

Research Paper

Self-propelled Magnetic Particles in the Presence of an External Homogenous Magnetic Field¹

Sonia Mohammad Hosseini Toramuni² and Farinaz Roshani^{3*}

Received: 2021.06.11

Revised: 2021.08.04

Accepted: 2021.09.16

Abstract

In this paper, the behavior of the magnetic swimmers has been simulated in the presence of an external magnetic field. The studied system is formed of spherical self-propelled particles that have magnetic properties and are suspended in a box. We have applied a homogeneous magnetic field with circular symmetry. The particle-to-particle, particle-to-wall, and bipolar-bipolar interactions have been ignored. The motion of particles has been described by the Langevin equation, and the Fokker-Planck equation has been used for the expression of the evolution of the probability density distribution function. In the steady-state, solving these equations shows the collective behavior of these magnetic particles. In the absence of an external magnetic field, these particles are smoothly distributed in the box. The motion of particles has been controlled by an external magnetic field. Applying an externally homogeneous magnetic field, these particles are concentrated at boundaries. If the magnetic field is an exponential function of distance, particles will collect in the middle of the box. This type of research has applications in targeted drug delivery to damaged tissues and the separation of magnetic particles.

Keyword: *Spherical Self-propelled Particles, Magnetic Particles, Homogenous Magnetic Field.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2021.36608.1217

² Ph. D. Student, Department of Physics, Faculty of Physics and Chemistry, Alzahra University, Tehran, Iran. Email: mahsayan@gmail.com

³ Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Physics and Chemistry, Alzahra University, Tehran, Iran. (Corresponding Author). Email: farinaz@alzahra.ac.ir



رفتار ذرات خودران مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی همگن خارجی^۱

سونیا محمدحسینی ترامونی^۲ و فریناز روشنی^{۳*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۳/۲۱

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۵/۱۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۶/۲۵

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهراء

سال یازدهم، پیاپی ۲۶، پاییز ۱۴۰۰

صص ۲۵ - ۳۵

چکیده

رفتار شناگرهای مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی در این مقاله شبیه‌سازی شده است. سیستم مورد بررسی از شناگرها یا ذرات کروی خودران مغناطیسی معلق در یک جعبه تشکیل می‌شود. میدان مغناطیسی همگن با تقارن دایره‌ای در این پژوهش به کار برده شده و از برهم‌کنش‌های ذره با ذره، ذره با دیواره و برهم‌کنش‌های دوقطبی-دوقطبی نیز صرف‌نظر شده است. برای توضیح حرکت ذرات از معادله لانژون و برای تحول تابع توزیع چگالی احتمال از معادله فوکر-پلانک استفاده شده است. حل این معادلات در حالت پایا، رفتار جمعی این ذرات مغناطیسی را نشان می‌دهد. ذرات در غیاب میدان مغناطیسی به‌طور یکنواخت در فضای جعبه پخش می‌شود. حرکت ذرات را می‌توان با اعمال میدان مغناطیسی خارجی کنترل کرد. ذرات در حضور میدان مغناطیسی همگن خارجی در مرزهای جعبه متمرکز می‌شود و اگر میدان مغناطیسی تابع نمایی فاصله باشد، ذرات در وسط کانال جمع می‌شود. این نوع پژوهش‌ها در تحویل هدفمند دارو به بافت‌های آسیب‌دیده و جداسازی ذرات مغناطیسی کاربرد دارد.

واژگان کلیدی: ذرات خودران کروی، ذرات مغناطیسی، میدان مغناطیسی همگن.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2021.36608.1217

^۲ دانشجوی دکترا، گروه فیزیک، دانشکده فیزیک- شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران. Email: mahsayan@gmail.com

^۳ دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده فیزیک- شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران. (نویسنده مسئول). Email: farinaz@alzahra.ac.ir

۱. مقدمه

رفتار ماده فعال یکی از موضوعات فیزیک در مبحث سیستم‌های نامتعادل است که توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. ذرات فعال، ذرات براونی خودران یا میکروشناگرها و نانوشناگرها انرژی را از محیط اطرافشان جذب و به حرکت مستقیم تبدیل می‌کنند. به همین دلیل، هدایت ذرات فعال از اهمیت زیادی برخوردار است. ماده فعال کاربرد بسیاری در دارورسانی هدفمند [۱] و رباتیک [۲] دارد. حال این سؤال پیش می‌آید که چگونه می‌توان حرکت یک ذره یا مجموعه‌ای از ذرات خودران تحت تأثیر افت‌وخیزهای تصادفی را کنترل کرد. بدون کنترل، ذرات فعال رفتار جمعی خاصی را نشان می‌دهند که در مقیاس مزو دارای الگوهای وابسته به زمان و مکان است [۳-۵].

نمونه‌هایی از ذرات خودران، که با هم برهم‌کنش می‌کنند، در مقیاس‌های مختلف وجود دارند. باکتری‌ها و کلونیدهای خودکاتالیزور، مثال‌هایی از ذرات فعال در مقیاس میکرو با سرعت ۱۰ میکرومتر بر ثانیه هستند [۶ و ۷]. ردیاب‌ها در سلول‌های زنده منعکس‌کننده فعالیت درون‌سلولی موتورهای مولکولی و رشته‌های اسکلتی هستند و از دینامیک فعال پیروی می‌کنند [۸ و ۹].

مکانیسم‌های مختلفی شامل اعمال میدان‌های الکتریکی [۱۰]، گرادیان‌های شیمیایی و نیروهای اپتیکی [۱۱] با توجه به نوع ذره فعال برای کنترل حرکت پیشنهاد شده است. برای مثال خودرانی در حوزه ذرات کلونیدی فعال، با یک لیزر ضعیف ایجاد می‌شود. هنگامی که ذره به خارج از ناحیه هدف می‌رود، خاموش و هنگامی که به ناحیه هدف وارد می‌شود، روشن می‌گردد [۱۲].

همراه با حرکت ذرات، پخش هم وجود دارد. فرایند پخش عادی را می‌توان به صورت حرکت یک کمیت از یک ناحیه با چگالی بالا به ناحیه دیگر با چگالی کم تعریف کرد. پخش عطر یا دود در هوا مثال‌هایی از پخش در زندگی روزمره است. برای توصیف فرایندهای پخش عادی در مقیاس میکروسکوپی و ماکروسکوپی به ترتیب از ولگشت براونی و معادله پخش استاندارد استفاده می‌شود. وقتی که معادله پخش استاندارد برای توصیف پخش یک فرایند به کار گرفته می‌شود، پخش، موضعی و مارکوفی است. منظور از غیرموضعی و غیرمارکوفی بودن، بستگی خواص پخش در یک مکان مشخص و یک لحظه، به مکان‌های دیگر و زمان‌های قبلی (یعنی حافظه‌دار بودن سیستم) است. پخش غیرعادی در توصیف بسیاری از سیستم‌های فیزیکی، اقتصادی، شیمیایی، اجتماعی و



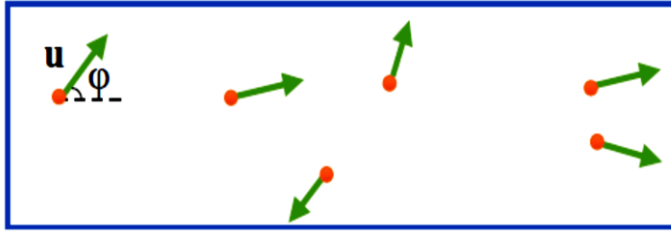
بیولوژیک که رفتار دینامیکی غیرعادی دارند، به کار می‌رود. از جمله می‌توان به حرکت باکتری‌ها اشاره کرد که برای بررسی آن، در حضور یا عدم حضور نیروی خارجی، از معادلات لانژون استفاده می‌شود.

معادله لانژون یکی از معادلات اساسی برای بررسی سیستم‌های نامتعادل است [۱۴ و ۱۳]. چنین معادله‌ای در کاربردهای مختلف، مانند انتشار سطحی و دینامیک پلیمر و نیز برای توصیف نوسانگرهای غیرخطی تصادفی ظاهر می‌شود [۱۹-۱۵]. در سیستم‌های بیولوژیک، حرکت یک کرم براونی از مرتبه سانتی‌متر با حل دقیق معادله لانژون جفت شده مطالعه می‌شود [۲۰].

در این پژوهش، ما با اعمال یک میدان مغناطیسی دایره‌ای همگن بر ذرات فعال کروی مغناطیسی و با استفاده از معادله فوکر-پلانک برای شبیه‌سازی تابع توزیع احتمال ذرات خودران کروی مغناطیسی در فضای محدود، تابع چگالی احتمال را در حالت پایا مطالعه کرده‌ایم.

۲. توصیف مدل

در اینجا می‌خواهیم رفتار باکتری‌های مغناطیسی درون یک جعبه را در حضور میدان مغناطیسی خارجی و در دمای اتاق، بررسی و با تغییر میدان مغناطیسی، حرکت ذرات را کنترل کنیم. مدل ساده‌شده این مسئله، بررسی رفتار کره‌های مغناطیسی خودران درون یک مکعب، در حضور میدان مغناطیسی و در دمای اتاق است. چگالی ذرات را کم فرض کرده‌ایم، بنابراین ذرات با هم برهم‌کنش ندارند. معادله لانژون را برای حرکت ذرات مغناطیسی درون جعبه می‌نویسیم و برای تابع توزیع چگالی احتمال، معادله فوکر-پلانک را با شرایط مرزی دوره‌ای و بدون شار (zero flux) روی مرزهای جعبه در نظر می‌گیریم. فرض بر این است که در لحظه اول، ذرات خودران کروی به شعاع a ، به‌طور یکنواخت پخش شده‌اند و با سرعت v در جهت \vec{u} تحت زاویه φ با قابلیت حرکت انتقالی $\mu_t = \frac{1}{6\pi\eta a}$ و قابلیت حرکت دورانی $\mu_r = \frac{1}{8\pi\eta a^3}$ در حرکت هستند (شکل ۱).



شکل ۱ فضای محدود با شرایط مرزی دوره‌ای، شامل ذرات خودران کروی (دایره‌های نارنجی)، و جهت‌گیری ذره برآونی (بردار \mathbf{u}) تحت زاویه φ با افق.

با فرض نادیده گرفتن اثرات اینرسی، معادلات لانژون برای یک ذره خودران مغناطیسی با سرعت v و در حضور میدان مغناطیسی خارجی \vec{B} ، عبارت‌اند از:

$$\vec{r} = v\vec{u} - \mu_t \vec{\nabla} V + \sqrt{2D_t} \vec{\xi}_t \quad (1)$$

$$\dot{\varphi} = \mu_r J + \sqrt{2D_r} \eta_t \quad (2)$$

که $D_t = \mu_t k_B T$ ضریب پخش انتقالی، $D_r = \mu_r k_B T$ ضریب پخش دورانی، $\vec{u} = \cos\varphi \hat{i} + \sin\varphi \hat{j}$ بردار یکه در جهت حرکت، و V پتانسیل مغناطیسی است. η_t و ξ_t نوفه سفید گاوسی هستند و گشتاور مغناطیسی J را در راستای Z اختیار کرده‌ایم. k_B ثابت بولتزمن و T دمای محیط است. چگالی ذرات بسیار کم در نظر گرفته شده است. بنابراین از برهم‌کنش‌های هیدرودینامیکی ذره با ذره، ذره با دیواره، و برهم‌کنش‌های دوقطبی-دوقطبی صرف‌نظر می‌شود.

\vec{m} ممان مغناطیسی مربوط به ذرات برآونی را در جهت حرکت در نظر گرفته‌ایم. نیروی مغناطیسی \vec{F} و گشتاور مغناطیسی J_z به صورت زیر به ذرات اعمال می‌شوند:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V = +\vec{\nabla} (\vec{m} \cdot \vec{B}) \quad (3)$$

$$J_z = (\vec{m} \times \vec{B})_z = m_x B_y - m_y B_x \quad (4)$$

که $\vec{\nabla} = \left[\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right]$. معادله فوکر-پلانک ذرات خودران با توجه به معادلات (۱) و (۲) عبارت است از:

$$\partial_t P = -\vec{\nabla} \cdot \left[(v\vec{u} - \mu_t \vec{\nabla} V) P - D_t \vec{\nabla} P \right] - \partial_\varphi \left[\mu_r J P - D_r \partial_\varphi P \right] \quad (5)$$



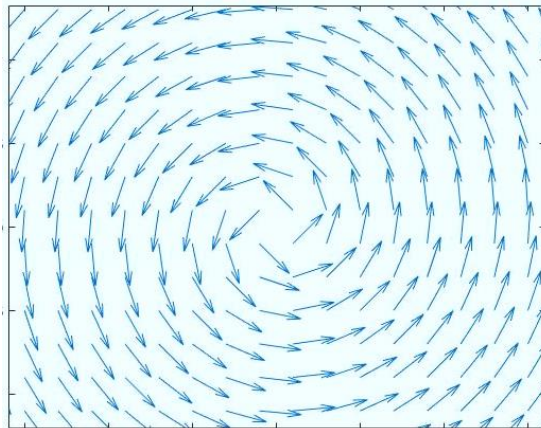
که $P(\vec{r}, \varphi, t)$ تابع توزیع احتمال ذرات است. برای شبیه‌سازی، معادله (۵) را بی‌بعد می‌کنیم:

$$\partial_{\vec{r}} \tilde{P} = -\tilde{\nabla} \cdot [(P_e \vec{u} - \tilde{\nabla} \tilde{V}) \tilde{P} - \tilde{\nabla} \tilde{P}] - \partial_{\varphi} [\tilde{J} \tilde{P} - \partial_{\varphi} \tilde{P}] \quad (۶)$$

کمیت‌های شامل \sim در معادله (۶) کمیت‌های بدون بعد هستند، بنابراین: $\tilde{P} = P/\rho_0$ (که ρ_0 چگالی فضاست)، $\tilde{r} = r/a$ ، $\tilde{J} = J/k_B T$ و $\tilde{V} = V/k_B T$. $P_e = v/aD_r$ نیز عدد پکله شناست.

میدان مغناطیسی دایره‌ای همگن را $\vec{B} = -\frac{y}{r} \hat{i} + \frac{x}{r} \hat{j}$ در نظر گرفته‌ایم (شکل ۲) و $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ فاصله شعاعی از مبدأ مختصات است.

شبیه‌سازی مربوط به معادله (۶)، در حالت پایا، با استفاده از نرم‌افزار کامسول نسخه ۵/۲a انجام گرفته و نمودار مربوط به تابع چگالی جریان احتمال، $\mathcal{P}(x,y) = \int \tilde{P}(x,y,\varphi) d\varphi$ در نرم‌افزار متلب ترسیم شده است. برای حل معادلات در نرم‌افزار کامسول از روش المان محدود استفاده می‌شود. در این روش، معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی با تبدیل به دستگاه معادلات خطی حل می‌شوند.



شکل ۲ نمایش خطوط میدان مغناطیسی دایره‌ای همگن در فضا.

۳. نتایج شبیه‌سازی

شبیه‌سازی در فضایی مکعبی شکل به ضلع $20a$ انجام شد. دمای سیستم را همان دمای اتاق در نظر گرفتیم. در شرایط اولیه فرض کردیم که ذره به صورت یکنواخت در تمام فضا توزیع شده است. محاسبات را برای ذرات کروی به شعاع $a=1 \mu m$ ، با $k_B T = 4/11 \times 10^{-21}$ ، و عدد پکله $P_e = 10$ انجام دادیم. ضریب پخش انتقالی را $D_t \approx 0.2 \mu m^2 s^{-1}$ ، ضریب پخش دورانی را $D_r \approx 0.17 \text{ rad}^2 s^{-1}$ ($\tau_R = D_r^{-1} \approx 6 \text{ s}$)، و ممان مغناطیسی را در زوایای گوناگون (0 و 2π)، $\varphi = 0$ ، $\varphi = \pi/2$ ، $\varphi = \pi$ ، $\varphi = 3\pi/2$ فرض کرده‌ایم. روی مرزهای دور، شرط دیریکله برقرار است. برای تساوی تعداد ذرات ورودی و خروجی در مرزهای بالایی و پایینی جعبه، شرط مرزی دوره‌ای اعمال شده است. در همهٔ وجه‌های مکعب نیز شرط شار صفر برقرار است. معادلهٔ مربوط به شرط شار صفر برابر است با:

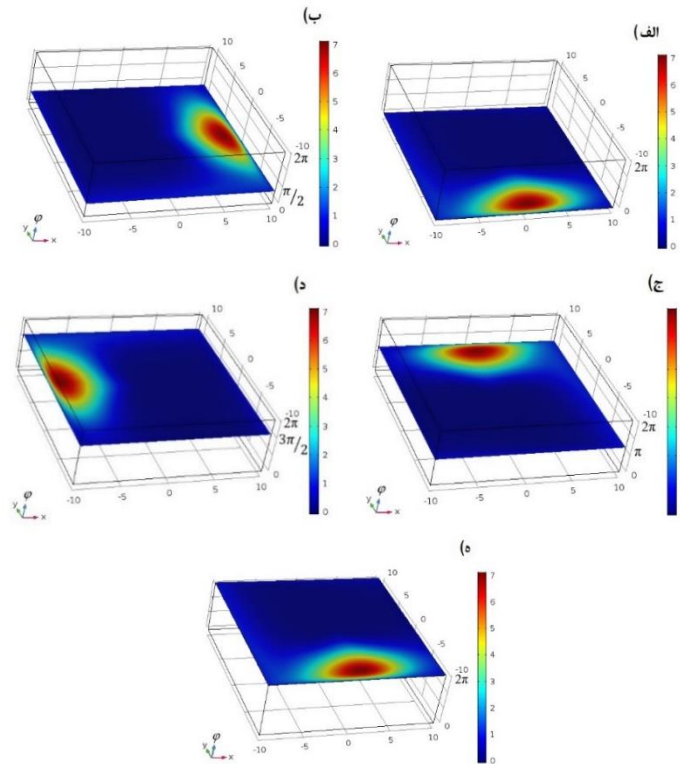
$$-\hat{n} \cdot [-\vec{\nabla} \tilde{P} + (P_e \vec{u} - \vec{\nabla} \tilde{V} + \vec{j} - \partial_\varphi) \tilde{P}] = 0$$

که \hat{n} بردار عمود بر سطح است.

برای بررسی محل تجمع ذرات و حالت نهایی سیستم، معادلات را در حالت پایا حل کردیم. شکل ۳ تابع توزیع احتمال $\tilde{P}(\vec{r}, \varphi)$ را در حالت پایا ($\partial_t \tilde{P} = 0$) و در زوایای مختلف: الف) $\varphi = 0$ ، ب) $\varphi = \pi/2$ ، ج) $\varphi = \pi$ ، د) $\varphi = 3\pi/2$ ، و ه) $\varphi = 2\pi$ نشان می‌دهد. زمان انجام محاسبات، در حالت پایا، در نرم‌افزار شبیه‌سازی کامسول از مرتبهٔ ۳۰ ثانیه است.



۳۱ رفتار ذرات خودران مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی همگن خارجی؛ سونیا محمدحسینی ترامونی و فریناز روشنی



شکل ۳ تابع توزیع احتمال $\tilde{P}(\vec{r}, \varphi)$ در حالت پایا در زوایای مختلف φ : الف) $\varphi = 0$ ، ب) $\varphi = \pi/2$ ، ج) $\varphi = \pi$ ، د) $\varphi = 3\pi/2$ ، و ه) $\varphi = 2\pi$

در زوایای گوناگون φ ، نیروی کل وارد بر ذرات در راستای محورهای X و Y به صورت زیر است:

$$\mathcal{F}_x = \frac{y^2 m \sin \varphi}{r^3} + \frac{xy m \cos \varphi}{r^3} + P_e \cos \varphi \quad (7)$$

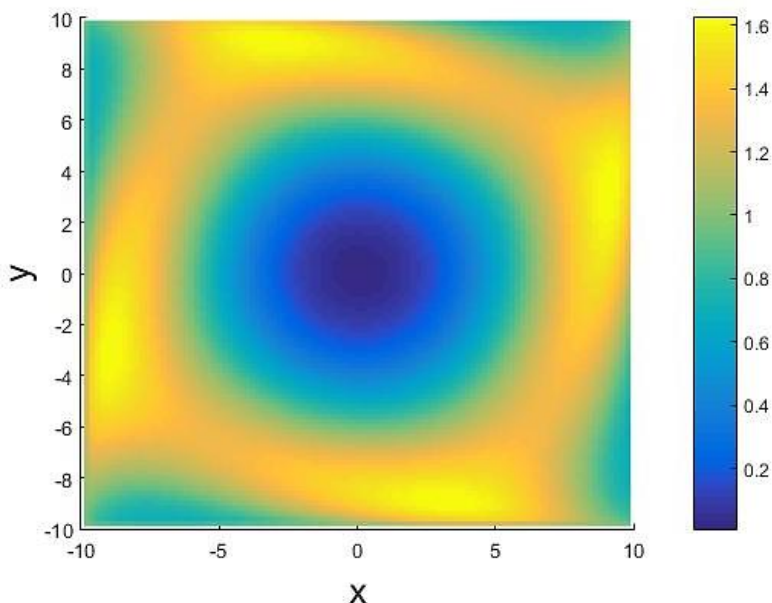
$$\mathcal{F}_y = -\frac{x^2 m \cos \varphi}{r^3} - \frac{xy m \sin \varphi}{r^3} + P_e \sin \varphi \quad (8)$$

برآیند این نیروها موجب می شود که ذرات فعال در زوایای مختلف φ ، در مرز خاصی تجمع کنند.

نمودار دوبعدی مربوط به تابع چگالی جریان احتمال، $\mathcal{P}(X, Y)$ ، در حالت پایا و در حضور میدان مغناطیسی دایره ای همگن، در شکل ۴ نشان داده شده است. همان طور که ملاحظه

می‌شود، ذرات فعال در محیط‌های محدود تحت تأثیر میدان مغناطیسی به سمت مرزها می‌روند و در آن‌جا تجمع می‌کنند و احتمال حضورشان در نقاط نزدیک به مرزها، بیشتر از سایر مکان‌ها در فضا است.

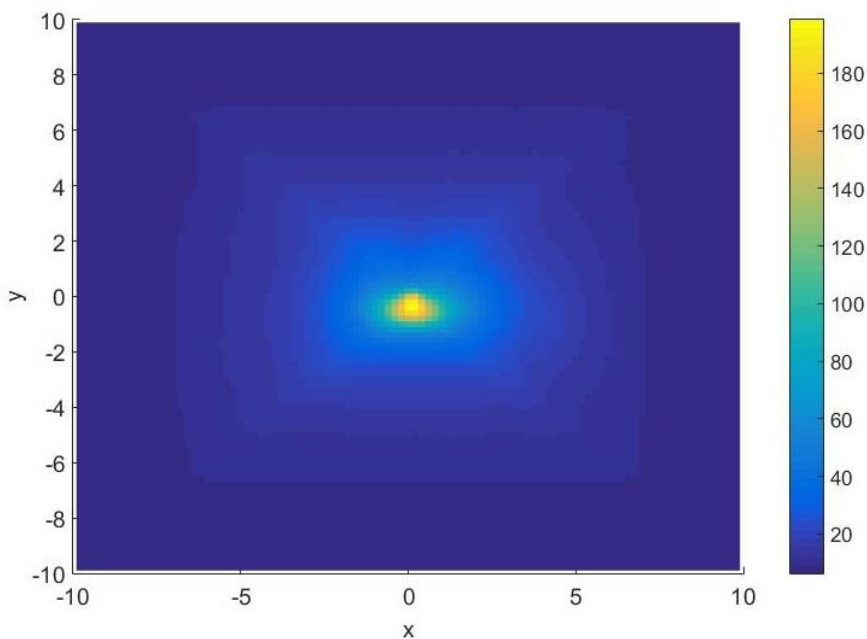
به این ترتیب مشاهده می‌شود که با به‌کارگیری این مدل ساده، توانستیم ذرات کروی مغناطیسی درون یک جعبه را در دمای اتاق، با استفاده از میدان مغناطیسی خارجی روی مرزهای دیواره متمرکز کنیم. بنابراین می‌توان از میدان مغناطیسی برای تمرکز و جداسازی ذرات مغناطیسی در دستگاه‌های آزمایشگاهی بر روی تراشه استفاده کرد.



شکل ۴ تابع چگالی P/P_0 بر حسب x و y ؛ چگالی جریان احتمال حضور ذرات خودران فعال در میدان مغناطیسی دایره‌ای همگن.

حال در همان دمای اتاق، میدان مغناطیسی را به صورت نمایی، $\vec{B} = \exp(r) \hat{i}$ ، در نظر می‌گیریم. نمودار دوبعدی مربوط به تابع چگالی جریان احتمال، $P(x,y)$ ، در حالت پایا و در حضور میدان مغناطیسی نمایی، در شکل ۵ نشان داده شده است. این شکل تأیید می‌کند که ذرات فعال در محیط‌های محدود تحت تأثیر میدان مغناطیسی نمایی به سمت مرکز جعبه می‌روند و در مرکز تجمع می‌کنند.





شکل ۵ تابع چگالی P/P_0 بر حسب x و y ؛ چگالی جریان احتمال حضور ذرات خودران فعال در میدان مغناطیسی نمایی $\vec{B} = \exp(r) \hat{i}$.

۴. نتیجه گیری

مسئله اصلی این پژوهش، بررسی رفتار باکتری‌های مغناطیسی در دمای اتاق و درون یک جعبه مکعب‌شکل در حضور میدان مغناطیسی خارجی است. به منظور ارائه مدلی ساده از این سیستم و بررسی رفتار ذرات خودران کروی در دمای اتاق، از معادله فوکر-پلاتنک، در شرایط مرزی دوره‌ای و بدون شار استفاده کردیم. تابع توزیع احتمال نیز در حالت پایا و تحت تأثیر میدان مغناطیسی دایره‌ای همگن مورد مطالعه قرار گرفته است. میدان مغناطیسی روی رفتار سیستم ذرات اثر می‌گذارد و منجر به حرکت و تجمع ذرات خودران در مرزها می‌شود. اگر میدان مغناطیسی به صورت نمایی در نظر گرفته شود، در حالت پایا، ذرات خودران در مرکز تجمع می‌کنند. به این ترتیب، با انتخاب نوع میدان، می‌توان ذرات را به سمت مرکز جعبه و یا مرزها هدایت، و محل تجمع ذرات خودران را به طور مناسبی

کنترل کرد. مدل‌هایی از این نوع، زمینه را برای درک بهتر سازوکار کنترل مسیر و موقعیت ذرات در کاربردهای صنعتی و بیولوژیکی فراهم می‌کند.

۵. تقدیر و تشکر

نویسندگان از دانشگاه الزهراء تشکر می‌کنند.

منابع

- [1] Wang W., Duan W., Ahmed S., Mallouk T. E., and Sen A., Small power: Autonomous nano- and micromotors propelled by self-generated gradients, *Nano Today*, **8** (5):531 2013.
- [2] Brambilla M., Ferrante E., Birattari M., and Dorigo M., Swarm robotics: a review from the swarm engineering perspective, *Swarm Intelligence*, **7** (1):1 2013.
- [3] Khadem S.M.J. and Klapp Sabine H.L., Delayed feedback control of active particles: a controlled journey towards the destination. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 13776, 2019.
- [4] Golestanian R., Collective Behavior of Thermally Active Colloids, *Phys. Rev. Lett.*, (3):038303, 2012.
- [5] Stenhammar J., Wittkowski R., Marenduzzo D., and Cates M.E., Activity-Induced Phase Separation and Self-Assembly in Mixtures of Active and Passive Particles, *Phys. Rev. Lett.*, **114** (1):018301, 2015.
- [6] Sokolov A., Aranson I.S., Kessler J.O., Goldstein R.E., Concentration dependence of the collective dynamics of swimming bacteria, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 158102, 2007.
- [7] Palacci J., Sacanna S., Steinberg A.P., Pine D.J., Chaikin P.M., Living crystals of light-activated colloidal surfers, *Science*, **339**, 936, 2013.
- [8] Fodor E., Guo M., Gov N.S., Visco P., Weitz D.A., van Wijland F., Activity-driven fluctuations in living cells, *Europhys. Lett.* **110**, 48005, 2015.
- [9] Turlier H., Fedosov D.A., Audoly B., Auth T., Gov N.S., Sykes C., Joanny J.-F., Gompper G., Betz T., Equilibrium physics breakdown reveals the active nature of red blood cell flickering, *Nat. Phys.* Online, 2016.
- [10] Lavrentovich O.D., Active colloids in liquid crystals, *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, **21**, 97-109, 2016.
- [11] Bechinger C., Di Leonardo R., Lowen H., Reichhardt C., Volpe G., and Volpe G., Active particles in complex and crowded environments, *Rev. Mod. Phys.*, **88** (4):045006, 2016.
- [12] Selmke M., Khadka U., Bregulla A.P., Cichos F., and Yang H., Theory for controlling individual self-propelled micro-swimmers by photon nudging I: directed transport, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 10502, 2018.
- [13] Rahimi Tabar M.R., Analysis and Data-Based Reconstruction of Complex Nonlinear Dynamical Systems: Using the Methods of Stochastic Processes, Springer, Switzerland, 2019.
- [14] Sau Fa K., Langevin equation with time dependent linear force and periodic load force: Stochastic resonance, *Eur. J. Phys.* 2017.
- [15] Duan J., An Introduction to Stochastic Dynamics, Cambridge University Press, New York, 2015.
- [16] Snook I., The Langevin and Generalized Langevin Approach to the Dynamics of Atomic, Polymeric and Colloidal Systems, Elsevier, Amsterdam, 2007.



- [17] Pavliotis G.A., *Stochastic Processes and Application: Diffusion Processes, the Fokker-Planck and Langevin Equations*, Springer, New York, 2014.
- [18] Leimkuhler B., Matthews C., *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*, Springer, 2015.
- [19] Carmona P., Existence and uniqueness of an invariant measure for a chain of oscillators in contact with two heat baths, *Stochastic Process. Appl.* **117** (8), 1076-1092, 2007.
- [20] Schweitzer F., An agent-based framework of active matter with applications in biological and social systems, *Eur. J. Phys.* 2018.