

Contraste de dinámicas vectorial *vs* angular, para sistemas con movimiento colectivo de partículas autopropulsadas.

Informe trabajo final

Noacco Rosende, Santiago J.

Cátedra de Simulaciones Computacionales 2018, FCE-UNLP

26 de mayo del 2019

Resumen

Reproducción del modelo de Vicsek *et al.* en 2D implementando dos dinámicas distintas: Angular y Vectorial diferenciadas por la naturaleza intrínseca del ruido. Una vez simulados, se contrastan ambos modelos viendo en particular la dependencia del parámetro de orden PO como función del ruido η . El estudio de la susceptibilidad y el cumulante de Binder permitió determinar que la transición de fase es de 1^{er} orden para ambas dinámicas y estimar los ruidos críticos $\eta_c^{(ang)} \simeq 0,35$ y $\eta_c^{(vec)} \simeq 0,5$.

1 Introducción

Para estudiar sistemas complejos de partículas cooperativas, Vicsek *et al.* introduce por primera vez en 1995, un modelo de partículas autopropulsadas (*SSP*). La naturaleza del comportamiento de estas partículas puede modelarse como un sistema fuera de equilibrio, puesto que estas disipan energía continuamente para trasladarse. El tipo de sistema que emulan estas partículas presentan una fase de movimiento ordenado, producto de la ruptura espontánea de alguna simetría continua. Esta característica permite introducir un parámetro de orden, y en consecuencia establecer similitudes con sistemas en equilibrio; por ejemplo estudiando la transición de fase. Luego, mediante técnicas como escaleo de tamaño finito se logra estimar los valores de los exponentes críticos en el límite termodinámico del sistema., pudiendo introducir una clase de

universalidad.[1]

La sencillez del modelo permitió extrapolarlo a varios sistemas físicos y biológicos, como enjambres de insectos, poblaciones de bacterias o sistemas de tránsito.[2][3] Por esta característica de adaptabilidad resulta atractivo ahondar en el conocimiento del sistema; lo cuál desde un punto de vista físico-estadístico implica responder a interrogantes cómo: determinar a qué clase de universalidad pertenece, interpretar la transición de fase o explorar las consecuencias de distintas dinámicas. Con el fin de abordar algunos de los puntos anteriores, a continuación se detalla el modelo original de Vicsek; al cual nos referiremos como “Escalar” o “Angular”, indistintamente.

1.1 Modelo Escalar/Angular

El modelo consiste en N partículas contenidas en una caja de longitud L , cuya dinámica

está dada por una regla de evolución temporal (que incluye un ruido aleatorio) y condiciones de contorno periódicas. En el caso Angular, el módulo de la velocidad v_0 de todas las partículas es el mismo y es constante. Pero a cada paso, cada una de ellas actualiza la dirección del vector velocidad en función de la dirección promedio de las partículas vecinas dentro de un radio R_0 ; más la fluctuación aleatoria. Esto se expresa en las siguientes cuatro ecuaciones:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_j^{t+\Delta t} &= \mathbf{r}_j^t + \Delta t \mathbf{v}_j^{t+\Delta t} \\ \mathbf{v}_j^{t+\Delta t} &= (v_{xj}^{t+\Delta t}, v_{yj}^{t+\Delta t}), \end{aligned} \quad (1)$$

con

$$\begin{aligned} v_{xj}^{t+\Delta t} &= v_0 \cos \theta_j^{t+\Delta t} \\ v_{yj}^{t+\Delta t} &= v_0 \sin \theta_j^{t+\Delta t} \end{aligned} \quad (2)$$

donde Δt es el paso temporal (que en general, y a continuación, se toma arbitrariamente igual a 1 paso de MonteCarlo (*MCS*)). Además, \mathbf{r}_j y \mathbf{v}_j los respectivos vectores de posición y velocidad de la partícula j -ésima, y el ángulo que determina la dirección de la evolución de la trayectoria dado por:

$$\theta_j^{t+\Delta t} = \text{Atan}\left(\frac{v_{yj}^t - s_{yj}^t}{v_{xj}^t - s_{xj}^t}\right) + \eta \xi_j^t \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_j^t &= (\sum_k n_{jk}^t v_{xk}^t, \sum_k n_{jk}^t v_{yk}^t) \\ n_{jk}^t &= \begin{cases} 1 & \text{si } \|r_j^t - r_k^t\| < R_0 \\ 0 & \text{si } \|r_j^t - r_k^t\| > R_0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

con n_{jk} la matriz de vecinos de la partícula j -ésima en un radio R_0 , \mathbf{s}_j^t la velocidad promedio de los vecinos a tiempo t de la partícula j -ésima, η un ruido (usualmente $\in [0, 1]$) y ξ una perturbación aleatoria.

De esta manera el comportamiento del sistema está caracterizado por los parámetros: densidad $\rho = N/L^2$, η y el *PO* $|\phi(t)|$. Este

último dado por:

$$|\phi(t)| = \frac{1}{N} \left\| \sum_j^N \mathbf{v}_j^t \right\| \quad (5)$$

que puede ser interpretado como la velocidad del centro de masas del conjunto de partículas. Estas características son propias y aplicables a todas las dinámicas que conforman la *clase de Vicsek*. [2]

Esta clase hace referencia a la clase de universalidad a la cual pertenece este modelo y muchas de sus variaciones. De estas últimas cabe destacar: generalizar el modelo a 3D, modificar la naturaleza de la dinámica o tomar en cuenta el tipo de fluido en el cuál se encuentran inmersas las partículas. [4] En particular, nos enfocaremos en el modelo vectorial.

1.2 Modelo Vectorial

Dado que se implementó la dinámica en dos dimensiones, se encuentran numerosas similitudes respecto al modelo angular. Cabe destacar que tanto las condiciones de contorno, como varias magnitudes definidas anteriormente siguen valiendo. En particular se reutilizan las ecuaciones (1), (4) y (5). La diferencia radica en la dinámica implementada, donde en lugar de (2) tendremos:

$$\begin{aligned} v_{xj}^{t+\Delta t} &= F(\mathbf{s}_j^{t+\Delta t}, v_0, G) \frac{s_{xj}^{t+\Delta t}}{\|\mathbf{s}_j^{t+\Delta t}\|} \\ v_{yj}^{t+\Delta t} &= F(\mathbf{s}_j^{t+\Delta t}, v_0, G) \frac{s_{yj}^{t+\Delta t}}{\|\mathbf{s}_j^{t+\Delta t}\|} \end{aligned} \quad (6)$$

y la evolución de \mathbf{s} viene dada componente a componente por:

$$\begin{aligned} s_{xj}^{t+\Delta t} &= \frac{s_{xj}^t}{v_0} + m_j \eta \cos \xi^t \\ s_{yj}^{t+\Delta t} &= \frac{s_{yj}^t}{v_0} + m_j \eta \sin \xi^t \end{aligned} \quad (7)$$

con \mathbf{s}^t dada por (4). Así mismo se introdujo la amplitud F , con el fin de que la variación de $\|v\|$ tienda a $\|v_0\|$. En concreto se utilizó:

$$F(\mathbf{s}_j^{t+\Delta t}, v_0, G) = 1 + G\left(\frac{v_0}{\|\mathbf{s}_j^{t+\Delta t}\|} - 1\right), \quad (8)$$

siendo G un parámetro que regula el apan-tallamiento.

En este trabajo se contrasta la dinámica de Vicsek escalar frente a la dinámica vectorial. Para ello se implementó tanto el modelo original de *Vicsek et al.* en 2 dimensiones como su análogo con la dinámica vectorial para $G = 0$; y se analiza el comportamiento del parámetro de orden, la susceptibilidad y el cumulante de Binder de este, como función del ruido η .

2 Métodos

Se simuló la dinámica angular en las siguientes condiciones:

- $v_0 = 1, 25$,
- $\eta \in [0, 1 : 0, 8]$,
- $\rho = 1$,
- $\Delta t_m = 200 \text{ MCS}$,
- $t_f = 100000 \text{ MCS}$,
- $N = \{225, 400, 625, 841, 1024\}$,

con Δt_m el período de medición y t_f el tiempo final de medición. Para la dinámica vectorial las condiciones fueron las mismas de la angular, salvo por: $N = \{225, 625, 1024\}$ y $G = 0$. Se simuló la dinámica para distintos valores de η y a cada Δt_m se tomaron medidas del $|\phi(t)|$.

Como consecuencia directa de la medida del observable es posible reproducir la evolución temporal del $|\phi(t)|$. En esta instancia se realizó el estudio de la autocorrelación temporal

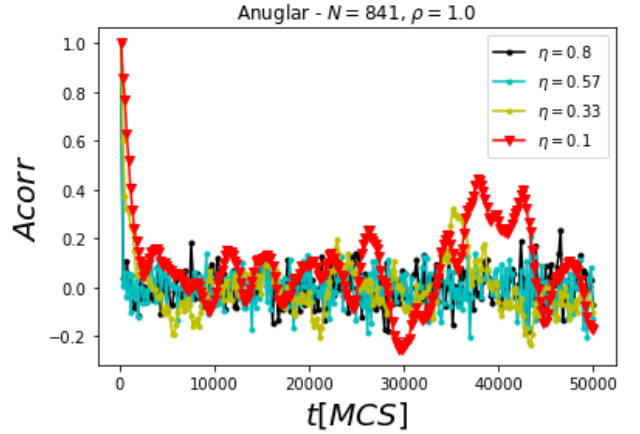


Figura 1: Autocorrelación temporal conectada y normalizada *vs t* para $N = 841$ y cuatro valores de η .

conectada $Acorr$ para cada ruido, con el objetivo de calcular el tiempo de equilibrio τ_{eq} . Para ello se estimó $Acorr$ según:

$$\begin{aligned} Acorr(i) &= \frac{1}{Nm-i} \sum_j^{Nm-i} \delta PO_j \delta PO_{j+i} \\ \delta PO_j &= PO_j - \langle PO \rangle \\ Nm &= t_f / \Delta t_m - tEq \end{aligned} \quad (9)$$

es decir que Nm es el número de medidas a partir de un tiempo de equilibración tEq ; que pedimos cumpla de manera autoconsistente $2\tau_{eq} \leq tEq \leq 5\tau_{eq}$. Entendiendo por τ_{eq} el tiempo característico de $Acorr$ que surge del ajuste de:

$$f = A \exp(-t/\tau_{eq}) + y_0. \quad (10)$$

En la figura 1 se observa este procedimiento para distintos valores de η . Como resultado se obtienen los distintos valores de τ_{eq} para cada η ; lo cuál se puede ver en la figura 2 para $N = 841$. Este análisis previo nos permite asegurarnos de promediar medidas independientes.

3 Resultados y discusión

Una vez conocido τ_{eq} para cada evento se estimó el valor medio del PO , esto es $\langle |\phi| \rangle$;

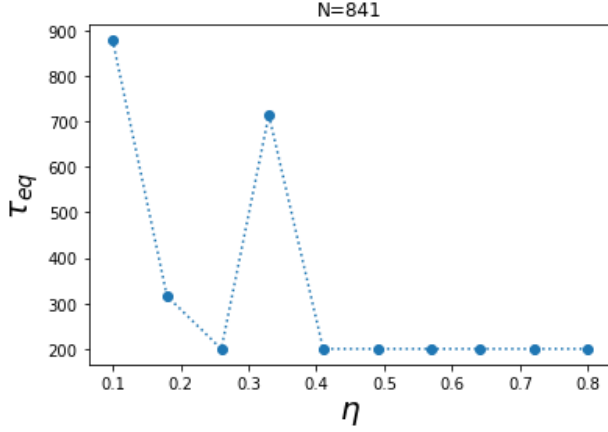


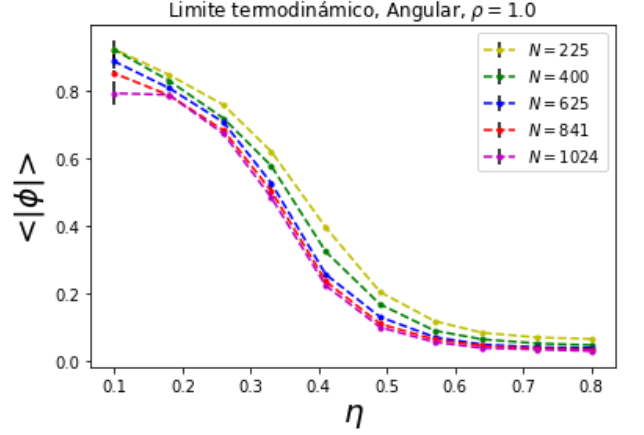
Figura 2: τ_{eq} vs η para $N = 841$, como resultado del ajuste de *Acorr* por (10). Este gráfico es meramente ilustrativo de la estimación de τ_{eq} , un estudio minucioso de su comportamiento para distintos valores de N realizó Chaté *et al.* en [4].

con $\langle . \rangle$ el promedio temporal. Tal como manifiesta la figura 3(a), donde se presenta la evolución de $\langle |\phi| \rangle$ como función de η , se reprodujo satisfactoriamente el resultado de Vicsek *et al.*

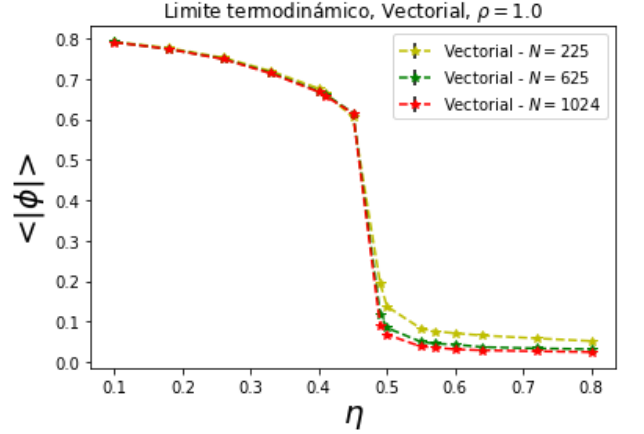
A simple vista parece que $\langle |\phi| \rangle$ presenta una típica transición de 2^{do} orden, puesto la curva de la figura 3(a) parece no presentar discontinuidades. Al estudiar el límite termodinámico, se aprecia que las curvas tienden a marcar una pendiente más abrupta alrededor de la transición conforme aumenta el tamaño de la muestra. Esto abre la posibilidad de que la transición que tiene lugar sea verdaderamente de 1^{er} orden. No obstante, la evidencia expuesta hasta ahora no respalda esta hipótesis de manera contundente.

Con respecto a la dinámica Vectorial en la figura 3(b) se ve que $\langle |\phi| \rangle$ atraviesa una transición de 1^{er} orden, dado que la discontinuidad del parámetro de orden como función del ruido es evidente.

Para continuar estudiando la naturaleza de la transición, se calculó la susceptibilidad y el comulante de Binder (CB) asociados a $\langle |\phi| \rangle$, para cada tamaño de muestra. La primera de las mencionadas cantidades se define, por

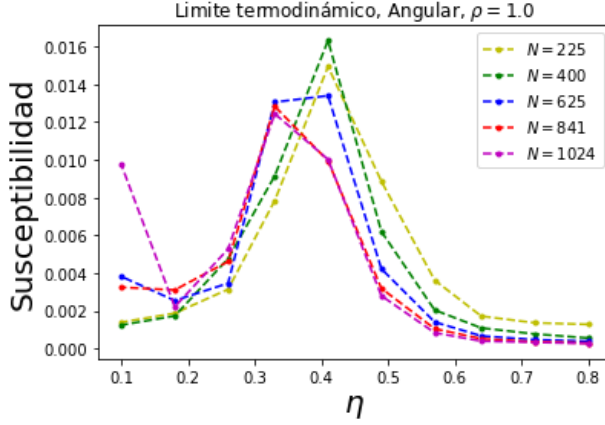


(a) Angular

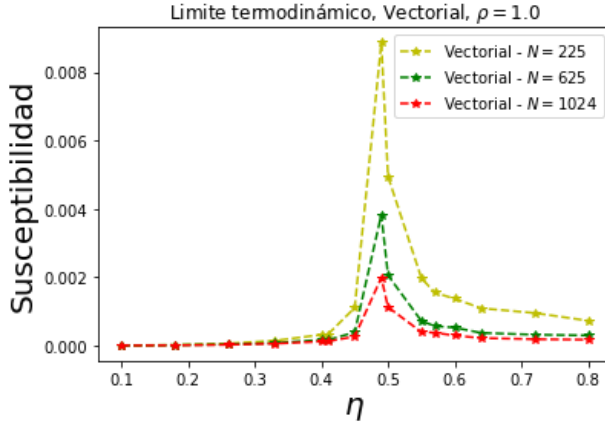


(b) Vectorial

Figura 3: Límite termodinámico de $\langle |\phi| \rangle$ vs η para cinco muestras variando N y a $\rho = 1$ para las dos dinámicas estudiadas. Las incertezas se calcularon según [5], tal como se detalla en la sección 5.



(a) Angular



(b) Vectorial

Figura 4: *Susceptibilidad vs η* para la dinámica angular(arriba) y vectorial(abajo), para 5 y 3 tamaños distintos, respectivamente.

analogía al teorema de fluctuación-disipación (definido para sistemas en equilibrio), proporcional a la varianza del PO :

$$\sigma^2 = \langle |\phi|^2 \rangle - \langle |\phi| \rangle^2. \quad (11)$$

Mientras que el segundo se introduce como:

$$CB = 1 - \frac{\kappa}{3} \quad (12)$$

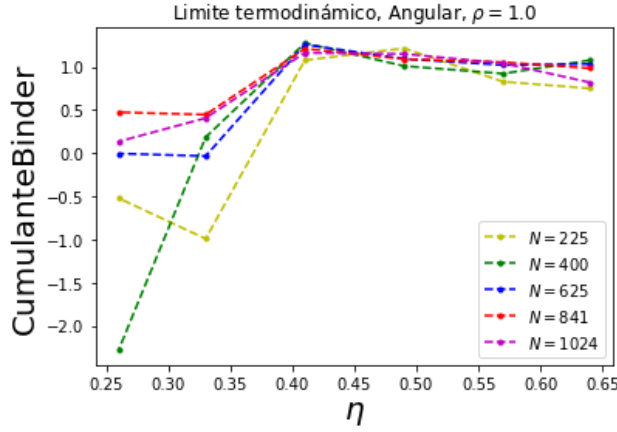
donde κ es la *curtosis* definida según Fisher de la distribución de $|\phi(t)|$.

La susceptibilidad como función de η (ver figura 4(a)) confirma que $\langle |\phi| \rangle$ sufre una transición de fase, puesto que presenta un

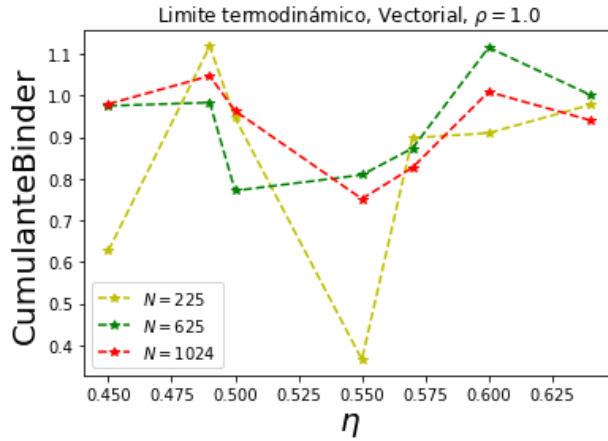
pico. A partir de esta curva se puede estimar, de manera conservadora, el valor del η_c , que a su vez permite discriminar ambas dinámicas. Para la dinámica vectorial, el límite termodinámico (ver figuras 4(b)) arroja como estimación visiblemente precisa $\eta_c^{(vec)} \simeq 0,5$. En tanto que para la dinámica escalar, la situación vista en el límite termodinámico es distinta. Las curvas para distintos tamaño no colapsan con la misma convergencia que en el caso vectorial. Esto se debe a un efecto asociado al tamaño finito del sistema simulado. Dado que la transición ocurre cuando la longitud de correlación (ξ_c) es del orden del tamaño del sistema, mientras más grande es el sistema más puede crecer la ξ_c . Esto se traduce, en el caso de la susceptibilidad, en que el pico donde tiene lugar la transición, se “traslada” hacia valores más pequeños en η ; es decir la curva tiene el máximo más a la izquierda. De esta manera, podemos estimar que $\eta_c^{(ang)} \in [0.3, 0.4] \simeq 0.35$. Sin embargo una forma más exacta de calcular tanto η_c como los exponentes críticos, sería realizar “escalado de tamaño finito”, asumiendo que vale para sistemas fuera de equilibrio. El análisis de la susceptibilidad permite obtener un panorama del comportamiento universal general de los sistemas pero no resulta suficiente para categorizar la transición.

Es por ello que se obtuvo CB (ver figura 5(a) y 5(b)), cuya estructura funcional aporta más información en esa dirección. Dado que el cálculo del CB implica la estimación del cuarto momento de la distribución de $|\phi|$, calcular η_c por este método demanda una mayor precisión numérica que la implementada en este estudio. No obstante, observar el comportamiento del CB en un entorno del η_c , especialmente para las curvas de mayor tamaño, sí permite inducir el carácter de la transición. Cuando la transición es de 1^{er} orden, el CB presenta un mínimo en η_c , evidencia de que ocurre coexistencia de dos fases. [4]

Si bien el η_c depende de ρ , v_0 , L , y posible-



(a) Angular



(b) Vectorial

Figura 5: Cumulante de Bindet *vs* η para la dinámica angular(arriba) y vectorial(abajo), para 5 y 3 tamaños distintos, respectivamente.

mente otras cantidades que desconocemos (por ser un sistema fuera de equilibrio), lo cual demuestra que η_c no es el mejor parámetro para estudiar el comportamiento universal del sistema; sí provee evidencia de que las dinámicas son naturalmente distintas. Este resultado parece contradictorio con el hecho de que hay una única simetría continua capaz de romperse espontáneamente en 2D, la simetría de rotación. Sin embargo recuperamos consistencia al demostrar que asintóticamente ambas dinámicas presentan el mismo comportamiento crítico, es decir que poseen los mismo expo-

nentes críticos y por tanto pertenecen a la misma clase de universalidad. [2]

4 Conclusiones

En primer lugar se reprodujo el resultado de Vicsek y se logró implementar exitosamente una variante del modelo con dinámica vectorial. Los resultados de las medidas arrojaron información sobre el comportamiento del parámetro de orden, observándose que en ambos casos atraviesa una transición de primer orden.

Por otro lado, se profundizó en efectos propios de la simulación como el de tamaño finito, y se logró estimar de manera aproximada el valor del η_c , obteniendo $\simeq 0,35$ y $0,5$ para la dinámica angular y vectorial respectivamente.

Finalmente se propone para futuros trabajos, el estudio de la dinámica vectorial con el parámetro $G \neq 0$ y la determinación de los exponentes críticos que caractericen la clase de universalidad de la dinámica vectorial.

5 Anexo

Estimación de incertidumbre

Según [5] la incertidumbre asociada a un valor medio temporal resulta:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{Nm-1} \langle |\phi|^2 \rangle - \langle |\phi| \rangle^2} \quad (13)$$

si $\tau_{eq} < \Delta t_m$, y:

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\tau_{eq}}{t_{max}} \langle |\phi|^2 \rangle - \langle |\phi| \rangle^2} \quad (14)$$

para $\tau_{eq} > \Delta t_m$.

Bibliografía

- [1] Tamás Vicsek, András Czirók, Eshel Ben-Jacob, Inon Cohen, and Ofer Shochet.

Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical review letters*, 75(6):1226, 1995.

- [2] Francesco Ginelli. The physics of the vicsek model. *The European Physical Journal Special Topics*, 225(11-12):2099–2117, 2016.
- [3] Volker Schaller, Christoph Weber, Christine Semmrich, Erwin Frey, and Andreas R Bausch. Polar patterns of driven filaments. *Nature*, 467(7311):73, 2010.
- [4] Hugues Chaté, Francesco Ginelli, Guillaume Grégoire, Fernando Peruani, and Franck Raynaud. Modeling collective motion: variations on the vicsek model. *The European Physical Journal B*, 64(3-4):451–456, 2008.
- [5] M Newman and G Barkema. *Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4*. Oxford University Press: New York, USA, 1999.