<u>Exercício 8</u>: Equações diferenciais ordinárias (parte 2)

Deve ser entregue relatório em duas semanas.

1. **Cinética das transições de fase:** considere um sistema cujo estado pode ser descrito por um parâmetro de ordem escalar ϕ: Se $\phi = 0$, digamos que o sistema é desordenado, e se $\phi \neq 0$ —ordenado. Suponha que a densidade de energia livre do sistema seja:

$$F(\phi) = \frac{a(T)}{2}\phi^2 - \frac{b}{3}\phi^3 + \frac{c}{4}\phi^4 - H\phi, \qquad (1)$$

onde $a(T),\ b > 0,\ c > 0$ são parâmetros fenomenológicos que caracterizam o sistema, e H descreve um campo externo que promove a ordem no sistema. Suponhamos que $a(T)$ depende de temperatura T. O valor do parâmetro de ordem no equlibrio termico ϕ_{eq} coresponde para o mínimo global de energia livre F. Quando $h = 0$, o sistema está num estado desordenado, $\phi_{eq} = 0$, para $a(T) > 0$ e num estado ordenado, $\phi_{eq} \neq 0$, para $a(T) < 0$. Uma transição quando ϕ muda seu valor de zero para um valor diffeerente de zero chama-se uma transição para a fase ordenada. A cinética desta transição ê caraterisada pelo uma funçâo $\phi(t)$: o valor de parâmetro de ordem no tempo t. Em certas condições, esta função satisfaz a equação diferencial (o chamado Modelo A)

$$\phi'(t) = -\Gamma\frac{\partial F}{\partial \phi} \qquad (2)$$

onde Γ é a taxa de relaxamento do parâmetro de ordem.

   a. Determine os pontos ϕ_{eq} do mínimo global de energia livre (1) para $a = -2,\ b = 1,\ c = 1,\ H = 0$.
   b. Implemente o método de Runge-Kutta da 4ª ordem. Para a condição inicial $\phi(0) = 0$ resolva (2) numericamente usando $\Gamma = 1,\ a = -2,\ b = 1,\ c = 1,\ H = 0.001$, no intervalo $t \in (0,6]$ com passos $h = \{0.3, 0.1, 0.03\}$. Trace os gráficos dos soluções $\phi(t)$ para cada h. Resolva (2) no Mathematica com a função NDSolve, e trace o gráfico $\phi(t)$ com a função Plot.
   c. Resolva (2) numericamente usando o método de Euler progressivo, para $\phi(0) = 0$ no intervalo $t \in (0,6]$ com passos $h = \{0.3, 0.1, 0.03\}$. Utiliza os mesmos valores de parâmetros $\Gamma,\ a,\ b,\ c,\ H$ como em 1.a. Trace os gráficos dos soluções $\phi(t)$ para cada h e compara com 1.a. Discuta as diferenças.

2. **Dinâmica de população em ambiente confinado:** o número de indivíduos $n(t)$ no tempo t em ambiente confinado é modelado como

$$n'(t) = r\,n(t)\left(1 - \frac{n(t)}{B}\right) \qquad (3)$$

onde B é o número máximo de indivíduos que podem coexistir neste ambiente, e r é a taxa de crescimento inicial. $n(t) = \frac{Be^{rt+\log\left(\frac{1}{B-1}\right)}}{1+e^{rt+\log\left(\frac{1}{B-1}\right)}}$ é solução do (3) com $n(0) = 1$.

   a. Implemente o método de Runge-Kutta da 4ª ordem. Para a condição initial $n(0) = 1$ resolva (3) numericamente para $r = 1$, no intervalo $t \in (0,5]$ com passos $h = \{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}, \frac{1}{16}, \frac{1}{32}, \frac{1}{64}\}$. Verifique numericamente que a convergência é de ordem 4 em h.