiste durante toda a simulação. As análise para outros tamanhos levam a comportamentos qualitativos muito parecidos com os discutidos aqui.

## 4.3 Coexistência entre condensados e DA

Conforme discutido acima, para densidades menores que a unidade, podemos observar o aparecimento de estruturas condensadas que coexistem com uma região desordenada de baixa densidade, a qual chamamos de vapor (em analogia ao que ocorre nos modelos do tipo Vicsek em espaço discreto, vide Sec. 2.3). Nesta subseção iremos mostrar que as propriedades deste chamado vapor e do estado DA são as mesmas, indicando que, de fato, estas estruturas condensadas acabam coexistindo com o estado DA.

Uma das primeiras grandezas que iremos comparar é a função distribuição radial, $g(r)$. Esta função acaba tendo uma definição conveniente para modelos em rede [61], dada por,

$$g(r) = \frac{1}{\overline{N}} \sum_{l=1}^{\overline{N}} \frac{1}{\mathcal{N}_l(r)} \sum_{m=1}^{\overline{N}} \delta(r - |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_l|) \;, \tag{4.1}$$

onde $\mathcal{N}_l(r)$ é o número de sítios a uma distância $r$ da $l$-ésima partícula, $\mathbf{r}_m$ e $\mathbf{r}_l$ são as posições das partículas $m$ e $l$ (respectivamente) e as somas são sobre as $\overline{N}$ partículas no estado vapor/DA. Além disso, definimos $\overline{\rho}$ como sendo a densidade do vapor/DA[10]. Sendo assim, podemos verificar que $\overline{\rho} g(r)$ é igual a probabilidade de que um sítio localizado na posição $\mathbf{r}$ esteja ocupado, dado que haja uma partícula na origem. A Figura 22(a) mostra que $g(r)$ decai rapidamente com $r$, assumindo um valor que é essencialmente constante

[10] Na presença de um condensado, o valor da densidade no vapor acaba sendo menor que a densidade média do sistema $\rho$.

e igual a unidade para $r > 10$. Além disso, podemos observar que o valor de $g(r)$ varia suavemente como função de $\eta$, inclusive quando $\eta$ passa por $\eta_c$, sugerindo que o vapor e a fase DA, sejam uma mesma fase.

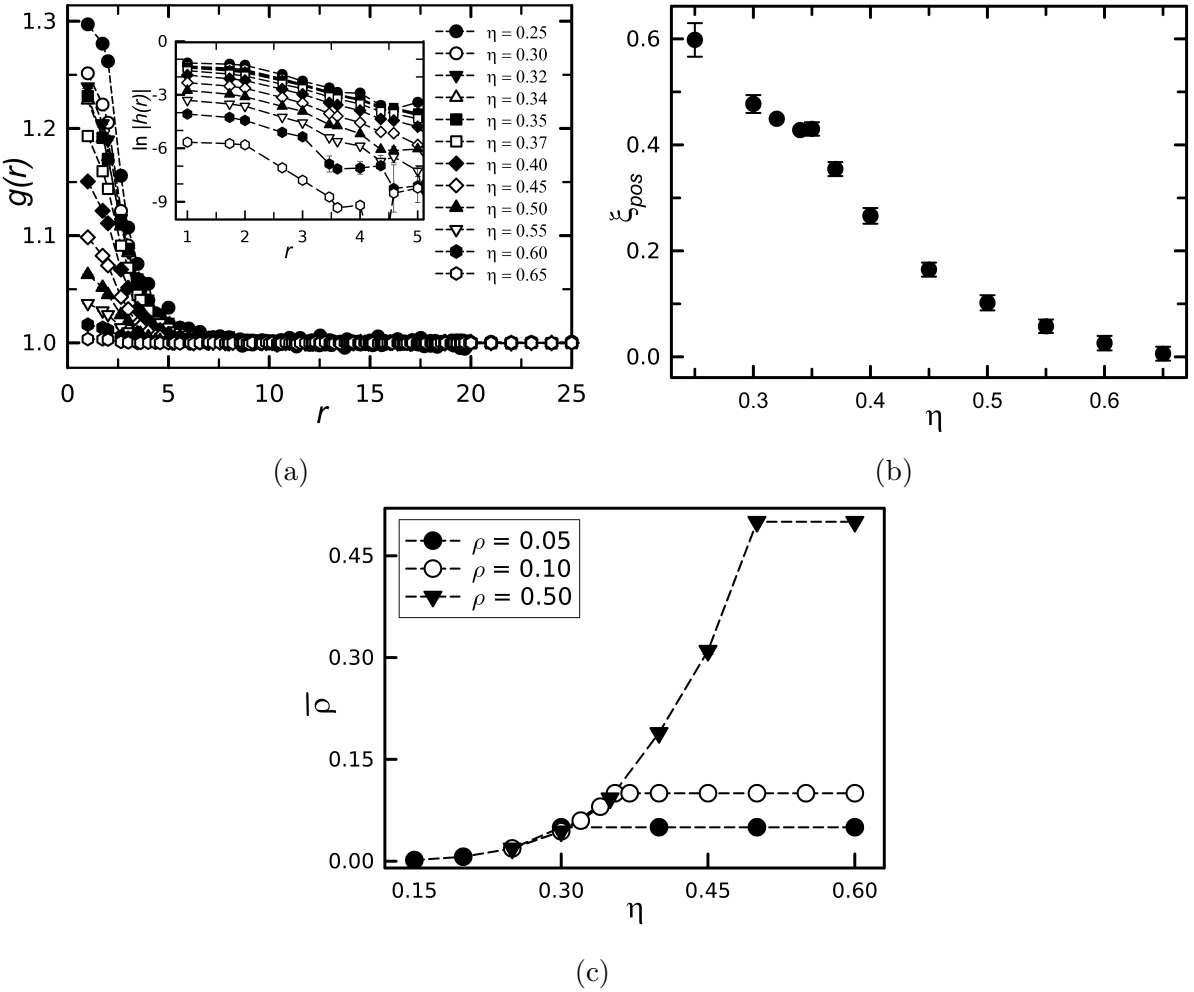



Figura 22 – (a) Gráfico de $g(r)$ para diversos valores de $\eta$, indicados na legenda, próximos a região de transição ($\eta \approx 0.345(5)$) e usando $\rho = 0.1$ e $L = 513$. O gráfico interno mostra o $|\ln h(r)|$ *versus* $r$. (b) O comprimento de correlação posicional, $\xi_{pos}$, *versus* $\eta$ para os mesmos valores dos parâmetros usados em (a). (c) $\overline{\rho}$ como uma função de $\eta$ para $\rho = 0.05, 0.1$ e $0.5$.

A função correlação de pares, $h(r) \equiv g(r) - 1$, acaba medindo como a presença de uma partícula na origem está correlacionada com a presença de uma outra partícula a uma distância $r$; a Fig. 22(b) mostra que $h(r)$ acaba tendo um decaimento próximo a de uma exponencial[11]. Alem disso, podemos definir uma outra grandeza chamada de comprimento de correlação ($\xi_{pos}$) obtida pela integração de $h(r)$ sobre todo o espaço, ou

[11] O decaimento assintótico exponencial é o comportamento genérico que acaba ocorrendo fora de um ponto crítico para sistemas, tanto em equilíbrio quanto fora de equilíbrio [32].

seja, $\xi_{pos} \propto \int_0^\infty h(r)dr$. Vale salientar que $\xi_{pos}$ em bem estabelecida no contexto de espaço contínuo e acabam medido a distância típica em que uma partícula acaba sendo capaz de influenciar a permanência de outra partícula na sua proximidade. Para o nosso sistema foi necessário introduzir um comprimento de correlação posicional adaptado ao espaço discreto. Desta forma, definimos o comprimento de correlação como,

$$\xi_{pos} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{n_{max}} |h(r_n) + h(r_{n+1})|(r_{n+1} - r_n) \tag{4.2}$$

onde $r_1 = 1$, $r_2 = \sqrt{2}$, $r_3 = 2$, ... são as distâncias entre os primeiros, segundos, terceiros, assim sucessivamente, vizinhos. Podemos ver na Fig. 22(b) que $\xi_{pos}$ decresce de forma monotônica e contínua com o aumento do ruído. Além disso, podemos notar que o valor de $\xi_{pos}$ permanece finito. Estes achados reforçam a hipótese que o vapor e DA é uma mesma fase.

Por fim, a Figura 22(c) sugere que $\overline{\rho}$ cresce continuamente com $\eta$, até saturar em $\overline{\rho} = \rho$. Quando relacionamos este gráfico com os resultados discutidos na seção acima, sobretudo os diagramas de fase, notamos que a possível descontinuidade da $d\xi_{pos}/d\eta$ acaba ocorrendo próximo ao ponto onde há a mudança de fase, e pode ser atribuída a uma dependência singular entre $\overline{\rho}$ e $\eta$ neste ponto.

Nós definimos a função correlação de velocidade (orientacional), $C_v(r)$, como sendo,

$$C_v(r) = \frac{\sum_{l,m=0}^{\overline{N},\overline{N}} \mathbf{v}_l \cdot \mathbf{v}_m \delta(r - |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_l|)}{\sum_{l,m=0}^{\overline{N},\overline{N}} \delta(r - |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_l|)} \tag{4.3}$$

onde $\mathbf{v}_l$ e $\mathbf{v}_m$ e, $\mathbf{r}_l$ e $\mathbf{r}_m$, são as velocidades e posições das partículas $l$ e $m$, respectivamente, e as somas ocorrem sobre as $\overline{N}$ partículas no vapor ou na fase DA. Assim como observado no $g(r)$, podemos verificar que o $C_v(r)$ varia suavemente com o aumento de $\eta$, vide Fig. 23, mesmo na proximidade da transição $IB - DA$, novamente indicando que vapor e $DA$ é a mesma fase. Curiosamente, no limite de $\eta \to 2/3$, as velocidades das partículas que ocupam os sítios vizinhos são anti-correlacionadas, devido ao volume excluído. Para esta combinação de baixa densidade e ruído alto, não há estrutura condensadas, mas a interação de volume excluído, proíbe, por exemplo, que uma partícula na origem e com velocidade $\mathbf{v}_1$ ganhe um vizinho com a mesma velocidade no sítio vizinho $(1, 0)$. De fato,

quando olhamos os dados do gráfico interno da Fig. 23 verificamos que a anti-correlação desaparece na ausência da interação do tipo volume excluído. As análises de $g(r)$ e $C_v(r)$ para as densidades $\rho = 0.05, 0.2$ e $0.5$ levaram a resultados similares.

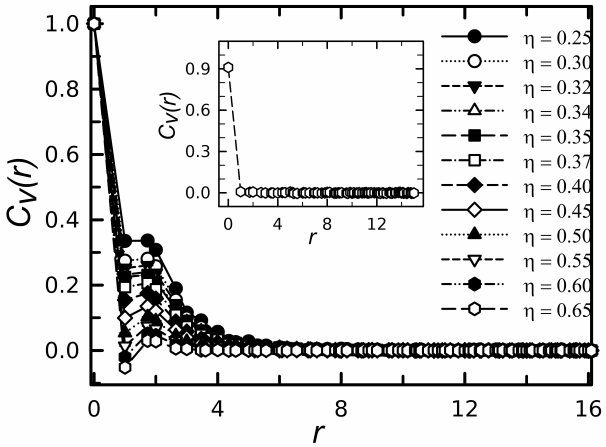



Figura 23 – Gráfico de $C_v(r)$ para vários valores de $\eta$ na proximidade da transição de fase, do $L = 513$ e $\rho = 0.1$. O gráfico interno mosta $C_v(r)$ para um modelo semelhante, sem a interação de volume-excluído, usando os mesmos parâmetros e $\eta = 0.65$.

Finalmente, ao compararmos as propriedades estudadas acima para um vapor e uma fase DA onde $\overline{\rho} = 0.0597$, $\eta = 0.32$ e com $L = 513$. Os valores de $g(r)$ e $C_v(r)$ são os mesmo nos dois casos (quando consideramos as barras de erro). Uma vez que não há diferença significativa nas propriedades do vapor e da fase DA, nos concluímos que ambos constituem uma mesma fase e que suas propriedades variam suavemente com $\eta$ e $\rho$.

## 4.4 Parâmetro de ordem

Para caracterizar quantitativamente o comportamento usamos como parâmetro de ordem a grandeza $\phi$, definida na Sec. 2.2. Ela mede o ordenamento por meio do módulo da velocidade média das partículas. Pode-se notar que, como $\phi$ mede o ordenamento global, esse tipo de parâmetro de ordem não é capaz de distinguir de forma efetiva estados com configurações do tipo TJI e DA, pois em ambos os casos o valor de $\phi$ é próximo de zero; apesar de se observar estruturas condensadas no TJI, o que reflete o fato de haver ordenamento local.

A Figura 24 mostra alguns exemplos emblemáticas de séries temporais do parâmetro de ordem. O primeiro exemplo, na Fig. 24(a), mostra que $\phi$ assume um valor médio significativamente superior a zero para ruído menor que $\eta^{-}$. Nesse caso a configuração típica do estado estacionário é a IB.

Já a Fig. 24(b), mostra um caso onde o estado estacionário fica alternando entre as configurações $IB$ e $DA$. Esse comportamento indica a existência de uma biestabilidade dessas configurações. O tempo típico que em que o sistema fica no estado $IB$ diminui com o aumento do $\eta$, em contrapartida, ele aumenta o tempo de permanência no estado $DA$. No caso da Fig. 24(c) vemos um exemplo de uma série temporal onde o sistema acaba alternando entre várias configurações (multi-estabilidade). Nesse caso em específico, o sistema fica alternando entre as configurações $IB$, $MBI$, $TJI$ e $DA$.

Por fim, as Figs. 24(d)-(e) mostram a série temporal de $\phi$ para $\eta > \eta_c$. Os resultados nos mostram que nessa região a configuração típica do estado estacionário é sempre $DA$, a diferença essencial entre elas é que (d) ocorre próximo de $\eta_c$ enquanto que (e) ocorre para ruídos distantes da região de transição ordem-desordem.

A Figura 25 mostra o comportamento de $\phi$ como função de $\rho$ e $\eta$ para $L = 33$ e 513 usando IB como configuração inicial. Para esta análise, deixamos cada realização independente relaxar por $2 \times 10^4$ passos de MC e a média temporal do valor do parâmetro de ordem da $i$-ésima realização independente, $\langle \phi_i(t) \rangle_t$, era calculada ao longo dos próximos $8 \times 10^4$ passos de Monte Carlo. Por fim, assumimos que o valor $\phi$ para um dado ponto no espaço de parâmetros é a média dos valores $\langle \phi_i(t) \rangle_t$, obtidas ao usarmos os mesmos parâmetros ($\phi \equiv \langle \langle \phi_i(t) \rangle_t \rangle_{\text{real.}}$). O erro associado a essa medida é o valor do erro padrão da média calculado sobre o conjunto de valores de $\langle \phi_i(t) \rangle_t$[12]. O número de realizações foi variável, visando reduzir as barras de erro para valores da ordem de $10^{-4}$, sobretudo para pontos longe da transição em baixa densidade. Como esperado, no limite em que a

[12] De forma geral, todas as vezes que falarmos que alguma grandeza foi avaliada sobre a média de uma dada quantidade de realizações independentes, um procedimento semelhante ao descrito para o cálculo de $\phi$ foi utilizado: o valor da grandeza é o valor médio da média temporal de cada uma das realizações, $\phi = \langle \langle \phi_i(t) \rangle_t \rangle_{real.}$, sendo a incerteza da medida igual ao erro padrão da média, ou seja, $\sigma_\phi = \frac{1}{\sqrt{n_{real.}}} \left[ \text{Var}(\langle \phi_i(t) \rangle_t) \right]^{1/2}$. Dessa forma, para evitar a repetição vamos omitir esse detalhamento, descrevendo com maiores detalhes só os casos de exceção.

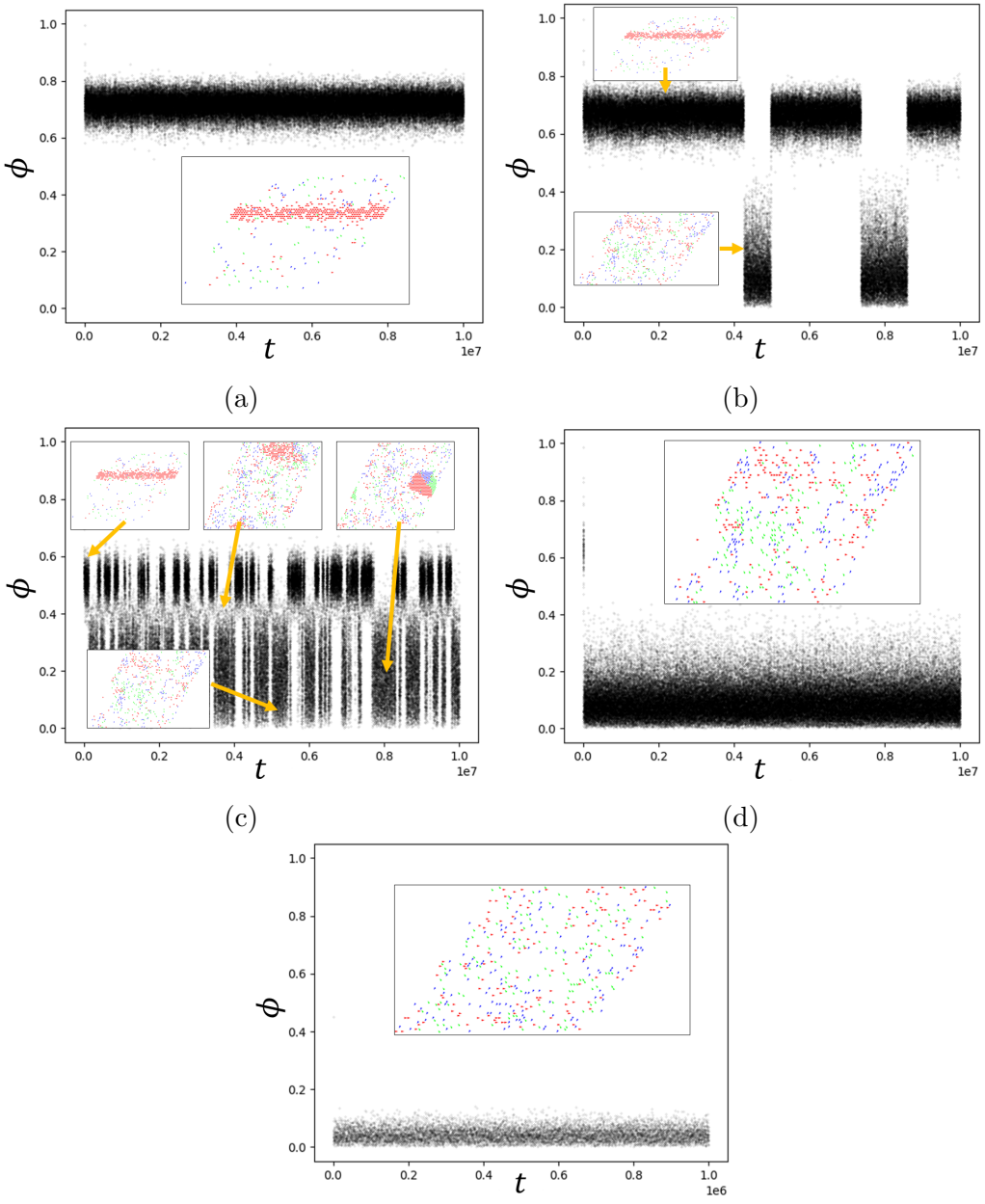
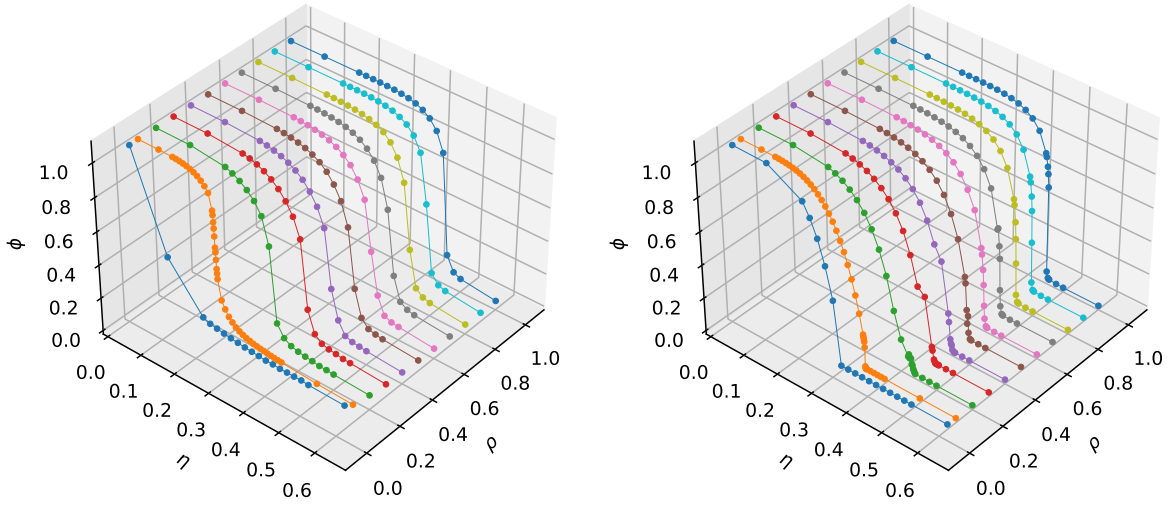



Figura 24 – Séries temporais do parâmetro de ordem $\phi$. **(a)** Valor aproximadamente constante para um estado estacionário do tipo $IB$ ($L = 65$, $\rho = 0.12$ e $\eta = 0.286$). **(b)** O valor de $\phi$ fica alternando entre dois regimes distintos, um associado à fase $IB$ e outro à fase $DA$, indicando a biestabilidade entre as duas configurações ($L = 65$, $\rho = 0.12$ e $\eta = 0.296$. **(c)** O valor de $\phi$ fica alternando o seu valor em resposta a multi-estabilidade de configurações no estado estacionário, a saber: $IB$, $MBI$, $TJI$ e $DA$ ($L = 65$, $\rho = 0.2$ e $\eta = 0.354$). **(d)** O valor $\phi$ flutua bastante mas o sistema exibe somente a configuração DA, nesse caso o valor do ruído é um pouco maior que $\eta_c$ ($L = 65$, $\rho = 0.12$ e $\eta = 0.3$). **(e)** O valor de $\phi \sim 0$, com pouca flutuação e o estado estacionário é do tipo $DA$, valor de $\eta$ distantes de $\eta_c$ ($L = 65$, $\rho = 0.12$ e $\eta = 0.6$). Nas Figs. (b) e (c) as setas indicam a configuração observada com o valor de $\phi$ em um dado instante de tempo.

intensidade do ruído é próximo de zero, o parâmetro de ordem assume o seu valor máximo ($\phi \to 1$), já para $\eta = 2/3$, as velocidades são contabilizadas de forma aleatória (com igual probabilidade), então o valor de $\phi \to 0$ para $L \to \infty$.

Independentemente da densidade, quando aumentamos a intensidade do ruído há uma queda abrupta no valor de $\phi$, associada com a transição de fase para o estado DA. Essa queda é mais acentuada em baixas densidades. Comportamentos semelhantes foram obtidos para outros tamanhos analisados ($L = \{65, 129, 257\}$).



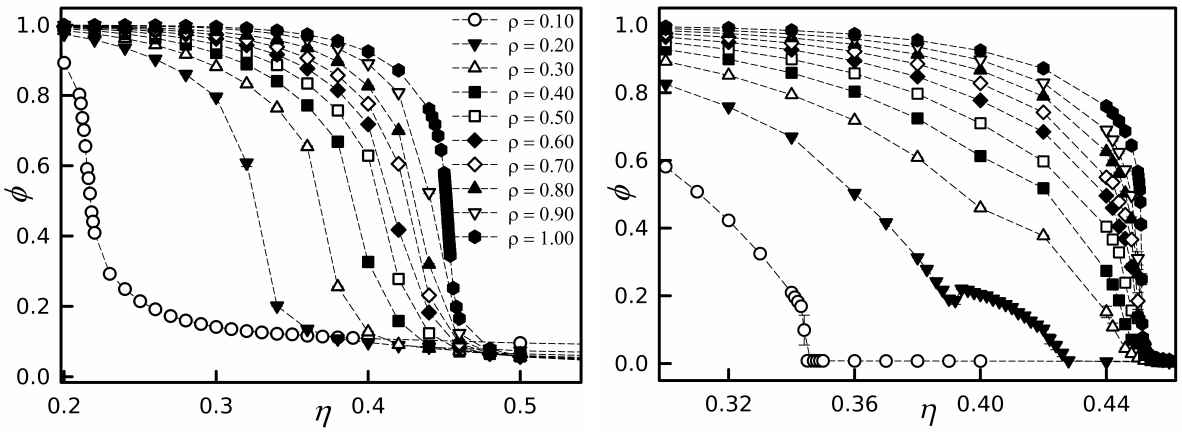

(a) (b)

Figura 25 – Valor do parâmetro de ordem como função de $\rho$ e $\eta$ para (a) $L = 33$ e (b) $L = 513$ usando IB como configuração inicial. As densidades analisadas foram 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 e 1.0.

A Figura 26 mostra o valor de $\phi$ como uma função do ruído para os tamanhos $L = 33$ e 513 (para outros tamanhos e configurações iniciais consultar o Apêndice E). Ao compararmos esses valores com os mapas de configurações (Fig. 17 e 21), podemos concluir que na fase IB [13], $\phi$ decai monotonicamente com o aumento do intensidade do ruído. Já na fase DA, como esperado, $\phi$ tende a zero.

Uma situação mais complexa surge quando olhamos o caso de $\rho = 0.2$ e $\eta^- < \eta < \eta^*$, em que a transição de fase é intermediada por configurações do tipo MBI e TJI, veja Fig. 21. Neste caso, $\phi(\eta)$ não possui um comportamento monotônico e apresenta uma rápida

[13] A partir desse ponto, quando falarmos em uma fase com o nome de alguma das configurações descrita na seção anterior, queremos dizer que nessa fase o estado estacionário é caracterizado somente exibir a configuração mencionada no estado estacionário.




(a) (b)

Figura 26 – Valor de $\phi$ *versus* $\eta$ para (a) $L = 33$ e (b) $L = 513$ usando IB como configuração inicial. As densidades são indicadas na legenda de (a). Na maioria dos casos as barras de erro são menores que os símbolos.

variação na curvatura (achados semelhantes puderam ser observados para valores maiores de densidade, mas menores que a unidade).

Nós não fomos capazes de determinar uma relação direta entre essas variações de $\phi$ e com a ocorrência de cada uma das configurações. Todavia, isso era esperado uma vez que $\phi$ não é um bom indicador para estados com configurações do tipo TJs, conforme discutido acima. Vale salientar que, por questão de completude, utilizamos os valores obtidos por simulações com um longo tempo de duração nas proximidades da transição para os dados de $L = 513$ e $\rho = 0.2$ da Fig. 26(b), tornando evidente o carácter não monotônico de $\phi(\eta)$.

## 4.5 Natureza da transição ordem-desordem

Um dos pontos importantes nos estudos de matéria ativa é a analise da transição de fase do tipo ordem-desordem[14]. Para tal, fizemos a análise do cumulante de Binder de quarta ordem, verificamos evidências de histerese e de efeitos de tamanho finito. Resolvemos focar as nossas análises para as densidades $\rho = 0.1$ (baixa densidade) e 1 (rede cheia)

[14] Sendo mais preciso, seria a chamada *flocking transition phase*, que traduzindo de forma livre teria o sentido de "transição de fase de bandos", ou seja, não é uma transição que ocorre no limiar do estado ordenado, mas no fim do movimento coletivo, tal qual discutido ao longo da Sec. 2.1. É fato que, na maioria dos modelos de matéria ativa, mais precisamente em modelos do tipo Vicsek, esses dois processos coincidem e por isso usa-se um parâmetro de ordem do tipo $\phi$ para mapear estes comportamentos.

usando IB como configuração inicial, uma vez que, para essas densidades há indícios de uma única transição de fase (do estado IB para o estado DA) ao variar o parâmetro $\eta$, vide Fig. 17 e Fig. 21. Dessa forma, deixando a análise das densidades intermediárias, de um cenário mais complexo, para um estudo futuro.

### 4.5.1 Rede cheia

Conforme já discutido, no limite de rede cheia as partículas não podem se mover. Sendo assim, a dinâmica é tal que uma partícula pode apenas alterar o que chamamos de velocidade – mas que neste caso acaba sendo simplesmente a sua orientação –. Isso faz com que o sistema se comporte como um modelo de *spin* de três estados, passando a ter simetria do tipo $S_3$ (permutação). Essa equivalência sugere que a transição ordem-desordem é de natureza contínua e que o sistema deve pertencer à mesma classe de universalidade do modelo de Potts de três estados [46].

O parâmetro do tipo susceptibilidade, $\chi \equiv L^2 \mathrm{Var}(\phi)$, como função de $\eta$, exibe um pico de amplitude crescente, cuja largura diminui sistematicamente com o tamanho do sistema, o que é esperado nas proximidades do ponto crítico. A Figura 27 mostra o comportamento de $\chi$ como função de $\eta$ na proximidade do ponto crítico. Para obter essa curva foram usadas de 30-60 realizações independentes, em cada uma delas deixamos o sistema relaxar por $2 \times 10^5$ passos MC e calculamos o valor médio de $\chi$ ao longo dos próximos $2.8 \times 10^6$ passos MC, por fim, assumimos o valor de $\chi$ como sendo a média de cada uma das realizações, ou seja, $\chi = \langle \langle \chi_i(t) \rangle_t \rangle_{real.}$, de forma semelhante a descrita para o $\phi$. Podemos verificar que no limite do sistema tendendo ao infinito a posição do pico de $\chi$ tende a um valor limite $\eta = 0.4510(1)$. Para esse resultado, verificamos a extrapolação do ajuste linear da posição do valor máximo de $\chi$ contra $1/L$ ( $(\eta_{max} = \eta(1/L))$[15].

Quando analisamos o comportamento do cumulante de Binder de quarta ordem, $U_4$, como função do ruído e diferentes tamanhos, verificamos que as curvas se cruzam

[15] Como os resultados obtidos posteriormente indicavam que, para a rede cheia, este modelo pertencia a mesma classe de universalidade de Potts, por isso, refizemos a análise considerando que $\eta(1/L^\nu)$, com $\nu = 5/6$, obtendo que para $L$ infinito $\eta = 0.4508(2)$.

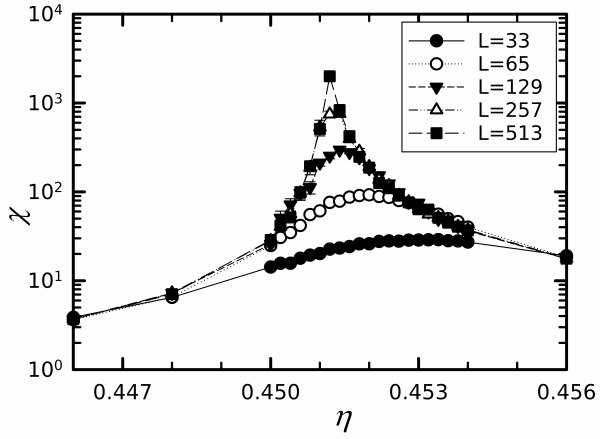



Figura 27 – Gráfico de $\chi$ *vs* $\eta$ para o caso da rede cheia, para vários tamanhos (veja legenda). As barras de erro são menores que os símbolos.

de modo a convergir para um valor $\eta_c$, como esperado no caso de uma transição de fase contínua [62, 63]. Para se estimar o valor de $\eta_c$ foi usado um procedimento semelhante ao do $\chi$, com um tempo de relaxação de $2 \times 10^5$ e média temporal sobre os próximos $2.8 \times 10^6$ passos. Para obtermos uma boa relevância estatística fizemos a média sobre 30-60 realizações independentes por ponto. O gráfico interno de Fig. 28 mostra $\eta_n$, o valor que marca o cruzamento de $U_4$ para sistemas com tamanho $L_n \equiv 2^n + 1$ com o $L_{n+1}$, como função de $1/L_{n+1}$. Ajustando os dados por uma linha reta[16] , verificamos que a estimativa de $\eta_c = \lim_{n\to\infty} \eta_n = 0.451002(6)$.

A estimativa do valor da intensidade do ruído crítico obtida com $U_4$ está de acordo com a obtida usando $\chi$, mas é consideravelmente mais precisa. Essa estimativa também é comparável com os resultados de uma teoria de campo médio com 19 sítios na vizinhança de uma dada partícula na qual todas as orientações são tratadas como estatisticamente independentes. Nessa teoria obtivemos $\eta_c = 0.4704$ (uma discrepância de aproximadamente 4%). Um trabalho mais completo sobre uma teoria de campo médio está em andamento por outro membro do grupo e deverá ser publicado em uma data posterior a da defesa desta tese.

Considerando os resultados obtidos de $\chi$ e $U_4$, assim como a aparente ausência de histerese para o parâmetro de ordem, nós concluímos que a transição de fase para

[16] Para maiores detalhes vide [64].

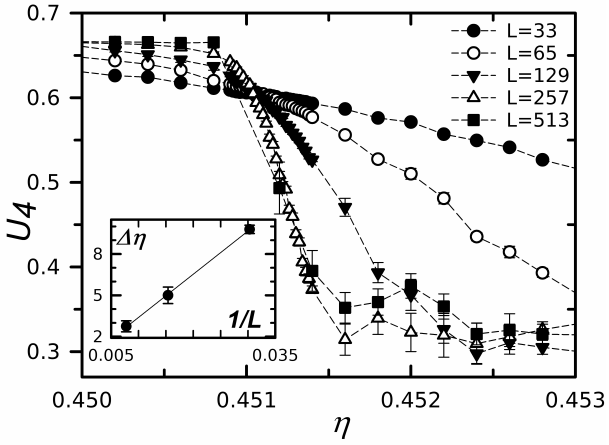


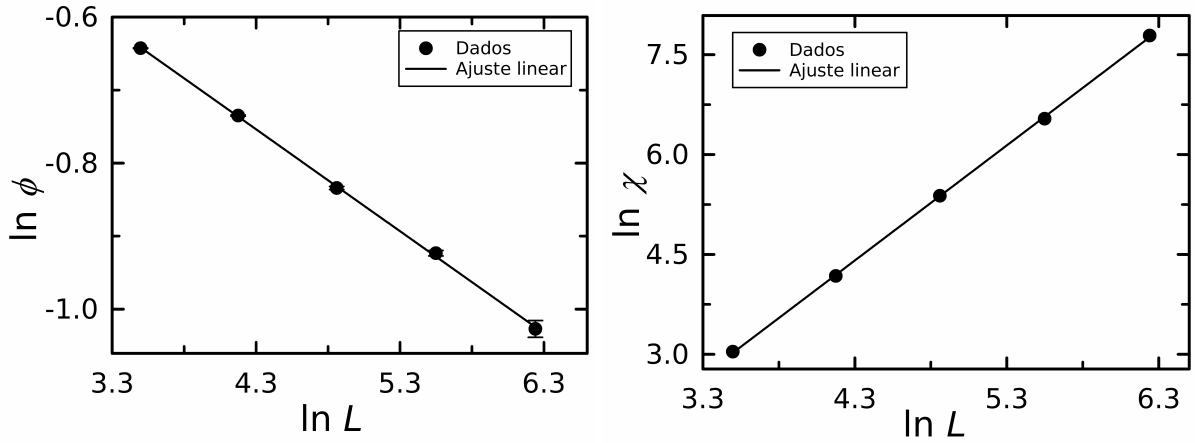

Figura 28 – Gráfico do cumulante de Binder de quarta ordem $U_4$ como função de $\eta$ para a rede cheia. O tamanho do sistema é indicado na legenda. O gráfico interno mostra $\Delta\eta \equiv (\eta_n - 0.45100) \times 10^5$ (onde $\eta_n$ é o valor de intensidade de ruído que marca o cruzamento das curvas de $U_4$ para tamanhos $L_n \equiv 2^n + 1$ e $L_{n+1}$) como função de $1/L_{n+1}$. A reta é o juste linear dos dados, que leva a um valor limite de $\eta = 0.451002(5)$.

uma rede completamente ocupada é contínua. Isso motivou a análise de tamanho finito, baseada na hipótese de escala usual para o ponto crítico $\eta_c$ (vide Eq. 2.11). Desse modo, o parâmetro de ordem e a sua variância devem seguir as leis de potência no ponto crítico„

$$\phi \propto L^{-\beta/\nu} \ , \quad \chi \propto L^{\gamma/\nu} \ , \tag{4.4}$$

onde $\nu$ é o expoente crítico que governa o crescimento do comprimento de correlação na região crítica. Pode-se notar na Eq. 2.11, que, para valores de intensidade de ruído $\eta$ fora do valor crítico, ou seja, para $t \neq 0$, os gráficos de $\ln \phi$ ou $\ln \chi \times \ln L$ exibem uma curvatura não nula. Dessa forma, podemos usar esse critério para determinar o valor de $\eta_c$. Empregando esse critério ao conjunto de estudos com grande significância estatística (média sobre 30-60 realizações independentes com $10^6$ passos MC e amostragem sobre os $2 \times 10^6$ passos MC restantes), nos obtivemos $\eta_c = 0.451034(1)$ e $0.451021(6)$ para os dados de $\phi$ e $\chi$, respectivamente. Na Figura 29 mostramos os gráficos do $\ln \phi$ (à esquerda) ou $\ln \chi$ (à direita) como função do $\ln L$ para para os cinco tamanhos de rede analisados; como pode-se perceber estes dados se ajustam bem a uma reta linear.

Os resultados da curvatura do gráfico log-log, discutido no parágrafo anterior, com




(a) (b)

Figura 29 – Gráficos log-log de (a) $\phi$ e de (b) $\chi$ como função de $L$ para $\eta = 0.451034$. Na maioria dos pontos, as barras de erro são menores que os símbolos.

o valor de $\eta_c$ obtido via analise do cruzamento das curvas do cumulante de Binder de quarta ordem, nos permite restringir o valor de $\eta_c$ ao intervalo $[0.451030, 0.451036]$. Desse modo, ao calcularmos a média da inclinação obtida dos ajustes lineares para os dados de $\ln\phi$ (e $\ln\chi$) em função de $\ln L$ para $\eta = \{0.451030, 0.451032, 0.451034, 0.451036\}$ e, levando em consideração a propagação de erro, obtivemos as seguintes estimativas para os expoentes críticos,

$$\frac{\beta}{\nu} = 0.138(3), \quad \frac{\gamma}{\nu} = 1.70(2). \tag{4.5}$$

Vale salientar que os valores dessas razões para o modelo de Potts de três estados em duas dimensões são: $\beta/\nu = 2/15 = 0.1333...$ e $\gamma/\nu = 26/15 = 1.733...$ Como pode-se notar, as nossas estimativas são ambas próximas aos valores do modelo de Potts. Acreditamos que essa pequena discrepância (de aproximadamente 4% e 2% para $\beta/\nu$ e $\gamma/\nu$, respectivamente) deve-se ao tamanho máximo utilizado e possíveis correções a escala de tamanho finito[17].

Dessa forma, podemos concluir que para a rede cheia, o comportamento crítico do nosso modelo é consistente com o do modelo de Potts de três estados em duas dimensões. Isso era, até certo ponto, esperado, já que a simetria do modelo de voto majoritário de

[17] Um possível indício de que há correlação devido ao tamanho finito se dá pelo fato de que as nossas três estimativas pra $\eta_c$ diferirem de menos de 0.007%, quando consideramos as sua incerteza, e mesmo assim os valores são mutualmente incompatíveis.

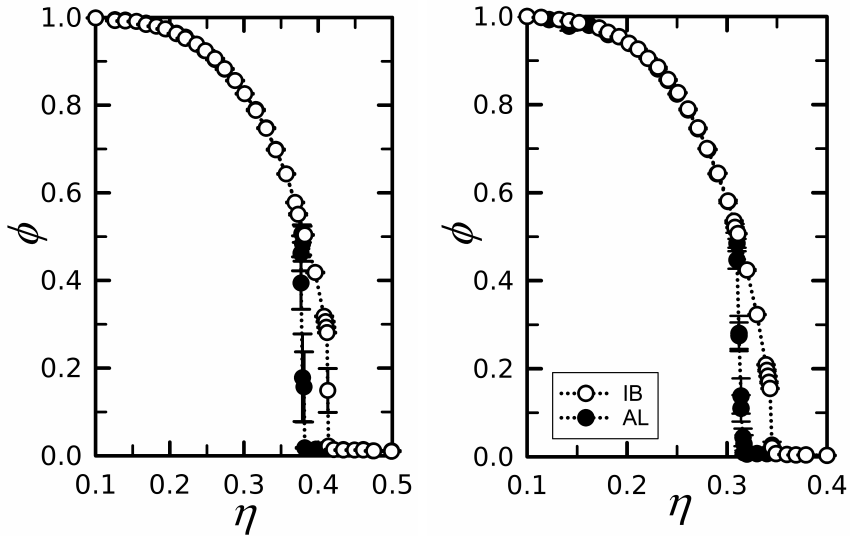
três estados é a mesma do modelo de Potts correspondente [59].

### 4.5.2 Baixa densidade

Enquanto a transição de fase para uma rede cheia é claramente contínua, nossas análises para uma densidade dez vezes menor, $\rho = 0.1$, nos mostram evidências robustas de que a transição $IB - DA$ é descontínua. Em um dos primeiros estudos para visualizar esse tipo de transição, nós realizamos simulações usando $10^6$ passos MC para dois tipos de configuração inicial: (i) uma IB com uma única faixa e vapor e, (ii) AL, conforme a Fig. 15(a). Para se obter a configuração (i), deixamos que 30 realizações independentes com $\eta = 0.31$ e configuração inicial IB, vide Fig. 15(c), relaxassem por $10^6$ passos MC e ao fim salvamos o estado de cada uma delas. Em seguida para cada realização independente nesse estudo inicial, selecionávamos aleatoriamente como configuração inicial uma dessas 30 configurações, permitindo que o sistema relaxasse por mais $4 \times 10^5$ passos MC usando o novo valor de $\eta$ antes de se iniciar a coleta dos dados. Na Figura 30 podemos ver os gráficos de $\phi$ *vs* $\eta$ para sistemas de tamanho $L = 257$ e $L = 513$. Esses gráficos nos mostram alguns resultados importantes:

- IB é a configuração mais estável para ruídos de baixa intensidade, uma vez que independentemente da configuração inicial o sistema acaba relaxando para esta configuração;
- o estado estacionário possui uma dependência com a configuração inicial para $\eta \in [0.310, 0.345]$, o que sugere que o sistema acaba tendo uma biestabilidade nesta região;
- o parâmetro de ordem aparenta saltar de um valor positivo para zero ao realizar a transição $IB \to DA$, e vice-versa.

Para os dois tamanhos analisados, as curvas de $\phi$ obtidas por ambas as configurações iniciais são essencialmente iguais para $\eta \in [0.1, 0.3]$. Para essa região, o estado estacionário é IB, com uma única faixa para configuração inicial do tipo (i) e uma ou mais bandas para




(a) (b)

Figura 30 – Valor do parâmetro de ordem $\phi$ *vs* $\eta$ para uma configuração inicial IB+Vapor (círculos vazios) e para uma configuração inicial AL (círculos cheios), usando $\rho = 0.1$ e, (a) $L = 257$ e (b) $L = 513$.

IB configuração inicial AL. Já para $\eta \geq 0.35$ observamos um estado estacionário DA para ambas as configuração inicial.

Os resultados acima confirmam a estabilidade do estado estacionário IB para ruídos de baixa intensidade, a biestabilidade do estado estacionário para ruídos intermediários, e um aparente salto no parâmetro de ordem na transição de fase $IB - DA$. Esses resultados motivaram a investigação da existência de histerese. Para tal estudo nos usamos doze realizações independentes com $L = 513$ e $\rho = 0.1$, iniciando com um valor de $\eta = 0.28$, configuração inicial IB (vide Fig. 14(c)) e tempo inicial de relaxação de $10^6$ passos. Então, o valor da intensidade do ruído foi aumentado de forma gradativa (incrementos $\Delta\eta = 0.003$) até que o sistema, inicialmente na fase IB, exibisse uma transição para a fase DA. Subsequentemente, nós invertemos o processo, lentamente diminuindo o valor de $\eta$ até o sistema retornar para a fase IB. A cada mudança no valor de $\eta$, permitimos o sistema relaxar por $10^5$ passos, tomando a média temporal pelos próximos $10^5$ passos. A Figura 31 mostra o valor de $\phi$ como uma função de $\eta$ para todas as doze realizações independentes; cada uma delas exibiu um ciclo de histerese. Nesse caso, as barras de erro representam o desvio padrão do valor de $\phi$ ao longo dos $10^5$ passos usados para fazer a

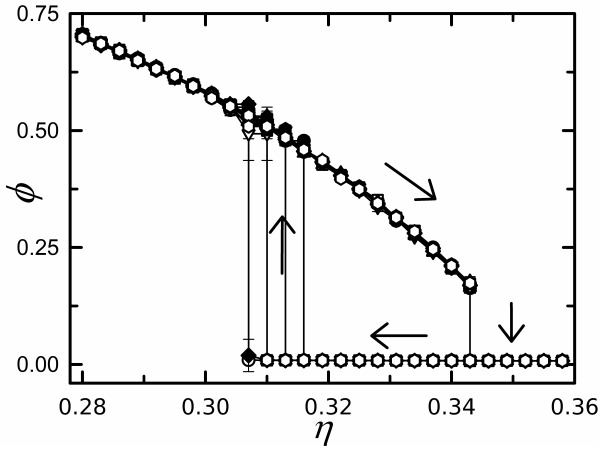



Figura 31 – Curva de histerese obtida para doze realizações independentes, obtida a partir de um variação lenta no valor de $\eta$. A setas indicam o aumento ou a diminuição no valor de $\eta$ e como resultado, se tivermos um salto para cima ou para baixo no valor de $\phi$. Para estes estudos usou-se $\rho = 0.1$ e o tamanho do sistema $L = 513$. Cada realização independente foi usado um símbolo distinto.

média em cada uma das realizações.

Podemos observar que a parte superior da curva de histerese segue diminuindo gradativamente até que, em todas as amostras, o valor do parâmetro de ordem cai abruptamente para $\eta$ no intervalo $[0.343, 0.346]$, marcando o limite de estabilidade da fase IB. Entretanto, quando olhamos as transições da fase DA para a fase IB, vemos que ela ocorre no intervalo significativamente maior $[0.307, 0.316]$[18] . Acreditamos que no caso em que o sistema vai para fase IB a partir de uma fase DA, o estado final pode apresentar uma ou mais faixas e esta variabilidade no número de faixas deve estar relacionado ao alargamento do intervalo do salto.

Ao construirmos alguns vídeos a partir da sobreposição de imagem das configurações ao longo do tempo, podemos notar que nas proximidades de ambos os limites de estabilidade, o sistema requer a formação de um núcleo crítico [51]. No caso do processo que leva ao ordenamento, vemos que, devido às flutuações, eventualmente se forma um pequeno aglomerado que agrega mais partículas até que, efetivamente, atravessa todo o sistema e forma as faixas congestionadas.

[18] O valor médio e o desvio padrão sobre os valores de $\eta$ em que há a transição do estado DA para o estado IB são iguais a 0.313 e 0.002, respectivamente.

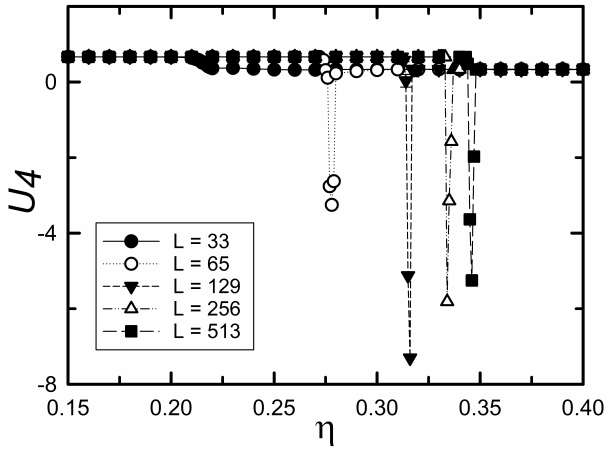



Figura 32 – Dependência de $U_4$ com o aumento da intensidade de ruído para cinco valores de $L$.

No caso do processo que leva à fase DA, vemos que a espessura da faixa[19] diminui, ao ponto que a menor das flutuações na forma da faixa acaba partindo-a (como uma espécie de uma "bolha") e o fragmento de IB inicia um processo de evaporação rápida, até o seu súbito desaparecimento. Para entender a evolução das estruturas condensadas, é imprescindível o leitor assistir os vídeos fornecidos em Apêndice D.

Ademais, pudemos verificar que $U_4$ apresenta sinais claros de uma transição de fase descontínua na região da mudança de fase $IB - DA$: como pode-se notar na Fig. 32, $U_4$ não decai de forma monotônica com o aumento do valor de $\eta$ e apresenta valores negativos nessas regiões. A única exceção é para o menor tamanho de sistema analisado, $L = 33$. Isso de fato ocorrer e é esperado para sistemas de tamanhos pequenos e, na maioria dos casos, está relacionado ao surgimento de correlações de escala de tamanho finito – fenômeno semelhante ao que permeou as discussões sobre a natureza da transição do modelo de Vicsek, vide Sec. 2.2–.

Em suma, esses resultados nos dão um forte indício de que a natureza da transição de fase ordem-desordem é descontínua para $\rho = 0.1$. Nós esperamos que isso ocorra para densidade menores e que, para algum valor de $\rho \leq 1$, exista uma mudança da natureza da transição, evidenciando um possível ponto tri-crítico. Optamos por estudar esse regime com mais detalhes em um trabalho futuro.

[19] Uso a palavra faixa no singular pois verifica-se que neste limiar todas as amostras analisadas tinham uma única faixa antes de fazer a transição.

# 5 Conclusão e perspectivas futuras

Investigamos um modelo do tipo Vicsek com volume excluído em uma rede triangular, onde as partículas só podiam assumir três velocidades distintas. O modelo exibe uma grande variedade de configurações nos estados estacionários, dependendo do tamanho da rede, da densidade, da intensidade do ruído e da configuração inicial. Porém, esta dependência com o tamanho da rede ocorre principalmente para tamanhos pequenos. Desta forma, acredita-se que para tamanhos suficientemente grandes, essa dependência não exista. Diferentemente dos modelos tipo Vicsek sem interação de volume excluído [1, 5, 65], onde a transição de fase para o estado ordenado envolve o surgimento de bandas com partículas móveis, no nosso modelo o volume excluído leva a estruturas condensadas em que a maioria das partículas são imóveis.

Para densidades menores que a unidade, as fases exibem estruturas condensadas coexistindo com um vapor de baixa densidade e desordenado, cujas propriedades mudam continuamente até que o sistema atinja uma fase desordenada e homogênea. Entre todos os estados estacionários que exibem estrutura condensada, aquele que exibe IB com uma única faixa é o mais estável para baixas intensidades de ruído, independentemente do tamanho do sistema, densidade ou configuração inicial. Em certos casos, mais de um tipo de configuração pode aparecer para o mesmo conjunto de parâmetros.

Assim como em vários modelos de matéria ativa, com ou sem interação do tipo volume excluído, o nosso modelo exibe uma transição ordem-desordem descontínua [16, 35, 38, 41, 58, 65]. Da mesma forma que ocorre em alguns modelos, também observamos que o nosso modelo pode apresentar uma mudança no tipo de transição dependendo da densidade. Um dos modelos mais recentes de matéria ativa a observar esse comportamento foi o de M. Paoluzzi et al. (2024) [66], que mostrou que, no espaço contínuo e com frustrações geométricas, essa mudança também ocorre. O nosso modelo apresenta uma única transição para os dois limites de densidade (alta e baixa); para densidades intermediárias, a transição

de fase é mais complexa e passa por vários tipos de estados estacionários à medida que o ruído aumenta.

Verificamos que a intensidade do ruído na qual essa transição ocorre aumenta rapidamente para baixa densidade, permanecendo quase constante para $\rho \gtrsim 0.4$. Em baixa densidade, há fortes indícios de que a transição é descontínua. Na rede cheia, o sistema pode ser interpretado como um modelo de voto majoritário de três estados, com a mesma simetria do modelo de Potts de três estados. Uma análise de escala de tamanho finito revela valores das razões entre os expoentes críticos $\beta/\nu = 0.138(3)$ e $\gamma/\nu = 1.70(2)$, muito próximos aos previstos para o modelo de Potts de três estados bidimensional.

Apesar de termos obtido vários resultados e uma boa caracterização das fases do modelo, alguns aspectos importantes permanecem em aberto e representam perspectivas para trabalhos futuros. Um deles é a caracterização do comportamento do sistema na região em que a transição de fase ordem-desordem deixa de ser descontínua e se torna contínua. Acredita-se que tal mudança ocorra em um ponto tricrítico ; sendo essencial uma análise de escala nessa região para entender a dinâmica dessa transição[1].

Outro aspecto a ser investigado é a caracterização detalhada da transição de fase $IB - DA$ em densidades intermediárias , especialmente nos casos em que a transição é intermediada por estados com bandas móveis e congestionamentos. Nesses casos, um parâmetro de ordem que meça um ordenamento global não é totalmente adequado. Portanto, pretende-se investigar outras propriedades que possam discriminar claramente cada uma das configurações, como o fator de estrutura e a corrente[2], entre outros.

Além disso, é necessário caracterizar o tempo de vida e a estabilidade de cada uma das configurações com o aumento do tamanho do sistema, pois isso nos auxiliaria na criação de um diagrama de fase mais completo do modelo, permitindo um melhor

[1] As análises de $\eta^*$ e $\eta^-$ sugerem que a descontinuidade para a transição vai ocorrer para $\rho \leq 0.96$ (maior densidade analisada abaixo da unidade), dessa forma a transição pode mudar somente para densidade igual a unidade.

[2] Resultados preliminares da corrente, $\mathbf{j} \equiv 1/N \sum_{i=1}^{N_{at}} \mathbf{v}_i$, onde apenas consideramos o número de partículas que efetivamente conseguem se mover em um passo Monte Carlo (MC) ($N_{at}$), indicam um sinal de descontinuidade em valores de ruídos ligeiramente menores que os previstos para $\phi$ sempre que: estruturas do tipo $TJI$ e $TJII$ precedem a transição.

mapeamento de todos os estados estacionários, inclusive com sobreposição e biestabilidade.

Durante nossos estudos, fomos capazes de compreender em detalhes as fases de um modelo simples de matéria ativa com interação do tipo volume excluído e um conjunto restrito de velocidades. Observamos que o uso de um volume excluído do tipo *hard-core* (núcleo duro) — onde apenas uma partícula pode ocupar um dado sítio – frustra em grande medida a formação de bandos, pois causa um forte desacoplamento entre os campos de densidade e ordem. Modelos em rede que relaxam essa regra de partícula única ou utilizam algum tipo de *soft-core* (núcleo mole) mostram que esse tipo de interação é mais adequado para estudar a formação de bandos [8, 9, 38]. Portanto, seria interessante reanalisar nosso modelo relaxando esse tipo de interação.

Ainda buscando uma melhor compreensão do efeito do desacoplamento entre os campos de densidade e ordem na formação de bandos, seria interessante investigar um modelo semelhante ao nosso que incorpore uma dinâmica populacional. Esse tipo de dinâmica gera uma correlação entre população e ordem, possibilitando a determinação precisa dos expoentes de escala da teoria hidrodinâmica da equação de Toner & Tu (vide Sec. 2.2.3). No espaço contínuo, essa dinâmica permite o surgimento de estruturas aparentemente estáveis, chamadas de *asters*, que são uma espécie de defeito onde as partículas emergem radialmente de um centro (sem partículas) até a fronteira (densa), conforme ilustrado na Fig. 3 de [67]. Estruturas desse tipo poderiam aparecer em nosso modelo, respeitando as especificidades. Além disso, espera-se que essa dinâmica populacional possa modificar os estados congestionados sem a necessidade de alterar o tipo de interação de volume excluído.

Por fim, outra extensão ao nosso modelo seria investigar o modelo de gás ativo em rede com uma interação atrativa, o que permitiria o estudo de ordem sem a necessidade de utilizar o artifício de condições de contorno periódicas.

# Referências

[1] Vicsek, T., A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen e O. Shochet: *Novel type of phase transition in a system of self-driven particles*. Phys. Rev. Lett., 75:1226–1229, 1995. Citado 5 vezes nas páginas 14, 23, 25, 26, and 88.

[2] Ramaswamy, S. e M. Rao: *The physics of active membranes*. C. R. Acad. Sci.: Ser. IV, 2:817–839, 2021. Citado na página 14.

[3] Ramaswamy, S.: *Active matter*. J. Stat. Mechanics: Theor. Exp., 054002:1–26, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 14, 21, and 22.

[4] Marchetti, M. C. *et al.*: *Hydrodynamics of soft active matter*. Rev. Mod. Phys., 85:1143–1189, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 15 and 22.

[5] Chaté, H., F. Ginelli, G. Grégoire e F. Raynaud: *Collective motion of self-propelled particles interacting without cohesion*. Phys. Rev. E, 77:046113, 2008. Citado 5 vezes nas páginas 14, 21, 28, 29, and 88.

[6] Solon, A. P. e J. Tailleur: *Revisiting the flocking transition using active spins*. Phys. Rev. Lett., 111:078101, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 14 and 40.

[7] Solon, A. P. e J. Tailleur: *Flocking with discrete symmetry: The two-dimensional active ising model*. Phys. Rev. E, 92:042119, 2015. Citado 7 vezes nas páginas 14, 40, 41, 42, 43, 45, and 46.

[8] Chatterjee, S. *et al.*: *Flocking and reorientation transition in the 4-state active potts model*. Europhys. Lett., 130:66001, 2020. Citado 4 vezes nas páginas 15, 46, 47, and 90.

[9] Mangeat, M. *et al.*: *Flocking with a q-fold discrete symmetry: Band-to-lane transition in the active potts model*. Phys. Rev. E, 102:042601, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 15, 47, and 90.

[10] Chatterjee, S., M. Mangeat e H. Rieger: *Polar flocks with discretized directions: the active clock model approaching the vicsek model.* Europhys. Lett., 138:41001, 2022. Citado na página 15.

[11] Solon, A., H. Chaté, J. Toner e J. Tailleur: *Susceptibility of polar flocks to spatial anisotropy.* Phys. Rev. Lett., 128:208004, 2022. Citado na página 15.

[12] Orosz, G., R. E. Wilson e G. Stépán: *Traffic jams: dynamics and control.* Philos. Trans. R. Soc. A, 368:4455–4479, 2010. Citado na página 16.

[13] Helbing, D.: *Traffic and related self-driven many-particle systems.* Rev. Mod. Phys., 73:1067, 2001. Citado na página 16.

[14] Khakalo, K. *et al.*: *Coarsening and mechanics in the bubble model for wet foams.* Phys. Rev. E, 98:012607, 2018. Citado na página 16.

[15] Moussaid, M. *et al.*: *Traffic instabilities in self-organized pedestrian crowds.* PLoS Comput. Biol., 8:e1002442, 2012. Citado na página 16.

[16] Peruani, F. *et al.*: *Traffic jams, gliders, and bands in the quest for collective motion of self-propelled particles.* Phys. Rev. Lett., 106:128101, 2011. Citado 7 vezes nas páginas 16, 48, 49, 50, 51, 52, and 88.

[17] Schaller, V. *et al.*: *Polar patterns of driven filaments.* Nature, 467:73–77, 2010. Citado na página 19.

[18] Sokolov, A. e I. S. Aranson: *Reduction of viscosity in suspension of swimming bacteria.* Phy. Rev. Lett., 103:148101, 2009. Citado na página 19.

[19] Buhl, J. *et al.*: *From disorder to order in marching locusts.* Science, 312:1402–1406, 2006. Citado na página 19.

[20] Gautrais, J. *et al.*: *Analyzing fish movement as a persistent turning walker.* J. Math. Biol., 58:429–445, 2009. Citado na página 19.

[21] Wang, W. *et al.*: *From one to many: Dynamic assembly and collective behavior of self-propelled colloidal motors.* Acc. of Chem. Res., 48:1938–1946, 2015. Citado na página 19.

[22] Balch, T. e R. C. Arkin: *Behavior-based formation control for multirobot teams.* IEEE: Trans. Robot. Autom., 14:926–939, 1998. Citado na página 20.

[23] Turgut, A. E. *et al.*: *Self-organized flocking in mobile robot swarms.* Swarm Intel., 2:97–120, 2008. Citado na página 20.

[24] Peshkov, A.: *Boltzmann-ginzburg-landau approach to simple models of active matter.* Tese de Doutoramento, Université Pierre et Marie Curie- Paris VI, 2013. Citado na página 20.

[25] Ramaswamy, S.: *The mechanics and statistics of active matter.* Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 1:323–345, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21, and 22.

[26] Silva, P. C. A. *et al.* da: *Normal and tumoral melanocytes exhibit q-gaussian random search patterns.* PloS One, 9:e104253, 2014. Citado na página 20.

[27] Reynolds, C. W.: *Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model.* Em *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, volume 21, páginas 25–34. ACM, agosto 1987. Citado na página 21.

[28] Toner, J. e Y. Tu: *Long-range order in a two-dimensional dynamical xy model: How birds fly together.* Phys. Rev. Lett., 75:4326–4329, 1995. Citado 4 vezes nas páginas 21, 34, 35, and 36.

[29] Toner, J. e Y. Tu: *Flocks, herds, and schools: A quantitative theory of flocking.* Phys. Rev. E, 58:4828–4858, 1998. Citado na página 21.

[30] Toner, J.: *Reanalysis of the hydrodynamic theory of fluid, polar-ordered flocks.* Phys. Rev. E, 86:1–9, 2012. Citado na página 21.

[31] Ginelli, F.: *The physics of the vicsek model.* Eur. Phys. J. Special Topics, 225:2099–2117, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 21, 23, and 38.

[32] Plischke, M. e B. Bergersen: *Equilibrium statistical physics*. World Scientific Publishing Company, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 22 and 73.

[33] Podestá, T. S. V. et al.: *Anomalous diffusion and q-weibull velocity distributions in epithelial cell migration*. Plos one, 12:e0180777, 2017. Citado na página 23.

[34] Ota, S., S. B. Ota e M. Fahnle: *Microcanonical monte carlo simulations for the two-dimensional xy model*. J. Phys.: Cond. Matt., 4:5411, 1992. Citado na página 24.

[35] Grégoire, G. e H. Chaté: *Onset of collective and cohesive motion*. Phys. Rev. Lett., 92:025702, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 25, 27, and 88.

[36] Tsai, S. e S. R. Salinas: *Fourth-order cumulants to characterize the phase transitions of a spin-1 ising model*. Braz. J. Phys., 28:58–65, 1998. Citado na página 27.

[37] Ramaswamy, S., R. A. Simha e J. Toner: *Active nematics on a substrate: Giant number fluctuations and long-time tails*. Europhys. Lett., 62:196, 2003. Citado na página 29.

[38] Chaté, H.: *Dry aligning dilute active matter*. Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 11:189–212, 2020. Citado 6 vezes nas páginas 29, 38, 42, 44, 88, and 90.

[39] Alon, U., M. G. Surette, N. Barkai e S. Leibler: *Robustness in bacterial chemotaxis*. Nature, 397:168–171, 1999. Citado na página 30.

[40] Stuelten, C. H. e C. A. Parentand D. J. Montell: *Cell motility in cancer invasion and metastasis: insights from simple model organisms*. Nat. Rev. Cancer, 18:296–312, 2018. Citado na página 30.

[41] Tu, Y., J. Toner e M. Ulm: *Sound waves and the absence of galilean invariance in flocks*. Phys. Rev. Lett., 80:4819–4822, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 36, 37, and 88.

[42] Toner, J.: *Birth, death, and flight: A theory of malthusian flocks*. Phys. Rev. Lett., 108:088102, 2012. Citado na página 37.

[43] Toner, J.: *Reanalysis of the hydrodynamic theory of fluid, polar-ordered flocks.* Phys. Rev. E, 86:031918, 2012. Citado na página 37.

[44] Mermin, N. D. e H. Wagner: *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models.* Phys. Rev. Lett., 17, 1966. Citado na página 37.

[45] Almodóvar, A., T. Galla e C. López: *Liquid-hexatic-solid phases in active and passive brownian particles determined by stochastic birth and death events.* Phys. Rev. E, 106:054130, 2022. Citado na página 39.

[46] wu, F.: *The potts model.* Rev. Mod. Phys., 54:235–268, 1982. Citado 3 vezes nas páginas 39, 47, and 80.

[47] Singh, Satya Pal: *The ising model: Brief introduction and its application.* Em Sivasankaran, Subbarayan, Pramoda Kumar Nayak e Ezgi Günay (editores): *Metastable, Spintronics Materials and Mechanics of Deformable Bodies*, capítulo 8. IntechOpen, Rijeka, 2020. `https://doi.org/10.5772/intechopen.90875`. Citado na página 39.

[48] Kolmogorov, A: *Theory of markov chains.* Math. Ann, 112:155–160, 1936. Citado na página 42.

[49] Chaté, H. *et al.*: *Modeling collective motion: variations on the vicsek model.* Eur. Phys. J. B, 64:451–456, 2008. Citado na página 42.

[50] Olsen, K. S.: *Diffusion of active particles with angular velocity reversal.* Phys. Rev. E, 103:052608, 2021. Citado na página 42.

[51] Marqusee, J. A. e J. Ross: *Kinetics of phase transitions: Theory of ostwald ripening.* J. Chem. Phys., 79:373–378, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 44 and 86.

[52] Binder, K.: *Applications of monte carlo methods to statistical physic.* Rep. Prog. Phys., 60:487–559, 1997. Citado na página 44.

[53] Aranson, I. S., A. Snezhko, J. S. Olafsen e J. S. Urbach: *Comment on "long-lived giant number fluctuations in a swarming granular nematic"*. Science, 320:612, 2008. Citado na página 46.

[54] Duminil-Copin, H., V. Sidoravicius e V. Tassion: *Continuity of the phase transition for planar random-cluster and potts models with* $1 \leq q \leq 4$. Commun. Math. Phys., 349:47–107, 2017. Citado na página 47.

[55] Gillespie, D. T.: *Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions*. J. Phys. Chem., 81:2340–2361, 1977. Citado na página 49.

[56] Biham, O., A. A. Middleton e D. Levine: *Self-organization and a dynamical transition in traffic-flow models*. Phys. Rev. A, 46:R6124, 1992. Citado na página 50.

[57] Nagatani, T.: *Jamming transition in the traffic-flow model with two-level crossings*. Phys. Rev. E, página 3290, 1993. Citado na página 50.

[58] Karmakar, M., S. Chatterjee, M. Mangeat, H. Rieger e R. Paul: *Jamming and flocking in the restricted active potts model*. Phys. Rev. E, 108:014604, 2023. Citado 2 vezes nas páginas 52 and 88.

[59] Zubillaga, B. J., A. L. M. Vilela, M. Wang, R. Du, G. Dong. e H. E. Stanley: *Three-state majority-vote model on small-word networks*. Sci. Rep., 12:282, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 58 and 84.

[60] Rosembach, T. V., A. L. N. Dias e R. Dickman: *Three-state active lattice gas: A discrete vicsek-like model with excluded volume*. Phys. Rev. E, 110:014109, 2024. Citado na página 60.

[61] Scalas, E. e R. Fernando: *Pair-correlation function in two dimensional lattice gases*. Phys. Rev. E, 49:513–520, 1994. Citado na página 72.

[62] Binder, K. e P. D. Landau: *Finite-size scaling at first-order phase transitions*. Phys. Rev. E, 30:1477, 1984. Citado na página 81.

[63] Furlan, A. P., T. J. Oliveira e R. Dickman: *Order-disorder transition in a two-dimensional associate latiice gas*. Phys. Rev. E, 100:022109, 2019. Citado na página 81.

[64] Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery: *Numerical Recipies: The Art of Scientific Computing*, páginas 773–799. Cambridge University Press, New York, EUA, 3a edição, 2007. `http://www.cambridge.org/9780521880688`. Citado na página 81.

[65] Solon, A. P., H. Chaté e J. Tailleur: *From phase to microphase separation in flocking models: The essential role of nonequilibrium fluctuations*. Phys. Rev. E, 114:068101, 2015. Citado na página 88.

[66] Paoluzzi, M., D. Levis e I. Pagonabarraga: *From flocking to glassiness in dense disorded polar active matter*. Commun. Phys., 7:57, 2024. Citado na página 88.

[67] Besse, M., H. Chaté e A. Solon: *Metastability of constant-density flocks*. Phys. Rev. Lett., 129:268003, 2022. Citado na página 90.

# Apêndices

# APÊNDICE A – Distribuição de frequência de $\delta\theta$

A figura abaixo mostra o comportamento da distribuição de frequência para $\rho_\circ = 0.5$ para alguns valores $\eta$. Como pode-se perceber a distribuição tipo "Batman" persiste para valores de $\eta$ superiores ao observado para $\rho_\circ = 2.0$. Além disso, neste caso para $\eta = 1.0$ não observamos uma distribuição tipo normal, mas uma distribuição que se assemelha à imagem de perfil do "Hulk".

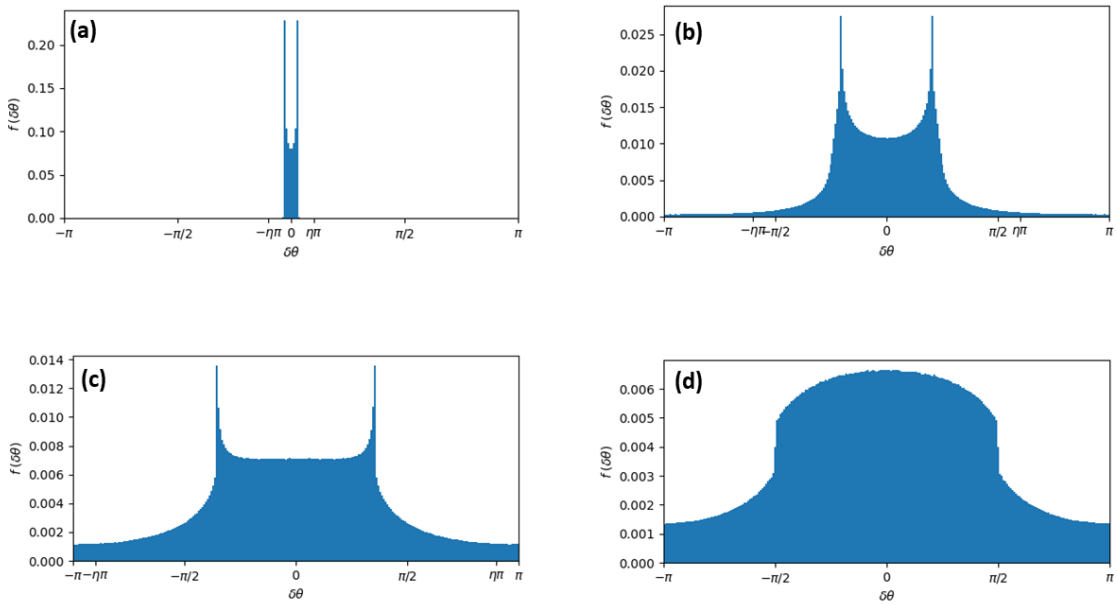



Figura 33 – Distribuição da frequência que o valor $\delta\theta$ aparece ao longo de $10^4$ passos Monte Carlo (MC) para o caso do ruído vetorial. **(a)** $\eta = 0.1$ (estado ordenado), **(b)** $\eta = 0.6$, **(c)** $\eta = 0.9$ e **(d)** $\eta = 1.0$. Para todos os casos foram usados $L = 64$, $v_\circ = 0.5$ e $\rho_\circ = 0.5$. Foram adotadas 250 caixas para fazer essas distribuições.

# APÊNDICE B – Código fonte do modelo

Neste apêndice, é colocado uma cópia do código, escrito em Fortran, de uma das versões utilizadas para simular o modelo.

```
1   program main
2       !Esta versao do codigo permite fotos e salva a ultima
            configuracao. O sistema ira salvar uma fato a cada
            nPassCicle.
3       !Foi incorporado um gerador aleatorio inline que otimizou
            o tempo de execussao.
4       !Foi acrescentadas as medidas de correntes e fracoes em
            cada estado.
5       !Foram criados mecanismos que permitem continuar uma
            simulacao.
6       !ATENCAO: segue desabilitada as medidas das regioes M's.
7       !Vizinhanca com 19.
8       !Data: 22/03/2023
9       implicit none
10
11      !# Definicao do tipo das variaveis
12      integer, parameter:: i16 = selected_int_kind(1) !Suporta
            ate 9
13      integer, parameter:: i32 = selected_int_kind(9) !Suporta
            de -10**10 ate 10**10 - Like 32-bits (Default)
14      integer, parameter:: i64 = selected_int_kind(18) !Suporta
            de -2^127 ate 2^127 - Like 32-bits
15
16      integer, parameter:: sp = selected_real_kind(6, 37) !32-
            bits
```

```
17        integer, parameter:: dp = selected_real_kind(15, 307) !64-
             bits
18
19        !# Variaveis gerador de numero aleatorio
20        integer (i32):: giroSeeds, kseed, lseed, mseed, nseed
21        integer (i32), parameter:: AI = 843314861_i32
22        integer (i32), parameter:: BI = 453816693_i32
23        integer (i32), parameter:: MI = 1073741824_i32
24        integer (i32), parameter:: MI2 = (MI-1)+MI
25        real (dp), parameter:: rSeed = 0.5_dp/MI
26        real (dp):: ran
27
28
29        !#Parametros da simulacao
30        integer (i32), parameter:: l=999
31        real (dp), parameter:: den=9.99d-9
32        real (dp), parameter:: eta=9.99e-9
33        integer (i32), parameter:: amos=999
34
35        ! !#Parametros da simulacao (teste)
36        ! integer (i32), parameter:: l=256
37        ! real (dp), parameter:: den=1000.0d-3
38        ! real (dp), parameter:: eta=45100.0e-5
39        ! integer (i32), parameter:: amos=1
40
41        !## Outros parametros ajustados com menos frequencia
42        logical:: fotoCicle = .false.       !Fazer foto a cada
             ciclo
43        integer (i32), parameter:: dPhi=100 !Intervalo de passos
             para salvar os medidas
```

```
44        integer (i64), parameter:: tempoInit=0 !Numero de passos
             anterior
45        integer (i64), parameter:: nPass=10**7 !Numero de passos
             na simulacao
46        integer (i64), parameter:: nPassCorte=0 !Numero de passos
             termalizacao
47        integer (i64), parameter:: nPassCicle=10**5 !Intervalos de
              PMC em que o sistema ira salvar os resultados em disco
48
49        !# Demais parametros e variaveis do programa
50        integer (i32), parameter :: iEta = int(eta*(MI2), i32)
51        integer (i64), parameter:: ll = 2*l+1, ll2=ll**2
52        integer (i64), parameter:: nPart = nint(den*(ll2))
53        integer (i64), parameter:: dPrintphi = int(nPass/10_i64,
             i64)
54        integer (i64), parameter:: nCicle = int((nPass-nPassCorte)
             /nPassCicle, i64)
55        integer (i64), parameter:: nModCiclePass = mod((nPass-
             nPassCorte),nPassCicle)
56        ! integer (i64), parameter:: nSitRegMs=9*ll
57        real (dp), parameter:: rnPart=1.0d00/npart
58        real (dp), dimension(2), parameter:: v1 = [ 1.0_dp, 0.0_dp
              ]
59        real (dp), dimension(2), parameter:: v2 = [ -0.5_dp,
             0.86602540378443864676372317075294_dp]
60        real (dp), dimension(2), parameter:: v3 = [ -0.5_dp,
             -0.86602540378443864676372317075294_dp]
61        ! real (dp), parameter:: rnSitRegMs = 1.00d00/nSitRegMs
62
63        character (len = 4):: namel
```

```
64        character (len = 4):: nameden
65        character (len = 3):: nameamos
66        character (len = 7):: nameeta
67        integer (i32):: iv
68        integer (i64):: iPass, iPass0, iPass1, iPassMC, iCicle
69        integer (i64):: iPart, iPartAct
70        integer (i64):: iSitio, iPos
71        integer (i16), dimension(ll2):: listaVeloc
72        integer (i32), dimension(3):: iVels, iMoves
73        integer (i64), dimension(3):: iContVels, iContVelsAct,
             iContVelsIna
74        integer (i64), dimension(3):: MudanVel
75        integer (i64), dimension(nPart):: listaPos
76        integer (i64), dimension(ll2, 7):: listaViz
77        integer (i64), dimension(ll2, 19):: listaAllViz
78        ! integer (i64), dimension(nSitRegMs, 4):: regM
79        integer (i16), dimension(0:19,0:19,0:19):: matMaximo
80        integer (i64), dimension(0:nPassCicle, 3):: nPartEachVel
81        real (dp), dimension(2):: correnteStep
82        real (dp), dimension(0:nPassCicle):: phi, phiAct, phiIna,
             fracActPart
83        real (dp), dimension(0:nPassCicle, 2):: corrente
84        ! real (dp), dimension(0:nPassCicle,4):: M
85
86        !Escrevendo os nomes das variaveis necessarias:
87        write(namel, '(I4.4)' ) l
88        write(nameden, '(I4.4)' ) nint(den*1000)
89        write(nameeta, '(I7.7)' ) nint(eta*1.0e7)
90        write(nameamos, '(I3.3)') amos
91
```

```
92        !Configurar as sementes iniciais do gerador de numeros
             aleatorios:
93        call initSeeds(0)  !0 - Aleatorias, 1 - Load especificas(
             Ler comentarios)
94
95        call setMatMaximo()
96
97        phi = 0.00d0
98        phiAct = 0.00d0
99        phiIna = 0.00d0
100       fracActPart = 0.00d0
101       corrente = 0.00d0
102       nPartEachVel = 0.00d0
103
104       !Configurando a rede
105       call setRede
106       call setVizinhanca
107
108       !Configurando a configuracao inicial
109       !# ! 0 - Rand, 1 - IB, 2 - MBII, 3 - All Mobility,
110       !# 9 - Carregar conf de um arquivo (vide informacoes)
111       call setConfInit(1)
112
113       !Iniciando a simulacao
114       !#Efetuando os passos de termalizacao (nenhum dado salvo)
115       if (nPassCorte .gt. 0) then
116          do iPass = 1,nPassCorte,1
117             !call stepMC
118
119             !MC nao mede nenhuma grandeza, so termaliza
```

```
120             do iPassMC = 1,nPart
121
122                iVels = 0
123
124                !Sorteando uma particula e verificando a
                      velocidade da sua vizinahnca
125                lseed = AI*lseed+BI
126                if (lseed .le. 0) lseed = (lseed+MI)+MI
127                ran = rSeed*lseed
128                iPart = int(ran*nPart)+1
129                iPos = listaPos(iPart)
130
131                do iSitio = 1,19
132                   iv = listaVeloc(listaAllViz(iPos,iSitio))
133                   if (iv .gt. 0) then
134                      iVels(iv) = iVels(iv)+1
135                   end if
136                end do
137
138                !Realizando a incerteza nas contagens dos
                      vizinhos
139                iMoves = 0
140
141                !!Reazilando incerteza no v1
142                do iv = 1,iVels(1),1
143
144                   mseed = AI*mseed+BI
145                   if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
146
147                   if (mseed .lt. iEta) then
```

```
148                         iMoves(1) = iMoves(1)-1
149
150                         mseed = AI*mseed+BI
151                         if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
152
153                         if(mseed .lt. MI) then
154                            iMoves(2) = iMoves(2)+1
155                         else
156                            iMoves(3) = iMoves(3)+1
157                         end if
158                      end if
159                   end do
160
161                   !!Reazilando incerteza no v2
162                   do iv = 1,iVels(2),1
163
164                      mseed = AI*mseed+BI
165                      if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
166
167                      if (mseed .lt. iEta) then
168                         iMoves(2) = iMoves(2)-1
169
170                         mseed = AI*mseed+BI
171                         if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
172
173                         if(mseed .lt. MI) then
174                            iMoves(3) = iMoves(3)+1
175                         else
176                            iMoves(1) = iMoves(1)+1
177                         end if
```

```
178                     end if
179                 end do
180
181                 !!Reazilando incerteza no v3
182                 do iv = 1,iVels(3),1
183
184                     mseed = AI*mseed+BI
185                     if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
186
187                     if (mseed .lt. iEta) then
188                         iMoves(3) = iMoves(3)-1
189
190                         mseed = AI*mseed+BI
191                         if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
192
193                         if(mseed .lt. MI) then
194                             iMoves(1) = iMoves(1)+1
195                         else
196                             iMoves(2) = iMoves(2)+1
197                         end if
198                     end if
199                 end do
200
201                 iVels = iVels+iMoves
202
203                 !Determinando a direcao do passo
204                 select case(matMaximo(iVels(1),iVels(2),iVels(3))
                        )
205                 case(1_i16)
206                     iv = 1
```

```
207                 case(2_i16)
208                    iv = 2
209                 case(4_i16)
210                    iv = 3
211                 case(3_i16)
212                    nseed = AI*nseed+BI
213                    if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
214
215                    iv = 1
216                    if (nseed .lt. MI) iv = 2
217
218                 case(5_i16)
219                    nseed = AI*nseed+BI
220                    if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
221
222                    iv = 1
223                    if (nseed .lt. MI) iv = 3
224
225                 case(6_i16)
226                    nseed = AI*nseed+BI
227                    if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
228
229                    iv = 2
230                    if (nseed .lt. MI) iv = 3
231
232                 case(7_i16)
233                    nseed = AI*nseed+BI
234                    if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
235
236                    if(nseed .lt. 715827883) then
```

```
237                     iv = 1
238                  else if (nseed .lt. 1431655765) then
239                     iv = 2
240                  else
241                     iv = 3
242                  end if
243
244               case default
245                  print*, 'ERROR #03: Existe um erro na
                        velocidade.'
246                  print*, ivels
247                  call exit ( 1 )
248               end select
249
250
251               !Executando o passo e salvando a configuracao
252               select case (iv)
253               case(1)
254                  iSitio = listaViz(iPos,5)
255                  if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
256                     listaPos(iPart) = iSitio
257                     listaVeloc(iPos) = 0
258                     listaVeloc(iSitio) = 1
259                  else
260                     listaVeloc(iPos) = 1
261                  end if
262               case(2)
263                  iSitio = listaViz(iPos,6)
264                  if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
265                     listaPos(iPart) = iSitio
```

```
266                     listaVeloc(iPos) = 0
267                     listaVeloc(iSitio) = 2
268                  else
269                     listaVeloc(iPos) = 2
270                  end if
271               case(3)
272                  iSitio = listaViz(iPos,1)
273                  if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
274                     listaPos(iPart) = iSitio
275                     listaVeloc(iPos) = 0
276                     listaVeloc(iSitio) = 3
277                  else
278                     listaVeloc(iPos) = 3
279                  end if
280               case default
281                  print*, 'ERROR #04: Problema com a velocidade
                        na dinamica.'
282                  print*, iv
283                  call exit ( 1 )
284               end select
285            end do
286         end do
287      end if
288
289      !# Efetuando os passos de amostragem
290
291      MudanVel = 0
292      do iPart = 1,nPart
293         iv = listaVeloc(listaPos(iPart))
294         MudanVel(iv) = MudanVel(iv)+1
```

```
295         end do
296
297         nPartEachVel(nPassCicle,:) = MudanVel
298
299         do iCicle = 1,nCicle,1
300
301            nPartEachVel(0,:) = nPartEachVel(nPassCicle,:)
302
303            do iPass = 1, nPassCicle
304
305               !call stepMCAct
306
307               !MC que mede as grandezas: iVelAct e iPartAct
308               iContVelsAct = 0
309               iPartAct = 0
310               correnteStep = 0.0_dp
311               MudanVel = 0_i64
312
313               do iPassMC = 1,nPart
314
315                  iVels = 0
316
317                  !Sorteando uma particula e verificando a
                        velocidade da sua vizinahnca
318                  lseed = AI*lseed+BI
319                  if (lseed .le. 0) lseed = (lseed+MI)+MI
320                  ran = rSeed*lseed
321                  iPart = int(ran*nPart)+1
322                  iPos = listaPos(iPart)
323
```

```
324                 !! Para manter atualizada o numero de particulas
                       em cada veloccidade
325                 iv = listaVeloc(iPos)
326                 MudanVel(iv) = MudanVel(iv)-1_i64
327
328                 do iSitio = 1,19
329                    iv = listaVeloc(listaAllViz(iPos,iSitio))
330                    if (iv .gt. 0) then
331                       iVels(iv) = iVels(iv)+1
332                    end if
333                 end do
334
335                 !Realizando a incerteza nas contagens dos
                       vizinhos
336                 iMoves = 0
337
338                 !!Reazilando incerteza no v1
339                 do iv = 1,iVels(1),1
340
341                    mseed = AI*mseed+BI
342                    if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
343
344                    if (mseed .lt. iEta) then
345                       iMoves(1) = iMoves(1)-1
346
347                       mseed = AI*mseed+BI
348                       if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
349
350                       if(mseed .lt. MI) then
351                          iMoves(2) = iMoves(2)+1
```

```
352                         else
353                             iMoves(3) = iMoves(3)+1
354                         end if
355                     end if
356                 end do
357
358                 !!Reazilando incerteza no v2
359                 do iv = 1,iVels(2),1
360
361                     mseed = AI*mseed+BI
362                     if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
363
364                     if (mseed .lt. iEta) then
365                         iMoves(2) = iMoves(2)-1
366
367                         mseed = AI*mseed+BI
368                         if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
369
370                         if(mseed .lt. MI) then
371                             iMoves(3) = iMoves(3)+1
372                         else
373                             iMoves(1) = iMoves(1)+1
374                         end if
375                     end if
376                 end do
377
378                 !!Reazilando incerteza no v3
379                 do iv = 1,iVels(3),1
380
381                     mseed = AI*mseed+BI
```

```
382                     if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
383
384                     if (mseed .lt. iEta) then
385                        iMoves(3) = iMoves(3)-1
386
387                        mseed = AI*mseed+BI
388                        if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
389
390                        if(mseed .lt. MI) then
391                           iMoves(1) = iMoves(1)+1
392                        else
393                           iMoves(2) = iMoves(2)+1
394                        end if
395                     end if
396                  end do
397
398                  iVels = iVels+iMoves
399
400                  !Determinando a direcao do passo
401                  select case(matMaximo(iVels(1),iVels(2),iVels(3))
                        )
402                  case(1_i16)
403                     iv = 1
404                  case(2_i16)
405                     iv = 2
406                  case(4_i16)
407                     iv = 3
408                  case(3_i16)
409                     nseed = AI*nseed+BI
410                     if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
```

```
411
412                     iv = 1
413                     if (nseed .lt. MI) iv = 2
414
415                  case(5_i16)
416                     nseed = AI*nseed+BI
417                     if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
418
419                     iv = 1
420                     if (nseed .lt. MI) iv = 3
421
422                  case(6_i16)
423                     nseed = AI*nseed+BI
424                     if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
425
426                     iv = 2
427                     if (nseed .lt. MI) iv = 3
428
429                  case(7_i16)
430                     nseed = AI*nseed+BI
431                     if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
432
433                     if(nseed .lt. 715827883) then
434                        iv = 1
435                     else if (nseed .lt. 1431655765) then
436                        iv = 2
437                     else
438                        iv = 3
439                     end if
440
```

```
441                 case default
442                    print*, 'ERROR #03: Existe um erro na
                          velocidade.'
443                    print*, ivels
444                    call exit ( 1 )
445                 end select
446
447
448                 !Executando o passo e salvando a configuracao
449                 select case (iv)
450                 case(1)
451                    iSitio = listaViz(iPos,5)
452                    if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
453                       listaPos(iPart) = iSitio
454                       listaVeloc(iPos) = 0
455                       listaVeloc(iSitio) = 1
456                       iPartAct = iPartAct+1
457                       iContVelsAct(1) = iContVelsAct(1)+1
458                       correnteStep = correnteStep+v1
459                       MudanVel(1) = MudanVel(1)+1_i64
460                    else
461                       listaVeloc(iPos) = 1
462                       MudanVel(1) = MudanVel(1)+1_i64
463                    end if
464                 case(2)
465                    iSitio = listaViz(iPos,6)
466                    if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
467                       listaPos(iPart) = iSitio
468                       listaVeloc(iPos) = 0
469                       listaVeloc(iSitio) = 2
```

```
470                     iPartAct = iPartAct+1
471                     iContVelsAct(2) = iContVelsAct(2)+1
472                     correnteStep = correnteStep+v2
473                     MudanVel(2) = MudanVel(2)+1_i64
474                  else
475                     listaVeloc(iPos) = 2
476                     MudanVel(2) = MudanVel(2)+1_i64
477                  end if
478               case(3)
479                  iSitio = listaViz(iPos,1)
480                  if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
481                     listaPos(iPart) = iSitio
482                     listaVeloc(iPos) = 0
483                     listaVeloc(iSitio) = 3
484                     iPartAct = iPartAct+1
485                     iContVelsAct(2) = iContVelsAct(2)+1
486                     correnteStep = correnteStep+v3
487                     MudanVel(3) = MudanVel(3)+1_i64
488                  else
489                     listaVeloc(iPos) = 3
490                     MudanVel(3) = MudanVel(3)+1_i64
491                  end if
492               case default
493                  print*, 'ERROR #04: Problema com a velocidade
                        na dinamica.'
494                  print*, iv
495                  call exit ( 1 )
496               end select
497            end do
498
```

```
499             if((mod(iPass,997).eq.0) .and. (mod(iPartAct,7).eq
                   .0)) then
500                call girarSeeds
501             end if
502
503             !## Calculando os parametros tipo parametro de ordem
504             iContVels = nPartEachVel(iPass-1,:)+MudanVel
505             nPartEachVel(iPass,:) = iContVels
506
507             phi(iPass) = rnPart*dsqrt(1.0d00*(iContVels(1)**2+
                   iContVels(2)**2+iContVels(3)**2-iContVels(1)*
                   iContVels(2)&
508             &-iContVels(1)*iContVels(3)-iContVels(2)*iContVels
                   (3)))
509
510             phiAct(iPass) = (1.00d0/iPartAct)*dsqrt(1.0d00*(
                   iContVelsAct(1)**2+iContVelsAct(2)**2+iContVelsAct
                   (3)**2&
511             &-iContVelsAct(1)*iContVelsAct(2)-iContVelsAct(1)*
                   iContVelsAct(3)-iContVelsAct(2)*iContVelsAct(3)))
512
513             iContVelsIna = iContVels-iContVelsAct
514             phiIna(iPass) = (1.00d0/(nPart-iPartAct))*dsqrt(1.0
                   d00*(iContVelsIna(1)**2+iContVelsIna(2)**2+
                   iContVelsIna(3)**2&
515             &-iContVelsIna(1)*iContVelsIna(2)-iContVelsIna(1)*
                   iContVelsIna(3)-iContVelsIna(2)*iContVelsIna(3)))
516
517             fracActPart(iPass) = rnPart*iPartAct
518
```

```
519               ! !## Calcular os parametros M's
520               ! iv = 0
521               ! do iPart = 1,nSitRegMs
522               !    if (listaVeloc(regM(iPart,1)) .gt. 0) then
523               !       iv = iv+1
524               !    end if
525               ! end do
526               ! M(iPass,1) = rnSitRegMs*iv-den
527               
528               ! iv = 0
529               ! do iPart = 1,nSitRegMs
530               !    if (listaVeloc(regM(iPart,2)) .gt. 0) then
531               !       iv = iv+1
532               !    end if
533               ! end do
534               ! M(iPass,2) = rnSitRegMs*iv-den
535               
536               ! iv = 0
537               ! do iPart = 1,nSitRegMs
538               !    if (listaVeloc(regM(iPart,3)) .gt. 0) then
539               !       iv = iv+1
540               !    end if
541               ! end do
542               ! M(iPass,3) = rnSitRegMs*iv-den
543               
544               ! iv = 0
545               ! do iPart = 1,nSitRegMs
546               !    if (listaVeloc(regM(iPart,4)) .gt. 0) then
547               !       iv = iv+1
548               !    end if
```

```
549             ! end do
550             ! M(iPass,4) = rnSitRegMs*iv-den
551
552             !## Calculando a corrente
553             corrente(iPass,:) = rnPart*correnteStep
554          end do
555
556          !##Salvando os resultados nos arquivos
557          call openFiles()
558          iPass0 =tempoInit+nPassCorte+(iCicle-1)*nPassCicle
559          do iPass = 1,nPassCicle,dPhi
560             iPass1 = iPass0+iPass
561             write( 1 ) iPass1
562             write( 2 ) iPass1
563             write( 3 ) iPass1
564             write( 4 ) iPass1
565             ! write( 5 ) iPass1
566             ! write( 9 ) iPass1
567             ! write( 7 ) iPass1
568             ! write( 8 ) iPass1
569             write( 10 ) iPass1
570             write( 11 ) iPass1
571             write( 1 ) phi(iPass)
572             write( 2 ) phiAct(iPass)
573             write( 3 ) phiIna(iPass)
574             write( 4 ) fracActPart(iPass)
575             ! write( 9 ) M(iPass,2)
576             ! write( 5 ) M(iPass,1)
577             ! write( 7 ) M(iPass,3)
578             ! write( 8 ) M(iPass,4)
```

```
579             write( 10 ) corrente(iPass,1)
580             write( 10 ) corrente(iPass,2)
581             write( 11 ) rnPart*nPartEachVel(iPass,1)
582             write( 11 ) rnPart*nPartEachVel(iPass,2)
583             write( 11 ) rnPart*nPartEachVel(iPass,3)
584          end do
585
586          !##Salvando o estado atual das sementes
587          write(50,*) kseed, lseed, mseed, nseed
588
589          call closeFiles()
590
591        if(fotoCicle) call saveConf(iCicle)
592
593       end do
594
595       do iPass = 1,nModCiclePass,1
596
597          !MC que mede as grandezas: iVelAct e iPartAct
598          iContVelsAct = 0
599          iPartAct = 0
600          corrente Step = 0.0_dp
601          MudanVel = 0_i64
602
603          do iPassMC = 1,nPart
604
605             iVels = 0
606
607             !Sorteando uma particula e verificando a velocidade
                   da sua vizinahnca
```

```
608             lseed = AI*lseed+BI
609             if (lseed .le. 0) lseed = (lseed+MI)+MI
610             ran = rSeed*lseed
611             iPart = int(ran*nPart)+1
612             iPos = listaPos(iPart)
613
614             !! Para manter atualizada o numero de particulas em
                   cada veloccidade
615             iv = listaVeloc(iPos)
616             MudanVel(iv) = MudanVel(iv)-1_i64
617
618             do iSitio = 1,19
619                iv = listaVeloc(listaAllViz(iPos,iSitio))
620                if (iv .gt. 0) then
621                   iVels(iv) = iVels(iv)+1
622                end if
623             end do
624
625             !Realizando a incerteza nas contagens dos vizinhos
626             iMoves = 0
627
628             !!Reazilando incerteza no v1
629             do iv = 1,iVels(1),1
630
631                mseed = AI*mseed+BI
632                if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
633
634                if (mseed .lt. iEta) then
635                   iMoves(1) = iMoves(1)-1
636
```

```
637                     mseed = AI*mseed+BI
638                     if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
639
640                     if(mseed .lt. MI) then
641                        iMoves(2) = iMoves(2)+1
642                     else
643                        iMoves(3) = iMoves(3)+1
644                     end if
645                  end if
646               end do
647
648               !!Reazilando incerteza no v2
649               do iv = 1,iVels(2),1
650
651                  mseed = AI*mseed+BI
652                  if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
653
654                  if (mseed .lt. iEta) then
655                     iMoves(2) = iMoves(2)-1
656
657                     mseed = AI*mseed+BI
658                     if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
659
660                     if(mseed .lt. MI) then
661                        iMoves(3) = iMoves(3)+1
662                     else
663                        iMoves(1) = iMoves(1)+1
664                     end if
665                  end if
666               end do
```

```
667
668             !!Reazilando incerteza no v3
669             do iv = 1,iVels(3),1
670
671                mseed = AI*mseed+BI
672                if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
673
674                if (mseed .lt. iEta) then
675                   iMoves(3) = iMoves(3)-1
676
677                   mseed = AI*mseed+BI
678                   if (mseed .le. 0) mseed = (mseed+MI)+MI
679
680                   if(mseed .lt. MI) then
681                      iMoves(1) = iMoves(1)+1
682                   else
683                      iMoves(2) = iMoves(2)+1
684                   end if
685                end if
686             end do
687
688             iVels = iVels+iMoves
689
690             !Determinando a direcao do passo
691             select case(matMaximo(iVels(1),iVels(2),iVels(3)))
692             case(1_i16)
693                iv = 1
694             case(2_i16)
695                iv = 2
696             case(4_i16)
```

```
697                 iv = 3
698              case(3_i16)
699                 nseed = AI*nseed+BI
700                 if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
701
702                 iv = 1
703                 if (nseed .lt. MI) iv = 2
704
705              case(5_i16)
706                 nseed = AI*nseed+BI
707                 if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
708
709                 iv = 1
710                 if (nseed .lt. MI) iv = 3
711
712              case(6_i16)
713                 nseed = AI*nseed+BI
714                 if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
715
716                 iv = 2
717                 if (nseed .lt. MI) iv = 3
718
719              case(7_i16)
720                 nseed = AI*nseed+BI
721                 if(nseed .le. 0) nseed = (nseed+MI)+MI
722
723                 if(nseed .lt. 715827883) then
724                    iv = 1
725                 else if (nseed .lt. 1431655765) then
726                    iv = 2
```

```
727                 else
728                     iv = 3
729                 end if
730
731             case default
732                 print*, 'ERROR #03: Existe um erro na velocidade.
                        '
733                 print*, ivels
734                 call exit ( 1 )
735             end select
736
737
738             !Executando o passo e salvando a configuracao
739             select case (iv)
740             case(1)
741                 iSitio = listaViz(iPos,5)
742                 if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
743                     listaPos(iPart) = iSitio
744                     listaVeloc(iPos) = 0
745                     listaVeloc(iSitio) = 1
746                     iPartAct = iPartAct+1
747                     iContVelsAct(1) = iContVelsAct(1)+1
748                     correnteStep = correnteStep+v1
749                     MudanVel(1) = MudanVel(1)+1_i64
750                 else
751                     listaVeloc(iPos) = 1
752                     MudanVel(1) = MudanVel(1)+1_i64
753                 end if
754             case(2)
755                 iSitio = listaViz(iPos,6)
```

```
756                 if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
757                     listaPos(iPart) = iSitio
758                     listaVeloc(iPos) = 0
759                     listaVeloc(iSitio) = 2
760                     iPartAct = iPartAct+1
761                     iContVelsAct(2) = iContVelsAct(2)+1
762                     correnteStep = correnteStep+v2
763                     MudanVel(2) = MudanVel(2)+1_i64
764                 else
765                     MudanVel(2) = MudanVel(2)+1_i64
766                     listaVeloc(iPos) = 2
767                 end if
768             case(3)
769                 iSitio = listaViz(iPos,1)
770                 if(listaVeloc(iSitio) .eq. 0) then
771                     listaPos(iPart) = iSitio
772                     listaVeloc(iPos) = 0
773                     listaVeloc(iSitio) = 3
774                     iPartAct = iPartAct+1
775                     iContVelsAct(2) = iContVelsAct(2)+1
776                     correnteStep = correnteStep+v3
777                     MudanVel(3) = MudanVel(3)+1_i64
778                 else
779                     MudanVel(3) = MudanVel(3)+1_i64
780                     listaVeloc(iPos) = 3
781                 end if
782             case default
783                 print*, 'ERROR #04: Problema com a velocidade na
                        dinamica.'
784                 print*, iv
```

```
785                call exit ( 1 )
786             end select
787          end do
788
789          if((mod(iPass,997).eq.0) .and. (mod(iPartAct,7).eq.0))
                then
790             call girarSeeds
791          end if
792
793          !## Calculando os parametros tipo parametro de ordem
794          iContVels = nPartEachVel(iPass-1,:)+MudanVel
795          nPartEachVel(iPass,:) = iContVels
796
797          phi(iPass) = rnPart*dsqrt(1.0d00*(iContVels(1)**2+
                iContVels(2)**2+iContVels(3)**2-iContVels(1)*
                iContVels(2)&
798          &-iContVels(1)*iContVels(3)-iContVels(2)*iContVels(3)))
799
800          phiAct(iPass) = (1.00d0/iPartAct)*dsqrt(1.0d00*(
                iContVelsAct(1)**2+iContVelsAct(2)**2+iContVelsAct(3)
                **2&
801          &-iContVelsAct(1)*iContVelsAct(2)-iContVelsAct(1)*
                iContVelsAct(3)-iContVelsAct(2)*iContVelsAct(3)))
802
803          iContVelsIna = iContVels-iContVelsAct
804          phiIna(iPass) = (1.00d0/(nPart-iPartAct))*dsqrt(1.0d00
                *(iContVelsIna(1)**2+iContVelsIna(2)**2+iContVelsIna
                (3)**2&
805          &-iContVelsIna(1)*iContVelsIna(2)-iContVelsIna(1)*
                iContVelsIna(3)-iContVelsIna(2)*iContVelsIna(3)))
```

```
806
807           fracActPart(iPass) = rnPart*iPartAct
808
809           ! !## Calcular os parametros M's
810           ! iv = 0
811           ! do iPart = 1,nSitRegMs
812           !    if (listaVeloc(regM(iPart,1)) .gt. 0) then
813           !       iv = iv+1
814           !    end if
815           ! end do
816           ! M(iPass,1) = rnSitRegMs*iv-den
817
818           ! iv = 0
819           ! do iPart = 1,nSitRegMs
820           !    if (listaVeloc(regM(iPart,2)) .gt. 0) then
821           !       iv = iv+1
822           !    end if
823           ! end do
824           ! M(iPass,2) = rnSitRegMs*iv-den
825
826           ! iv = 0
827           ! do iPart = 1,nSitRegMs
828           !    if (listaVeloc(regM(iPart,3)) .gt. 0) then
829           !       iv = iv+1
830           !    end if
831           ! end do
832           ! M(iPass,3) = rnSitRegMs*iv-den
833
834           ! iv = 0
835           ! do iPart = 1,nSitRegMs
```

```
836          !     if (listaVeloc(regM(iPart,4)) .gt. 0) then
837          !        iv = iv+1
838          !     end if
839          ! end do
840          ! M(iPass,4) = rnSitRegMs*iv-den
841
842          !## Calculando a corrente
843          corrente(iPass,:) = rnPart*correnteStep
844
845       end do
846
847       call openFiles
848       !##Salvando os resultados nos arquivos
849       iPass0 = tempoInit+nPassCorte+nCicle*nPassCicle
850       do iPass = 1,nModCiclePass,dPhi
851          iPass1 = iPass0+iPass
852          write( 1 ) iPass1
853          write( 2 ) iPass1
854          write( 3 ) iPass1
855          write( 4 ) iPass1
856          ! write( 5 ) iPass1
857          ! write( 9 ) iPass1
858          ! write( 7 ) iPass1
859          ! write( 8 ) iPass1
860          write ( 10 ) iPass1
861          write ( 11 ) iPass1
862          write( 1 ) phi(iPass)
863          write( 2 ) phiAct(iPass)
864          write( 3 ) phiIna(iPass)
865          write( 4 ) fracActPart(iPass)
```

```
866             ! write( 9 ) M(iPass,2)
867             ! write( 5 ) M(iPass,1)
868             ! write( 7 ) M(iPass,3)
869             ! write( 8 ) M(iPass,4)
870             write ( 10 ) corrente(iPass,1)
871             write ( 10 ) corrente(iPass,2)
872             write( 11 ) rnPart*nPartEachVel(iPass,1)
873             write( 11 ) rnPart*nPartEachVel(iPass,2)
874             write( 11 ) rnPart*nPartEachVel(iPass,3)
875         end do
876
877         !##Salvando o estado atual das sementes
878         write(50,*) kseed, lseed, mseed, nseed
879
880         call closeFiles
881
882         !#Salvando a ultima configuracao
883         call saveConf(-1_i64) !Uso -1 para indicar que eh a ultima
                conf
884
885         contains
886
887         subroutine setMatMaximo()
888             implicit none
889
890             integer ( i32 ):: n1,n2,n3,n2mx,n3mx,imax
891             integer ( i16 ):: iTemp
892
893             matMaximo = 0
894
```

```
895           do n1 = 0, 19
896              n2mx = 19-n1
897              do n2 = 0,n2mx
898                 n3mx = n2mx-n2
899                 do n3 = 0,n3mx
900                    iTemp = 0_i16
901                    imax = (n1+n2+iabs(n1-n2))/2
902                    imax = (imax+n3+iabs(imax-n3))/2
903
904                    if(n1 .eq. imax) iTemp = 1_i16
905                    if(n2 .eq. imax) iTemp = iTemp+2_i16
906                    if(n3 .eq. imax) iTemp = iTemp+4_i16
907
908                    matMaximo(n1,n2,n3) = iTemp
909
910                 end do
911              end do
912           end do
913
914        end subroutine setMatMaximo
915
916        ! subroutine setRegionsM()
917        !    implicit none
918
919        !    integer ( i64 ):: iy, ix, iSit
920
921        !    !#reg_M1 (vertical)
922        !    do iy = 1,ll
923        !       do ix = 1,9
924        !          iPos = (iy-1)+ix
```

```
925         !           iSit = (iy-1)*ll+l-4+ix
926         !           regM(iPos,1) = iSit
927         !        end do
928         !     end do
929
930         !     !#reg_M2 (diagonal secundaria)
931         !     regM(1:9,2) = [1_i64, 2_i64, 3_i64, 4_i64, 5_i64, ll
            -3, ll-2, ll-1, ll]
932         !     regM(10:18,2) = [ll+1, ll+2, ll+3, ll+4, ll+5, ll+6,
            2*ll-2, 2*ll-1, 2*ll]
933         !     regM(19:27,2) = [2*ll+1, 2*ll+2, 2*ll+3, 2*ll+4, 2*ll
            +5, 2*ll+6, 2*ll+7, 3*ll-1, 3*ll]
934         !     regM(28:36,2) = [3*ll+1, 3*ll+2, 3*ll+3, 3*ll+4, 3*ll
            +5, 3*ll+6, 3*ll+7, 3*ll+8, 4*ll]
935         !     do iy = 5,ll-4
936         !        do ix = 1,9
937         !           iPos = (iy-1)*9+ix
938         !           iSit = (iy-1)*ll+iy-5+ix
939         !           regM(iPos,2) = iSit
940         !        end do
941         !     end do
942         !     regM(9*(ll-4)+1:9*(ll-3),2) = [ll2-4*ll+1, ll2-3*ll
            -7, ll2-3*ll-6, ll2-3*ll-5, ll2-3*ll-4,&
943         !     & ll2-3*ll-3, ll2-3*ll-2, ll2-3*ll-1, ll2-3*ll]
944         !     regM(9*(ll-3)+1:9*(ll-2),2) = [ll2-3*ll+1, ll2-3*ll
            +2, ll2-2*ll-6, ll2-2*ll-5, ll2-2*ll-4,&
945         !     & ll2-2*ll-3, ll2-2*ll-2, ll2-2*ll-1, ll2-2*ll]
946         !     regM(9*(ll-2)+1:9*(ll-1),2) = [ ll2-2*ll+1, ll2-2*ll
            +2, ll2-2*ll+3, ll2-ll-5, ll2-ll-4,&
947         !     & ll2-ll-3, ll2-ll-2, ll2-ll-1, ll2-ll]
```

```
948         !    regM(9*(ll-1)+1:9*ll,2) = [ll2-ll+1, ll2-ll+2, ll2-ll
               +3, ll2-ll+4, ll2-4, ll2-3, ll2-2, ll2-1, ll2]
949
950         !    !#reg_M3 (horizontal)
951         !    do iy=1,9
952         !       do ix=1,ll
953         !          iPos = (iy-1)*ll+ix
954         !          iSit = (l-4+iy)*ll+ix
955         !          regM(iPos,3) = iSit
956         !       end do
957         !    end do
958
959         !    !#regM4 (diagonal principal)
960         !    regM(1:9,4) = [1_i64, 2_i64, 3_i64, 4_i64, ll-4, ll
               -3, ll-2, ll-1, ll]
961         !    regM(10:18,4) = [ll+1, ll+2, ll+3, 2*ll-5, 2*ll-4, 2*
               ll-3 , 2*ll-2 ,2*ll-1, 2*ll]
962         !    regM(19:27,4) = [2*ll+1, 2*ll+2, 3*ll-6, 3*ll-5, 3*ll
               -4, 3*ll-3 , 3*ll-2 ,3*ll-1, 3*ll]
963         !    regM(28:36,4) = [3*ll+1, 4*ll-7, 4*ll-6, 4*ll-5, 4*ll
               -4, 4*ll-3 , 4*ll-2 ,4*ll-1, 4*ll]
964         !    do iy=5,ll-4
965         !       do ix=1,9
966         !          iPos = (iy-1)*9+ix
967         !          iSit = iy*ll-iy-5+ix
968         !          regM(iPos,4) = iSit
969         !       end do
970         !    end do
971         !    regM(9*(ll-4)+1:9*(ll-3),4) = [ll2-4*ll+1, ll2-4*ll
               +2, ll2-4*ll+3, ll2-4*ll+4, ll2-4*ll+5,&
```

```
!     & ll2-4*ll+6, ll2-4*ll+7, ll2-4*ll+8, ll2-3*ll]
!     regM(9*(ll-3)+1:9*(ll-2),4) = [ll2-3*ll+1, ll2-3*ll
   +2, ll2-3*ll+3, ll2-3*ll+4, ll2-3*ll+5,&
!     & ll2-3*ll+6, ll2-3*ll+7, ll2-2*ll-1, ll2-2*ll]
!     regM(9*(ll-2)+1:9*(ll-1),4) = [ll2-2*ll+1, ll2-2*ll
   +2,ll2-2*ll+3, ll2-2*ll+4, ll2-2*ll+5,&
!     & ll2-2*ll+6, ll2-ll-2, ll2-ll-1, ll2-ll]
!     regM(9*(ll-1)+1:9*ll,4) = [ll2-ll+1, ll2-ll+2, ll2-ll
   +3, ll2-ll+4, ll2-ll+5, ll2-3,&
!     &ll2-2, ll2-1, ll2]

! end subroutine setRegionsM

subroutine initSeeds(case)
   ! 0 - Sementes aleatorias, 1 - Carrega preestabelecida
   implicit none

   integer(i32), intent(in):: case

   select case (case)
   case(0)  !Sementes aleatorias - Nao ha nada extra a
      fazer
      call ranSeed(mseed)

      mseed = int(9999*rSeed*mseed)+1

      open(unit=1 , file='seeds1.dat', status = 'old',
         action = 'read')

      do nseed = 1,mseed
```

```
997                read(1,*)
998             end do
999             read(1,*) kseed    !Usar somente na subroutine
                   setConfInit
1000            read(1,*) lseed
1001            read(1,*) mseed
1002            read(1,*) nseed
1003
1004            close (1)
1005         case (1) !Carregar sementes especificas
1006            !Para esta rotina funcionar e necessario que o
                   arquivo 00-saveSeeds_amos_XXX.txt seja adicionado
                   na pasta confInit (eta tbm precisa ser criada
                   manualmente).
1007            open(unit=50, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                   '/eta_'//nameeta//'/confInit/00-saveSeeds_amos_'//
                   nameamos//'.txt',&
1008            & status = 'old', action = 'read')
1009
1010            read(50, *) kseed, lseed, mseed, nseed
1011
1012            close(50)
1013         case default
1014            print*, "ERRO 09: Esta opcao para as sementes atuais
                    nao esta definida."
1015         end select
1016
1017      end subroutine initSeeds
1018
1019      subroutine setRede()
```

```
1020          !Subrotina para configurar inicialmente a rede
1021          implicit none
1022
1023          integer (i64):: ix, iy, iSit
1024
1025          listaVeloc = 0
1026          listaViz = 0
1027
1028          !IMPLEMENTACAO DOS VIZINHOS SEGUNDO A GEMETRIA (REDE
                 TRIANGULAR)
1029          !!Implementando as condicoes de contorno (periodica)
1030          listaViz(1,:) = [ll2-ll+1_i64, ll2-ll+2_i64, ll, 1_i64,
                  2_i64, 2*ll, ll+1_i64]
1031          listaViz(ll,:) = [ll2, ll2-ll+1_i64, ll-1_i64, ll, 1
                 _i64, 2*ll-1_i64, 2*ll]
1032          listaViz(ll2-ll+1,:)= [ll2-2*ll+1_i64, ll2-2*ll+2_i64,
                 ll2, ll2-ll+1, ll2-ll+2_i64, ll, 1_i64]
1033          listaViz(ll2,:) = [ll2-ll, ll2-2*ll+1_i64, ll2-1_i64,
                 ll2, ll2-ll+1_i64, ll-1_i64, ll]
1034
1035          do ix = 2,ll-1
1036             listaViz(ix,:) = [ll2-ll+ix, ll2-ll+ix+1, ix-1, ix,
                    ix+1, ix+ll-1, ix+ll]
1037             iSit = ll2-ll+ix
1038             listaViz(iSit,:) = [iSit-ll, iSit-ll+1, iSit-1, iSit
                    , iSit+1, ix-1, ix]
1039             iSit = (ix-1)*ll+1
1040             listaViz(iSit,:) = [iSit-ll, iSit-ll+1, ix*ll, iSit,
                     iSit+1, (ix+1)*ll, iSit+ll]
1041             iSit = ix*ll
```

```
1042            listaViz(iSit,:) = [iSit-ll, iSit-2*ll+1, iSit-1,
                   iSit, iSit-ll+1, iSit+ll-1, iSit+ll]
1043         end do
1044
1045         !!Regra no bunker
1046         do iy = 2,ll-1
1047            do ix = 2,ll-1
1048               iSit = (iy-1)*ll+ix
1049               listaViz(iSit,:) = [iSit-ll, iSit-ll+1, iSit-1,
                      iSit, iSit+1, iSit+ll-1, iSit+ll]
1050            end do
1051         end do
1052
1053      end subroutine setRede
1054
1055      subroutine setVizinhanca()
1056         implicit none
1057
1058         integer ( i64 ):: iSit
1059
1060         listaAllViz = 0
1061
1062         do iSit = 1,ll2
1063            listaAllViz(iSit,1) = listaViz(listaViz(iSit,1),1)
1064            listaAllViz(iSit,2) = listaViz(listaViz(iSit,1),2)
1065            listaAllViz(iSit,3) = listaViz(listaViz(iSit,2),2)
1066            listaAllViz(iSit,4) = listaViz(listaViz(iSit,1),3)
1067            listaAllViz(iSit,5) = listaViz(listaViz(iSit,1),4)
1068            listaAllViz(iSit,6) = listaViz(listaViz(iSit,2),4)
1069            listaAllViz(iSit,7) = listaViz(listaViz(iSit,2),5)
```

```
1070            listaAllViz(iSit,8) = listaViz(listaViz(iSit,3),3)
1071            listaAllViz(iSit,9) = listaViz(listaViz(iSit,3),4)
1072            listaAllViz(iSit,10) = iSit
1073            listaAllViz(iSit,11) = listaViz(listaViz(iSit,5),4)
1074            listaAllViz(iSit,12) = listaViz(listaViz(iSit,5),5)
1075            listaAllViz(iSit,13) = listaViz(listaViz(iSit,6),3)
1076            listaAllViz(iSit,14) = listaViz(listaViz(iSit,6),4)
1077            listaAllViz(iSit,15) = listaViz(listaViz(iSit,7),4)
1078            listaAllViz(iSit,16) = listaViz(listaViz(iSit,7),5)
1079            listaAllViz(iSit,17) = listaViz(listaViz(iSit,6),6)
1080            listaAllViz(iSit,18) = listaViz(listaViz(iSit,6),7)
1081            listaAllViz(iSit,19) = listaViz(listaViz(iSit,7),7)
1082         end do
1083
1084      end subroutine setVizinhanca
1085
1086      subroutine setConfInit (kind)
1087         implicit none
1088         !Subrotina responsavel por gerar as configuracoes
               iniciais. Antes chamar a subroutine setRede
1089         !!Cod: 0 - Aleatoriamente, 1 - IB, 2 - Banda Chate, 3 -
              All Mobility
1090         !!Dens for All Mobility:
1091         !!       L=016: 0.23507805325987144168962350780533
1092         !!       L=032: 0.24236686390532544378698224852071
1093         !!       L=064: 0.24613905414338080644192055765879
1094         !!       L=128: 0.24805825977683235173886054293025
1095         !!       L=256: 0.24902629109051598022563447822502
1096         !!       L=512: 0.24951243307555026769779892920 88
1097
```

```
1098            integer ( i32 ), intent(in):: kind
1099
1100            integer ( i16 ):: iVel
1101            integer ( i32 ):: iVs !Necessaria para ler uma
                   configuracao previa
1102            integer ( i64 ):: iSit, ix, ixMin, ixMax, iy, iyMin,
                   iyMax, iCont, nLin, nCol
1103            integer ( i64 ), dimension(ll2):: matPos(ll2)
1104
1105            matPos = 0
1106            iVels = 0
1107
1108            select case (kind)
1109            case(0)
1110               iVels = 0
1111               iCont = 1
1112               do iy = 1,ll
1113                  do ix = 1,ll
1114                     iSit = (iy-1)*ll+ix
1115                     matPos(iCont) = iSit
1116                     iCont = iCont+1
1117                  end do
1118               end do
1119
1120               iCont = iCont-1
1121
1122               if (nPart .eq. ll2) then
1123                  do iPart = 1,nPart
1124                     iSit = matPos(iPart)
1125
```

```
1126                    kseed = AI*kseed+BI
1127                    if (kseed .le. 0) kseed = (kseed+MI)+MI
1128                    ran = rSeed*kseed
1129
1130                    iVel = int(3*ran, i16)+1_i16
1131                    listaVeloc(iSit) = iVel
1132                    listaPos(iPart) = iSit
1133                    iVels(iVel) = iVels(iVel)+1
1134                 end do
1135              else
1136                 do iPart = 1,nPart
1137
1138                    kseed = AI*kseed+BI
1139                    if (kseed .le. 0) kseed = (kseed+MI)+MI
1140                    ran = rSeed*kseed
1141
1142                    ix = int((iCont-iPart+1)*ran)+1
1143                    iSit = matPos(ix)
1144                    listaPos(iPart) = iSit
1145
1146                    kseed = AI*kseed+BI
1147                    if (kseed .le. 0) kseed = (kseed+MI)+MI
1148                    ran = rSeed*kseed
1149
1150                    iVel = int(3*ran,i16)+1_i16
1151                    listaVeloc(iSit) = iVel
1152                    iVels(iVel) = iVels(iVel)+1
1153                    matPos(ix) = matPos(iCont-ipart+1)
1154                 end do
1155              end if
```

```
1156
1157              phi(0) = dsqrt(1.0d00*(iVels(1)**2+iVels(2)**2+iVels
                     (3)**2-iVels(1)*iVels(2)-iVels(1)*iVels(3)&
1158              &-iVels(2)*iVels(3)))/(1.0d0*npart)
1159
1160              npartEachVel(0,:) = iVel
1161
1162           case(1)
1163              iCont = 1
1164              nLin = ceiling(1.00d0*nPart/ll,i64)
1165              if (nLin .eq. 1) then
1166                 do ix = 1,ll
1167                    matPos(ix) = l*ll+ix
1168                 end do
1169                 iCont = ll
1170              else if (mod(nLin,2) .eq. 0) then
1171                 nLin = nLin/2
1172                 iyMin = l+2-nLin
1173                 iyMax = l+1+nLin
1174                 do iy = iyMin,iyMax
1175                    do ix = 1,ll
1176                       iSit = (iy-1)*ll+ix
1177                       matPos(iCont) = iSit
1178                       iCont = iCont+1
1179                    end do
1180                 end do
1181              else
1182                 nLin = nLin/2
1183                 iyMin = l+1-nLin
1184                 iyMax = l+1+nLin
```

```
1185                do iy = iyMin,iyMax
1186                   do ix = 1,ll
1187                      iSit = (iy-1)*ll+ix
1188                      matPos(iCont) = iSit
1189                      iCont = iCont+1
1190                   end do
1191                end do
1192             end if
1193
1194             iCont = iCont-1
1195
1196             do iPart = 1,nPart
1197                kseed = AI*kseed+BI
1198                if (kseed .le. 0) kseed = (kseed+MI)+MI
1199                ran = rSeed*kseed
1200
1201                ix = int(( iCont-iPart+1)*ran)+1
1202                iSit = matPos(ix)
1203                listaPos(iPart) = iSit
1204
1205                listaVeloc(iSit) = 1
1206                matPos(ix) = matPos(iCont-ipart+1)
1207
1208             end do
1209
1210             phi(0) = 1.00d0
1211
1212             nPartEachVel(0,1) = nPart
1213
1214          case(2)
```

```
1215              iCont = 1
1216              nCol = ceiling(1.00_i64*nPart/ll, i64)
1217
1218              if (nCol .eq. 1) then
1219                 do iy = 1,ll
1220                    matPos(iy) = l+1+(iy-1)*ll
1221                 end do
1222                 iCont = ll
1223              else if (mod(nCol,2) .eq. 0) then
1224                 nCol = nCol/2
1225                 ixMin = l+2-nCol
1226                 ixMax = l+1+nCol
1227                 do iy = 1,ll
1228                    do ix = ixMin,ixMax
1229                       iSit = (iy-1)*ll+ix
1230                       matPos(iCont) = iSit
1231                       iCont = iCont+1
1232                    end do
1233                 end do
1234              else
1235                 nCol = nCol/2
1236                 ixMin = l+1-nCol
1237                 ixMax = l+1+nCol
1238                 do iy = 1,ll
1239                    do ix = ixMin,ixMax
1240                       iSit = (iy-1)*ll+ix
1241                       matPos(iCont) = iSit
1242                       iCont = iCont+1
1243                    end do
1244                 end do
```

```
1245            end if
1246
1247            iCont = iCont-1
1248
1249            do iPart = 1,nPart
1250
1251               kseed = AI*kseed+BI
1252               if (kseed .le. 0) kseed = (kseed+MI)+MI
1253               ran = rSeed*kseed
1254
1255               ix = int((iCont-iPart+1)*ran)+1
1256               iSit = matPos(ix)
1257               listaPos(iPart) = iSit
1258
1259               listaVeloc(iSit) = 1
1260               matPos(ix) = matPos(iCont-ipart+1)
1261
1262            end do
1263
1264            phi(0) = 1.00d0
1265
1266            nPartEachVel(0,1) = nPart
1267
1268         case(3)
1269            !All viz empty
1270            if (npart .ne. int(0.25*(ll-1)*(ll-1))) then
1271               print*, "ERROR: Para esta configracao a densidade
                       precisa ser igual a 0.25*(2*l)**2/(2*l+1)**2."
1272               call exit(1)
1273            end if
```

```
1274
1275              iVels = 0
1276
1277              iPart=1
1278              do iy = 1,ll-1,2
1279                 do ix = 1,ll-1,2
1280                    iSit = (iy-1)*ll+ix
1281                    listaPos(iPart) = iSit
1282                    listaVeloc(iSit) = 1_i16
1283                    iVels(1) = iVels(1)+1
1284                    iPart = iPart+1
1285                 end do
1286              end do
1287
1288              phi(0) = dsqrt(1.0d00*(iVels(1)**2+iVels(2)**2+iVels
                     (3)**2-iVels(1)*iVels(2)-iVels(1)*iVels(3)&
1289              &-iVels(2)*iVels(3)))/(1.0d0*npart)
1290
1291              nPartEachVel(0,:) = iVels
1292
1293           case(9)
1294              !Eh preciso criar uma pasta com nome confInit com
                     arquivos de nome tipo initXXX.bin
1295              open(unit=1, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                     /eta_'//nameeta//'/confInit/'//'init'//nameamos//'
                     .bin',&
1296              & status = 'old', action = 'read', form = '
                     unformatted', access='stream')
1297
1298              do iPart=1,nPart
```

```
1299                read(1) iCont
1300                read(1) iSit
1301                read(1) iVs
1302                listaVeloc(iSit) = iVs
1303                listaPos(iCont) = iSit
1304             end do
1305
1306             close(1)
1307
1308          case default
1309             print*, 'ERRO #03: Esta configuracao nao definida!'
1310             call exit(2)
1311          end select
1312
1313       end subroutine setConfInit
1314
1315       subroutine girarSeeds()
1316
1317          giroSeeds = lseed
1318          lseed = mseed
1319          mseed = nseed
1320          nseed = giroSeeds
1321
1322       end subroutine girarSeeds
1323
1324       subroutine openFiles()
1325
1326          logical:: exist
1327
```

```
1328            inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
                   nameeta//'/resultados/02-phi_amos_'//nameamos//'.bin'
                   ,&
1329            & exist=exist)
1330            if(exist) then
1331               open(unit=1, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                      /eta_'//nameeta//'/resultados/02-phi_amos_'//
                      nameamos//'.bin',&
1332               & status = 'old', action = 'write', position='append
                      ', form = 'unformatted', access='stream')
1333            else
1334               open(unit=1, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                      /eta_'//nameeta//'/resultados/02-phi_amos_'//
                      nameamos//'.bin',&
1335               & status = 'new', action = 'write', form = '
                      unformatted', access='stream')
1336            end if
1337
1338            inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
                   nameeta//'/resultados/03-phi_act_amos_'//nameamos//'.
                   bin',&
1339            & exist=exist)
1340            if(exist) then
1341               open(unit=2, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                      /eta_'//nameeta//'/resultados/03-phi_act_amos_'//
                      nameamos//'.bin',&
1342               & status = 'old', action = 'write', position='append
                      ', form = 'unformatted', access='stream')
1343            else
```

```
1344            open(unit=2, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                   /eta_'//nameeta//'/resultados/03-phi_act_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
1345            & status = 'new', action = 'write', form = '
                   unformatted', access='stream')
1346          end if
1347
1348          inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
                 nameeta//'/resultados/04-phi_ina_amos_'//nameamos//'.
                 bin',&
1349          & exist=exist)
1350          if(exist) then
1351            open(unit=3, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                   /eta_'//nameeta//'/resultados/04-phi_ina_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
1352            & status = 'old', action = 'write', position='append
                   ', form = 'unformatted', access='stream')
1353          else
1354            open(unit=3, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                   /eta_'//nameeta//'/resultados/04-phi_ina_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
1355            & status = 'new', action = 'write', form = '
                   unformatted', access='stream')
1356          end if
1357
1358          inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
                 nameeta//'/resultados/05-f_act_amos_'//nameamos//'.
                 bin',&
1359          & exist=exist)
1360          if (exist) then
```

```
1361            open(unit=4, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                   /eta_'//nameeta//'/resultados/05-f_act_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
1362            & status = 'old', action = 'write', position='append
                   ', form = 'unformatted', access='stream')
1363         else
1364            open(unit=4, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'
                   /eta_'//nameeta//'/resultados/05-f_act_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
1365            & status = 'new', action = 'write', form = '
                   unformatted', access='stream')
1366         end if
1367
1368         ! !##Abrindo os arquivos onde salvaremos os valores dos
                M's
1369         ! inquire('./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
                nameeta//'/resultados/06-M1_amos_'//nameamos//'.bin
                ',&
1370         !& exist=exist)
1371         ! if(exist) then
1372            ! open(unit=5, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                   //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M1_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
1373            ! & status = 'old', action = 'write', position='
                   append', form = 'unformatted', access='stream')
1374         ! else
1375            ! open(unit=5, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                   //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M1_amos_'//
                   nameamos//'.bin',&
```

```
1376              ! & status = 'new', action = 'write', form = '
                     unformatted', access='stream')
1377           ! end if
1378
1379           ! inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_
                  '//nameeta//'/resultados/06-M2_amos_'//nameamos//'.
                  bin',&
1380           !& exist=exist)
1381           ! if(exist) then
1382              ! open(unit=9, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                     //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M2_amos_'//
                     nameamos//'.bin',&
1383              ! & status = 'old', action = 'write', position='
                     append', form = 'unformatted', access='stream')
1384           ! else
1385              ! open(unit=9, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                     //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M2_amos_'//
                     nameamos//'.bin',&
1386              ! & status = 'new', action = 'write', form = '
                     unformatted', access='stream')
1387           ! end if
1388
1389           ! inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_
                  '//nameeta//'/resultados/06-M3_amos_'//nameamos//'.
                  bin',&
1390           !& exist=exist)
1391           ! if(exist) then
1392              ! open(unit=7, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                     //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M3_amos_'//
                     nameamos//'.bin',&
```

```
1393              ! & status = 'old', action = 'write', position='
                     append', form = 'unformatted', access='stream')
1394           ! else
1395              ! open(unit=7, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                     //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M3_amos_'//
                     nameamos//'.bin',&
1396              ! & status = 'new', action = 'write', form = '
                     unformatted', access='stream')
1397           ! end if
1398
1399           ! inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_
                  '//nameeta//'/resultados/06-M4_amos_'//nameamos//'.
                  bin',&
1400           !& exist=exist)
1401           ! if(exist) then
1402              ! open(unit=8, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                     //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M4_amos_'//
                     nameamos//'.bin',&
1403              ! & status = 'old', action = 'write', form = '
                     unformatted', access='stream')
1404           ! else
1405              ! open(unit=8, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden
                     //'/eta_'//nameeta//'/resultados/06-M4_amos_'//
                     nameamos//'.bin',&
1406              ! & status = 'new', action = 'write', position='
                     append', form = 'unformatted', access='stream')
1407           ! end if
1408
1409           inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
                  nameeta//'/resultados/10-corrente_amos_'//nameamos//'
```

```
            .bin',&
1410        & exist=exist)
1411        if(exist) then
1412           open(unit=10, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                  '/eta_'//nameeta//'/resultados/10-corrente_amos_'
                  //nameamos//'.bin',&
1413           & status = 'old', action = 'write', position='append
                  ', form = 'unformatted', access='stream')
1414        else
1415           open(unit=10, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                  '/eta_'//nameeta//'/resultados/10-corrente_amos_'
                  //nameamos//'.bin',&
1416           & status = 'new', action = 'write', form = '
                  unformatted', access='stream')
1417        end if
1418
1419        inquire(file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/eta_'//
              nameeta//'/resultados/11-frac_veloc_amos_'//nameamos
              //'.bin',&
1420        & exist=exist)
1421        if(exist) then
1422           open(unit=11, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                  '/eta_'//nameeta//'/resultados/11-frac_veloc_amos_
                  '//nameamos//'.bin',&
1423           & status = 'old', action = 'write', position='append
                  ', form = 'unformatted', access='stream')
1424        else
1425           open(unit=11, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                  '/eta_'//nameeta//'/resultados/11-frac_veloc_amos_
                  '//nameamos//'.bin',&
```

```
1426            & status = 'new', action = 'write', form = '
                    unformatted', access='stream')
1427          end if
1428
1429          open(unit=50, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//'/
                 eta_'//nameeta//'/00-saveSeeds_amos_'//nameamos//'.
                 txt',&
1430          & status = 'unknown', action = 'write')
1431
1432       end subroutine openFiles
1433
1434       subroutine closeFiles()
1435          close(1)
1436          close(2)
1437          close(3)
1438          close(4)
1439          ! close(5)
1440          ! close(9)
1441          ! close(7)
1442          ! close(8)
1443          close(10)
1444          close(11)
1445          close(50) !Salvar as seeds atuais
1446       end subroutine closeFiles
1447
1448       subroutine saveConf(seq)
1449          !Use seq=-1 para indicar que e a ultima configuracao
1450          implicit none
1451
1452          integer(i64), intent(in):: seq
```

```
1453            integer(i64):: iPartS, iPosS
1454            character (len=4):: nameSeq
1455
1456            if (seq .ne. -1) then
1457               write(nameSeq, '(I4.4)') seq
1458
1459               open(unit=99, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                      '/eta_'//nameeta//'/resultados/01-conf_amos_'//
                      nameamos//&
1460               &'_foto_'//nameSeq//'.bin', status = 'new', action =
                       'write', form = 'unformatted', access='stream')
1461
1462               do iPartS=1,nPart
1463                  iPosS = listaPos(iPartS)
1464                  write(99) iPartS
1465                  write(99) iPosS
1466                  write(99) int(listaVeloc(iPosS), i32)
1467               end do
1468
1469               close(99)
1470            else
1471               open(unit=99, file='./l_'//namel//'/den_'//nameden//
                      '/eta_'//nameeta//'/resultados/01-conf_amos_'//
                      nameamos//'_last.bin',&
1472               & status = 'new', action = 'write', form = '
                      unformatted', access='stream')
1473
1474               do iPart=1,nPart
1475                  iPos = listaPos(iPart)
1476                  write(99) iPart
```

```
1477                write(99) iPos
1478                write(99) int(listaVeloc(iPos), i32)
1479             end do
1480
1481             close(99)
1482          end if
1483
1484       end subroutine saveConf
1485
1486
1487    end program main
1488
1489    subroutine ranSeed(iseed)
1490       use iso_fortran_env, only: int64
1491       !use IFPORT, ONLY: getpid !Comentar se for usar o gfortran
1492       implicit none
1493       integer ( kind = 4), intent (out):: iseed
1494       integer ( kind = 4 ) :: t
1495       integer ( kind = 4 ) :: dt(8)
1496       integer ( kind = 4 ) :: pid
1497
1498       pid = getpid()
1499
1500       call system_clock ( t )
1501
1502       if (t == 0) then
1503          call date_and_time(values=dt)
1504          t = int((dt(1) - 1970) * 365_int64 * 24 * 60 * 60 *
                  1000 &
1505                + dt(2) * 31_int64 * 24 * 60 * 60 * 1000 &
```

```
1506                + dt(3) * 24_int64 * 60 * 60 * 1000 &
1507                + dt(5) * 60 * 60 * 1000 &
1508                + dt(6) * 60 * 1000 + dt(7) * 1000 &
1509                + dt(8))
1510        end if
1511
1512        t = ieor(t, int(pid, kind(t)))
1513
1514        iseed = lcg ( t )
1515
1516        contains
1517
1518        integer function lcg ( s )
1519           use iso_fortran_env, only: int64
1520           implicit none
1521           integer ( kind = 4 ) :: s
1522
1523           if (s == 0) then
1524              s = 104729
1525           else
1526              s = int(mod(s, 4294967296_int64))
1527           end if
1528           s = int(mod(s * 279470273_int64, 4294967291_int64))
1529           lcg = int(mod(s, int(huge(0), int64)), kind(0))
1530           if (lcg .lt. 0) lcg = -lcg
1531         end function lcg
1532
1533    end subroutine ranSeed
```

# APÊNDICE C – Mapas de configurações para vários $L$

Neste apêndice, colocaremos os mapas de configurações, Fig. 34-37, para $L = 33, 65, 129$ e 257, respectivamente. Vale salientar que esses mapas foram feitos usado a última configuração observada após $10^5$ passos de MC e com uma quantidade variável de amostras, tal qual discutido na Sec. 4.1.

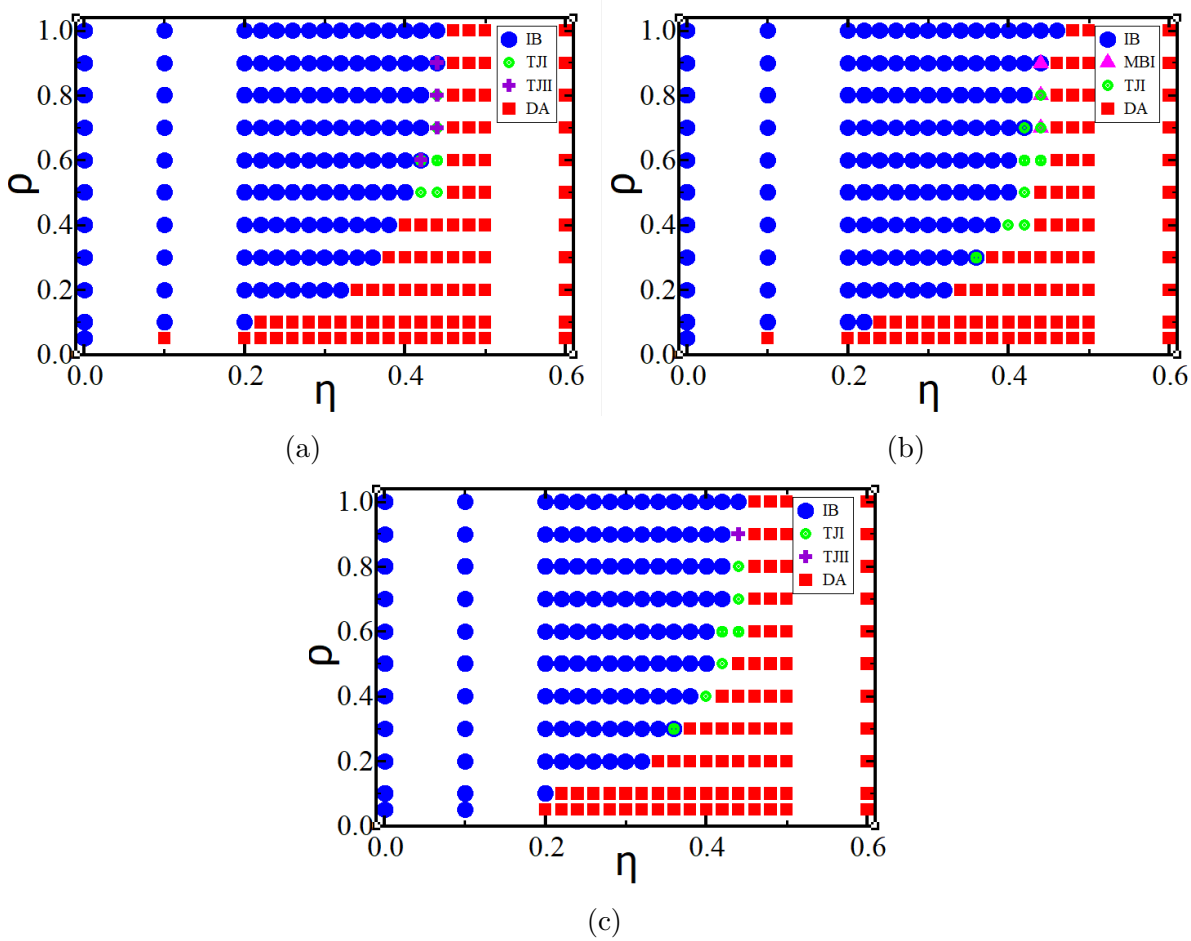



Figura 34 – O mapa mostrando a ocorrência de cada uma das configurações como estado final após $10^5$ passos MC com $L = 33$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Em alguns pontos, mais de um tipo de configuração final surgiu, dessa forma há mais de um símbolo sobre o mesmo ponto, sobretudo no caso AL.

As Figs. 38-39 mostram mapas de configurações mais detalhados para $L = 129$ e 257 usando os $10^7$ passos de MC (longo tempo).

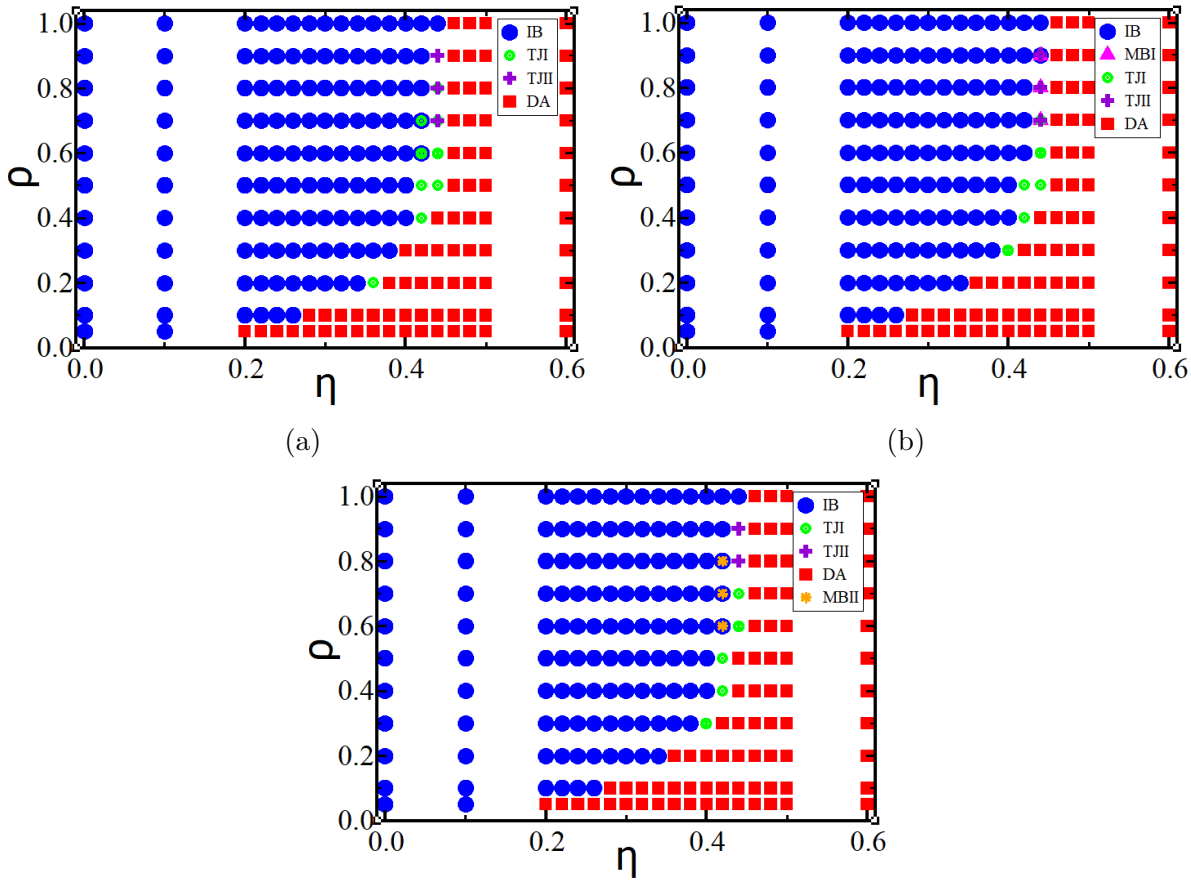



Figura 35 – O mapa mostrando a ocorrência de cada uma das configurações como estado final após $10^5$ passos MC com $L = 65$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Em alguns pontos, mais de um tipo de configuração final surgiu, dessa forma há mais de um símbolo sobre o mesmo ponto, sobretudo no caso AL.

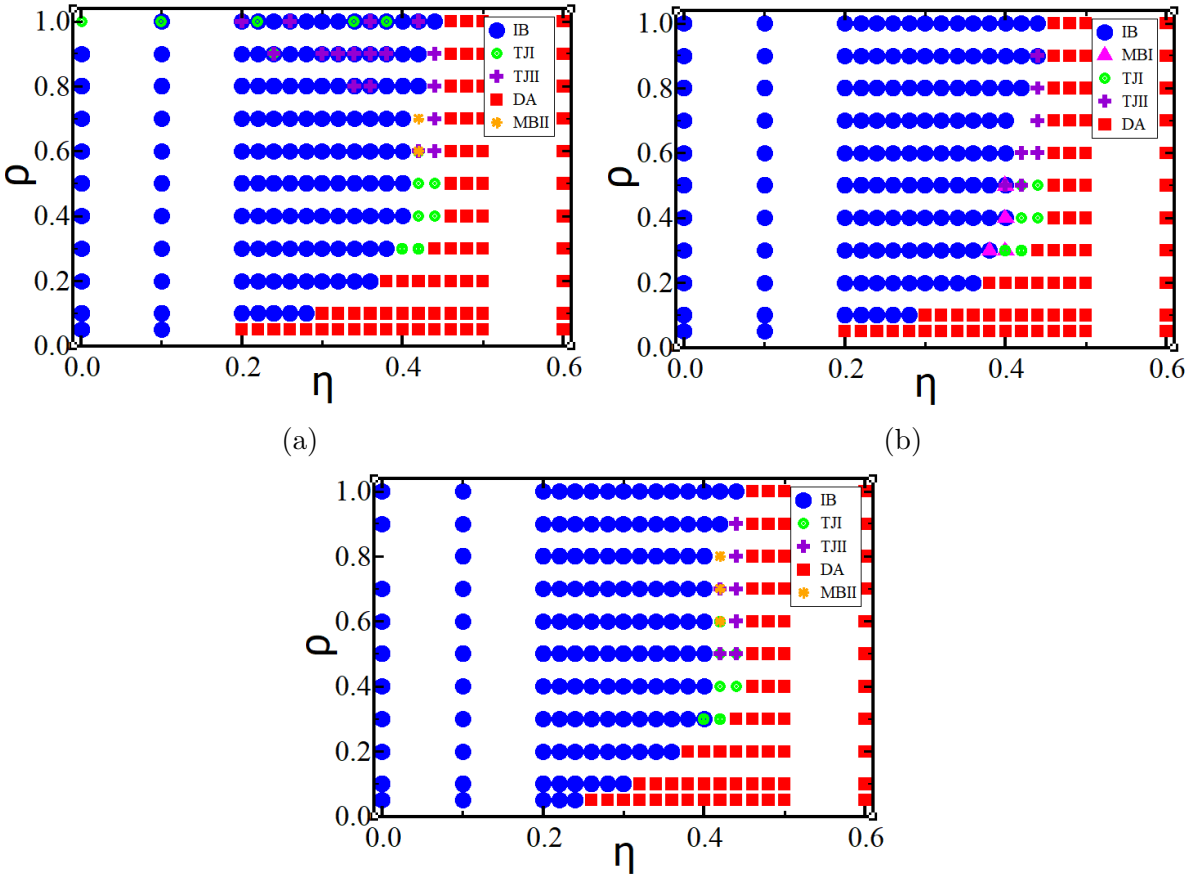



Figura 36 – O mapa mostrando a ocorrência de cada uma das configurações como estado final após $10^5$ passos MC com $L = 129$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB.Em alguns pontos, mais de um tipo de configuração final surgiu, dessa forma há mais de um símbolo sobre o mesmo ponto, sobretudo no caso AL.

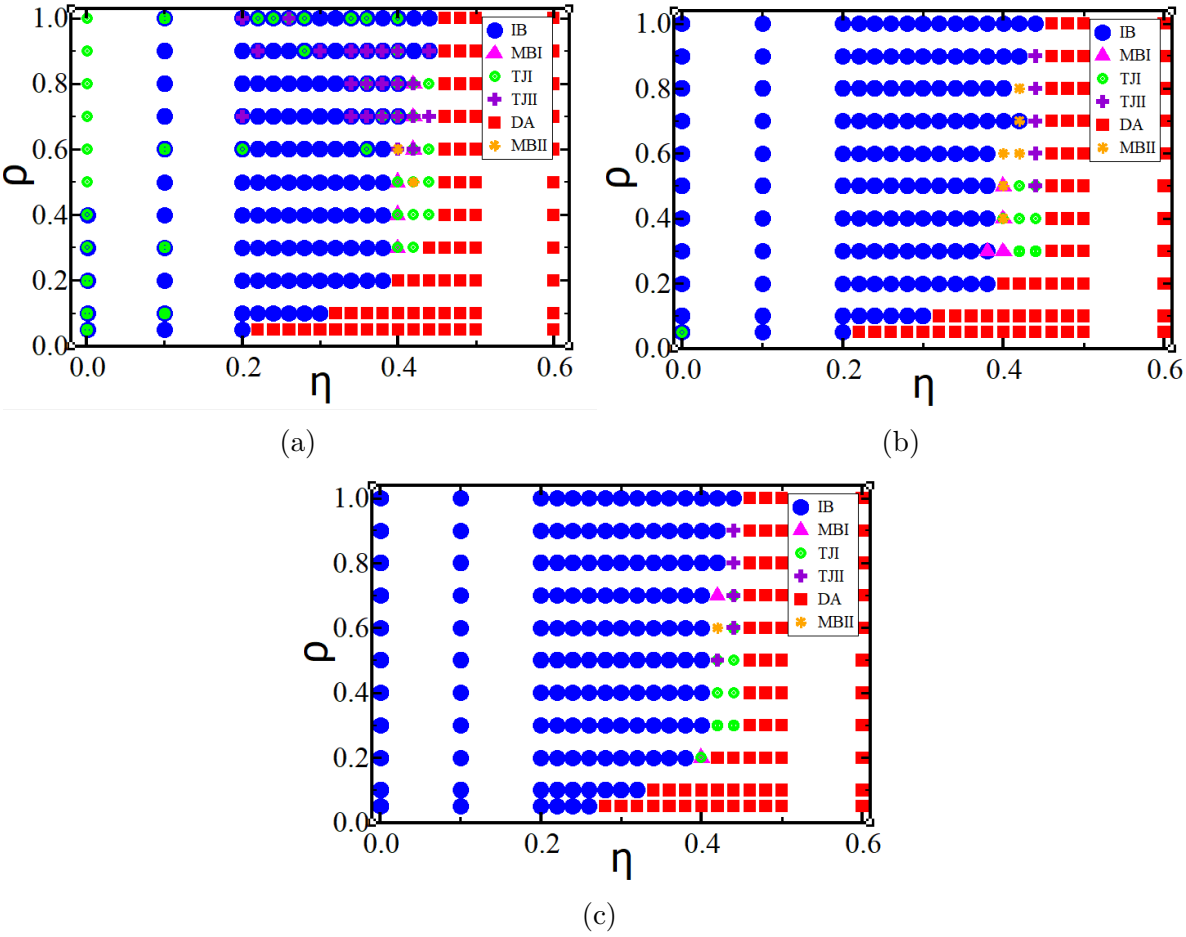



Figura 37 – O mapa mostrando a ocorrência de cada uma das configurações como estado final após $10^5$ passos MC com $L = 257$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Em alguns pontos, mais de um tipo de configuração final surgiu, dessa forma há mais de um símbolo sobre o mesmo ponto, sobretudo no caso AL.

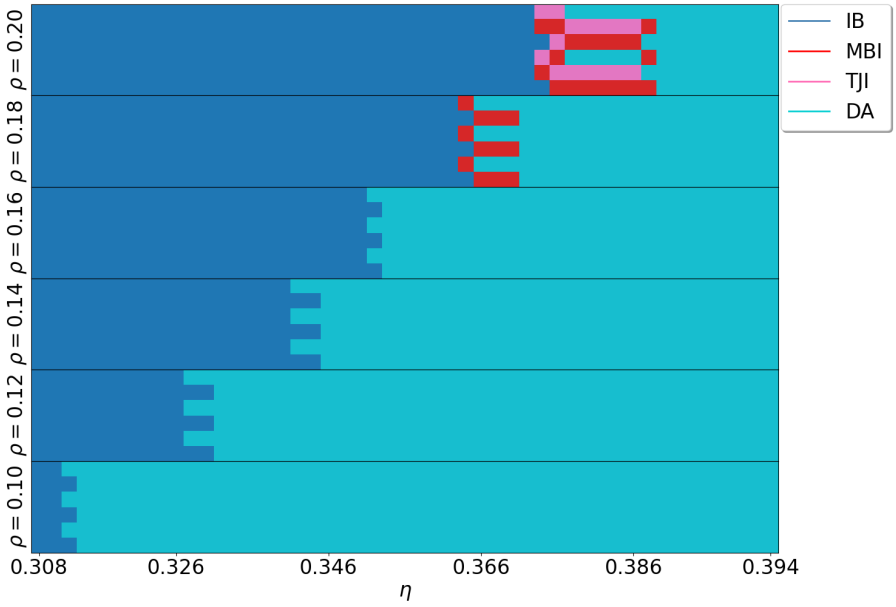



Figura 38 – Mapa de configurações para valores de parâmetros próximos a transição de fase usando $10^7$ passos de MC na simulação, em $L = 129$ e baixa densidade ($0.1 \leq \rho \leq 0.2$). O número de vezes que uma configuração é indicada em um ponto não está relacionado com a frequência que ela ocorre.

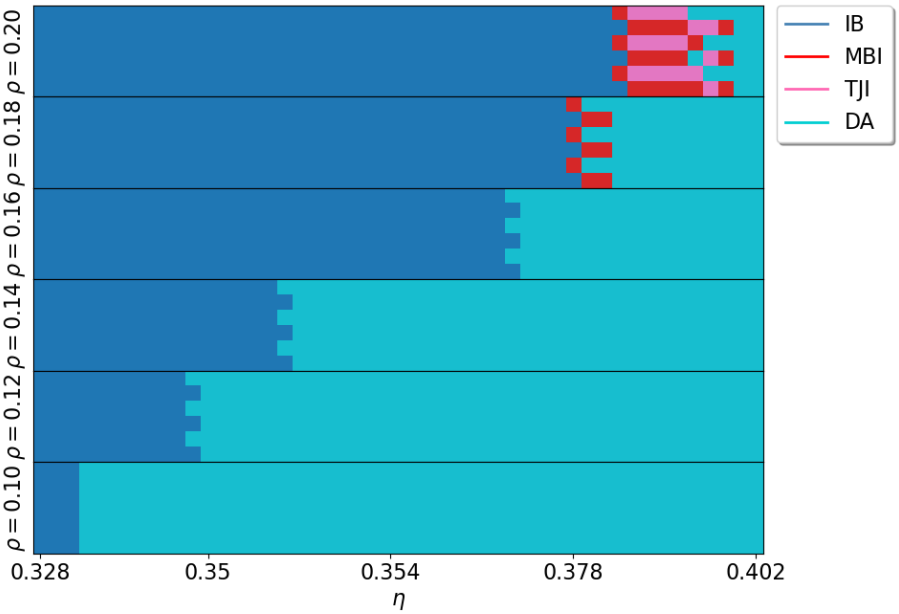



Figura 39 – Mapa de configurações para valores de parâmetros próximos a transição de fase usando $10^7$ passos de MC na simulação, em $L = 257$ e baixa densidade ($0.1 \leq \rho \leq 0.2$). O número de vezes que uma configuração é indicada em um ponto não está relacionado com a frequência que ela ocorre.

# APÊNDICE D – Vídeos de comportamentos típicos

Neste apêndice, colocaremos o acesso a alguns vídeos que mostram a evolução temporal de algumas situações importantes. Esses vídeos estarão disponíveis via YouTube no link `https://www.youtube.com/playlist?list=PLGekL6a8rRdA_JT-0fTTO_pUP1N1hBltj`, último acesso 16/08/2024.

Nas Figs. 40-46 evidenciamos as principais características de cada um dos vídeos (vide as legendas). Para todos o último acesso ocorreu em 18/08/2024. Note que no ambiente Adobe, basta clicar na imagem para abrir o vídeo diretamente no YouTube.

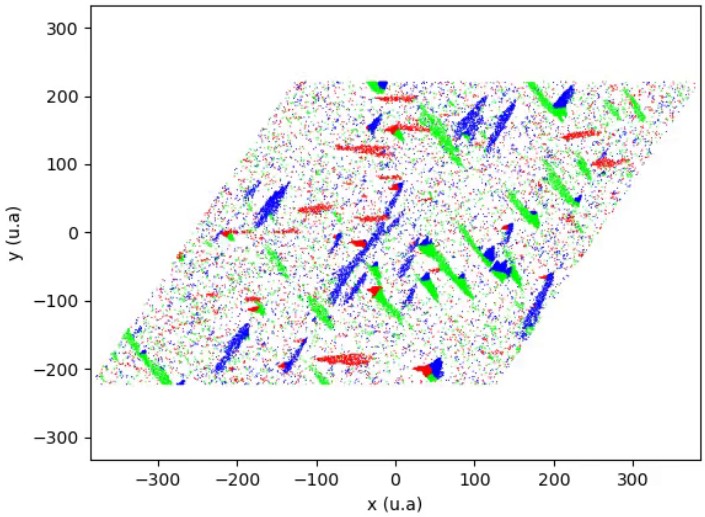



Figura 40 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial AL e, $\eta$ menor e distante do $\eta_c$. Inicialmente, vários condensados com velocidades distintas surgem, mas ao longo do tempo o sistema relaxa para um estado IB com múltiplas bandas. Há pouca flutuação após o transiente. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/KTHnRaKZeb4`.

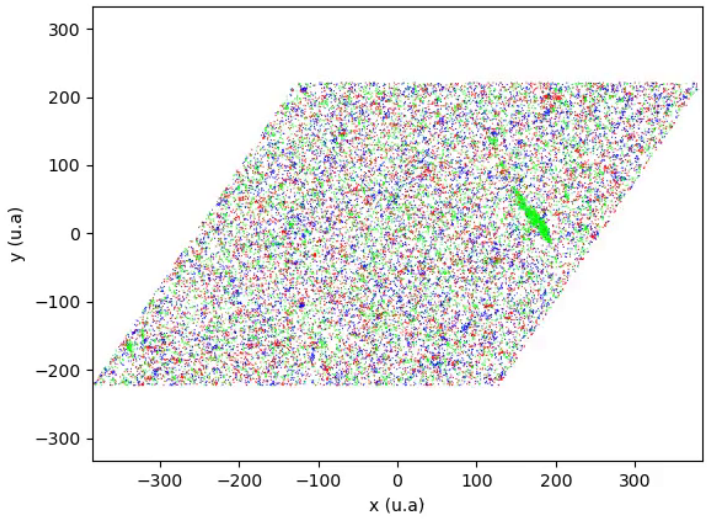



Figura 41 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial AL e, $\eta$ menor e próximo ao $\eta_c$. Inicialmente, verificamos a formação de condensados com tempo de vida curto. Porém, a partir de $2s$ surge um condensado crítico (em verde) que "cresce" até formar uma IB com uma única faixa. Note que a região gasosa na proximidade da IB em crescimento possuí uma densidade menor, esse comportamento é comum ao processo de nucleação. Há pouca flutuação após o transiente. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/M8JcaTLwQSk`.

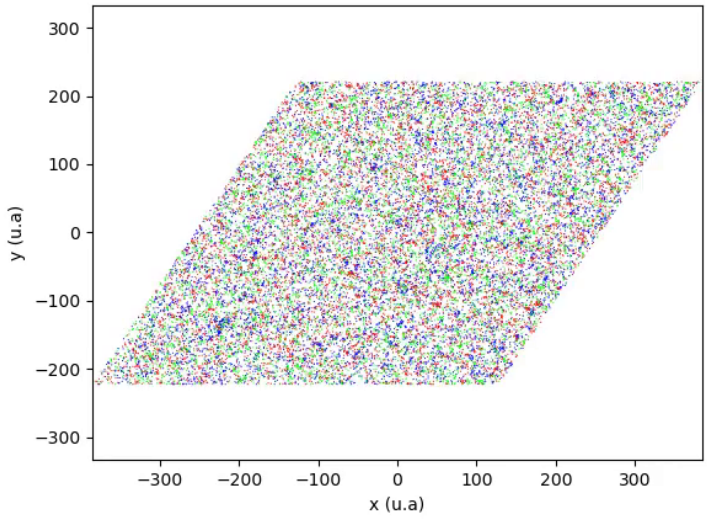



Figura 42 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial AL e $\eta$ maior que $\eta_c$. Nesse caso, não há diferença significativa se o valor de $\eta$ é próximo ou distante ao valor crítico, em ambos os casos o estado do sistema é do tipo DA, sem grandes flutuações. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/KH9C9XW4Wxg`.

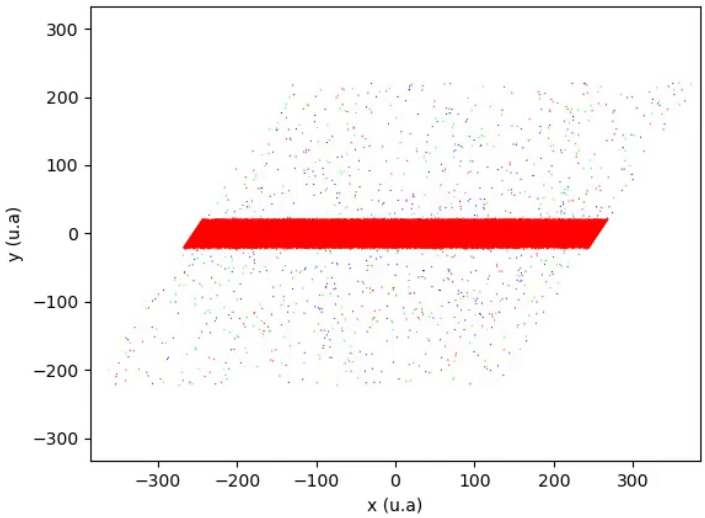



Figura 43 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial IB e $\eta$ menor e distante que $\eta_c$. É possível observar que, rapidamente, algumas partículas se desprendem do condensado e formam um gás de baixíssima densidade. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/POZxLOz6Sa8`.

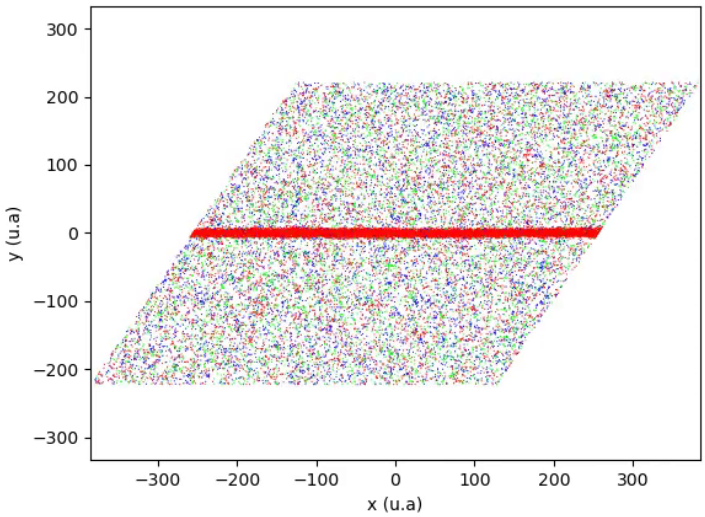



Figura 44 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial IB e $\eta$ menor e próximo ao $\eta_c$. Pode-se perceber que ao longo do tempo mais partículas vão se desprendendo do IB, de tal modo, que a espessura final é significativamente menor que a mostrada na Fig. 43. Nesse caso, o $\overline{\rho} \sim \rho$. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/9LCjgDc-G6E`.

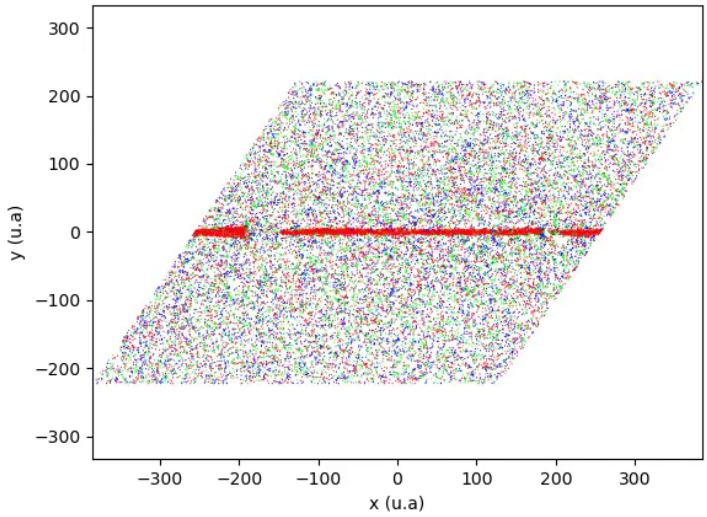



Figura 45 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial IB e $\eta$ maior e próximo ao $\eta_c$. Pode-se perceber que ao longo da relaxação as partículas vão se desprendendo do condensado até que, devido as flutuações, a faixa se rompe. Após esse rompimento, o processo de evaporação faz o condensado diminuir rapidamente. Ao fim, esse condensado se desfaz de forma abrupta. Neste vídeo não é possível observar uma nova nucleação. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/POZxLOz6Sa8`.

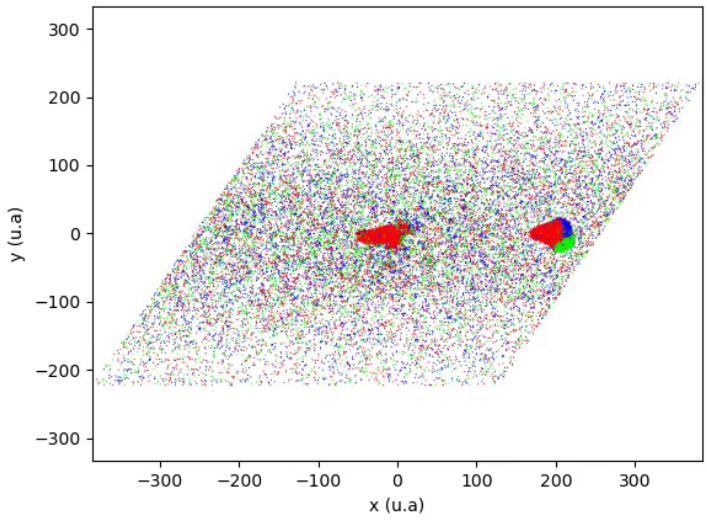



Figura 46 – Simulação mostrando o comportamento típico para baixa densidade, configuração inicial IB e $\eta$ maior e longe do $\eta_c$. Pode-se perceber que ao longo da relaxação as partículas vão se desprendendo do condensado até que, devido às flutuações, a faixa se rompe. Nesse caso, como as flutuações são significativamente maiores, a faixa se rompem e gera condensados que são tipicamente maiores (se comparado ao descrito em Fig. 45), o que permite o aparecimento de estruturas semelhantes a MBI e TJI (com tempo de vida muito curto) ao longo da evaporação. O vídeo pode ser acessado em `https://youtu.be/NGW0jy4-0rA`.

# APÊNDICE E – Parâmetro de ordem

Neste apêndice, serão fornecidas informações adicionais sobre o parâmetro de ordem ($\phi$), discutido na Sec. 4.4. As Figs. 47-51 mostram o comportamento de $\phi$ para diversas configurações iniciais e tamanhos. Conforme discutido ao longo da Sec. 4.1, em vários pontos a configuração final não é univoca, o que leva a grandes flutuações quando fazemos a média sobre realizações independentes. Essas flutuações são mais acentuadas para ruídos baixos e tamanhos maiores.

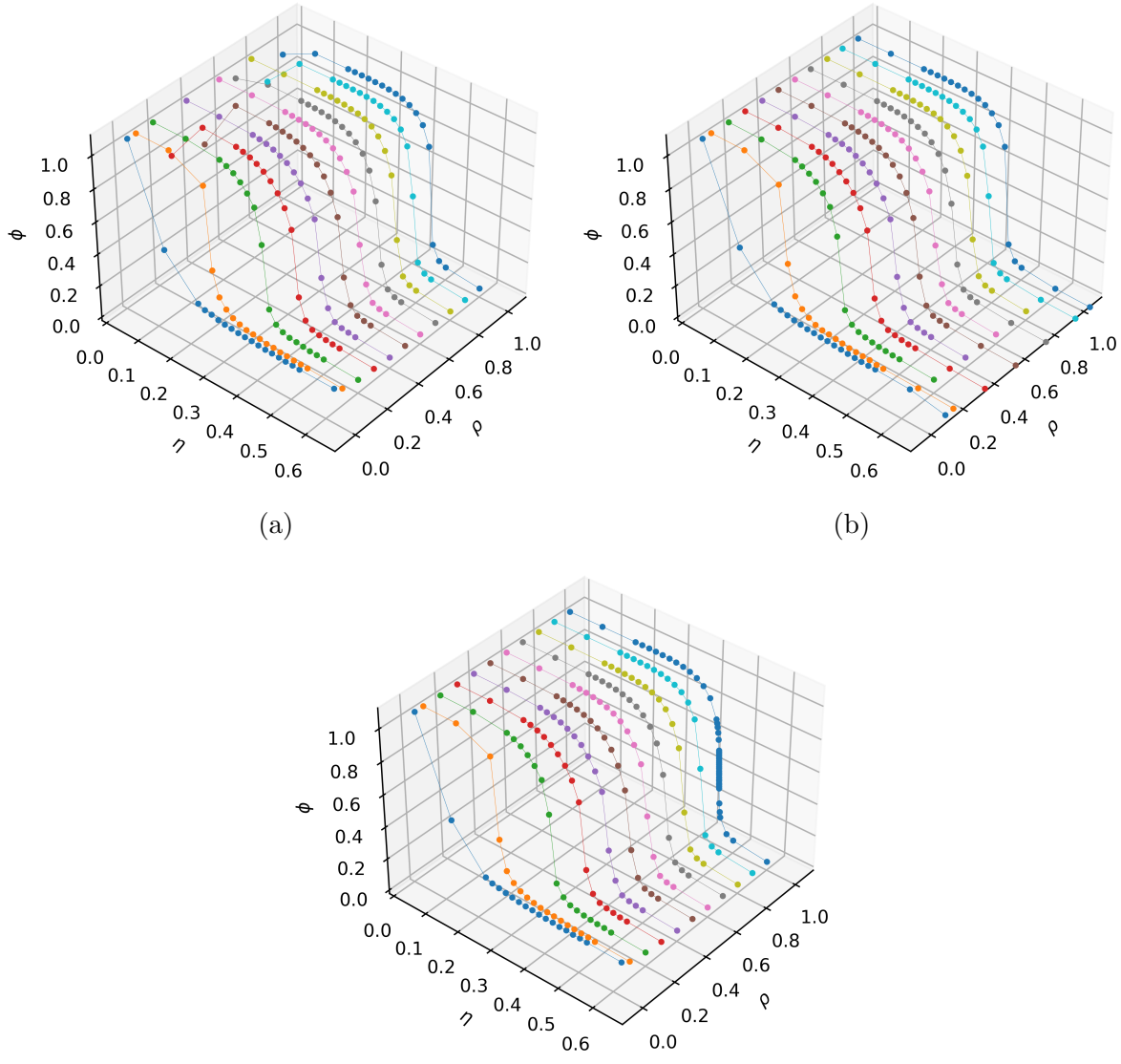



Figura 47 – Valor médio de $\phi$ para $10^5$ passos Monte Carlo (MC), $L = 33$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Por questões técnicas não são colocadas as barras de erro nesses gráficos.

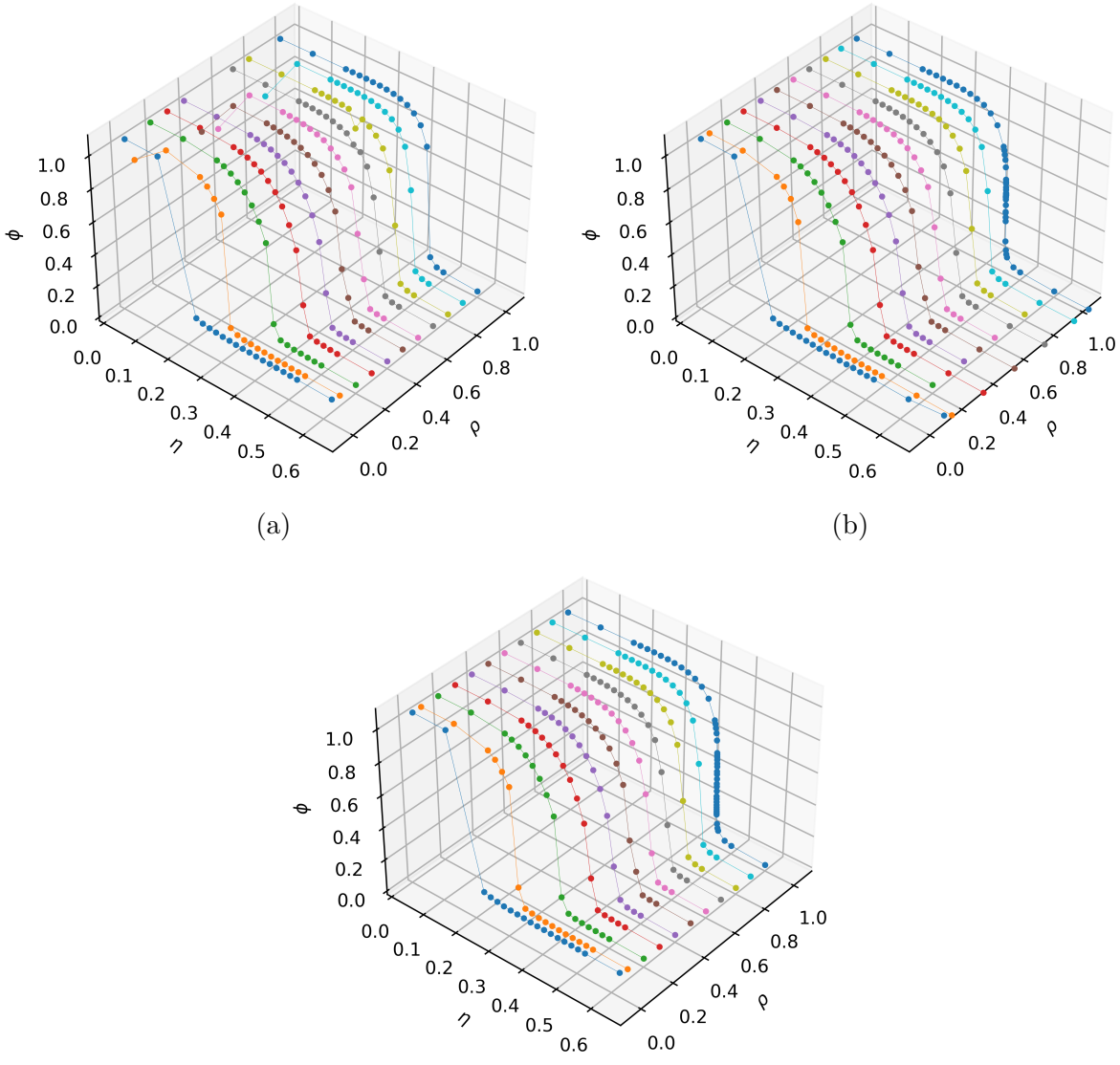
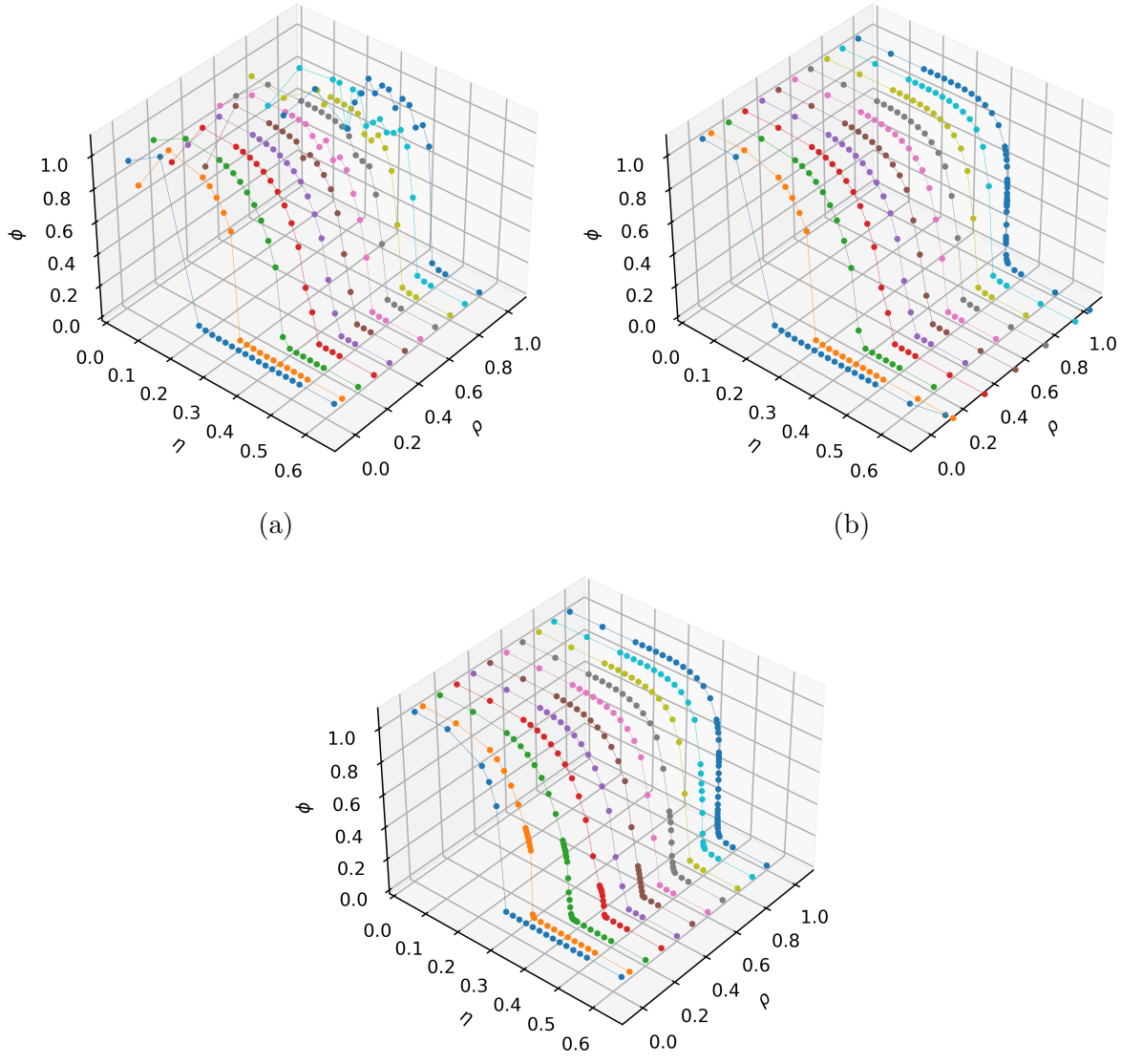


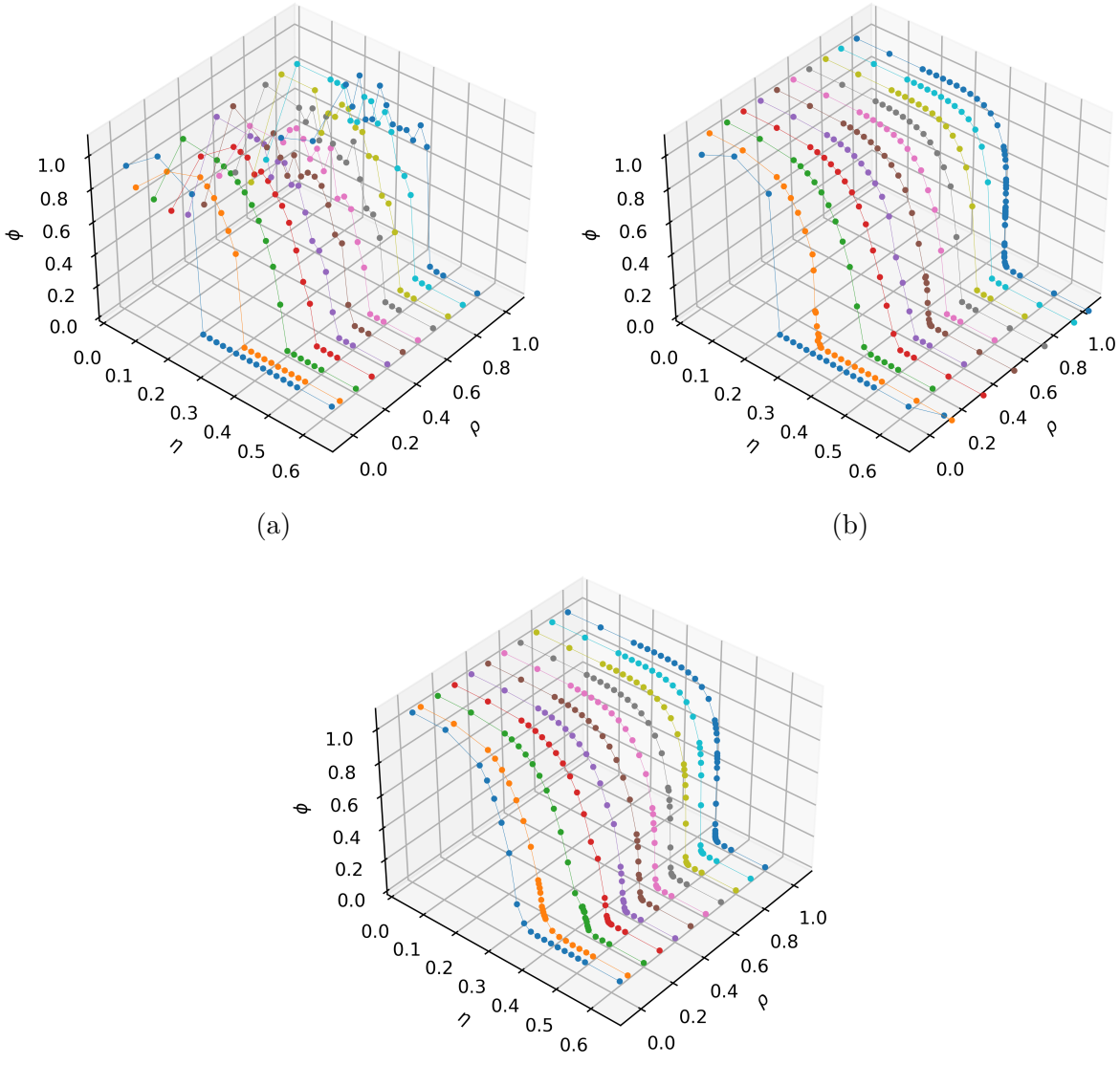

Figura 48 – Valor médio de $\phi$ para $10^5$ passos MC, $L = 65$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Por questões técnicas não são colocadas as barras de erro nesses gráficos.




(a) (b)

(c)

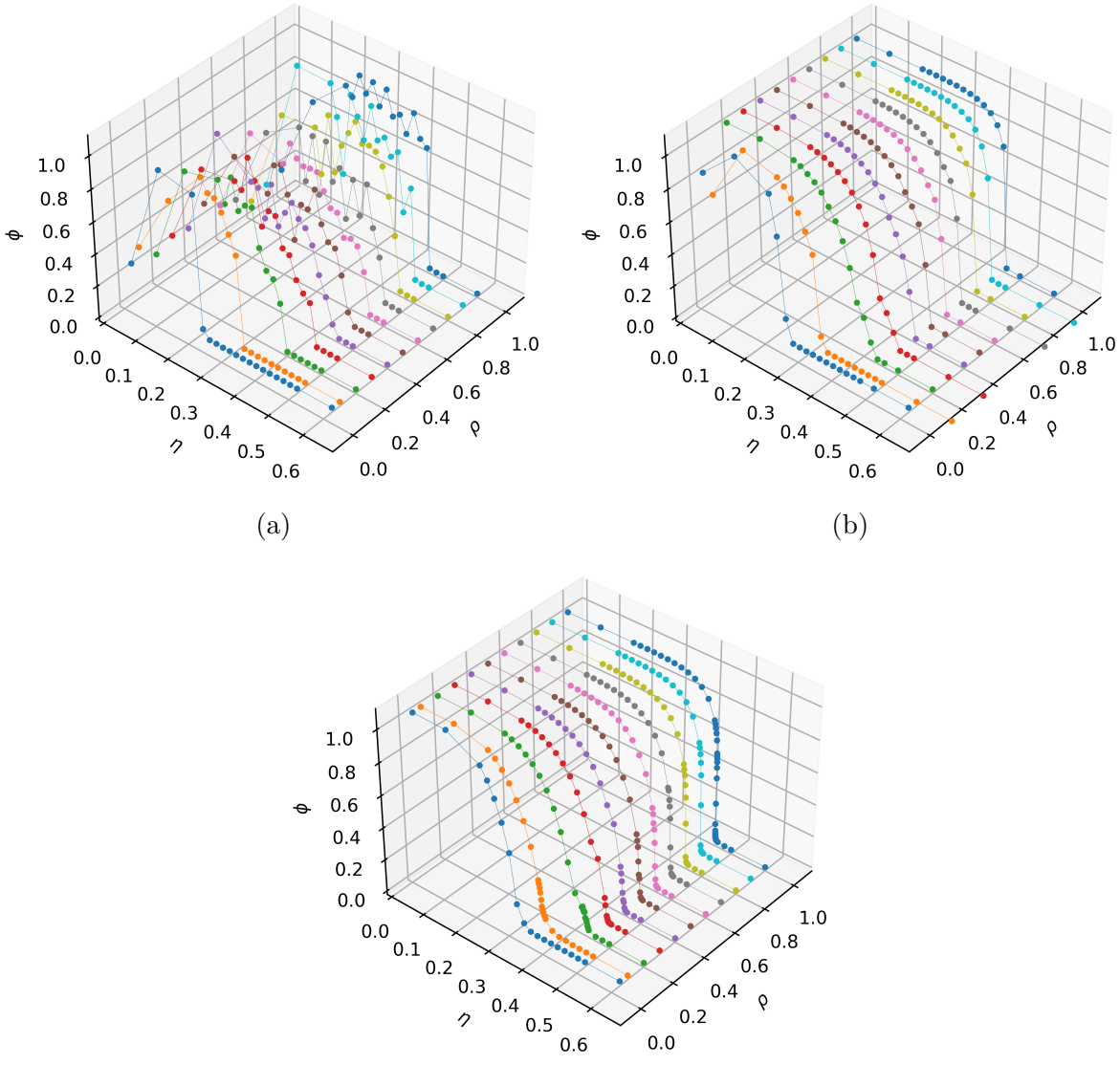
Figura 49 – Valor médio de $\phi$ para $10^5$ passos MC, $L = 129$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Por questões técnicas não são colocadas as barras de erro nesses gráficos.




(a) (b)

(c)

Figura 50 – Valor médio de $\phi$ para $10^5$ passos MC, $L = 257$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Por questões técnicas não são colocadas as barras de erro nesses gráficos.




(a) (b)

(c)

Figura 51 – Valor médio de $\phi$ para $10^5$ passos MC, $L = 513$ e configuração inicial (a) AL, (b) TB e (c) IB. Por questões técnicas não são colocadas as barras de erro nesses gráficos.

# Anexos

# ANEXO A – Artigo publicado

Cópia do artigo publicado acerca da caracterização do modelo de gás em rede ativo de 3-estados. Informações adicionais podem ser consultadas em `https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.110.014109`, último acesso 09/07/2024.

# Three-state active lattice gas: A discrete Vicsek-like model with excluded volume

Tiago Venzel Rosembach [1,2,*] Ana Luiza Novaes Dias [1,†] and Ronald Dickman [1,3,‡]

[1] *Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, C.P. 702, 30123-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil*

[2] *Departamento de Formação Geral de Leopoldina, Centro Federal de Ensino Tecnológico de Minas Gerais, Rua José Peres 558, Cento, Leopoldina, Minas Gerais 36700-001, Brazil*

[3] *Departamento de Física and National Institute of Science and Technology for Complex Systems, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, C.P. 702, 30123-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil*

(Received 14 December 2023; revised 8 May 2024; accepted 12 June 2024; published 2 July 2024)

We study a discrete-space model of active matter with excluded volume. Particles are restricted to the sites of a triangular lattice and can assume one of three orientations. Varying the density and noise intensity, Monte Carlo simulations reveal a variety of spatial patterns. Ordered states occur in the form of condensed structures, which (away from the full occupancy limit) coexist with a low-density vapor. The condensed structures feature low particle mobility, particularly those that wrap the system via the periodic boundaries. As the noise intensity is increased, dense structures give way to a disordered phase. We characterize the parameter values associated with the condensed phases and perform a detailed study of the order-disorder transition at (i) full occupation and (ii) a density of 0.1. In the former case, the model possesses the same symmetry as the three-state Potts model and exhibits a continuous phase transition, as expected, with critical exponents consistent with those of the associated Potts model. In the low-density case, the transition is clearly discontinuous, with a strong dependence of the final state upon the initial configuration, hysteresis, and nonmonotonic dependence of the Binder cumulant upon noise intensity.

DOI: 10.1103/PhysRevE.110.014109

## I. INTRODUCTION

Since the introduction of a model of self-organized motion of mobile agents by Vicsek *et al.* [1], active matter (AM) has motivated enormous theoretical, simulational, and experimental interest among investigators in statistical physics and allied fields. Active matter, understood as collections of many interacting particles, each of which consumes free energy to self-propel, is intrinsically far from equilibrium. Well-studied examples of AM are groups of macro- or microorganisms that interact to yield organized collective motion. Subcellular processes exhibit diverse examples of AM. The cytoskeleton, for example, maintains polarization dynamics and stresses far from equilibrium via a chemical free-energy supply; the plasma membrane, with ion pumps and actin polarization centers, behaves like an active fluid [2–8].

The Vicsek model (VM) uses simple rules to describe the continuous-space dynamics of active particles aligning their direction of motion with that of their neighbors, leading to a phase transition between collective motion at high density and low noise and disordered motion in the opposite limit [1]. Subsequent studies showed that the VM and related models exhibit a regime marked by the coexistence of a condensed ordered phase and a disordered vapor [9]. The latter falls between a uniformly ordered phase and a disordered gas phase [10]. The VM represents dilute active matter in the sense that excluded-volume interactions between particles are ignored.

The question naturally arises whether such coexistence occurs in discrete-space AM systems; it is in fact found in the active Ising model (AIM) [11,12] as well as in diverse lattice models. Similar to the (continuous-space) Vicsek model, the homogeneously ordered and disordered phases are separated, in the density and noise-intensity plane, by a coexistence region. Recent works investigating a generalization of the AIM, the $q$-state active Potts model (APM), show that as long as there is no restriction on the number of particles that may occupy a lattice site, phase coexistence is observed [13,14]. Another discrete-space active matter model is the $q$-state active clock model (ACM). Similar to what is observed in the VM and APM, the active clock model displays a liquid-vapor-type transition. The ACM coexistence region features macroscopic phase separation for small-$q$ values and microscopic separation for large-$q$ values, as in the VM [15,16].

Since a significant fraction of the available space can be occupied by the organisms constituting a bird flock or school of fish, it is important to understand how organization in AM is affected by excluded-volume interactions. In AM models with excluded volume (EV), particle mobility decreases with density, leading to immobile structures such as traffic jams. Congestion is observed, for example, in vehicular traffic, embryogenesis, tumor formation, and herds [17–20]. Self-propelled motion of entities with EV can lead to structures similar to those found in the Vicesk model and AIM, as well as traffic jams, in addition to mixed configurations containing two or more simple structures [21–24].

*Contact author: tiagovenzel@cefetmg.br
†Contact author: anand@ufmg.br
‡Contact author: dickman@fisica.ufmg.br

 ©2024 American Physical Society

Previous studies of AM models with excluded volume include the four-state active Potts model proposed by Peruani *et al.* [23], with four particle orientations on a square lattice. In this model, a parameter $g$ determines the intensity of alignment between particles occupying nearest-neighbor sites; as $g$ is increased at fixed particle density, the system exhibits three phases: disordered aggregates for weak alignment, a phase with local ordering characterized by traffic jams and gliders (dynamic traffic jams with two opposing orientations), and immobile bands that emerge under strong alignment.

The present study is motivated by our interest in characterizing the phases and associated phase transitions in a simple active-matter model with EV and a minimal set of particle motions in the plane. Since EV is most efficiently treated in discrete space, and in the interest of simplicity, we study a lattice gas in which particle velocities are limited to three directions on the triangle lattice. Our model includes a Vicsek-like alignment interaction favoring the formation of ordered groups; this tendency, which follows a majority-vote scheme, is nevertheless frustrated by the reduced particle mobility in dense regions, leading to the emergence of condensed structures which may be characterized as bands or "traffic jams."

Using numerical simulation, we find that the model exhibits a variety of stationary states depending on the parameters (density, noise intensity, and system size) and the initial configuration. We find that the most stable configuration at low noise intensity is an immobile band of particles that wraps the system via the periodic boundaries, that is, it forms a structure that closes via the periodic boundaries. At high noise intensities, the steady state is disordered, having equal average particle fractions in the three directions, and spatially uniform. The model exhibits one or more phase transitions as one increases the noise intensity at fixed density. The order-disorder transition is discontinuous over most of the range of densities. In the limiting case of full occupancy, all particles are immobile and the model possesses the permutational symmetry of the three-state Potts model. We find that, as expected, the phase transition belongs to the three-state Potts universality class in this limit.

The remainder of the article is organized as follows. In the following section we define the model and contrast it with previously studied discrete-space AM models. In Sec. III we report and discuss the results obtained via Monte Carlo simulation. Section IV contains a summary of our main conclusions and prospects for future work.

## II. MODEL

We consider a set of $N$ particles moving on a triangular lattice of $L^2$ sites with periodic boundaries. Volume exclusion is imposed via the condition that at most one particle may occupy a given site. Although each site has $z = 6$ nearest neighbors, velocities are restricted to a set of only three unit vectors $\hat{v}_1 = \mathbf{i}$, $\hat{v}_2 = -\mathbf{i}/2 + \sqrt{3}\mathbf{j}/2$, and $\hat{v}_3 = -\mathbf{i}/2 - \sqrt{3}\mathbf{j}/2$. This is the smallest unbiased set sufficient for a particle to travel from the origin to any other site in at most $O(L)$ steps. Figure 1 shows the three directions of allowed motion.

The update rules for particle positions and velocities parallel those of the VM [1] in the context of discrete position and orientation. At each elementary event, a randomly chosen particle $i$, with current velocity $\mathbf{v}_i$, updates its velocity to $\mathbf{v}_i'$. If the neighboring site in the direction of $\mathbf{v}_i'$ is vacant, the particle moves to this site. Otherwise, the particle remains at its current position while maintaining $\mathbf{v}_i'$ as its velocity. We associate a time interval of $1/N$ with each elementary event.

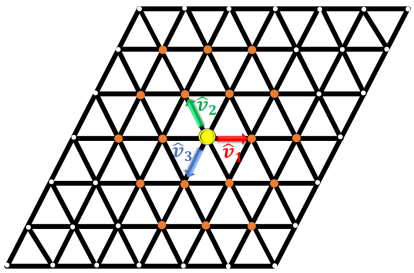



FIG. 1. Schematic of the three-state active Potts model. Sites in orange correspond to the nearest, second-nearest, and third-nearest neighbors of the site marked in yellow. The set of 19 sites comprising the central (yellow) site and its neighbors (orange) constitute the neighborhood of the yellow site. Red, green, and blue arrows correspond to velocities $\hat{v}_1$, $\hat{v}_2$, and $\hat{v}_3$, respectively. The system is periodic in both directions, so all sites possess the same number of neighbors.

The updated velocity of particle $i$ depends on the velocities of all the particles in its neighborhood, which we take as the set of first, second, and third neighbors, as well as particle $i$ itself, for a total of 19 sites. (Thus the neighborhood of a particle can never be empty.) The use of an extended interaction neighborhood improves statistics in simulations and reduces the likelihood of situations lacking a clearly defined majority orientation. To update its velocity, particle $i$ performs a "census" of the velocities of all particles in its neighborhood. Each appraisal of a velocity is subject to error: with probability $\eta$, a particle with velocity $\mathbf{v}_j$ is incorrectly identified as having one of the other two velocities; this applies to particle $i$ as well. The updated velocity $\mathbf{v}_i'$ is taken as the majority of the set of perceived velocities. In case of a two-way tie between velocities $\hat{v}_k$ and $\hat{v}_m$, one of the two is chosen at random for $\mathbf{v}_i'$; in case of a three-way tie, $\mathbf{v}_i'$ is chosen at random.

Evidently, $\eta$ represents the noise intensity; for $\eta = \frac{2}{3}$ all information about the majority velocity is lost, rendering alignment impossible. In the fully occupied lattice, naturally, no movement is possible and the system becomes a three-state majority-vote model [25], admitting an ordered phase for $\eta < \eta_c$ as discussed below. The fully occupied lattice allows neither particle displacements nor density fluctuations and so cannot be considered active matter [10]. We nevertheless study the order-disorder transition at full occupancy since it is a limiting case of the model. In the limit of vanishingly small density, on the other hand, each particle executes a persistent random walk, with a persistence time of $1/\eta$ for small $\eta$; the walk is fully random for $\eta = \frac{2}{3}$.

The model defined above bears certain similarities to the four-state square-lattice active Potts model proposed by Peruani *et al.* [23]. Like the model studied here, it also has excluded-volume interactions. Aside from the different lattice

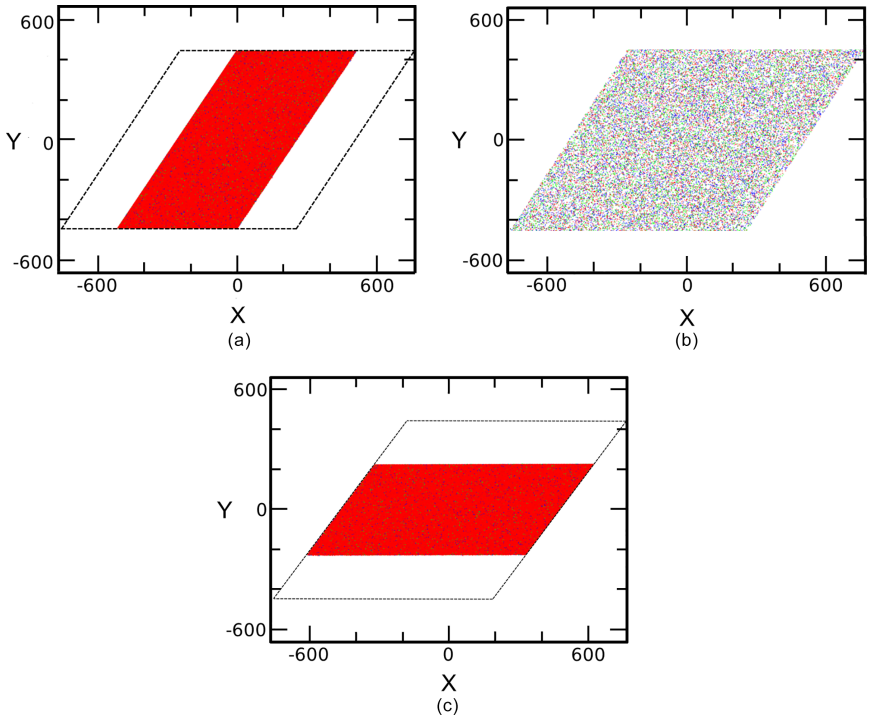



FIG. 2. Examples of the three kinds of initial configuration used in this study: (a) transverse band, (b) random, and (c) immobile band. While these images are for $L = 1025$ and $\rho = 0.5$, ICs are qualitatively similar for other sizes and densities. In random ICs, particles are assigned velocities independently, with equal probabilities from the set $\{\hat{v}_1, \hat{v}_2, \hat{v}_3\}$ and with random positions, respecting the excluded-volume condition. In both immobile- and transverse-band ICs, the particles are closely packed in a band that wraps the system and whose width depends on the desired density. In both IB and TB ICs, all particles have the same orientation.

structure and number of allowed velocities, the model studied in [23] features a different approach to the velocity-update process compared with our model or the original Vicsek model. Specifically, the probability that a particle change its velocity from $\mathbf{v}$ to $\mathbf{v}'$ is proportional to a Boltzmann-like factor

$$\text{Prob}(\mathbf{v} \to \mathbf{v}') \propto \exp\left(g \sum_{j \in A} \mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}_j\right), \tag{1}$$

where the sum is over the occupied nearest-neighbor sites of the particle under consideration and $g \geqslant 0$ is a parameter that plays the role of an inverse temperature. (Thus, although there is no one-to-one mapping, $\eta = 0$ in our model corresponds to $g \to \infty$ in the model of Peruani *et al.*, while $\eta = \frac{2}{3}$ effectively corresponds to $g = 0$.) It is unclear, *a priori*, what effect such differences between the models might imply for the phase diagram. A further procedural difference is that Peruani *et al.* use random initial configurations (ICs) whereas, as explained in Sec. III A, we investigate several kinds of ICs (including random positions and velocities) before concentrating our study on a particularly stable class of ICs that we call an immobile band. In light of the above considerations, the set of phases found in the two models need not be identical.

## III. RESULTS AND DISCUSSION

### A. Classification of steady-state configurations: Preliminary survey

The three-state active lattice gas exhibits diverse stationary configurations, including some previously observed in other models of active matter [11,21–24]. In a set of preliminary studies extending to $10^5$ Monte Carlo (MC) steps, we simulated systems of size $L = \{33, 65, 129, 257, 513\}$, using three types of ICs: immobile band (IB), transverse band (TB), and random (see Fig. 2). In these studies, the number of independent realizations varies from a minimum of five to a maximum of 60 for parameters that appear to place the system near a phase transition, that is, regions that exhibit a nonunique final configuration type and/or large fluctuations in stationary properties such as the order parameter (discussed below). Study of the transverse band IC is motivated by previous works [21,26], which indicate that in continuous-space models without volume exclusion (e.g., the Vicsek model)

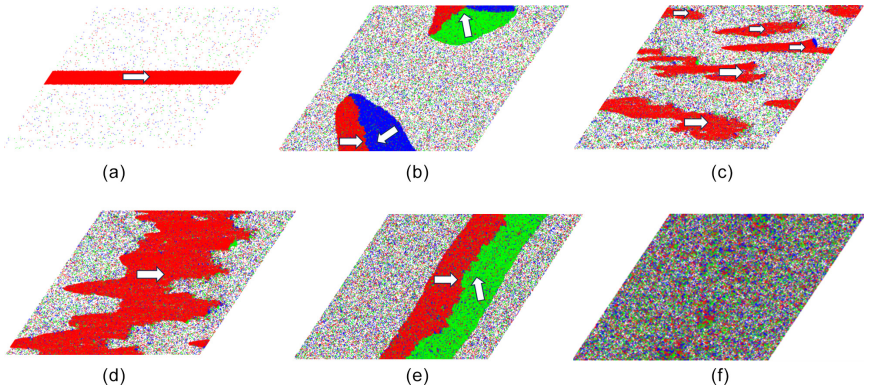



FIG. 3. Examples of final configurations observed after $10^5$ MC steps: (a) IB with $\rho = 0.1$ and $\eta = 0.20$, (b) TJI with $\rho = 0.3$ and $\eta = 0.42$, (c) MBI with $\rho = 0.3$ and $\eta = 0.38$, (d) MBII with $\rho = 0.5$ and $\eta = 0.4$, (e) TJII with $\rho = 0.5$ and $\eta = 0.44$, and (f) DA with $\rho = 0.5$ and $\eta = 0.458$. All images are for system size $L = 513$. The white arrows show the majority velocity in each condensed region.

coexistence between ordered and disordered phases is characterized by dense ordered bands propagating perpendicular to the global velocity. Our results nevertheless indicate that, due to excluded volume, ordered configurations often consist of one or more immobile bands, motivating our study of ICs consisting of a single such band.

The final configurations fall into six categories: IBs, type-1 and type-2 traffic jams (TJI and TJII, respectively), type-1 and type-2 mobile bands (MBI and MBII, respectively), and disordered aggregates (DAs). This classification, modeled on that employed by Peruani *et al.* [23], groups stationary states according to the shape and mobility of the flocks and/or particles. While the DA, IB, and TJI states observed here are similar to those reported in [23], we also find a second traffic-jam state (TJII), formed by the clash between two bands with distinct directions of motion. Whereas the MB states are found here, the so-called glider states reported in [23] are not observed here.

Figure 3 shows examples of each type of final configuration. Immobile-band states are similar in form to the eponymous ICs, except that in some cases (when using random or TB ICs) two or more parallel bands are observed. Most of the particles in an IB are oriented parallel to the band and so are blocked from moving forward by the particle immediately ahead. As a result, activity in this state is restricted mainly to band edges. At full occupancy, the ordered phase possesses a nonzero average orientation and may be seen as an IB occupying the entire lattice.

Non-IB condensed states typically occur at higher noise intensities than IBs. In the case of MBI, the velocities tend to align along the band, but small short-lived flocks with different velocities appear, generating temporary congestion which is sufficient to prevent the formation of immobile bands but not to eliminate global order entirely. Particles in these smaller groups tend to align, creating irregular clusters that move through space. A similar process occurs in MBII states, but here a band with irregular edges forms along a direction different from the direction of propagation, wrapping the system. Figure 3 suggests that in mobile bands, rough band edges allow particle movement to coexist with overall ordering along the band direction.

Type-II mobile bands are slightly reminiscent of the bands observed in Vicsek-like models without excluded volume [22,27]. Nevertheless, the MBII structures observed here have wildly fluctuating boundaries and a jammed bulk, compared to the smooth density variation and uniform motion of the bands observed without excluded volume.

Excluded volume also gives rise to traffic jams (TJI and TJII), congested configurations in which flocks of particles with different velocities block each other's motion. In TJI states, two or more clusters with different velocities meet head-on, leading, in general, to an oval structure. This configuration occurs through the growth of clusters with different velocities; typically MBIs are precursors. In this type of configuration, the alignment interaction leads to competition between groups with different velocities to "capture" new particles and so to a dynamic process of evaporation and condensation. By contrast, TJIIs emerge at higher densities ($\rho \geqslant 0.5$) and consist of two wrapping stripes with different velocities that again block each other's motion. Such configurations exhibit a slower evaporation-condensation process than TJI, suggesting that TJII configurations have a longer lifetime than do TJIs.

Finally, disordered steady states, characterized as disordered aggregates, are observed, as expected, at low densities and high noise intensities. At densities $\rho \leqslant 0.96$, condensed structures, be they bands or traffic jams, coexist with a low-density disordered vapor. In fact, the vapor and the homogeneous DA state are one and the same phase. This conclusion is based on studies of the radial distribution and velocity correlation functions described below.

Our first objective is to infer the phase diagram in the $\rho$-$\eta$ plane (i.e., in the infinite-$L$ limit) based on maps of the occurrence of the states shown in Fig. 3. To begin, we determine which regions of parameter space typically yield each type of configuration. While the fundamental intensive parameters

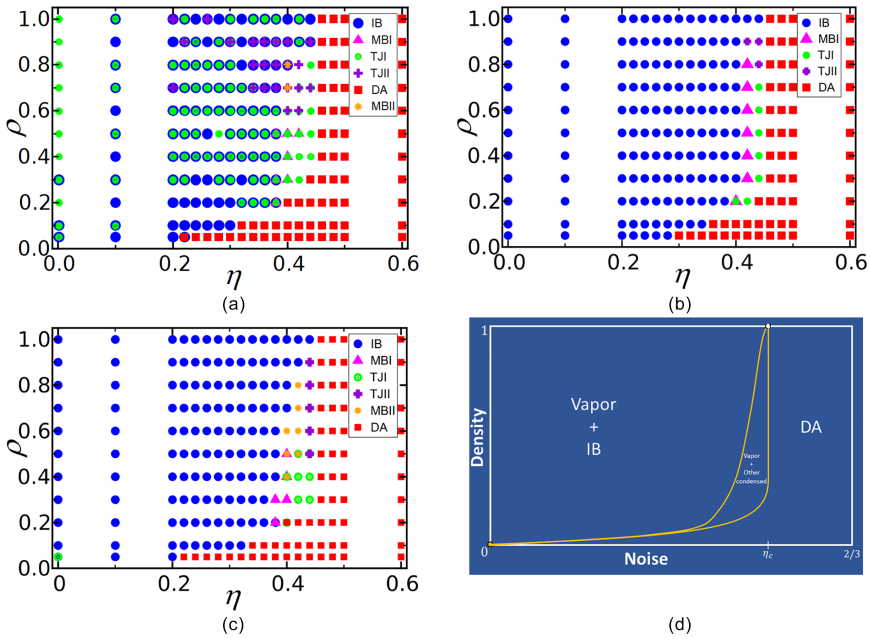



FIG. 4. Maps of the occurrence of the states for $L = 513$ and initial configurations as noted: (a) random, (b) IB, (c) TB, and (d) generic phase diagram on the $\rho$-$\eta$ plane. Note that, in some cases, more than one kind of final state is possible at the same point in parameter space, particularly for random ICs.

are density $\rho$ and noise intensity $\eta$, the boundaries between regions exhibiting one or another configuration type also vary systematically with the system size $L$. Figure 4 shows where each configuration is observed using a relaxation time of $10^5$ MC steps. (Similar maps for $L = 33$, 65, 129 and 257 are provided in the Supplemental Material [28].)

Examination of Fig. 4 reveals that at certain points in the $\rho$-$\eta$ plane, more than one kind of configuration can arise from a given IC; this multiplicity is most common for random ICs. Regardless of the initial configuration or the density, the final state is a DA for sufficiently high noise intensity ($\eta \gtrsim 0.45$). The value of $\eta$ marking the transition between a DA and an ordered state increases rapidly with $\rho$ at low densities and saturates as $\rho \to 1$.

As noted above, for random initial configurations, a greater variety of condensed states is observed, including nonunique outcomes for the same parameters. This is particularly common for larger systems, suggesting that the evolution becomes trapped in a metastable state with a lifetime that grows with system size. A similar observation holds for TB ICs. The hypothesis that metastability is responsible (at least in part) for the variety and nonuniqueness of steady states is supported by the observation that, even when using a TB initial configuration, MBII steady states are only observed in larger systems, for which the lifetime presumably exceeds the simulation time of $10^5$ MC steps. We return to this issue in the following section.

While random or TB initial configurations can, as noted, lead to multiple-IB states, the number of stripes observed varies with each realization and tends to shrink with increasing noise intensity $\eta$. For example, for random ICs, $L = 513$, $\rho = 0.1$, and $\eta = 0.1$, we observe as many as 15 bands, whereas near the phase transition ($\eta \approx 0.32$) only a single band is found.

### B. Steady states: Detailed study

The results reported in the preceding section represent a preliminary step in characterizing the phase diagram. To obtain a more precise picture, we use longer simulation times ($10^7$ MC steps) and restrict attention to IB initial configurations, due to the relative simplicity and apparent stability of IB steady states. We stress that for IB initial configurations, which employ a single band, multiple-IB steady states are never observed. Limited computational resources prohibit our repeating all of the $\eta$ values and system sizes investigated for $10^5$ MC steps in these more detailed studies.

We begin by probing the stability limits of the IB and DA phases. Let $\eta^-(\rho, L)$ denote the noise intensity below which the stationary configuration is always an IB. Similarly, define $\eta^*(\rho, L)$ as the noise intensity above which only the DA phase is observed. Figure 5 shows these stability limits for $L = 129$ and a simulation time of $10^7$ MC steps and is in qualitative agreement with Fig. 4(d). In the region between the two

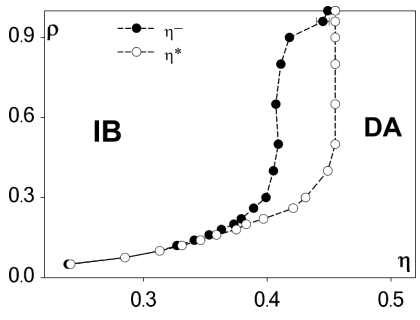



FIG. 5. Stability limits $\eta^-$ and $\eta^*$ versus $\rho$ for system size $L = 129$ and a simulation time of $10^7$ MC steps. Dashed lines connecting the points are merely an aid for visualization.

stability limits, other condensed states can appear, depending on the density. We note, however, that MBII configurations are not observed in studies extending to $10^7$ MC steps and so are excluded from the set of phases. All the other configuration types found for the survey using $10^5$ MC steps are also observed in the longer studies; we regard them as phases of the model. A systematic determination of the MBII lifetime or of interphase switching times (see below) is beyond the scope of the present work.

The extended simulations provide clear evidence of bistability in the parameter space between the stability limits (see Fig. 5) in that the configuration may alternate between phases over time. For lower densities, we find time series in which IB and DA phases alternate. At higher densities, we find time series with alternation between the following pairs of phases: IB-DA, IB-MBI, IB-TJI, MBI-TJII, TJI-DA, MBI-DA, TJI-TJII, and, most commonly, MBI-TJI.

Figures 6(a) and 6(b) show $\eta^-$ and $\eta^*$ as a function of system size in the low-density regime. The values for $\eta^-$ are well fitted by a straight line. On the other hand, $\eta^*$ exhibits positive curvature with increasing density. We believe that this curvature is associated with the fact that, for these higher densities, the system goes through several states during the transition from an IB to a DA as we increase the noise intensity. The intermediate states (MBI, TJI, and TJII) are readily nucleated at higher densities, thus extending the stability of condensed phases to higher noise intensities. Figure 6(c) shows the extrapolated values for $\eta^-$ and $\eta^*$, which again indicates that the phase diagram is qualitatively as suggested in Fig. 4(d). The gap between the IB and DA phases is seen to extend to $\rho = 0.95$ (the highest density studied), suggesting that the order-disorder transition is discontinuous for any density smaller than unity.

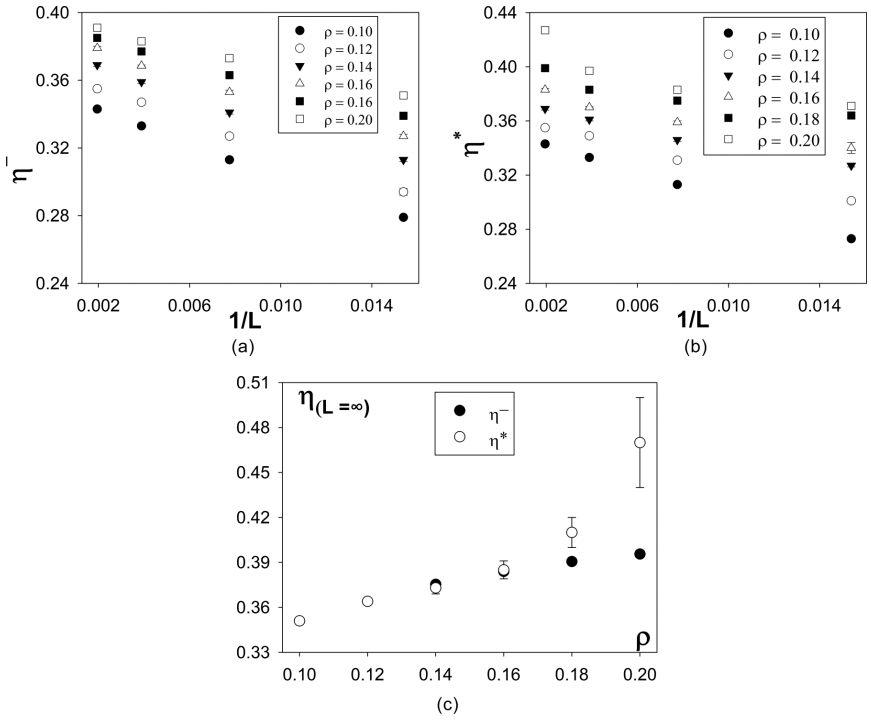



FIG. 6. Plots of (a) $\eta^-$ versus $1/L$ at low densities, (b) $\eta^*$ versus $1/L$, and (c) estimated values of $\eta^-$ and $\eta^*$ in the thermodynamic limit.

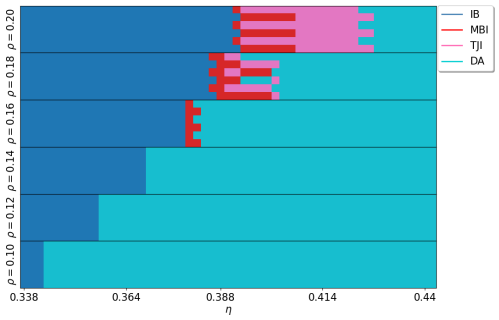



FIG. 7. Observed states for noise levels near the order-disorder transition at low density and $L = 513$. Note that the number of times a configuration is indicated at a certain point in configuration space is not related to its frequency of occurrence.

To gain a better understanding of the transition region at low densities ($0.1 \leqslant \rho \leqslant 0.2$), we perform simulations for $L = 65$, 129, 257, and 513, again using $10^7$ MC steps, and a density increment of $\Delta\rho = 0.02$. Figure 7 illustrates the observed states for $L = 513$. It is evident that as density increases, the number of possible states also grows. At several points exhibiting nonunique final configurations, the system alternates between states, confirming bistability, as described above. Far from transition regions, the states are unique. In general, the sequence of states observed with increasing noise is IB, MBI, TJI, and DA states.

Type-2 traffic jams are found at higher densities, presumably because they involve two bands that wrap the system and so require more particles to remain stable. Studies using $L = 129$, densities $\rho \geqslant 0.5$, and noise intensities close to $\eta^*$ yield TJII final states. These transitions are often governed by an evaporation-condensation process alternating with the TJI state but persisting over the duration of the simulation. Analyses for other system sizes yield qualitatively similar behavior.

We close this section with a remark on rather exotic, ordered, spatially uniform states with density smaller than unity. Consider, for example, a configuration in which all sites in one of the four sublattices of the triangle lattice are occupied by particles having the same velocity (say, $v_1$) and all other sites are vacant. For $\eta = 0$, this IC evolves to a state in which, on average, half the particles in each occupied row are mobile. (Note that for zero noise the system is in fact a stack of independent rings, each running a totally asymmetric exclusion process.) Studies of a system with $L = 129$ extending to $10^8$ MC steps show that this state is unstable to arbitrarily small nonzero noise intensities. As one increases $\eta$, the final state passes through the sequence of multiple IBs, a single IB, a TJI, and a DA.

### C. Coexistence between condensed and DA phases

As noted above, for densities smaller than unity, condensed phases coexist with a low-density vapor. Here we show that the properties of the vapor are those of the DA phase, as characterized by the radial distribution function $g(r)$ and velocity correlations.

A convenient definition of $g(r)$ for lattice models [30] can be written as

$$g(r) = \frac{1}{\bar{N}} \sum_{l=1}^{\bar{N}} \frac{1}{\mathcal{N}_l(r)} \sum_{m=1}^{\bar{N}} \delta(r - |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_l|), \tag{2}$$

where $\mathcal{N}_l(r)$ is the number of sites at a distance $r$ from the $l$th particle, $\mathbf{r}_m$ and $\mathbf{r}_l$ are the positions of particles $m$ and $l$, respectively, and the sums are over all $\bar{N}$ particles in the vapor-DA phase. In addition, $\bar{\rho}$ corresponds to the density of the vapor and/or DA. (In the presence of a condensed phase, the vapor density is smaller than the overall density.) In brief, $\bar{\rho}g(r)$ represents the probability that site $\mathbf{r}$ is occupied, given that there is a particle at the origin. Figure 8(a), for $L = 513$ and $\rho = 0.1$, shows that $g(r)$ decreases rapidly with $r$, eventually leveling off near unity for $r > 10$. Note that the function $g(r)$ varies smoothly with $\eta$, suggesting that the vapor that coexists with the IB, and the DA are the same phase.

The pair correlation function $h(r) \equiv g(r) - 1$ measures the extent to which the presence of a particle at the origin is correlated to the presence of another at a distance $r$; the inset of Fig. 8(a) shows that $h(r)$ decays in a roughly exponential manner. Introducing the correlation length $\xi_{\rm pos} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{n_{\rm max}} |h(r_n) + h(r_{n+1})|(r_{n+1} - r_n)$ (where $\{r_1 = 1, r_2 = \sqrt{3}, r_3 = 2, \ldots\}$ are the first-, second-, third-, etc., neighbor distances), Fig. 8(b) shows that $\xi_{\rm pos}$ continuously decreases monotonically (and quite rapidly) with increasing noise. [We note that at the low density considered in Fig. 8, the transition is discontinuous (see Sec. III D), so that $\xi_{\rm pos}$ remains finite.] These findings again support the conclusion that the vapor and DA are a single phase.

The $\bar{\rho}$ increases with $\eta$ until saturating at $\bar{\rho} = \rho$, as seen in Fig. 8(c). The apparent discontinuity in $d\xi_{\rm pos}/d\eta$ occurs at the IB-DA phase boundary and can be attributed to the singular dependence of $\bar{\rho}$ on $\eta$ at this point.

We define the velocity (or orientation) correlation function $C_v(r)$ as

$$C_v(r) = \frac{\sum_{l,m=0}^{\bar{N},\bar{N}} \mathbf{v}_l \cdot \mathbf{v}_m \, \delta(r - |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_l|)}{\sum_{l,m=0}^{\bar{N},\bar{N}} \delta(r - |\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_l|)}, \tag{3}$$

where $\mathbf{v}_l$ and $\mathbf{v}_m$, and $\mathbf{r}_l$ and $\mathbf{r}_m$ are velocities and positions of particles $l$ and $m$, respectively, and the sums are over all $\bar{N}$ particles in the vapor or DA phase. Figure 9 shows that much like $g(r)$, the functions $C_v(r)$ change smoothly with $\eta$ in the vicinity of the IB-DA transition, again indicating that the vapor and DA are the same phase. Curiously, in the limit of random reorientation ($\eta \simeq \frac{2}{3}$), the velocities of particles occupying neighboring sites are anticorrelated, due to excluded volume. For these high noise levels and low densities, there are no condensed structures, but the excluded-volume interaction prohibits, for example, a particle at the origin with velocity $\mathbf{v}_1$ acquiring a neighbor with the same velocity at the neighboring site (1,0). Indeed, the inset of Fig. 9 shows that the anticorrelation vanishes in the absence of the excluded-volume interaction.

Analyses of $g(r)$ and $C_v(r)$ for $\rho = 0.05$, 0.2, and 0.5 yield comparable findings. Finally, we compare the properties

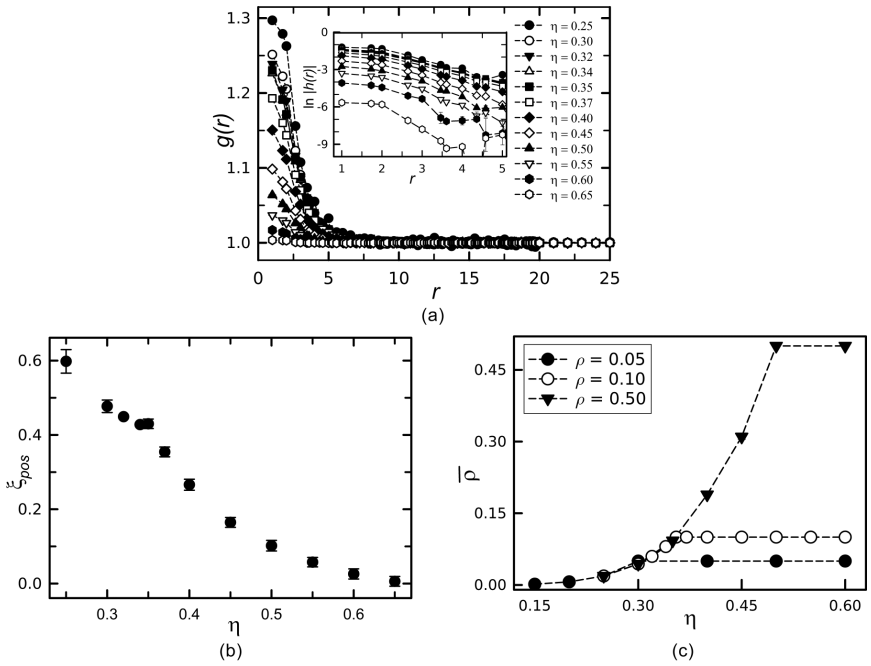



FIG. 8. (a) Plot of $g(r)$ for $\eta$ values as indicated in the legend, in studies with $\rho = 0.1$ and $L = 513$, including the vicinity of the IB-DA phase transition, which occurs at $\eta = 0.345(5)$ for this density. The inset shows a plot of $\ln|h(r)|$ versus $r$. (b) Correlation length $\xi_{\rm pos}$ versus $\eta$ for the same parameter values as in (a). (c) Plot of $\bar{\rho}$ vs $\eta$ for $\rho = 0.05$, 0.1, and 0.5.

studied above in vapor and DA phases having the same density at the same noise intensity $\bar{\rho} = 0.0597$ and $\eta = 0.32$ (both with $L = 513$). The values of $g(r)$ and $C_v(r)$ are the same to within uncertainty in the two cases. Since significant differences in the properties of vapor and DA states are absent, we conclude that they constitute a single phase whose properties vary smoothly with $\eta$ and $\rho$.

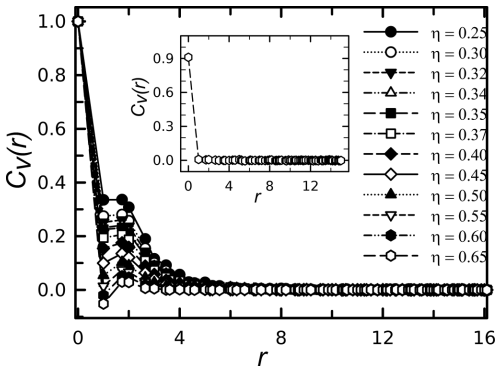



FIG. 9. Plot of $C_v(r)$ for noise intensities as indicated in the legend, with $L = 513$ and $\rho = 0.10$. The inset shows $C_v(r)$ for the model without excluded-volume interactions, using the same parameters, with $\eta = 0.65$.

### D. Order parameter

As is customary in the study of active matter [1,26], we define the order parameter as the modulus of the mean velocity

$$\phi = \frac{1}{N}\left|\sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i\right|, \tag{4}$$

where $N$ is the particle number and $\mathbf{v}_i$ is the velocity of particle $i$. In the disordered phase, $\phi \to 0$ as the system size $L$ approaches infinity. We note that since $\phi$ is a measure of global order, it is not reliable in distinguishing, for example, between TJI and DA phases. The former features ordering of particles into high-density regions of comparable size, but with different directions of movement, so that $\phi$ may be close to zero in a typical configuration.

Figure 10 shows $\phi$ as a function of $\rho$ and $\eta$ for $L = 33$ and 513, using IB initial configurations. Here, in each independent realization, the system is allowed to relax for $2 \times 10^4$ time steps, with $\phi$ obtained from a temporal average evaluated over the subsequent $8 \times 10^4$ time steps; we then evaluate

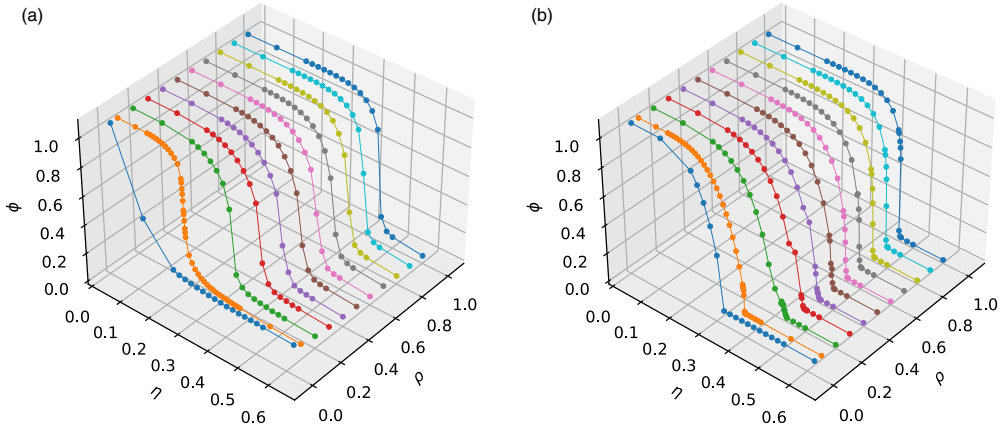



FIG. 10. Order parameter as a function of $\rho$ and $\eta$ for (a) $L = 33$ and (b) $L = 513$ and IB initial configurations. The densities are 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, and 1.0.

the mean of $\phi$ over the set of independent realizations. As expected, in the zero-noise limit, the order parameter assumes its maximum value; for $\eta = \frac{2}{3}$, particle velocities are chosen randomly, with equal probabilities, at each update, so that $\phi \to 0$ as $L \to \infty$. Regardless of the density $\rho$, as the noise intensity increases, there is an abrupt decrease in $\phi$ associated with the transition to the DA state.

In Fig. 11 the stationary order parameter is plotted versus $\eta$ for $L = 33$ and 513. (For other sizes, see the Supplemental Material [28].) Comparing these results with those obtained from analysis of configurations (Figs. 4 and 7), one verifies that in the IB phase, $\phi$ decays monotonically with increasing noise. In the DA phase, as expected, $\phi$ tends to zero.

A more complex situation arises when we examine $\phi$ for $\rho = 0.2$ and $\eta^- < \eta < \eta^*$, which includes the intermediate states MBI and TJI [see Fig. 11(b)]. Here $\phi(\eta)$ is non-monotonic and exhibits rapid variations in curvature. (Similar behavior is observed for $0.2 \leqslant \rho < 1$.) We do not find a clear correspondence between these variations in $\phi$ and the phase boundaries. This is not altogether surprising since, as noted above, $\phi$ is not a good indicator of traffic-jam states.

### E. Nature of the order-disorder transition

To identify the nature of the transitions between the disordered and ordered phases, we analyze the Binder cumulant and look for evidence of finite-size scaling and hysteresis [31–33]. Here we concentrate on densities $\rho = 0.1$ and 1 (full occupancy) using IB initial configurations, since there is apparently only one transition (IB to DA) as we vary $\eta$ at these densities. We defer analysis of the more complex scenarios observed at intermediate densities to future study.

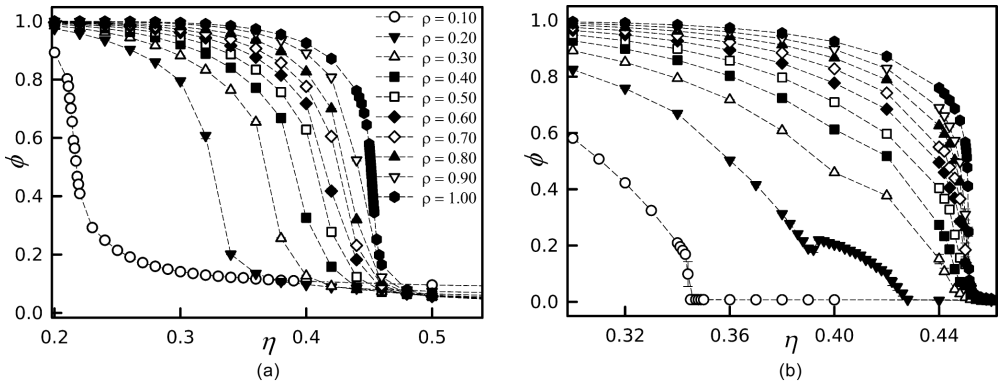



FIG. 11. Order parameter $\phi$ versus $\eta$ for system sizes (a) $L = 33$ and (b) $L = 513$, with densities as per the legend in (a). In almost all cases, the error bars, which correspond to the standard deviation of the mean, are smaller than the symbols.

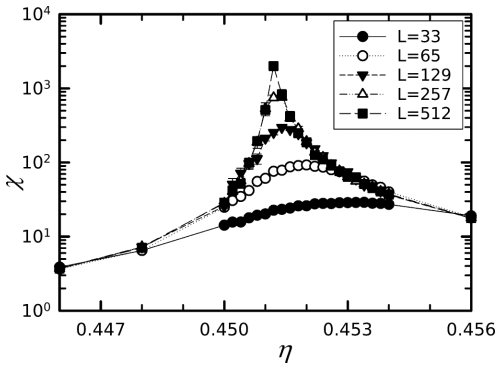



FIG. 12. Plot of $\chi$ vs $\eta$ for full occupancy, with system sizes as indicated in the legend.

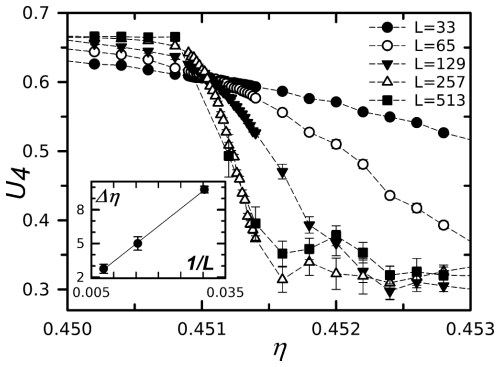



FIG. 13. Binder cumulant $U_4$ versus noise intensity $\eta$ at full occupancy, with system sizes as indicated in the legend. The inset shows $\Delta\eta \equiv (\eta_n - 0.451\,00) \times 10^5$ (where $\eta_n$ is the value marking the crossing of the $U_4$ curves for sizes $L_n$ and $L_{n+1}$) versus $1/L_{n+1}$. The line is a least-squares linear fit to the data, yielding a limiting value of $\eta = 0.451\,002(5)$ (see the text for details).

#### *1. Full occupancy*

At full occupancy, particles cannot move, so the model, which enjoys $S_3$ (permutation) symmetry, is equivalent to a system of spins, suggesting that the order-disorder transition is continuous and in the three-state Potts model universality class. The scaled variance $\chi \equiv L^2 \mathrm{var}(\phi)$ exhibits a peak as a function of $\eta$ with an amplitude and sharpness that grow systematically with system size, as expected at a critical point (see Fig. 12). The position of the maximum approaches a limiting value of $\eta = 0.4512(2)$ as the system size tends to infinity.

The Binder cumulant [34]

$$U_4 = 1 - \frac{\langle \phi^4 \rangle}{3\langle \phi^2 \rangle^2}, \tag{5}$$

shown in Fig. 13, exhibits a series of crossings that converge to a limiting value $\eta_c$ as expected at a continuous phase transition. To estimate $\eta_c$ from the cumulant crossings, we perform a series of high-statistics studies for $L = 33$, 65, 129 and 257, using 30–60 independent realizations for each $\eta$ value, and a relaxation time of $2 \times 10^5$ MC steps followed by production runs of $2.8 \times 10^6$ steps. The inset of Fig. 13 plots $\eta_n$, the value marking the crossing of $U_4$ for sizes $L_n \equiv 2^n + 1$ and $L_{n+1}$, versus $1/L_{n+1}$. A least-squares linear fit to these data yields the estimate $\lim_{n\to\infty} \eta_n = 0.451\,002(6)$.

This estimate for the critical noise intensity is in accord with that obtained via analysis of $\chi$, but considerably more precise. It also compares well with the result of a mean-field (MF) analysis that treats all 19 sites in the neighborhood of a given particle as statistically independent, yielding $\eta_c = 0.4704$. (A discrepancy of about 4% between simulation and a simple MF analysis is of course hardly surprising.) Details of this and other MF analyses, including stability estimates for condensed structures such as immobile bands, will be presented elsewhere [35].

Considering the results for the scaled variance and Binder cumulant reported above, as well as the apparent absence of hysteresis in the order parameter, we conclude that the phase transition at full occupancy is continuous. This motivates a finite-size-scaling analysis, based on the usual scaling hypothesis that at $\eta_c$, the order parameter and its variance follow power laws, that is,

$$\phi \propto L^{-\beta/\nu}, \quad \chi \propto L^{\gamma/\nu}, \tag{6}$$

where $\nu$ is the critical exponent governing the growth of the correlation length in the critical region. (While these asymptotic power laws may receive subdominant correction terms for smaller sizes, the present data are insufficient to reliably introduce correction-to-finite-size-scaling terms.) For off-critical values of $\eta$, plots of $\ln \phi$ or $\ln \chi$ versus $\ln L$ exhibit significant curvature.

Applying this criterion to a set of high-statistics studies, using 30–60 independent realizations (with $10^6$ MC relaxation steps followed by time averages over the subsequent $2 \times 10^6$ steps, for a series of $\eta$ values in the critical region), we obtain $\eta_c = 0.451\,034(1)$ and $0.451\,021(6)$ based on the data for $\phi$ and $\chi$, respectively. Figure 14 shows the order parameter and its scaled variance for $\eta = 0.451\,034$ for the five system sizes analyzed in this work; these data are well fitted by a linear expression.

Analysis of the resulting curvatures of log-log plots of the order parameter and its scaled variance versus $L$, combined with the value of $\eta_c$ obtained via analysis of the cumulant crossings, permits us to restrict $\eta_c$ to the interval $[0.451\,030, 0.451\,036]$. Interpolating the slopes of the least-squares linear fits to the data for $\ln \phi$ (and $\ln \chi$) as a function of $\ln L$, for $\eta = 0.451\,030$, $0.451\,032$, $0.451\,034$, and $0.451\,036$, and taking into account error propagation, we obtain the critical exponent estimates

$$\frac{\beta}{\nu} = 0.138(3), \quad \frac{\gamma}{\nu} = 1.70(2). \tag{7}$$

The values of the corresponding quantities for the three-state Potts model in two dimensions are $\beta/\nu = 2/15 = 0.133\ldots$ and $\gamma/\nu = 26/15 = 1.733\ldots$ [36]. Thus our

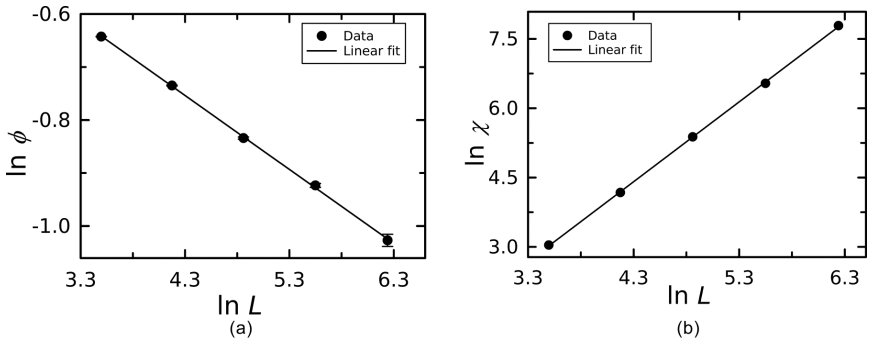



FIG. 14. A log-log plot of (a) $\phi$ and of (b) $\chi$ for $\eta = 0.451\,034$. Error bars are smaller than the symbols.

estimates for both $\beta/\nu$ and $\gamma/\nu$ are quite close to the Potts model values. The small discrepancies (about 4% and 2% for $\beta/\nu$ and $\gamma/\nu$, respectively) are likely due to the limited range of system sizes and possible corrections to finite-size scaling. (This is reflected in the fact that, while our three estimates for $\eta_c$ differ by less than 0.007%, the values, with their respective uncertainties, are mutually incompatible.)

We conclude that at full occupancy, the critical behavior of our model is consistent with that of the three-state Potts model in two dimensions. This is of course to be expected, since the symmetry of the three-state majority-vote model is precisely that of the corresponding Potts model [25].

#### *2. Density 0.1*

While the phase transition at full occupancy is clearly continuous, our analysis at the much lower density of 0.1 yields strong evidence of a discontinuous transition between the IB and DA phases. In preliminary studies, we perform simulations extending to $10^6$ MC steps, using two kinds of ICs: (i) a single IB with vapor and (ii) completely random positions and velocities. Initial configurations for case (i) are prepared by allowing 30 independent realizations to relax for $10^6$ MC steps using $\eta = 0.31$ and an IC similar to Fig. 2(b) and saving the final configuration of each realization. Subsequently, for each independent realization of the ordering studies, we randomly select one of these 30 configurations as the IC and allow the system to relax for an additional $4 \times 10^5$ MC steps at the new value of $\eta$ before collecting data.

Figure 15 shows $\phi$ versus $\eta$ for system sizes $L = 257$ and 513, yielding several key observations. First, the IB is the more stable configuration for low noise values. Second, the steady state depends on the initial configuration for $\eta \in [0.310, 0.345]$. Third, the order parameter appears to jump from a positive value to zero at the IB to DA transition.

For both of the sizes studied, the curves for $\phi$ obtained using IB and random ICs are essentially identical for $\eta$ in the interval $[0.1, 0.3]$. In this range, the steady-state configuration remains a single IB for IB initial configurations and consists of one or two IBs when using random ICs.

The above results confirm the stability of the IB steady state for low noise, bistability of the steady state for intermediate noise, and an apparent jump in the order parameter at the IB to DA transition. Taken together, they motivate a search for hysteresis, which we perform as follows. We generate 12 independent realizations with $L = 513$ and $\rho = 0.1$, starting from $\eta = 0.28$, and gradually increase the noise intensity (using increments $\Delta\eta = 0.003$) until the system, initially in the IB phase, exhibits a transition to the DA phase. We subsequently reverse the process, slowly decreasing $\eta$ until the system returns to the IB phase. Following each change in $\eta$, we allow the system to relax for $10^5$ MC steps. Figure 16 shows $\phi$ versus $\eta$ for the 12 independent realizations; each exhibits a hysteresis loop.

We note that the upper terminal points of the hysteresis loops all fall in the $\eta$ interval $[0.343, 0.346]$, marking the stability limit of the IB phase. By contrast, transitions from the DA to the IB occur over a broader interval $[0.307, 0.316]$. (The mean and standard deviation over the 12 studies are 0.313 and 0.002, respectively.)

Videos of the evolution near the stability limits (see the Supplemental Material [28]) reveal that in both cases, the transition requires the formation of a critical nucleus: of an IB fragment capable of growing until it wraps the system, in

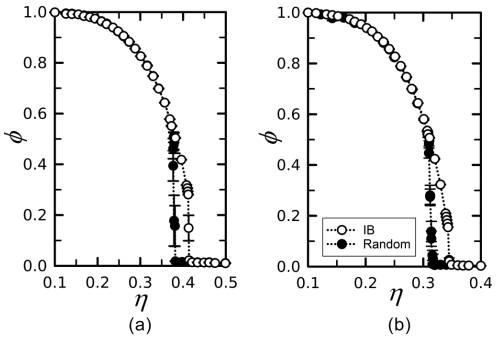



FIG. 15. Order parameter $\phi$ vs $\eta$ for an IB initial configuration (open circles) and for a random IC (closed circles), with density $\rho = 0.1$ and system sizes (a) $L = 257$ and (b) $L = 513$.

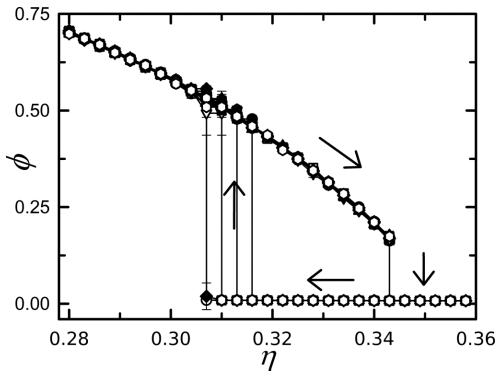



FIG. 16. Hysteresis curves obtained from 12 independent realizations. Arrows indicate increasing or decreasing $\eta$ and resulting upward or downward jumps in $\phi$. The density $\rho = 0.1$ and system size $L = 513$.

the transition from the DA to the IB, and of a critical "bubble" within the IB at the inverse transition.

We also find clear signs of a discontinuous IB to DA transition in the Binder cumulant. A key signature of a discontinuous phase transition [associated with a bimodal probability distribution for the order parameter (see the Supplemental Material [28]) is a nonmonotonic dependence of $U_4$ on noise intensity, including negative values in the vicinity of the transition [31]. Figure 17 shows $U_4$ for density $\rho = 0.1$. For $L \geqslant 65$, regardless of the initial configuration, the cumulant assumes negative values in the regions with abrupt changes in $\phi$, indicating that the phase transition is discontinuous. (For $L = 33$ the behavior is typical of a continuous transition, as might be expected for such a small system size.)

In summary, there are strong indications that for density $\rho = 0.1$, the order-disorder transition is discontinuous. We expect this to hold for even smaller densities and for some

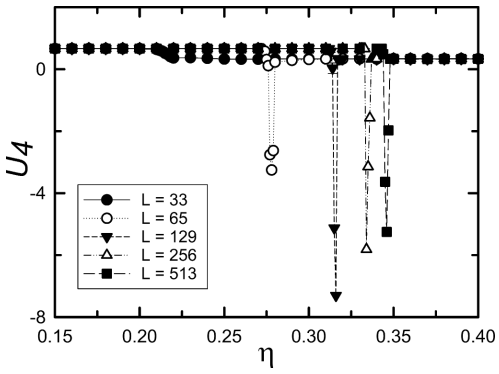



FIG. 17. Dependence of $U_4$ upon noise intensity for all sizes and IC IB.

range of densities greater than 0.1, although we defer a precise determination of this range and analysis of scaling at the associated tricritical point to future study.

## IV. CONCLUSION

We investigate a Vicsek-like model with excluded volume on a triangular lattice, in which particles can only assume three different velocities. The model exhibits a wide variety of steady-state configurations, depending on the noise intensity, density, initial configuration, and system size. Different from Vicsek-like models without excluded volume [1,21], in which the transition to order involves bands of mobile particles, here excluded volume leads to condensed structures in which most particles are immobile. For densities smaller than unity, condensed phases coexist with a low-density disordered vapor, whose properties evolve continuously into those of the uniform disordered phase. Of the five condensed phases depicted in Fig. 3, that consisting of a single IB is the most stable at low noise intensities, regardless of system size, density, or initial configuration. In certain cases, more than one type of configuration can appear for the same set of parameters.

A previous study of an active four-state Potts model by Peruani *et al.* [23] revealed ordered phases corresponding (in our terminology) to an immobile band or a traffic jam (TJI). The present model exhibits these phases as well as two additional condensed structures: a mobile band and a second type of traffic jam. The glider configurations reported in [23] are not observed here. As noted in Sec. II, the differences in the phase diagrams are quite plausible, given the differences in lattice structure, number of states, and velocity-update procedure between the two models. Precisely which differences allow certain states to appear in our model but not in that of Ref. [23] nevertheless remains an open question.

Several studies of active matter models, both with and without excluded-volume interactions, exhibit a discontinuous transition between ordered and disordered phases [14,21,26,37–39]. Similar to the active Potts models studied in [23,24], the nature of the order-disorder transition in the present model changes from discontinuous, at low density, to continuous at high density. This is similar to the behavior observed in [40], in an active-matter model with geometric frustration and a tendency to alignment, in continuous space. While our model exhibits a single phase transition at very high as well as very low densities, at intermediate densities, we observe transitions between various phases, such as mobile bands and traffic jams, at intermediate noise intensities. At full occupancy, the model can be interpreted as a three-state majority-vote model having the same symmetry as the three-state Potts model. A finite-size-scaling analysis yields critical exponent ratios of $\beta/\nu = 0.138(3)$ and $\gamma/\nu = 1.70(2)$, in fair agreement with the exact values for the three-state Potts model in two dimensions.

Our study leaves several open questions for future study: probing the occurrence and stability of the non-IB condensed phases, pinpointing the change from a discontinuous to a continuous order-disorder phase transition, investigating the associated tricritical scaling, and understanding dynamic aspects of the phase transition. A refined analysis of the phase boundaries of non-IB condensed phases should include

particle mobility and current, which change significantly at the transition. Peruani *et al.* [23] suggested that the change from a continuous to a discontinuous IB-DA transition coincides when the density is that of the site-percolation threshold, placing it at $\rho = 0.5$ on the triangle lattice. This is certainly possible, although one might question the relevance of independent percolation to a model with nontrivial correlations. In fact, our results for the stability limits $\eta^-$ and $\eta^*$ shown in Fig. 5 reveal a gap for densities as large as 0.96. If these results (for $L = 129$) continue to hold for larger system sizes and densities even nearer unity, it would imply that the transition is discontinuous for all densities smaller than unity.

While this study has elucidated in some detail the phase behavior of a simple active-matter system with EV and a restricted set of velocities, we note that hard-core excluded-volume interactions with a one particle per site restriction frustrate flocking, since they cause a decoupling of the density and ordering fields. Lattice models that relax the one-particle rule or that employ soft-core repulsion are better suited to the study of flocking [13,14,24].

Extensions of the present model include (i) incorporating population dynamics, generating correlations between population and order, and (ii) including attractive interactions, which should allow one to study ordering free from the artifice of periodic boundaries.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors are grateful to Hugues Chaté for helpful discussions and many insightful suggestions. This work was partially supported by the Brazilian agencies Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

[1] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, Novel type of phase transition in a system of self-driven particles, Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995).
[2] S. Ramaswamy and M. Rao, The physics of active membranes, C. R. Acad. Sci. **2**, 817 (2001).
[3] A. Kumar, A. Maitra, M. Sumit, S. Ramaswamy, and G. V. Shivashankar, Actomyosin contractility rotates the cell nucleus, Sci. Rep. **4**, 3781 (2014).
[4] J. Brugués and D. Needleman, Physical basis of spindle self-organization, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **111**, 18496 (2014).
[5] T. S. V. Podestá, T. V. Rosembach, A. A. dos Santos, and M. L. Martins, Anomalous diffusion and q-Weibull velocity distributions in epithelial cell migration, PLoS One **12**, e0180777 (2017).
[6] J.-F. Joanny, K. Kruse, J. Prost, and S. Ramaswamy, The actin cortex as an active wetting layer, Eur. Phys. J. E **36**, 52 (2013).
[7] J. Prost, F. Jülicher, and J. F. Joanny, Active gel physics, Nat. Phys. **11**, 111 (2015).
[8] S. Ramaswamy, J. Toner, and J. Prost, Nonequilibrium fluctuations, traveling waves, and instabilities in active membranes, Phys. Rev. Lett. **84**, 3494 (2000).
[9] A. P. Solon, H. Chaté, and J. Tailleur, From phase to microphase separation in flocking models: The essential role of nonequilibrium fluctuations, Phys. Rev. Lett. **114**, 068101 (2015).
[10] H. Chaté, Dry aligning dilute active matter, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **11**, 189 (2020).
[11] A. P. Solon and J. Tailleur, Revisiting the flocking transition using active spins, Phys. Rev. Lett. **111**, 078101 (2013).
[12] A. P. Solon and J. Tailleur, Flocking with discrete symmetry: The two-dimensional active Ising model, Phys. Rev. E **92**, 042119 (2015).
[13] S. Chatterjee, M. Mangeat, R. Paul, and H. Rieger, Flocking and reorientation transition in the 4-state active Potts model, Europhys. Lett. **130**, 66001 (2020).
[14] M. Mangeat, S. Chatterjee, R. Paul, and H. Rieger, Flocking with a $q$-fold discrete symmetry: Band-to-lane transition in the active Potts model, Phys. Rev. E **102**, 042601 (2020).
[15] A. Solon, H. Chaté, J. Toner, and J. Tailleur, Susceptibility of polar flocks to spatial anisotropy, Phys. Rev. Lett. **128**, 208004 (2022).
[16] S. Chatterjee, M. Mangeat, and H. Rieger, Polar flocks with discretized directions: The active clock model approaching the Vicsek model, Europhys. Lett. **138**, 41001 (2022).
[17] G. Orosz, R. E. Wilson, and G. Stépán, Traffic jams: dynamics and control, Philos. Trans. R. Soc. A **368**, 4455 (2010).
[18] D. Helbing, Traffic and related self-driven many-particle systems, Rev. Mod. Phys. **73**, 1067 (2001).
[19] K. Khakalo, K. Baumgarten, B. P. Tighe, and A. Puisto, Coarsening and mechanics in the bubble model for wet foams, Phys. Rev. E **98**, 012607 (2018).
[20] M. Moussaid, E. G. Guillot, M. Moreau, J. Fehrenbach, O. Chabiron, S. Lemercier, J. Pettré, C. Appert-Rolland, P. Degond, and G. Theraulaz, Traffic instabilities in self-organized pedestrian crowds, PLoS Comput. Biol. **8**, e1002442 (2012).
[21] H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, F. Peruani, and F. Raynaud, Modeling collective motion: Variations on the Vicsek model, Eur. Phys. J. B **64**, 451 (2008).
[22] H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, and F. Raynaud, Collective motion of self-propelled particles interacting without cohesion, Phys. Rev. E **77**, 046113 (2008).
[23] F. Peruani, T. Klauss, A. Deutsch, and A. Voss-Boehme, Traffic jams, gliders, and bands in the quest for collective motion of self-propelled particles, Phys. Rev. Lett. **106**, 128101 (2011).
[24] M. Karmakar, S. Chatterjee, M. Mangeat, H. Rieger, and R. Paul, Jamming and flocking in the restricted active Potts model, Phys. Rev. E **108**, 014604 (2023).
[25] B. J. Zubillaga, A. L. M. Vilela, M. Wang, R. Du, G. Dong, and H. E. Stanley, Three-state majority-vote model on small-world networks, Sci. Rep. **12**, 282 (2022).
[26] F. Ginelli, The physics of the Vicsek model, Eur. Phys. J. Spec. Top. **225**, 2099 (2016).
[27] G. Grégoire, H. Chaté, and Y. Tu, Moving and staying together without a leader, Physica D **181**, 157 (2003).
[28] See Supplemental Material at http://link.aps.org/supplemental/10.1103/PhysRevE.110.014109 for other sizes of the finite-$L$

phase diagram, complementary results about the order parameter $\phi$, and movies, which includes Ref. [29].

[29] J. A. Marqusee and J. Ross, Kinetics of phase transitions: Theory of Ostwald ripening, J. Chem. Phys. **79**, 373 (1983).

[30] E. Scalas and R. Fernando, Pair-correlation function in two-dimensional lattice gases, Phys. Rev. E **49**, 513 (1994).

[31] S. H. Tsai and S. R. Salinas, Fourth-order cumulants to characterize the phase transitions of a spin-1 Ising model, Braz. J. Phys. **28**, 58 (1998).

[32] A. P. Furlan, T. J. Oliveira, J. F. Stilck, and R. Dickman, Order-disorder transition in a two-dimensional associating lattice gas, Phys. Rev. E **100**, 022109 (2019).

[33] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

[34] K. Binder and D. P. Landau, Finite-size scaling at first-order phase transitions, Phys. Rev. B **30**, 1477 (1984).

[35] A. L. N. Dias, T. V. Rosembach, and R. Dickman (unpublished).

[36] F. Y. Wu, The Potts model, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).

[37] D. S. Cambui, A. S. De Arruda, and M. Godoy, Critical exponents of a self-propelled particles system, Physica A **444**, 582 (2016).

[38] N. Katyal, S. Dey, D. Das, and S. Puri, Coarsening dynamics in the Vicsek model of active matter, Eur. Phys. J. E **43**, 10 (2020).

[39] M. Romenskyy and V. Lobaskin, Statistical properties of swarms of self-propelled particles with repulsions across the order-disorder transition, Eur. Phys. J. B **86**, 91 (2013).

[40] M. Paoluzzi, D. Levis, and I. Pagonabarraga, From flocking to glassiness in dense disordered polar active matter, Commun. Phys. **7**, 57 (2024).