

Projecto de Simulação

Computação e Programação (LEMat, LEQ)
Departamento de Matemática, IST

O objectivo deste projecto é estudar a produção de um certo produto químico em função do tempo, utilizando a simulação discreta estocástica, implementada em *Python*.

Para tal considera-se um sistema simplificado de produção química no qual dois reagentes, P e Q, interagem para produzir um produto R. Por exemplo, P e Q são átomos diferentes, e R é uma molécula. As reacções que podem ocorrer são as seguintes:

- Reacção 1: $P + Q \rightarrow R$
- Reacção 2: $2R \rightarrow 2P + 2Q$

Do ponto de vista geométrico, consideramos o recipiente onde ocorre a produção química como uma grelha bidimensional, de lado L . Os átomos P e Q, e as moléculas R, estão presentes em células dessa grelha. No total existem $L \times L = L^2$ células (cf. Fig. 1).

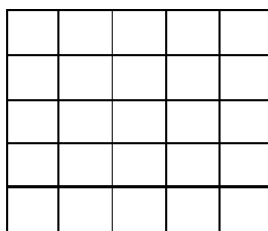


Fig. 1 – Exemplo de grelha de lado $L = 5$, contendo $L^2 = 25$ células.

As partículas presentes em cada célula deslocam-se livre e aleatoriamente para outra célula.

As reacções ocorrem quando as espécies relevantes estão na mesma célula, seguindo a ordem das reacções 1 a 2 indicadas acima.

Adicionalmente, considera-se ainda os eventos de adicionar reagentes (átomos P e Q) à mistura, e de extracção de produto (moléculas R).

A simulação é constituída pelos seguintes passos:

1. Inicialização do sistema: O sistema é inicializado com N_P átomos de P, e N_Q átomos de Q, colocados aleatoriamente, segundo distribuição uniforme, no recipiente;

2. Evolução do sistema: O sistema evolui até ser atingido o tempo limite de simulação T_S , por ocorrência dos seguintes tipos de eventos:

2.1. Deslocamento global: o tempo entre deslocamentos globais é uma variável aleatória com distribuição exponencial de valor médio T_D . Cada deslocamento global consiste no conjunto dos deslocamentos individuais de cada um dos átomos P e Q, e das moléculas R, segundo as direcções $d = x, y$. Cada partícula move-se Δd na direcção d , onde Δd é um número aleatório (obtido uniformemente) tal que: $-K \leq \Delta d \leq +K$, para cada uma das direcções $d = x, y$, onde K é o

limite de deslocamento. Em caso de contacto com as paredes do recipiente, as partículas são reflectidas na direcção oposta (de forma elástica);

2.2. Reacção global: o tempo entre reacções globais é uma variável aleatória com distribuição exponencial de valor médio T_{Rea} . Cada reacção global consiste no conjunto das reacções em cada célula nesse instante. Em cada célula ocorrem as reacções 1 a 2 descritas acima, por essa ordem, se e enquanto as partículas presentes na célula o permitirem.

2.3. Adição de reagentes: Este evento ocorre quando, simultaneamente, a percentagem de cada um dos reagentes no recipiente é inferior a 50% do seu valor inicial. O tempo de adição de novos reagentes P e Q é um número aleatório obtido uniformemente entre 0 e T_A , o tempo máximo de adição. Em cada adição de reagentes, são inseridos $N_P / 2$ átomos de P, e $N_Q / 2$ átomos de Q, aleatoriamente nas células que constituem o perímetro da grelha, segundo distribuição uniforme.

2.4. Extracção do produto: Este evento ocorre apenas quando o número de moléculas de R no contentor ultrapassa um limiar N_E . O tempo de extracção do produto é um número aleatório obtido uniformemente entre 0 e T_E , o tempo máximo de saída. Quando ocorre este evento, são extraídas todas as moléculas de R que se encontram no quadrante inferior esquerdo da grelha.

3. Observação do resultado: O simulador deve produzir como *output*:

- Um gráfico que mostre a evolução da quantidade de P, Q, e R no recipiente desde o tempo 0 até ao tempo T_S (cf. exemplo na Fig. 2)
- Os valores da quantidade total de átomos P consumidos, átomos Q consumidos, e moléculas de R extraídas do recipiente.

Instruções para desenvolver o simulador:

O simulador deve ser desenvolvido seguindo o método da programação modular por camadas centrado nos dados.

1. Comece por identificar os tipos de dados relevantes (incluindo a grelha bidimensional, os eventos, e a CAP), e desenvolva os respectivos módulos;
 2. Desenvolva o simulador sobre a camada que disponibiliza estes tipos de dados;
 3. Considere o seguinte conjunto de dados, apresentando os respectivos resultados, e indicando explicitamente que se trata dos resultados para o conjunto de dados fornecido pelo enunciado:
- $L = 8$ – Número de células num lado da grelha bidimensional onde decorre a simulação.
 - $N_P = 120$ – Número inicial de átomos de P.
 - $N_Q = 90$ – Número inicial de átomos de Q.
 - $N_E = 50$ – Limiar a partir do qual se começa a remover moléculas de R.
 - $T_S = 2$ – Tempo total de simulação.
 - $T_D = 1$ – Tempo médio entre deslocamentos globais
 - $K = 2$ – Limite de cada deslocamento individual, em cada direcção.
 - $T_{Rea} = 3$ – Tempo médio de reacção.
 - $T_A = 0.1$ – Tempo máximo de adição.
 - $T_E = 1$ – tempo máximo de extracção.

Exemplo de resultados:

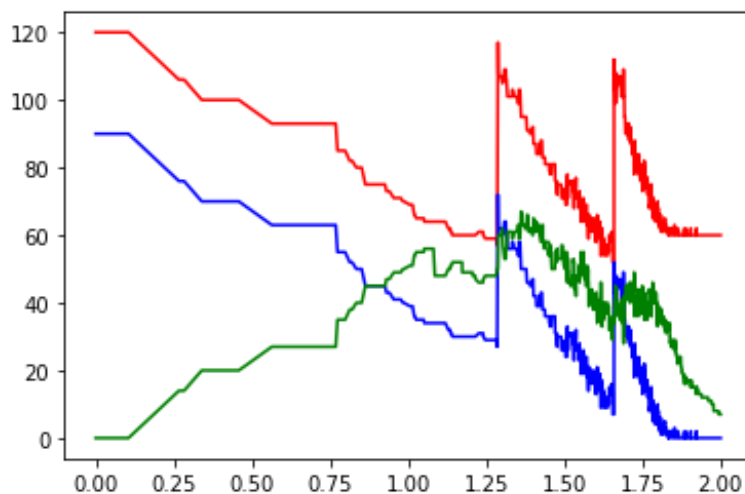


Fig. 2 – Quantidade de átomos P (curva vermelha), de átomos Q (curva azul), e de moléculas R (curva verde) em função do tempo.

Neste processo simulado, foram consumidos 240 átomos de P, 180 de Q, e extraídas do recipiente 173 moléculas de R.

4. Experimente também o simulador com outros conjuntos de dados à sua escolha, apresentando os respectivos resultados.

Entrega do projeto:

O projecto é entregue através do sistema Fenix, após a inscrição do respectivo grupo na plataforma. A entrega deve consistir **num único ficheiro** (zip ou rar) contendo:

- o simulador;
- os módulos;
- um relatório explicando as principais opções tomadas para a implementação dos módulos e do simulador, **incluindo exemplos que ilustrem e permitam analisar o comportamento das funções dos módulos e do simulador propostos**. O relatório deve indicar explicitamente o **número do grupo**, e o nome e número dos alunos que o constituem.

Formato dos ficheiros:

- o simulador e os módulos devem ser desenvolvidos em ficheiros IPYNB ou PY, **e cada um deles apresentado também no formato PDF ou HTML**.
- o relatório pode ser feito em processador de texto (submetido em PDF) ou no Jupyter (submetido em IPYNB, mas nesse caso **também** em PDF ou HTML).