



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS

Comparação de Métodos Numéricos em Modelos
de
Movimento Browniano

Felipe Pinheiro da Silva Júnior

Pará
2021.02

FELIPE PINHEIRO DA SILVA JÚNIOR

**Comparação de Métodos Numéricos em Modelos
de
Movimento Browniano**

Trabalho de Conclusão do Curso, apresentado à Faculdade Física do Instituto de Ciências Exatas e Naturais da Universidade Federal do Pará, para obtenção do Grau de Bacharel de Física

Universidade Federal do Pará – UFPA

Faculdade de Física

Orientador: Prof.Dr.Fabricio Q. Potiguar

Belém-PA

1 de junho de 2021

2015, v-1.9.5

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a)
autor(a)**

D111c da Silva Júnior, Felipe Pinheiro.
Comparação de Métodos Numéricos em Modelos de
Movimento Browniano / Felipe Pinheiro da Silva Júnior. —
2021.
xii,43 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Fabrício Queroz Potiguar
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) -
Universidade Federal do Pará, Instituto de Ciências Exatas e
Naturais, Faculdade de Física, Belém, 2021.

1. movimento browniano, métodos numéricos.Euler,
Runge-Kutta,matéria ativa. I. Título.

CDD 530.13

FELIPE PINHEIRO DA SILVA JÚNIOR

Comparação de Métodos Numéricos em Modelos de Movimento Browniano

Trabalho de Conclusão do Curso, apresentado à Faculdade Física do Instituto de Ciências Exatas e Naturais da Universidade Federal do Pará, para obtenção do Grau de Bacharel de Física

Data da aprovação: _/_/_

Banca Examinadora:

Prof.Dr.Fabricio Q. Potiguar
Orientador

Pr.Dr.Marcelo Costa de Lima
Convidado 1

Pr.Dr.Maria Lúcia de Moraes Costa
Convidado 2

Belém-PA
1 de junho de 2021
2015, v-1.9.5

Resumo

O presente trabalho é o estudo da comparação de métodos numéricos estocásticos em modelos de movimento browniano, dentre eles matéria ativa. Matéria ativa consiste num conjunto de fenômenos fora do equilíbrio em que há movimentos de partículas auto-propelidas gastando sua própria energia interna. É bem sabido que sistemas fora do equilíbrio apresentam certa complexidade em suas propriedades. No contexto de simulação, queremos estudar a utilização de diferentes métodos numéricos, no caso Euler e Runge -kutta, para diferentes medidas e comparar suas performances (precisão e concordância das medidas, bem como tempo de execução dos cálculos) em medidas de difusão e corrente de partículas (velocidade média).

Palavras-chave: movimento browniano. métodos numéricos. Euler.Runge-Kutta. matéria ativa

Abstract

The present work is the study of the comparison of stochastic numerical methods in models of Brownian motion, among them active matter. Active matter consists of a set of phenomena out of equilibrium in which there are movements of self-propelled particles expending their own internal energy. It is well known that out-of-equilibrium systems have some complexity in their properties. In the context of simulation, we want to study the use of different numerical methods, in the case of Euler and Runge-kutta, for different measures and to compare their performance (precision and agreement of the measures, as well as time of execution of the calculations) in diffusion and current measures of particles (average speed).

Keywords: brownian motion. numerical methods. Euler. Runge-Kutta. active matter

Lista de ilustrações

- Figura 1 – Desvio médio quadrático da posição em função do tempo usando a variante $\tau(1)$ e $\eta = 0.001$ variando o parâmetro γ . A curva de cor preta e vermelha referem-se, respectivamente, as componentes x e y do desvio médio quadrático calculadas via método de Euler, as curvas de cor verde e azul referi-se respectivamente as componentes x e y da difusão calculadas via Runge-kutta. 35
- Figura 2 – λ_{xy} em função do tempo para alguns valores diferentes de γ . Nos dois primeiros gráficos (2a) e (2b) temos a comparação dos valores calculados por cada método, em que a curva de cor preta é para o método de Euler e a curva de cor vermelha para Runge-Kutta. Já para os dois últimos gráficos (2c) e (2d) temos o plote das curvas de tendência, sendo que (2c) temos em preto a curva de λ_{xy} via Euler e as curvas de cor vermelha e azul são, respectivamente, as regressões linear e potencia. Em (2d) temos em preto a curva de λ_{xy} via Runge-Kutta e as curvas de cor vermelha e verde são respectivamente as regressões linear e potencia. 38
- Figura 3 – Quatro gráficos de λ em função do tempo usando a variante $\tau_p(2)$, $\eta = 0.001$ e $\gamma = 0.001$. Nos três primeiros gráficos (3a),(3b),(3c), preto e vermelho referem-se, respectivamente, as componentes x e y da difusão calculadas via método de Euler, por outro lado, as curvas de cor verde e azul referi-se respectivamente as componentes x e y da difusão calculadas via Runge-Kutta e usamos a variante $\tau_4(2)$. Já o gráfico (3d) refere-se as curvas de grandeza λ_{xy} calculadas pelo método de Euler para diferentes valores de p : preto $p = 4$, vermelho $p = 8$, verde $p = 16$ e azul $p = 32$ 39
- Figura 4 – Quatro gráficos de difusão em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ para diferentes valores η fixando o valor de $\gamma = 0.01$. As curvas de cor preta e vermelha são, respectivamente, as componentes x e y da difusão via método de Euler. Enquanto as curvas de cor verde e azul são respectivamente as componentes x e y da difusão calculadas via Runge-kutta. 40

Figura 5 – Quatro gráficos das componentes da velocidade média calculadas por cada método numérico em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e $\eta = 0.001$ para diferentes valores de γ . Nos quatro gráficos as curvas de cor verde e azul são, respectivamente, a componente x e y pelo método Runge-kutta. Foram plotadas as curvas via método Euler de cor preta para componente x e vermelha para y , mas essas curvas estão muito próximas das curvas via Runge-Kutta para podemos distinguir.	41
Figura 6 – Três gráficos da grandeza Δv_i para cada componente x e y em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e $\eta = 0.001$ para diferentes valores de γ , sendo que o terceiro é resultado da ampliação do segundo. Nos dois gráficos as curvas de cor preta refere-se a componente x em quanto a violeta para componente y	42
Figura 7 – Quatro gráficos das componentes da velocidade média calculada por cada método numérico em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e fixando $\gamma = 0.01$ para diferentes valores de η . Nos quatro gráficos as curvas de cor verde e azul são, respectivamente, a componente x e y pelo método Runge-kutta. Foram plotadas as curvas via método Euler de cor preta para componente x e vermelha para y , mas essas curvas estão muito próximas das por via Runge-Kutta para podemos distinguir.	43
Figura 8 – Dois gráficos das componentes da grandeza Δv calculados por cada método numérico em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e fixando $\gamma = 0.01$ para diferentes valores de η . As curvas de cor preta e violeta são, respectivamente, a componente x e y da grandeza Δv	44
Figura 9 – Aqui temos quatro gráficos da difusão ($\vec{\lambda} = (\lambda_x, \lambda_y)$) em função de tempo para diferentes valores de η_θ . As curvas de cor preta e vermelha são, respectivamente, as componentes x e y via Euler, em quanto que as curvas de cor verde e a azul são as componentes x e y via Runge-Kutta.	47
Figura 10 – Quatro gráficos da difusão (λ_{xy}) em função do tempo para diferentes valores de η_θ mais o estudo das regressões. Os gráficos (10a) e (10c) curvas de difusão (λ_{xy}) via Euler e em quanto (10b) e (10d) para Runge-Kutta. As cores preto para difusão, vermelho e azul para regressão linear e potencia respectivamente.	48
Figura 11 – Quatro gráficos da velocidade média ($\langle v \rangle$) em função do tempo para diferentes valores de η_θ . As curvas de cores preta, vermelha, verde e azul são, respectivamente, as componentes x e y via Euler e componentes x e y via Runge-Kutta.	49

Figura 12 – Objetos assimétricos. O ponto em preto é que indica a suas posição no sistema de coordenadas, que chamaremos de ponto P . Nas duas figuras representam dois semicírculos em uma dada configuração no sistema de coordenadas.	50
Figura 13 – Objeto assimétrico formado por dois semicírculos de raio Rc	51
Figura 14 – Os gráficos da velocidade média para dois caso do número q de obstáculos. As cores preto e vermelho para componente x e y da velocidade média via Euler, em quanto que verde e azul para componente x e y via Runge-Kutta.	51

Sumário

Lista de ilustrações	9	
Sumário	12	
1	INTRODUÇÃO	13
2	ABORDAGEM TEÓRICA	17
2.1	Solução da Partícula Browniana Livre	17
2.2	Solução da Partícula Browniana Harmônica	21
2.3	Movimento Browniano Angular	23
2.4	Métodos de Numéricos Estocástico	26
2.4.1	A Simulação computacional	27
2.4.2	Método de Euler Estocástico	27
2.4.3	Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem Estocástico	28
3	DISCUSSÃO DOS PROBLEMAS	31
3.1	Movimento Browniano Normal	31
3.1.1	Modelo de Coloides livres	31
3.1.2	Resultados e Discussão	35
3.2	Movimento Browniano Angular	43
3.2.1	Modelo de Matéria Ativa	43
3.2.2	Difusão da Matéria Ativa	46
3.2.3	Transporte de Matéria Ativa	49
4	CONCLUSÃO	53
	REFERÊNCIAS	55

1 Introdução

O Movimento Browniano foi estudado e documentado primeiramente pelo holandês Jan Ingenhousz em 1785, em um experimento envolvendo um grão de carvão mineral em solução de álcool. No entanto, foi só em 1828 numa publicação do botânico Robert Brown que o movimento teve nome, quando ele observou um deslocamento errático do grão de pólen sobre um fluido em equilíbrio térmico. Em 1905, Albert Einstein foi outro que contribuiu e explicou o movimento browniano por meio de seu artigo, onde ele buscou explicar o movimento chegando na equação da qual ele poderia medir o número de Avogadro, indo no caminho para reforçar a hipótese atômica da matéria (KLAFTER; SHLESINGER; ZUMOFEN, 1996; WIKIPEDIA, 2021).

A matéria ativa é caracterizada por indivíduos auto-propelidos, sendo que cada um converte a sua energia armazenada ou energia livre presente no meio para o seu movimento errático. A interação das partículas com a outras possui forte correlação com o movimento coletivo. Sendo assim, segue-se alguns exemplos de matéria ativa: movimento em suspensão de *bactéria subtilis* (SOKOLOV; ARANSON, 2012), voo de pássaros (CAVAGNA; GIARDINA, 2014), cristalização (RIBEIRO; POTIGUAR, 2018) cardume de peixes e coleções de robors (TOSCHI; SEGA, 2019; SCHALLER et al., 2011; BORBA et al., 2020).

Diferentemente de muitos casos familiares de sistemas fora do equilíbrio na física estatística, para a matéria ativa o fluxo de energia que faz com que o sistema saia do equilíbrio é local. Isto é, cada partícula consome e dissipa a energia que atravessa um ciclo que geralmente causa o movimento da partícula. Segundo (SCHALLER et al., 2011), sistemas ativos apresentam propriedades fora do equilíbrio interessantes como estruturas emergentes com o comportamento coletivo diferente dos indivíduos presentes, bizarras flutuações estatísticas, oscilações sustentadas mesmo na ausência da inércia.

Devido à grande quantidade de propriedades universais para sistemas de diferentes escalas, podemos classificar matéria ativa em um pequeno número de classes universais para sistemas vivos. Vamos considerar quatro classes de acordo com a quebra de simetria da orientação de fase e tipo do amortecimento. Para quebra de simetria: objetos alongados e autopropelidos são, em geral, polares com a distinção de **head** e **tail** podem estar em fase polar ou em fase nemática. Em fase polar os objetos são orientados em média em uma direção, é casos dos peixes e rebanhos de ovelhas. Na fase nemática, pode ser obtida em duas formas, os objetos autopropelidos são orientados aleatoriamente em **head-tail** e estando em paralelo ou sistemas constituídos por partículas autopropelidas mas com a orientação **head-tail** simétrica, como os melanócitos na distribuição do pigmento da

pele (KEMKEMER et al., 2000)(SCHALLER et al., 2011).

Em um fluido, ativo ou não, que o amortecimento está relativo no movimento das vizinhanças o momento total é conservado. Mas para um sistema em contato com um substrato, que resiste a ficar em repouso na superfície ou entre duas paredes próximas, o arrasto do substrato é dominante, o momento total não é conservado. Assim, partículas ativas em um fluido com viscosidade η e constante de fricção γ podem ser descritos como sistemas com ou sem conservação do momento, dependendo da densidade de partícula e da escala de interesse (SCHALLER et al., 2011).

Para a natureza do amortecimento: quando as interações do solvente hidrodinâmico são importantes, a dinâmica do fluido em suspensão deve ser incorporada no modelo. Assim, devemos desenvolver a descrição da suspensão das partículas ativas e do fluido, com conservação total do momento. Modelos que descrevem sistemas com conservação de momento são denominados de **went**. Haja vista que, podemos desprezar as ações do fluxo do fluido quando a escala espacial de interesse é muito grande comparado $\sqrt{\frac{\eta}{\gamma}}$ (SCHALLER et al., 2011).

Em fluidos desprovidos de reações químicas, basta apenas apresentar o coeficiente de fricção, daí as partículas irão transferir momento para o fluido, esse conjunto fluido-partículas pode ser modelado como um sistema super-amortecido e sem conservação do momento, denominado de **dry** (SCHALLER et al., 2011).

A exemplo disso, a revoada de pombos e rebanhos de animais em um cercado pertencem a essa classe **dry**. Nesses casos podemos considerar o substrato não explícito, diferentemente de substratos em vidro que contêm bactérias. O modelo que obteve grande êxito para descrição de animais "grandes"(ovelhas, pássaros, etc..) foi o modelo de Vicsek.

O modelo de Vicsek (MV) foi proposto em meados de 1995 por (VICSEK et al., 1995) e possui certa semelhança com o modelo de Ising para fermions em equilíbrio. Nesse modelo, dado um aglomerado de partículas, cada uma determina sua direção através da média das direções das partículas vizinhas mais um ruído (GINELLI, 2016) (GINELLI, 2016).

O modelo do Movimento Browniano Angular(MBA) proposto por (FILY; MARCHETTI, 2012), considera um grupo de partículas brownianas em que cada uma, possui uma velocidade intrínseca que segue uma regra dada por um ruído gaussiano. É importante salientar que pode-se gerar esse modelo através do movimento browniano normal (MBN). A equação que rege os dois modelos de movimento((MBA) e (MBN)) é a equação de Langevin.

Nesse trabalho a equação de Langevin será utilizada para resolver alguns problemas que serão propostos. Sendo assim, o objetivo é fazer uma comparação de métodos numéricos estocásticos utilizados para integrar a dinâmica dos modelos sendo eles: Euler

e Runge-Kutta de segunda ordem (HONEYCUTT, 1992) . Em principio, começaremos pelo modelo do Movimento Browniano Normal(MBN) e em seguida pelo Movimento Browniano Angular (MBA) descrito por (FILY; MARCHETTI, 2012).

Nas simulações serão medidos a desvio médio quadrático (DMQ) e velocidade média do sistema. As medidas serão plotadas em função do tempo no intervalo de interesse. Usaremos como parâmetros a constante de fricção γ , intensidade do ruído normal η e intensidade do ruído angular η_θ .

No sistema ativo que ao serem adicionados certos objetos geométricos há uma quebra da invariância translacional e o conseqüente surgimento de uma corrente líquida de partículas. Nesse sentido, o modelo (MBA) será interessante no contexto de transporte de partículas na presença de de um objeto assimétrico. Nessa parte usaremos como base o estudo do transporte de partículas ativas em meio a objetos assimétricos fixos feito por (BORBA et al., 2020).

Portanto, esse trabalho dividiu-se em quatro capítulos, sendo o primeiro referente a este momento introdutório. No segundo capítulo, apresentaremos os modelos e algumas de suas soluções teóricas. No terceiro capítulo, caberá a apresentação das simulações, dos parâmetros e dos resultados, com suas respectivas análises. No quarto capítulo, faremos a conclusão e com algumas pretensões futuras do trabalho.

2 Abordagem Teórica

Nesse capítulo, começaremos pelo o estudo do (MBN). Em seguida, pelo estudo do (MBA). Finalmente, apresentaremos os algoritmos numéricos: Euler e Runge-kutta de segunda ordem.

2.1 Solução da Partícula Browniana Livre

O movimento browniano é um fenômeno da escala macroscópica a qual reflete a natureza microscópica. Este fenômeno é observado em equilíbrio térmico, no entanto há uma agitação irregular da partícula (REICHL, 1999). O movimento browniano é um processo, o qual envolve uma quantidade grande de partículas, fora do equilíbrio inicialmente, mas que decai para estado de equilíbrio. Um outro aspecto deste fenômeno, que os sucessivos choques aleatórios causam em média dois tipos de consequências. A primeira delas, é que, as partículas do meio agem como uma "força eletromotriz", ou seja, os constituintes do fluido mantêm constantemente o movimento errático. A segunda parte, é que as moléculas geram a força de arrasto da equação do movimento. O primeiro trecho se refere ao um evento sistemático e o segundo, à parte randômica. Portanto, existe uma relação entre a força de arrasto e a aleatória. Tal caso é a manifestação do Teorema da flutuação-dissipação (KUBO, 1966).

Podemos descrever a partícula browniana a partir da Segunda lei de Newton com uma força de arrasto de Stokes, proporcional à velocidade da partícula, mais um ruído gaussiano. Tal descrição anterior é realizada através da equação de Langevin (REICHL, 1999; KUBO, 1966).

Seja uma partícula de massa m e de raio a , em um fluido constituído por partículas menores de massa depressível comparado a massa m da partícula. Usaremos como base de nossas as referenciais (POTIGUAR, 2019; REICHL, 1999). Suas equações de movimento, Langevin, são;

$$\frac{d\vec{v}(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}\vec{v} + \frac{1}{m}\vec{\xi}(t), \quad (2.1)$$

e

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \vec{v}(t). \quad (2.2)$$

onde $\gamma = 6\pi\eta a$ é coeficiente de fricção do fluido, $\vec{v}(t)$ é o vetor velocidade da partícula em certo tempo t , $\vec{r}(t)$ é vetor posição da partícula no instante t e $\vec{\xi}(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t), \xi_3(t))$ onde $\xi_i(t)$ é número aleatório chamado de ruído gaussiano devido às

suas propriedades estatísticas descritas abaixo pelas equações (2.3) e (2.4).

$$\langle \xi_i(t) \rangle_\xi = 0, \quad (2.3)$$

e

$$\langle \xi_i(t_1) \xi_i(t_2) \rangle_\xi = \Gamma \delta(t_2 - t_1). \quad (2.4)$$

Onde a notação $\langle \rangle_\xi$ expressa a média na distribuição de probabilidade da realização da variável ξ e Γ é o ruído gaussiano. Note que, equação (2.3) reflete o fato do fenômeno ser marcoviano, pela presença da função delta que implica uma correlação apenas instantânea.

Aqui iremos realizar uma simplificação. O problema tridimensional pode ser resolvido apenas para uma destas direções, pois o espaço é isotrópico.

Na literatura existe uma quantidade considerável de métodos de resoluções de equações diferenciais. Nesse trabalho a abordagem escolhida para o problema será a transformação de Laplace, definida na relação matemática;

$$\mathcal{F}(f(t)) := \int_0^\infty f(t) e^{-st} dt; \quad (2.5)$$

Onde $s \in \mathbb{R}$.

Assim teremos os seguintes passos;

$$\mathcal{F}\left(\frac{dv_x(t)}{dt}\right) = \mathcal{F}\left(-\frac{\gamma}{m}v_x(t) + \frac{1}{m}\xi(t)\right) \quad (2.6)$$

Supondo v_0 seja a velocidade no tempo $t = 0$ e tomando $V := \mathcal{F}(v(t))$, $\Xi := \mathcal{F}(\xi(t))$ para simplificar a expressão. Segue que;

$$V = \frac{v_0}{(s - \frac{\gamma}{m})} + \frac{1}{m} \frac{\Xi}{(s - \frac{\gamma}{m})}. \quad (2.7)$$

Usando um dicionário de funções imagem, tem-se;

$$v_x(t) = \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{v_0}{(s - \frac{\gamma}{m})}\right) + \frac{1}{m} \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{(s - \frac{\gamma}{m})}\Xi\right) \quad (2.8)$$

Note que, há duas parcelas na equação (2.8). A primeira $\mathcal{F}^{-1}\left(\frac{v_0}{(s - \frac{\gamma}{m})}\right) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t}$ e a segunda é dada pelo teorema da convolução ;

$$(f * g) := \int_0^t f(\tau)g(s - \tau)d\tau. \quad (2.9)$$

Onde escrevemos $\frac{1}{m}\mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{(s-\frac{\gamma}{m})}\Xi\right) = \frac{1}{m}\left(\mathcal{F}^{-1}(\Xi) * \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{s+1}\right)\right)$. Assim, teremos para $v_x(t)$;

$$v_x(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t} + \frac{1}{m} \int_0^t d\tau e^{-\frac{\gamma}{m}(t-\tau)} \xi(\tau). \quad (2.10)$$

Obteremos a relação para $x(t)$ fazendo uma relação com as equações (2.1) e (2.2), aplicando a transformada de Laplace junto com (2.9). Assumindo que em $t = 0$ a posição possa se expressa como x_0 .

$$\mathcal{F}\left(\frac{dx(t)}{dt}\right) = \mathcal{F}(v_x(t)) \implies sX(s) - x(0) = V(s). \quad (2.11)$$

Onde podemos obter a forma algébrica de $V(s)$ pela relação (2.7),

$$X(s) = \frac{v_0}{s(s + \frac{\gamma}{m})} + \frac{1}{m} \frac{\Xi}{s(s + \frac{\gamma}{m})} + \frac{x_0}{s}. \quad (2.12)$$

Ou seja;

$$\mathcal{F}^{-1}(X(s)) = \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{v_0}{s(s + \frac{\gamma}{m})}\right) + \frac{1}{m}\mathcal{F}^{-1}\left(\frac{\Xi}{s(s + \frac{\gamma}{m})}\right) + x_0\mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{s}\right), \quad (2.13)$$

usando o método de decomposição em frações parciais no primeiro item do lado direito da relação (2.13) podemos chegar que,

$$x(t) = x_0 + v_0 \frac{m}{\gamma} \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{(s + \frac{\gamma}{m})}\right) - v_0 \frac{m}{\gamma} \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{s}\right) + \frac{1}{m} \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{\Xi}{s(s + \frac{\gamma}{m})}\right). \quad (2.14)$$

O segundo e terceiro termos de (2.14) são soluções bem conhecidas da literatura. Resta calcular o quarto termo de (2.14), dentre as muitas formas de calcular podemos proceder aplicando o teorema da convolução duas vezes tendo em mente que $\mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{s}\right) = 1$, $\mathcal{F}^{-1}\left(1/(s + \frac{\gamma}{m})\right) = e^{-\frac{\gamma}{m}t}$ e $\mathcal{F}^{-1}(\Xi(s)) = \xi(t)$. Aplicando a primeira vez para calcular $\mathcal{F}^{-1}\left(1/s(s + \frac{\gamma}{m})\right) = \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{s}\right) * \mathcal{F}^{-1}\left(1/(s + \frac{\gamma}{m})\right) = \int_0^t d\tau 1 e^{-\frac{\gamma}{m}\tau} = \frac{m}{\gamma}(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t})$ e segunda para $\mathcal{F}^{-1}(\Xi) * \mathcal{F}^{-1}\left(1/s(s + \frac{\gamma}{m})\right) = \frac{m}{\gamma} \int_0^t d\tau (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}(t-\tau)}) \xi(\tau)$. Assim, teremos para $x(t)$ a expressão;

$$x(t) = x_0 + v_0 \frac{m}{\gamma} \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}\right) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t d\tau \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}(t-\tau)}\right) \xi(\tau). \quad (2.15)$$

Note que, tanto (2.10) quanto na relação (2.15) há uma dependência na variável aleatória. Se uma função depende de uma termo aleatório esta é aleatória. Resta calcular os momentos da posição e velocidade. Façamos primeiro para $v_x(t)$ no sentido de obter a correlação de velocidades em dois tempos distintos. Para tal basta aplicar $\langle \rangle_\xi$ em ambos os lados em cada uma das equações para dois tempos diferentes (t_1 e t_2) e leva em conta as relações (2.3) e (2.4). vejamos para correlação da velocidade a seguir.

$$\langle v_x(t_2)v_x(t_1) \rangle_\xi = v_0^2 e^{-\frac{\gamma}{m}(t_2+t_1)} + \frac{\Gamma}{m} \int_0^{t_2} d\tau_2 \int_0^{t_1} d\tau_1 \delta(\tau_2 - \tau_1) e^{\frac{\gamma}{m}(\tau_1-t_1)} e^{\frac{\gamma}{m}(\tau_2-t_2)} \quad (2.16)$$

aqui pode-se usar a propriedade de filtragem da delta de Dirac na integral e ainda tomando $t_2 > t_1$. Assim se obtém expressão (2.17).

$$\langle v_x(t_2)v_x(t_1) \rangle_\xi = \left(v_0^2 - \frac{\Gamma}{2\gamma m} \right) e^{-\frac{\gamma}{m}(t_2+t_1)} + \frac{\Gamma}{2\gamma m} e^{-\frac{\gamma}{m}|t_2-t_1|}. \quad (2.17)$$

É possível determinar o caso do qual a partícula está em equilíbrio com fluido. Primeiro caso será para correlação de velocidade em (2.17). Segundo (REICHL, 1999), se uma partícula browniana está em equilíbrio (isto é, no limite de tempo infinito, t_1 e $t_2 \rightarrow \infty$), então a correlação de velocidade depende apenas de $|t_2 - t_1|$. Segue a equação (2.18).

$$\langle \langle v_x(t_2)v_x(t_1) \rangle_\xi \rangle_T = \frac{T}{2\gamma m} e^{-\frac{\gamma}{m}|t_2-t_1|}. \quad (2.18)$$

Onde a notação $\langle \rangle_T$ é o limite do equilíbrio que leva em conta os termos em t de maior relevância para tempos grandes. A partir da (2.10) pode-se obter a velocidade média e o desvio quadrático médio. Segue então utilizando (2.3) e (2.4);

$$\langle v_x(t) \rangle_\xi = \bar{v}_x(t) = \bar{v}_x(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t} \quad (2.19)$$

e

$$\langle [v_x(t) - \bar{v}_x(t)]^2 \rangle_\xi = \frac{m\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\frac{\gamma}{m}t}). \quad (2.20)$$

Pelo teorema da equipartição de energia, cada grau quadrático deve corresponder a meio de $K_B T$, onde, K_B é constante de Boltzmann e T é temperatura absoluta. Então no limite difusivo, têm-se as seguintes expressões;

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{v}_x(t) = 0; \quad (2.21)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle [v_x(t)]^2 \rangle_\xi = \frac{2K_B T}{m}; \quad (2.22)$$

das expressões (2.20), (2.21) e (2.22) obtém-se a relação $\Gamma = \frac{2K_B T \gamma}{m^2}$, este resultado mostra conexão do comportamento microscópico e macroscópico da matéria. A medida da temperatura, que é uma medida macroscópica, pode ser usada para calcular a energia cinética média da partícula browniana.

Um outro resultado bastante interessante é variação da posição relação a situação inicial e a posição média. Para tais, basta usa (2.15), (2.4), (2.3) e tomando o fato de que $\langle x(t)\xi(t) \rangle = 0$. Segue então a equação (2.23) e (2.24).

$$\langle [x(t) - x_0]^2 \rangle_\xi = \frac{m^2}{\gamma^2} \left(v_0^2 - \frac{\Gamma}{2\gamma m} \right) (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t})^2 + \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left[t - \frac{m}{\gamma} (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}) \right]. \quad (2.23)$$

$$\langle [x(t)] \rangle_\xi = x_0 + v_0 \frac{m}{\gamma} \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t} \right). \quad (2.24)$$

Aplicando o mesmo argumento de equilíbrio para a equação (2.15), segue a seguinte relação em (2.25).

$$\langle \langle [x(t) - x_0]^2 \rangle_\xi \rangle_T = \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left[t - \frac{m}{\gamma} (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}) \right]. \quad (2.25)$$

Vejam os dois limites extremos no tempo para o desvio médio quadrático. Note que o termo $e^{-\frac{\gamma}{m}t}$ na equação (2.23) pode se expresso em termo de uma série de Taylor conforme a relação (2.26).

$$e^{-\frac{\gamma}{m}t} = 1 - \frac{\gamma}{m}t + \frac{1}{2!} \frac{\gamma^2}{m^2} t^2 - \frac{1}{3!} \frac{\gamma^3}{m^3} t^3 + \dots \quad (2.26)$$

Para $t \ll m\gamma^{-1}$, ou seja para tempos suficientemente próximos da situação inicial, o desvio fica proporcional t^2 (limite balístico);

$$\langle [x(t) - x_0]^2 \rangle_\xi = \frac{\Gamma m}{2\gamma} t^2 = \frac{K_B T}{m} t^2. \quad (2.27)$$

Para $t \gg m\gamma^{-1}$ desvio médio quadrático fica proporcional t ,

$$\langle \langle [x(t) - x_0]^2 \rangle_\xi \rangle_T = \frac{\Gamma}{\gamma^2} t = \frac{2K_B T}{m\gamma} t. \quad (2.28)$$

Note que na equação (2.28) é possível calcular a constante de Boltzmann,, da qual relaciona o comportamento macroscópico e microscópico da matéria. Este resultado é a assinatura típica de fenômenos difusivos.

2.2 Solução da Partícula Browniana Harmônica

Em sistemas de partículas da qual há um campo de força, é necessário inserir uma alteração na equação (2.1). Nessa questão vamos nos restringir para forças conservativas. Segue então a expressão em (2.29).

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\gamma}{m} \vec{v} - \frac{1}{m} \vec{\nabla} U(\vec{r}) + \frac{1}{m} \xi(t) \quad (2.29)$$

Onde $\vec{F} = -\vec{\nabla} U(\vec{r})$ expressa o fato de existir um campo conservativo no sistema. Vejamos uma caso especial unidimensional com força conservativa dado pela expressão $F(x) = -kx(t)$, onde k é numero real positiva chamado de constante elástica. Segue as equações (2.30) e (2.31).

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\gamma' v - \omega_0^2 x(t) + \frac{1}{m} \xi(t) \quad (2.30)$$

e

$$\frac{dx(t)}{dt} = v(t). \quad (2.31)$$

Em que $\omega_0^2 := \frac{k}{m}$ e $\gamma' := \frac{\gamma}{m}$. Tomando $X(s) := \mathcal{F}\{x(t)\}$, $V(s) := \mathcal{F}\{v(t)\}$ e $\Xi(s) := \frac{1}{m}\mathcal{F}\{\xi(t)\}$ segue as equações no espaço de configurações (2.32) e (2.33). E estamos interessados no caso amortecido normal, isto $\omega_0^2 > \gamma^2/4$.

$$(s + \gamma')V(s) + \omega_0^2 X(s) = v_0 + \Xi(s); \quad (2.32)$$

$$sX(s) - V(s) = x_0. \quad (2.33)$$

Donde segue;

$$V(s) = \frac{s(v_0 + \Xi(s))}{(s + \frac{\gamma'}{2})^2 + (\omega_0^2 - \frac{\gamma'^2}{4})} - \frac{\omega_0^2 x_0}{(s + \frac{\gamma'}{2})^2 + (\omega_0^2 - \frac{\gamma'^2}{4})} \quad (2.34)$$

e

$$X(s) = \frac{x_0}{s} + \frac{(v_0 + \Xi(s))}{(s + \frac{\gamma'}{2})^2 + (\omega_0^2 - \frac{\gamma'^2}{4})} - \frac{\omega_0^2 x_0}{s[(s + \frac{\gamma'}{2})^2 + (\omega_0^2 - \frac{\gamma'^2}{4})]} \quad (2.35)$$

Usando o dicionário de imagem de funções teremos;

$$v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma'}{2}t} \cos(\omega_1 t) - \frac{(2\omega_0^2 x_0 + v_0 \gamma')}{\omega_1} e^{-\frac{\gamma'}{2}t} \sin(\omega_1 t) + \frac{1}{m} \int_0^t \xi(\tau) e^{-\frac{\gamma'}{2}(t-\tau)} \left\{ \cos(\omega_1(t-\tau)) - \frac{\omega^2}{2\omega_1} \sin(\omega_1(t-\tau)) \right\} d\tau \quad (2.36)$$

e

$$x(t) = (x_0 \omega^2 + 2v_0) e^{-\frac{\gamma'}{2}t} \frac{\sin(\omega_1 t)}{2\omega_1} + x_0 e^{-\frac{\gamma'}{2}t} \cos(\omega_1 t) + \frac{1}{m} \int_0^t \xi(\tau) e^{-\frac{\gamma'}{2}(t-\tau)} \frac{\sin(\omega_1(t-\tau))}{\omega_1} d\tau. \quad (2.37)$$

Onde $\omega_1^2 = \omega_0^2 - \frac{\gamma'^2}{4}$, para simplificar a expressão. Tendo isso resta calcular os valores médios para equações (2.36) e (2.37). Usando a relação (2.3), segue a média da variável $x(t)$.

$$\langle x(t) \rangle_\xi = \overline{x(t)} = e^{-\frac{\gamma'}{2}t} \left[(x_0 \gamma' + 2v_0) \frac{\sin(\omega_1 t)}{2\omega_1} + x_0 \cos(\omega_1 t) \right]. \quad (2.38)$$

Para variância do processo basta fazer $x(t) - \overline{x(t)}$ elevar ao quadrado e aplicando $\langle \rangle_\xi$ na equação.

$$\left\langle \left[x(t) - \overline{x(t)} \right]^2 \right\rangle_\xi = \frac{k_b T}{m \omega_0^2 \omega_1^2} \left[\omega_1^2 - e^{-\gamma' t} \left(\omega_0^2 + \frac{\omega_1 \gamma' \sin(2\omega_1 t)}{2} + (\omega_1^2 - \frac{\gamma'^2}{4}) \cos(2\omega_1 t) \right) \right] \quad (2.39)$$

Para o limite difusivo da equação (2.39), teremos;

$$\left\langle \left[x(t) - \overline{x(t)} \right]^2 \right\rangle_T = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left[x(t) - \overline{x(t)} \right]^2 \right\rangle_\xi = \frac{k_B T}{m \omega_0^2}. \quad (2.40)$$

Outrossim, é interessante obter a velocidade média da partícula. Com a equação (2.36) e (2.3) obtém-se a expressão (2.41).

$$\langle v(t) \rangle_\xi = \bar{v}(t) = \frac{e^{-\frac{\gamma'}{2}t}}{\omega_1} \left[v_0 \omega_1 \cos(\omega_1 t) - (2\omega_0^2 x_0 + v_0 \omega^2) \sin(\omega_1 t) \right]. \quad (2.41)$$

Do mesmo modo como se fez para calcular a dispersão da posição pode-se fazer para a velocidade da partícula. Segue a expressão.

$$\langle [v(t) - \bar{v}(t)]^2 \rangle_\xi = \frac{\gamma' k_B T}{4m\omega_1^2} \left[\frac{4\omega_1^2}{\gamma'} + e^{-\gamma' t} \left(\gamma' \cos(2\omega_1 t) + 2\omega_1 \sin(\omega_1 t - \frac{4\omega_0^4}{\gamma}) \right) \right] \quad (2.42)$$

2.3 Movimento Browniano Angular

Seja uma partícula ativa sobre um líquido viscoso, dotada com uma força intrínseca $\vec{f} = f_0[\cos \theta, \sin \theta]$ e sofre a ação da força $\vec{F}(r) = -\vec{\nabla}U(r)$. Seja γ grande o suficiente para que a velocidade da partícula vá para o estado estacionário instantaneamente. Desta maneira na equação (2.29) o termo $\frac{d\vec{v}}{dt} \approx 0$. Assim, A nova representação desse fenômeno bidimensional;

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = v_0 \hat{\rho} + \gamma \vec{F}(r) + \frac{1}{\gamma} \vec{\xi}(t). \quad (2.43)$$

Onde $v_0 \hat{\rho} = v_0(\cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y})$ é a velocidade intrínseca da partícula, sendo $v_0 = f_0/\gamma$ e ξ_i um número aleatório. E seja esta dotada com momento de inércia I e sofra a ação do torque viscoso de constante α' , um torque externo $M(t)$ e outro aleatório $\mu(t)$. Fazendo a consideração do caso super amortecido, ou seja, $\frac{d\omega}{dt} \approx 0$;

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{M}{\alpha'} + \frac{1}{\alpha'} \mu(t) \quad (2.44)$$

Onde, para a variável aleatória $\mu(t)$ temos as seguintes equações.

$$\langle \mu(t) \rangle_\xi = 0 \quad (2.45)$$

e ainda;

$$\langle \mu(t_1) \mu(t_2) \rangle_\xi = \eta \delta(t_1 - t_2) \quad (2.46)$$

Vejamos para caso $M(t) = 0$ e $\vec{F} = \vec{0}$, ou seja, o caso da partícula livre. Assim, a equação (2.44) é resolvida facilmente. Segue;

$$\theta(t) = \theta_0 + \int_0^t \mu(\tau) d\tau. \quad (2.47)$$

Das equações (2.45) e (2.46) Segue, então.

$$\langle \theta(t) \rangle_\mu = \theta_0 \quad (2.48)$$

e ainda;

$$\langle \mu(t_1)\mu(t_2) \rangle_\mu = 2\eta t. \quad (2.49)$$

Vamos assumir a seguinte função de distribuição de probabilidade gaussiana tenha para $\theta(t)$, a qual pode, facilmente, ser mostrada como a solução da equação de Fokker-Planck.

$$P(\theta, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\eta t}} e^{-\frac{(\theta(t)-\theta_0)^2}{4\eta t}}. \quad (2.50)$$

Aqui são necessários os valores médios de cosseno e seno. Segue o primeiro caso. Faz-se; $\langle \cos[\theta(t)] \rangle_\theta = \langle \cos[\theta(t) - \theta_0 + \theta_0] \rangle_\theta$. Assim, tem-se.

$$\langle \cos[\theta(t) - \theta_0 + \theta_0] \rangle_\theta = \langle \cos[\theta(t) - \theta_0] \rangle_\theta \cos[\theta_0] - \langle \sin[\theta(t) - \theta_0] \rangle_\theta \sin[\theta_0] \quad (2.51)$$

Como a seno é impar, então o segundo termo se anula. Assim, resta calcular o primeiro termo. Fazendo uma expansão, teremos:

$$\langle \cos[\theta(t) - \theta_0] \rangle_\theta \cos[\theta_0] = \frac{\cos[\theta_0]}{\sqrt{4\eta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} - \dots \right] e^{-\frac{(\theta-\theta_0)^2}{4\eta t}} \quad (2.52)$$

onde $x = \theta - \theta_0$. Para os momentos pares podem ser escritos da seguinte forma;

$$\langle x^{2n} \rangle_\theta = 1.2.3....(2n-1) \langle x^2 \rangle_\theta^n = 1.2.3....(2n-1)(2\eta t)^n. \quad (2.53)$$

Assim, temos;

$$\langle \cos[\theta(t)] \rangle_\theta = \cos[\theta_0] \left[1 - \eta t + \frac{(\eta t)^2}{2!} - \frac{(\eta t)^3}{3!} - \dots \right] = \cos[\theta_0] e^{-\eta t}. \quad (2.54)$$

Note que, na equação (2.54) vale apenas para uma dada condição inicial θ_0 . Para torna isto num aspecto mais geral basta fazer a média sobre todos os valores iniciais. Sendo que, não seria uma perda de generalidade impor uma distribuição uniforme entre 0 e π . Assim;

$$\langle \cos[\theta(t)] \rangle_\theta = 0. \quad (2.55)$$

Formula semelhantes temos para a média de seno. Ou seja, escrevendo $\langle [\sin[\theta(t) - \theta_0 + \theta_0]] \rangle_\theta = \langle \sin[\theta(t) - \theta_0] \rangle_\theta \cos[\theta_0] + \langle \cos[\theta(t) - \theta_0] \rangle_\theta \sin[\theta_0]$. Note que a primeira parcela se anula, pois, é impa, e a segunda basta usar (2.54). Então tem-se (2.56) .

$$\langle \sin[\theta(t)] \rangle_\mu = \sin[\theta_0] e^{-\eta t}. \quad (2.56)$$

Finalmente pode-se calcular os momentos as quais temos interesse. São eles da posição e desvio em relação à situação inicial. Segue o primeiro caso.

$$\langle \vec{r}(t) \rangle_\mu = \vec{r}_0 + \frac{v_0 \hat{\rho}}{\eta} (1 - e^{-\eta t}). \quad (2.57)$$

Este resultado depende de θ_0 através do versor ρ . De fato, na média, ele é o versor na direção inicial. Aplicando a média sobre θ_0 , teremos que a média da posição é igual à posição inicial, o que é esperado, pois, a velocidade não implica em deslocamento no regime superamortecido.

Agora o segundo momento. Para tal, basta fazer $\vec{r}(t) - \vec{r}_0$ e fazer produto interno deste vetor com ele mesmo. Segue.

$$\begin{aligned} \langle [\vec{r}(t) - \vec{r}_0]^2 \rangle_\mu &= v_0^2 \int \int [\langle \cos[\theta(t_1)] \cos[\theta(t_2)] \rangle_\mu + \\ &+ \langle \sin[\theta(t_1)] \sin[\theta(t_2)] \rangle_\mu + \frac{1}{\gamma^2} \int \int \vec{\xi}(t_1) \cdot \vec{\xi}(t_2) dt_1 dt_2]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Onde os termos da primeira integral são calculados fazendo a mudança de variável para a diferença de tempo $t_2 - t_1 = \Delta t$ e toma-se esta diferença como constante. Assim teremos;

$$\langle \cos[\theta(t_1)] \cos[\theta(t_2)] \rangle_\mu = \cos^2[\theta_0] e^{-\eta|\Delta|} \quad (2.59)$$

e ainda,

$$\langle \sin[\theta(t_1)] \sin[\theta(t_2)] \rangle_\mu = \sin^2[\theta_0] e^{-\eta|\Delta|}. \quad (2.60)$$

Na primeira integral de (2.58), com a ajuda de (2.59) e (2.60) torna-se $\int \int dt_1 dt_2 [\cos^2[\theta_0] + \sin^2[\theta_0]] e^{-\eta|\Delta|} = \int \int dt_1 dt_2 e^{-\eta|\Delta|}$ que é facilmente resolvível. Na segunda integral, basta aplicar a relação (2.3) e (2.4). Então tem-se como resultado a seguinte expressão.

$$\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}_0]^2 \rangle_\mu = 4 \left(\frac{\Gamma}{\gamma^2} + \frac{v_0^2}{2\eta} \right) t + 2 \frac{v_0^2}{\eta^2} (e^{-\eta t} - 1). \quad (2.61)$$

Vale ressaltar o limite difusivo da relação 2.61. Assim, segue a equação 2.62;

$$\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}_0]^2 \rangle_T = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle [\vec{r}(t) - \vec{r}_0]^2 \rangle_\mu = 4 \left(\frac{\Gamma}{\gamma^2} + \frac{v_0^2}{2\eta} \right) t. \quad (2.62)$$

Em (2.62) observamos que o coeficiente de difusão, $D = \left(\frac{\Gamma}{\gamma^2} + \frac{v_0^2}{2\eta} \right)$, é a soma das flutuações térmicas e interação da força intrínseca. Geralmente, o segundo termo é maior que o primeiro em D (POTIGUAR, 2019).

Calculemos para este caso a correlação de velocidades para dois tempos t_1 e t_2 . Para isso basta utilizar a equação (2.43) para dois tempos distintos (t_1 e t_2). Em seguida

façamos o produto interno com as duas equações e teremos;

$$\vec{v}(t_1)\vec{v}(t_2) = v_0^2 \left(\cos \theta(t_1) \cos \theta(t_2) + \sin \theta(t_1) \sin \theta(t_2) \right) + \frac{1}{\gamma} \vec{\xi}(t_1) \cdot \vec{\xi}(t_2) \quad (2.63)$$

Em seguida procedemos aplicando o operador $\langle \cdot \rangle_\xi$ em ambos os lados da equação (2.63). E utilizando as relações (2.59), (2.59) e (2.4), teremos;

$$\langle \vec{v}(t_1) \cdot \rangle_\xi = v_0^2 e^{-\eta|t_1-t_2|} + \frac{2\Gamma}{\gamma^2} \delta(t_1 - t_2) \quad (2.64)$$

Note que em (2.64) não é necessário aplicar o limite difusivo para a correlação de velocidade depender somente da diferença $|t_1 - t_2|$ diferentemente da relação (2.17).

2.4 Métodos de Numéricos Estocástico

Em certas situações, não é possível obter a solução formal para dada equação diferencial ou então a apropriada solução será pouco útil. Por exemplo, para resolver o átomo hidrogenado, ou seja, obter a função de onda, fazei-se alguns passos de álgebra e integração para ,aí sim! Obter a solução exata, entretanto para outros átomos é impossível resolver analiticamente, pelo acoplamento das equações. Como o objetivo é saber como a soluções do problema evoluem(a partir de certo ponto x^0) no parâmetro t que em física costuma ser o tempo, utilizamos, para isto, métodos numéricos.

Hodiernamente, na literatura existe vários formas de resolver numericamente de acordo com tipo do problema. Desde década de 60 para cá os métodos numéricos têm mostrado sua eficiência em linguagem de programação como Fortran, c, c++, Pascal e entre outras. Assim, com o auxílio de métodos computacionais pode-se resolver o problema de muitos corpos em vários contextos(quântico, Newtoniano, relativístico ... etc) , estuda propriedades de fluidos e entre outras. Aqui como já dito, deseja-se resolver numericamente as equações de movimento para a partícula browniana normal descrita pelas equações (2.1) e (2.2) bem como as equações de movimento para partícula browniana angular (2.43) e (2.44). Para tal deveremos usar os métodos numéricos estocásticos . Especialmente dois deles, Euler (TOSCHI; SEGA, 2019) e Runge-Kutta de segunda ordem(HONEYCUTT, 1992). Os dois métodos propostos têm objetivo de resolver as equações diferenciais da forma (2.65).

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x, t) + \xi(t) \quad (2.65)$$

Onde $\xi(t)$ é um número aleatório que obedece às propriedades (2.3) e (2.4). Note que ambos os formalismos, (MB) e (MBA), seguem a descrição (2.65) .

2.4.1 A Simulação computacional

A simulação computacional utiliza de certas ferramentas matemáticas como aproximações numéricas e o conhecimento da teoria para solucionar um dado funcionamento de um evento, por exemplo, a colisão de partículas. Dai, podemos dizer que a simulação se assemelha a teoria nesses dado aspecto (RAPAPORT, 2004).

No mundo prático não é possível ter uma precisão infinita das medidas como escrito numa solução formal de dada equação diferencial, mesmo no ato de medir pode ocorrer alguma flutuação ao acaso devido ao meio. O ponto citado é que aproxima simulação computacional do experimento (RAPAPORT, 2004).

Então a noção da simulação computacional está imersa tanto a teoria quanto no experimento em suas respectivas proporções. E medida que os computadores ficaram cada vez melhores, algumas noções de programação têm sido usadas com mais frequência no mundo científico, como computação simbólica (RAPAPORT, 2004).

2.4.2 Método de Euler Estocástico

Integrando a equação (2.65), Podemos escrever esta na seguinte forma expressa em (2.66);

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(x,t)dt + \int_t^{t+h} \xi(\tau)d\tau \quad (2.66)$$

Donde, termo ξ segue a seguinte relações;

$$\langle \xi(t) \rangle_\xi = 0; \quad (2.67)$$

e

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle_\xi = 2D\delta(t_1 - t_2) \quad (2.68)$$

Note que;

$$\int_t^{t+h} f(x,t)dt = hf(x(t)) + \mathcal{O}(h^2) \quad (2.69)$$

onde $\mathcal{O}(h^2)$ é a função erro de até a primeira ordem, isto é, estamos desprezando termos de ordem maior que h . Donde vê-se;

$$\lim_{h \rightarrow 0} \mathcal{O}(h^2) = 0. \quad (2.70)$$

Isto é, quanto menor for h melhor a aproximação. Fazendo a aproximação da equação (2.66),teremos;

$$x(t+h) = x(t) + hf(x(t)) + \sqrt{2Dh}\bar{\xi} + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.71)$$

Tal formulação é chamada de método de Euler estocástico. É importante salientar, o terceiro termo é exatamente o modulo do vetor na direção unitária $\bar{\xi}$. Onde $\bar{\xi}$ tem média zero e variância unitária.

É importante salientar a maneira que devemos integrar as equações de movimento da partícula browniana (MBN e MBA), ou seja, a equação da velocidade e da posição. Suponha que tenhamos certas condições iniciais \mathbb{X}_0 , isto é para cada partícula temos os valores de posição e velocidade no tempo $t = 0$. Sendo assim, se tivéssemos interessado em saber a posição e velocidade no tempo $t = h$, basta integrar as $2N$ equações simultaneamente de uma vez. Deste modo, teremos as velocidades e posições no tempo $t = h$, e poderemos utilizar esses valores para a próxima integração e assim por diante.

A expressão (2.71), nos permite saber o valor de x avaliado em $t + h$ a partir de eventos no instante t . Isto é, no tempo t haverá a interação de $f(x)$.

2.4.3 Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem Estocástico

O método Runge-kutta (PRESS et al., 1992) é bastante utilizado para problemas do tipo determina o comportamento a função de onda, fluidos em geral e etc. Aqui abordaremos certas partes da dedução do método, para visão mais cuidadosa recomendamos (HONEYCUTT, 1992). Segue a representação estocástica do Runge-kutta de segunda ordem.

Dado a seguinte relação;

$$dx = f(x(t), t)dt + \xi dt. \quad (2.72)$$

Note que, é outra forma de escrever (2.65). Integrando de 0 ate h , segue que;

$$x(h) = x(0) + \int_0^h f(x)dt + \int_0^h \xi(\tau)d\tau. \quad (2.73)$$

Definimos;

$$\Gamma_0 = \int_0^h \xi(\tau)d\tau. \quad (2.74)$$

Fazendo a discretização da equação e tomando $x_0 = x(t = 0)$; f^i é notação para i -ésima derivada da função no tempo $t = 0$, com a condição $f^0 = f(0) = f$ teremos então, expandindo $f(x(t))$ numa série de potências;

$$x(h) = x_0 + \Gamma_0 + hf + \dots + h \frac{f^{(i)}}{i!} \int_0^h (x' - x_0)^i dt' + \dots \quad (2.75)$$

Basta agora usar a própria equação (2.75) para sua simplificação. Especificamente o termo $(x' - x_0)$ do qual faremos substituições sucessivas e ignorando termos menores que h^2 . Segue então;

$$x(h) = x_0 + hf + \frac{h^2}{2} f f^{(1)} + R(h). \quad (2.76)$$

Onde $R(h)$ é parte aleatória da posição $x(h)$. Tal formulação é Runge-kutta de segunda ordem. Segue algumas relações para $R(h)$;

$$R(h) = \sqrt{2Dh}\bar{\xi} + \frac{h}{2}\sqrt{2Dh}f^{(1)} + \mathbb{O}_\xi(h) \quad (2.77)$$

Segue, fazendo algumas manipulações;

$$x(h) = x_0 + \frac{h}{2}(F_1 + F_2) + \sqrt{2Dh\xi} + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.78)$$

Onde temos;

$$F_1 = f(x_0) \quad (2.79)$$

e ainda;

$$F_2 = f(x_0 + hF_1 + \sqrt{2Dh\xi}). \quad (2.80)$$

Apesar do método Runge-Kutta apresentar maior precisão, este possui um custo computacional maior que o de Euler, pois calcula a derivada da equação diferencial original em dois tempos distintos em cada iteração, ao passo que o de Euler a calcula somente uma vez.

3 Discussão dos Problemas

Neste capítulo, recorreremos aos algoritmos estocásticos de integração numérica de Euler e de Runge-Kutta de segunda ordem para estudar o transporte de coloides livres e de matéria ativa, através de medidas do desvio médio quadrático da posição (difusão) e velocidade média, de modo a comparar os desempenhos, isto é, concordância dos resultados e tempo de integração, dos dois métodos numéricos. Para começar faremos o caso mais simples, que é estudo do sistema constituído por coloides livres, através da solução numérica do modelo do Movimento Browniano Normal.

3.1 Movimento Browniano Normal

3.1.1 Modelo de Coloides livres

Considere um certo número N de partículas brownianas numa caixa bidimensional de área L^2 sendo que o sistema em equilíbrio a uma temperatura T . No modelo em questão adotaremos cada partícula de diâmetro d e massa m . Nesse sistema, o movimento de cada partícula i depende da posição das j -ésimas partículas vizinhas. Desta maneira, as equações de movimento de cada uma delas são acopladas com outras. Assim, temos a seguinte equação para a velocidade da i -ésima partícula;

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\gamma' \vec{v}_i + \frac{1}{m} \vec{\xi}_i + \frac{1}{m} \vec{F}_i. \quad (3.1)$$

e

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i. \quad (3.2)$$

Onde $\gamma' = \gamma/m$, sendo γ a constante de fricção. Como a dimensão do nosso espaço $s = 2$, temos $2N$ equações que descrevem a dinâmica do sistema. Onde F_{xi} e F_{yi} são componentes do vetor \vec{F}_i , da qual representa a força sentida pela i -ésima partícula devido à presença das outras partículas. Lembrando que os números ξ_{xi} e ξ_{yi} são números aleatórios que seguem as relações (2.3) e (2.4). Tal força \vec{F}_i é a força resultante sobre a partícula i e é dada por;

$$\vec{F}_i = -\kappa \sum_{j \neq i} \max(R_i + R_j - |\vec{r}_j - \vec{r}_i|, 0) \hat{n}_{ji}. \quad (3.3)$$

Em que, κ é um constante positiva e R_i e R_j são respectivamente o raio da partícula i e j . Observe que, no nosso modelo $R_i = R_j = d/2$ para todo i e j . O versor \hat{n}_{ji} aponta da partícula i para a partícula j . A força é nula quando $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| > d$, pois não há contato entre as partículas i e j .

Por simplicidade iremos fazer a modelagem das equações primeiramente para o método de Euler. Assim teremos, seguindo a receita da equação (2.71).

$$v_{ix}(t+h) = v_{ix}(t) + h\{-\gamma v_{ix}(t) + \frac{1}{m}F_{ix}\} + \sqrt{2\eta h}\xi_1. \quad (3.4)$$

$$v_{iy}(t+h) = v_{iy}(t) + h\{-\gamma v_{iy}(t) + \frac{1}{m}F_{iy}\} + \sqrt{2\eta h}\xi_2. \quad (3.5)$$

$$x_i(t+h) = x_i(t) + hv_{ix}. \quad (3.6)$$

$$y_i(t+h) = y_i(t) + hv_{iy}. \quad (3.7)$$

Onde h é o intervalo entre dois tempos sucessivos (t_i, t_{i+1}) . Sendo assim, uma vez situadas as condições iniciais do problema poderemos evoluir as equações (3.4),(3.5),(3.6), (3.7) de modo único.

É de se nota que o método de Euler se destaca pela sua simplicidade. Mas este é de primeira ordem, ou seja, apenas termo de primeira ordem em h deverão ser levado em conta, vejamos agora um de segunda ordem. Segue o método Runge-Kutta de segunda ordem estocástico .

$$v_{ix}(t+h) = v_{ix}(t) + \frac{h}{2}\{H_{i1x} + H_{i2x}\} + \sqrt{2\eta h}\xi_1. \quad (3.8)$$

$$v_{iy}(t+h) = v_{iy}(t) + \frac{h}{2}\{H_{i1y} + H_{i2y}\} + \sqrt{2\eta h}\xi_2. \quad (3.9)$$

$$x_i(t+h) = x_i(t) + \frac{h}{2}\{P_{i1x} + P_{i2x}\} \quad (3.10)$$

$$y_i(t+h) = y_i(t) + \frac{h}{2}\{P_{i1y} + P_{i2y}\} \quad (3.11)$$

Onde temos as seguintes expressões para H_{i1x} , H_{i2x} , H_{i1y} e H_{i2y} .

$$H_{i1x} = -\gamma v_{ix}(t) + \frac{1}{m}F_{ix}(\vec{r}_i(t); \{\vec{r}_j\}). \quad (3.12)$$

$$H_{i2x} = -\gamma(v_{iy}(t) + hH_{i1x} + \sqrt{2\eta h}\xi_1) + \frac{1}{m}F_{ix}(\vec{r}_i(t_{half}); \{\vec{r}_j(t_{half})\}). \quad (3.13)$$

$$H_{i1y} = -\gamma v_{iy}(t) + \frac{1}{m}F_{iy}(\vec{r}_i(t); \{\vec{r}_j(t)\}). \quad (3.14)$$

$$H_{i2y} = -\gamma(v_{iy}(t) + hH_{i1y} + \sqrt{2\eta h}\xi_{1.}) + \frac{1}{m}F_{iy}(\vec{r}_i(t_{half}); \{\vec{r}_j(t_{half})\}). \quad (3.15)$$

Onde também temos a expressão para P_{i1x} , P_{i2x} , P_{i1y} e P_{i2y} .

$$P_{i1x} = v_{ix}(t). \quad (3.16)$$

$$P_{i2x} = v_{ix} + hH_{i1x}. \quad (3.17)$$

$$P_{i1y} = v_{iy}(t). \quad (3.18)$$

$$P_{i2y} = v_{iy}(t) + hH_{i1y}. \quad (3.19)$$

Vale apresentar certas questões. Nas equações (3.12) e (3.14) temos os primeiros passos do Runge-Kutta, essencialmente são lados direitos das equações de Langevin respectivamente (3.1) e (3.2) em um determinado tempo t . Enquanto, (3.13) e (3.15) são a chamados de segundo passo do Runge-Kutta , e possuem a forma do lado direito da equações de Langevin avaliadas no tempo t_{half} . Note que $t_{half} = h + t$ é o ponto de tempo médio que será usado para computar o passo de integração "real"(PRESS et al., 1992). Note que, no segundo passo há dependência do primeiro, que são os termos do tipo $H_{i1\alpha}$, onde $\alpha = \{x, y\}$, presentes em (3.13) e (3.15). Vejamos agora o caso dos $P_{i\lambda\alpha}$, em que $\lambda = \{1, 2\}$. Os termos P_{i1x} e P_{i1y} chamados de primeiro passos do Runge-kutta , são as componentes da velocidade no tempo t . Enquanto, P_{i2x} e P_{i2y} chamados segundo passo do Runge-kutta , são das velocidade no tempo intermediário t_{half} .

Vejamos agora o papel da força \vec{F} nas equações geradas pelo método Runge-Kutta. Na equação (3.12) e (3.14), temos a presença dos termos $F_{ix}(\vec{r}_i(t); \{\vec{r}_j(t)\})$ e $F_{iy}(\vec{r}_i(t); \{\vec{r}_j(t)\})$ os quais representam a força sentida pela i -ésima partícula perante a presença das outras j -ésimas no tempo t . Dai surge a necessidade de saber a forma de $\vec{r}_i(t_{half}) = (x_i(t_{half}), y_i(t_{half}))$, segue.

$$x_i(t_{half}) = x_i(t) + hP_{i1x}. \quad (3.20)$$

$$y_i(t_{half}) = y_i(t) + hP_{i1y}. \quad (3.21)$$

Vale ressaltar a ordem de integração das equações geradas pelo método do Runge-Kutta estocástico. Suponha que seja dado o conjunto de condições iniciais \mathbb{X}_0 . Então a partir desses pontos iniciais podemos calcular o primeiro passo do Runge-kutta que são os valores $\{H_{i1\alpha}; P_{i1\alpha}\}$. Tendo conhecimento desses valores podemos calcular os valores intermediários $\{\vec{r}_i(t_{half})\}$ e em seguida o segundo passo do Runge-Kutta $\{H_{i2\alpha}; P_{i2\alpha}\}$, pois

o conjunto $\{H_{i2\alpha}\}$ depende da posição intermediária . Desta maneira as equações (3.12), (3.13), (3.14) e (3.15) irão gerar o estado do sistema no tempo $t = h$, ou seja, as velocidades e posições de cada partícula.

Em todas as simulações aplicamos a condições periódicas de contorno (CPC) nas paredes da caixa a qual contém as partículas. Desta forma, se por ventura uma dada componente espacial da posição j da partícula i estiver fora da caixa, isto é depois da caixa $r_{ij} > L$, ou antes da caixa $r_{ij} < 0$ faremos a componente da partícula volta para caixa com a seguinte transformação $r_{ij} \rightarrow r_{ij} - L$ para depois da caixa e $r_{ij} \rightarrow r_{ij} + L$ para depois da caixa (RAPAPORT, 2004; BORBA et al., 2020).

Nesse modelo os valores tomados fixos são $d = 1.0$, $\kappa = 100.0$, $m = 1.0$, $L = 50.0$, $N = 1000$ e $h = 0.001$, logo a densidade de partícula é $\psi = \frac{N\pi d^2}{4L^2} = \frac{\pi}{10} \approx 0.31415$. Os parâmetros que queremos variar são $\gamma = [0.001, 1]$ e $\eta = [0.001, 1]$. A condição inicial das componentes das velocidades e posições das partículas são tomadas aleatoriamente, sendo que $|\vec{v}_i(t = 0)| = 1$ e $r_{ij} \in]0, L[$ para quaisquer partícula i e componente espacial j .

Queremos integrar as equações (3.1) e (3.2) para cada i a partir de certo conjunto $\mathbb{X}_0 = (\vec{r}_i(t = 0), \vec{v}_i(t = 0)); 1 \leq i \leq N$, isto é o conjunto \mathbb{X}_0 é o conjunto da condição inicial do sistema e é a partir dele que as equações de movimento evoluem no tempo. Pela discussão feita no capítulo passado é conveniente saber o comportamento dos momentos(média, desvios padrão, etc.) e medidas referentes a (DMQ) no tempo. Aqui estamos interessados em 4, a média da velocidade para cada componente espacial, x e y , e as quantidades $\lambda_x(t)$ e $\lambda_y(t)$ expressas pelas seguintes relações;

$$\lambda_x(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i(t) - x_{i0})^2 \quad (3.22)$$

e

$$\lambda_y(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i(t) - y_{i0})^2. \quad (3.23)$$

Onde $x_{i0} = x_i(t = 0)$ e $y_{i0} = y_i(t = 0)$ as posições iniciais de dada partícula i . Pela forma de (3.3) é de se esperar que não haja direção preferencial nas medidas citadas, pois estamos diante um sistema de partículas idênticas sem qualquer outro campo de força F_{outro} que promova uma direção preferencial.

O tratamento das medidas se dará por médias das medidas dos ensaios fixando o mesmo tempo de início t_{M0} e término t_{Mf} das medidas para cada um. A duração de vida dos ensaios t_v também será a mesma. As condições iniciais das posições e velocidades irão diferir de um ensaio para outro aleatoriamente. Tendo isso posto, iremos utilizar duas variantes do tratamento. A primeira será dado quando $t_{M0} = 100h, t_{Mf} = t_v = 6000h$ e $p = 4$ ensaios, chamamos este arranjo de $\tau(1)$.

A segunda por $t_{M0} = 1000h$, $t_{Mf} = t_v = 600000h$ com p variando de 4 para 32, chamamos esse de $\tau_p(2)$. Em qualquer um destes arranjos faremos 101 medidas igualmente espaçadas no tempo para cada grandeza. Ao o final da próxima seção iremos mostrar, também, o tempo de compilação de duas simulações, um para o método de Euler e outro para Runge-Kutta.

3.1.2 Resultados e Discussão

Começamos apresentando os resultados para difusão dos coloides livres, através da medida do desvio médio quadrático da posição em função do tempo. Observe que na figura (1) temos os gráficos (1a), (1b), (1c), (1d) para diferentes valores de γ , vejamos para dois casos extremos. O caso $\gamma = 1.0$ representado pelo gráfico (1d) para tempos $T \in]0, 2.0[$ os valores de desvio médio quadrático (DMQ) são crescentes. Em contrapartida, para $T \in]3, 6[$ as curvas tendem a ser cada vez mais próximas de uma função tipo constante. Há uma divergência maior no primeiro intervalo do tempo do que no segundo intervalo entre os métodos numéricos Euler e Runge-Kutta. Aparentemente, no segundo intervalo a distância entre os valores dos métodos se mantêm.

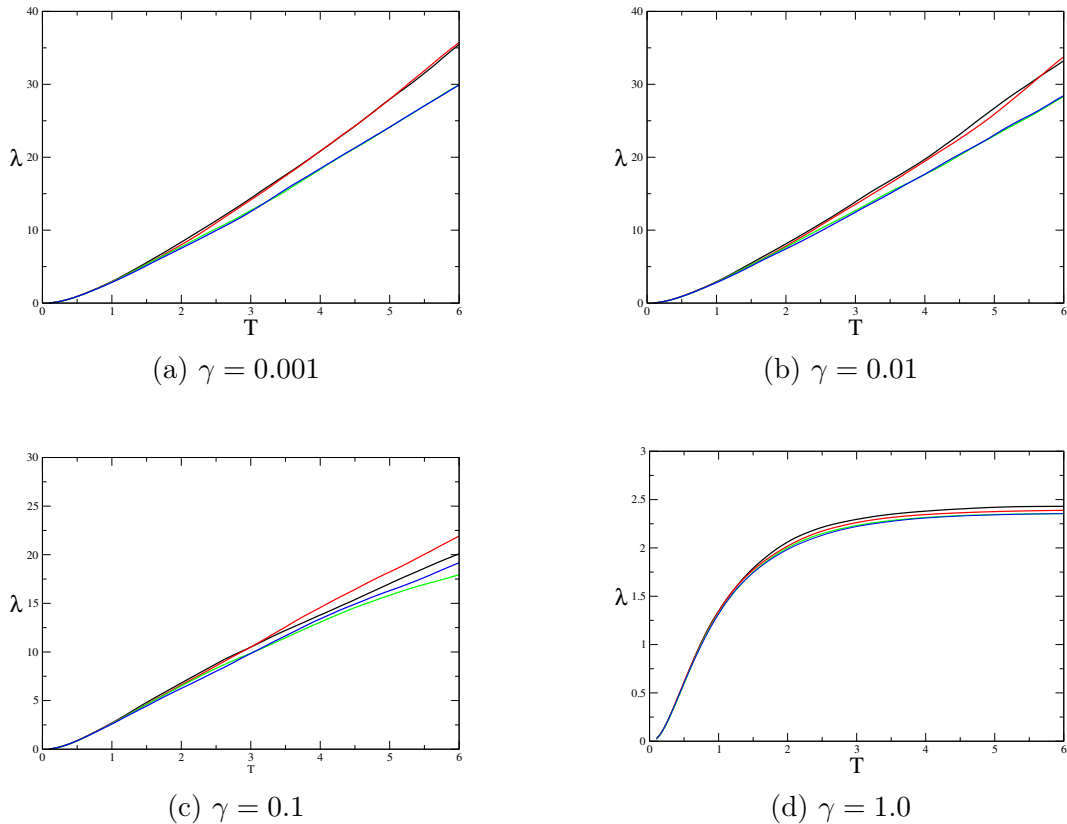


Figura 1 – Desvio médio quadrático da posição em função do tempo usando a variante $\tau(1)$ e $\eta = 0.001$ variando o parâmetro γ . A curva de cor preta e vermelha referem-se, respectivamente, as componentes x e y do desvio médio quadrático calculadas via método de Euler, as curvas de cor verde e azul referi-se respectivamente as componentes x e y da difusão calculadas via Runge-kutta.

Para o gráfico (1a) que representa o caso $\gamma = 0.001$ observamos que todas as curvas são crescentes para diferentes instantes de tempo. No intervalo de tempo $T \in]0, 1.5[$ há uma convergência mais acentuada do que na região $T \in]4, 6[$. Apesar disso, a diferença entre as componentes (λ_x e λ_y) calculadas por um mesmo método é relativamente pequena. Ao contrário do último caso (1d), podemos observar que existe uma tendência de que a diferença entre os métodos no cálculo de mesma medida aumente para $T \in]0, 6[$. Vejamos agora, os casos de γ intermediários.

O gráfico (1c) corresponde ao caso $\gamma = 0.1$. No intervalo de tempo $T \in]0, 1.25[$ temos uma convergência entre os métodos numéricos mais forte do que o intervalo $]4, 6[$. O gráfico (1b), caso $\gamma = 0.01$, temos, no geral, uma convergência menor do que (1c). Para intervalos de tempo $T \in]0, 1[$ existe uma maior convergência do que no intervalo $T \in]5, 6[$.

Os valores $\gamma = [0.001, 1.0]$ na figura (1) causam efeitos que se maximizam e minimizam para valores extremos de γ . Lembrando que na equação (3.1) γ é a constante de fricção do meio, quanto maior γ maior a resistência ao movimento no meio, em contrapartida, quanto menor γ menor a resistência. Desta maneira, dado que $t = 0$ as partículas possuíam certa quantidade de energia e momento linear total, em certo tempo t_s estas quantidades serão consumidas consideravelmente para constante de fricção muito grande comparado $|\vec{\xi}_i|$ ou mantida pelo menos parte destas quantidades para constante de fricção pequena.

A primeira ideia é refletido pelo gráfico (1d), de início as partículas têm energia e momento linear para se moverem em relação às posições iniciais, mas a partir de certo tempo t_s não há energia e momento linear considerável para que estas se movam significativamente. É nesse caso que a distância entre os métodos numéricos é pequena comparado ao outros.

A segunda ideia é vista no caso (1a). Aqui, valor de γ é o menor de todos os casos, mas ainda assim não é nulo. Logo, as partículas transferirão energia-momento para o meio e $\vec{\xi}_i$ inserira energia considerável para que as partículas movam-se no meio. Assim, as curvas de λ são crescentes. Este é onde as diferenças entre os métodos numéricos são maiores comparados Nas aos outros casos.

Como o espaço é isotrópico não há direção preferencial para as grandezas envolvidas. Desta maneira, seria conveniente definir uma grandeza em função de λ_x e λ_y , denominada como λ_{xy} . Segue a forma explicita;

$$\lambda_{xy} = \lambda_x + \lambda_y. \quad (3.24)$$

Na figura (2) temos dados referentes a grandeza λ_{xy} . Para enfatizar os regimes balístico e difusivo os gráficos foram postos na escala **logxlog**. Os gráficos (2a) e (2b) mostram curvas para casos extremos do parâmetro γ . O gráfico (2a) mostra que a dife-

rença entre as curvas calculadas por cada método não é visível para $T \in]0, 1[$, mas para $T > 1$ os valores calculados por cada método começam divergir.

Já para o caso (2b), as inclinações dos valores da difusão calculados por cada método permanecem relativamente próximas. Haja vista que as curvas de cada método são tão próximas que no gráfico não é possível, facilmente, observar a distinção entre as curvas. Vejamos o estudo dos dados de difusão por regressões lineares e potencias.

Nos gráficos (2c) e (2d) temos curvas para o caso $\gamma = 0.001$, sendo cada gráfico temos apenas o estudo de um dos métodos. No gráfico (2c) as regressões linear e potencia possuem a regra do tipo $y = -12.694 + 13.762x$ e $y = 15.056x^{2+0.4863}$, onde x é abscissa e y é a ordenada. Em quanto para o caso (2d) as regressões são $y = -8.0969 + 11.266x$ e $y = 15.056x^{2+0.4704}$. Note que os valores de difusão apresentam comportamento balístico, em (2c) e (2d), da forma $\lambda \sim x^{2+\epsilon}$, mas o segundo caso é mais acentuado do que o primeiro, pois $0 < \epsilon_{rk} < \epsilon_{er}$ (os índices rk e er indicam respectivamente Runge-Kutta e Euler). Podemos concluir que o regime linear é presente para tempos suficientemente grandes e balístico para tempos suficientemente próximos de zero.

Na figura (3) temos quatro gráficos referentes a difusão usando a variante $\tau_p(2)$, que nos permite saber se o método de Euler ainda continua divergindo do Runge-Kutta para tempos grandes. No gráfico (3a), caso $\gamma = 0.001$, notamos que no método de Euler os valores das componentes estão mais próximos entre si do que comparado com o caso $\tau(1)$, no entanto, os valores calculados pelo método de Euler divergem ainda mais das curvas calculadas via Runge-Kutta. O gráfico (3b) temos as curvas de cada componente de $\vec{\lambda}$ calculadas por Runge-Kutta, são as mesmas curvas plotadas no gráfico (3a) de cores iguais. Com os gráficos (3a) e (3b) podemos perceber a ordem de grandeza entre os métodos numéricos. O método de Euler é diverge fortemente do método do Runge-Kutta para variante $\tau_4(2)$. Podemos observar que a divergência entre os métodos aumentou, consideravelmente, com tempo de simulação ($\tau(1) \Rightarrow \tau_4(2)$).

Em contra partido, o gráfico (3c), caso $\gamma = 1.0$, utilizando a variante $\tau_4(2)$ as curvas calculadas pelos métodos numéricos são relativamente próximas da ordem quando tínhamos usado a variante $\tau(1)$. No gráfico (3d) temos as curvas calculadas via método de Euler para diferentes valores de p , observe que o caso de $p = 4$ se distancia dos outros casos de p , sendo estes tendendo a se aproximar, fracamente, das curvas calculadas via método de Runge-Kutta.

Na figura (4) podemos observar o comportamento da difusão para diferentes valores de η . Note que em (4a) e (4b) os pontos calculados por cada método numérico possuem uma considerável divergência. Mas, conforme os gráficos (4c) e (4d) a medida que o parâmetro η aumenta os pontos calculados por cada método se aproxima cada vez mais, embora para o caso $\eta = 1.0$ os valores da difusão tendem a divergir.

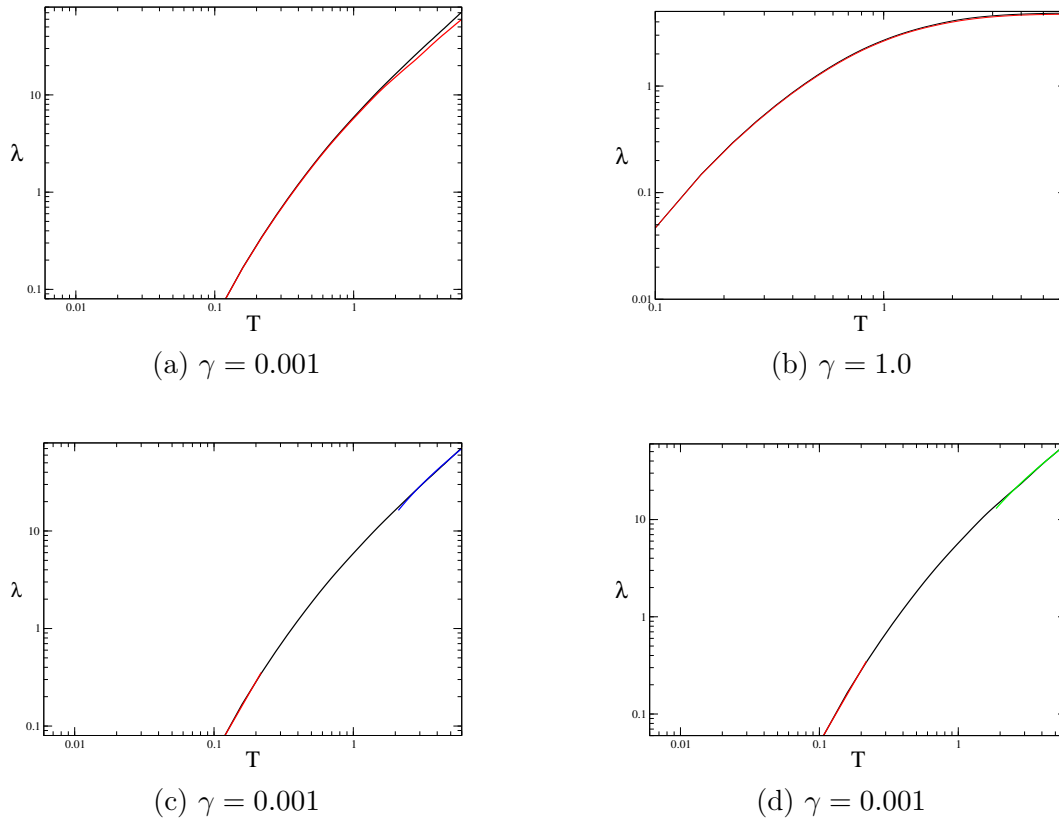


Figura 2 – λ_{xy} em função do tempo para alguns valores diferentes de γ . Nos dois primeiros gráficos (2a) e (2b) temos a comparação dos valores calculados por cada método, em que a curva de cor preta é para o método de Euler e a curva de cor vermelha para Runge-Kutta. Já para os dois últimos gráficos (2c) e (2d) temos o plote das curvas de tendência, sendo que (2c) temos em preto a curva de λ_{xy} via Euler e as curvas de cor vermelha e azul são, respectivamente, as regressões linear e potencia. Em (2d) temos em preto a curva de λ_{xy} via Runge-Kutta e as curvas de cor vermelha e verde são respectivamente as regressões linear e potencia.

Na figura (5) temos as curvas de velocidade média em função do tempo para diferentes valores de γ . Em todos os casos de γ apresentados os valores calculados por cada método são extremamente próximos se comparado com o cálculo do desvio médio quadrático (DMQ) (tanto usando a variante $\tau(1)$ e $\tau_4(2)$). Podemos observar que por mais que os valores de γ aumentem ou diminuam não surge uma diferença entre os métodos, significativa (comparando com os valores da λ). Nos gráficos (5a) e (5b) é possível notar a diminuição dos picos das curvas de velocidade média, cada vez mais tendendo para situação estacionária. Para os gráficos (5c) e (5d) observamos uma tendência ainda mais rápida que os gráficos anteriores, sendo visível o comportamento estacionário $T \in]200, 600]$.

Nos gráficos da figura (5) não é possível visualizar as diferenças de cada método, para todos os casos da γ apresentados. Visto que estejamos interessados na comparação entre os métodos numéricos vamos definir outra grandeza em função das componentes da velocidade média calculada por Euler e Runge-Kutta. Tal grandeza será definida pela

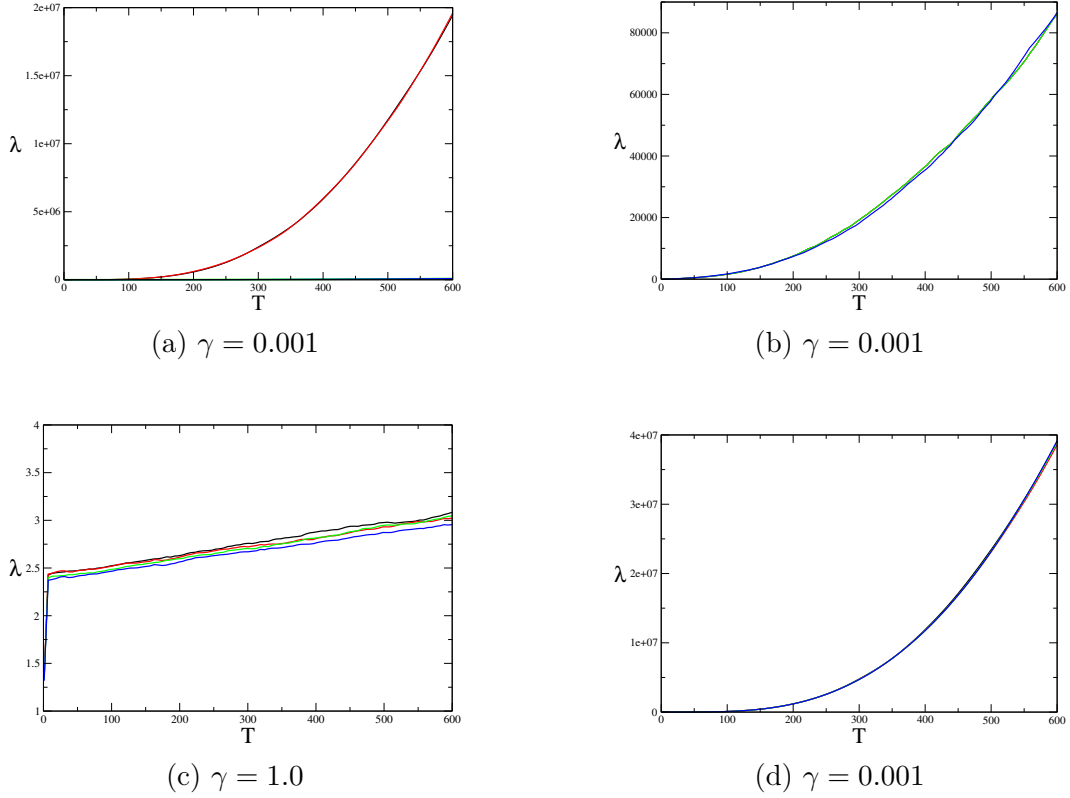


Figura 3 – Quatro gráficos de λ em função do tempo usando a variante $\tau_p(2)$, $\eta = 0.001$ e $\gamma = 0.001$. Nos três primeiros gráficos (3a), (3b), (3c), preto e vermelho referem-se, respectivamente, as componentes x e y da difusão calculadas via método de Euler, por outro lado, as curvas de cor verde e azul referi-se respectivamente as componentes x e y da difusão calculadas via Runge-Kutta e usamos a variante $\tau_4(2)$. Já o gráfico (3d) refere-se as curvas de grandeza λ_{xy} calculadas pelo método de Euler para diferentes valores de p : preto $p = 4$, vermelho $p = 8$, verde $p = 16$ e azul $p = 32$.

diferença entre as velocidades médias por cada método numérico. Segue;

$$\Delta v_i = (\langle v_i \rangle)_{Er} - (\langle v_i \rangle)_{RK}. \quad (3.25)$$

Onde, o índice i é a componente espacial da velocidade e a notação Er indica calculada via método de Euler enquanto a notação RK indica calculada via método de Runge-Kutta de segunda ordem.

Dado a figura (6) podemos tirar algumas conclusões. No gráfico (6a), caso $\gamma = 0.001$, a escala de grandeza do eixo y é da ordem de 10^{-9} e 10^{-8} , ou seja, os métodos numéricos diferem da ordem de 10^{-9} ou 10^{-8} dependendo do intervalo. Para $T \in]0, 200[$ observamos que a diferença dos métodos é da ordem 10^{-9} em quanto que $T \in]300, 600[$ a diferença é da ordem 10^{-8} .

Já no gráfico (6b) e (6c), caso $\gamma = 1.0$, existe uma convergência entre os métodos numéricos para praticamente todos os valores de T . Sendo que a diferença que se mantém é da ordem 10^{-7} é um fator de 10^2 ou 10 maior que do que a escala do gráfico (6a)

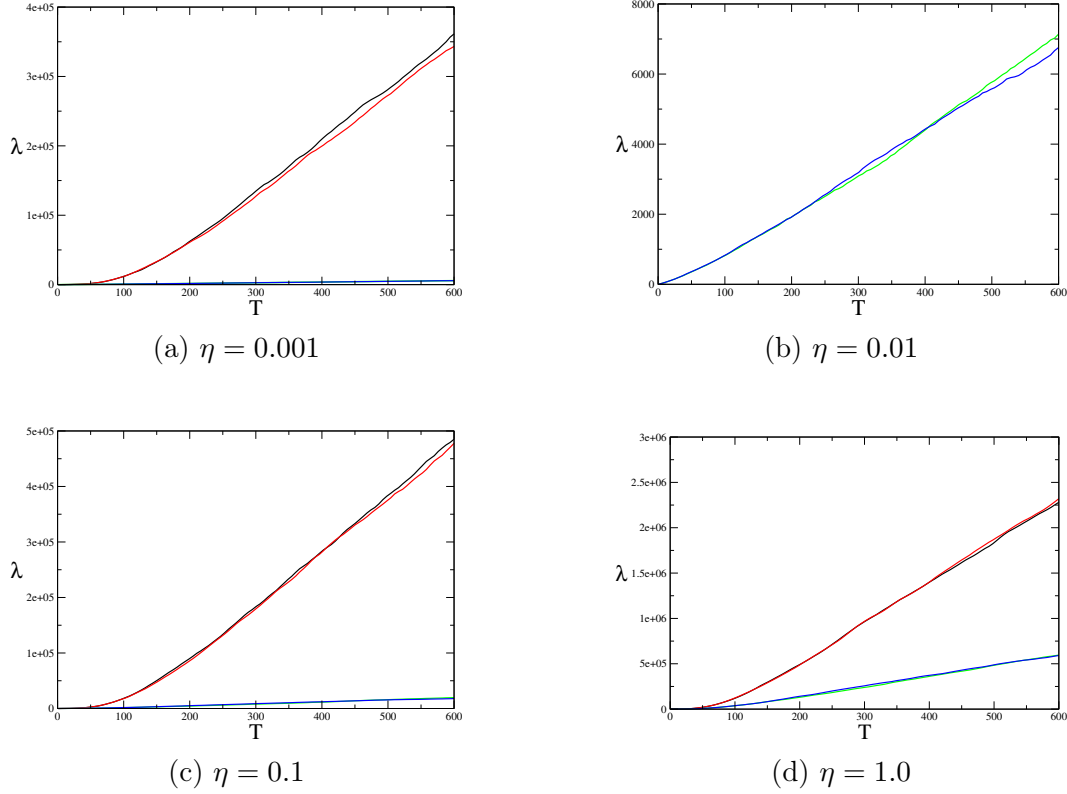


Figura 4 – Quatro gráficos de difusão em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ para diferentes valores η fixando o valor de $\gamma = 0.01$. As curvas de cor preta e vermelha são, respectivamente, as componentes x e y da difusão via método de Euler. Enquanto as curvas de cor verde e azul são respectivamente as componentes x e y da difusão calculadas via Runge-kutta.

dependendo do intervalo de tempo. Pela definição de Δv_i existem trechos em que os valores calculados do método Runge-kutta são maiores ou menores do que do método de Euler. No caso (6b) esse comportamento ocorre com mais frequência do que (6a). Como o parâmetro γ está ligado com a resistência ao movimento das partículas, com valores relativamente grandes, $\gamma = 1.0$ por exemplo, o sistema aproxima-se do regime superamortecido. Os valores velocidades de cada partícula a partir de certo tempo irão oscilar muito próximo em torno de zero. Os passos de integração dos métodos numéricos (Euler e Runge-Kutta) irão calcular do estado em que as partículas de velocidades são praticamente nulas para um segundo estudo extremamente próximo do primeiro.

Já para valores de γ relativamente pequenos, como $\gamma = 0.001$ por exemplo, embora haja um amortecimento do fluido sobre as partículas este não é grande o suficiente para superar a força aleatória de cada uma. Deste modo, mesmo após do tempo de termalização do sistema a velocidade de cada partícula mudará com tempo significativamente, embora $\langle v(t) \rangle \approx 0$. Desta forma, o passo dos métodos numéricos para cada partícula levarão de um estado para outro, diferente do primeiro. Como não poderemos aproximar a lei de velocidade como uma função constante os métodos de integração diferir mais fortemente.

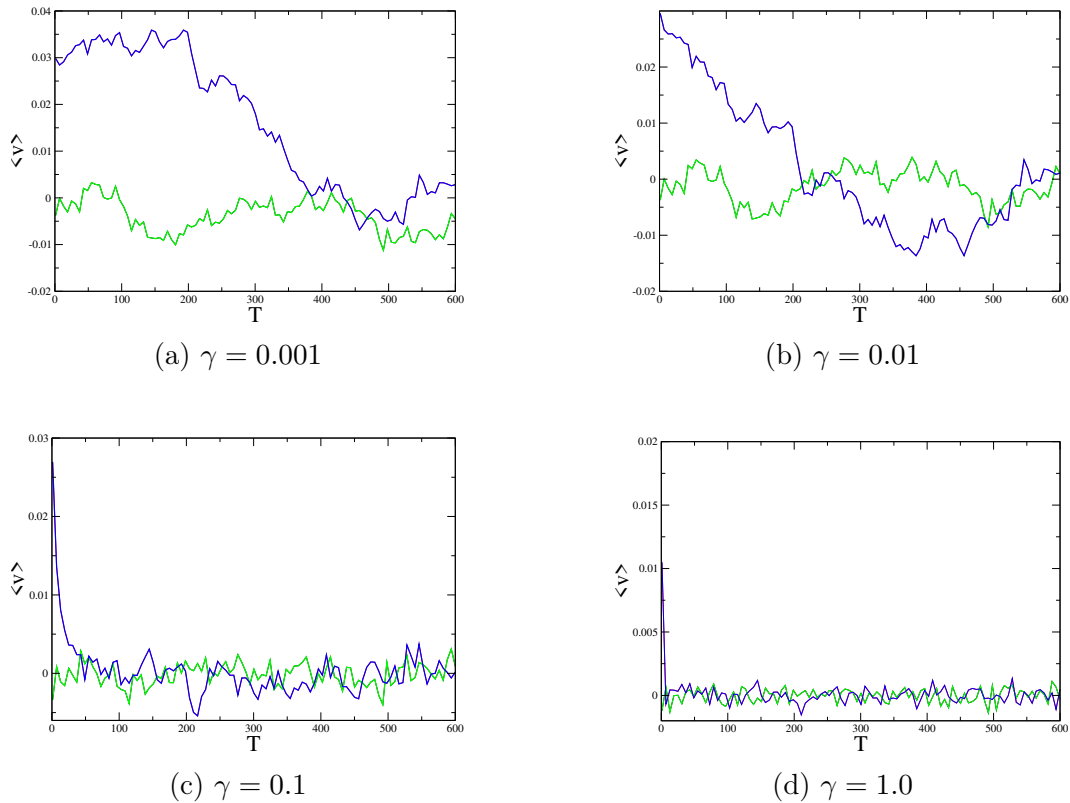
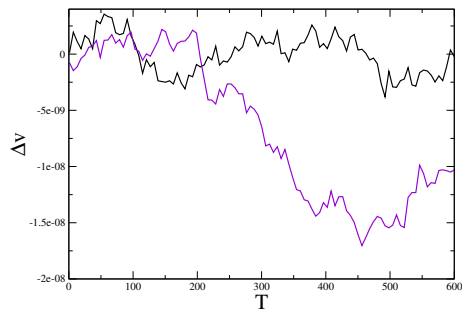


Figura 5 – Quatro gráficos das componentes da velocidade média calculadas por cada método numérico em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e $\eta = 0.001$ para diferentes valores de γ . Nos quatro gráficos as curvas de cor verde e azul são, respectivamente, a componente x e y pelo método Runge-kutta. Foram plotadas as curvas via método Euler de cor preta para componente x e vermelha para y , mas essas curvas estão muito próximas das curvas via Runge-Kutta para podemos distinguir.

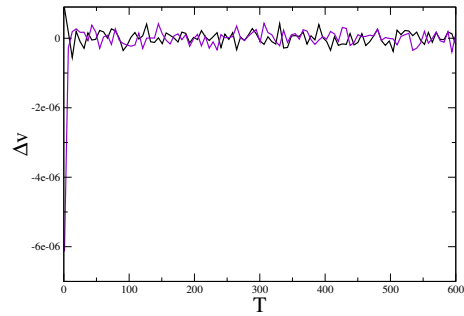
Na imagem (7) temos gráficos da velocidade média no tempo para diferentes valores de η . Observamos que em todos os casos de η a velocidade média calculada por cada método são muito próximos de modo que não podemos distinguir. Na figura (8) podemos observar a ordem da diferença entre os métodos numéricos. No primeiro caso (8a) a ordem é de 10^{-8} em quanto no segundo (8b) a ordem é de 10^{-6} para intervalo de tempo medido.

Visto os resultados numéricos apresentados nesse subseção, vamos agora medir o tempo de execução e compilação de programas. Os programas utilizados para fazer assimulações são **progeuler.c** e **progRK.c**, primeiro simulação via método de Euler e segundo via método de Runge-Kutta de segunda ordem. Em ambos os casos foi utilizado a variante $\tau_4(2)$ para $\gamma = 0.001$ e $\eta = 0.001$. O instrumento utilizado é terminal(**xfc**) do Linux com o comando **time**. Sendo Necessário o compilador gcc já instalado para podemos compilar nossos programas. Segue o tempo de compilação do primeiro programa.

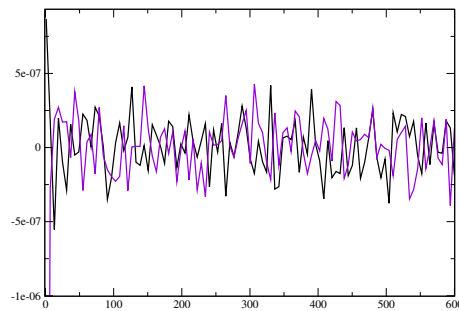
```
$ gcc progeuler.c -lm -o lp
real    0m0.105s
user    0m0.086s
```



(a) $\gamma = 0.001$



(b) $\gamma = 1.0$



(c) $\gamma = 1.0$

Figura 6 – Três gráficos da grandeza Δv_i para cada componente x e y em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e $\eta = 0.001$ para diferentes valores de γ , sendo que o terceiro é resultado da ampliação do segundo. Nos dois gráficos as curvas de cor preta refere-se a componente x em quanto a violeta para componente y.

```
sys 0m0.020s
```

Agora podemos medir o tempo de execução da simulação via método de Euler, segue.

```
$time ./lp
real 12m42.905s
user 12m42.865s
sys 0m0.004s
```

Vejamos o tempo de compilação do segundo programa, segue.

```
$ gcc progRK.c -lm -o lp
real 0m0.120s
user 0m0.099s
sys 0m0.021s
```

Vejamos o tempo de execução da simulação via método de Runge-Kutta de segunda ordem.

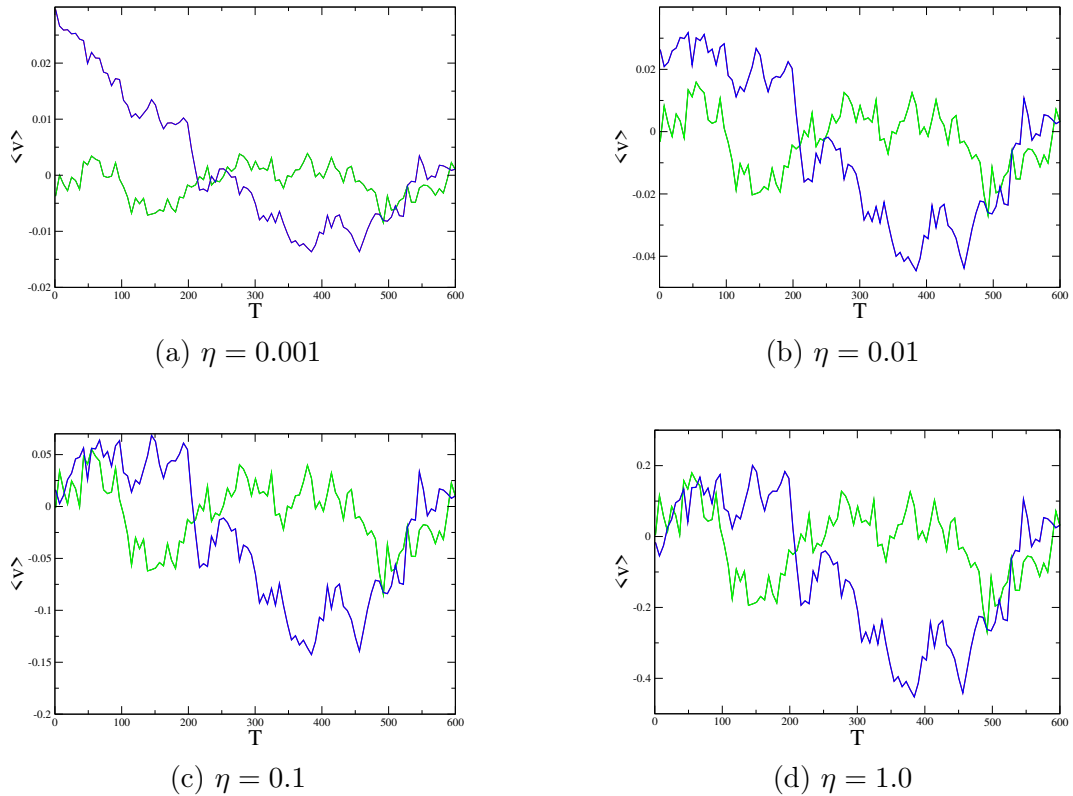


Figura 7 – Quatro gráficos das componentes da velocidade média calculada por cada método numérico em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e fixando $\gamma = 0.01$ para diferentes valores de η . Nos quatro gráficos as curvas de cor verde e azul são, respectivamente, a componente x e y pelo método Runge-kutta. Foram plotadas as curvas via método Euler de cor preta para componente x e vermelha para y, mas essas curvas estão muito próximas das por via Runge-Kutta para podemos distinguir.

```

$ time ./lp
real    23m47.858s
user    23m47.734s
sys     0m0.080s

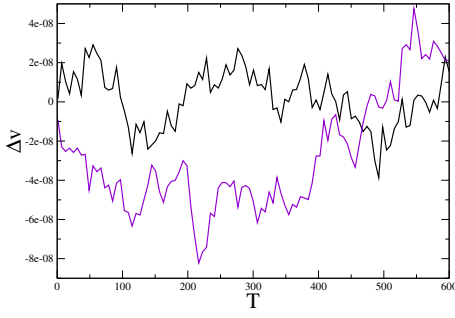
```

Observe que o tempo de execução do programa via Runge-Kutta é quase duas vezes maior que do Euler. Isto ocorre por conta que no algoritmo do Runge-Kutta o cálculo da Força é feito duas vezes por passo de integração em quanto para Euler o calculo da Força é apenas uma vez por passo.

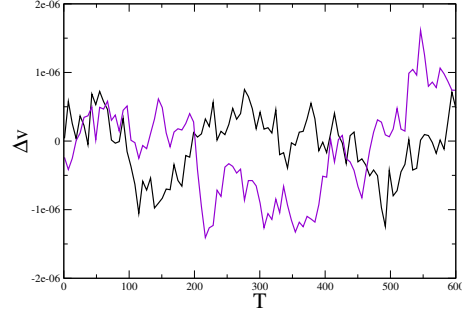
3.2 Movimento Browniano Angular

3.2.1 Modelo de Matéria Ativa

Seja um conjunto de N partículas idênticas de massa m imerso em um fluido de constante γ grande o suficiente para podermos despreza a taxa de variação da velocidade



(a) $\eta = 0.001$



(b) $\eta = 1.0$

Figura 8 – Dois gráficos das componentes da grandeza Δv calculados por cada método numérico em função do tempo usando a variante $\tau_4(2)$ e fixando $\gamma = 0.01$ para diferentes valores de η . As curvas de cor preta e violeta são, respectivamente, a componente x e y da grandeza Δv .

para cada partícula i , $\frac{d\vec{v}_i}{dt} \approx \vec{0}$. E nesse fluido as partículas movessem em apenas duas direções, ou seja, o sistema é bidimensional. Modelo apresentado aqui é as vezes bastante utilizado no estudo de matéria ativa. Podemos escrever a equação de movimento para cada partícula i ;

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = v_0 \hat{\rho}_i + \gamma \vec{F}_i + \frac{1}{\gamma} \vec{\xi}_i \quad (3.26)$$

e;

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \mu_i(t). \quad (3.27)$$

Onde termo \vec{F}_i representa a força sentida pela partícula i , definida anteriormente em (3.3). Enquanto para ξ_i e μ_i são números aleatórios. Note que nas equações $M(t) = 0$ e $\alpha = 1$.

Iremos primeiro utilizar o método de Euler estocástico para integrar as equações (3.26) e (3.27) e em seguida pelo método de Runge-kutta de segunda ordem estocástico. Segue a modelagem das equações via método de Euler.

$$x_i(h+t) = x_i(t) + h(v_0 \cos \theta_i(t) + \gamma F_x(\vec{r}_i(t))) + \frac{1}{\gamma} \sqrt{2h\eta} \xi_{ix}(t) \quad (3.28)$$

$$y_i(h+t) = x_i(t) + h(v_0 \sin \theta_i(t) + \gamma F_y(\vec{r}_i(t))) + \frac{1}{\gamma} \sqrt{2h\eta} \xi_{iy}(t) \quad (3.29)$$

$$\theta_i(h+t) = \theta_i(t) + \sqrt{2h\eta_\theta} \xi_\theta(t) \quad (3.30)$$

Onde ξ_{ix} , ξ_{iy} e ξ_θ , são números aleatórios calculados para cada interação de variância unitária e média nula. Enquanto η e η_θ são constantes reais que representam respectivamente a intensidade do ruído gaussiano Normal e angular.

Com as equações (3.28), (3.29) e (3.30) podemos estimar o estado do sistema em $t + h$, a precisão é melhor quanto menor for h . Podemos observar que o número de equações para determina o estado futuro do sistema é menor em comparação ao movimento browniano normal.

Uma vez dendo encontrado a forma da discretização temporal das equações via método de Euler, podemos então prosseguir para o método do Runge-Kutta de segunda ordem. Segue a discretização via Runge-Kutta.

$$x_i(t + h) = x_i(t) + \frac{h}{2}\{H_{i1x} + H_{i2x}\} + \frac{1}{\gamma}\sqrt{2\eta h}\xi_1. \quad (3.31)$$

$$y_i(t + h) = y_i(t) + \frac{h}{2}\{H_{i1y} + H_{i2y}\} + \frac{1}{\gamma}\sqrt{2\eta h}\xi_1. \quad (3.32)$$

$$\theta_i(h + t) = \theta_i(t) + \frac{h}{2}\{l_{1\theta} + l_{2\theta}\} + \sqrt{2h\eta}\xi_{T_i}. \quad (3.33)$$

Onde $H_{i1\alpha}$ refere-se ao primeiro passo do Runge-Kutta enquanto para $H_{i2\alpha}$ refere-se ao segundo , com $\alpha = \{x, y\}$, da equação de posição. Para equação angular $l_{1\theta}$ é o primeiro passo do Runge-Kutta, enquanto $l_{2\theta}$. Prosseguindo;

$$H_{i1x} = v_0 \cos(\theta(t)) + \gamma F_x(\vec{r}_i(t)). \quad (3.34)$$

$$H_{i1y} = v_0 \sin(\theta(t)) + \gamma F_y(\vec{r}_i(t)). \quad (3.35)$$

$$H_{i2x} = v_0 \cos(\theta(t_{half})) + \gamma F_x(\vec{r}_i(t_{half})). \quad (3.36)$$

$$H_{i2y} = v_0 \sin(\theta(t_{half})) + \gamma F_y(\vec{r}_i(t_{half})). \quad (3.37)$$

Onde $t_{half} = h + t$ representa o tempo intermediário que será usado para o cálculo do passo de integração real, vejamos o caso dos l -is. Para a equação angular os termos $l_{1\theta}$ e $l_{2\theta}$ são nulos. Apesar disso é necessário apresenta o termo $\theta(t_{half})$ e com $x_i(t_{half})$ e $y_i(t_{half})$, que são os valores intermediários.

$$\theta(t_{half}) = \theta(t) + \sqrt{2h\eta}\xi_{\theta_{half}}. \quad (3.38)$$

$$x_i(t_{half}) = x_i(t) + hH_{i1x}. \quad (3.39)$$

$$y_i(t_{half}) = y_i(t) + hH_{i1y}. \quad (3.40)$$

Onde $\xi_{\theta_{half}}$ é um número aleatório de variância unitária e média nula utilizado em um tempo intermediário t_{half} . A equação (3.38) deve ser utilizada no tempo intermediário.

Nosso estudo será dividido em duas subseções a primeira voltada a difusão e outra para o transporte. Para primeira parte as grandezas que iremos medir são a velocidade média $\langle \vec{v} \rangle$ e a difusão $\vec{\lambda}$ definidos anteriormente em (3.1.1). Mas para segunda parte do estudo do modelo iremos medir a densidade de corrente \vec{J} definido por;

$$\vec{J} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} \right\rangle; \quad (3.41)$$

onde $\langle \rangle$ é a notação para média no tempo e \vec{v}_{α} é o vetor velocidade de dada partícula α . Sendo que o índice α da partícula que varia entre $[1, N]$.

Em todas as simulações das duas subseções iremos aplicar a condições periódicas de contorno (CPC) como feito na seção anterior (3.1). Nesse modelo os valores tomados fixos são $d = 1.0$, $m = 1$, $L = 50.0$, $N = 1000$, $h = 0.001$, $\gamma = 1.0$, $v_0 = 1.0$ e $\eta = 0$. Mas para primeira subseção $\kappa = 100.0$, em quanto que para segunda parte tomaremos $\eta_{\theta} = 0.001$, $\kappa = 10$ para entre as partículas e $\kappa = 1000$ para interação partícula-obstáculo. Para primeira parte, o parâmetro que queremos variar é $\eta_{\theta} = [0.001, 1]$. Mas para a segunda vamos variar o número de obstáculos q .

As posições das partículas são tomadas aleatoriamente, sendo que $r_{ij}(t = 0) \in]0, L[$ para qualquer partícula i e componente espacial j . Em quanto que as condições iniciais para variável θ_i será dado aleatoriamente sendo que $\theta_i(t = 0) \in]0, 2\pi[$ e i é o índice da partícula. Para tratamento dos dados da primeira subseção iremos utilizar a exclusivamente a variante $\tau_4(2)$. Mas para a segunda parte, iremos utilizar a variante $\tau_4(3)$, isto é com 4 ensaios e $t_{M0} = 100000h$, $t_f = t_v = 1000000h$. Para os dois arranjos faremos 101 medidas igualmente espaçadas no tempo para cada grandeza. Ao final de cada parte faremos, também, a medida do tempo de compilação e execução das simulações.

3.2.2 Difusão da Matéria Ativa

No conjunto de gráficos em (9) mostra o comportamento da difusão para diferentes valores de η_{θ} . Em todos os casos podemos observar que as curvas calculadas por cada método são relativamente próximas. Dentre todos os casos, $\eta_{\theta} = 0.001$ temos a maior aproximação das curvas durante o intervalo de tempo calculado e ainda é o que alcança os maiores valores de difusão. Duas características que não podem ser observados juntas para o modelo de coloides.

Em (10) podemos observar o comportamento linear e potencia. Para $\eta_{\theta} = 0.001$ pelos dois métodos obtemos a curva inteiramente do tipo potencia, $y = 0.69029x^{1.8978}$ para Euler e $y = 0.66925x^{1.9038}$ para Runge-Kutta. Já para o caso $\eta_{\theta} = 1.0$ podemos obter os dois regimes. A regressão tipo potencia e linear para Euler é dado por $y = 0.61548x^{1.2855}$

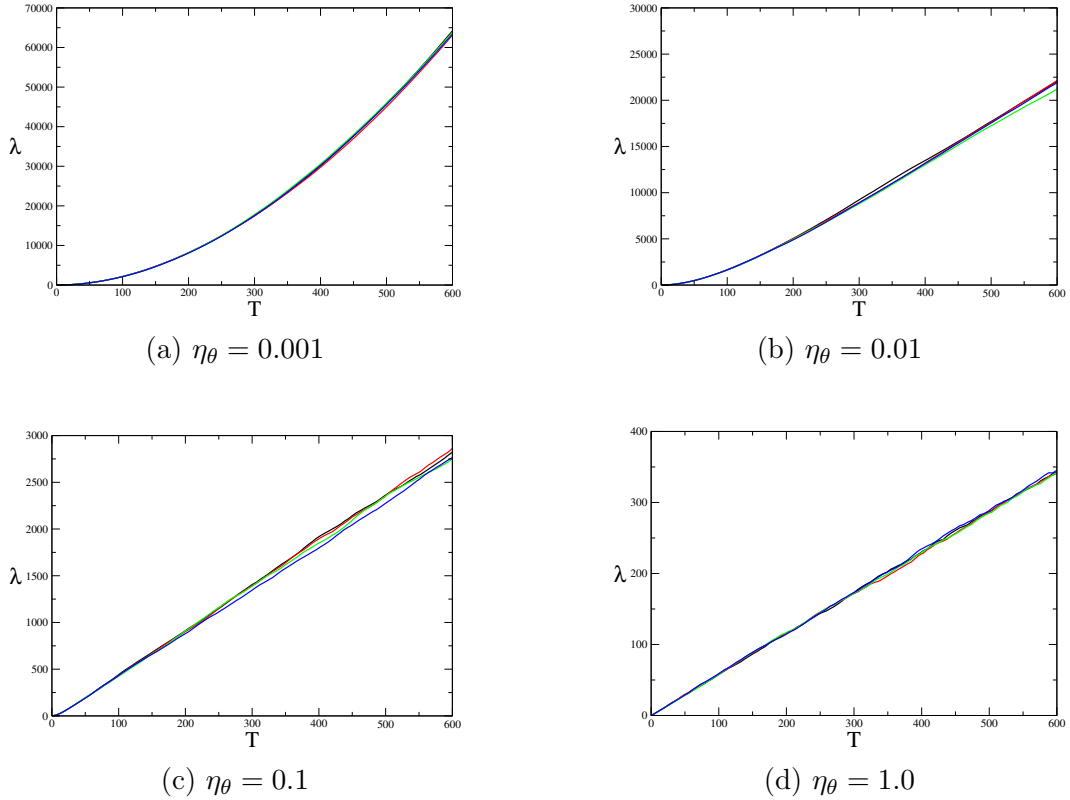


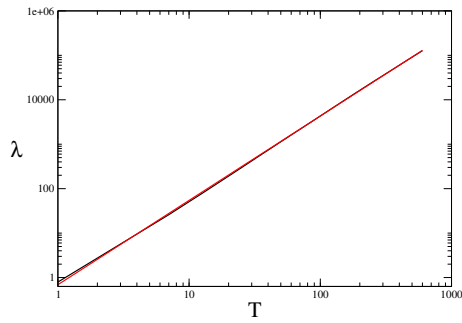
Figura 9 – Aqui temos quatro gráficos da difusão ($\vec{\lambda} = (\lambda_x, \lambda_y)$) em função de tempo para diferentes valores de η_θ . As curvas de cor preta e vermelha são, respectivamente, as componentes x e y via Euler, em quanto que as curvas de cor verde e a azul são as componentes x e y via Runge-Kutta.

e $y = 1.7224 + 1.1431x$, em quanto para o Runge-kutta temos $y = 0.62188x^{1.2919}$ e $y = 3.1217 + 1.1442x$, onde x é abcissa e y é ordenada. Daí podemos notar que o sistema tende a demorar a chegar ao regime difusivo para η_θ pequeno.

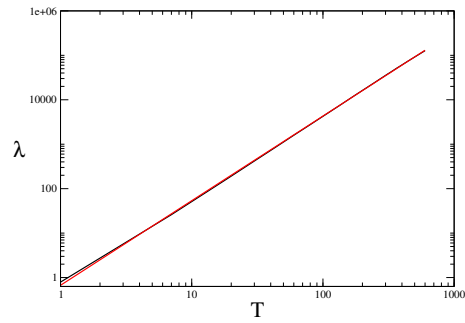
Na figura (11) podemos observar os valores da velocidade média para diferentes valores de η_θ . Em todos os casos de η_θ as curvas da velocidade média são oscilantes entorno de zero, mas os métodos numéricos sofrem certo desvio, especialmente comparado a velocidade média no modelo dos coloides. Os Dados sugerem que não há alguma tendência para distanciamento dos métodos, isto no tempo calculado.

Visto certos resultados numéricos para o sistema abordado nesse subseção, faremos agora a medida do tempo de compilação e execução dos programas **Activeeuler.c** e **ActiveRK.c** utilizados aqui, o primeiro via Euler o segundo via Runge-Kutta. Os dois códigos de teste serão avaliados na variante $\tau_4(2)$ com $\eta_\theta = 0.001$ e $\eta = 0$. O instrumento unitizado é o terminal do **linux**. Com o **gcc** já instalado podemos compilar os programas, segue o primeiro.

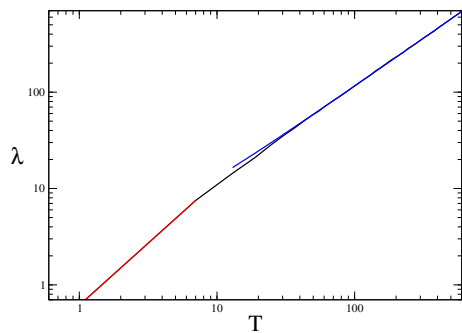
```
$ time gcc Activeeuler.c -lm -o lp
real    0m0.123s
user    0m0.077s
```



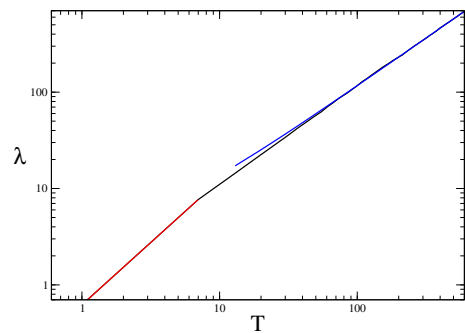
(a) $\eta_\theta = 0.001$



(b) $\eta_\theta = 0.001$



(c) $\eta_\theta = 1.0$



(d) $\eta_\theta = 1.0$

Figura 10 – Quatro gráficos da difusão (λ_{xy}) em função do tempo para diferentes valores de η_θ mais o estudo das regressões. Os gráficos (10a) e (10c) curvas de difusão (λ_{xy}) via Euler e em quanto (10b) e (10d) para Runge-Kutta. As cores preto para difusão, vermelho e azul para regressão linear e potencia respectivamente.

```
sys 0m0.030s
```

Agora podemos executar o programa lp com o comando `./lp`, para obter o tempo de execução da calculada via método de Euler. Segue.

```
$ time ./lp
real 21m1.182s
user 21m1.174s
sys 0m0.000s
```

Vejam os para o segundo o programa, teremos.

```
$ time gcc ActiveRK.c -lm -o lp
real 0m0.141s
user 0m0.118s
sys 0m0.011s
```

Segue também o comando `./lp` para vermos o tempo de execução da simulação calculada via método de Runge-Kutta de segunda ordem.

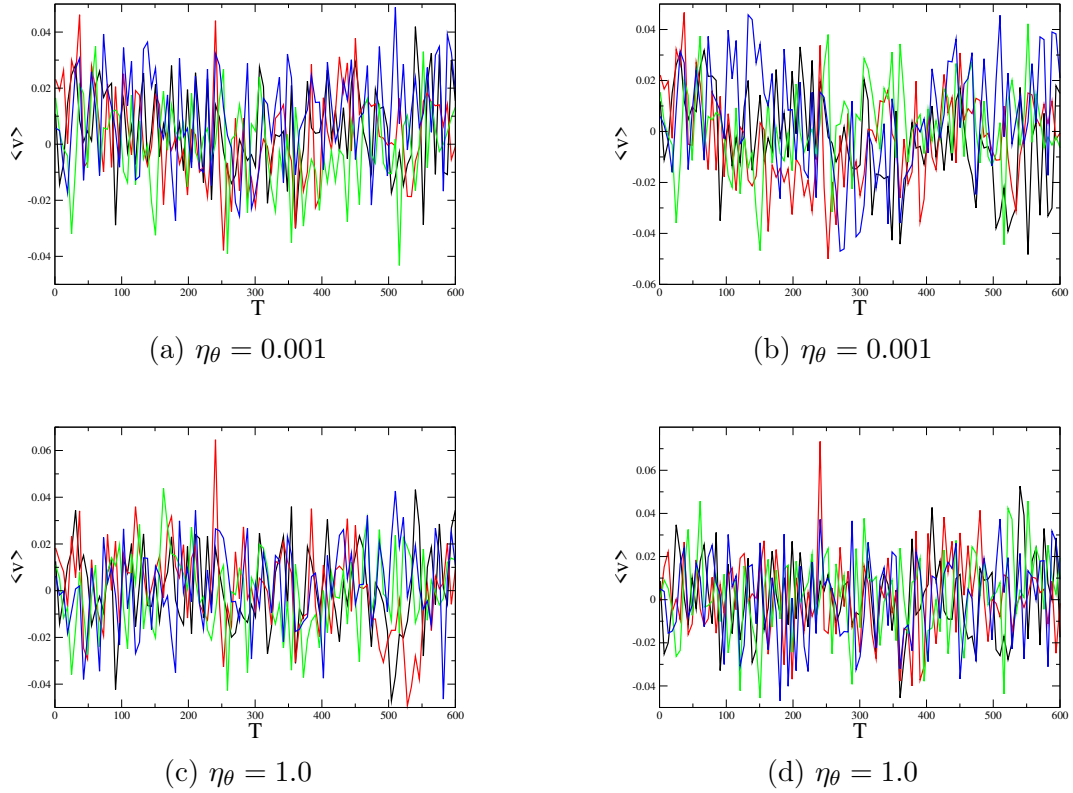


Figura 11 – Quatro gráficos da velocidade média ($\langle v \rangle$) em função do tempo para diferentes valores de η_θ . As curvas de cores preta, vermelha, verde e azul são, respectivamente, as componentes x e y via Euler e componentes x e y via Runge-Kutta.

```
$ time ./lp
real    34m11.944s
user    34m11.943s
sys     0m0.000s
```

3.2.3 Transporte de Matéria Ativa

Na subseção anterior vimos alguns aspectos sobre sistemas ativos no modelo movimento browniano angular sem qualquer obstáculo. Agora queremos estudar algumas questões do sistema com a existência de um objeto geométrico na rede bidimensional, e a maior parte do nosso estudo será baseada no trabalho (BORBA et al., 2020). Lembrado que estamos interessados na comparação de métodos numéricos estocásticos Euler e Runge-Kutta de segunda ordem.

Na proposta da quebra da invariância de translação espacial dentre os muitas figuras geométricas, escolheremos os semicírculos, como (BORBA et al., 2020). Com isso teremos algo semelhante como mostra a imagem (12) no sistema. Faremos a simulação com os semicírculos em uma determinada configuração da qual será citada a posteriori. Com inserções dos semicírculos as grandezas λ_x e λ_y serão inutilizadas na nossa arrobagem.



Figura 12 – Objetos assimétricos. O ponto em preto é que indica a suas posição no sistema de coordenadas, que chamaremos de ponto P . Nas duas figuras representam dois semicírculos em uma dada configuração no sistema de coordenadas.

A configuração com dois semicírculos, mostrada na figura (13), "capturará" algumas partículas que estão no sentido contrário da normal do objeto formado. Para as nossas simulações os objetos estarão com a normal voltada para o sentido negativo da orientação do eixo x . Uma vez pondo esses objetos, eles se comportarão como uma "armadilha" para o sistema, esperamos que haja uma corrente de velocidade definida por conta deste vínculo.

É importante citar, que todos os semicírculos são idênticos de raio $R_c = 5d$. Poderemos localizar a posição de cada semicírculo através do ponto P , indicado na figura (12). Com a presença dos semicírculos a densidade será modificada para $\psi = \frac{N\pi d^2}{(\frac{L^2}{4} - 2q\pi R_c^2)}$, onde q é número obstáculos semicirculares. O número máximo de semicírculos na caixa é calculado imaginando que cada ponto P esteja uma célula, um quadrado de lado $2R_c$, assim temos $n = (\frac{L}{2R_c})(\frac{L}{2R_c}) = 25$ semicírculos.

Na figura (14) podemos observar fatores interessantes nas curvas de velocidade média. Os métodos numéricos sofrem certa divergência entre os valores calculados, mas não absurda. Note que, nos dois casos de q , (14a) e (14b), por ambos os métodos a componente y da velocidade média é praticamente nula, em quanto que a componente x esta fica retido frequentemente para valores negativos. Para o caso (14a) temos;

$$\vec{J} = (-0.01843, 0.000682) \approx -0.01843\hat{x}; \quad (3.42)$$

via Euler e;

$$\vec{J} = (-0.01524, 0.008112) \approx -0.01524\hat{x}; \quad (3.43)$$

via Rugen-Kutta. Note que para ambos métodos, o valor da densidade de corrente de partícula \vec{J} está na direção contrária ao eixo x dentro de certa aproximação para ambos os métodos. Podemos observar que J_y é zero para três algarismos significativos por Euler e dois algarismos significativos via Runge-Kutta.

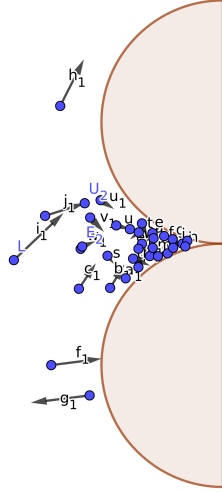
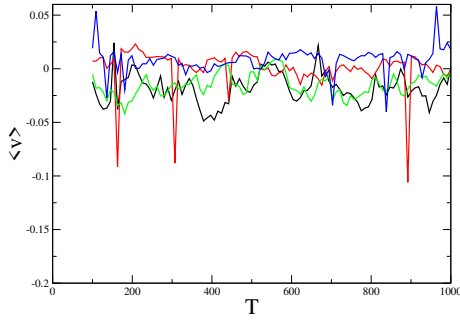
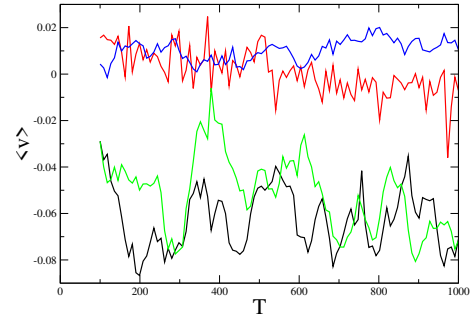


Figura 13 – Objeto assimétrico formado por dois semicírculos de raio Rc



(a) $q = 6$



(b) $q = 8$

Figura 14 – Os gráficos da velocidade média para dois caso do número q de obstáculos. As cores preto e vermelho para componente x e y da velocidade média via Euler, em quanto que verde e azul para componente x e y via Runge-Kutta.

Já para o caso (14b), temos;

$$\vec{J} = (-0.062661, 0.001080) \approx -0.062661\hat{x}; \quad (3.44)$$

via Euler e ;

$$\vec{J} = (-0.051459, 0.010264) \approx -0.051459\hat{x} \quad (3.45)$$

via Runge-Kutta. Note que os valores da densidade de corrente de partícula \vec{J} está , com alguma aproximação, na direção contrária do eixo x por ambos os métodos. Mas a componente J_y é nula para dois algarismos significativos por Euler e um algarismo significativo por Runge-Kutta. Verificamos um aumento de J_y de $q = 6$ para $q = 8$ por ambos os métodos. Das componentes de \vec{J} , podemos observar serem maiores por Runge-Kutta do que via Euler para os dois caso de q .

Vejamos agora o tempo de execução e compilação dos programas **eulerfile.c** (método de Euler) e **Rkfile.c** (método Runge-Kutta) para o casos $q = 8$. Segue por

Euler;

```
~/ time gcc eulerfile.c -lm -o lp  
  
real    0m0,092s  
user    0m0,079s  
sys     0m0,013s
```

Vejamos agora o tempo de execução da simulação via método de Euler.

```
~/ time ./lp  
  
real    35m46,807s  
user    35m36,414s  
sys     0m8,100s
```

Para o tempo de compilação do segundo programa, teremos.

```
~/ time gcc RKfile.c -lm -o lp  
  
real    0m0,106s  
user    0m0,079s  
sys     0m0,027s
```

vejamos o tempo de execução da simulação via Runge-kutta de segunda ordem.

```
~/ time ./lp  
  
real    65m51,918s  
user    65m43,464s  
sys     0m7,214s
```

4 Conclusão

Nesse trabalho vimos os resultados numéricos por dois métodos utilizados Euler e Runge- Kutta de segunda ordem em sistemas caóticos desde aqueles formados apenas por partículas idênticas e com sistemas com partículas e obstáculos. Nós focamos nossos estudos em dois modelos: movimento browniano normal e o movimento browniano angular.

Com as simulações feitas aqui, foi possível medir os tempos de cada programa escrito em c, bem como o tempo dos executáveis. Vimos que o tempo de execução para por via do método Runge-Kutta, é cerca de duas vezes mais lento do que pelo método de Euler.

Os valores para velocidade média para coloides vista por cada método numérico são muito próximos. Visto tal situação, foi conveniente medir a medida das diferenças dos valores medidos por cada método para verificar a ordem de diferença. Em quanto para o modelo ativo, as velocidades médias apesar de estarem no mesmo patamar em ordem, as curvas por cada método não converge tanto para os ciclos medidos.

Acerca da grandeza λ podemos comentar alguns pontos visto na comparação entre os dois modelos. Para coloides a grandeza λ possui uma certa divergência notável entre os valores medidos via o método de Euler e Runge-Kutta, da qual tendia a aumentar a medida que o tempo aumentava, tanto variando γ como η . Vimos que para casos de $\gamma = 0.001$ os métodos divergiam em quanto para o regime amortecido ($\gamma = 1.0$) os métodos possuíam uma convergência razoável.

No modelo (MBA), modelo super-amortecido, as medidas feitas desta grandeza por cada método numérico eram relativamente próximas para todos os valores η_θ , fixando $\eta = 0$.

Com isso podemos perceber que os dois métodos numéricos possuem uma maior aproximação para medidas referentes à primeira ordem do tempo no modelo de coloides (MBN), como a velocidade média. Mas diverge, fortemente, para grandezas de segunda ordem no tempo, como a grandeza λ no modelo de coloides para os casos de γ não amortecido. Em contra partida, para casos de $\gamma = 1$ nos dois modelos (MBA e MBN) há uma convergência razoável dos métodos para todas as medidas. Concluímos que a divergência entre os métodos numéricos possui forte correlação com o amortecimento do sistema.

Vimos na última subseção (3.2.3), que os valores de densidade de corrente apresentam o mesmo comportamento negativo na direção do eixo x para os métodos, embora

haja uma diferença entre os valores calculados. O valor J_y é , ligeiramente, maior pelo Runge-Kutta do que por Euler.

A perspectiva do trabalho é servi de base para alcançar novos horizontes em sistemas caóticos especialmente ativos. Como na simulação de moléculas com o formato não circular sem ou com a presença de objetos geométricos.

Referências

- BORBA, A.; DOMINGOS, J. L.; MORAES, E.; POTIGUAR, F.; FERREIRA, W. Controlling the transport of active matter in disordered lattices of asymmetrical obstacles. **Physical Review E**, APS, v. 101, n. 2, p. 022601, 2020.
- CAVAGNA, A.; GIARDINA, I. Bird flocks as condensed matter. **Annu. Rev. Condens. Matter Phys.**, Annual Reviews, v. 5, n. 1, p. 183–207, 2014.
- CHEPIZHKO, O.; ALTMANN, E. G.; PERUANI, F. Optimal noise maximizes collective motion in heterogeneous media. **Physical review letters**, APS, v. 110, n. 23, p. 238101, 2013.
- _____. _____. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 110, p. 238101, Jun 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.238101>>.
- FILY, Y.; MARCHETTI, M. C. Athermal phase separation of self-propelled particles with no alignment. **Physical review letters**, APS, v. 108, n. 23, p. 235702, 2012.
- GINELLI, F. The physics of the vicsek model. **The European Physical Journal Special Topics**, Springer, v. 225, n. 11, p. 2099–2117, 2016.
- HONEYCUTT, R. L. Stochastic runge-kutta algorithms. i. white noise. **Physical Review A**, APS, v. 45, n. 2, p. 600, 1992.
- KEMKEMER, R.; KLING, D.; KAUFMANN, D.; GRULER, H. Elastic properties of nematoid arrangements formed by amoeboid cells. **The European Physical Journal E**, Springer, v. 1, n. 2-3, p. 215–225, 2000.
- KLAFTER, J.; SHLESINGER, M. F.; ZUMOFEN, G. Beyond brownian motion. **Physics today**, [New York, American Institute of Physics], v. 49, n. 2, p. 33–39, 1996.
- KUBO, R. The fluctuation-dissipation theorem. **Reports on progress in physics**, IOP Publishing, v. 29, n. 1, p. 255, 1966.
- MORIN, A.; DESREUMAUX, N.; CAUSSIN, J.-B.; BARTOLO, D. Distortion and destruction of colloidal flocks in disordered environments. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 13, n. 1, p. 63–67, 2017.
- POTIGUAR, F. Q. **Notas do capítulo Processo Estocástico**. [S.l.: s.n.], 2019.
- PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. Numerical recipes in c++. **The art of scientific computing**, v. 2, p. 1002, 1992.
- RAPAPORT, D. C. **The art of molecular dynamics simulation**. [S.l.]: Cambridge university press, 2004.
- REICHL, L. E. **A modern course in statistical physics**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 1999.

RIBEIRO, H.; POTIGUAR, F. Lane formation and crystallization of active matter in a narrow channel. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 503, p. 849–855, 2018.

SCHALLER, V.; WEBER, C.; FREY, E.; BAUSCH, A. R. Polar pattern formation: hydrodynamic coupling of driven filaments. **Soft Matter**, Royal Society of Chemistry, v. 7, n. 7, p. 3213–3218, 2011.

SOKOLOV, A.; ARANSON, I. S. Physical properties of collective motion in suspensions of bacteria. **Physical review letters**, APS, v. 109, n. 24, p. 248109, 2012.

TOSCHI, F.; SEGA, M. **Flowing Matter**. [S.l.]: Springer Nature, 2019.

VICSEK, T.; CZIRÓK, A.; BEN-JACOB, E.; COHEN, I.; SHOCHET, O. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. **Physical review letters**, APS, v. 75, n. 6, p. 1226, 1995.

WIKIPEDIA, t. f. e. F. **Brownian motion**. 2021. <https://en.wikipedia.org/wiki/Brownian_motion>.