



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**Modelos de Movimiento Colectivo
y Autoensamblaje Activo**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS FÍSICAS

PRESENTA:

M. en C. MARTÍN ZUMAYA HERNÁNDEZ

TUTOR:

DR. MAXIMINO ALDANA GONZÁLEZ
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ
INSTITUTO DE FÍSICA

DR. VÍCTOR DOSSETTI ROMERO
BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO
DE PUEBLA

CIUDAD DE MÉXICO, ABRIL 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Índice general

1. Resumen	1
2. Introducción	3
2.1. Materia activa y comportamiento colectivo	3
2.2. Estudio empírico del comportamiento colectivo animal	4
2.2.1. Resultados cuantitativos	5
2.3. Modelos de movimiento colectivo	13
2.3.1. El modelo de Vicsek	13
2.3.2. El modelo de Vicsek en espacio abierto	17
2.3.3. Behavioural Rules Model	18
2.3.4. Inertial Spin Model	24
2.3.5. Control de densidad con interacciones topológicas	28
2.3.6. Hybrid Projection Model	32
3. MC con interacciones de corto y largo alcance	39
3.1. Descripción del modelo	40
3.1.1. Interacciones entre partículas	40
3.1.2. Dinámica del sistema	42
3.2. Resultados y caracterización del sistema	42
3.3. Extensión del inertial spin model	47
4. Autoensamblaje activo	51
4.1. Autoensamblaje	51
4.2. Modelos de autoensamblaje	52
4.2.1. Partículas Brownianas	53
4.2.2. Sistemas de PBA interactuantes	56
4.2.3. Sistemas con interacciones repulsivas	57
Separación de fases inducida por movilidad	59
Efecto de la geometría de las partículas	62
4.2.4. Sistemas con interacciones repulsivas y atractivas	65
4.3. Modelo de polimerización de coloides activos	70
4.3.1. Resultados	72
5. Conclusiones	81
A. Parámetros de Simulaciones	83
A.1. Parámetros del <i>Behavioural Rules Model</i>	83
A.2. Parámetros de la extensión del <i>Inertial Spin Model</i>	84

A.3. Parámetros del modelo de movimiento colectivo con interacciones de corto y largo alcance.	85
A.4. Parámetros del modelo de autoensamblaje activo	86
Bibliografía	87

Capítulo 1

Resumen

El movimiento colectivo es uno de los ejemplos de comportamiento coordinado más ubicuo y espectacular en la naturaleza y puede presentarse en sistemas de muy distintos tipos, desde sistemas físicos, poblaciones de células o grupos de insectos y vertebrados como bandadas de aves, cardúmenes de peces, rebaños de ovejas e incluso multitudes humanas [55]. Este comportamiento colectivo coherente, en el que los individuos que componen un grupo se mueven de forma coordinada aproximadamente en la misma dirección, es una propiedad emergente resultado de las interacciones entre las unidades que lo componen.

Debido a que este comportamiento se presenta en sistemas de distintos tipos, en las últimas décadas se han propuesto modelos y realizado estudios, tanto teóricos [1, 12, 41] como empíricos [14], en los que se ha tratado de determinar la naturaleza de las interacciones entre individuos, principalmente en grupos animales, y los mecanismos necesarios para que un sistema sea capaz de mostrar movimiento colectivo.

La mayor parte de los modelos están basados en interacciones de alineamiento [56, 12], en las que cada individuo modifica su dirección de movimiento para hacerla coincidir con la dirección promedio de cierta vecindad más un ruido; o en una combinación de interacciones de alineamiento y de atracción o repulsión [18, 29, 10, 25]. Estas interacciones pueden definirse de forma métrica, en donde cada partícula interactúa con todas las demás dentro de cierta distancia, referida como el rango de interacción, o de forma topológica, en donde cada partícula interactúa con un número fijo de vecinos cercanos, independientemente de la distancia relativa entre ellos. Existe evidencia empírica que respalda la presencia de ambos tipos de interacciones [4, 8], y qué tipo está presente depende de cada sistema en particular [55].

Sin embargo, a pesar de que los modelos son capaces de reproducir las características principales del movimiento colectivo, generalmente están definidos dentro de fronteras periódicas [56] o consideran al sistema en un estado estacionario ordenado [12]. Como se muestra más adelante, estos modelos no son capaces de mostrar estados ordenados y cohesivos cuando se elimina la condición de fronteras periódicas y se permite a las partículas del sistema moverse en un espacio infinito, a menos que se incluyan interacciones atractivas explícitas entre ellas o con el centro de masa [18, 21, 29, 10, 25, 41, 51, 42]. Este problema es bien conocido por la comunidad científica trabajando en movimiento colectivo, pero no ha sido tratado de forma tan exhaustiva como la transición orden-desorden que se observa en este tipo de sistemas. Una parte de este trabajo se enfoca en sugerir un mecanismo para resolverlo.

Así pues, se propone una variación del modelo de Vicsek [56] en espacio infinito, en el que se incluyen interacciones de alineamiento de corto y largo alcance entre partículas. Las interacciones de corto alcance pueden definirse de forma métrica o topológica, mientras que las interacciones de largo alcance se definen por medio de una red de interacción; la presencia de las interacciones de corto y largo alcance puede ajustarse con un factor de peso relativo, el cual permite al modelo describir distintos tipos de sistemas. La introducción de una pequeña fracción de interacciones de largo alcance, permite al sistema presentar estados ordenados en espacio infinito partiendo de condiciones iniciales aleatorias, lo cual muestra que no es necesaria la inclusión de un potencial atractivo entre partículas o que cada una reciba información de todas las demás para que el sistema pueda alcanzar un estado ordenado y moverse de forma colectiva. Por otro lado, a pesar de que el sistema se mantiene ordenado, se observa que el grupo se expande en el tiempo, sin embargo, la presencia de las interacciones de largo alcance reduce significativamente dicha expansión, lo cual se refleja en el coeficiente de difusión de las partículas con respecto del centro de masa. Asimismo, el modelo muestra giros colectivos espontáneos, una propiedad esencial observada en sistemas reales, lo cual sugiere que la presencia de unas cuantas interacciones de largo alcance es un mecanismo eficiente de transferencia de información entre partículas.

La emergencia de un estado ordenado de movimiento colectivo es un ejemplo de un proceso de autoorganización en el que un conjunto de partículas se organizan en un agregado coherente. Aunque de naturaleza distinta, se observan procesos similares en sistemas de coloides (partículas del orden de micrometros) interactuantes, los cuales se organizan en agregados con estructuras específicas debido a su geometría y a la forma de las interacciones entre ellos. A este tipo de procesos se les denomina de autoensamblaje y su estudio es relevante tanto desde un punto de vista tecnológico [63] como teórico; sin embargo, usualmente se han considerado sistemas en equilibrio (a los que se denomina como autoensamblaje pasivo) y sólo ha sido hasta años recientes que se han comenzado a tratar sistemas fuera de equilibrio compuestos por coloides o partículas autopropulsadas [60, 61, 34, 31, 35], a los cuales se les denomina como autoensamblaje activo. El área de estudio de este tipo de sistemas es el denominado *materia activa* [58, 63, 35, 5, 49, 66], y otro de los objetivos del presente proyecto es el de investigar la influencia de la autopropulsión en procesos de autoensamblaje de agregados de coloides interactuantes, para lo cual desarrollamos un modelo de polimerización de coloides activos en el que mostramos que la autopropulsión de los componentes del sistema actúa como catalizador para la formación de un mayor número de cadenas de coloides y de mayor longitud en comparación con el caso pasivo.

Capítulo 2

Introducción

En este capítulo se describe brevemente parte del trabajo teórico y experimental que se ha llevado a cabo en el área de movimiento colectivo. La investigación en esta área ha crecido significativamente en años recientes, en gran medida debido al desarrollo de tecnología para el estudio de grupos de animales y de sistemas físicos, biológicos o químicos y al interés de investigadores de distintas disciplinas como Física, Biología y Ciencias Sociales, resultando en un área de estudio multidisciplinaria.

2.1. Materia activa y comportamiento colectivo

En general nos referimos como materia activa a partículas que transforman energía de su entorno en movimiento dirigido [63]. Algunos ejemplos biológicos microscópicos son las bacterias, células y proteínas como la myosina y kinosina, también podemos considerar como materia activa a organismos como peces, aves o mamíferos, en especial aquellos que se mueven en grupos. Recientemente también se han desarrollado materiales capaces de generar autopropulsión, un ejemplo son las partículas Janus [5, 57] las cuales, debido a que cada mitad de su superficie se trata con un recubrimiento con propiedades físicas o químicas distintas, son capaces de autopropulsarse por medio de gradientes de temperatura o químicos generados a su alrededor. Como se muestra en la Fig. 2.1, las partículas Janus pueden ser esféricas, cilíndricas o discos, y su superficie estar dividida en forma horizontal o transversal.

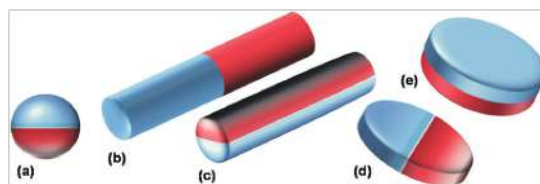


FIGURA 2.1: Ejemplos de partículas Janus con geometría (a) esférica, (b,c) cilíndrica y (d,e) de disco, así como distintas formas de aplicar el recubrimiento a la superficie de las partículas. Las secciones azul y roja corresponden a recubrimientos con distintas propiedades físicas o químicas que, al entrar en contacto y reaccionar con el medio, generar gradientes a su alrededor produciendo una autopropulsión en las partículas. Imagen tomada de [57].

Por un lado, el estudio de la materia activa es relevante desde el punto de vista teórico ya que, al corresponder a sistemas que se encuentran fuera del equilibrio termodinámico,

es una plataforma para la exploración de la física estadística fuera de equilibrio. Por otro lado, resultado de la autopropulsión de las partículas y las interacciones entre ellas, este tipo de sistemas tienen la notable característica de presentar comportamientos colectivos, por lo que su estudio es relevante para la teoría de los sistemas complejos, ya que permiten el estudio de propiedades emergentes. Así mismo, desde el punto de vista biológico, el estudio de este tipo de sistemas y el desarrollo de modelos que presenten comportamientos similares a los que se observan en la naturaleza, pueden ser útiles para entender qué tipos de interacciones existen entre los miembros de un grupo y los mecanismos de consenso entre ellos que, resultado de procesos evolutivos y de adaptación, han desarrollado para protegerse de depredadores o para realizar actividades de forajeo o migración. Finalmente, debido a recientes avances tecnológicos que han permitido la síntesis de partículas autopropulsadas, el estudio de este tipo de sistemas puede ser relevante para el desarrollo de nuevos materiales inteligentes capaces de autoensamblarse y reconfigurarse con potenciales aplicaciones nanotecnológicas e incluso médicas.

2.2. Estudio empírico del comportamiento colectivo animal

Debido principalmente a la dificultad técnica que implica la obtención de datos experimentales, las primeras observaciones del movimiento colectivo animal se limitaron a realizar una descripción cualitativa. Dichas observaciones permitieron formular las primeras hipótesis sobre el origen del orden y la coordinación del movimiento de grupos de animales.

En la década de los años 60 se realizaron los primeros estudios empíricos de comportamiento colectivo animal en grupos pequeños de peces, estos estudios permitieron medir algunas cantidades como la distancia promedio entre individuos y su distribución angular, lo que condujo a la obtención de resultados cuantitativos [15]. Recientemente el grupo del Dr. Iain Couzin se ha dedicado a obtener datos empíricos tanto de grupos animales (como peces e insectos) como de grupos humanos [19, 17, 23, 50].

Otro de los ejemplos paradigmáticos del comportamiento animal colectivo lo constituyen las aves, de las cuales algunas especies realizan largos viajes migratorios en donde realizan formaciones y otras, como los estorninos, se organizan en grandes grupos de individuos que les permiten protegerse de ataques de predadores. En lo que respecta a estos últimos, el esfuerzo más grande que se ha llevado a cabo lo constituye el proyecto STARFLAG (*Starlings in flight: understanding the patterns of animal group movement*) llevado a cabo del año 2005 al 2008 en el Instituto de Sistemas Complejos de la Universidad Sapienza de Roma, liderado por el Dr. Andrea Cavagna y la Dra. Irene Giardina [15].

Como parte del proyecto STARFLAG se desarrolló un método para la reconstrucción de las trayectorias tridimensionales de las aves (véase la Fig. 2.2). Para esto se colocaron cámaras en distintos edificios de Roma para fotografiar grupos de cientos de estorninos. Una vez obtenidas las imágenes, la obtención de las coordenadas tridimensionales de cada uno de los individuos dentro de los grupos fotografiados es altamente no trivial y la solución de este problema, denominado de correspondencia ya que es necesario identificar al mismo pájaro en cada una de las imágenes obtenidas, constituyó el parteaguas para la obtención y posterior análisis de los datos, con los cuales ha sido posible caracterizar

cuantitativamente características esenciales del comportamiento colectivo presentado por estas aves.

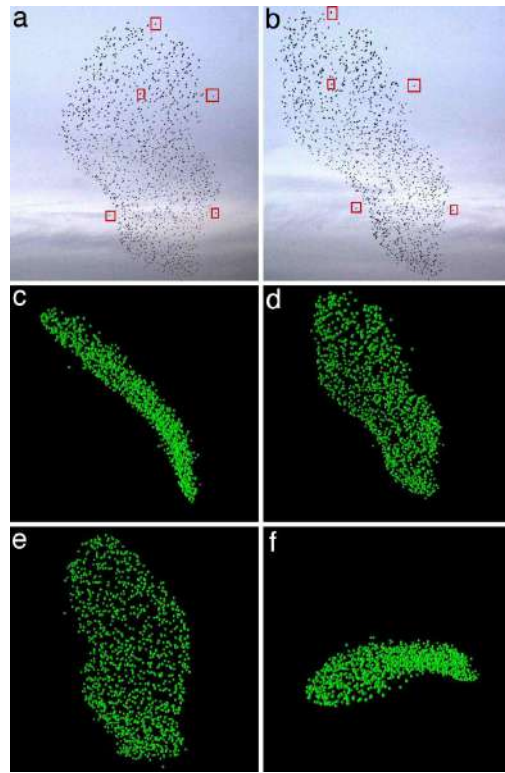


FIGURA 2.2: Ejemplo de una bandada analizada en el proyecto STARFLAG. Este grupo en particular consta de 1,246 estorninos, volando aproximadamente a ≈ 70 m de las cámaras a $\approx 11 \text{ m s}^{-1}$. Imagen izquierda (a) y derecha (b) de las fotografías estereográficas del mismo grupo de estorninos tomadas a 25 m de distancia una de otra. Para realizar la reconstrucción tridimensional de las trayectorias de las aves, es necesario emparejar la imagen de cada individuo en ambas fotografías. Se muestran 5 parejas de imágenes de los mismos individuos en los recuadros rojos en las figuras (a) y (b). Las imágenes (c-f) corresponden a la reconstrucción tridimensional de las trayectorias de las aves desde distintos puntos de vista. La imagen (d) muestra la reconstrucción del grupo desde la misma perspectiva que en (b). Imagen tomada de [4].

2.2.1. Resultados cuantitativos

Uno de los objetivos del estudio de sistemas autoorganizados, como los grupos de estorninos, es el de describir la emergencia del comportamiento colectivo. Con este objetivo se han formulado distintos modelos inspirados en observaciones biológicas o en consideraciones físicas, en todos los casos se considera que son suficientes reglas de interacción sencillas entre individuos para permitir la emergencia de un comportamiento colectivo. Sin embargo, sin información experimental disponible no es posible discernir entre modelos y entender las reglas fundamentales subyacentes o los mecanismos mínimos que permiten el surgimiento de este tipo de comportamiento.

En este punto es en el que se enfoca uno de los primeros trabajos resultado del proyecto STARFLAG. En [4] se intenta determinar el tipo de interacción que permite mantener la

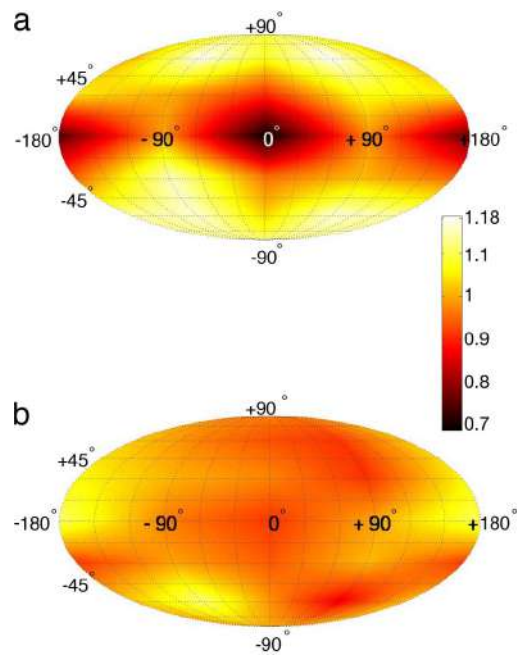


FIGURA 2.3: Densidad angular de vecinos cercanos. El centro del mapa $\phi = 0$ corresponde al frente de ave, los puntos $\phi = 0, \alpha = \pm 180$ corresponden a su parte trasera. El ángulo ϕ es la latitud en el mapa y α la longitud. (a) La densidad angular de vecinos cercanos topológicos en la capa $n = 6$ es anisotrópica, reflejado en una densidad baja en la dirección de movimiento de cada ave. La distribución anisotrópica es resultado de la interacción entre individuos. (b) La densidad angular es esencialmente isotrópica para los vecinos en la capa $n = 10$, lo cual indica un conjunto de individuos no interactuantes. Imagen tomada de [4].

cohesión en forma robusta, i.e. que sea capaz de mantener unido al grupo bajo la influencia de perturbaciones externas, lo cual es importante desde el punto de vista biológico ya que se cree que el comportamiento colectivo mostrado por estorninos y algunas especies de peces, les permite a los individuos tener una mayor probabilidad de supervivencia cuando son atacados por predadores.

En [4] se caracteriza la estructura de las aves dentro de los grupos estudiados en el proyecto STARFLAG, por medio de la distribución espacial de los vecinos cercanos de cada ave. Para esto, se define el vector unitario \mathbf{u}_i en la dirección del vecino más cercano de cada individuo i dentro del grupo, posteriormente colocando a todos los vectores \mathbf{u}_i en el mismo origen, se grafica su densidad en la esfera unitaria, normalizando con el caso isotrópico en el que los vecinos cercanos se encuentran distribuidos uniformemente; en [4] se considera que una distribución uniforme o isotrópica, corresponde a un agregado de individuos no interactuantes.

Como se muestra en la Fig. 2.3, la distribución de vecinos cercanos es anisotrópica, con una densidad baja en la dirección de movimiento. En [4] se sugiere que una de las posibles razones de la anisotropía en la distribución de vecinos cercanos, puede ser el aparato visual de las aves, ya que tienen un eje visual lateral y que además, la anisotropía es el efecto de la interacción entre individuos, cualquiera que esta sea.

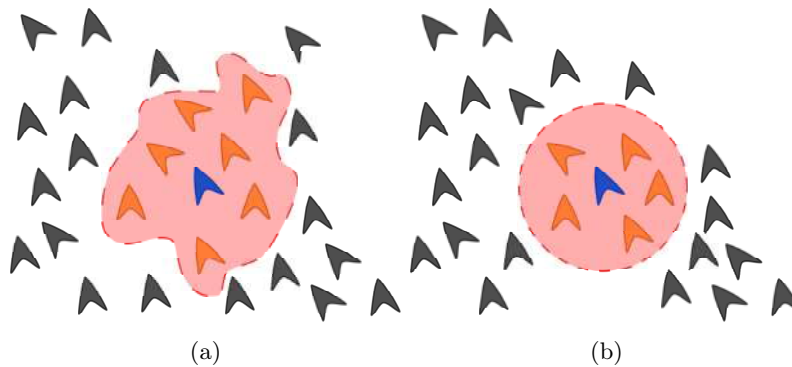


FIGURA 2.4: Las interacciones entre individuos (o partículas en los modelos teóricos) pueden definirse de forma (a) métrica, donde cada partícula interactúa con todas las demás dentro de cierta distancia r_0 , o (b) topológica donde cada partícula interactúa con sus primeros κ_l vecinos, independientemente de la distancia relativa entre ellos. El área sombreada en rojo de ambas figuras corresponde a la vecindad de interacción de la partícula mostrada en azul.

El que la distribución angular de vecinos cercanos en la capa $n = 10$ resulte ser isotrópica, indica que no hay interacción entre individuos a dicha distancia topológica y se considera una indicación empírica de que la interacción decae con la distancia. Así mismo demuestra, según los autores, que la anisotropía de la distribución angular de vecinos cercanos puede ser utilizada para obtener información de la interacción entre individuos. De esta forma, identificando el valor de la n -ésima capa de vecinos cercanos para la cual la distribución es isotrópica en distintos grupos de aves, se llega a la conclusión de que cada individuo interactúa con entre cinco y siete de sus vecinos más cercanos. A este tipo de vecinos cercanos, definidos por su orden de cercanía, se les denomina topológicos (véase la Fig. 2.4a), mientras que se denominan como métricos (véase la Fig. 2.4b) cuando se consideran a todos los individuos dentro de cierto alcance de interacción.

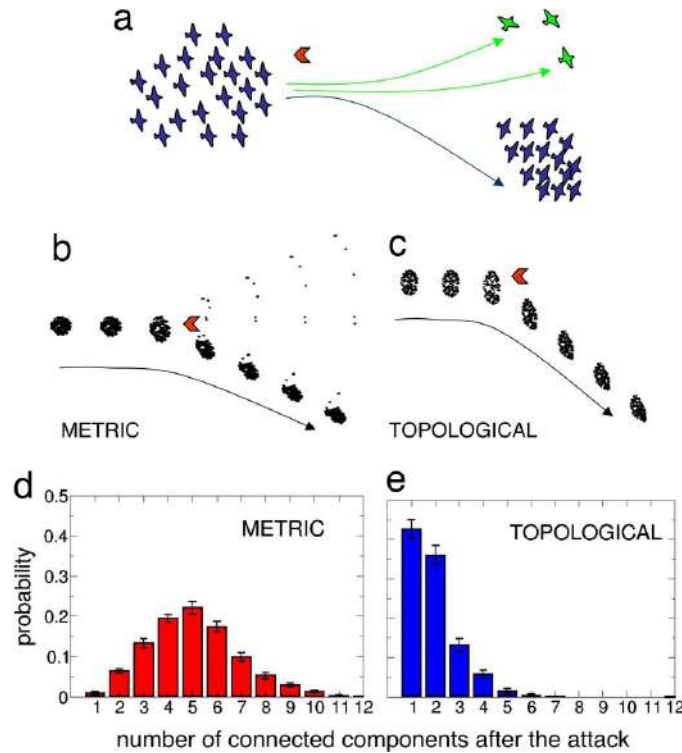


FIGURA 2.5: Se aplica una perturbación, representada por la flecha naranja en las figuras, en la que las partículas son repelidas. En (a) se muestra un posible escenario en el que un subgrupo del sistema se separa del original, en (b) se muestra una simulación con interacciones métricas en las que el grupo se fragmenta, en cambio en (c) las interacciones definidas topológicamente son las que permiten mantener la cohesión del sistema bajo una perturbación externa. En (d,e) se muestra la probabilidad de que el grupo se separe en M componentes después de un ataque. Se puede observar que la probabilidad de desintegración del grupo es mayor en el caso métrico que en el topológico. Imagen tomada de [4]

Posteriormente, para mostrar que son las interacciones topológicas las que promueven la cohesión en el sistema, comparan simulaciones numéricas del modelo de Vicsek, como se define en la sección 2.3.1, en donde las interacciones se definen de forma métrica (véase la Fig. 2.4b), y un modelo análogo en el que se consideran los primeros n vecinos más cercanos de cada partícula, en donde la interacción se define en forma topológica (véase la Fig. 2.4a). De esta forma, inicializando un grupo de partículas en un estado ordenado, i.e. moviéndose en la misma dirección, muestran que el grupo con interacciones métricas es más susceptible de ser fragmentado bajo una perturbación externa (véase la Fig. 2.5).

Estos resultados sugieren que las interacciones topológicas son más eficaces para mantener la cohesión y para que exista una respuesta colectiva en el sistema. Cabe mencionar que en las simulaciones presentadas en el artículo, el sistema de partículas se inicializa en un estado ordenado y cohesionado y no se demuestra que las interacciones topológicas con n vecinos cercanos sean capaces de llevar al sistema a un estado ordenado y cohesivo partiendo de condiciones iniciales arbitrarias.

En [3] se estudia el caso específico en el que un grupo de estorninos realiza un giro colectivo. Este trabajo es relevante ya que se ocupa de la respuesta colectiva ante perturbaciones y

la propagación de cambios de dirección en el sistema.

Partiendo de las trayectorias tridimensionales reconstruidas de los individuos mientras realizan un giro colectivo, se determina el retraso relativo de giro τ_{ij} , definido como el intervalo de tiempo en el cual el individuo j gira antes ($\tau_{ij} > 0$) o después ($\tau_{ij} < 0$) del i . Los tiempos de retraso τ_{ij} permiten asignar un rango r_i a cada individuo de acuerdo al orden en que modificaron su dirección de movimiento, asignando $r_i = 1$ al primero en realizar el giro, $r_i = 2$ al siguiente, y así sucesivamente. Así mismo, se asigna un tiempo de giro absoluto t_i , i.e. el retraso del individuo i con respecto al de rango $r = 1$.

Graficando el rango r_i de cada individuo con respecto de su tiempo de giro absoluto t_i se obtiene la curva $r(t)$ (Fig. 2.6a), a partir de la cual se puede calcular una ley de dispersión, i.e. la distancia x que la información de cambio de dirección ha recorrido en un tiempo t . Dado que el sistema se encuentra en 3 dimensiones y el giro se genera a partir de un origen localizado, la distancia $x(t)$ es igual al radio de la esfera que contiene a los primeros $r(t)$ individuos en la curva de rango, i.e. $x(t) = [r(t)/\rho]^{1/3}$, donde ρ es la densidad del sistema. La característica más importante de la curva $x(t)$ (Fig. 2.6c) es que se observa un régimen lineal para tiempos cortos e intermedios. Por lo tanto es posible concluir que la distancia recorrida por la perturbación se comporta como $x(t) = c_s t$, donde c_s es la velocidad de propagación. Se reportan valores en el intervalo $20 - 40\text{ms}^{-1}$, que corresponde a un tiempo aproximado de medio segundo para un grupo de 400 individuos. Al determinar la distancia máxima D entre los primeros 5 individuos en realizar el giro (Fig. 2.6b), se observa que estos se encuentran cerca espacialmente, lo cual indica que la perturbación se genera localmente y se propaga de individuo a individuo a todo el sistema.

Por otro lado, la aceleración angular de los individuos (Fig. 2.6d) muestra que la información se propaga en el sistema con muy poca atenuación, lo cual se observa en una disminución mínima de la amplitud y un valor del máximo de la aceleración angular prácticamente constante con respecto al rango r_i . La ley de dispersión lineal y la baja atenuación de la información de giro en el sistema, son características importantes que permiten al sistema mantenerse cohesionado durante la realización de un giro colectivo.

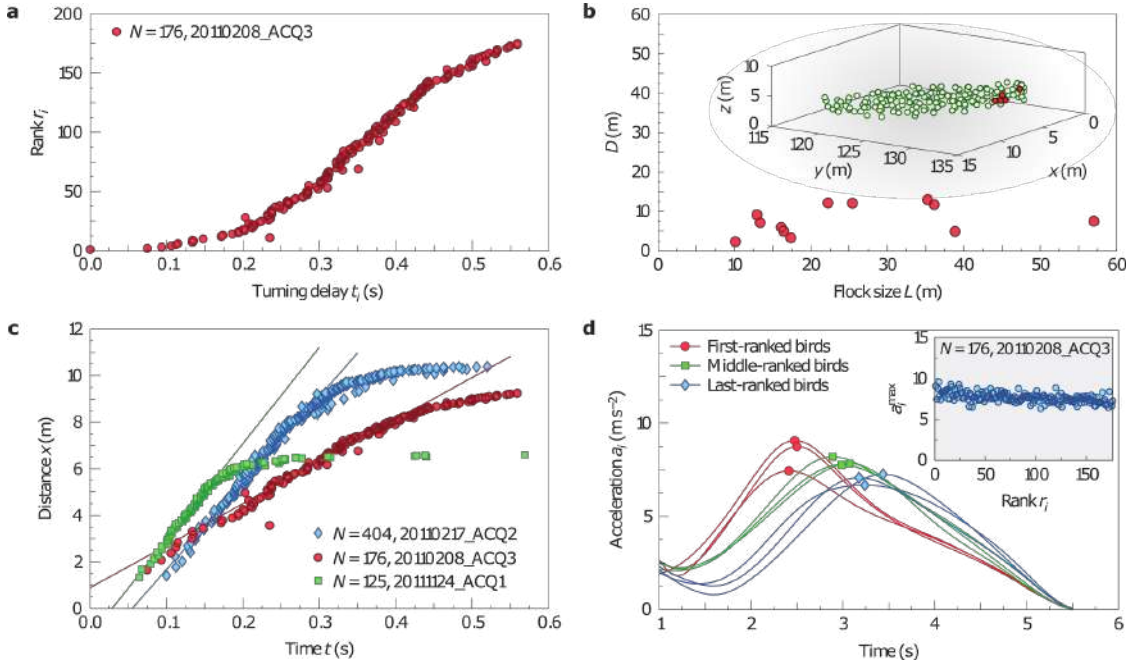


FIGURA 2.6: Propagación de un giro colectivo en el sistema. (a) El rango r_i de cada individuo en función de su tiempo de giro absoluto. (b) La distancia mutua máxima D entre los primeros 5 individuos en realizar el giro no se modifica con el tamaño del grupo L , indicando que el giro se inicia en un punto localizado y se propaga a sus vecinos más cercanos. (c) La distancia x recorrida por la información de giro en un tiempo t es proporcional al radio de la esfera que contiene a los primeros $r(t)$ individuos. La velocidad de propagación es la pendiente en el régimen lineal de $x(t)$ para tiempos cortos e intermedios. (d) La intensidad del pico de la aceleración angular, a^{\max} , se atenúa muy levemente al pasar de los primeros individuos en realizar el giro. La gráfica en el recuadro indica la aceleración máxima a^{\max} en función del rango r_i , mostrando que la perturbación se propaga en el sistema con muy poca atenuación. Imagen tomada de [3]

Hasta el momento hemos tratado el caso específico de las bandadas de estorninos, sin embargo, se han realizado estudios de otros grupos de animales que también son capaces de mostrar movimiento colectivo. Un ejemplo de esto es el trabajo presentado en [8], en donde se estudia el comportamiento colectivo de la langosta del desierto, *Schistocerca gregaria*. Este tipo de insecto realiza migraciones masivas en las que millones de organismos, en específico los juveniles que aún no cuentan con alas, modifican su dirección de movimiento resultado de interacciones de contacto con el resto de los insectos y forman grupos que se pueden extender sobre varios kilómetros. Estas migraciones masivas de insectos, además de ser un ejemplo espectacular de movimiento colectivo y de autoorganización, usualmente arrasan con cosechas a su paso generando un impacto social y económico devastador, por lo que el entendimiento del comportamiento de este tipo de plagas, además del interés científico, es importante para poder generar estrategias de control que minimicen su impacto.

Estos organismos típicamente pasan de mostrar un comportamiento “solitario”, en el que los individuos se mueven de forma independiente, a un comportamiento “gregario” en el que los individuos se agregan en bandadas que se mueven de forma coordinada. Este tipo de comportamiento se genera cuando grupos pequeños de agregados locales se mueven

de forma colectiva en el campo y van reclutando nuevos individuos a su paso, generando grupos cada vez más grandes. Si el reclutamiento de nuevos individuos en los grupos gregarios no es exitoso, estos se disuelven y los individuos vuelven a presentar un comportamiento solitario. Resultado de observaciones empíricas del comportamiento de este tipo de insectos, se ha determinado que una de las condiciones más importantes para observar movimiento colectivo es que exista una alta densidad local de individuos.

La densidad de las bandas de langostas que se observa en el campo se encuentra dentro de un rango típico de entre 20 y 50 individuos/ m^2 . Este rango se utilizó como referencia para los experimentos reportados en [8], en donde se utilizaron densidades entre 12.3 y 295 individuos/ m^2 dentro de una arena circular en forma de anillo (véase la Fig. 2.7).

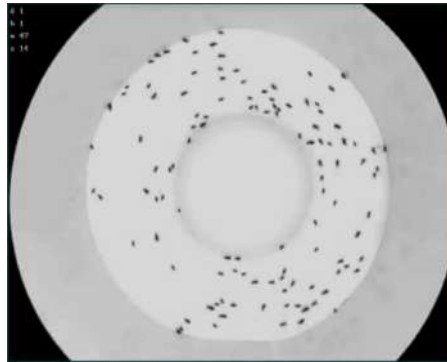


FIGURA 2.7: Fotografía de los experimentos realizados en [8]. Se observa la arena circular en forma de anillo donde se colocan las langostas, las cuales se pueden mover en el espacio entre el centro de la arena y la pared exterior. La fotografía muestra un experimento realizado con 120 langostas, las cuales presentan movimiento colectivo en sentido anti horario. Imagen tomada del material suplementario de [8].

En dichos experimentos se grabaron las posiciones de las langostas dentro de la arena por un periodo de 8 horas a una frecuencia de 5 cuadros por segundo, las cuales fueron procesadas para obtener la posición y orientación de cada una y así obtener sus coordenadas angulares relativas al centro de la arena en cuadros consecutivos. La orientación χ de cada insecto se define como el ángulo entre la línea que une un par de posiciones consecutivas y la que une el centro de la arena con la primera de las dos posiciones consideradas, lo cual expresamos como:

$$\chi_i = \arcsin [\sin (\theta_i - \alpha_i)], \quad (2.1)$$

donde α es el ángulo de la dirección de movimiento y θ es el ángulo con el centro de la arena. El alineamiento instantáneo de las langostas en la arena a cada paso de tiempo $\Phi(t)$, se define como el promedio normalizado de la orientación de todas las langostas en la arena, i.e.

$$\Phi(t) = \frac{2}{m\pi} \sum_{i=1}^m \chi_i(t), \quad (2.2)$$

donde m es el número total de individuos. Por lo tanto, los valores extremos de 1 y -1 indican que todas las langostas en el sistema se mueven de forma coordinada, ya sea en sentido horario o anti horario respectivamente, mientras que valores cercanos a 0 indican la ausencia de alineamiento colectivo.

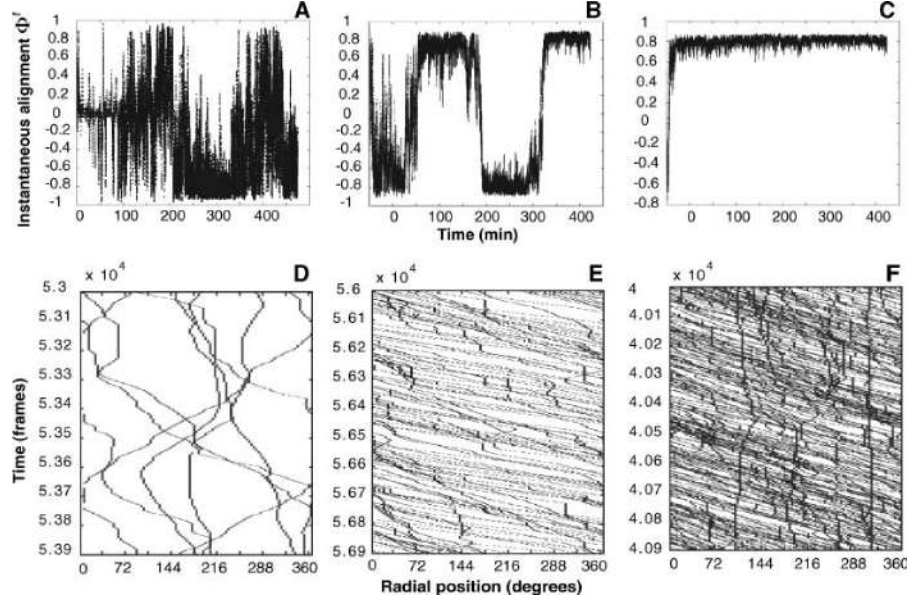


FIGURA 2.8: Comportamiento temporal del alineamiento de las langostas $\Phi(t)$ para distintas densidades: (A) 3.47 individuos/ m^2 , (B) 12.05 individuos/ m^2 y (C) 47.35 individuos/ m^2 . (D-F) Visualizaciones de la evolución temporal de la orientación de cada individuo en los experimentos para las mismas densidades que los paneles (A-C), el eje X corresponde a la orientación χ de cada individuo y el eje Y al tiempo, en un intervalo de 3 min. Imagen tomada de [8].

Como se muestra en la Fig. 2.8 el comportamiento observado en los experimentos reportados en [8] dependen fuertemente de la densidad del sistema. A bajas densidades, correspondientes a entre 5.3 y 17.2 individuos/ m^2 , se observó poco alineamiento entre individuos de forma esporádica después de largos periodos de movimiento desordenado. Para densidades intermedias entre 24.6 y 61.5 individuos/ m^2 se observaron largos periodos de movimiento colectivo interrumpidos por cambios rápidos espontáneos de dirección. A densidades arriba de 73.8 individuos/ m^2 también se observó movimiento colectivo en el sistema, con la diferencia de que en este caso no se observaron cambios espontáneos de dirección durante el tiempo de observación y los insectos adoptaron rápidamente una dirección común y persistente de movimiento en la arena.

Los resultados reportados en [8] no solamente muestran que la densidad del sistema induce la presencia de comportamiento colectivo en el sistema, sino que la persistencia del mismo también depende de esta, lo cual se refleja en la intermitencia del alineamiento de las langostas $\Phi(t)$ en donde se observan cambios colectivos en la dirección de movimiento, que desaparecen al aumentar la densidad del sistema. Este comportamiento se puede interpretar como una “inercia de grupo”, la cual hace más robustos bajo perturbaciones externas a estos grupos de insectos.

Estos dos grupos de animales, las bandadas de estorninos y los grupos de langostas, son ejemplos de movimiento colectivo en la naturaleza los cuales, a pesar de corresponder a especies animales muy distintas, presentan comportamientos auto organizados emergentes muy similares, resultado de las interacciones entre sus componentes. Esta omnipresencia del movimiento colectivo en sistemas de distintos tipos ha motivado la generación de modelos, algunos de los cuales describimos a continuación.

2.3. Modelos de movimiento colectivo

Debido a que el movimiento colectivo se observa en sistemas de muy distinta naturaleza, la comunidad científica se ha preguntado por los mecanismos mínimos o genéricos que permiten a un sistema de partículas interactuantes presentar movimiento coherente [55].

Con este fin, se han desarrollado distintos modelos de sistemas compuestos de partículas idénticas, que generalmente se mueven con la misma velocidad absoluta y son capaces de modificar su dirección de movimiento. Así mismo, se considera que las interacciones entre partículas ocurren dentro de cierto intervalo y que su efecto es únicamente el de modificar su dirección de movimiento. Finalmente se considera que las interacciones están sujetas al efecto de un ruido de magnitud variable, que modifica la dirección de las partículas después de una interacción [55], y que puede introducirse en el modelo de dos formas distintas, una agregando un ángulo aleatorio a la dirección promedio de las partículas vecinas (véanse las ecuaciones 2.5), o agregando un vector unitario aleatorio al vector resultante asociado a la velocidad promedio de las partículas vecinas (véanse las ecuaciones 2.6). Estas consideraciones mínimas son en las que se basan la mayor parte de los modelos de movimiento colectivo, siendo las principales diferencias entre ellos los detalles de la definición de las vecindades de interacción y la forma de la interacción entre partículas.

A continuación se presentan algunos de los principales ejemplos de modelos de movimiento colectivo y de estudios experimentales que hemos tomado como base para el desarrollo del proyecto de investigación.

2.3.1. El modelo de Vicsek

Uno de los primeros modelos de movimiento colectivo es el presentado por Tamás Vicsek en su artículo *Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles* de 1995 [56]. Anteriormente en 1987 Reynolds introdujo su modelo de “Boids” en [48], sin embargo, dicho modelo se desarrolló en el ámbito de la animación computerizada con el objetivo de generar visualizaciones realistas de grupos animales para películas y no con el objetivo de realizar una descripción cuantitativa de su comportamiento. En este sentido, el modelo de Vicsek es el primero que se desarrolló desde el marco de la física estadística y que sentó las bases para la descripción y caracterización del movimiento colectivo de sistemas de muchas partículas.

El modelo de Vicsek fue desarrollado con el propósito de investigar la formación de patrones, propiedades de transporte y transiciones de fase en sistemas fuera de equilibrio, en los cuales la dirección de las partículas está determinada por una regla simple de interacción y fluctuaciones aleatorias. El modelo consiste de N partículas $\{1, 2, \dots, N\}$ confinadas a una celda bidimensional de tamaño L con condiciones de frontera periódicas,

caracterizadas por su posición $\mathbf{r}_n(t)$ y velocidad $\mathbf{v}_n(t) = v_0(\cos \theta_n(t), \sin \theta_n(t))$, donde la dirección de movimiento de la partícula está dada por el ángulo $\theta_n(t)$. Se considera la misma magnitud de la velocidad, $\|\mathbf{v}_n\| = v_0$, para todas las partículas del sistema a todo tiempo t , debido a que el objetivo del modelo es estudiar la generación de orden en el sistema, i.e. la alineación de las direcciones de las velocidades de las partículas, resultado de las interacciones entre ellas.

Las partículas en el sistema modifican su dirección de movimiento mediante interacciones de alineamiento entre ellas y por fluctuaciones aleatorias, las cuales pueden ser interpretadas de dos formas distintas: una en la cual el ruido en el sistema corresponde a un error en el mecanismo de decisión de la partícula, i.e. comete un error al intentar alinearse con la dirección de sus vecinas; a este tipo de ruido se le denomina interno. Por otro lado es posible suponer que la señal llega a las partículas con cierta incertidumbre debido a condiciones del medio o a errores en el mecanismo de comunicación entre partículas, denominando a este tipo de ruido como externo. El modelo de Vicsek puede formularse considerando cada uno de los casos; sin embargo, la versión original considera solamente ruido interno.

Definimos a $U_i(r_0, t)$ como la vecindad circular de radio r_0 alrededor de la i -ésima partícula centrada en $\mathbf{r}_i(t)$. Dicha vecindad está compuesta por las partículas j tales que

$$\|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\| = r_{ij} \leq r_0, \quad (2.3)$$

donde r_{ij} es la distancia relativa entre la partícula i y la partícula j ; a la cantidad r_0 se le conoce como *alcance de interacción* y, junto con la distancia que recorren las partículas en un paso de tiempo, $d = v_0 \Delta t$, definen las distancias características en el sistema. A este tipo de vecindad de interacción definida por medio de un rango de interacción métrico se le denomina vecindad de interacción métrica.

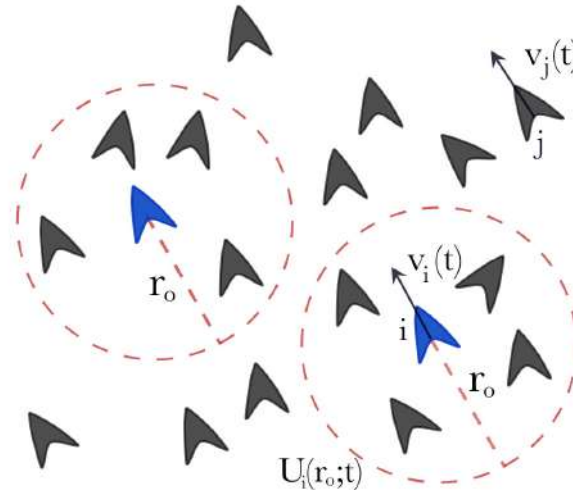


FIGURA 2.9: En el modelo de Vicsek, partículas autopropulsadas caracterizadas por su posición, $\mathbf{r}(t)$, y velocidad, $\mathbf{v}(t)$, interactúan con las partículas dentro de la vecindad circular de radio r_0 , alrededor de cada partícula $U_i(r_0, t)$.

Definimos al vector $\mathbf{V}_i(t)$ como la señal que cada partícula recibe de su vecindad de interacción $U_i(r_0; t)$ por medio de

$$\mathbf{V}_i(t) = \frac{1}{k_i(t)} \sum_{j \in U_i} \mathbf{v}_j(t), \quad (2.4)$$

donde $k_i(t)$ es el número de partículas en $U_i(r_0; t)$ al tiempo t . La evolución temporal del sistema con ruido interno está dada por la actualización simultánea de las posiciones y direcciones de cada partícula de acuerdo a las reglas:

$$\theta_i(t + \Delta t) = \text{ang}[\mathbf{V}_i(t)] + \eta \xi_i(t), \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = v_0(\cos \theta_i(t + \Delta t), \sin \theta_i(t + \Delta t)), \quad (2.5b)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \Delta t \quad (2.5c)$$

por otro lado, la dinámica del sistema con ruido externo se expresa por medio de las reglas

$$\theta_i(t + \Delta t) = \text{ang}[\mathbf{V}_i(t) + \eta(\cos \xi_i(t), \sin \xi_i(t))], \quad (2.6a)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = v_0(\cos \theta_i(t + \Delta t), \sin \theta_i(t + \Delta t)), \quad (2.6b)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \Delta t. \quad (2.6c)$$

En ambos casos la función $\text{ang}[\cdot]$ es tal que, para cualquier vector $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$, se tiene $\text{ang}[\mathbf{u}] = \arctan(u_y/u_x)$. A la variable $\xi_i(t)$ se le asocia un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo $[-\pi, \pi]$ y $\eta \in [0, 1]$ es un parámetro positivo asociado a la intensidad del ruido.

La diferencia entre ruido interno y externo radica en que en el primer caso, el ruido se agrega directamente a la dirección de la velocidad promedio, por lo que también se le conoce como ruido escalar. En el segundo caso, el ruido toma la forma de un vector aleatorio $\eta(\cos \xi_i(t), \sin \xi_i(t))$, el cual se suma directamente a la velocidad promedio $\mathbf{V}_n(t)$ y posteriormente se calcula la dirección del vector resultante; a esta implementación del ruido en el modelo también se le denomina como ruido vectorial [1].

El orden en el sistema se mide con el parámetro de orden instantáneo $\psi(t)$ definido como

$$\psi(t) = \frac{1}{Nv_0} \left| \sum_{n=1}^N \mathbf{v}_n(t) \right|, \quad (2.7)$$

el cual corresponde a la magnitud de la velocidad promedio de las partículas en el sistema. El parámetro de orden $\psi \rightarrow 0$ cuando el sistema se encuentra en un estado desordenado en el que todas las partículas se mueven en direcciones aleatorias no correlacionadas,

mientras que cuando el sistema se encuentra en un estado ordenado en el que las partículas se mueven en la misma dirección, el parámetro de orden $\psi \rightarrow 1$.

Este parámetro de orden es el que ha sido utilizado en la literatura, para caracterizar el estado dinámico del sistema desde la introducción del modelo por Vicsek en [56], hasta trabajos más recientes [1, 30, 1, 55], y es análogo a la magnetización en modelos de interacciones ferromagnéticas como el modelo de Ising, Potts, Heisenberg o XY [39].

Partiendo de condiciones iniciales aleatorias, después de un transitorio el sistema alcanza un estado estacionario y es posible promediar $\psi(t)$, ya sea sobre distintas realizaciones del ruido, o de manera equivalente sobre el tiempo. El parámetro de orden estacionario Ψ se define como

$$\Psi = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T \psi(t) dt \quad (2.8)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota un promedio de ensamble sobre distintas realizaciones, τ es el transitorio al estado estacionario del parámetro de orden, y el promedio temporal está dado por la integral.

Debido a que la vecindad de interacción de las partículas está definida de forma métrica, existe un acoplamiento entre densidad y orden, ya que el número de interacciones por partícula se incrementa con la densidad local. Manteniendo fijo el valor de la intensidad del ruido η , el modelo de Vicsek presenta una transición de fase orden-desorden en la que se pasa de una fase desordenada para valores bajos de la densidad, a una fase ordenada en la que las partículas en el sistema se mueven en una dirección en común para valores de la densidad mayores a una densidad crítica ρ_c (Fig. 2.10b). Así mismo, si ahora se mantiene fija la densidad ρ , el modelo de Vicsek también presenta una transición orden-desorden en función de la intensidad del ruido η (Fig. 2.10a).

La transición de fase en el modelo de Vicsek ha sido caracterizada en distintas ocasiones en la literatura [1, 37, 55, 56] y se ha mostrado que para el modelo de Vicsek con ruido *interno* la transición de fase, tanto en función del parámetro η como de la densidad ρ , es continua y muy similar a las transiciones de fase para sistemas de equilibrio cerca de un punto crítico, satisfaciendo las relaciones de escalamiento [56, 37]:

$$\Psi(\eta) \sim [\eta_c(\rho) - \eta]^\beta, \quad \Psi(\rho) \sim [\rho - \rho_c(\eta)]^\delta, \quad (2.9)$$

donde $\beta = 0.45 \pm 0.07$ y $\delta = 0.35 \pm 0.06$, son los exponentes críticos y $\eta_c(\rho)$ y $\rho_c(\eta)$ son la intensidad de ruido y densidad críticas (para $L \rightarrow \infty$), respectivamente. Sin embargo, como se discute en [1] y [37], la naturaleza de la transición de fase parece depender de la implementación del ruido en el modelo y el régimen de velocidad de las partículas, mostrándose como discontinua para el caso de ruido externo o en el caso en el que la velocidad de las partículas satisface la relación $v\Delta t > r_0$.

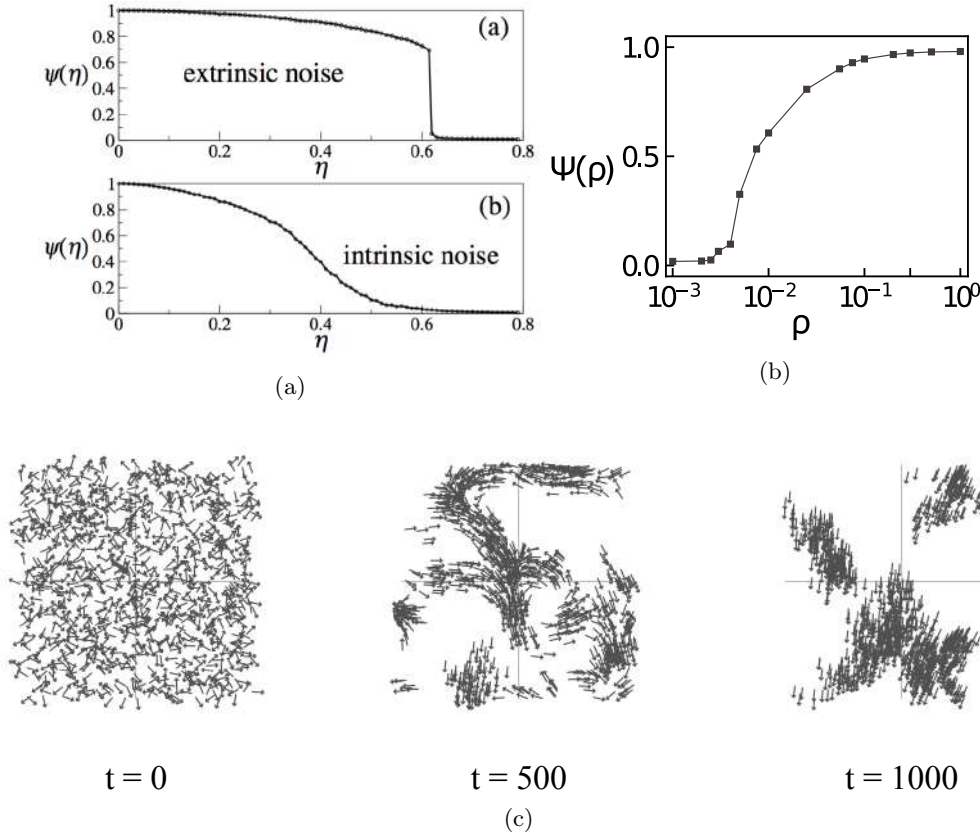


FIGURA 2.10: El modelo de Vicsek presenta una transición de fase orden-desorden en la que se pasa de un estado desordenado en el que las partículas realizan un movimiento aleatorio no correlacionado a un estado ordenado en el que las partículas se mueven en una dirección en común. (a) Manteniendo fija la densidad ρ , la intensidad del ruido η funge como el parámetro de control de la transición. La transición se muestra como discontinua para el modelo con ruido externo y continua para el caso de ruido interno (Imagen tomada de [1]) (b) Debido a que la interacción entre partículas se define de forma métrica, existe un acoplamiento entre densidad y orden. Manteniendo fija la intensidad del ruido η , la transición de fase se presenta en función de la densidad ρ . (c) Visualizaciones para un sistema de $N = 1000$ partículas y $\eta = 0.01$, partiendo de condiciones iniciales aleatorias, o un estado desordenado, se puede observar como las partículas alcanzan un estado ordenado en el que se mueven aproximadamente en la misma dirección.

2.3.2. El modelo de Vicsek en espacio abierto

Como hemos discutido en la sección anterior, el modelo de Vicsek presenta una transición orden-desorden, ya sea en función de la intensidad del ruido en el sistema mientras se mantiene la densidad de partículas fija, o en función de la densidad manteniendo la intensidad del ruido constante. Sin embargo, usualmente no se menciona el papel que juegan las condiciones de frontera en la dinámica del sistema para que este comportamiento pueda ser observado.

Cuando el movimiento de las partículas se lleva a cabo dentro de fronteras periódicas, partículas que se encuentran en extremos opuestos de la celda de simulación y que se mueven en direcciones contrarias alejándose entre ellas, al cruzar las fronteras y ser reinsertadas en el sistema, ahora se acercan entre ellas con la posibilidad de encontrarse e

interactuar (véanse las Fig. 2.11a y 2.11b). Situación que no ocurre cuando el movimiento de las partículas se lleva a cabo sin restricción en espacio abierto, donde partículas que se mueven en direcciones opuestas continúan alejándose entre sí (véanse las Fig. 2.11c y 2.11d).

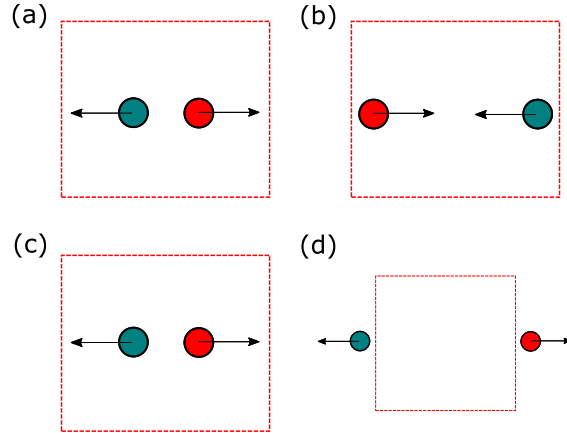


FIGURA 2.11: Efecto de las condiciones de frontera periódicas en la dinámica del sistema. Partículas moviéndose en direcciones contrarias dentro de una celda de simulación con condiciones periódicas de frontera (representadas por líneas punteadas en la figura) (a), al cruzarlas y ser reinsertadas en la celda, se mueven ahora una en dirección de la otra (b) con la posibilidad de interactuar entre ellas. A diferencia de cuando el movimiento de las partículas ocurre en espacio abierto, en donde partículas que se mueven en direcciones opuestas (c), continúan alejándose entre si (d), sin la posibilidad de interactuar entre ellas.

Esta retroalimentación de interacciones entre partículas en la celda de simulación debido a la presencia de fronteras periódicas en el sistema, es la que hace posible observar estados globales ordenados ya que induce interacciones entre partículas que no ocurren cuando el movimiento de las partículas se realiza en espacio abierto. Como mostramos en la Fig. 2.12, en el caso en espacio abierto el sistema se fragmenta en cúmulos incluso para valores bajos de la intensidad del ruido en el sistema η , lo cual se refleja en valores para el parámetro de orden $\Psi \approx 0$. Sin embargo, también se observa que estos cúmulos se mueven de manera ordenada localmente, por lo que el parámetro de orden Ψ , al tomar en cuenta al total de las partículas en el sistema no refleja esta situación, haciendo aparente la ausencia de comportamiento colectivo el cual, si bien no se observa de manera global como en el caso dentro de fronteras periódicas, si está presente localmente en cada cúmulo. Esta situación es similar a la que se presenta en sistemas magnéticos cuyos dominios se organizan en bandas, resultando en una magnetización global cercana a cero, pero que localmente tiene un valor finito.

Dado que en la naturaleza los sistemas que presentan movimiento colectivo no se mueven dentro de fronteras periódicas, como las bandadas de estorninos o los cardúmenes de peces, es necesario desarrollar modelos de movimiento colectivo en espacio abierto que sean capaces de describir este comportamiento.

2.3.3. Behavioural Rules Model

El *Behavioural Rules Model* introducido por Couzin en [18], es un modelo de movimiento colectivo en espacio abierto en tres dimensiones basado en interacciones métricas entre

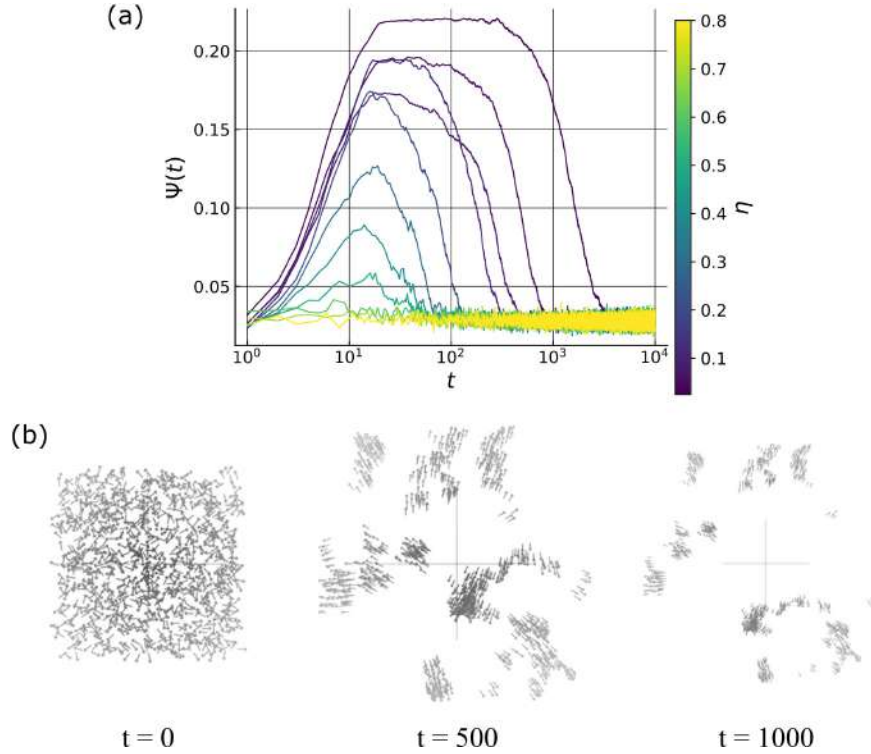


FIGURA 2.12: Modelo de Vicsek en espacio abierto. (a) Parámetro de orden Ψ en función del tiempo para valores de la intensidad del ruido $\eta \in [0.01, 0.8]$, para un sistema de $N = 1024$ partículas, $\rho = 1$, $v_0 = 1$, $r_0 = 1$. Cada curva representa un promedio de ensemble sobre 40 condiciones iniciales aleatorias. Se puede observar como para todos los valores de η , el sistema no muestra estados globales ordenados, lo cual se refleja en valores de $\Psi \approx 0$. (b) Instantáneas del sistema para una intensidad de ruido de $\eta = 0.01$, se puede observar como el grupo se fragmenta en pequeños grupos coherentes que se alejan entre ellos, lo que resulta en valores bajos del parámetro de orden. La cruz al centro de las figuras muestra el tamaño inicial de la celda de simulación.

partículas. El modelo consiste de N partículas $\{1, 2, \dots, N\}$, caracterizadas por su posición \mathbf{r}_i , su velocidad \mathbf{v}_i con magnitud constante $|\mathbf{v}_i| = v_0$. A cada paso de tiempo cada partícula actualiza su dirección de movimiento de acuerdo con la orientación y posición de las demás partículas a su alrededor dentro de tres zonas no traslapadas que corresponden a comportamientos distintos. Estas zonas se muestran en la Fig. 2.13 y son: (i) zona de repulsión (*zor*), definida como la vecindad esférica de radio r_r centrada en la partícula i -ésima, donde las partículas se repelen para mantener una distancia mínima entre ellas. (ii) La zona de orientación (*zoo*), definida como el cascarón de ancho $\Delta r_o = r_o - r_r$, donde la partícula i se alinea con la dirección promedio de las partículas dentro de la zona. (iii) La zona de atracción (*zoo*), definida como el cascarón esférico de ancho $\Delta r_a = r_a - r_o$, donde la partícula modifica su dirección de movimiento para alinearse en la dirección de la posición promedio de las partículas dentro de la región.

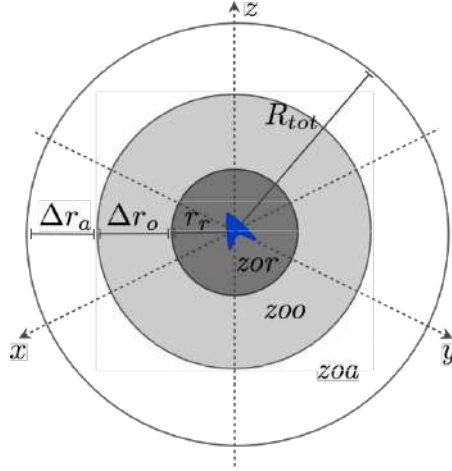


FIGURA 2.13: Behavioural Rule Model. La interacción entre partículas depende de la zona en la que se encuentran. En la zona de repulsión (zor) las partículas se repelen entre ellas para mantener una distancia mínima entre ellas. En la zona de orientación (zoo), las partículas alinean su dirección de movimiento con la promedio de las partículas dentro de la zona. En la zona de atracción (zoa), las partículas se mueven en la dirección de la posición promedio de las otras partículas en la zona. $R_{tot} = r_r + \Delta r_o + \Delta r_a$ es la región total de interacción de las partículas en el sistema.

Denotamos por $\mathbf{d}_i(t)$ el vector de dirección de la i -ésima partícula al tiempo t , y definimos los vectores de repulsión, orientación y atracción asociados a la partícula, respectivamente, como

$$\mathbf{d}_i^r(t + \Delta t) = - \sum_{j \neq i}^{n_i^r(t)} \frac{\mathbf{r}_{ij}(t)}{|\mathbf{r}_{ij}(t)|}, \quad (2.10a)$$

$$\mathbf{d}_i^o(t + \Delta t) = \sum_{j=1}^{n_i^o(t)} \frac{\mathbf{v}_{ij}(t)}{|\mathbf{v}_{ij}(t)|}, \quad (2.10b)$$

$$\mathbf{d}_i^a(t + \Delta t) = \sum_{j \neq i}^{n_i^a(t)} \frac{\mathbf{r}_{ij}(t)}{|\mathbf{r}_{ij}(t)|} \quad (2.10c)$$

donde $n_i^r(t)$, $n_i^o(t)$ y $n_i^a(t)$ son el número de partículas dentro de cada una de las zonas de comportamiento al tiempo t , la cantidad $\mathbf{r}_{ij} = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ es el vector unitario en la dirección de la i -ésima a la j -ésima partícula y Δt es el paso de tiempo de integración. Estos vectores determinan las interacciones de la i -ésima partícula con las demás dentro de cada una de las zonas de comportamiento.

La dirección de cada partícula se actualiza a cada paso de tiempo de acuerdo con las reglas

$$\mathbf{d}_i(t + \Delta t) = \mathbf{d}_i^r(t + \Delta t) \text{ si } n_i^r > 0, \quad (2.11a)$$

$$\mathbf{d}_i(t + \Delta t) = \mathbf{d}_i^o(t + \Delta t) \text{ si } n_i^r, n_i^a = 0, \quad (2.11b)$$

$$\mathbf{d}_i(t + \Delta t) = \mathbf{d}_i^a(t + \Delta t) \text{ si } n_i^r, n_i^o = 0, \quad (2.11c)$$

$$\mathbf{d}_i(t + \Delta t) = \frac{1}{2}[\mathbf{d}_i^o(t + \Delta t) + \mathbf{d}_i^a(t + \Delta t)] \quad (2.11d)$$

si $n_r = 0$ y $n_o, n_a \neq 0$.

En el caso en que las interacciones resulten en un vector nulo o no se hayan detectado partículas en ninguna de las zonas de comportamiento, la partícula no modifica su dirección de movimiento, i.e.

$$\mathbf{d}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t). \quad (2.12)$$

Finalmente el modelo considera que la actualización de la dirección de movimiento de las partículas está sujeta a los efectos de un ruido externo, lo cual se simula rotando al vector $\mathbf{d}_i(t + \Delta t)$, en la dirección de un vector aleatorio con componentes tomadas de una distribución Gaussiana con promedio nulo y desviación estándar σ . De tal forma que, una vez que se ha determinado el vector $\mathbf{d}_i(t + \Delta t)$ para cada partícula, este se normaliza a una magnitud constante v , y se actualizan los vectores de velocidad de las partículas como:

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = v_0 \hat{\mathbf{d}}_i(t + \Delta t), \quad (2.13)$$

El análisis de la dinámica del modelo se realiza con la polarización del grupo p_{group} y el momento angular del grupo m_{group} . La polarización del grupo p_{group} es análoga al parámetro de orden Ψ definido en la Ec. 2.7 y mide el grado de alineamiento en el grupo, mientras que el momento angular m_{group} es la suma de los momentos angulares individuales alrededor del centroide del grupo \mathbf{r}_{group} y mide el grado de rotación del grupo alrededor de su centro. Ambas cantidades están dadas por las expresiones

$$p_{group}(t) = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t) \right| \quad (2.14)$$

$$m_{group}(t) = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_{ic}(t) \times \mathbf{v}_i(t) \right| \quad (2.15)$$

donde $\mathbf{r}_{ic} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{group}$, es la posición de la partícula p_i relativa al centroide del grupo \mathbf{r}_{group} dado por

$$\mathbf{r}_{group}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i(t). \quad (2.16)$$

El modelo presenta distintos comportamientos colectivos en función del tamaño de las zonas de orientación Δr_o y de atracción Δr_a , los cuales se pueden clasificar de la siguiente manera:

Enjambre: Agregado cohesivo, pero con polarización p_{group} y momento angular m_{group} bajos. Esto ocurre cuando las partículas interactúan principalmente de forma atractiva y repulsiva, pero con poca o nula orientación. Este comportamiento es similar al que se observa en enjambres de insectos (Fig. 2.14A).

Movimiento toroidal: Las partículas rotan alrededor de un centro en común. La dirección de rotación es aleatoria. La polarización del grupo p_{group} es baja pero el momento angular m_{group} es alto. Se presenta para valores de Δr_o relativamente bajos y de Δr_a relativamente altos. Este comportamiento es similar al que presentan algunos cardúmenes de peces (Fig. 2.14B).

Grupo paralelo dinámico: El grupo muestra una alta polarización pero bajo momento angular. Este comportamiento es mucho más móvil que los anteriores, lo cual se observa en una traslación del centro de masa del sistema, y ocurre para valores intermedios de Δr_o con valores intermedios o altos de Δr_a . (Fig. 2.14C).

Grupo altamente paralelo: Al incrementarse el tamaño de la zona de orientación, el grupo se autoorganiza en una estructura altamente alineada ($p_{group} \sim 1$). El movimiento del centro de masa del sistema es esencialmente rectilíneo, lo cual se refleja en un valor $m_{group} \sim 0$ para el momento angular del grupo (Fig. 2.14D).

Cabe mencionar que esta descripción de los estados macroscópicos que presenta el modelo, es un parafraseo de lo reportado en [18], y que la ambigüedad de los adjetivos alto, bajo e intermedio para los tamaños de las zonas de orientación y atracción, Δr_o y Δr_a , responde a que se reportan en unidades arbitrarias y no se proporciona una escala espacial con cual compararlas. Sin embargo, si se considera una densidad inicial de partículas ρ_0 , podemos comparar el tamaño de las zonas de orientación y atracción con el tamaño de la celda inicial $L_0 = \sqrt[3]{N/\rho}$.

Con el fin de determinar el tamaño de las zonas de atracción y repulsión necesarias para que el sistema presente estados con polarización alta, se realizaron simulaciones numéricas manteniendo fijos el tamaño de la zona de repulsión r_r , la intensidad del ruido en el sistema y la densidad inicial ρ_0 (los parámetros utilizados se listan en la Tabla A.1 del apéndice). Como se muestra en la Fig. 2.15, el tamaño de la zona total de interacción $R_{tot} = r_r + \Delta r_o + \Delta r_a$ debe de ser comparable con L_0 para que el sistema pueda mostrar comportamientos ordenados en espacio abierto partiendo de condiciones iniciales aleatorias.

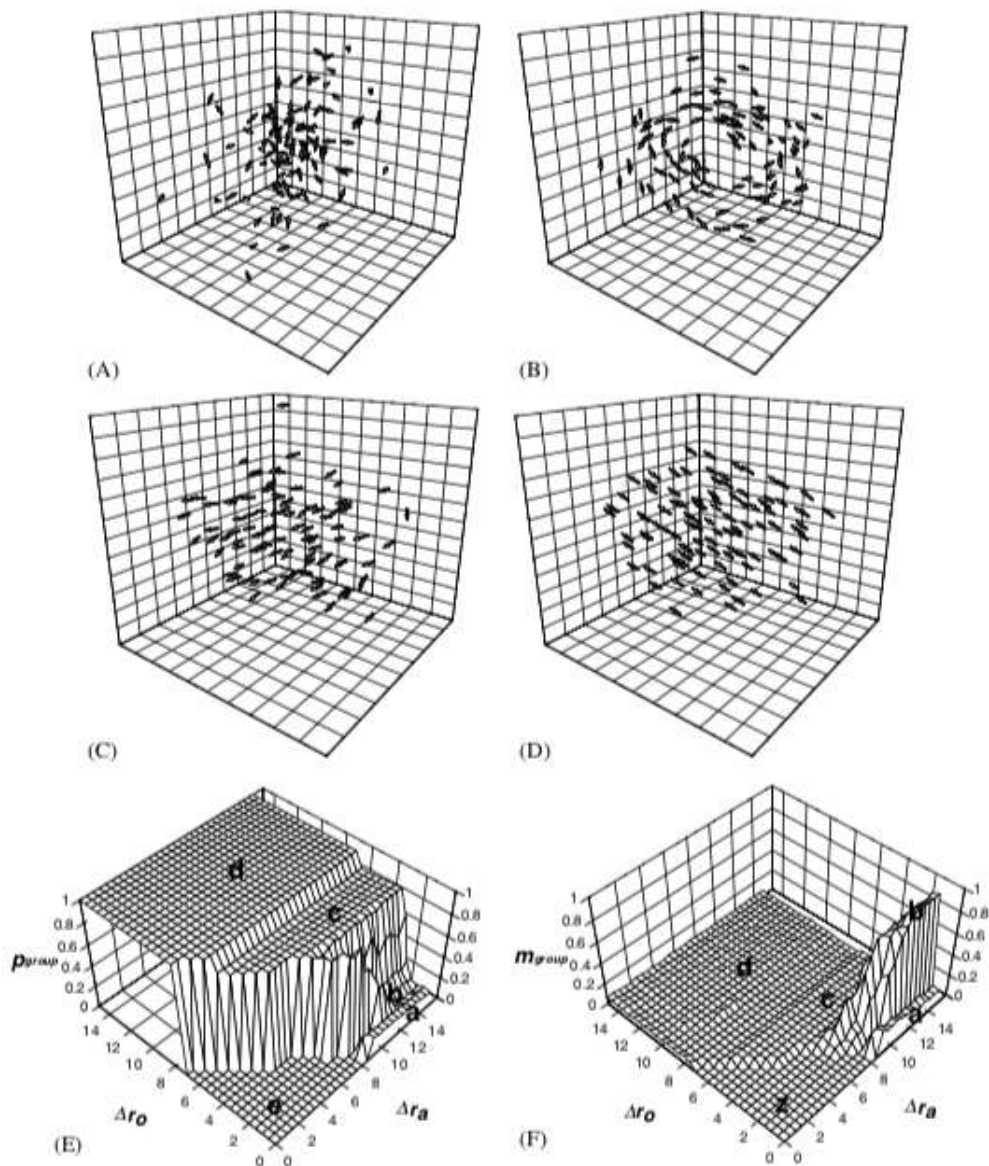


FIGURA 2.14: Comportamientos colectivos mostrados por el modelo: (A) enjambre, (B) movimiento toroidal, (C) grupo paralelo dinámico, (D) grupo altamente paralelo. (E) polarización del grupo p_{group} y (F) momento angular del grupo m_{group} como función del tamaño de las zonas de orientación Δr_o y de atracción Δr_a . Las áreas marcadas por (a-d) corresponden a los comportamientos (A-D) respectivamente. Imagen tomada de [18]

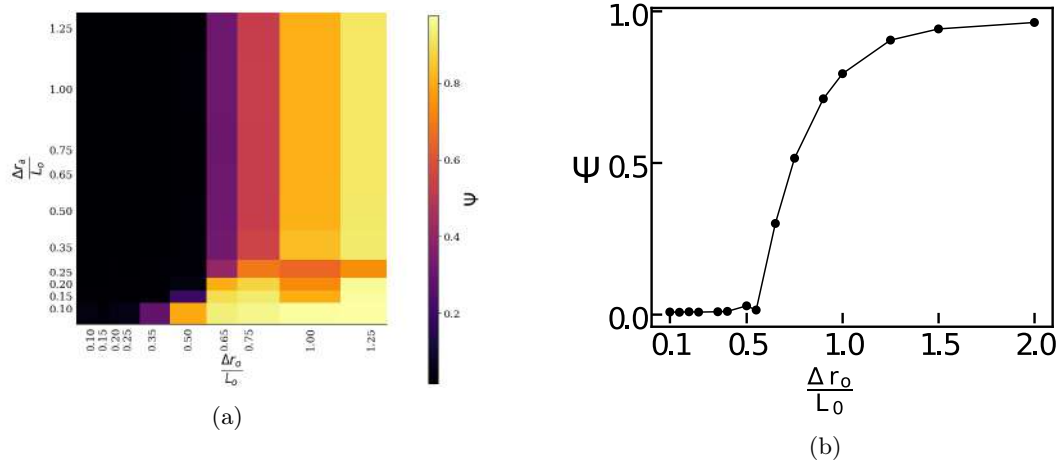


FIGURA 2.15: Polarización p_{group} en el Behavioural Rules Model para distintos valores del tamaño de las zonas de orientación Δr_o y de atracción Δr_a relativos al tamaño del sistema L_0 . (a) Radio de repulsión $r_r = 0.05L_0$, el modelo presenta estados ordenados siempre y cuando $\Delta r_o > 0.65L_0$. (b) Polarización en función de la zona de orientación manteniendo fijo $\Delta r_a = L_0$, el tamaño de la zona de interacción debe de ser $R_{tot} \approx L_0$ para mostrar estados ordenados.

El que la zona de interacción de cada partícula sea comparable con el tamaño la celda inicial ($R_{tot} \approx L_0$) para que sea posible observar estados ordenados, implica que cada partícula necesita interactuar con la mayor parte de todas las demás en el sistema, generando dudas sobre la capacidad de las interacciones de corto alcance para generar estados colectivos en espacio abierto.

2.3.4. Inertial Spin Model

Uno de los objetivos de los modelos de Vicsek y de Couzin es el de investigar qué tipo de interacciones permiten a un sistema de partículas llegar a un estado colectivo ordenado, ya sea éste caracterizado por una polarización alta (correspondiente a un valor de Ψ o de $p_{group} \approx 1$) en el que el movimiento de las partículas es esencialmente rectilíneo, o caracterizado por un momento angular alto (correspondiente a $m_{group} \approx 1$) en el que las partículas rotan en la misma dirección alrededor de un punto. La capacidad de generar estos tipos de estados colectivos emergentes es una de las características de los sistemas autoorganizados, otra característica importante es su capacidad de respuesta colectiva a perturbaciones externas, por ejemplo, un grupo de estorninos realiza un cambio de dirección colectivo cuando es atacado por un depredador. Típicamente este tipo de ataques se realiza sobre un conjunto de individuos, provocando una perturbación local que se propaga en el sistema y que resulta en un cambio en el estado colectivo del grupo.

El *Inertial Spin Model* introducido en [12], fue realizado con el propósito de crear un modelo que presente cambios de dirección colectivos con las características dinámicas que se han observado en grupos de estorninos reales [3]; en específico, se ha mostrado que los giros colectivos presentan una propagación lineal de información puramente direccional (la dirección de movimiento de los individuos) y de curvatura de las trayectorias individuales, sin cambios en la densidad local. También se ha observado que estos cambios de dirección

colectivos se inician localmente en el sistema, típicamente por un solo individuo, y el frente de giro se propaga rápidamente y sin atenuación. Estos giros colectivos no se observan en el modelo de Vicsek, en donde la propagación de información direccional ocurre de forma difusiva y con atenuación (Fig. 2.16).

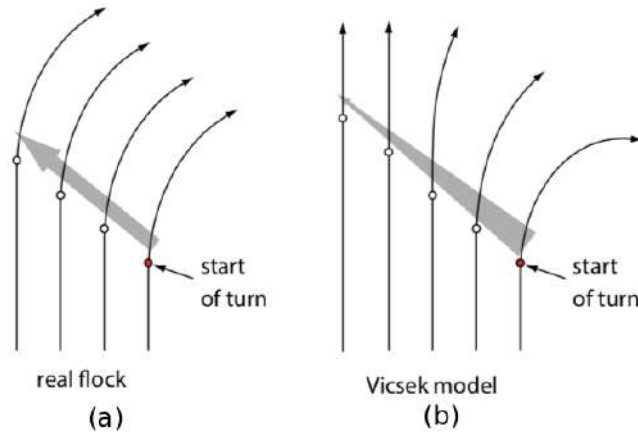


FIGURA 2.16: Representación esquemática de la propagación de un giro en un grupo real y en el modelo de Vicsek. (a) Se ha observado que en un sistema real, cuando un individuo comienza un giro la información del cambio de dirección se propaga sin atenuación a todo el sistema y se genera un giro colectivo. (b) En el modelo de Vicsek la información de giro se disipa y no se propaga en el sistema. Imagen tomada de [12]

En el estudio realizado en [3], se muestra que dos ingredientes faltantes en la dinámica del modelo de Vicsek que deben ser tomados en cuenta para reproducir los giros colectivos observados en sistemas reales son: (i) la presencia de una ley de conservación asociada a la simetría rotacional del sistema y (ii) una inercia de comportamiento que medie el efecto de la fuerza social (interacción de las partículas con un conjunto de vecinos).

Para la construcción del modelo, se parte del hecho de que las partículas que constituyen al sistema son autopropulsadas y de que su velocidad es esencialmente constante cuando realizan movimiento dirigido o durante giros colectivos [3, 13]. Esta condición, también presente en el modelo de Vicsek (ver sección 2.3.1), la expresamos como

$$\|\mathbf{v}\| = v_0. \quad (2.17)$$

Expresamos a la velocidad de las partículas en términos de la coordenada generalizada ϕ , asociada a la orientación del vector de velocidad en un plano, como

$$\mathbf{v} = v_0(\cos \phi, \sin \phi), \quad (2.18)$$

la variable ϕ es el parámetro de rotación de la partícula alrededor de su posición, i.e. el generador de la rotación parametrizada por ϕ no es el momento angular de la partícula l , sino un momento interno, o spin s . Las variables (ϕ, s) son las coordenadas conjugadas que imponen la restricción de velocidad constante. En ausencia de fuerzas, además de las que

mantienen la restricción de la Ec. 2.17, podemos asociar el Hamiltoniano al movimiento de la partícula:

$$H = \frac{s^2}{2\chi} \quad (2.19)$$

donde χ es un momento generalizado de inercia que representa la resistencia de un individuo a modificar su spin (o dirección de movimiento). Las ecuaciones de movimiento, en términos de los paréntesis de Poisson, $\{ \cdot, \cdot \}$, de las coordenadas generalizadas con el Hamiltoniano están dadas por

$$\frac{d\phi}{dt} = \{\phi, H\} = \frac{\partial H}{\partial s} = \frac{s}{\chi}, \quad (2.20a)$$

$$\frac{ds}{dt} = \{s, H\} = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = 0. \quad (2.20b)$$

La simetría del Hamiltoniano bajo rotaciones de la velocidad de la forma $\phi \rightarrow \phi + \delta\phi$, representa que todas las direcciones de movimiento son equivalentes e implica, de acuerdo al teorema de Noether, la conservación del spin de la partícula. Por lo tanto, el movimiento descrito por el hamiltoniano H , es el de una partícula cuya velocidad rota a velocidad constante $\dot{\phi} = s/\chi$.

Para describir un sistema de N partículas autopropulsadas $\{1, 2, \dots, N\}$ interactuantes, cada una con un par de coordenadas generalizadas (ϕ_i, s_i) , un vector de posición \mathbf{r}_i y de velocidad \mathbf{v}_i , se propone el Hamiltoniano H

$$H = -\frac{J}{2v_0^2} \sum_{ij} n_{ij} \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j + \frac{1}{2\chi} \sum_i s_i^2, \quad (2.21)$$

donde J es la intensidad de la fuerza de alineamiento entre partículas, a partir del cual obtenemos las ecuaciones de movimiento

$$\frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = \frac{1}{\chi} \mathbf{s}_i(t) \times \mathbf{v}_i(t), \quad (2.22a)$$

$$\frac{ds_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t) \times \left[\frac{J}{v_0^2} \mathbf{V}_i(t) - \frac{\eta}{v_0^2} \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} + \frac{\boldsymbol{\xi}_i}{v_0} \right], \quad (2.22b)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t); \quad (2.22c)$$

donde, además de la interacción descrita por el Hamiltoniano, se ha agregado el término disipativo para la variable de spin: $-(\eta/v_0^2)(d\mathbf{v}_i/dt)$, con coeficiente de fricción η , y un término estocástico en el que $\boldsymbol{\xi}_i$ es un vector aleatorio con correlación

$$\langle \boldsymbol{\xi}_i(t) \cdot \boldsymbol{\xi}_j(t') \rangle = 2d\eta T \delta_{ij} \delta(t - t'), \quad (2.23)$$

que representa el ruido en el sistema con intensidad T . $\mathbf{V}_i(t)$ es la información que cada partícula recibe de sus primeros κ_l vecinos cercanos, dada por

$$\mathbf{V}_i(t) = \frac{1}{\kappa_l} \sum_{j \neq i} n_{ij} \mathbf{v}_j(t), \quad (2.24)$$

donde $n_{ij} = 1$ si la j -ésima partícula es una de los primeros κ_l vecinos de la i -ésima o $n_{ij} = 0$ en caso contrario. Esta forma de definir a las interacciones de cada partícula (los primeros κ_l vecinos más cercanos), se denomina topológica, ya que, a diferencia de los modelos de Vicsek (ver sección 2.3.1) y Couzin (ver sección 2.3.3) discutidos anteriormente, no se considera un alcance de interacción fijo sino que se elige a un número fijo de vecinos, independientemente de su distancia relativa con la partícula.

El modelo puede operar en dos regímenes, dependiendo de los valores de los parámetros η y χ ; el régimen sobreamortiguado, que corresponde a valores $\eta^2/\chi > \kappa_l J(a/L)^2$, o el subamortiguado para valores $\eta^2/\chi \ll \kappa_l J(a/L)^2$, donde L es el tamaño inicial del sistema y a es la distancia promedio entre partículas.

En el régimen sobreamortiguado, el cambio de dirección iniciado por una partícula en el modelo se atenúa hasta escalas $k \geq k_0$ con $k_0 = 1/(2a\sqrt{\kappa_l J \chi}) > 1/L$. Para escalas $k < k_0$, la disipación de la señal domina, ocasionando un decaimiento exponencial de la señal. El caso extremo ocurre para $\eta^2/\chi \rightarrow \infty$ (o $\chi/\eta^2 \rightarrow 0$), donde no ocurre la propagación de perturbaciones de dirección en el sistema. Por otro lado, en el régimen subamortiguado se tiene una propagación lineal de la señal a través del sistema con una atenuación despreciable, permitiendo al sistema presentar giros colectivos. La velocidad de la propagación de la información en el sistema está dada por $c_s = a\sqrt{\kappa_l J/\chi}$.

En la Fig. 2.17 se muestran los resultados de simulaciones numéricas del modelo para distintos valores de los parámetros η y χ , en las que, partiendo de un estado ordenado, se elige una partícula al azar para que realice un giro de 90° con respecto a su dirección de movimiento y sea la generadora de un giro colectivo en el sistema. Para caracterizar la propagación de información en el sistema se hace uso de la cantidad

$$\cos \phi_i(t) = \mathbf{v}_i(t_0) \cdot \mathbf{v}_i(t), \quad (2.25)$$

la cual corresponde a la dirección de la velocidad $\mathbf{v}_i(t)$ con respecto al momento de inicio de la perturbación t_0 , y para caracterizar la atenuación de la propagación de la perturbación en el sistema se utiliza la aceleración angular instantánea de cada partícula $a_i(t)$

Para valores de los parámetros en el régimen sobre amortiguado, no hay propagación de perturbaciones en el sistema y por lo tanto no se observan giros colectivos. En la Fig. 2.17a, 2.17d y 2.17g se observa que algunas partículas cercanas a la perturbación reaccionan a esta, pero el efecto es muy pequeño y el grupo mantiene su dirección de movimiento original. Para valores menores de η^2/χ (Fig. 2.17b) se observa que, aunque la propagación de la perturbación es mayor que en el caso anterior, esta es atenuada a su paso por el sistema hasta desaparecer (Fig. 2.17e y 2.17h) y la mayor parte de las partículas en el sistema no son afectadas significativamente. En este caso, además de no

generarse un giro colectivo, el grupo se desintegra debido a la pérdida de cohesión durante la propagación de la perturbación.

Para el caso subamortiguado la perturbación se propaga a través de todo el sistema, y todas las partículas siguen a la partícula generadora del giro modificando su dirección de movimiento sin atenuación (Fig. 2.17c). Las Fig. 2.17f y 2.17i muestran que el giro se realiza de forma coordinada, permitiendo al grupo modificar su dirección de movimiento manteniendo su forma y cohesión durante el giro.

El *Inertial Spin Model* es un modelo basado en interacciones topológicas de alineamiento, capaz de describir giros colectivos con las propiedades dinámicas observadas en sistemas reales reportadas en [3]. A diferencia de otros modelos de movimiento colectivo en donde las interacciones entre partículas modifican directamente al vector de velocidad, en este modelo se introducen una variable de spin, y un momento de inercia asociado a la resistencia de las partículas a modificar su dirección de movimiento. Esta variable de spin media la interacción entre partículas y modifica de forma indirecta su vector de velocidad. Cabe hacer notar que el análisis del modelo se realiza considerando al sistema ya en un estado ordenado, lo cual se justifica argumentando que es lo que corresponde a las observaciones realizadas de sistemas reales [4, 3]. Sin embargo, queda abierta la pregunta de si el mecanismo de interacción propuesto es capaz de generar estados ordenados partiendo de condiciones iniciales aleatorias, o si sólo es efectivo una vez que el sistema se encuentra en un estado estacionario ordenado.

2.3.5. Control de densidad con interacciones topológicas

De manera análoga al *Inertial Spin Model*, el modelo introducido en [40] y que comentamos en esta sección, está basado en interacciones de los individuos con sus primeros vecinos topológicos, con la diferencia de que en este modelo el comportamiento de los individuos depende de su posición en el grupo, en específico, según se encuentren en el bulto o en la frontera del mismo.

En el modelo se define a los individuos que forman parte de la envolvente convexa del grupo como pertenecientes a la frontera, y al resto de los individuos como parte del bulto. Se introduce un sesgo hacia el interior del grupo para aquellos individuos que se encuentran en la frontera, donde el interior se define como la dirección promedio de los vectores apuntando hacia los vecinos de Voronoi que también forman parte de ella (véase la Fig. 2.18), argumentando que esta definición es compatible con la observación de bandadas con fronteras definidas y relativamente estables, además de imitar un efecto de tensión superficial.

Una de las justificaciones que se presentan en [40] para diferenciar el comportamiento de los individuos en la frontera es que son estos los que están más expuestos a ataques o perturbaciones externas, a diferencia de los que se encuentran en el bulto del grupo, y por lo tanto son los que tienen la capacidad de generar cambios en la estructura del grupo.

El modelo consta de N individuos, cuyo movimiento se realiza en espacio abierto, i.e. no está restringido por condiciones de frontera periódicas, caracterizados por sus vectores de

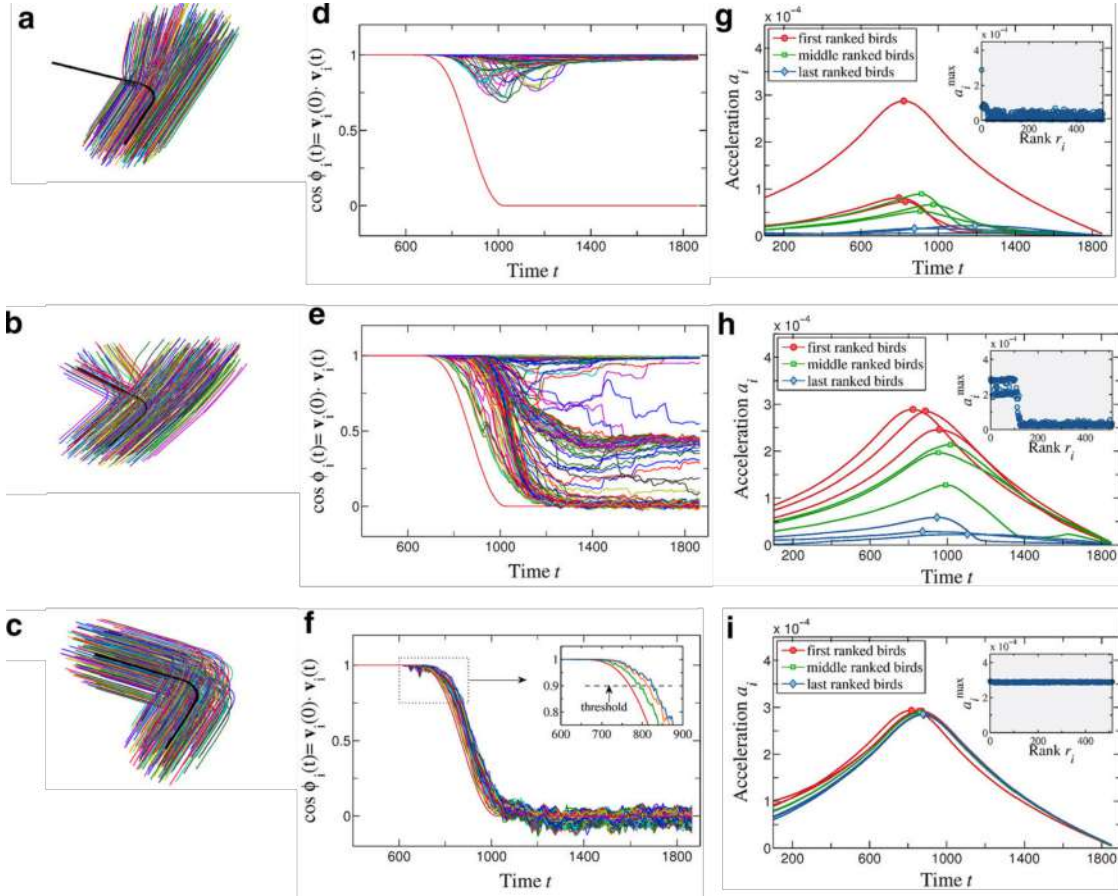


FIGURA 2.17: Propagación de información en diferentes regímenes. (a) Régimen sobreamortiguado, $\eta^2/\chi = 28.8 \times 10^2$. La señal se disipa rápidamente y no hay giro colectivo. La trayectoria de la partícula iniciadora se muestra en con una línea negra. $\eta = 60$, $\chi = 1.25$, $J = 0.8$. (b) Régimen amortiguado, $\eta^2/\chi = 1.8 \times 10^2$. La información se propaga en el sistema pero es atenuada antes de que la información percole el sistema. El sistema pierde cohesión y coherencia durante el giro. $\eta = 15$, $\chi = 1.25$, $J = 0.8$. (c) Régimen subamortiguado $\eta^2/\chi = 7.2 \times 10^{-2}$. La señal se propaga sin atenuación a través de todo el sistema, el cual realiza un giro colectivo manteniendo su forma y cohesión. $\eta = 0.3$, $\chi = 1.25$, $J = 0.8$. (d,e,f) Coseno de las velocidades individuales con respecto de la dirección de movimiento original para los casos mostrados en (a), (b), (c). La partícula que inicia el giro se muestra con una línea roja. El recuadro en la figura (f) muestra el umbral para la determinación del rango de las partículas durante el giro. (g,h,i) Perfiles de aceleración individuales para los casos mostrados en (a,b,c). Los recuadros muestran la intensidad del pico de la aceleración como función de r_i . $N = 512$, $T = 8 \times 10^{-5}$, $\kappa_l = 6$, $v_0 = 0.1$, $dt = 0.1\sqrt{J/\chi}$. Imagen tomada de [12].

posición, $\mathbf{r}_i(t)$, y de velocidad, $\mathbf{v}_i(t)$, los cuales se actualizan a pasos de tiempo discretos Δt , de acuerdo con las ecuaciones:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + v_0 \hat{\mathbf{v}}_i(t), \quad (2.26a)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = (1 - \phi_n) \hat{\boldsymbol{\mu}}_i(t) + \phi_n \hat{\boldsymbol{\eta}}_i(t) \quad (2.26b)$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_i(t) = (1 - f_i) \frac{\langle \hat{\mathbf{v}}_j(t) \rangle_{j \in B_i}}{|\langle \hat{\mathbf{v}}_j(t) \rangle_{j \in B_i}|} + f_i \langle \hat{\mathbf{r}}_{ij}(t) \rangle_{j \in S_i} \quad (2.26c)$$

$$f_i = \begin{cases} \phi_e & \text{si } \mathbf{r}_i(t) \in C \\ 0 & \text{en el caso contrario} \end{cases} \quad (2.26d)$$

donde v_0 , de manera análoga al modelo de Vicsek, es la magnitud de la velocidad con la que se mueven los individuos, de tal forma que las interacciones en el modelo solamente modifican su dirección de movimiento pero no la magnitud de su velocidad. El símbolo ($\hat{\boldsymbol{\eta}}$) denota un vector unitario aleatorio, que representa el ruido en el sistema, cuya intensidad está controlada por el parámetro $\phi_n \in [0, 1]$.

El vector $\hat{\boldsymbol{\mu}}_i$ representa la información que cada individuo recibe del resto en el sistema según se encuentren en el bulto o en la frontera del grupo. Esta distinción se realiza por medio del coeficiente f_i de la Ec. 2.26d. El parámetro ϕ_e es el peso relativo entre la interacción de alineamiento de los individuos con sus vecinos cercanos y el sesgo hacia el interior del grupo. B_i es el conjunto de las partículas dentro de la primera capa de los vecinos de Voronoi alrededor del i -ésimo individuo, construida con las posiciones de los individuos al tiempo t , mientras que para los individuos que dentro del conjunto C , compuesto por aquellos en la envolvente convexa del grupo, el conjunto $S_i = B_i \cap C$ se compone de los vecinos cercanos que también forman parte de la frontera del grupo. En la Fig. 2.18 se muestra un ejemplo de la geometría del modelo. En todas las ecuaciones, $\langle \hat{\cdot} \rangle$, representa un vector normalizado y $\langle \dots \rangle$ un promedio sobre el subconjunto indicado en el subíndice.

Como se muestra en la Fig. 2.19a, de manera análoga al modelo de Vicsek, este modelo presenta un cambio entre estados ordenados y desordenados en función de la intensidad del ruido ϕ_n , aún en el caso $\phi_e = 0$ cuando todas las partículas en el sistema interactúan solamente con sus vecinos topológicos más cercanos, y no hay distinción entre las que se encuentran en la frontera y el bulto del grupo. Sin embargo, en este caso, aunque el grupo se encuentra en un estado ordenado, se expande continuamente disminuyendo su densidad. Esta situación no se presenta cuando $\phi_e > 0$, i.e. cuando los individuos en la frontera tienen una atracción hacia el interior del grupo (véase la Ec. 2.26c), en este caso, la extensión del grupo, R , definida como $R = r_d N^{1/3}$, donde r_d es la separación promedio entre vecinos de Voronoi y N es el número de individuos en el grupo, se mantiene estable.

En la Fig. 2.19b se muestra cómo este modelo genera grupos con una extensión bien definida, la cual sigue una ley de potencia en función del número de partículas N , de la forma $R \sim N^{0.8}$. Con el objetivo de describir el origen de esta relación, consideramos solamente el término del efecto de la frontera del grupo, ignorando el término de alineamiento entre partículas, de tal forma que reescribimos la Ec. 2.26c como

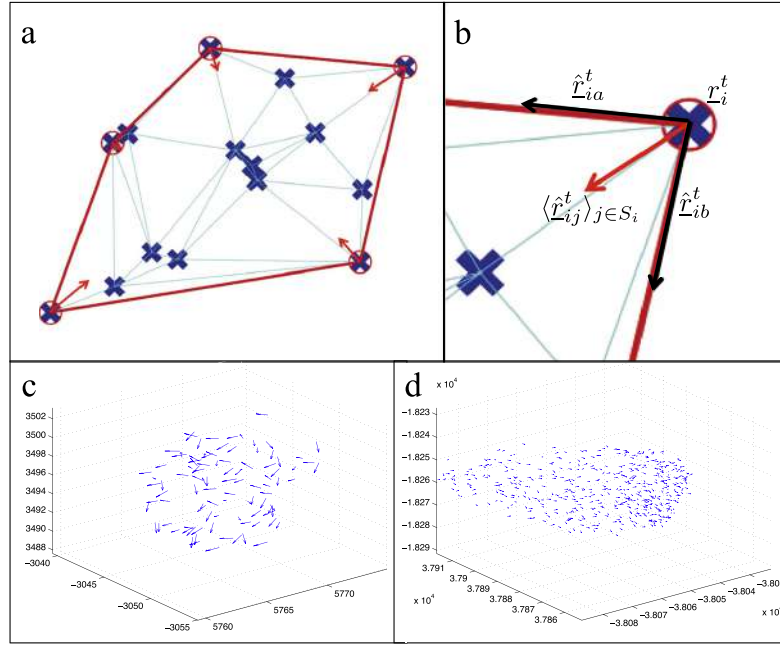


FIGURA 2.18: (a) Geometría del modelo. Se muestra un conjunto de puntos $(\mathbf{r}_i(t))$, representados como cruces en un plano bidimensional, los que forman parte de la envolvente convexa del grupo se muestran dentro de un círculo rojo (para los cuales $f_i \neq 0$ en la Ec. 2.26d). La triangulación de Delaunay se muestra con líneas azules y las líneas rojas denotan el subconjunto de puntos de la envolvente convexa del grupo. Por lo tanto, los puntos conectados por una línea azul (o roja), forman parte del conjunto B_i , y los puntos conectados solamente con líneas rojas forman parte del conjunto $S_i = B_i \cap C$, los cuales contribuyen al término de tensión superficial de la superficie (mostrado como una flecha roja para cada punto en la frontera). (b) Descripción detallada del término de superficie en la Ec. 2.26c, construido para una partícula arbitraria i . La flecha roja representa el vector $\langle \hat{\mathbf{r}}_{ij}(t) \rangle_{j \in S_i}$, el cual corresponde al promedio de los vectores unitarios en dirección de los individuos adyacentes que también forman parte de la frontera del grupo, $\mathbf{r}_{ia}(t)$ y $\mathbf{r}_{ib}(t)$ para las partículas a y b respectivamente. (c), (d) Visualizaciones del modelo con $N = 100$ y 500 partículas respectivamente. Ambas imágenes corresponden a $\phi_n = 0.45$, $\phi_e = 0.5$ y un valor del parámetro de orden de $\Psi \approx 0.75$. Imagen tomada de [40].

$$\boldsymbol{\mu}_i(t + \Delta t) = f_i \langle \hat{\mathbf{r}}_{ij}(t) \rangle_{j \in S_i}, \quad (2.27)$$

y consideramos la siguiente analogía con un gas ideal: en la ausencia de las interacciones de alineamiento, los individuos en el grupo se asemejan a moléculas en un gas, sintiendo solamente una fuerza cuando se acercan a la frontera del grupo; un comportamiento similar a una burbuja de gas ideal.

Partiendo de la ley del gas ideal, $pV \sim NT$, y sustituyendo $p \sim F/A$ para la presión, obtenemos $FV/A \sim FR \sim NT$, donde N y R son el número de individuos en el grupo y la extensión del grupo respectivamente. El análogo a la fuerza total hacia el interior del grupo, F , es proporcional al número de partículas en la frontera del grupo, N_S , y al sesgo promedio hacia el interior, $f = \langle \langle \hat{\mathbf{r}}_{ij} \rangle_{j \in S} \rangle_{i \in C}$. Dado que la velocidad de las partículas, v_0 , se mantiene constante, la temperatura T solamente está relacionada con la intensidad del ruido en el sistema, por lo tanto $T(\phi_e)$. Substituyendo en F , obtenemos la relación: $fN_S R \sim NT(\phi_e)$, la cual, como se muestra en la Fig. 2.19c, se cumple para esta simplificación del modelo, y se mantiene cuando se incluye la interacción de alineamiento entre partículas como se muestra en la Fig. 2.19b.

La introducción del comportamiento diferenciado entre los individuos en la frontera del grupo y los que se encuentran en el bulto, permite a este modelo presentar estados ordenados y cohesivos en espacio abierto por medio de un efecto similar al de la tensión superficial, el cual es un mecanismo implícito de incorporar información del estado global del sistema en el comportamiento de cada individuo. En la siguiente sección presentamos otro modelo de movimiento colectivo en el que también se incorpora información del estado global del sistema.

2.3.6. Hybrid Projection Model

En los modelos descritos en las secciones anteriores las interacciones entre partículas se definen de manera local en la vecindad de cada una de ellas, ya sea esta definida de forma métrica por medio de un umbral de distancia (véase Fig. 3.1a) o topológica por medio de un número fijo de vecinos cercanos (véase Fig. 3.1b). El *Hybrid Projection Model* (HPM) introducido en [41] considera una posibilidad diferente.

El HPM se formula tomando como base la pregunta: “¿Qué es lo que observa un ave cuando forma parte de una bandada?”. En [41] se considera que un ave moviéndose dentro de uno de estos grupos de varios cientos o miles de individuos, al mirar hacia el exterior del grupo observaría a la mayoría del resto de los individuos del grupo solamente como siluetas, las cuales se moverían rápidamente y a una distancia tal que el seguimiento y discriminación de cada uno de los individuos por separado sería muy complicada. Por lo tanto se asume que el estímulo visual que recibe cada individuo se compone solamente de contrastes visuales, i.e. un patrón dinámico de zonas de oscuridad, las cuales corresponden al resto de los individuos, y zonas brillantes que corresponden al espacio entre individuos. Un ave dentro de una bandada muy densa vería al resto de los individuos como un conjunto de siluetas oscuras traslapadas a su alrededor, mientras que, un individuo aislado que no forma parte del grupo, solamente vería luz a su alrededor. Estos patrones de luz y sombra que cada individuo percibe debido a la organización espacial del resto de sus compañeros, le provee de información asociada al estado global del grupo, la cual se puede considerar

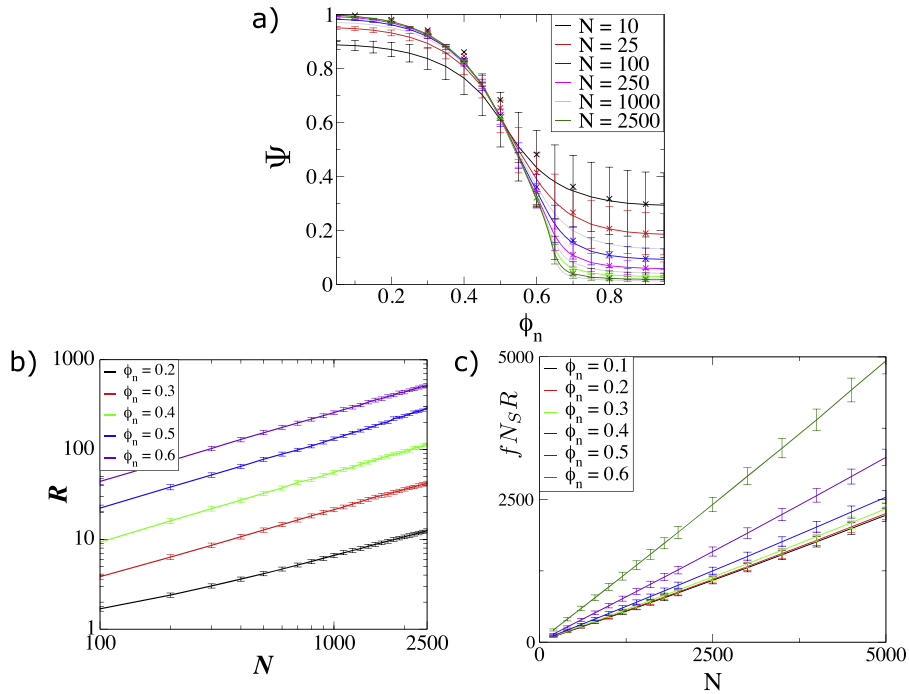


FIGURA 2.19: (a) Parámetro de orden Ψ en función de la intensidad del ruido ϕ_n para distintos números de partículas N . Se puede observar como el modelo presenta una transición orden-desorden en función del ruido en el sistema. (b) Extensión espacial del grupo R en función del número de partículas N para distintos valores de la intensidad del ruido ϕ_n . Cada punto corresponde a un promedio sobre 4×10^4 pasos de simulación. $\phi_e = 0.5$ para todas las curvas. (c) Para sistemas sin término de alineamiento entre partículas, el producto del número de partículas en la frontera N_S , el sesgo hacia el interior del grupo f y la extensión espacial R , escala linealmente con el número de partículas en el sistema N , lo cual sustenta que este estado es análogo a un gas ideal, y muestra que el origen de la relación de ley de potencia es el sesgo introducido por las partículas en la frontera del grupo. Imagen adaptada de [40].

como una proyección de baja dimensión de los $6N$ grados de libertad de un grupo de N individuos moviéndose en un espacio tridimensional.

Este modelo considera dos fuentes de información para cada individuo: (i) la orientación de sus vecinos topológicos más cercanos y (ii) un patrón de zonas oscuras y brillantes que representan la distribución espacial del resto de los individuos en el grupo desde su propio punto de vista. En [41] se conjetura que las aves, resultado de su autoorganización en bandadas, además de realizar movimiento colectivo, se organizan espacialmente de manera óptima en grupos suficientemente dispersos que les permiten recibir información de distintas regiones del sistema, y por lo tanto del estado global del grupo. Dicha organización espacial óptima, les permite a los miembros del grupo identificar el ataque de un depredador, o al menos, observar la respuesta de individuos en una región distante del sistema a una perturbación externa y generar una respuesta colectiva. A diferencia de un grupo denso, en donde obtendrían poca o nula información de perturbaciones externas, lo que haría más difícil responder a ataques de depredadores.

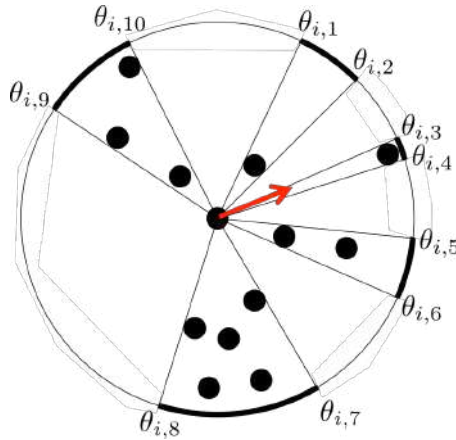


FIGURA 2.20: Esquema de la construcción de la proyección de un grupo de partículas bidimensional, desde el punto de vista del i -ésimo individuo, el cual se encuentra en el centro del grupo. Los segmentos de arcos mostrados con líneas gruesas en la figura, representan a las regiones angulares donde uno o más individuos del grupo bloquean la línea de visión del i -ésimo individuo en el centro del grupo, los ángulos $\theta_{i,j}$ mostrados en la figura corresponden a las fronteras de las regiones oscuras, las cuales en este caso constan de $M_i = 10$. La suma de vectores unitarios apuntando a cada uno de los ángulos $\theta_{i,j}$ resultan en el vector δ_i , el cual se muestra como una flecha roja, y corresponde a la información del estado global del sistema que forma parte de la ecuación de movimiento de cada individuo. Imagen tomada de [41].

Para construir la proyección del grupo que cada individuo observa en el mismo, primero identificamos las regiones angulares en las que la línea de visión de un individuo hacia el infinito intersecta a uno o más miembros del grupo. Estas regiones corresponden a las zonas oscuras que hemos mencionado anteriormente, las cuales están separadas por regiones claras en las que la línea de visión del individuo no intersecta a ningún otro miembro del grupo. En el caso bidimensional, las fronteras entre las zonas oscuras y claras, vistas desde el i -ésimo individuo, definen el conjunto de ángulos θ_{ij} , medidos desde un eje de referencia arbitrario, donde el índice j corresponde a cada una de las M_i

fronteras entre las zonas oscuras y claras (véase la Fig. 2.20). El conjunto de ángulos θ_{ij} intenta representar la capacidad de detección de siluetas de las aves y, como se realiza en el HPM, se puede considerar como una entrada sensorial de los individuos capaz de regular su comportamiento.

Formalmente, el HPM está compuesto por N individuos $\{1, 2, \dots, N\}$, representados como partículas isotrópicas de tamaño $b = 1$, caracterizadas por sus vectores de posición, \mathbf{r}_i , y de velocidad \mathbf{v}_i . De forma análoga al modelo de Vicsek, las partículas en el modelo HPM son partículas autopropulsadas que se mueven con velocidad constante v_0 , dentro de una celda de simulación de tamaño L con condiciones periódicas de frontera.

La posición y velocidad de todas las partículas en el sistema se actualiza de forma simultánea a cada paso de tiempo discreto Δt de acuerdo con las ecuaciones:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + v_0 \hat{\mathbf{v}}_i(t), \quad (2.28a)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \phi_p \boldsymbol{\delta}_i(t) + \phi_a \widehat{\mathbf{V}}_i(t) + \phi_n \boldsymbol{\eta}_i(t), \quad (2.28b)$$

donde el símbolo, $(\hat{\cdot})$, denota un vector normalizado y $\boldsymbol{\eta}$ es un vector aleatorio unitario que representa el ruido en el sistema.

El vector $\mathbf{V}_i(t)$ representa la información local que recibe cada partícula y corresponde a la velocidad promedio de sus primeros k vecinos topológicos, la cual está dada por:

$$\mathbf{V}_i(t) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \mathbf{v}_j, \quad (2.29)$$

mientras que el vector $\boldsymbol{\delta}_i$ representa la información que recibe cada partícula del estado global del sistema el cual está dado por:

$$\boldsymbol{\delta}_i = \frac{1}{M_i} \sum_{j=1}^{M_i} (\cos(\theta_{ij}), \sin(\theta_{ij})), \quad (2.30)$$

donde los ángulos θ_{ij} corresponden a las M_i fronteras entre zonas oscuras y claras que percibe el i -ésimo individuo de la proyección del resto en el sistema (véase la Fig. 2.20).

Los términos ϕ_p, ϕ_a, ϕ_n son los pesos de la información global del sistema, la información local y el ruido, respectivamente, los cuales no se consideran como independientes sino que deben de satisfacer la relación

$$\phi_p + \phi_a + \phi_n = 1. \quad (2.31)$$

En [41] exploran el comportamiento del sistema mediante simulaciones numéricas del modelo para distintas combinaciones de los parámetros $\{\phi_p, \phi_a\}$, determinado el valor de ϕ_n mediante la Ec. 2.31.

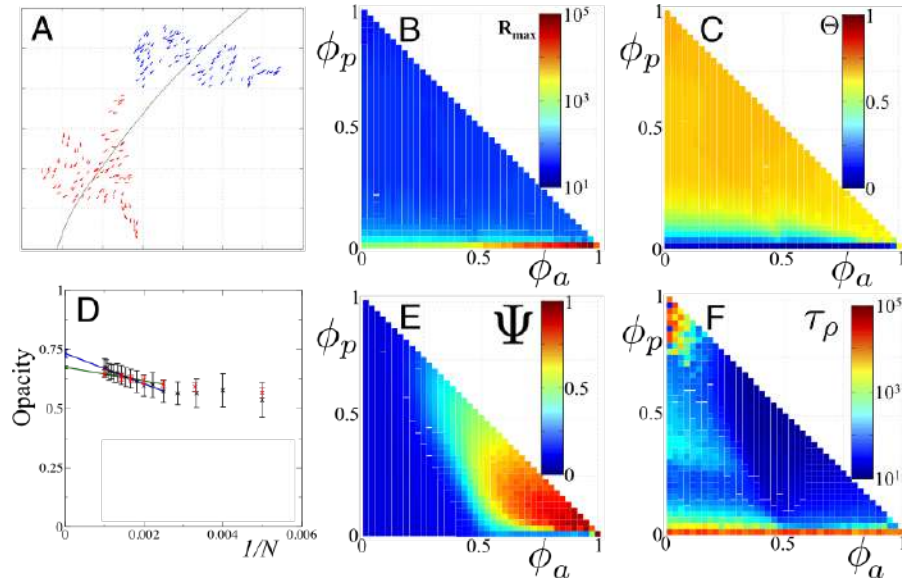


FIGURA 2.21: Resultados de las simulaciones numéricas del HPM en función de la respuesta de las partículas a la proyección del grupo ϕ_p y la intensidad del alineamiento con sus primeros vecinos topológicos más cercanos ϕ_a . Cada punto en las figuras B,C,D,E y F representa un par de valores de los parámetros $\{\phi_a, \phi_p\}$ y corresponde al valor promedio sobre 4×10^5 pasos de tiempo para $N = 100$ partículas. (A) Visualización de dos instantes consecutivos de una simulación (azul primero y luego rojo) con $\phi_p = 0.75$ y $\phi_a = 0.1$. La línea sólida representa el movimiento del centro de masa del sistema. (B) Distancia máxima entre partículas, R_{\max} , en unidades del diámetro de las partículas, se puede observar como el grupo no se fragmenta a menos que $\phi_p = 0$. (C) Opacidad promedio Θ . (D) Opacidad de grupos con distintos números de partículas N con $\phi_p = 0.03$ y $\phi_a = 0.8$ promediados sobre 50,000 iteraciones. Los puntos negros corresponden a sistemas bidimensionales y los rojos a sistemas tridimensionales. (E) Parámetro de orden Ψ . (F) Tiempo de autocorrelación de la densidad del grupo, τ_ρ en unidades de pasos de tiempo de simulación. La esquina superior izquierda representa estados aglomerados que corresponden a sistemas no físicos. Imagen tomada de [41].

Como se muestra en las Fig. 2.21A y B, el modelo es capaz de mostrar estados ordenados y cohesivos en espacio abierto, y este solamente se fragmenta cuando $\phi_p = 0$, i.e. cuando la proyección del resto de las partículas en el grupo no forma parte de la información que recibe cada partícula y estas solamente interactúan con sus primeros vecinos topológicos, lo cual se refleja en valores altos de la distancia máxima entre partículas, R_{\max} . De manera análoga al modelo de Vicsek, el HPM también presenta una transición orden-desorden, en este caso en función del peso de la interacción de las partículas con sus vecinos cercanos ϕ_a (véase la Fig. 2.21E) el cual, debido a la dependencia entre los pesos de las interacciones en el sistema expresada por la Ec. 2.31, es equivalente a una transición en función de la intensidad de ruido en el sistema al mantener fijo el valor de ϕ_p , ya que al incrementarse ϕ_a disminuye el ruido en el sistema.

Otro aspecto que se resalta en [41], es la emergencia de lo que denominan una opacidad marginal (véanse las Fig. 2.21C y D) con un valor $\Theta \sim 0.65$. Este mismo valor se observa en grupos con distinto número de partículas N y los mismos valores de los parámetros ϕ_a y ϕ_p , lo cual indica que esta opacidad marginal puede mantenerse sin que los individuos en el grupo modifiquen su comportamiento o incluso estén informados del tamaño del grupo. Así mismo, la emergencia de esta opacidad marginal puede interpretarse como un efecto de la autoorganización espacial de los individuos en el grupo, por medio de la cual los individuos obtienen la información óptima del estado global del sistema y les permite mostrar estados ordenados y sin fragmentarse en espacio abierto.

Finalmente, en la Fig. 2.21F se muestra el tiempo de autocorrelación de la densidad del sistema, τ_p . Los valores altos observados alrededor de $\phi_p = 0$ muestran que la respuesta del grupo es muy lenta en la ausencia de la información del estado global del sistema por medio de la proyección del grupo. El tiempo de autocorrelación disminuye al incrementar la influencia de la proyección, debido a que la proyección del grupo opera como una interacción global que genera una respuesta dinámica, lo cual es consistente con los transitorios rápidos observados en grupos reales.

Este modelo es un ejemplo de cómo la información del estado global del sistema, por medio de la proyección del resto de los individuos en el grupo, permite observar estados ordenados y cohesivos así como una respuesta colectiva en espacio abierto, manteniendo las interacciones de alineamiento solamente con los primeros vecinos topológicos de cada partícula. Situación que contrasta con el *Behavioural Rules Model* (véase la Sección 2.3.3) en donde es necesario que el alcance de interacción sea del orden del tamaño del sistema para poder observar estados ordenados en espacio abierto.

En el siguiente capítulo consideramos una extensión del modelo de Vicsek en la que se incluye una pequeña fracción de interacciones de alineamiento no locales, las cuales permiten observar estados ordenados en espacio abierto y retrasar la expansión del sistema.

Capítulo 3

Modelo de movimiento colectivo con interacciones de corto y largo alcance

El trabajo previo realizado en el área, tanto experimental como teórico, ha generado avances en la descripción del movimiento colectivo de conjuntos de partículas interactuantes (o individuos en el caso de grupos animales). Sin embargo, la descripción de estos sistemas aún no es completa, ya que la mayor parte de los modelos consideran condiciones de frontera periódicas, las cuales no reflejan lo que se observa en sistemas reales. En estos modelos la condición de fronteras periódicas es necesaria para que el sistema muestre estados ordenados, ya que, como se muestra en la sección 2.3.2, en el caso del modelo de Vicsek, al eliminar las condiciones de frontera periódicas, permitiendo a las partículas moverse sin restricciones en espacio abierto, el sistema no es capaz de organizarse en un grupo ordenado partiendo de condiciones iniciales aleatorias, o como en el caso del Behavioural Rules Model descrito en la sección 2.3.4, se requiere que el radio de interacción sea del orden del tamaño inicial del sistema para poder observar estados ordenados.

Se han propuesto distintos modelos para describir movimiento colectivo en espacio abierto, en los que se consideran interacciones atractivas explícitas entre partículas o con el centro de masa del sistema, o comportamientos diferenciados dependiendo de la posición espacial de las partículas dentro del grupo [52, 29, 21], las cuales permiten al sistema mantenerse cohesivo en espacio abierto, o como en el modelo introducido en [41], se incluye información del estado global del sistema de forma implícita, la cual también permite observar estados ordenados en espacio abierto.

Con el objetivo de investigar otros posibles mecanismos además de los ya mencionados, hemos desarrollado una variación del modelo de Vicsek [56] y del *Inertial Spin Model* [12], ambos basados en interacciones solamente de alineamiento, en donde, además de las interacciones de corto alcance de los modelos originales, se incluyen interacciones de largo alcance. La inclusión de una pequeña fracción de estas interacciones de largo alcance, permiten al sistema alcanzar estados ordenados en espacio abierto partiendo de condiciones iniciales aleatorias.

3.1. Descripción del modelo

El modelo consiste de N partículas autopropulsadas $\{1, 2, \dots, N\}$ puntuales, caracterizadas por su posición \mathbf{r}_i y su velocidad \mathbf{v}_i , cuya magnitud $|\mathbf{v}_i(t)| = v_0$ es la misma para todas las partículas del sistema a todo tiempo t , de tal forma que las interacciones entre partículas solamente modifican su dirección de movimiento θ_i . Las partículas se mueven en *espacio abierto*, lo que significa que su movimiento no está restringido por ningún tipo de frontera.

3.1.1. Interacciones entre partículas

Resultado del estudio del comportamiento de distintos sistemas [14, 4, 8, 55], se ha mostrado que las interacciones entre partículas pueden presentarse de forma métrica, en donde cada una interactúa con todas los demás dentro de cierto alcance de interacción (Fig. 3.1a), o de forma topológica, en donde cada partícula interactúa con un número fijo de sus vecinos más cercanos sin importar la distancia relativa entre ellos (Fig. 3.1b). A las partículas dentro del alcance de interacción en el caso métrico, o a los primeros vecinos en el caso topológico, los denominamos vecinos de corto alcance y conforman a la vecindad de interacción de corto alcance de cada partícula en el sistema. Cabe hacer notar que en el caso topológico, las partículas en la vecindad de corto alcance pueden corresponder a partículas que se encuentran distantes espacialmente. Consideramos como vecinos de largo alcance a todas las partículas que no pertenecen a la vecindad de corto alcance, i.e. las que se encuentran a distancias mayores que el alcance de interacción en el caso métrico, o a las que no son los primeros vecinos en el caso topológico. La introducción de interacciones de largo alcance, de manera análoga al *Hybrid Projection Model* (véase la Sec. 2.3.6), parte de suponer que cada individuo, además de interactuar con sus vecinos más cercanos, es capaz de percibir diferentes regiones del grupo, ya sean lejanas o no, y modificar su dirección de movimiento de acuerdo a esta información. Es esta percepción del movimiento del grupo lo que intentamos capturar con la red de interacción de largo alcance introducida en el modelo.

Definimos la vecindad $U_i(t)$, como el conjunto de vecinos de corto alcance de la i -ésima partícula al tiempo t . En el caso de interacciones de corto alcance métricas, $U_i(t)$ consiste de todas las partículas dentro de la vecindad de radio r_0 alrededor de \mathbf{r}_i , mientras que en el caso de interacciones de corto alcance topológicas, $U_i(t)$ consiste de los primeros κ_l vecinos más cercanos de la i -ésima partícula al tiempo t . Esta no es la única forma de definir a los vecinos topológicos de cada partícula, como se ha hecho en otros trabajos [25, 52], es posible definirlos como los vecinos de Voronoi de cada partícula, sin embargo, elegimos no hacerlo de esta manera para evitar calcular la descomposición de Voronoi a cada paso de tiempo.

La diferencia entre interacciones de corto alcance métricas o topológicas es relevante bajo contracciones y expansiones del sistema. En el caso métrico el número de partículas dentro de la vecindad de corto alcance, $U_i(t)$, se modifica con la densidad local cuando el sistema se expande o contrae, lo que induce un acoplamiento entre densidad y orden, mientras que en el caso topológico el número de interacciones de corto alcance es el mismo independientemente de la expansión o contracción del sistema. Consideramos estas dos maneras de definir la vecindad de interacción de corto alcance debido a que ambas han sido tratadas en la literatura.

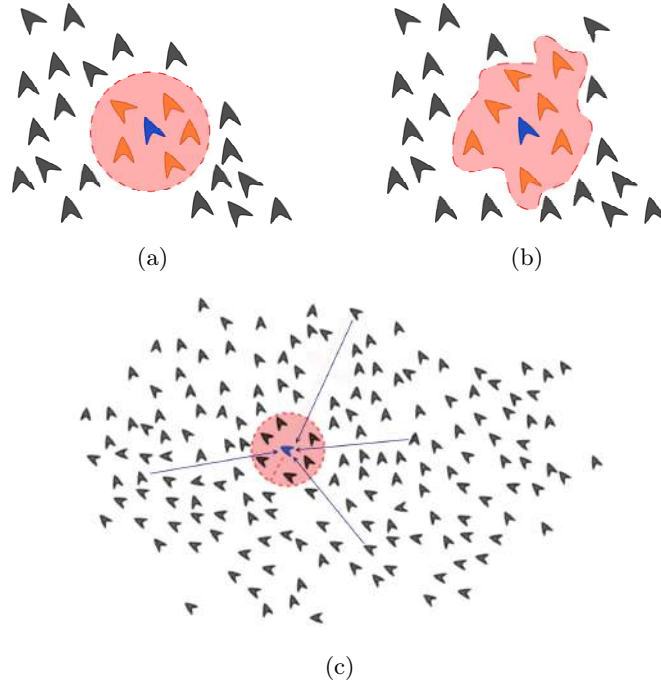


FIGURA 3.1: Las interacciones de corto alcance pueden definirse de forma (a) métrica, donde cada partícula interactúa con todas las demás dentro de cierta distancia r_0 , o (b) topológica donde cada partícula interactúa con sus primeros κ_l vecinos, independientemente de la distancia relativa entre ellos. Las regiones coloreadas en rojo en la figura representan la vecindad $U_i(t)$ de corto alcance. (c) Además de las interacciones de corto alcance, cada partícula interactúa con un cierto número de vecinos de largo alcance (representados con flechas en la figura).

Dado que no contamos con información adicional sobre la topología de una posible red de interacción de largo alcance entre partículas, y partiendo del supuesto de que no hay un conjunto de individuos privilegiados o que funcionen como líderes dentro del grupo, optamos por definir las interacciones de largo alcance de cada partícula por medio de una red de interacción aleatoria de Erdős-Renyi, caracterizada, en el límite $N \rightarrow \infty$, por una distribución de grado de Poisson de la forma:

$$P(\mu_i) = e^{-\kappa} \frac{\kappa^{\mu_i}}{\mu_i!}, \quad (3.1)$$

donde el parámetro κ representa la conectividad promedio de la red y μ_i es el grado de cada nodo en la red, el cual identificamos como el número de interacciones de largo alcance por partícula, y obtenemos de la distribución a cada paso de tiempo durante la simulación.

Una vez que se ha determinado el número de interacciones de largo alcance para cada partícula, μ_i , seleccionamos con probabilidad uniforme a las partículas que conformarán al conjunto de vecinos de largo alcance, $L_i(t)$, de aquellas que no pertenecen a $U_i(t)$. También sería posible definir una red de interacción a $t = 0$ y mantenerla fija durante la simulación del sistema, sin embargo, en este caso no se tomarían en cuenta la movilidad

de las partículas y la distinción entre vecinos de corto y largo alcance. Cabe notar que para el caso $\kappa = 0$ sólo existen interacciones de corto alcance en el sistema.

3.1.2. Dinámica del sistema

Definimos las señales de corto y largo alcance que recibe la partícula p_i al tiempo t , $\mathbf{V}_i(t)$, $\mathbf{\Upsilon}_i(t)$ como

$$\mathbf{V}_i(t) = \frac{1}{k_i} \sum_{p_j \in U_i} \mathbf{v}_j(t), \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{\Upsilon}_i(t) = \frac{1}{\mu_i} \sum_{p_j \in L_i} \mathbf{v}_j(t), \quad (3.2b)$$

donde k_i es el número de partículas en la vecindad de interacción de corto alcance, $U_i(t)$, y μ_i es el número de vecinos de largo alcance en $L_i(t)$, respectivamente. La evolución temporal del sistema está dada por la actualización simultánea de las posiciones y velocidades de todas las partículas de acuerdo con las reglas

$$\mathbf{s}_i(t) = \omega \mathbf{V}_i(t) + (1 - \omega) \mathbf{\Upsilon}_i(t), \quad (3.3a)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathcal{R}\{\mathbf{x}_i(t); \theta_i(t)\}(\mathbf{v}_i(t)) \quad (3.3b)$$

$$\mathbf{x}_i(t) = \frac{\mathbf{v}_i(t) \times \mathbf{s}_i(t)}{\|\mathbf{v}_i(t) \times \mathbf{s}_i(t)\|}, \quad (3.3c)$$

$$\theta_i(t + \Delta t) = \cos^{-1} \left(\frac{\mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{s}_i(t)}{v_0 \|\mathbf{s}_i(t)\|} \right) + \eta \xi_i(t), \quad (3.3d)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \Delta t, \quad (3.3e)$$

donde el vector $\mathbf{s}_i(t)$ representa la señal que recibe cada partícula de sus vecinos de corto y largo alcance. El parámetro $\omega \in [0, 1]$, es el peso relativo entre los dos tipos de interacciones y permite transitar de un sistema en el que solo se tienen interacciones de corto alcance con $\omega = 1$, a uno con solo interacciones de largo alcance con $\omega = 0$ (Ec. 3.3a). Los resultados que se presentan a continuación corresponden a $\omega = 1/2$.

El operador $\mathcal{R}\{\mathbf{x}_i; \theta_i\}(\mathbf{v}_i)$ en la Ec. 3.3b, representa la alineación de la dirección de movimiento de las partículas con la señal que recibe de sus vecinos de corto y largo alcance, mediante la rotación del vector de velocidad \mathbf{v}_i en el plano generado por éste y el vector \mathbf{s}_i , un ángulo θ_i alrededor del vector ortonormal a dicho plano, \mathbf{x}_i (Ec. 3.3c). θ_i es el ángulo entre los vectores \mathbf{v}_i y \mathbf{s}_i , al que se le añade la variable $\xi_i(t)$. Una variable aleatoria uniforme en el intervalo $[-\pi, \pi]$ que representa el ruido en el sistema, del cual, el parámetro $\eta \in [0, 1]$ representa su intensidad (Ec. 3.3d).

3.2. Resultados y caracterización del sistema

Realizamos simulaciones numéricas del modelo con interacciones de corto alcance métricas y topológicas para distintos valores de la conectividad promedio de largo alcance

κ ; manteniendo fijas la intensidad del ruido η y la densidad inicial del sistema ρ_0 con valores que corresponden a la fase ordenada del modelo de Vicsek dentro de condiciones de frontera periódicas (véase la Fig. 3.2), los parámetros utilizados en las simulaciones se listan en la Tabla A.3 del apéndice. Las simulaciones se realizaron partiendo de condiciones iniciales aleatorias, i.e. con orientaciones aleatorias para la velocidad y posiciones iniciales aleatorias dentro de una caja de tamaño $L_0 = \sqrt[3]{N/\rho_0}$.

Determinamos el orden en el sistema con el parámetro Ψ , definido en la Ec. 2.3.1. Este parámetro es comúnmente utilizado para caracterizar la transición orden-desorden en modelos de movimiento colectivo [56, 55, 1, 25]. La Fig. 3.2 muestra el parámetro de orden como función de la densidad ρ manteniendo fija la intensidad del ruido η para el modelo de Vicsek en 3D dentro de condiciones de frontera periódicas. Sin embargo, cuando las fronteras son eliminadas permitiendo a las partículas moverse libremente en el espacio, el sistema no presenta estados ordenados globales para cualquier valor de la densidad.

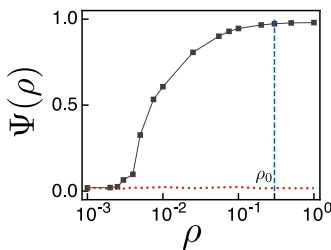


FIGURA 3.2: Parámetro de orden Ψ como función de la densidad ρ para el modelo de Vicsek en 3D con condiciones de frontera periódicas (curva negra) y en espacio abierto (curva roja punteada). Nótese la ausencia de estados ordenados para el caso en espacio abierto. $\rho_0 = 0.3$ es la densidad inicial utilizada para generar las trayectorias mostradas en la Fig. 3.3, este valor corresponde a la fase ordenada del modelo de Vicsek.

Como se puede observar en las trayectorias de las partículas mostradas en la Fig. 3.3, el modelo pasa de un estado desordenado cuando $\kappa = 0$, i.e. cuando las partículas interactúan solamente con su vecindad de corto alcance, (véase la Fig. 3.3a), aún para parámetros iniciales en la fase ordenada del modelo de Vicsek (véase la Fig. 3.2), a estados ordenados en los que el sistema presenta movimiento colectivo (véanse las Fig. 3.3b y 3.3c). El sistema pasa de un estado ordenado a uno desordenado en función de κ , tanto para el caso con interacciones de corto alcance métricas como topológicas, este cambio se muestra en la Fig. 3.3g.

Los valores de κ necesarios para observar estados ordenados son relativamente bajos, del orden de $\kappa \approx 0.01$ para el caso topológico y $\kappa \approx 0.1$ para el caso métrico. El sistema también presenta un cambio de estados ordenados a desordenados en función de la intensidad del ruido η (ver Fig. 3.3h y Fig. 3.3i); sin embargo, dado que el objetivo principal es el de caracterizar el efecto de las interacciones de largo alcance en la dinámica del sistema, se mantiene fijo el valor de la intensidad de ruido en $\eta = 0.15$ para todas las simulaciones, el cual corresponde a la fase ordenada del modelo con condiciones periódicas de frontera.

Es importante resaltar que sólo se requiere una pequeña fracción de interacciones de largo alcance por partícula para que el sistema presente estados ordenados y se mantenga

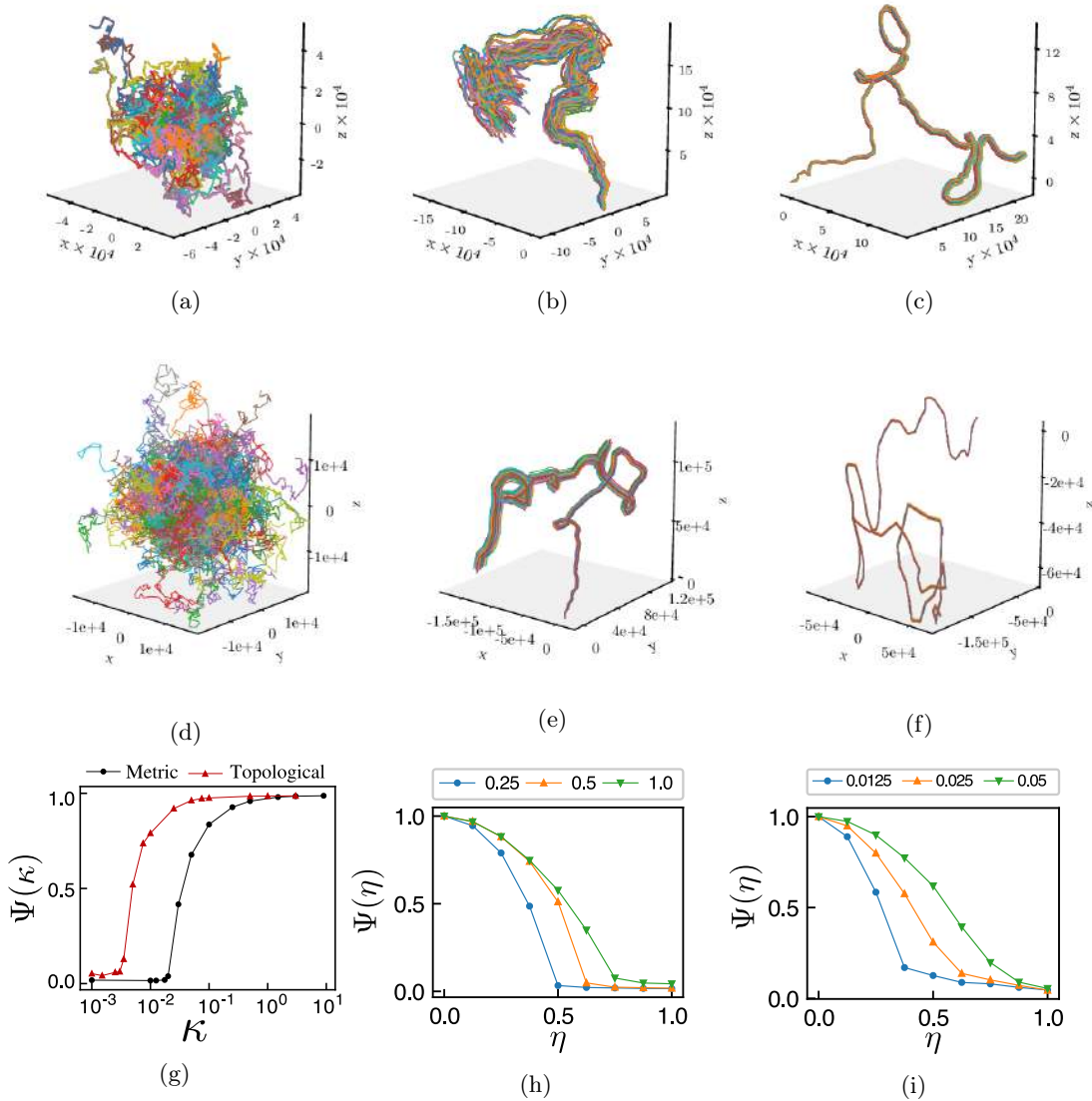


FIGURA 3.3: Trayectorias típicas de un sistema de $N = 512$ partículas después de $t_\infty = 10^6$ pasos de tiempo, para distintos valores de κ manteniendo fija la intensidad del ruido en $\eta = 0.15$ y la densidad inicial del sistema $\rho_0 = 0.3$. Las figuras (a,b,c) corresponden a interacciones de corto alcance topológicas y las figuras (d,e,f) a métricas. (a,d) $\kappa = 0$, el sistema no alcanza un estado ordenado aún para parámetros en la fase ordenada del modelo de Vicsek para ambos tipos de interacciones de corto alcance. (b) $\kappa = 0.01$, (e) $\kappa = 0.1$, el sistema presenta movimiento colectivo y las partículas se organizan en un grupo localizado espacialmente. (c) $\kappa = 0.1$ (f) $\kappa = 15$, la expansión del sistema se reduce al incrementar la conectividad media de largo alcance. (g) Ψ en función de la conectividad de largo alcance κ para sistemas en espacio abierto con interacciones de corto alcance métricas (curva negra con círculos) y topológicas (curva roja con triángulos). En ambos casos la aparición de estados ordenados ocurre para valores relativamente bajos de κ . (h) Ψ en función de la intensidad de ruido η para distintos valores de κ e interacciones de corto alcance métricas. (i) Ψ en función de la intensidad de ruido η para distintos valores de κ e interacciones de corto alcance topológicas. En ambos casos el sistema muestra una transición orden-desorden en función de la intensidad del ruido. La lista completa de los parámetros utilizados en las simulaciones se muestra en las Tabla A.3.

cohesionado por tiempos largos. Por otro lado, en las Fig. 3.3e y Fig. 3.3b se puede observar que el sistema se expande en el tiempo. Caracterizamos dicha expansión con la distancia promedio de las partículas al centro de masa, $\langle R(t) \rangle_\kappa$, dado por:

$$\langle R(t) \rangle_\kappa = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_{cm}(t)| \right\rangle_\kappa \quad (3.4)$$

donde $\mathbf{r}_{cm}(t) = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{r}_i(t)$ es la posición del centro de masa al tiempo t , y $\langle \cdot \rangle_\kappa$ representa un promedio de ensemble sobre distintas condiciones iniciales para el mismo valor de la conectividad promedio de largo alcance κ .

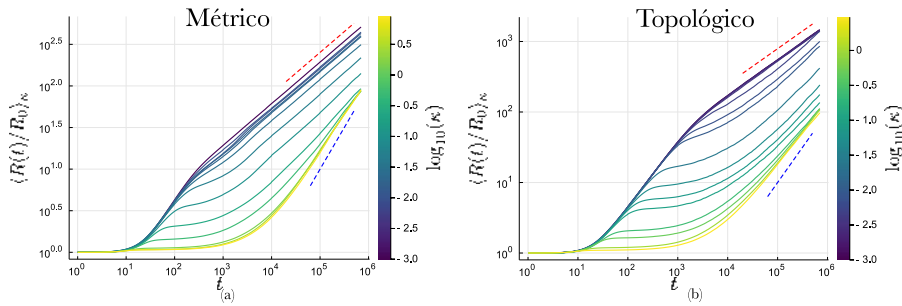


FIGURA 3.4: Expansión del sistema con respecto a la distancia promedio inicial de las partículas al centro de masa, $R_0 = R(t = 0)$, para distintos valores de la conectividad promedio de largo alcance κ . El panel (a) corresponde a interacciones de corto alcance métricas y el (b) a interacciones de corto alcance topológicas. Las líneas rojas punteadas corresponden a pendiente 1/2 y las azules a pendiente 1. La inclusión de interacciones de largo alcance no eliminan la expansión del sistema, pero si la reducen y retrasan significativamente al incrementarse la conectividad promedio de largo alcance κ . Las simulaciones se realizaron con sistemas con $N = 4096$, $\eta = 0.15$ y densidad inicial $\rho_0 = 0.3$.

Como se muestra en la Fig. 3.4, la introducción de interacciones de largo alcance no elimina la expansión del sistema, pero si la disminuyen y retrasan significativamente al incrementarse la conectividad promedio de largo alcance κ . La expansión del sistema pasa de mostrar un comportamiento $R(t) \propto t^{1/2}$, para valores bajos de κ , a un comportamiento lineal, $R(t) \propto t$ al incrementarse κ . Sin embargo, a pesar de tener un comportamiento lineal, la expansión con respecto al tamaño inicial del sistema $R_0 = R(t = 0)$, es de alrededor un orden de magnitud menor que el observado para valores $\kappa \approx 0$, en donde se observa una expansión de $\approx 10^3 R_0$, comparado con $\approx 10^2 R_0$ para los valores más altos de κ considerados.

Por otro lado, consideramos el desplazamiento cuadrático medio de las partículas en el sistema de referencia del centro de masa del sistema, $\langle \Delta r^2(t) \rangle_\kappa$, dado por la expresión:

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle_\kappa = \left\langle \frac{1}{T-t} \frac{1}{N} \sum_{t_0=0}^{T-t-1} \sum_i \|\mathbf{r}'_i(t_0+t) - \mathbf{r}'_i(t_0)\|^2 \right\rangle_\kappa, \quad (3.5)$$

donde T es el total de iteraciones de las simulaciones numéricas del modelo, y $\mathbf{r}'_i(t) = \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_{cm}(t)$ es la posición de las partículas en el sistema del centro de masa, cuya

posición está dada por $\mathbf{r}_{cm}(t) = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{r}_i(t)$. Las figuras Fig. 3.5a y Fig. 3.5b muestran que $\langle \Delta r^2(t) \rangle_\kappa$ presenta difusión anómala para ambos tipos de interacciones de corto alcance, i.e. $\langle \Delta r^2(t) \rangle_\kappa = D(\kappa)t^{\alpha(\kappa)}$. Como se muestra en las Fig. 3.5c y Fig. 3.5d, el coeficiente de difusión $D(\kappa)$, disminuye varios órdenes de magnitud al incrementar κ , mientras que el exponente de difusión $\alpha(\kappa)$ pasa de un comportamiento difusivo con $\alpha \sim 1$ para valores bajos de κ a superdifusivo con $\alpha \sim 1.9$ al incrementar κ .

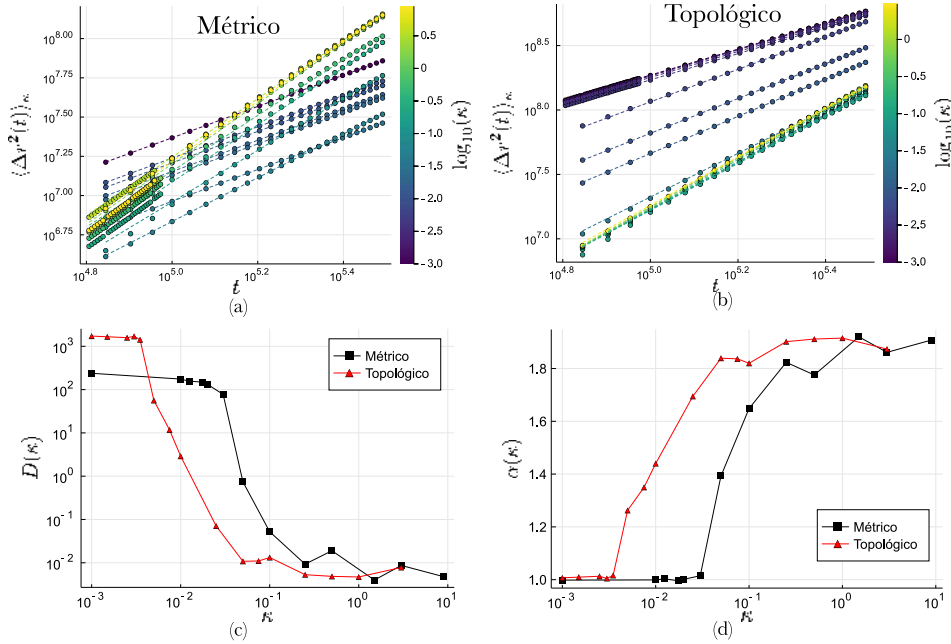


FIGURA 3.5: Desplazamiento cuadrático medio con respecto del centro de masa $\langle \Delta r^2(t) \rangle_\kappa$ para distintos valores de la conectividad de largo alcance κ . (a) Interacciones de corto alcance métricas (b) Interacciones de corto alcance topológicas. Asintóticamente, $\langle \Delta r^2(t) \rangle_\kappa = D(\kappa)t^{\alpha(\kappa)}$, las líneas rojas punteadas corresponden a $\alpha = 1$ y las azules a $\alpha = 2$. (c) $D(\kappa)$ y $\alpha(\kappa)$. Al incrementarse κ , el coeficiente de difusión disminuye en varios órdenes de magnitud, mientras que se pasa de un comportamiento difusivo con $\alpha \sim 1$ a superdifusivo con $\alpha \sim 1.8$. A pesar de que se incrementa el exponente de difusión la reducción de $D(\kappa)$ disminuye de forma efectiva la expansión del sistema. Las simulaciones se realizaron con sistemas con $N = 4096, \eta = 0.15$ y densidad inicial $\rho_0 = 0.3$.

Estos resultados son compatibles con los obtenidos en [11], en donde, partiendo de trayectorias tridimensionales de estorninos realizando movimiento colectivo, se encuentra un comportamiento superdifusivo de los individuos con respecto del centro de masa del grupo. En dicho trabajo se reporta un exponente de difusión de $\alpha = 1.73$ y un coeficiente de difusión de $D = 0.036$, correspondiendo a valores de la conectividad de largo alcance de $\kappa = 0.25$ para el caso métrico, en donde encontramos un exponente de difusión de $\alpha = 1.72$ y un coeficiente de difusión de $D = 0.03$, y de $\kappa = 0.05$ para el caso topológico, en donde se tiene un exponente de $\alpha = 1.7911$ y un coeficiente de $D = 0.018$. Llama la atención que la inclusión de interacciones de alineamiento de largo alcance, permita obtener estos valores no triviales del exponente y coeficiente de difusión encontrados en grupos de estorninos, lo cual sugiere que este u otro mecanismo similar de interacción pueda estar presente en sistemas reales.

3.3. Extensión del inertial spin model

Con el propósito de determinar si los efectos observados en la sección anterior de las interacciones de largo alcance, son exclusivos del modelo de Vicsek con interacciones de corto y largo alcance, extendimos el *Inertial Spin Model* introducido por Cavagna *et al* en [12] incluyendo también interacciones de largo alcance en sus reglas dinámicas. Este modelo está basado originalmente en interacciones de corto alcance topológicas (definidas como los primeros κ_l vecinos de cada partícula) y, aunque estas interacciones también son de alineamiento, el mecanismo mediante el cual se genera la alineación entre partículas es muy distinto al del modelo extendido de Vicsek.

El modelo consiste de N partículas $\{1, 2, \dots, N\}$ caracterizadas por su posición \mathbf{r}_i , velocidad \mathbf{v}_i , y una variable asociada a un momento generalizado \mathbf{s}_i referida como spin, la cual está asociada a la curvatura instantánea de la trayectoria de la partícula y sirve como intermediaria de las interacciones mediante las cuales las partículas modifican su dirección de movimiento.

En este modelo, cada partícula interactúa con su vecindad topológica de corto alcance $U_i(t)$ compuesta por sus primeros κ_l vecinos más cercanos. La inclusión de interacciones de largo alcance se realiza de la misma forma descrita en la sección 3.1.1, i.e. la vecindad de largo alcance $L_i(t)$ de cada partícula se compone de κ_i partículas seleccionadas al azar que no pertenecen a $U_i(t)$.

La evolución temporal del inertial spin model extendido con interacciones de largo alcance, está basada en la del modelo original descrito en las Ecs. 2.22 y corresponde a la actualización simultánea de las posiciones, velocidades y variables de spin de todas las partículas del sistema, de acuerdo a las ecuaciones

$$\frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = \frac{1}{\chi} \mathbf{s}_i(t) \times \mathbf{v}_i(t) \quad (3.6a)$$

$$\frac{d\mathbf{s}_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t) \times \left\{ \frac{J}{v_0^2} [\mathbf{V}_i(t) + \mathbf{Y}_i(t)] - \frac{\eta}{v_0^2} \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} + \frac{\boldsymbol{\xi}_i}{v_0} \right\} \quad (3.6b)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i(t)}{dt} = \mathbf{v}_i(t), \quad (3.6c)$$

donde \mathbf{V}_i es la información de corto alcance y \mathbf{Y}_i la información de largo alcance, definidas en la Ec.(3.2) y el vector $\boldsymbol{\xi}$ que representa el ruido en el sistema se define de la misma manera que en el modelo original como se muestra en la Ec. 2.23.

Como se puede observar en la Ec. 3.6, las interacciones de corto y largo alcance se tratan de la misma forma y con la misma intensidad J , lo cual se ha hecho con el objetivo de reducir el número de parámetros en el modelo. Esta implementación puede generalizarse considerando un factor de peso entre las interacciones de corto y largo alcance, o distintas intensidades para cada una de ellas.

En su versión original, el inertial spin model puede operar en dos regímenes distintos dependiendo de los valores de los parámetros en la dinámica del sistema. En el régimen sobreamortiguado la información de orientación decae exponencialmente con la distancia

y el sistema no presenta cambios de dirección colectivos, por otro lado, en el régimen subamortiguado la información de orientación se propaga de forma lineal y el sistema realiza cambios de dirección o giros colectivos. Los detalles de las características dinámicas del modelo pueden consultarse en [12] o en la sección 2.3.4.

Se realizaron simulaciones numéricas del inertial spin model extendido partiendo de condiciones iniciales aleatorias con parámetros fijos en el régimen subamortiguado, para distintos valores de la conectividad de largo alcance κ . La caracterización del sistema se realizó de la misma forma que ha sido descrita en la sección 3.2.

Como puede observarse de las trayectorias de las partículas mostradas en la Fig. 3.6a, el sistema no alcanza un estado ordenado en espacio abierto partiendo de condiciones iniciales aleatorias en ausencia de interacciones de largo alcance, en cambio, cuando $\kappa > 0$, el sistema alcanza estados ordenados, se organiza en un grupo localizado espacialmente y muestra cambios de dirección colectivos, como se muestra en las figuras Fig. 3.6b y Fig. 3.6c. Cabe mencionar que los resultados mostrados en [12] corresponden al análisis de la dinámica del modelo partiendo de un estado ordenado y no de condiciones iniciales aleatorias, evitando la discusión de los mecanismos con los cuales el sistema puede alcanzar dichos estados ordenados.

Este modelo también presenta una transición orden-desorden en función de la conectividad de largo alcance κ , mostrada en la Fig. 3.6d, donde se puede observar que la fase ordenada corresponde a valores de κ aún menores que los obtenidos en el modelo de Vicsek con interacciones de largo alcance. Por otro lado, la evolución temporal de $\langle R(t)/R_0 \rangle_\kappa$ (Fig.3.6e) muestra que la expansión del sistema se ve significativamente reducida con el incremento de κ .

Los resultados obtenidos muestran que las interacciones de corto alcance, ya sean métricas o topológicas, no son suficientes para inducir estados ordenados en espacio abierto, aún para densidades e intensidad del ruido en la fase ordenada del modelo de Vicsek dentro de condiciones de frontera periódicas, y sugieren que las interacciones de largo alcance son un mecanismo general, independiente de los detalles de la forma de la interacción de alineamiento entre partículas, para generar orden y cohesión en movimiento colectivo en espacio abierto.

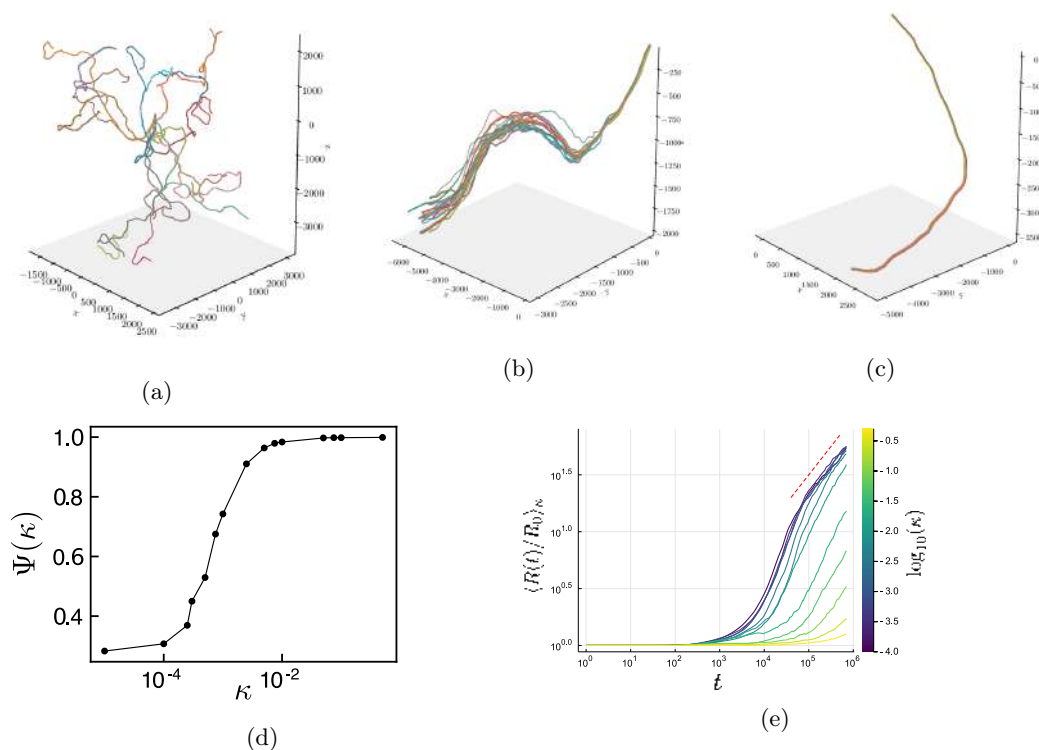


FIGURA 3.6: Trayectorias típicas del Inertial Spin Model extendido con interacciones de largo alcance en espacio abierto para distintos valores de κ : (a) $\kappa = 0$, (b) $\kappa = 0.005$, (c) $\kappa = 0.075$. Las simulaciones se realizaron con $N = 512$ y los valores de los demás parámetros se listan en la Tabla A.2. (d) Transición orden-desorden en función de κ . El sistema presenta estados ordenados para valores de κ cercanos a $\kappa = 0.001$. (e) Evolución temporal de $\langle R(t)/R_0 \rangle_{\kappa}$. Nótese que al incrementar κ las curvas se vuelven más planas, indicando una reducción en la expansión del sistema.

Capítulo 4

Autoensamblaje activo

Los procesos de auto-organización también se pueden presentar en sistemas microscópicos y moleculares. Un ejemplo es la generación de agregados de moléculas (o coloides) que se autoensamblan resultado de procesos de difusión en equilibrio, a este tipo de procesos se les denomina *autoensamblaje pasivo*. Sin embargo, es posible que este tipo de procesos se lleven a cabo en situaciones en las que las moléculas son autopropulsadas debido a un flujo constante de energía, a este tipo de procesos se les denomina *autoensamblaje activo* [34, 31, 63, 66, 58]. El vínculo entre estos procesos de autoorganización (movimiento colectivo y autoensamblaje activo) es un campo de investigación abierto, ya que no ha sido sino hasta tiempos recientes que se han realizado estudios donde se ha comenzado a explorar la relación entre ellos [60, 61, 34, 31].

En este capítulo hacemos una breve revisión del campo y presentamos un modelo de autoensamblaje activo de cadenas de coloides que muestra que, tanto las condiciones de frontera como la autopropulsión de los elementos en el sistema, influyen en la longitud de las cadenas que se forman a comparación del caso pasivo en el que el movimiento de los componentes es inducido solamente por el contacto con un baño térmico.

4.1. Autoensamblaje

De manera general, nos referimos como autoensamblaje a un proceso de organización autónoma de componentes en patrones o estructuras sin intervención humana. Los procesos de autoensamblaje se observan en sistemas de distintos tipos y escalas, como por ejemplo la generación de cristales a escala molecular o la generación de células y tejidos [6, 62]. El estudio, descripción y control de los procesos de autoensamblaje es relevante tanto desde el punto de vista académico para tener un mejor entendimiento de los mecanismos y condiciones para que este tipo de procesos se lleven a cabo, como tecnológico, ya que pueden resultar en técnicas prácticas y eficientes para la construcción de nano estructuras que podrían ser utilizadas con fines médicos [24], o para el diseño de nuevos materiales inteligentes reconfigurables, entre otros [6, 26].

El término autoensamblaje aún no se ha formalizado completamente y ha sido utilizado en la literatura para referirse a procesos de muy distintos tipos. Por ahora consideraremos autoensamblaje a procesos reversibles que involucran un conjunto de componentes mínimos (que inicialmente se encuentran en un estado desordenado o que corresponden a distintas partes de una estructura desordenada), y que pueden ser controlados por el diseño de los componentes y las interacciones entre ellos.

Como ya hemos mencionado en la introducción de este capítulo, es posible distinguir dos tipos principales de autoensamblaje: pasivo y activo. El autoensamblaje pasivo involucra sistemas que se encuentran en un equilibrio global o local y las estructuras ordenadas que se observan se forman por efectos termodinámicos, la acción de fuerzas o la inyección de energía externa, como por ejemplo en forma de agitación del medio o la interacción con un baño térmico, pero una vez que se han formado las estructuras, estas permanecen estables [6, 38]. El estudio de procesos de autoensamblaje pasivo se ha desarrollado principalmente en el campo de la química [26, 62, 64].

Por otro lado, en el caso del autoensamblaje activo o dinámico, el sistema se encuentra fuera de equilibrio termodinámico, lo cual se refleja en la autopropulsión de los componentes y su movimiento dirigido y que les permite mostrar un comportamiento individual análogo al de las partículas autopropulsadas de los modelos de movimiento colectivo, por ejemplo en el modelo de Vicsek.

Algunos ejemplos de procesos de autoensamblaje activos son: las células biológicas o la formación de patrones de grupos de animales [26]. En este tipo de procesos, las estructuras o patrones que se forman no permanecen en una forma estática al paso del tiempo sino que pueden modificar su forma o incluso los componentes que los conforman. Un ejemplo es el de los llamados “cristales vivientes” observados en sistemas de partículas Janus, en los cuales, los agregados que se forman cambian de forma, tamaño e incluso intercambian partículas entre ellos [36, 5]. Otro ejemplo son los grupos de estorninos que modifican su forma constantemente y se adaptan a estímulos externos, por ejemplo el ataque de un depredador. En particular, nos referiremos a procesos de autoensamblaje activo a sistemas compuestos por partículas o estructuras autopropulsadas que interactúan por medio de potenciales atractivos o repulsivos en función de su distancia y orientación relativa.

4.2. Modelos de autoensamblaje

Estudios recientes [60, 61, 31, 34, 35] han mostrado que las interacciones de volumen excluido entre partículas y su geometría son relevantes para la emergencia de distintos tipos de comportamiento colectivo en sistemas de coloides autopropulsados. Cuando se consideran partículas rígidas, estas pueden bloquearse mutuamente impidiendo su movimiento, y por lo tanto la suposición de velocidad constante, utilizada comúnmente en los modelos clásicos de movimiento colectivo con partículas puntuales [55, 18, 25, 65], no permite describir adecuadamente el comportamiento del sistema [35]. Por lo tanto, es más adecuado considerar una fuerza de autopropulsión constante actuando en cada una de las moléculas rígidas y ajustar la magnitud y dirección del vector de velocidad de acuerdo a las interacciones de cada partícula con las demás en el sistema.

Los elementos constituyentes de un modelo de autoensamblaje activo corresponden a partículas Brownianas activas (PBA), las cuales son una generalización de las partículas Brownianas que, adicionalmente al movimiento inducido por un baño térmico, considera una fuerza de autopropulsión que actúa sobre cada una de ellas. Una vez que se ha definido a los componentes de un sistema en partículas como PBA, las interacciones entre ellas se definen por medio de potenciales que pueden depender de la distancia o la orientación relativa entre ellas. A continuación realizamos una breve descripción del modelo de PBA y sus propiedades principales.

4.2.1. Partículas Brownianas

Los componentes elementales en los modelos de autoensamblaje son las partículas Brownianas (activas o pasivas) o alguna generalización de ellas. En primer lugar hacemos una revisión de las propiedades y características de las partículas Brownianas con el objetivo de poder identificar de mejor manera las diferencias entre el caso activo y pasivo.

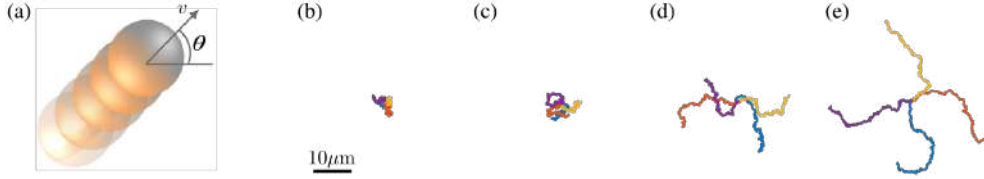


FIGURA 4.1: Partículas Brownianas activas en espacio bidimensional. (a) Una partícula está caracterizada por su vector de posición \mathbf{r} , de velocidad \mathbf{v} y orientación θ . Ejemplos de trayectorias de partículas Brownianas pasivas con (b) $v = 0\mu\text{ms}^{-1}$ y activas con distintas velocidades de autopropulsión (c) $v = 1\mu\text{ms}^{-1}$, (d) $v = 2\mu\text{ms}^{-1}$ (e) $v = 3\mu\text{ms}^{-1}$. Las partículas se trasladan a mayores distancias antes de cambiar de dirección al aumentar su velocidad de autopropulsión. Imagen adaptada de [5].

Comenzamos por considerar una partícula Browniana pasiva de radio R , masa m y momento de inercia I la cual se mueve libremente en un medio homogéneo bidimensional, i.e. en un medio sin fronteras físicas, en contacto con un baño térmico a temperatura T . En este caso, las ecuaciones de movimiento para la posición $\mathbf{r} = (x, y)$ y la orientación θ de la partícula (véase la Fig. 4.1a) están dadas por las ecuaciones de Langevin desacopladas:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\gamma_T \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \sqrt{\frac{2\gamma_T}{\beta}} \boldsymbol{\xi}(t) \quad (4.1a)$$

$$I \frac{d^2 \theta}{dt^2} = -\gamma_R \frac{d\theta}{dt} + \sqrt{\frac{2\gamma_R}{\beta}} \xi_\theta(t) \quad (4.1b)$$

donde $\beta = 1/k_B T$, γ_T, γ_R son los coeficientes de fricción traslacional y rotacional respectivamente y $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y)$, y ξ_θ representan las fuerzas estocásticas sobre la partícula debido a su contacto con el baño térmico, las cuales se modelan con números aleatorios Gaussianos con $\langle \xi_i \rangle = 0$ y $\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle = \delta(t - t')$ donde $i = \{x, y, \theta\}$.

El movimiento de una partícula Browniana pasiva es puramente difusivo con coeficiente de difusión traslacional

$$D_T = \frac{k_B T}{6\pi\eta R} = \frac{k_B T}{\gamma_T}, \quad (4.2)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta del baño térmico y η es la viscosidad del fluido. Así mismo, la partícula también presenta difusión rotacional con un tiempo característico τ_R dado por el inverso del coeficiente de difusión rotacional de la partícula, el cual está relacionado con el coeficiente de difusión traslacional por medio de la relación de Stokes-Einstein, i.e.

$$D_R = \tau_R^{-1} = \frac{3D_T}{\sigma^2} = \frac{k_B T}{8\pi\eta R^3} = \frac{k_B T}{\gamma_R}, \quad (4.3)$$

donde $\sigma = 2R$ es el diámetro de la partícula.

Usualmente se considera que las partículas Brownianas se encuentran en un medio con número de Reynolds bajo [45] en el que los efectos inerciales son despreciables debido a la alta viscosidad del medio, y se opta por realizar una descripción sobreamortiguada del movimiento de las partículas. En este caso, las ecuaciones de movimiento de una partícula Browniana pasiva están dadas por:

$$\dot{x} = \sqrt{2D_T}\xi_x \quad (4.4a)$$

$$\dot{y} = \sqrt{2D_T}\xi_y \quad (4.4b)$$

$$\dot{\theta} = \sqrt{2D_R}\xi_\theta \quad (4.4c)$$

En general, el término “Partícula Browniana Activa” se refiere a partículas Brownianas que realizan movimiento dirigido, el cual puede estar asociado a la transformación de un reservorio de energía interna, en este caso las ecuaciones de movimiento para una PBA con velocidad v están dadas por:

$$\dot{x} = v \cos \theta + \sqrt{2D_T}\xi_x \quad (4.5a)$$

$$\dot{y} = v \sin \theta + \sqrt{2D_T}\xi_y \quad (4.5b)$$

$$\dot{\theta} = \sqrt{2D_R}\xi_\theta \quad (4.5c)$$

En este caso las ecuaciones de movimiento para la posición están acopladas por medio de la dirección de la partícula. En las Figs. 4.1b-d, se muestran ejemplos de trayectorias típicas de PBA para distintos valores de la velocidad v . Se puede observar que al incrementar v se obtienen trayectorias con movimiento dirigido a tiempos cortos, sin embargo, a tiempos largos la orientación y dirección de movimiento de la partícula se aleatoriza debido a la difusión rotacional.

La trayectoria promedio de una partícula Browniana pasiva con condiciones iniciales a $t = 0$, $x(0) = 0$, $y(0) = 0$, $\theta(0) = 0$ se anula por simetría, i.e. $\langle x(t) \rangle = \langle y(t) \rangle = 0$, donde $\langle \cdot \rangle$ representa promedio de ensemble, mientras que en el caso de una partícula Browniana activa corresponde a una línea recta en la dirección de su orientación original (que en el caso que estamos considerando corresponde a la dirección del eje x) dada por:

$$\langle x(t) \rangle = \frac{v}{D_R} [1 - \exp(-D_R t)] = v\tau_R \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_R}\right) \right] \quad (4.6)$$

mientras que $\langle y(t) \rangle = 0$ por simetría. Esto implica que, en promedio, una PBA tiene una longitud de persistencia finita, L , en la dirección de su orientación inicial dada por:

$$L = \frac{v}{D_R} = v\tau_R, \quad (4.7)$$

antes de que su orientación se modifique debido a la difusión rotacional.

La importancia relativa entre movimiento dirigido y difusivo puede caracterizarse por medio del número de Peclet:

$$\text{Pe} \propto \frac{v}{\sqrt{D_T D_R}}, \quad (4.8)$$

donde se utiliza el símbolo de proporcionalidad debido a que no hay un consenso en la literatura en el valor del prefactor. Si $\text{Pe} < 1$, los procesos de difusión dominan el movimiento de la partícula, mientras que en el caso contrario si $\text{Pe} \gg 1$, el movimiento dirigido de la partícula prevalece. El número de Peclet es utilizado con frecuencia en la literatura para determinar la movilidad de las PBA con relación a las propiedades difusivas del medio en el que se mueven.

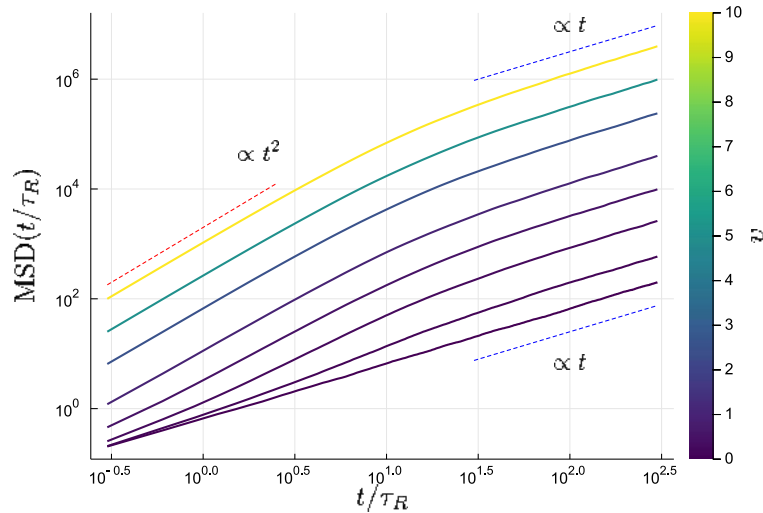


FIGURA 4.2: Desplazamiento cuadrático medio (MSD) calculado numéricamente para partículas Brownianas pasivas y activas con distintas velocidades de autopropulsión. Las partículas Brownianas pasivas ($v = 0$) solamente muestran un comportamiento difusivo, mientras que las partículas Brownianas activas muestran un comportamiento balístico a tiempos cortos con respecto al tiempo característico τ_R , i.e. $t/\tau_R \approx 1$, para después pasar a un comportamiento difusivo para tiempos largos, $t/\tau_R \gg 1$.

Por último, como se muestra en la Fig. 4.2, comparamos el desplazamiento cuadrático medio ($\text{MSD}(t)$) de partículas Brownianas pasivas y activas. En el caso de partículas pasivas en dos dimensiones el MSD está dado por la fórmula de Ornstein-Uhlenbeck [54]:

$$\text{MSD}(t) = 4D_T t + \frac{4k_B T}{m} \tau_m^2 \left[e^{t/\tau_m} - 1 \right] \quad (4.9)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, y $\tau_m = m/\gamma$ es el tiempo de relajación de la partícula, donde m es su masa. Por lo tanto, para tiempos $t \gg \tau_m$ el $\text{MSD}(t)$ de una partícula Browniana pasiva es lineal con el tiempo y su pendiente corresponde al coeficiente de difusión traslacional D_T . Por otro lado, en el caso de una partícula Browniana activa el $\text{MSD}(t)$ está dado por [28]:

$$\text{MSD}(t) = [4D_T + 2v^2\tau_R] t + 2v^2\tau_R^2 \left[e^{-t/\tau_R} - 1 \right]. \quad (4.10)$$

En el caso activo el tiempo característico de la partícula τ_R permite identificar distintos comportamientos en el $\text{MSD}(t)$. A escalas de tiempo $t \approx \tau_R$, se tiene un comportamiento superdifusivo con $\text{MSD}(t) = 4D_T t + 2v^2 t^2$ y para tiempos largos, $t \gg \tau_R$, se observa de nuevo un comportamiento lineal de la forma $\text{MSD}(t) = [4D_T + 2v^2\tau_R] t$, i.e. las PBA muestran un comportamiento difusivo para tiempos largos, debido a que la difusión rotacional aleatoriza la dirección de las partículas y realizan una caminata aleatoria cuya longitud de paso corresponde a la longitud de persistencia L , definida en la Ec. 4.2.1. Lo cual resulta en un coeficiente de difusión efectivo: $D_{\text{eff}} = D_T + \frac{1}{2}v^2\tau_R$.

4.2.2. Sistemas de PBA interactuantes

Las partículas Brownianas son los componentes elementales de los modelos de autoensamblaje y, como hemos visto en la sección anterior, su comportamiento individual en el caso en que son partículas libres interactuando solamente con un baño térmico a temperatura T está descrito por su desplazamiento cuadrático medio. Sin embargo la presencia de otras partículas en el sistema resulta en interacciones mutuas entre ellas que, además de modificar la dinámica individual de cada partícula, también pueden llevar a la emergencia de comportamientos colectivos como agregaciones, movimiento colectivo, entre otros, en función de la densidad del sistema, la geometría de las partículas y su actividad.

Si consideramos ahora un sistema de N partículas Brownianas activas $\{\mathbf{r}_i, \hat{\mathbf{p}}_i\}_{i=1}^N$, caracterizadas por su vector de posición, $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$, y de orientación, $\hat{\mathbf{p}}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$. La forma más general de expresar la interacción entre cualquier par de ellas es por medio de un potencial de interacción $U_{ij} = U_{ij}(r_{ij}, \theta_i, \theta_j)$, donde los índices i, j representan distintas partículas en el sistema y $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ es la distancia relativa entre ellas. En este caso, las ecuaciones de movimiento en el régimen sobreamortiguado para cada una de las partículas en el sistema están dadas por

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{1}{\gamma_T} (F_{sp}\hat{\mathbf{p}}_i + \mathbf{F}(\{r_{ij}\})) + \sqrt{2D_T}\boldsymbol{\xi}_i(t), \quad (4.11a)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \frac{1}{\gamma_R} \mathbf{T}(\{r_{ij}\}) + \sqrt{2D_R}\xi_{\theta i}(t), \quad (4.11b)$$

donde F_{sp} es la fuerza de autopropulsión, $\mathbf{F}(\{r_{ij}\})$ son las fuerzas entre pares de partículas determinadas por el potencial de interacción y $\mathbf{T}(\{r_{ij}\})$ las torcas generadas por dichas fuerzas, las cuales se calculan como

Los tipos de interacciones que usualmente se han considerado en la literatura son atractivas y repulsivas, modeladas por distintos tipos de potenciales.

$$\mathbf{F}(\{r_{ij}\}) = \sum_j \mathbf{F}_{ij} = - \sum_j \frac{\partial U_{ij}}{\partial \mathbf{r}_{ij}} \quad (4.12a)$$

$$\mathbf{T}(\{r_{ij}\}) = \sum_j \mathbf{T}_{ij} = - \sum_j \frac{\partial U_{ij}}{\partial \theta_i}. \quad (4.12b)$$

Cabe hacer notar que el potencial de interacción solamente considera interacciones por pares y puede definirse de múltiples formas para describir el sistema en particular que se esté tratando. Los tipos de interacciones que usualmente se han considerado en la literatura son atractivas y repulsivas, modeladas por distintos tipos de potenciales. Uno de los utilizados con mayor frecuencia es el potencial de Lennard-Jones, el cual está dado por la expresión:

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (4.13)$$

donde r_{ij} es la distancia relativa entre un pares de partículas, σ es el diámetro de las partículas y ϵ la intensidad del potencial. El primer término, $1/r_{ij}^{12}$, corresponde a la parte repulsiva del potencial el cual describe la exclusión de Pauli a corto alcance, mientras que el término, $1/r_{ij}^6$, describe la atracción entre partículas a largo alcance, la cual decae con r_{ij} . El potencial de Lennard-Jones (véase la Fig. 4.3) tiene un mínimo para la distancia entre partículas $r_{ij} = r_m = 2^{1/6}\sigma$, en donde tiene el valor $U(r_m) = -\epsilon$.

A continuación mostramos algunos ejemplos de trabajos previos, para después introducir un modelo de autoensamblaje activo que hemos desarrollado como parte del proyecto de investigación.

4.2.3. Sistemas con interacciones repulsivas

En un sistema de partículas Brownianas pasivas con interacciones de corto alcance repulsivas, las fases que típicamente se observan son, a densidades bajas, una suspensión en fase líquida, la cual, al incrementarse la densidad del sistema, transita a una fase ordenada cristalina [16, 32]. La situación es distinta en un sistema de PBA en el cual, al introducir cierto grado de actividad en los componentes del sistema, es posible observar un comportamiento más rico que presenta más fases además de la fluida y la cristalina de los sistemas pasivos.

En primer lugar consideramos un sistema de N PBA esféricas de diámetro σ , caracterizadas por sus vectores de posición \mathbf{r}_i y orientación \mathbf{p}_i . El movimiento de las partículas está confinado a un plano bidimensional en el que cada partícula se autopropulsa con

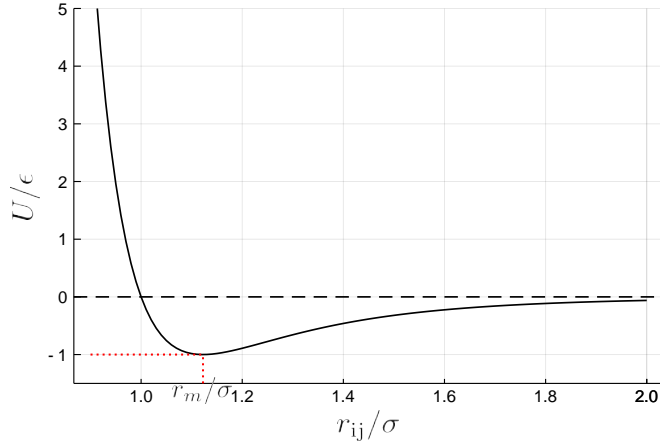


FIGURA 4.3: Potencial de interacción de Lennard-Jones, como función de la r_{ij}/σ , donde r_{ij} es la distancia entre partículas y σ su tamaño. El potencial tiene una componente repulsiva ($1/r_{ij}^{12}$) y una atractiva ($1/r_{ij}^6$), el potencial tiene un mínimo para la distancia entre partículas $r_{ij} = r_m = 2^{1/6}\sigma$, en donde $U(r_m) = -\epsilon$. Este potencial es utilizado comúnmente en simulaciones numéricas de dinámica molecular, para modelar sistemas de partículas con interacciones de volumen excluido e interacciones atractivas entre ellas.

una fuerza F_{sp} y solamente existen interacciones isotrópicas de volumen excluido entre ellas. Debido a que la interacción entre partículas es isotrópica no hay un mecanismo de alineamiento explícito ni torcas sobre las partículas, de tal forma que las ecuaciones de movimiento se reducen a

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{1}{\gamma_T} (F_{sp}\hat{\mathbf{p}}_i + \mathbf{F}(\{r_{ij}\})) + \sqrt{2D_T}\boldsymbol{\xi}_i(t), \quad (4.14a)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \sqrt{2D_R}\xi_{\theta i}(t), \quad (4.14b)$$

donde $\mathbf{F}(\{r_{ij}\})$ corresponde a las fuerzas de volumen excluido entre partículas, las cuales, como en [46, 53], pueden definirse por medio de un potencial de Weeks-Chandler-Andersen, dado por

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \epsilon \quad (4.15)$$

si $r_{ij} < 2^{1/6}\sigma$ y $U_{ij} = 0$ en el caso contrario y donde ϵ corresponde a la intensidad del potencial. Este potencial de interacción corresponde a un potencial de Lennard-Jones (véase la Ec. 4.13) trasladado, el cual no presenta estados ligados y solamente representa interacciones repulsivas entre partículas.

Otra forma de implementar las interacciones de volumen excluido se muestra en [22] donde las fuerzas entre pares de partículas \mathbf{F}_{ij} se definen directamente como

$$\mathbf{F}_{ij} = -k(\sigma - r_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (4.16)$$

si $r_{ij} < \sigma$ y $\mathbf{F}_{ij} = 0$ en el caso contrario. En ambos casos, a pesar de que la definición de la interacción entre partículas es diferente, se observa el mismo comportamiento del sistema, lo cual sugiere que los detalles de la implementación de las interacciones no son relevantes sino el que ambas correspondan a interacciones repulsivas de corto alcance.

Separación de fases inducida por movilidad

Una de las características principales de los sistemas de PBA es que presentan lo que se ha denominado como separación de fases no térmica inducida por movilidad o *athermal motility-induced phase separation*. En la cual el sistema transita de una fase homogénea a una en la que zonas de baja densidad coexisten con clusters o agregados de partículas. Esta transición, aunque similar a las transiciones de fase de sistemas en equilibrio en las que existen regiones de coexistencia, el parámetro de control de la transición no es la temperatura del sistema, sino la actividad de las partículas, usualmente representada por el número de Peclet y la fracción de empacamiento ϕ definida como el cociente entre el área ocupada por las partículas entre la de la celda de simulación de tamaño L i.e.

$$\phi = \frac{N\pi\sigma^2}{4L^2}. \quad (4.17)$$

Cabe hacer notar que la agregación de las partículas se da en ausencia de interacciones atractivas. Las únicas interacciones presentes en el sistema son las repulsivas de volumen excluido. Un fenómeno similar se observa para algunas combinaciones de parámetros en la fase ordenada del modelo de Vicsek de movimiento colectivo en fronteras periódicas, a pesar de que en este caso las interacciones entre partículas son de alineamiento y no repulsivas (véase la sección 2.3.1), en la cual agregados de partículas que se mueven en la misma dirección se encuentran rodeados de un mar de partículas desordenadas, dichos agregados también pueden presentarse en la forma de bandas que transitan en alguna de las direcciones de la celda de simulación. Lo cual sugiere que la aglomeración de las partículas es un efecto del estado de no equilibrio en el que se encuentra el sistema debido a la autopropulsión de las partículas.

En la Fig. 4.4 se compara la organización espacial de las partículas en sistemas pasivos y activos, para el mismo valor de la fracción de empacamiento ϕ . Es posible observar que la agregación de las partículas es mayor en el caso activo, en el cual se observan agregados de mayor tamaño que en el caso pasivo y, por encima de un empacamiento crítico $\phi_c \approx 0.4$ se observa una separación de fases. Los sistemas pasivos mostrados en la Fig. 4.4 corresponden a sistemas térmicos equivalentes a los activos, definido como uno en el que se observa un traslape similar entre partículas que en el caso activo para el mismo valor de la fracción de empacamiento ϕ . El traslape δ en el caso activo se obtiene haciendo un balance entre la fuerza activa F_{sp} y la repulsiva $k\delta$, con $\delta = 0.1$ para $F_{sp}/\gamma_T = 1$. El equivalente térmico (o pasivo) se obtiene asignando $k_B T = k\delta = 0.1$.

Como revisamos en la Sección 4.2.1, el MSD de una partícula Browniana activa libre está dado por

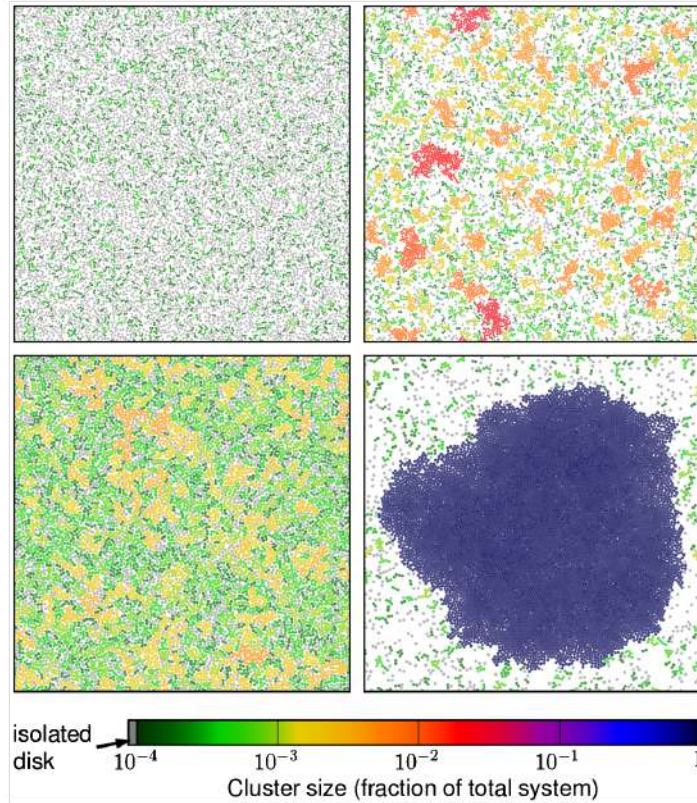


FIGURA 4.4: Visualizaciones de un sistema de $N = 10^4$ partículas Brownianas con una densidad de $\phi = 0.39$ para la fila superior y de $\phi = 0.7$ para la inferior. El tamaño de los clusters de partículas, definido por el traslape entre ellas, se indica en la barra de color. Las figuras de la columna izquierda corresponden a un sistema pasivo a temperatura $k_B T = 0.1$ y la columna derecha a sistemas de partículas Brownianas activas con velocidad de autopropulsión $F_{sp}/\gamma_T = 1$. Imagen tomada de [22]

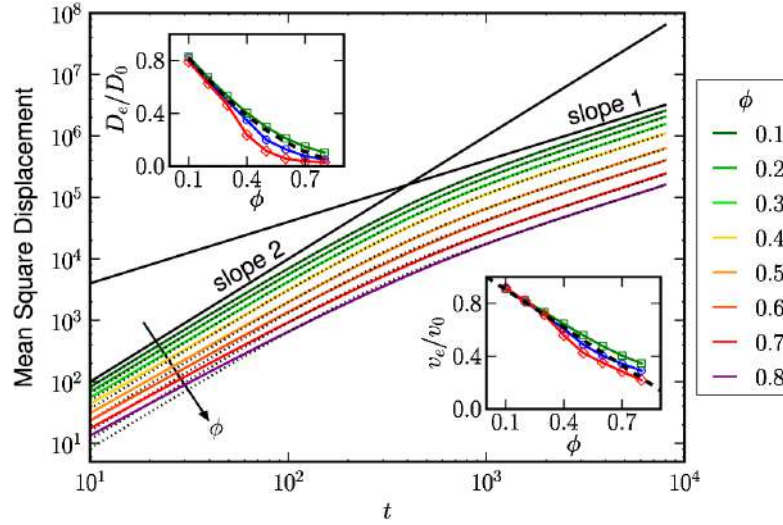


FIGURA 4.5: Desplazamiento cuadrático medio de una partícula Browniana para distintas densidades ϕ , mostrando una transición de un comportamiento balístico a difusivo. El recuadro superior muestra el coeficiente de difusión efectivo $D_e(\phi)/D_0$ y la velocidad de autopropulsión efectiva $v_e(\phi)/v_0$ como función de ϕ para velocidades de autopropulsión iniciales $F_{\text{sp}}/\gamma_T = 0.5, 1, 2$, representadas por diamantes, círculos y cuadrados respectivamente. Imagen tomada de [22]

$$\text{MSD}(t) = 4D_T t + 4D_0 \left[t + \tau_R \left(e^{-t/\tau_R} - 1 \right) \right] \quad (4.18)$$

donde $D_0 = \frac{v^2}{2D_r}$. Si, como en [22], ignoramos el ruido traslacional $\xi_i(t)$ y solamente consideramos el angular, tenemos que en este caso el MSD está dado por $\text{MSD}(t) = 4D_0 [t + \tau_R (e^{-t/\tau_R} - 1)]$. Para valores de $\phi > 0$ el MSD también puede describirse de la misma forma i.e. $\text{MSD}(t) = 4D_e [t + 1/D_R^e (e^{-tD_R^e} - 1)]$ con $D_e = \frac{v_e^2}{2D_R^e}$ y D_R^e, v_e parámetros libres dependientes de la densidad del sistema.

En la Fig. 4.5 se muestra el MSD, el coeficiente de difusión $D_e(\phi)$ y la velocidad de las partículas $v_e(\phi)$ para distintos valores de la fracción de empaquetamiento ϕ . Para $\phi < \phi_c$, la velocidad efectiva $v_e(\phi)$ presenta un buen ajuste lineal de la forma $v_e(\phi) = v_0(1 - \lambda\phi)$, con $\lambda \approx 0.9$ independientemente de v_0 . En contraste, el coeficiente de difusión rotacional es muy similar al caso de partículas libres $D_R^e \approx D_R$ y el coeficiente de difusión efectivo $D_e(\phi)$ presenta un comportamiento de la forma $D_e(\phi) \sim D_0(1 - \lambda\phi)$.

Como se muestra en la Fig. 4.5, se observa una disminución tanto del coeficiente de difusión como de la velocidad de las partículas en función de la densidad del sistema. Esta supresión de la difusión es el mecanismo responsable de la separación de fases y la formación de agregados de partículas.

Efecto de la geometría de las partículas

Hasta el momento hemos considerado partículas esféricas, sin embargo es posible extender el modelo de PBA a elementos con geometrías distintas. El procedimiento que generalmente se utiliza para considerar otro tipo de geometrías es el de discretizar a las “partículas” o coloides en subunidades esféricas, lo cual simplifica el cálculo de las interacciones entre ellos. En [61] se utiliza este procedimiento para modelar el comportamiento colectivo de coloides activos anisotrópicos de distintas geometrías, en donde se investiga cómo la geometría de los constituyentes afecta la formación de estructuras y el movimiento colectivo en sistemas de materia activa. Adicionalmente, como se realiza en [61], este tipo de modelos pueden ser útiles para modelar ciertos tipos de células o microorganismos e investigar el papel de su geometría en la evolución del comportamiento multicelular o la formación de colonias. En la Fig. 4.6 se muestran la geometría real y la efectiva utilizada para el modelo de distintos microorganismos, en todos los casos se realiza una simplificación de la forma de los microorganismos en subunidades esféricas que representan el espacio efectivo que ocupan. De forma adicional se consideran distintas simetrías en la dirección de movimiento de cada uno de los microorganismos, ya que, además de la forma, la dirección de propulsión es importante para determinar el comportamiento colectivo del sistema.

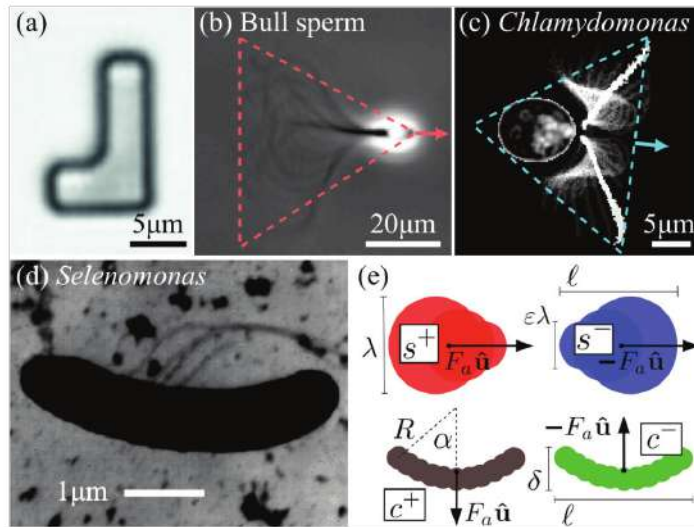


FIGURA 4.6: Geometría real y efectiva de los organismos considerados en [61] junto con su representación simplificada utilizada en el modelo. (a) Coloide autopropulsado con forma de “L”. (b) Espermatozoide de toro, el área triangular corresponde al espacio que ocupa durante el nado a escalas de tiempo mayores que el periodo de batido de $\sim 0.1s$, el cual imita un cono con propulsión en la dirección de su ápice. (c) Alga *Chlamydomonas*, en este caso el espacio que ocupa semeja un cono con propulsión en la dirección de su base. (d) Bacteria *Selenomonas bovis* con forma de media luna. (e) Aproximaciones de las geometrías de los distintos organismos en el modelo, las cuales se discretizan en subunidades esféricas. Imagen tomada de [61].

El modelo considera dos clases de geometrías, se comparan coloides activos polares convexos (s^+) con antipolares convexos (s^-) y no convexos en forma de media luna (c^+) con otros con la misma geometría pero que se mueven en la dirección contraria (c^-) (véase la Fig. 4.6e). Cada coloide se discretiza en $i = 1, \dots, n$ subunidades esféricas con diámetro

efectivo λ^i . Definiendo $\lambda_{\alpha\beta}^{ij} = (\lambda_\alpha^i + \lambda_\beta^j)/2$, el potencial total entre un par de coloides α, β está dado por

$$U_{\alpha\beta} = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j=1}^n U_{\alpha\beta}^{ij} \left(\frac{r_{\alpha\beta}^{ij}}{\lambda_{\alpha\beta}^{ij}} \right), \quad (4.19)$$

donde $\mathbf{r}_{\alpha\beta}^{ij}$ es la distancia entre centros de masa dada por $r_{\alpha\beta}^{ij} = |\mathbf{r}_{\alpha\beta} + \mathbf{e}_\alpha^i - \mathbf{e}_\beta^j|$, el vector \mathbf{e}_α^i representa la posición de la subunidad i relativa a la posición del centro de masa \mathbf{r}_α , y $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta$ es la distancia entre los centros de masa entre los coloides α, β .

El potencial repulsivo entre pares de subunidades, $U(x)$, está dado por

$$U(x) = u_0 \frac{e^{-x}}{x^2}, \quad (4.20)$$

con amplitud $u_0 > 0$. Finalmente, la interacción total del coloide α con el resto de coloides en el sistema, U_α , está dado por

$$U_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta (\alpha \neq \beta)} U_{\alpha\beta}. \quad (4.21)$$

A diferencia de los modelos anteriores, se ignora el ruido térmico considerando ecuaciones de movimiento deterministas para el vector de posición del centro de masa $\mathbf{r}_\alpha(t)$ y de orientación $\hat{\mathbf{u}}_\alpha$ de cada partícula, lo cual es aceptable para densidades medias a altas en donde las colisiones entre partículas dominan la dinámica del sistema, por lo que las ecuaciones de movimiento están dadas por

$$\frac{d\mathbf{r}_\alpha}{dt} = \frac{1}{\gamma_T} (F_{sp} \hat{\mathbf{p}}_\alpha - \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} U_\alpha), \quad (4.22a)$$

$$\frac{d\theta_\alpha}{dt} = -\frac{1}{\gamma_R} \nabla_{\theta_\alpha} U_\alpha \quad (4.22b)$$

donde F_{sp} es la fuerza de autopropulsión que actúa sobre cada coloide, y se aplica en la dirección del vector de la orientación de la partícula $\hat{\mathbf{p}}_\alpha$.

La asimetría entre la parte frontal y trasera de los coloides s^+ y s^- resulta en una transferencia de momento distinta durante una colisión para cada especie (véase la Fig. 4.7). Los coloides s^+ tienden a alinearse y su velocidad no se modifica significativamente después de una colisión, por el contrario los coloides antipolares s^- se dispersan ampliamente y reducen su velocidad. Esta diferencia resulta en comportamientos colectivos distintos. Los coloides s^+ presentan movimiento colectivo análogo al de la fase ordenada del modelo de Vicsek, en el que los coloides forman un grupo que se mueve en una dirección en común, mientras que los coloides s^- forman agregados que crecen lentamente partiendo de suspensión homogénea. La agregación de los coloides s^- es similar a la separación de fases inducida por movilidad que hemos discutido anteriormente, en el sentido en que el

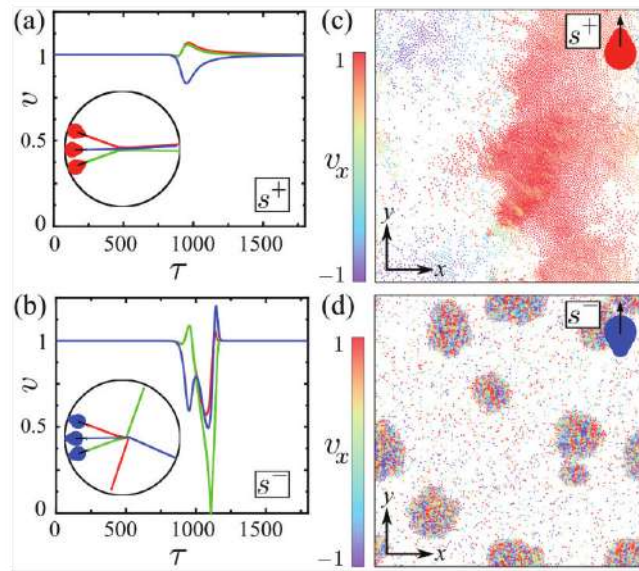


FIGURA 4.7: Cambio de momento durante una colisión y comportamiento colectivo de los coloides s^+ y s^- . (a,b) Comportamiento temporal de la velocidad v y ejemplos de trayectorias (recuadro) de tres coloides (a) s^+ y (b) s^- durante una colisión. Debido a la diferencia del cambio de la velocidad de las partículas en una colisión, los coloides s^+ forman (c) frentes ordenados de partículas que se mueven en la misma dirección o en el caso de las partículas s^- (d) forman agregados rodeados de un mar de coloides desordenados. El color de las partículas representa la componente v_x de la velocidad de las partículas. Imagen tomada de [61].

mecanismo que lo genera son las interacciones de volumen excluido y la reducción de la movilidad de los coloides en función de la densidad local.

La diferencia en el comportamiento colectivo que presenta cada una de las especies de coloides s^+ y s^- sugiere un mecanismo de separación inducida por geometría en sistemas activos que podría ser relevante para la segregación de especies en sistemas biológicos microscópicos. Para probar esta idea, en [61] realizan simulaciones de mezclas binarias con la misma proporción de coloides s^+ y s^- , las cuales muestran que las mezclas binarias se separan en regiones densas de agregados prácticamente inmóviles compuestas en su mayoría por coloides s^- , rodeadas por un mar de coloides s^+ (véanse las Figuras 4.8). Los coloides s^+ tienden a acumularse en la periferia de los agregados, un comportamiento análogo al de algunos tipos de bacterias que se acumulan en la superficie de colonias de algas. Este comportamiento, además de tener posibles implicaciones biológicas, podría ser útil para el diseño y la fabricación no supervisada de estructuras de coloides activos en capas.

Los coloides no convexos c^+ y c^- también presentan comportamientos colectivos distintos en función de su dirección de movimiento. De forma similar al caso de los coloides s^\pm , también se observa una separación en un sistema binario con la misma proporción de coloides c^+ y c^- , con la diferencia de que en este caso los coloides c^- se organizan en rotores formados por varios coloides que pueden girar en sentido horario o anti-horario, mientras que los coloides c^+ se organizan en parejas o tripletes. Las simulaciones realizadas en [61] muestran que los rotores de coloides c^- son robustos bajo fluctuaciones térmicas

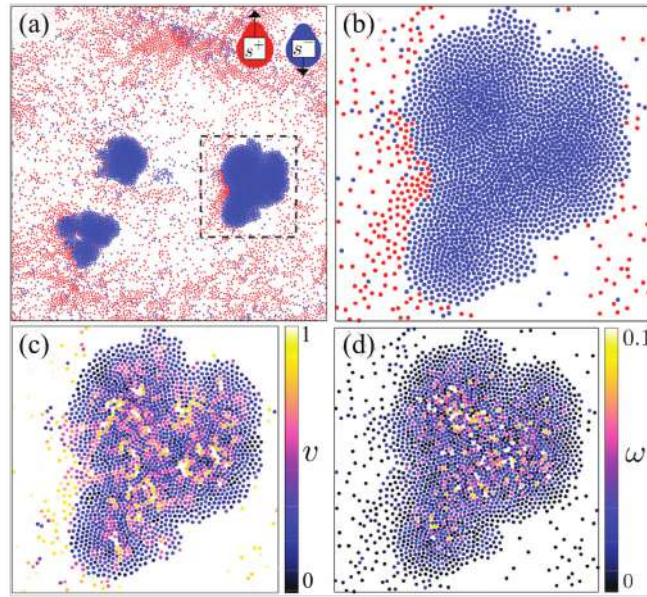


FIGURA 4.8: Separación de una mezcla binaria con la misma proporción de coloides s^+ y s^- . (a) Visualización de la posición del centro de masa de un sistema de $N = 10^4$ coloides con una densidad de $\phi = 0.05$. (b-d) Ampliación de la región dentro del recuadro con líneas punteadas en (a). El color en (c) representa la magnitud de la velocidad de los coloides v y (d) la velocidad angular $\omega = |\partial\phi/\partial\tau|$. Imagen tomada de [61].

mientras que los agregados de coloides c^- se desintegran rápidamente en la presencia de ruido térmico.

Una característica notable de este sistema es que muestra cómo la autopropulsión de los coloides y diferencias en su geometría y dirección de movimiento, resultan en comportamientos colectivos cualitativamente distintos que podrían ser explotados para el autoensamblaje de estructuras complejas, tales como rotores, partiendo de coloides que se mueven linealmente. Mas aún, hasta el momento las únicas interacciones entre coloides que hemos considerado son repulsivas o de volumen excluido, sin embargo, también puede darse el caso que existan interacciones atractivas entre ellas, como revisamos a continuación.

4.2.4. Sistemas con interacciones repulsivas y atractivas

Como hemos visto en la sección anterior, la geometría de las partículas tiene un efecto importante tanto en el tipo de estructuras que pueden observarse como en el comportamiento colectivo del sistema. Mas aún hemos visto que la inclusión de autopropulsión en un sistema solamente con interacciones repulsivas, genera comportamientos como la separación de fases inducida por movilidad en la que se observan agregados de partículas resultado de una reducción de la movilidad debido al bloqueo mutuo de las partículas al incrementarse la densidad local en el sistema.

En esta sección consideramos el modelo de coloides Brownianos activos con interacciones repulsivas y atractivas introducido en [34], con el fin de mostrar cómo la autopropulsión puede ser útil para seleccionar y promover la formación de estructuras.

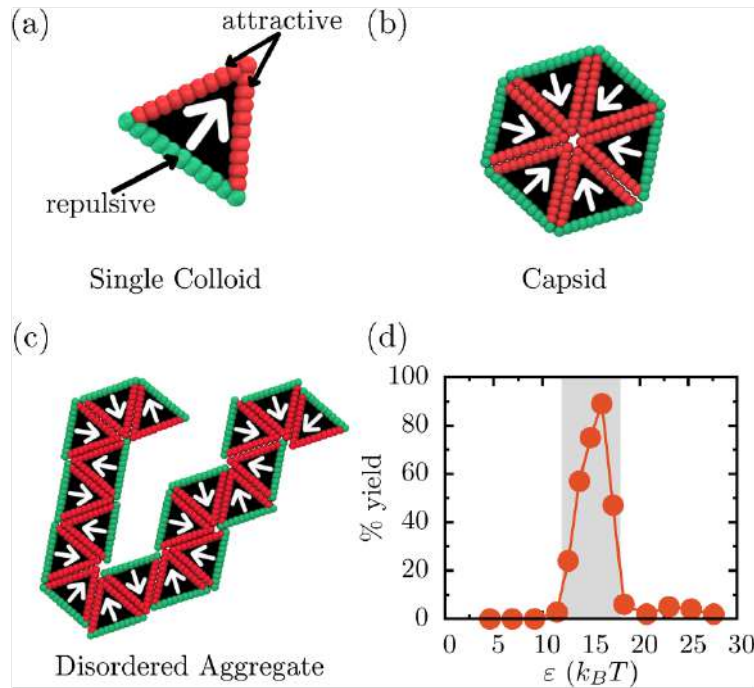


FIGURA 4.9: (a) Componentes del sistema. Cada coloide se discretiza en subunidades esféricas, las cuales no interactúan entre sí sino con las del resto de los coloides del sistema por medio de interacciones atractivas o repulsivas dependiendo de la arista a la que pertenecen, la flecha indica la dirección de autopropulsión. (b) Cápside formada por 6 de los componentes elementales en el modelo. La formación de esta estructura es la que se utiliza para evaluar el efecto de la autopropulsión en el proceso de autoensamblaje. (c) Ejemplo de agregado desordenado producido en el proceso de autoensamblaje con el que compiten las cápsides. (d) Porcentaje de producción de cápsides para el caso pasivo ($F_{sp} = 0$) en función de la energía de atracción ϵ . Imagen tomada de [34].

Los coloides que componen el sistema son triángulos equiláteros cuyas aristas, de forma similar al modelo introducido en [61], se discretizan en subunidades esféricas (véase la Fig. 4.9a.), las cuales no interactúan entre sí sino con las subunidades del resto de los coloides por medio de interacciones atractivas o repulsivas según la arista a la que pertenecen. La definición de las interacciones entre partículas, y en consecuencia entre aristas, permite la formación de cápsides compuestas por 6 coloides (véase Fig. 4.9b), las cuales compiten con otras estructuras desordenadas (véase Fig. 4.9c) y son utilizadas como “estructura objetivo” para evaluar el papel de la autopropulsión en la dinámica del sistema.

En el modelo cada coloide se discretiza en $N_T = 30$ subunidades esféricas de diámetro $\sigma_T = 0.25\sigma$, donde σ es la unidad de longitud y cada arista tiene una longitud de 2σ . La masa total del coloide es m y su movimiento está confinado a una celda bidimensional con condiciones periódicas de frontera. Así mismo, como en los modelos discutidos anteriormente, las ecuaciones de movimiento rotacional y traslacional están dadas por ecuaciones de Langevin en contacto con un baño térmico a temperatura T . La fuerza de autopropulsión F_{sp} se aplica en la dirección del vector de orientación $\hat{\mathbf{p}}$ que pasa por el centro de masa de cada coloide y es perpendicular a su arista repulsiva.

Las interacciones entre subunidades de coloides distintos están dadas por un potencial de Lennard-Jones de la forma:

$$U\left(r_{\alpha\beta}^{ij}\right) = 4\epsilon_{sk} \left[\left(\frac{\sigma_T}{r_{\alpha\beta}^{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_T}{r_{\alpha\beta}^{ij}}\right)^6 \right] \quad (4.23)$$

donde $r_{\alpha\beta}^{ij}$ es la distancia entre la subunidad α del coloide i y la subunidad β del coloide j . Los subíndices s y k etiquetan a las subunidades de los coloides en dos especies: A y B. Las subunidades A identifican a las que presentan interacciones atractivas mientras que las de tipo B solamente presentan interacciones de volumen excluido. La forma en la que se distingue entre interacciones atractivas y repulsivas entre subunidades es por medio de la distancia de corte r_c del potencial de interacción, el cual tiene el valor $r_c = 2.5\sigma_T$ para el caso de las interacciones entre partículas de tipo A, con una energía de interacción ϵ_{AA} , mientras que la distancia de corte para el resto de las interacciones (AB, y BB) tiene un valor $r_c = 2^{1/6}\sigma_T$, resultando en un potencial puramente repulsivo. La energía de interacción para las interacciones de volumen excluido se fija en $\epsilon_{AB} = \epsilon_{BB} = 1$, mientras que para el caso del potencial atractivo se exploran distintos valores.

El potencial total entre los coloides i y j resultado de la superposición de las interacciones entre subunidades U_{ij} está dado por

$$U_{ij} = \sum_{\alpha,\beta} U\left(r_{\alpha\beta}^{ij}\right). \quad (4.24)$$

Cabe mencionar que a pesar de que cada coloide está compuesto por un conjunto de subunidades, éstos se trasladan y rotan de manera rígida con respecto al centro de masa

del coloide, por lo que las ecuaciones de movimiento de la posición del centro de masa \mathbf{r}_i y la orientación del coloide θ_i están dadas por:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -\gamma_T \dot{\mathbf{r}} + F_{\text{sp}} \hat{\mathbf{p}}_i - \nabla_{\mathbf{r}_i} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sqrt{2\gamma^2 D_T} \boldsymbol{\xi}_i^T \quad (4.25a)$$

$$\dot{\theta}_i = -\frac{1}{\gamma_R} \sum_{i \neq j} \nabla_{\theta_i} U_{ij} + \sqrt{2D_R} \xi_i^R. \quad (4.25b)$$

Dada la geometría de los coloides y las estructuras objetivo hexagonales, partiendo con $N = 600$ coloides sería posible formar 100 de ellas en el caso en que todas ellas se ensamblaran perfectamente. Por lo que es posible cuantificar la eficiencia del proceso, comparando este número máximo de posibles estructuras que pueden formarse, con el número de estructuras observadas para cierto conjunto de parámetros. Con el objetivo de evaluar el papel de la autopropulsión en la formación de las cápsides o estructuras hexagonales, en [34] en primer lugar miden la producción de cápsides en sistemas pasivos a la misma temperatura pero distintos valores de la fuerza de la interacción atractiva ϵ (véase la Fig. 4.9d), mostrando que se presenta un máximo de 90% de producción de cápsides para una energía de atracción de $\epsilon \approx 16k_B T$, mientras que para energías menores los coloides no se agregan y el sistema se mantiene en una fase líquida y para energías mayores se favorece la producción de agregados desordenados.

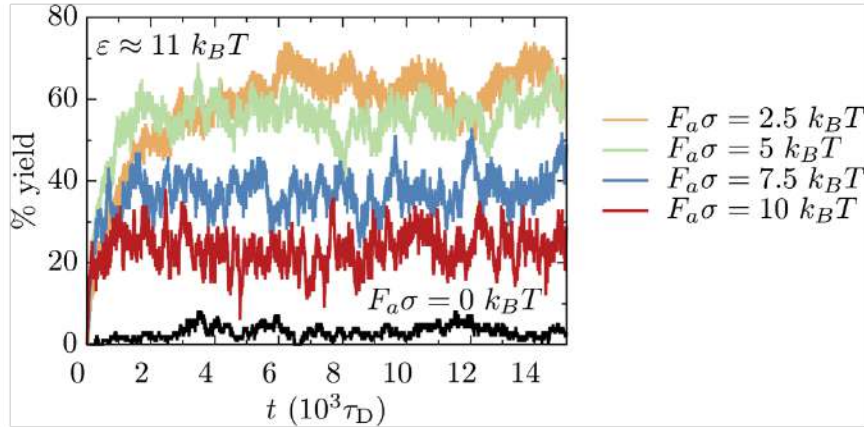


FIGURA 4.10: Porcentaje de producción de cápsides como función del tiempo para distintos valores de la fuerza de autopropulsión F_{sp} para una energía de atracción $\epsilon \approx 11k_B T$. Se observa que la inclusión de autopropulsión de los coloides incrementa dramáticamente la producción de cápsides. Imagen tomada de [34].

Para el caso activo se considera una energía de interacción atractiva de $\epsilon \approx 11k_B T$, la cual corresponde a una producción de cápsides no mayor al 5% en el caso pasivo. Como se muestra en la Fig. 4.10, la producción de cápsides se incrementa dramáticamente con la introducción de una pequeña cantidad de autopropulsión en los coloides, la cual alcanza valores cercanos al 60% para $F_{\text{sp}}\sigma = 2.5k_B T$ y $F_{\text{sp}}\sigma = 5.0k_B T$. Sin embargo, la producción de cápsides disminuye para valores más altos de la fuerza de autopropulsión

($F_{sp}\sigma > 7.5k_B T$), ya que para estos valores de F_{sp} las colisiones entre coloides libres y cápsides pueden destruir las estructuras que ya han sido formadas.

Otra manera de medir el efecto de la autopropulsión en el proceso de autoensamblaje es por medio del tiempo requerido para producir el 50 % del máximo de cápsides posibles, $\tau_{1/2}$, y compararlo con el tiempo del caso pasivo para el cual se tiene un máximo de producción, el cual denotamos por $\tau_{1/2}^*$ y corresponde a una energía de atracción de $\epsilon \approx 16k_B T$. Definimos la tasa de autoensamblaje relativa, ν_{SA} , como el cociente entre el tiempo para el caso activo y el pasivo, i.e. $\nu_{SA} = \tau_{1/2}/\tau_{1/2}^*$.

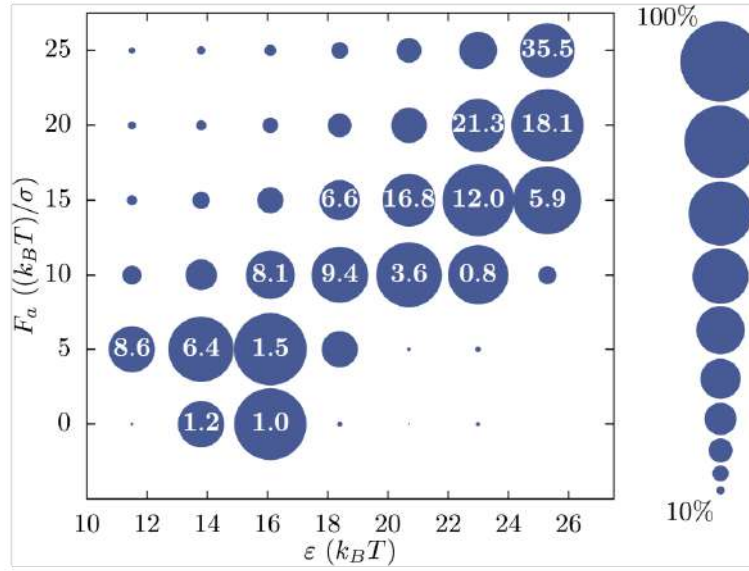


FIGURA 4.11: Porcentaje de producción de cápsides como función de la energía de atracción ϵ y la fuerza de autopropulsión F_{sp} . El número en el centro de los círculos indica el incremento relativo de la tasa de producción ν_{SA} , con respecto al caso de mejor producción pasivo para $\epsilon \approx 16k_B T$. Imagen tomada de [34].

En la Fig. 4.11 se reporta la producción de cápsides estacionaria como función de la energía de atracción ϵ y la fuerza de autopropulsión F_{sp} , en donde principalmente se puede observar que el espacio de parámetros para el cual se observa autoensamblaje de cápsides es más amplio en el caso activo que en el pasivo. Así mismo, se observa que la producción de cápsides para distintos valores de la fuerza de autopropulsión es mayor o comparable con la del caso pasivo óptimo.

Debido a la forma de las cápsides, en [34] sugieren que el mecanismo responsable de la mejoría de su autoensamblaje es meramente geométrico. Al formarse la estructura objetivo, la suma vectorial de las fuerzas de autopropulsión de los componentes se anula, estabilizándola. Así mismo, cualquier otro agregado para el cual no se cumple esta condición se encuentra sujeto a fuerzas y torques que pueden separar a los componentes, por lo que la autopropulsión actúa como un filtro selectivo que permite la estabilización de ciertas estructuras.

Si bien la autopropulsión puede promover la formación de estructuras en las que la suma de las fuerzas de sus componentes se anula, como en las cápsides que hemos considerado

hasta ahora, en la siguiente sección introducimos un modelo de polimerización de coloides activos, en donde la autopropulsión también actúa como catalizador en la formación de cadenas de coloides, las cuales no necesariamente son estáticas y sin embargo se observa un incremento en la formación y longitud de estas como función de la fuerza de autopropulsión de los componentes. Lo cual sugiere que los efectos de la autopropulsión son más generales y no se aplican solamente a ciertos tipos de agregados.

4.3. Modelo de polimerización de coloides activos

De forma análoga al modelo tratado en la sección anterior, consideramos un sistema de N coloides rígidos $\{1, 2, \dots, N\}$, caracterizados por la posición de su centro de masa \mathbf{r}_i , su velocidad \mathbf{v}_i y el vector unitario $\hat{\mathbf{p}}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$ que representa la orientación del coloide y la dirección sobre la que actúa la fuerza de autopropulsión F_{sp} . En esta descripción, la magnitud de la velocidad \mathbf{v}_i puede cambiar en el tiempo mientras que la magnitud de la fuerza de autopropulsión se mantiene constante; asimismo, puede darse el caso en que la dirección de la velocidad \mathbf{v}_i y la orientación de la partícula $\hat{\mathbf{p}}_i$ no sean paralelas. Siguiendo a las referencias [60, 61, 34] las aristas de los coloides se discretizan en M subunidades esféricas de diámetro σ_s y posiciones \mathbf{e}_i^α , donde el superíndice corresponde a la α -ésima subunidad, y el subíndice se refiere al i -ésimo coloide (véase la Fig. 4.12). Las subunidades dentro de cada coloide no interactúan entre sí manteniendo sus posiciones fijas relativas a la posición del centro de masa, sin embargo, las subunidades de diferentes coloides interactúan por medio de un potencial de Lennard-Jones de la forma

$$U(e_{ij}^{\alpha\beta}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma_s}{e_{ij}^{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_s}{e_{ij}^{\alpha\beta}} \right)^6 \right], \quad (4.26)$$

donde $e_{ij}^{\alpha\beta} = |\mathbf{e}_i^\alpha - \mathbf{e}_j^\beta|$, es la distancia relativa entre la α -ésima subunidad del i -ésimo coloide y la β -ésima subunidad del j -ésimo coloide. El potencial total de interacción U_{ij} entre la i -ésima y la j -ésima está dado por

$$U_{ij} = \sum_{\alpha, \beta} U(e_{ij}^{\alpha\beta}). \quad (4.27)$$

Consideramos una descripción *seca* del sistema, i.e. una en que las interacciones hidrodinámicas entre los coloides y el medio no se toman en cuenta. La dinámica del sistema se lleva a cabo en un plano bidimensional con condiciones de frontera periódicas y evolucionan de acuerdo a un par de ecuaciones amortiguadas de Langevin para el movimiento traslacional y rotacional de cada coloide:

$$\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t} = -\frac{1}{\gamma_t} \sum_{i \neq j} \nabla_{\mathbf{r}_i} U_{ij} + F_{\text{sp}} \hat{\mathbf{p}}_i + \sqrt{2\gamma_t^2 D \xi_i^t(t)} \quad (4.28a)$$

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial t} = -\frac{1}{\gamma_r} \sum_{i \neq j} \nabla_{\theta_i} U_{ij} + \sqrt{2D_r \xi_i^r(t)} \quad (4.28b)$$

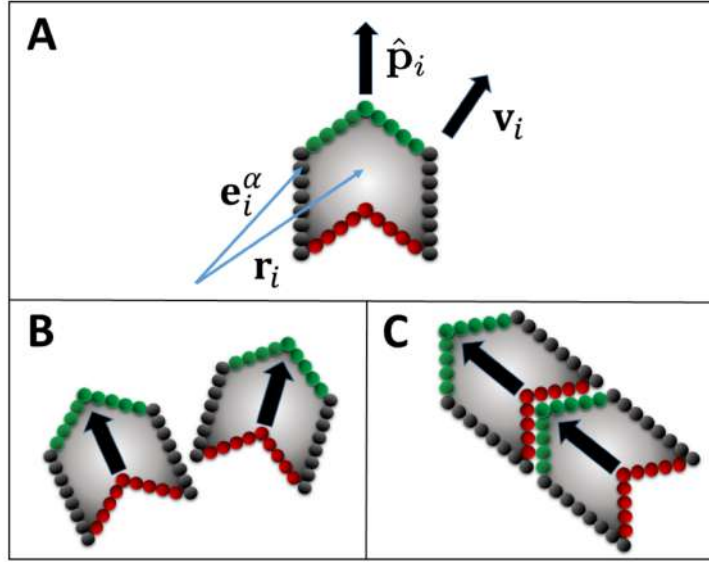


FIGURA 4.12: (A) Representación esquemática del coloide básico utilizado en las simulaciones. Las aristas del coloide se discretizan en subunidades esféricas con posiciones \mathbf{e}_i^α que ejercen fuerzas atractiva o repulsivas sobre las subunidades de otros coloides. Cada coloide se caracteriza por la posición \mathbf{r}_i de su centro de masa, su velocidad \mathbf{v}_i y orientación $\hat{\mathbf{p}}_i$. Nótese que la orientación y la velocidad no son necesariamente paralelos. La fuerza de autopropulsión siempre actúa en la dirección del vector de orientación $\hat{\mathbf{p}}_i$. Las aristas del coloide están coloreados de acuerdo a las fuerzas atractivas o repulsivas que ejercen sobre otros coloides: si dos coloides colisionan con lados del mismo color la fuerza es repulsiva como en (B), mientras que la interacción es atractiva solamente entre lados verdes y rojos como en (C).

donde γ_t y γ_r son los coeficientes de fricción traslacional y rotacional, F_{sp} es la fuerza de autopropulsión, y D y D_r son los coeficientes de difusión traslacional y rotacional. $\xi_i^t(t)$ y $\xi_i^r(t)$ son términos de ruido blanco Gaussiano para el movimiento traslacional y rotacional, los cuales satisfacen las condiciones $\langle \xi_i^t(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_i^t(t) \cdot \xi_j^t(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t')$, $\langle \xi_i^r(t) \rangle = 0$ y $\langle \xi_i^r(t) \cdot \xi_j^r(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t')$.

Las fuerzas entre coloides se obtienen por medio del gradiente del potencial de interacción $\nabla_{\mathbf{r}_i} U_{ij}$, y las torcas generadas por estas fuerzas se obtienen derivando el potencial de interacción con respecto a la dirección de movimiento del coloide θ_i , i.e. $\nabla_{\theta_i} U_{ij}$. Las ecuaciones 4.3 describen el movimiento del centro de masa (CM) y la orientación de cada coloide. Todas las subunidades que conforman un coloide se mueven y rotan de forma rígida con respecto al CM.

Las interacciones entre las subunidades de coloides distintos pueden ser atractivas o repulsivas según a que arista a la que pertenecen (véase la Fig. 4.12). El carácter atractivo o repulsivo de las interacciones se obtiene por medio de diferentes radios de corte r_c para el potencial de interacción de la ecuación 4.26. En el caso repulsivo, la distancia de corte corresponde a $r_c = 2^{1/6} \sigma_s$, mientras que para el caso atractivo corresponde a $r_c = 2.5 \sigma_s$. En ambos casos el potencial se traslada después de ser truncado, de tal forma que $U(r_c) = 0$

La geometría que hemos elegido para los coloides (véase Fig. 4.12) y la definición de las

interacciones atractivas y repulsivas entre ellos permiten una sola forma de ensamblaje. La cual, si bien es una simplificación, reduce las posibilidades de ensamblaje y permite enfocarnos en describir cómo la autopropulsión afecta la polimerización de cadenas.

4.3.1. Resultados

Realizamos simulaciones numéricas del modelo para sistemas de $N = 512$ coloides activos en dos escenarios: (i) considerando un sistema con condiciones periódicas de frontera y (ii) considerando condiciones de frontera semi periódicas. En el primer caso, los coloides se mueven dentro de una celda cuadrada de lado l en la cual las cuatro fronteras son periódicas. En el segundo caso, los coloides se mueven dentro de una celda rectangular de lados l_1 y l_2 , con $l_1 \leq l_2$. Los lados más largos son paredes reflejantes mientras que los lados más cortos son fronteras periódicas, asemejando un canal. La motivación de considerar un sistema con fronteras semi periódicas se basa en la hipótesis de que la formación de macro moléculas orgánicas relevantes para el origen de la vida pudo haber ocurrido en micro canales formados ya sea en meteoritos [43, 44, 27, 9], o en espacios minúsculos confinados de chimeneas marinas en las que las coloides son impulsadas por gradientes térmicos [7]. Por lo tanto, las simulaciones se realizaron para distintos valores de la temperatura del baño térmico T y la fuerza de autopropulsión F_{sp} . Además, para el caso del canal, consideramos distintos valores para la relación de aspecto, $R = l_1/l_2$, de la geometría del canal. Los demás parámetros utilizados en las simulaciones se reportan en la tabla A.4.

La Fig. 4.13 muestra el estado final de las simulaciones para el caso con fronteras periódicas a temperatura constante $T = 0.1$ y diferentes valores de la fuerza de autopropulsión F_{sp} . El caso $F_{sp} = 0$ corresponde al caso de autoensamblaje espontáneo, el cual es solamente provocado por ruido térmico. Como se puede observar en la Fig. 4.13a, en este caso, solamente se forman cadenas muy cortas y una gran cantidad de coloides quedan sin ligarse a ninguna otra. Al contrario, cuando se consideran valores altos para la fuerza de autopropulsión (por ejemplo $F_{sp} = 10$, Fig. 4.13c), se forman polímeros mucho más largos. Como se muestra en la Fig. 4.14, se obtienen resultados similares para el caso de fronteras semi periódicas. Cabe hacer notar que para la geometría de canal, la mayor parte de los polímeros se forman y acumulan cerca de las paredes reflejantes (véase la figura 4.14). Este resultado es inesperado ya que no existen fuerzas atractivas entre las paredes y las coloides. Un comportamiento similar ha sido reportado para diferentes sistemas de bastones [59] y esferas activas [20].

La Fig. 4.15 muestra la longitud promedio de las cadenas, $\langle L(t) \rangle$, como función del tiempo de simulación t para diferentes temperaturas, T , fuerzas de autopropulsión, F_{sp} , y relaciones de aspecto, R para el caso de la geometría de canal. La longitud L de una cadena en el sistema se define como el número de coloides que la componen, mientras que la longitud promedio $\langle L(t) \rangle$ corresponde al promedio de ensamble de la longitud promedio de las cadenas en una realización del sistema, $\overline{L(t)}$, definida como:

$$\overline{L(t)} = \frac{1}{N_p(t)} \sum_{i=1}^{N_p(t)} L_i, \quad (4.29)$$

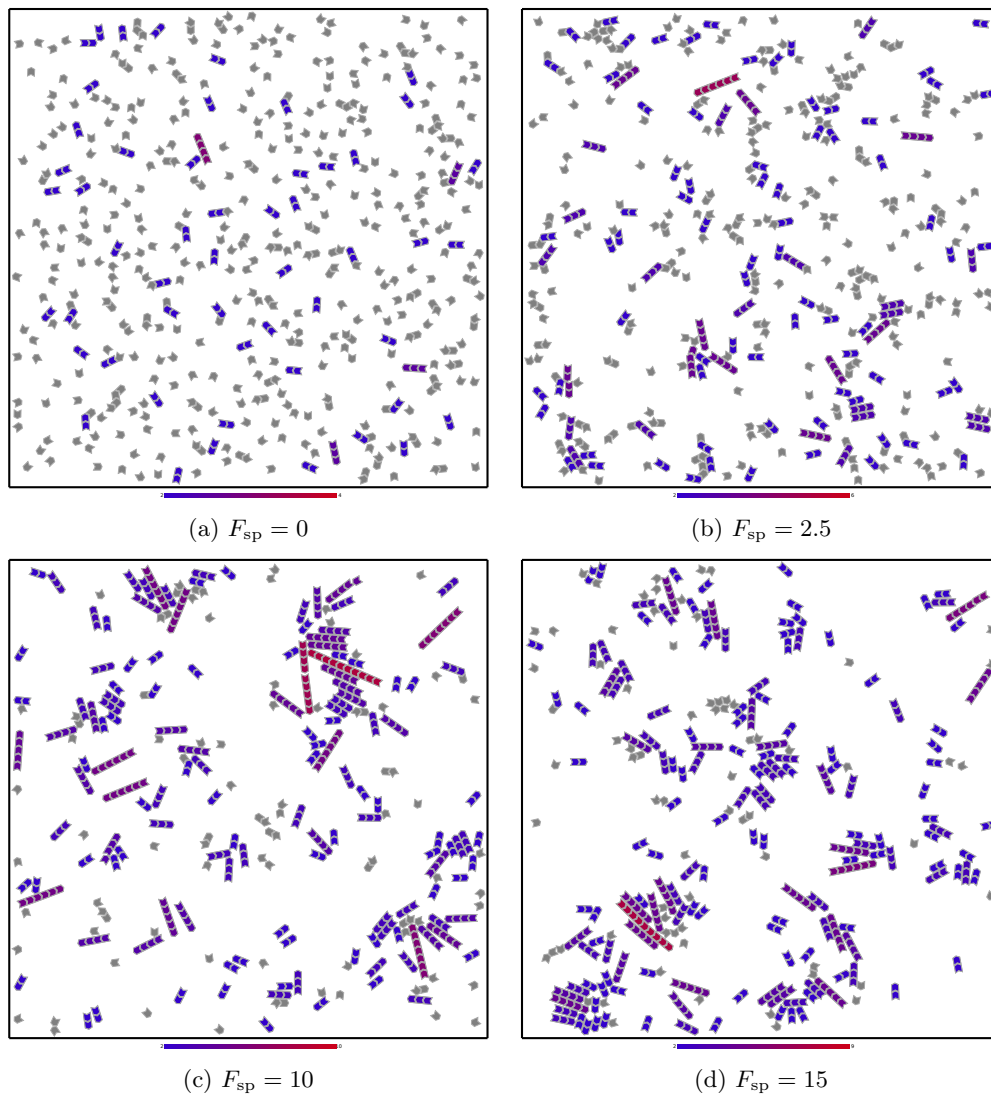


FIGURA 4.13: Efecto de la autopropulsión en el ensamblaje de cadenas en el caso con condiciones periódicas de frontera. Las diferentes imágenes corresponden a valores distintos de la fuerza de autopropulsión F_{sp} . En todos los casos la temperatura es $T = 0.1$. Nótese que para el caso sin autopropulsión ((a), $F_{sp} = 0$), solamente se forman cadenas muy cortas. Este caso corresponde a autoensamblaje espontáneo generado por movimiento térmico. Al aumentar la fuerza de autopropulsión F_{sp} , se observan cadenas más largas. Se puede observar que la autopropulsión aumenta considerablemente el ensamblaje de cadenas en comparación con el caso de autoensamblaje espontáneo.

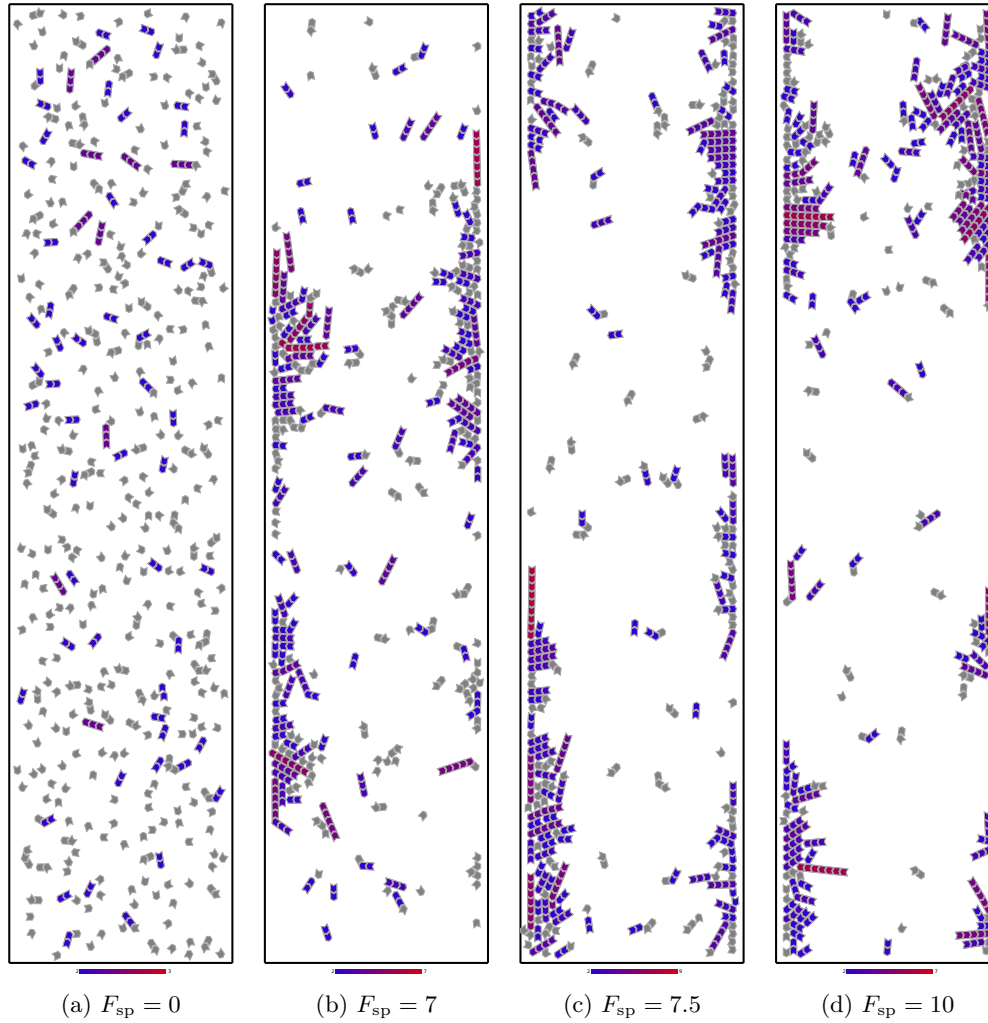


FIGURA 4.14: Efecto de la autopropulsión en el autoensamblaje de cadenas dentro de condiciones de frontera semi periódicas (canal), los lados más largos corresponden a fronteras reflejantes y los cortos a fronteras periódicas. Todas las imágenes corresponden a temperatura $T = 0.1$ y razón de aspecto del canal $R = 0.5$. Para $F_{sp} = 0$, i.e. cuando el movimiento de los coloides únicamente se debe a ruido térmico, solamente se forman polímeros cortos. Sin embargo, al aumentar la fuerza de autopropulsión F_{sp} la longitud de los polímeros ensamblados también aumenta. Nótese que en este caso los polímeros se acumulan en las paredes reflejantes, permitiendo formar cadenas aún más largas.

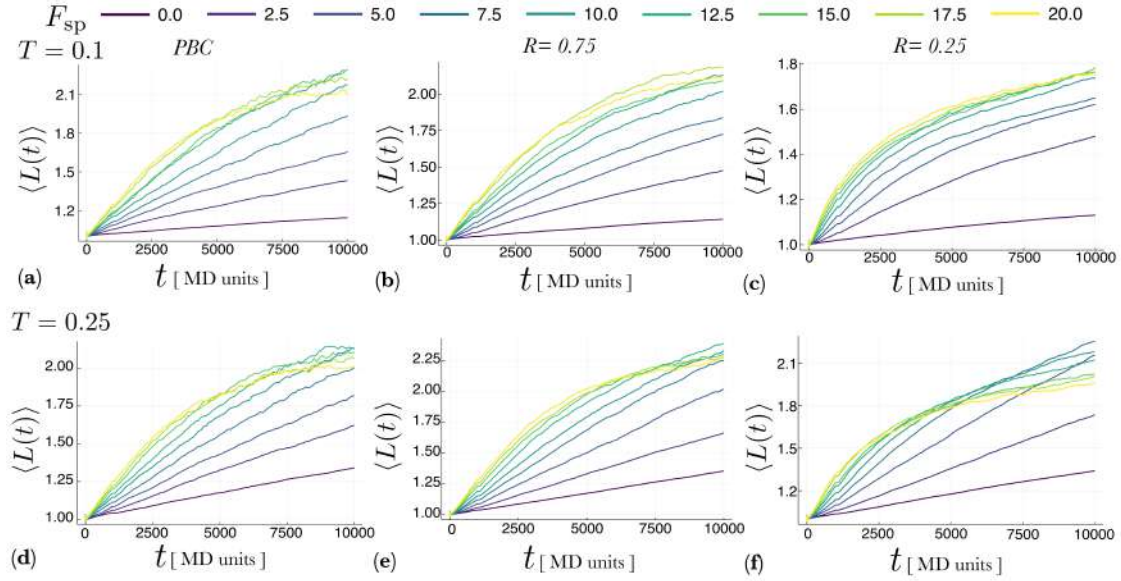


FIGURA 4.15: Longitud promedio de las cadenas observadas en las simulaciones numéricas $\langle L \rangle$ como función del tiempo t para distintos valores de la relación de aspecto R , la temperatura T y la fuerza de autopropulsión F_{sp} . Los paneles (a-c) corresponden a temperatura $T = 0.1$ y los paneles (d-f) a $T = 0.25$. Las figuras (a) y (d) muestran la evolución temporal de $\langle L(t) \rangle$ en el caso de condiciones de frontera periódicas, mientras que el resto corresponden a la geometría de canal para distintas relaciones de aspecto: $R = 0.75$ en las figuras (b,e) y $R = 0.25$ en las figuras (c,f). Se puede observar que el sistema no alcanza un estadio estacionario con respecto a $\langle L \rangle$ en el tiempo de simulación. Sin embargo, es evidente en todos los casos que la fuerza de autopropulsión F_{sp} acelera la formación de cadenas. El tiempo máximo de cómputo $t = 10^3$ corresponde a 10^7 iteraciones de la simulación de dinámica molecular.

Cada curva corresponde a un promedio de ensemble calculado sobre 20 realizaciones.

donde, $N_p(t)$ es el número de cadenas en el sistema al tiempo t y L_i es la longitud de la i -ésima cadena. El promedio de ensemble $\langle L(t) \rangle$ se calcula realizando M realizaciones del sistema con los mismos parámetros y promediando $L(t)$ sobre ellas.

En todos los casos reportados en la Fig. 4.15, se puede observar que al aumentar F_{sp} la tasa de crecimiento de las cadenas también aumenta (la pendiente de la curva aumenta con F_{sp}). El cruce de las curvas que se observa en la Fig. 4.15 al aumentar F_{sp} , se debe a que, aunque a tiempos cortos el incremento en la fuerza de autopropulsión acelera el proceso de polimerización de los coloides, a tiempos más largos las cadenas ya formadas se rompen debido a las colisiones entre ellas, disminuyendo el valor de $\langle L(t) \rangle$. Cabe hacer notar que en ninguno de los casos, el sistema ha llegado a un sistema estacionario con respecto a la longitud promedio de las cadenas.¹ Sin embargo, es claro que incluso en el transitorio, un incremento en la fuerza de autopropulsión acelera la tasa a la que las cadenas crecen.

Para cuantificar el efecto que tiene la autopropulsión en el proceso de polimerización, calculamos, para distintos valores de F_{sp} y temperatura $T = 0.1$, la probabilidad $P(L)$ de

¹Esta situación se debió a la falta de recursos computacionales en el momento de la realización de las simulaciones numéricas. Sin embargo, se está trabajando en la optimización de la implementación del modelo y en el acceso a mayores recursos de cómputo para obtener una mejor caracterización del sistema.

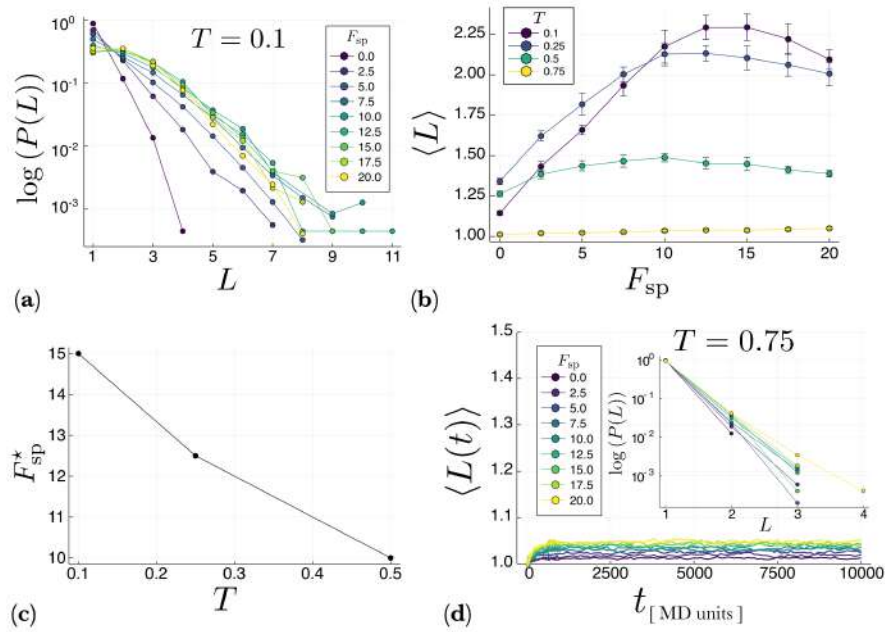


FIGURA 4.16: Resultados para el sistema con condiciones de frontera periódicas. (a) Probabilidad $P(L)$ de observar una cadena de longitud L . Los diferentes colores corresponden a distintos valores de la fuerza de autopropulsión F_{sp} . Todas las simulaciones corresponden a temperatura constante $T = 0.1$. (b) Longitud promedio de polímeros $\langle L \rangle$ como función de la fuerza de autopropulsión F_{sp} para distintos valores de la temperatura T . Nótese que para temperaturas bajas existe un valor óptimo F_{sp}^* de la fuerza de autopropulsión para el cual $\langle L \rangle$ muestra un máximo. Dicho valor se muestra en la figura (c) como función de la temperatura T . (d) Evolución temporal de la longitud promedio de las cadenas $\langle L(t) \rangle$ para una temperatura alta $T = 0.75$ para distintos valores de la F_{sp} . Nótese que en este caso $\langle L(t) \rangle$ sí alcanza un estado estacionario. La subfigura contenida muestra la fracción de monómeros ($L = 1$) y dímeros ($L = 2$) en el sistema. (Las cadenas con $L > 2$ ocurren en tan bajas cantidades que no pueden apreciarse en el histograma).

observar un polímero de longitud L una vez que se ha dejado evolucionar al sistema por $t = 10^7$ iteraciones. Como se muestra en la Fig. 4.16, al incrementar la magnitud de F_{sp} , se crean polímeros más largos. Sin embargo, el comportamiento no es monótono, como se observa en la Fig. 4.16b, que muestra la longitud promedio de las cadenas $\langle L \rangle$ como función de F_{sp} para distintas temperaturas. Se puede observar que a bajas temperaturas ($T \leq 0.5$) $\langle L \rangle$ alcanza un valor máximo para un valor óptimo de F_{sp} , después del cual $\langle L \rangle$ decrece. Esto se debe a colisiones entre coloides y polímeros. Cuando F_{sp} tiene un valor alto, las colisiones son más energéticas, desensamblando polímeros que ya han sido formados. La Fig. 4.16c muestra que el valor óptimo de la fuerza de autopropulsión, F_{sp}^* disminuye con T en el régimen de baja temperatura. Sin embargo para temperaturas altas ($T = 0.75$) no se observa un valor óptimo de F_{sp} para el cual $\langle L \rangle$ se maximiza, como se muestra en la Fig. 4.16d. En esta misma figura se puede observar que para $T = 0.75$ el sistema sí alcanza un sistema estacionario con respecto a la longitud promedio de las cadenas, así mismo se puede observar que para esta temperatura se observan monómeros y dímeros principalmente, mientras que cadenas más largas se observan con muy baja probabilidad.

Para el caso de la geometría de canal con condiciones de frontera semi periódicas se obtienen resultados similares (véase Fig.4.17). En este caso, la cola de la distribución $P(L)$ muestra que se forman polímeros mucho más largos que en el caso de fronteras periódicas. Lo cual se debe a la acumulación de polímeros y coloides junto a las paredes reflejantes, ya que se disminuye la velocidad de los coloides y polímeros previniendo que ocurran colisiones muy energéticas que destruyan a los polímeros que ya se han formado. De hecho, como se puede observar en la Fig.4.17b, para temperatura $T = 0.1$ la longitud promedio de las cadenas $\langle L \rangle$ no muestra un máximo en función de F_{sp} sino que aumenta de forma monótona para después alcanzar un valor constante. Por otro lado, para temperaturas más altas ($T = 0.25$) $\langle L \rangle$ se comporta de forma no monótona con F_{sp} alcanzando un máximo para un valor óptimo F_{sp}^* de la fuerza de autopropulsión, como se muestra en la Fig. 4.17c. Este valor óptimo parece aumentar con la relación de aspecto del canal R (véase Fig. 4.17d), lo que indica que se requiere una fuerza de autopropulsión menor para formar cadenas más largas en canales más angostos. Esto se refleja en el efecto de aglomeración de los coloides en las paredes repulsivas del canal, haciéndose este efecto más notorio en canales angostos. Una de las razones de la acumulación de los coloides en las paredes del canal es que, una vez que se han encontrado con una de ellas, los coloides se mueven siguiéndolas, favoreciendo el ensamblaje de cadenas paralelas a las paredes, o en el caso en el que la orientación de un conjunto de coloides que colisionan con las paredes sea perpendicular a ellas, se forman cadenas paralelas que reclutan coloides del bulto del canal. Esta situación puede verse modificada al incrementar la temperatura en el sistema, ya que la reorientación de los coloides sería de mayor amplitud y permitiría a los coloides moverse con mayor frecuencia en el bulto del sistema. Sin embargo es necesario realizar una exploración más amplia de los parámetros del sistema para verificarlo.

Con el objetivo de comparar la dinámica del sistema en el caso con fronteras periódicas y en el canal, en la Fig. 4.18 se muestra la longitud máxima promedio de las cadenas $\langle L_{m\acute{a}x}^C \rangle$ observada en el caso de la geometría de canal, comparada con la longitud máxima promedio de las cadenas $\langle L_{m\acute{a}x}^B \rangle$ observada en el caso con fronteras periódicas, para dos temperaturas distintas y diferentes valores de la realización de aspecto del canal R . Para generar los datos mostrados en la Fig. 4.18 consideramos las cadenas más largas en cada realización y promediamos sus longitudes. Las cantidades obtenidas, $\langle L_{m\acute{a}x}^C \rangle$, $\langle L_{m\acute{a}x}^B \rangle$, son entonces el promedio sobre realizaciones de la longitud de las cadenas más largas. Como se puede observar en la figura, es claro que prácticamente todos los puntos se encuentran arriba de la identidad (excepto para $F_{sp} = 0$). Lo cual indica que las fronteras repulsivas en la geometría de canal incrementan la formación de cadenas más largas en comparación con el caso de fronteras periódicas. La agregación y “embotellamiento” de partículas activas cerca de fronteras confinantes ha sido observado en simulaciones numéricas y experimentos y continúa siendo un problema abierto de investigación [5, 47, 59].

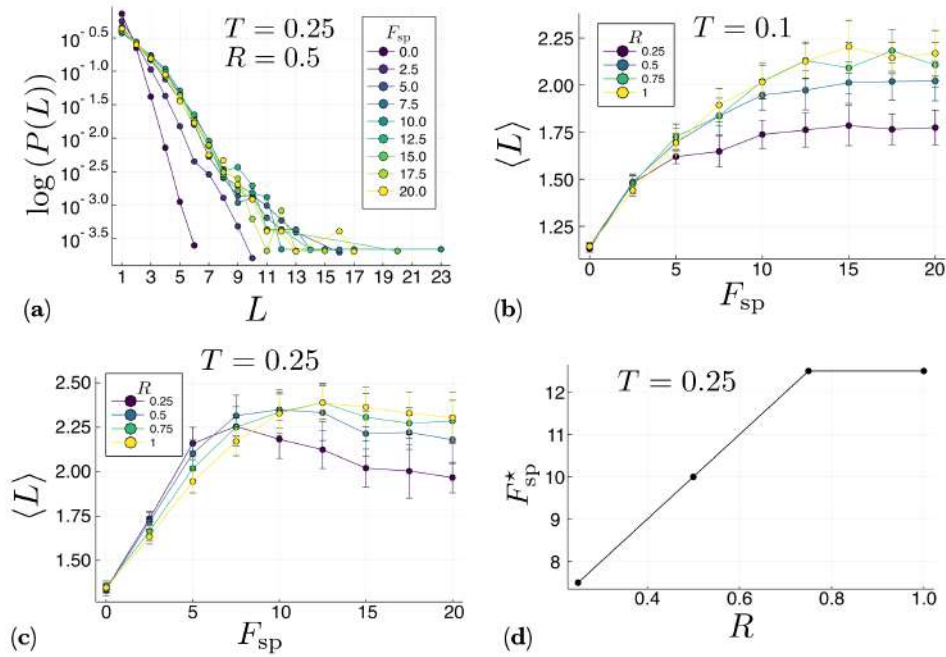


FIGURA 4.17: Resultados para el sistema con condiciones de frontera semi periódicas. Los resultados presentados corresponden a temperatura constante $T = 0.1$. (a) Probabilidad $P(L)$ de observar una cadena de longitud L para distintos valores de la fuerza de autopropulsión F_{sp} en un canal con relación de aspecto $R = 0.75$. Se puede observar que en este caso se forman polímeros incluso más largos con respecto al caso de fronteras periódicas mostrado en la Fig. 4.16. (b,c) Longitud promedio de las cadenas $\langle L \rangle$ en función de la fuerza de autopropulsión F_{sp} para distintos valores de la relación de aspecto del canal R , y temperatura (b) $T = 0.1$ y (c) $T = 0.25$. Para el caso de baja temperatura ($T = 0.1$) se observa que $\langle L \rangle$ primero aumenta y después satura en función de F_{sp} , mientras que para $T = 0.25$ alcanza un máximo a para un valor óptimo de la fuerza de autopropulsión F_{sp}^* , el cual se muestra en la figura (d) como función de la relación de aspecto R para temperatura $T = 0.25$.

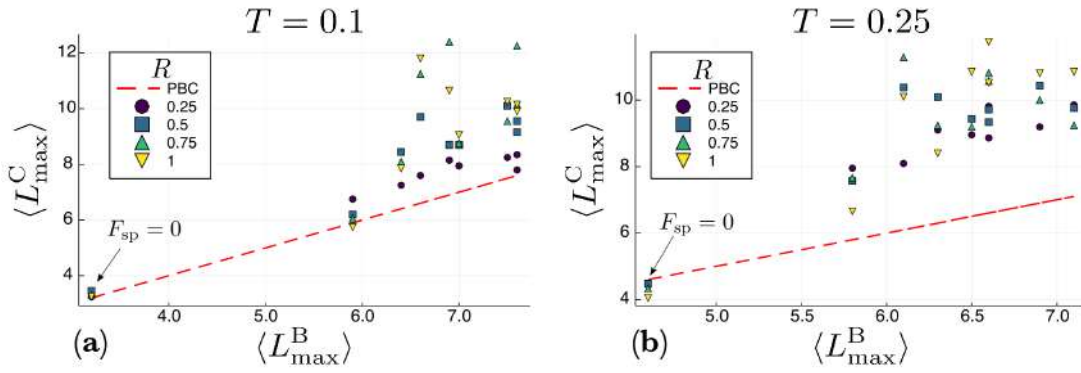


FIGURA 4.18: Promedio de la longitud máxima de las cadenas $\langle L_{\max}^C \rangle$ para la geometría de canal en comparación con la longitud máxima de cadenas promedio para el caso con condiciones periódicas de frontera $\langle L_{\max}^B \rangle$. Cada punto corresponde a un valor específico de F_{sp} , y cada símbolo a un calor distinto de la relación de aspecto de la geometría de canal R . La figura (a) muestra los datos para temperatura $T = 0.1$ y la figura (b) los datos para temperatura $T = 0.25$. Nótese que todos los puntos, excepto para $F_{\text{sp}} = 0$, se encuentran por encima de la identidad, lo cual indica que las cadenas formadas en condiciones de frontera semi periódicas son considerablemente más largas que las que se observan en condiciones de frontera periódicas. Los promedios de ensamble $\langle \cdot \rangle$ fueron calculados sobre 20 realizaciones independientes.

Capítulo 5

Conclusiones

La materia activa y el estudio de sus propiedades colectivas es un área de investigación multidisciplinaria que ha ganado popularidad y relevancia recientemente, debido en gran parte al desarrollo de tecnología que ha permitido obtener información más detallada del movimiento colectivo de distintos sistemas o la síntesis de nuevos materiales, como las partículas Janus, que permiten investigar la posibilidad de diseñar partículas y las interacciones entre ellas con el fin de inducir ciertos comportamientos colectivos o el autoensamblaje de ciertos tipos de estructuras las cuales tienen potenciales aplicaciones tecnológicas.

Aunque en las simulaciones numéricas la fuerza de autopropulsión sobre las partículas siempre está presente, esta situación no se observa en sistemas reales, ya que la persistencia de la autopropulsión de las partículas depende de la presencia de gradientes químicos o térmicos alrededor de las partículas, cuya intensidad disminuye conforme los sistemas alcanzan equilibrios térmicos o químicos. Es necesario incluir esta disminución de la intensidad de la fuerza de auto propulsión en los modelos numéricos y computacionales, para tener una mejor descripción de este tipo de sistemas y procesos de autoensamblaje activo.

Sin embargo, la mayor parte de los modelos de movimiento colectivo se definen en condiciones periódicas de frontera, situación que no corresponde con lo que se observa en sistemas reales y que además induce interacciones que no están presentes cuando el movimiento de las partículas en el modelo se realiza en espacio abierto.

La presencia de solamente interacciones de alineamiento locales entre partículas lleva inevitablemente a la segregación del grupo en espacio abierto, a menos que se incluyan interacciones explícitamente atractivas o el rango de interacción sea comparable con el tamaño del sistema. El modelo de movimiento colectivo con interacciones de alineamiento de corto y largo alcance que hemos introducido, es una propuesta para solucionar este problema y, como hemos mostrado, solamente se requiere que un número bajo de interacciones de largo alcance estén presentes para que el grupo se mantenga en un estado ordenado en espacio abierto, lo cual sugiere que este sea un mecanismo eficiente para la transmisión de información entre los individuos que componen el sistema. Así mismo, este tipo de interacciones podrían ser útiles para el control no centralizado de grupos de robots autónomos, sugiriendo una posible aplicación tecnológica del proyecto de investigación.

Por otro lado también hemos mostrado cómo la autopropulsión genera comportamientos colectivos emergentes en sistemas de coloides que no se observan en su contraparte pasiva

(o sin autopropulsión). Dado que los sistemas de coloides activos pueden ser estudiados y manejados en condiciones de laboratorio con mayor facilidad que grupos de animales, son modelos prometedores para el estudio del tipo de interacciones que promueven la emergencia de los distintos comportamientos colectivos observados, mas aún, dada la posibilidad de sintetizar y diseñar este tipo de materiales, su estudio puede resultar en distintas aplicaciones tecnológicas.

Los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas del modelo de polimerización de moléculas activas, muestran que la autopropulsión aumenta considerablemente la polimerización en cadenas de estas moléculas. Al incrementar la magnitud de la fuerza de autopropulsión, se observan cadenas más largas en comparación con el caso en equilibrio en el que el autoensamblaje espontáneo de cadenas se da solamente por el movimiento Browniano de las moléculas como resultado de la temperatura del baño térmico. En el caso en que las moléculas se mueven dentro de fronteras periódicas existe un valor óptimo para la fuerza de autopropulsión para el cual la longitud promedio de las cadenas alcanza un máximo. Debido principalmente a la competencia entre la energía de enlace y la fuerza ejercida por las moléculas cuando colisionan entre ellas. Esta competencia es menos frecuente cuando las moléculas se mueven dentro de fronteras semi periódicas. En este caso, las moléculas y polímeros tienden a acumularse cerca de las paredes reflejantes, lo cual disminuye la velocidad de ambos, previniendo en cierto grado, la ocurrencia de colisiones.

Nuestros resultados y los obtenidos por otros grupos, muestran que la autopropulsión actúa como un catalizador del ensamblaje de estructuras ordenadas macroscópicas partiendo de moléculas sencillas, ya sean polímeros unidimensionales, como es el caso del modelo que hemos presentado [2], o cápsides [34] o dominios protéicos en la membrana celular [33]. El estudio y control de las propiedades de autoensamblaje de estos sistemas puede tener relevancia tanto tecnológica, para el desarrollo de nuevos materiales y técnicas de fabricación de micro y nanoestructuras complejas, como teórico, para el desarrollo de teoría de sistemas fuera de equilibrio y el estudio de propiedades emergentes en sistemas de muchos cuerpos.

Apéndice A

Parámetros de Simulaciones

A.1. Parámetros del *Behavioural Rules Model*

En la Tabla A.1 se muestran los parámetros utilizados para las simulaciones numéricas del *Behavioural Rules Model*, descrito en la Sección 2.3.3.

<i>Behavioural Rules Model</i>		
N	Número de partículas	2000
L_0	Tamaño inicial del grupo	19
r_r	Radio de la zona de repulsión	$10 \approx 0.05L_0$
$\Delta r_o/L_0$	Tamaño de la zona de orientación relativa al tamaño del sistema	[0.1, 2.0]
$\Delta r_a/L_0$	Tamaño de la zona de atracción relativa al tamaño del sistema	1.0
η	Intensidad del ruido	0.15
ρ_0	Densidad inicial	0.3
v_0	Velocidad de las partículas	1.0
θ	Máximo ángulo de giro	360°
t_∞	Número de iteraciones	10^5

TABLA A.1: Parámetros utilizados en las simulaciones numéricas del *Behavioural Rules Model*

A.2. Parámetros de la extensión del *Inertial Spin Model*

En la Tabla A.2 se muestran los parámetros utilizados para las simulaciones numéricas de la extensión del *Inertial Spin Model* con interacciones de largo alcance, descrito en la Sección 3.

Extensión del <i>Inertial Spin Model</i>		
N	Número de partículas	512
χ	Momento generalizado de inercia	0.3
η	Coefficiente de fricción	0.15
J	Intensidad de la fuerza de alineamiento	0.8
T	Temperatura generalizada	0.8
κ_l	Número de vecinos cercanos topológicos	6
ρ_0	Densidad Inicial	0.3
v_0	Velocidad	0.1
Δt	Paso de integración	$v_0 \sqrt{J/\chi}$
t_∞	Número de iteraciones	10^6
ω	Peso relativo entre interacciones de corto y largo alcance	0.5

TABLA A.2: Parámetros utilizados en las simulaciones numéricas de la extensión del *Inertial Spin Model*

A.3. Parámetros del modelo de movimiento colectivo con interacciones de corto y largo alcance.

En la Tabla A.3 se muestran los parámetros utilizados para las simulaciones numéricas del modelo de movimiento colectivo con interacciones de corto y largo alcance, descrito en la Sección 3.

Modelo de Movimiento Colectivo con interacciones de corto y largo alcance		
N	Número de partículas	4096
η	Intensidad de ruido	0.15
v_0	Velocidad	1.0
Δt	Paso de integración	1.0
t_∞	Número de iteraciones	10^6
ω	Peso relativo entre interacciones de corto y largo alcance	0.5
α_l	Número de vecinos cercanos topológicos	6
r_0	Rango de interacción métrico	$2v_0\Delta t$
ρ_0	Densidad Inicial	0.3

TABLA A.3: Parámetros utilizados en las simulaciones numéricas de la extensión del modelo de Vicsek con interacciones de corto y largo alcance.

A.4. Parámetros del modelo de autoensamblaje activo

En la Tabla A.4 se muestran los parámetros utilizados para las simulaciones numéricas del modelo de autoensamblaje activo, descrito en la Sección 4.3.

Modelo de autoensamblaje activo		
N	Número de coloides	512
N_s	Número de subunidades por coloide	20
T	Temperatura	[0.1, 0.75]
σ_s	Radio de subunidades	0.25
γ_r	Coefficiente de fricción traslacional	250
D_r	Coefficiente de difusión traslacional	$k_B T / \gamma_r$
γ_t	Coefficiente de fricción rotacional	$D_r / k_B T$
D_t	Coefficiente de difusión rotacional	$3D_r / \sigma_s^2$
F_{sp}	Fuerza de autopropulsión	[0, 20]
Δt	Paso de integración	10^{-3}
t_∞	Número de iteraciones	10^7
R	Relación de aspecto del canal	[0.25, 1]
l	Tamaño de la celda de simulación	135

TABLA A.4: Parámetros utilizados en las simulaciones numéricas del modelo de autoensamblaje activo. Los coloides inician en posiciones aleatorias sin traslaparse dentro de la celda de simulación.

Bibliografía

- [1] M. Aldana y col. «Phase Transitions in Systems of Self-Propelled Agents and Related Network Models». En: *Phys. Rev. Lett.* 98 (9 2007), pág. 095702.
- [2] Maximino Aldana, Miguel Fuentes-Cabrera y Martín Zumaya. «Self-Propulsion Enhances Polymerization». En: *Entropy* 22.2 (2020), pág. 251.
- [3] Alessandro Attanasi y col. «Information transfer and behavioural inertia in starling flocks.» En: *Nature physics* 10.9 (2014), págs. 615-698.
- [4] M. Ballerini y col. «Interaction ruling animal collective behavior depends on topological rather than metric distance: Evidence from a field study». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 105.4 (2008), págs. 1232-1237.
- [5] Clemens Bechinger y col. «Active particles in complex and crowded environments». En: *Rev. Mod. Phys.* 88 (4 2016), pág. 045006.
- [6] Mila Boncheva y George M. Whitesides. «Making Things by Self-Assembly». En: *MRS Bulletin* 30.unsolved (2005), págs. 736-742.
- [7] Itay Budin y Jack W. Szostak. «Expanding Roles for Diverse Physical Phenomena During the Origin of Life». En: *Annual Review of Biophysics* 39.1 (2010), págs. 245-263.
- [8] J. Buhl y col. «From Disorder to Order in Marching Locusts». En: *Science* 312.5778 (2006), págs. 1402-1406.
- [9] Aaron S. Burton y col. «Understanding prebiotic chemistry through the analysis of extraterrestrial aminoacids and nucleobases in meteorites». En: *Chem. Soc. Rev.* 41 (16 2012), págs. 5459-5472.
- [10] M. Camperi y col. «Spatially balanced topological interaction grants optimal cohesion in flocking models». En: *Interface Focus* 2.6 (2012), págs. 715-725.
- [11] A. Cavagna y col. «Diffusion of individual birds in starling flocks». En: *Proceedings of the Royal Society of London B: Biological Sciences* 280.1756 (2013). ISSN: 0962-8452.
- [12] Andrea Cavagna y col. «Flocking and Turning: a New Model for Self-organized Collective Motion». En: *J. Stat. Phys.* 158.3 (2014), págs. 601-627.
- [13] Andrea Cavagna y col. «Scale-free correlations in starling flocks.» En: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 107.26 (2010), págs. 11865-11870. ISSN: 0027-8424.
- [14] Andrea Cavagna y col. «Short-range interactions versus long-range correlations in bird flocks». En: *Physical Review E* 92.1 (2015).
- [15] Andrea Cavagna y col. «The {STARFLAG} handbook on collective animal behaviour: 1. Empirical methods». En: *Animal Behaviour* 76.1 (2008), págs. 217 -236. ISSN: 0003-3472.

- [16] Kun Chen, Theodore Kaplan y Mark Mostoller. «Melting in Two-Dimensional Lennard-Jones Systems: Observation of a Metastable Hexatic Phase». En: *Physical Review Letters* 74.20 (1995), págs. 4019-4022.
- [17] Iain D. Couzin. «Collective animal migration». En: *Current Biology* 28.17 (2018), R976 -R980. ISSN: 0960-9822.
- [18] Iain D. Couzin y col. «Collective Memory and Spatial Sorting in Animal Groups». En: *Journal of Theoretical Biology* 218.1 (2002), págs. 1 -11. ISSN: 0022-5193.
- [19] Grace H. Davis, Margaret C. Crofoot y Damien R. Farine. «Estimating the robustness and uncertainty of animal social networks using different observational methods». En: *Animal Behaviour* 141 (2018), págs. 29 -44. ISSN: 0003-3472.
- [20] Jens Elgeti y Gerhard Gompper. «Wall accumulation of self-propelled spheres». En: *EPL (Europhysics Letters)* 101.4 (2013), págs. 48003.
- [21] B. Ferdinandy y col. «Landing together: How flocks arrive at a coherent action in time and space in the presence of perturbations». En: *Physica A* 391.4 (2012), págs. 1207-1215.
- [22] Yaouen Fily y M. Cristina Marchetti. «Athermal Phase Separation of Self-Propelled Particles with No Alignment». En: *Physical Review Letters* 108.23 (2012).
- [23] Andrea Flack y col. «From local collective behavior to global migratory patterns in white storks». En: *Science* 360.6391 (2018), págs. 911-914. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.aap7781.
- [24] Arijit Ghosh y col. «Active matter therapeutics». En: *Nano Today* (2020), págs. 100836.
- [25] Guillaume Grégoire, Hugues Chaté y Yuhai Tu. «Moving and staying together without a leader». En: *Physica D* 181.3-4 (2003), págs. 157-170.
- [26] Bartosz A. Grzybowski y col. «Self-assembly: from crystals to cells». En: *Soft Matter* 5.6 (2009), págs. 1110.
- [27] Hideo Hashizume. «Role of Clay Minerals in Chemical Evolution and the Origins of Life». En: *Clay Minerals in Nature*. Ed. por Marta Valášková y Grażyna Simha Martynkova. Rijeka: IntechOpen, 2012. Cap. 10.
- [28] Jonathan R. Howse y col. «Self-Motile Colloidal Particles: From Directed Propulsion to Random Walk». En: *Physical Review Letters* 99.4 (2007).
- [29] Cristián Huepe y col. «Scale-Free Correlations in Flocking Systems with Position-Based Interactions». En: *J. Stat. Phys.* 158.3 (2014), págs. 549-562.
- [30] Cristián Huepe y Maximino Aldana-González. «Dynamical Phase Transition in a Neural Network Model with Noise: An Exact Solution». English. En: *Journal of Statistical Physics* 108.3-4 (2002), págs. 527-540. ISSN: 0022-4715.
- [31] Sven Erik Ilse, Christian Holm y Joost de Graaf. «Surface roughness stabilizes the clustering of self-propelled triangles». En: *The Journal of Chemical Physics* 145.13 (2016), págs. 134904.
- [32] A. Jaster. «The hexatic phase of the two-dimensional hard disk system». En: *Physics Letters A* 330.1-2 (2004), págs. 120-125.
- [33] Karin John y Markus Bär. «Alternative Mechanisms of Structuring Biomembranes: Self-Assembly versus Self-Organization». En: *Physical Review Letters* 95.19 (2005).
- [34] S. A. Mallory y A. Cacciuto. «Activity-assisted self-assembly of colloidal particles». En: *Phys. Rev. E* 94 (2 2016), págs. 022607.
- [35] Andreas M. Menzel. «Tuned, driven, and active soft matter». En: *Physics Reports* 554 (2015). Tuned, driven, and active soft matter, págs. 1 -45. ISSN: 0370-1573.

- [36] B. M. Mognetti y col. «Living Clusters and Crystals from Low-Density Suspensions of Active Colloids». En: *Physical Review Letters* 111.24 (2013).
- [37] Máté Nagy, István Daruka y Tamás Vicsek. «New aspects of the continuous phase transition in the scalar noise model (SNM) of collective motion». En: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 373 (2007), págs. 445-454.
- [38] Eva G. Noya y col. «The stability of a crystal with diamond structure for patchy particles with tetrahedral symmetry». En: *The Journal of Chemical Physics* 132.23 (2010), pág. 234511.
- [39] R.K. Pathria y Paul D. Beale. «12 - Phase Transitions: Criticality, Universality, and Scaling». En: *Statistical Mechanics (Third Edition)*. Ed. por R.K. Pathria y Paul D. Beale. Third Edition. Boston: Academic Press, 2011, págs. 401 -469. ISBN: 978-0-12-382188-1.
- [40] D J G Pearce y M S Turner. «Density regulation in strictly metric-free swarms». En: *New Journal of Physics* 16.8 (2014), pág. 082002.
- [41] D. J. G. Pearce y col. «Role of projection in the control of bird flocks». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111.29 (2014), págs. 10422-10426.
- [42] D. J.G. Pearce y M. S. Turner. «Density regulation in strictly metric-free swarms». En: *New Journal of Physics* 16 (2014).
- [43] E. Pierazzo y C. F. Chyba. «Amino acid survival in large cometary impacts». En: *Meteoritics & Planetary Science* 34.6 (1999), págs. 909-918.
- [44] Cyril Ponnampereuma, Akira Shimoyama y Elaine Friebele. «Clay and the origin of life». En: *Origins of life* 12.1 (1982), págs. 9-40. ISSN: 1573-0875.
- [45] E. M. Purcell. «Life at low Reynolds number». En: *American Journal of Physics* 45.1 (1977), págs. 3-11.
- [46] Gabriel S. Redner, Aparna Baskaran y Michael F. Hagan. «Reentrant phase behavior in active colloids with attraction». En: *Physical Review E* 88.1 (2013).
- [47] C. Reichhardt y C. J. Olson Reichhardt. «Active matter transport and jamming on disordered landscapes». En: *Phys. Rev. E* 90 (1 2014), pág. 012701.
- [48] Craig W. Reynolds. «Flocks, Herds and Schools: A Distributed Behavioral Model». En: *SIGGRAPH Comput. Graph.* 21.4 (ago. de 1987), págs. 25-34. ISSN: 0097-8930.
- [49] P. Romanczuk y col. «Active Brownian particles». En: *The European Physical Journal Special Topics* 202.1 (2012), págs. 1-162. ISSN: 1951-6401.
- [50] Sara Brin Rosenthal y col. «Revealing the hidden networks of interaction in mobile animal groups allows prediction of complex behavioral contagion». En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 112.15 (2015), págs. 4690-4695. ISSN: 0027-8424.
- [51] Jen Schellinck y Tony White. «A review of attraction and repulsion models of aggregation: Methods, findings and a discussion of model validation». En: *Ecol. Modell.* 222.11 (2011), págs. 1897-1911.
- [52] Daniel Schubring y Paul R. Ohmann. «Density-independent model of self-propelled particles». En: *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* 88.3 (2013), págs. 1-10.
- [53] Joakim Stenhammar y col. «Continuum Theory of Phase Separation Kinetics for Active Brownian Particles». En: *Physical Review Letters* 111.14 (2013).
- [54] G. E. Uhlenbeck y L. S. Ornstein. «On the Theory of the Brownian Motion». En: *Physical Review* 36.5 (1930), págs. 823-841.

-
- [55] Tamás Vicsek y Anna Zafeiris. «Collective motion». En: *Physics Reports* 517.3-4 (2012), págs. 71-140.
- [56] Tamás Vicsek y col. «Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles». En: *Physical Review Letters* 75.6 (1995), págs. 1226-1229.
- [57] Andreas Walther y Axel H. E. Müller. «Janus particles». En: *Soft Matter* 4.4 (2008), pág. 663.
- [58] Wei Wang y col. «From one to many: Dynamic assembly and collective behavior of self-propelled colloidal motors». En: *Accounts of Chemical Research* 48.7 (2015), págs. 1938-1946.
- [59] H. H. Wensink y H. Löwen. «Aggregation of self-propelled colloidal rods near confining walls». En: *Phys. Rev. E* 78 (3 2008), pág. 031409.
- [60] H H Wensink y H Löwen. «Emergent states in dense systems of active rods: from swarming to turbulence». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 24.46 (2012), pág. 464130.
- [61] H. H. Wensink y col. «Controlling active self-assembly through broken particle-shape symmetry». En: *Phys. Rev. E* 89 (1 2014), pág. 010302.
- [62] G. M. Whitesides. «Self-Assembly at All Scales». En: *Science* 295.5564 (2002), págs. 2418-2421.
- [63] Julia M. Yeomans. «Nature's engines: active matter». En: *Europhysics News* 48.2 (2017), págs. 21-25.
- [64] Zhenli Zhang y Sharon C. Glotzer. «Self-Assembly of Patchy Particles». En: *Nano Letters* 4.8 (2004), págs. 1407-1413.
- [65] Martín Zumaya, Hernán Larralde y Maximino Aldana. «Delay in the dispersal of flocks moving in unbounded space using long-range interactions». En: *Scientific Reports* 8.1 (2018), págs. 2045-2322.
- [66] Andreas Zöttl y Holger Stark. «Emergent behavior in active colloids». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 28.25 (2016), pág. 253001.