

# Caracterización de la formación de clusters en partículas activas a través de la formación de redes\*

Vázquez Aguilar Edmundo Ignacio.\*\*

*Instituto de Física*

*Universidad Nacional Autónoma de México*

(Dated: 7 de diciembre de 2022)

La materia activa, capaz de tomar energía de su entorno y transformarla en movimiento autopropulsado, ha sido un importante objeto de estudio interdisciplinario en los últimos años. La formación de separación de fase inducida por motilidad es un efecto colectivo de la materia activa que ha sido de gran interés, desarrollando trabajos encaminados a comprender la formación de esta separación de fase y el comportamiento del sistema cerca del punto crítico. En el presente trabajo se hace uso de simulaciones de Dinámica Browniana, para el estudio de la formación de clusters relacionados con la separación de fase inducida por motilidad. Además, se propone un nuevo método basado en ciencia de redes para caracterizar dicha formación de clusters en el sistema estudiado.

Keywords: Dinámica Browniana, Materia Activa, Redes, Componente Gigante.

## I. INTRODUCCIÓN

El estudio de materia activa ha cobrado mayor interés en los últimos años en campos como la biología, química, ecología y física [1]. El término Materia Activa se refiere a sistemas fuera de equilibrio de agentes autónomos, capaces de consumir energía de su entorno y convertirla en movimiento dirigido [2]. La materia activa abarca sistemas a diferentes escalas: desde motores biomoleculares, micro nadadores, hasta grupos de animales como parvas o cardúmenes [1]. Las colonias de bacterias [3], fluidos seminales y suspensiones acuosas de coloides activos son ejemplos de la llamada materia blanda activa, la cual su estudio es de principal interés por presentar propiedades reológicas y estructurales importantes que difieren del comportamiento de sistemas inertes [4]. Dichos sistemas previamente mencionados residen en el campo de estudio de la física fuera del equilibrio. Inspirándose en el movimiento de los microorganismos vivos, en los últimos años se han desarrollado partículas activas artificiales, tales como las *Partículas Janus*, que tienen un alto potencial de aplicación en campos como la medicina [2].

Existe un creciente interés en entender los efectos colectivos de la materia blanda activa. Entre todos los existentes quizá el más estudiado es la *Separación de fase inducida por motilidad* [5] (MIPS por sus siglas en inglés “*motility-induced phase separation*”) el cuál involucra la coexistencia de dos fases a distintas densidades. La diferencia entre la formación de MIPS y una separación de fase normal es que en la primera no existe una fuerza termodinámica que lleve al sistema a dicha separación. Mientras que en fluidos en equilibrio la interacción atractiva entre partículas es lo que da origen a la separación de fase, en MIPS esta separación es inducida por el movimiento autopropulsado de las partículas [5]. Conceptualmente el

origen de la MIPS es sencillo: dado que cuando las partículas autopropulsadas están acumuladas en una región se mueven más lentamente en comparación a cuando no lo están, su velocidad de autopropulsión decrece cuando la densidad aumenta debido a las colisiones o interacciones químicas y esto lleva a un ciclo de retroalimentación que induce la formación de una fase densa [6].

Entre los modelos desarrollados para estudiar a las partículas activas, el modelo de *partículas Brownianas activas* (ABPs) es uno de los utilizados para caracterizar la formación de MIPS [7], con la ventaja que puede ser simulado computacionalmente de forma sencilla [8], particularmente a través del método de Dinámica Browniana [9]. ABPs ha sido utilizado para construir un diagrama de fase de que caracterice la MIPS, además, se han desarrollado trabajos en dirección a modelar dicho diagrama como el *Modelo cinético de MIPS en ABPs* [10] y la descripción de la presión mecánica en ABPs usando el formalismo de la *ley de áreas iguales de Maxwell* [11]. Sin embargo, el entender el comportamiento de la separación de fase cerca de su punto crítico es una necesidad vigente, debido a las discrepancias existentes en la literatura [5].

Durante las últimas tres décadas se ha observado el potencial de aplicar el formalismo de redes a numerosos y variados temas en ciencia, desde neurobiología hasta la física estadística [12]. En el presente trabajo proponemos una nueva forma de caracterizar la formación de MIPS: a través de la formación de redes cuyos nodos son conectados a través de una regla relacionada con la distancia entre partículas, esto usando simulaciones de dinámica molecular

La organización del presente trabajo es la siguiente: en la sección II se abordará el método de simulación de Dinámica Browniana, en la sección III.A se presentará los primeros resultados de las simulaciones realizadas en ABPs con la intención de encontrar la MIPS, en la sección III.B se comentará la caracterización de MIPS a través de la formación de redes y se discutirán los resultados obtenidos, finalmente, en la sección IV se presentarán las conclusiones.

\* Trabajo presentado como proyecto final en Física Estadística computacional.

\*\* [edmundova@estudiantes.fisica.unam.mx](mailto:edmundova@estudiantes.fisica.unam.mx)

## II. DINÁMICA BROWNIANA DE PARTÍCULAS ACTIVAS

### A. Caso pasivo

El movimiento Browniano de una suspensión coloidal se caracteriza por la ecuación de *Langevin* [13]:

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \mathbf{F} - \lambda \mathbf{v}(t) + \boldsymbol{\eta}(t) + \mathbf{F}_{ext}, \quad (1)$$

donde  $m$  y  $\mathbf{v}$  son la masa y velocidad de la partícula browniana respectivamente;  $\lambda$  es el coeficiente de fricción,  $\mathbf{F}_{ext}$  es una fuerza externa actuando sobre la partícula y  $\boldsymbol{\eta}(t)$  es una fuerza aleatoria gaussiana que satisface

$$\langle \eta \rangle = 0 \quad (2)$$

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2\lambda k_B T \delta(t - t'), \quad (3)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura del sistema. La solución a la ecuación (1) en el caso de una dimensión para una partícula libre en una dimensión es:

$$v(t) = v(0) e^{-\Gamma t} + \frac{1}{m} \int_0^t e^{-\Gamma(t-s)} \eta(s) ds, \quad (4)$$

donde  $\Gamma = \lambda/m$ . A partir de esta solución es posible obtener una expresión analítica para el *desplazamiento al cuadrado* [14], cuyo límite asintótico ( $t \rightarrow \infty$ ) tiene un comportamiento lineal, mientras que a tiempos cortos se tiene una dependencia cuadrática predominante. Por lo anterior, al régimen de tiempos cortos se le conoce como balístico, mientras que el régimen a tiempos largos se le conoce como difusivo.

El método de Dinámica Browniana es una técnica usada para simular sistemas físicos que son impulsados por fluctuaciones térmicas [15], como las suspensiones coloidales. En este método el medio es considerado continuo y la interacción entre partículas debe ser considerada. La forma en la que las posiciones de las partículas del sistema son actualizadas es a través de la solución discretizada de la ecuación de Langevin, la solución discretizada es comúnmente obtenida a través del *método de Euler*, que para la  $i$ -ésima partícula es del tipo

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{F}_i(t) + W_i(t), \quad (5)$$

donde  $\Delta t$  representa el paso de integración y  $W_i$  es ruido gaussiano con media 0 y varianza 1. Cabe destacar que ahora  $t$  no se trata de una variable continua, sino de pasos discretos (*para más información acerca de la implementación del método de Dinámica Browniana se recomienda revisar la referencia [16]*).

### B. Caso activo

En un entorno homogéneo dos-dimensional, el movimiento de una partícula activa puede ser modelado como

la combinación de tres procesos: un proceso de difusión aleatoria, una fuerza interna autopropulsante y, en el caso de partículas quirales activas, una torca [8]. Además si se considera el caso en el que las partículas interactúan a través de un potencial de interacción, habrá un tercer proceso asociado a interacción a pares entre partículas [7]. La posición  $(x(t), y(t))$  de una partícula esférica de radio  $R$  está caracterizada por un coeficiente browniano de difusión traslacional

$$D_T = \frac{K_B T}{6\pi\eta R}, \quad (6)$$

donde  $\eta$  es la viscosidad del fluido. Una forma sencilla de modelar la actividad de la partícula es considerar que se mueve con una velocidad de autopropulsión constante y con una dirección que depende de la orientación de la partícula como se muestra en la figura 1. La orientación  $\varphi$  estará relacionada a un coeficiente de difusión rotacional

$$D_R = \frac{K_B T}{8\pi\eta R^3}. \quad (7)$$

Para medir la longitud de persistencia de una partícula activa es útil usar el número de Péclet

$$Pe = \frac{3v}{D_R \sigma}, \quad (8)$$

esta cantidad está normalizada por  $\sigma$ , el diámetro de la partícula. En la formación de MIPS,  $Pe$  hace el rol del inverso de la temperatura.

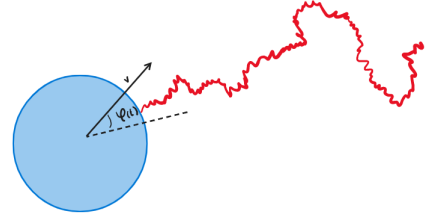


Figura 1. Ejemplo de la trayectoria de una partícula browniana activa

En el caso dos-dimensional, no considerando fuerzas externas o torcas y despreciando efectos inerciales al estar a un número de Reynolds bajo [2]; las ecuaciones de Langevin que describen este movimiento de un sistema de partículas activas son

$$\frac{d}{dt} \varphi_i(t) = \sqrt{2D_R} W_\varphi, \quad (9)$$

$$\frac{d}{dt} x_i(t) = v \cos \varphi(t) + \sum_j F_{xi,j} \Delta t + \sqrt{2D_T} W_x, \quad (10)$$

$$\frac{d}{dt} y_i(t) = v \sin \varphi(t) + \sum_j F_{yi,j} \Delta t + \sqrt{2D_T} W_y, \quad (11)$$

donde  $F_{xi,j}$ ,  $F_{yi,j}$  son las componentes  $x, y$  de las fuerzas de interacción entre pares de partículas respectivamente, mientras que  $W_\varphi$ ,  $W_x$  y  $W_y$  representan ruidos gaussianos blancos interdependientes. A partir de esta solución también es posible obtener una expresión analítica para el *desplazamiento al cuadrado*, cuyo límite asintótico ( $t \rightarrow \infty$ ) tiene un comportamiento lineal, mientras que a tiempos cortos se tiene una dependencia cuadrática predominante; al régimen de tiempos cortos se le conoce como balístico, mientras que el régimen a tiempos largos se le conoce como difusivo, sin embargo, el régimen balístico en este caso dependerá de la velocidad de autopropulsión [2]. Al igual que en el caso pasivo, para poder aplicar el método de dinámica browniana es necesario obtener las soluciones discretizadas de las ecuaciones (9), (10) y (11), cuyas soluciones son

$$\varphi_i = \varphi_{i-1} + \sqrt{2D_R\Delta t}W_{\varphi,i}, \quad (12)$$

$$x_i = x_{i-1} + v \cos \varphi_{i-1} \Delta t + \sum_j F_{xi,j} \Delta t + \sqrt{2D_T\Delta t}W_{x,i}, \quad (13)$$

$$y_i = y_{i-1} + v \sin \varphi_{i-1} \Delta t + \sum_j F_{yi,j} \Delta t + \sqrt{2D_T\Delta t}W_{y,i}, \quad (14)$$

### III. RESULTADOS

#### A. Formación de clusters

Se realizaron simulaciones de dinámica browniana de partículas activas (usando las ecuaciones (12), (13) y (14) como reglas de actualización del sistema) para sistemas a distintas densidades número partículas. En todas las simulaciones fueron usadas unidades adimensionales de temperatura, haciendo  $T^* = T/K_B$  con  $K_B$  la constante de Boltzmann. En todos los sistemas fue utilizado  $D_T = D_R = 1$  y  $T^* = 1$  para simplificar las conversiones en la simulación. Lo anterior hace que los parámetros libres en el sistema a un número de partículas fijo sean la fracción de empaquetamiento  $\phi$ , definida a partir de la densidad  $\phi = 4\rho^*/\pi = 4/\phi(A\sigma/N)$  con  $A$  el área de simulación y  $\sigma$  el diámetro de las partículas; y la velocidad de autopropulsión  $v$ . En todas las simulaciones se usó el potencial de interacción repulsivo  $WCA$  (véase apéndice A), condiciones de frontera periódicas así como la condición de *mínima imagen* en la caja de simulación para asegurar que el sistema fuera termodinámicamente representativo. Además, se utilizó el criterio de *radio de corte* al calcular el potencial entre partículas para agilizar los tiempos de cómputo. En todas las realizaciones el paso de integración fue  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}s$  y el diámetro de las partículas fue de  $\sigma = 1,0\mu m$ .

Con el fin del comprobar que el sistema simulado fuera correcto, se realizaron simulaciones a  $N = 121$  partículas

y  $\phi = 0,5$ , realizando  $2 \times 10^6$  pasos de simulación; en las que se calculó el desplazamiento cuadrático medio cada 100 pasos de integración, variando la velocidad de autopropulsión a  $v = 0\mu m/s$ ,  $v = 1\mu m/s$ ,  $v = 2\mu m/s$ ,  $v = 5\mu m/s$  y  $v = 10\mu m/s$ . En la figura 2 se muestran las curvas del desplazamiento cuadrático medio (MSD) a las velocidades mencionadas. Puede notarse que a  $v = 0$  se obtiene un comportamiento puramente difusivo, mientras que, conforme la velocidad incrementa, el comportamiento balístico a tiempos cortos se hace cada vez más presente y es especialmente notorio a  $v = 5\mu m/s$  y  $v = 10\mu m/s$ . Esto confirma que el sistema simulado es correcto.

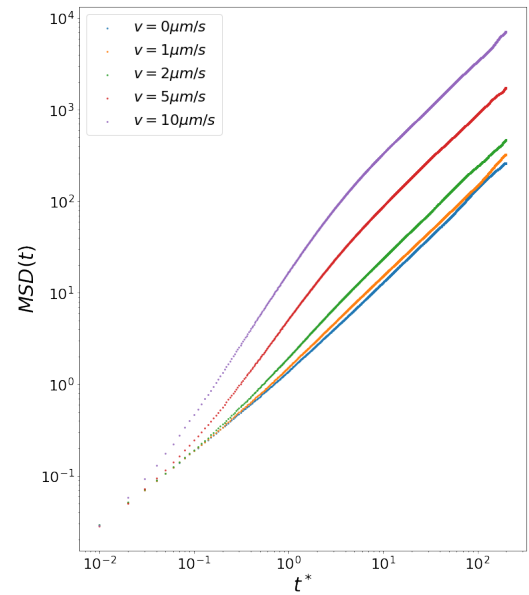


Figura 2. Desplazamiento cuadrático medio a distintas velocidades de autopropulsión  $v$ , a  $N = 121$  partículas,  $\phi = 0,5$ .

Para la búsqueda cualitativa de la formación de clusters se intentaron sistemas con distinto número de partículas, encontrando que, para  $N = 625$  era el sistema más pequeño en el que se podía formar clusters con dos regiones de densidad definidas, por lo que se escogió analizar sistemas a este número de partículas para optimizar los tiempos de cómputo. En todas las simulaciones se comenzó con un arreglo de red cuadrada y se dejó evolucionar el sistema hasta que formara un arreglo aleatorio de partículas y a partir de ahí comenzar a analizar el sistema. Un ejemplo de la formación de clusters es el mostrado en la figura 3, donde es posible observar la forma compacta en la que las partículas en la zona de mayor densidad están dispuestas, formando arreglos hexagonales entre ellas, lo cual es un ejemplo de la formación de la fase hexática. [7].

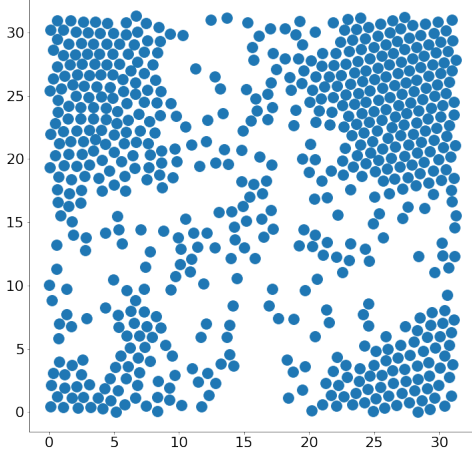


Figura 3. Formación de clusters para un sistema de  $N = 625$  partículas,  $v = 40\mu\text{m/s}$  y  $\phi = 0,5$ .

### B. Caracterización de la formación de clusters usando ciencia de redes

Utilizando el formalismo de ciencia de redes [12] se buscó caracterizar los clusters formados a partir de simulaciones con  $N = 625$  partículas, variando la fracción de empaquetamiento  $\phi$  y la velocidad de autopropulsión  $v$  respectivamente. Se caracterizaron redes en las que había un nodo representando a cada partícula y se aplicó la siguiente condición para establecer un enlace entre nodos:

$$\text{Si } r_{i,j} < r_{\min}, \text{ entonces, establecer un enlace entre el nodo } i \text{ y } j.$$

Donde  $r_{i,j}$  es la distancia bidimensional entre dos partículas y  $r_{\min} = 2^{1/6}\sigma$ . En las figuras 4, 5 y 6 se muestra la red de enlaces formados a  $t = 20\Delta t$ ,  $t = 2000\Delta t$  y  $t = 9000\Delta t$  pasos de integración, lo cual ilustra de forma cualitativa una relación entre la posible formación de clusters y el crecimiento de la *Componente Gigante* o la primera componente más conectada (LCC) de la red. Para el análisis se eligió comparar el tamaño de la primera componente más conectada de la red (LCC) y la segunda componente más conectada (SLCC) a lo largo de distintos pasos de integración.

En las figuras 7 y 8 se muestra el comportamiento de LCC y SLCC respectivamente. De estas es posible observar que a mayores tiempos de simulación, LCC y SLCC crecen de acuerdo a una ley de potencias. Sin embargo a partir de  $t^* \sim 10^{-1}s$  (aproximadamente  $10^3\Delta t$ ) LCC comienza a saturar a un valor del orden de  $N \sim 10^2$  mientras que SLCC decae a  $N \sim 10^1$ , esto concuerda con el tiempo que le toma al sistema formar una fase densa y otra diluida, por lo cual se exhibe una relación

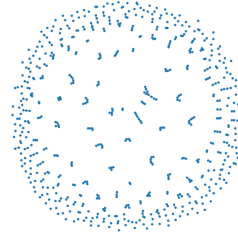


Figura 4. Red de enlaces formados a  $t = 20\Delta t$  pasos de integración.

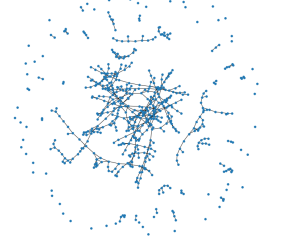


Figura 5. Red de enlaces formados a  $t = 2000\Delta t$  pasos de integración.

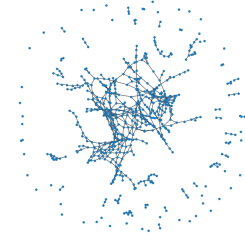


Figura 6. Red de enlaces formados a  $t = 9000\Delta t$  pasos de integración.

en el comportamiento entre LCC, SLCC y la formación de clusters.

Para explorar más la relación entre LCC, SLCC y la formación de clusters, se analizó el tamaño de estas componentes a lo largo del tiempo de simulación para sistemas de  $N = 625$  partículas,  $v = 40\mu\text{m/s}$  y distintos valores de la fracción de empaquetamiento  $\phi$ . En la figura 9 se muestra el comportamiento de LCC respecto al tiempo de simulación para distintos valores de la fracción de empaquetamiento  $\phi$ . En este caso se muestra el tamaño de LCC hasta valores de  $t^* \sim 10^1$ . Se observa que en todas las densidades analizadas, saturan a partir de cierto tiempo, el cual cada vez es menor conforme aumenta la fracción de empaquetamiento. Para  $\phi = 0,6$ ,  $\phi = 0,7$  y  $\phi = 0,85$  la saturación es tan rápida que la transición no se ve reflejada en la figura 9.

Por otro lado, también se exploró el comportamiento de SLCC respecto a  $\phi$ , sin embargo, no se encontró una tendencia clara como si se muestra en LCC. Sin embargo, cuando se analiza la relación entre LCC y SLCC a distintas densidades, se obtienen una gráfica interesante, la cual se muestra en la figura 10. Lo primero que resalta es que existe una clara separación de regiones, correspondientes cada una a diferentes valores de  $\phi$ , además, conforme el tamaño de LCC aumenta, también lo hace el tamaño de SLCC hasta llegar a cierto valor crítico, donde a mayores valores de LCC, SLCC decae, lo cual indica una relación clara entre estas variables y la fracción de empaquetamiento  $\phi$ .

También se realizó un análisis similar al comentado previamente, variando la velocidad de autopropulsión y

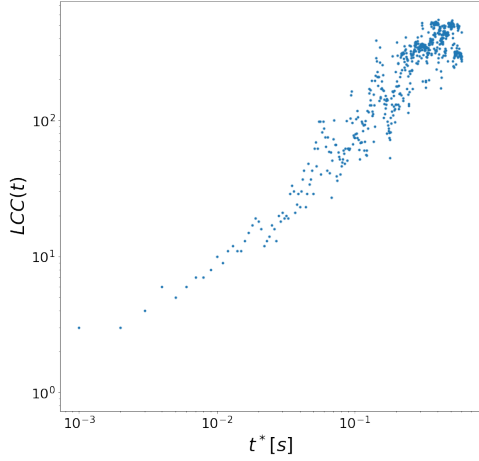


Figura 7. Primera componente más conectada (LCC) a respecto al tiempo de simulación, para  $\phi = 0,5$  y  $v = 40\mu m/s$ .

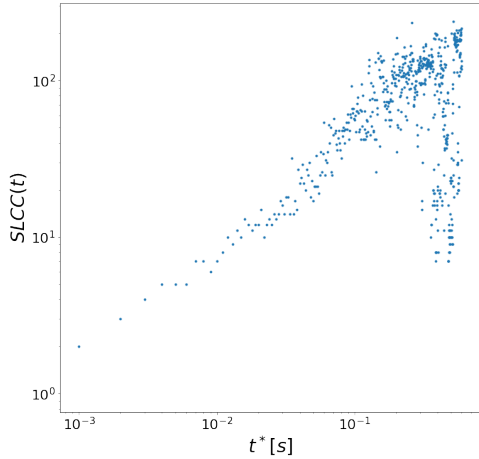


Figura 8. Segunda componente más conectada (LCC) a respecto al tiempo de simulación, para  $\phi = 0,5$  y  $v = 40\mu m/s$ .

manteniendo una densidad constante, sin embargo, en este caso, no fue posible encontrar una separación entre regiones de velocidad bien definidas.

#### IV. CONCLUSIONES

Se implementó el algoritmo de Dinámica Browniana para partículas activas considerando un potencial de interacción repulsivo, localizando de forma cualitativa la formación de clusters y posibles MIPS, después se analizó la formación de clusters con el incremento de LCC y SLCC. Aunque se observa una relación entre el incremen-

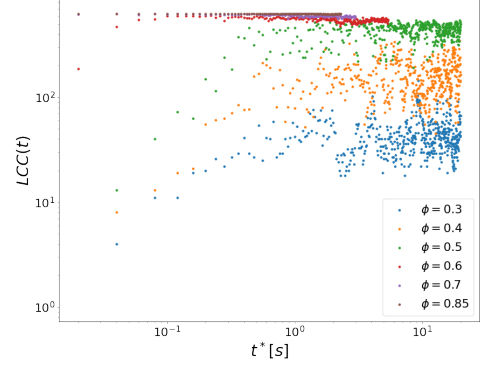


Figura 9. Primera componente más conectada (LCC) a respecto al tiempo de simulación, para  $v = 40\mu m/s$  y distintos valores de la fracción de empaquetamiento  $\phi$ .

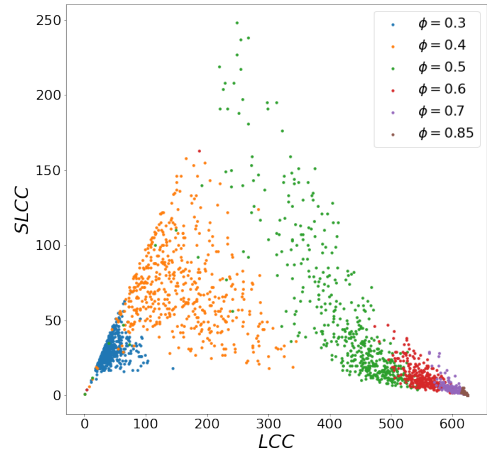


Figura 10. LCC vs SLCC a distintos valores de la fracción de empaquetamiento  $\phi$ .

to de LCC y la formación de clusters, esta sigue siendo de carácter cualitativo. Una opción para convertirla en un análisis cuantitativo es aplicar de forma más exhaustiva el formalismo de ciencia de redes, por ejemplo, buscar una relación entre las últimas gráficas mostradas y el coeficiente de clustering. otra opción es aplicar algoritmos de clasificación para poder determinar un criterio en el que la formación de clusters pueda llevarse a cabo. El tamaño del sistema analizado dificulta la capacidad para discernir si lo observado es efectivamente la presencia de MIPS, valdría la pena realizar este análisis usando un número mayor de partículas, sin embargo, esto provocaría que fuera más costoso computacionalmente.



## V. AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Doctor Alexis Torres Carbajal, ya que gracias a su instrucción y su código base en FORTRAN me fue posible partir para desarrollar el presente proyecto [17]. Agradezco a mi tutor, el Doctor Juan Rubén Gómez Solano por sus constantes recomendaciones, a mis compañeros Christian Colorado y Jeison Rojas por sus recomendaciones en redes. Por ultimo agradezco al profesor, el Doctor Alejandro Perez Riascos por todo lo impartido.

## VI. APÉNDICE A: POTENCIAL WCA

El potencial de *Mie* es usado en simulaciones de fluidos y suspensiones coloidales, se define de la siguiente manera [18]:

$$U_{Mie}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^n - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^m \right], \quad (15)$$

donde  $\epsilon = 1/K_B T$  es la energía de dispersión (siendo  $K_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura),  $r$  es la distancia entre moléculas,  $\sigma$  es el diámetro de la partícula, mientras que  $n$  y  $m$  pueden tomar distintos valores según el sistema que se desee modelar. Un caso particular del potencial de Mie es el potencial de *Lennard-Jones* [19] con  $n = 12$  y  $m = 6$  definido como:

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (16)$$

en este, se tiene un término repulsivo con una pendiente muy empinada y un término atractivo más suave, que representa las fuerzas de dispersión de London. El potencial de *Lennard-Jones* es el más común en las simulaciones actualmente por representar de manera correcta una gran cantidad de fluidos.

En 1971, *Weeks, Chandler y Andersen* [20] tomaron el potencial de *Lennard-Jones* y lo dividieron en su parte atractiva y repulsiva con el fin de estudiar sus correspondientes estructuras de equilibrio. derivado de lo anterior surgió el potencial que ahora es conocido como *WCA* (*Weeks, Chandler, Andersen*), cuya parte atractiva se define de la forma:

$$U_{WCA}(r) = \begin{cases} U_{LJ} + \epsilon, & r \leq r_{min} \\ 0, & r > r_{min}, \end{cases} \quad (17)$$

donde  $U_{LJ}$  es el potencial de *Lennard-Jones* definido en la ecuación (16) y  $r_{min} = 2^{1/6}\sigma$  es la distancia correspondiente a la del mínimo del potencial  $U_{min}$ . Este potencial es útil cuando se quiere recuperar únicamente la componente repulsiva del potencial de *Lennard-Jones*.

- 
- [1] G. Gompper, R. G. Winkler, T. Speck, A. Solon, C. Nardini, F. Peruani, H. Löwen, R. Golestanian, U. B. Kaupp, L. Alvarez, *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**, 193001 (2020).
  - [2] C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichhardt, G. Volpe, and G. Volpe, *Reviews of Modern Physics* **88**, 045006 (2016).
  - [3] C. H. Ramos, E. Rodríguez-Sánchez, J. A. A. Del Angel, A. V. Arzola, M. Benítez, A. E. Escalante, A. Franci, G. Volpe, and N. Rivera-Yoshida, *Science Advances* **7**, eabh2278 (2021).
  - [4] M. C. Marchetti, J.-F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, and R. A. Simha, *Reviews of modern physics* **85**, 1143 (2013).
  - [5] J. Stenhammar, arXiv preprint arXiv:2112.05024 (2021).
  - [6] M. E. Cates and J. Tailleur, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**, 219 (2015).
  - [7] R. C. Maloney and C. K. Hall, *Langmuir* **36**, 6378 (2020).
  - [8] G. Volpe, S. Gigan, and G. Volpe, *American Journal of Physics* **82**, 659 (2014).
  - [9] D. L. Ermak and J. A. McCammon, *The Journal of chemical physics* **69**, 1352 (1978).
  - [10] G. S. Redner, M. F. Hagan, and A. Baskaran, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 055701 (2013).
  - [11] J. U. Klamser, S. C. Kapfer, and W. Krauth, *Nature communications* **9**, 1 (2018).
  - [12] M. Newman, *Networks* (Oxford university press, 2018).
  - [13] D. S. Lemons and A. Gythiel, *American Journal of Physics* **65**, 1079 (1997), <https://doi.org/10.1119/1.18725>.
  - [14] W. Coffey and Y. P. Kalmykov, *The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering*, Vol. 27 (World Scientific, 2012).
  - [15] G. A. Huber and J. A. McCammon, *Trends in chemistry* **1**, 727 (2019).
  - [16] R. Erban, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **470**, 20140036 (2014).
  - [17] A. Torres-Carbajal, *Two dimensional brownian dynamics* (2022).
  - [18] A. E. Nasrabad, *The Journal of chemical physics* **128**, 154514 (2008).
  - [19] J. E. Jones, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **106**, 441 (1924).
  - [20] J. D. Weeks, D. Chandler, and H. C. Andersen, *The Journal of chemical physics* **54**, 5237 (1971).