Victor Sacek IAG/USP

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

Equação de difusão

Dedução em 1-dimensão

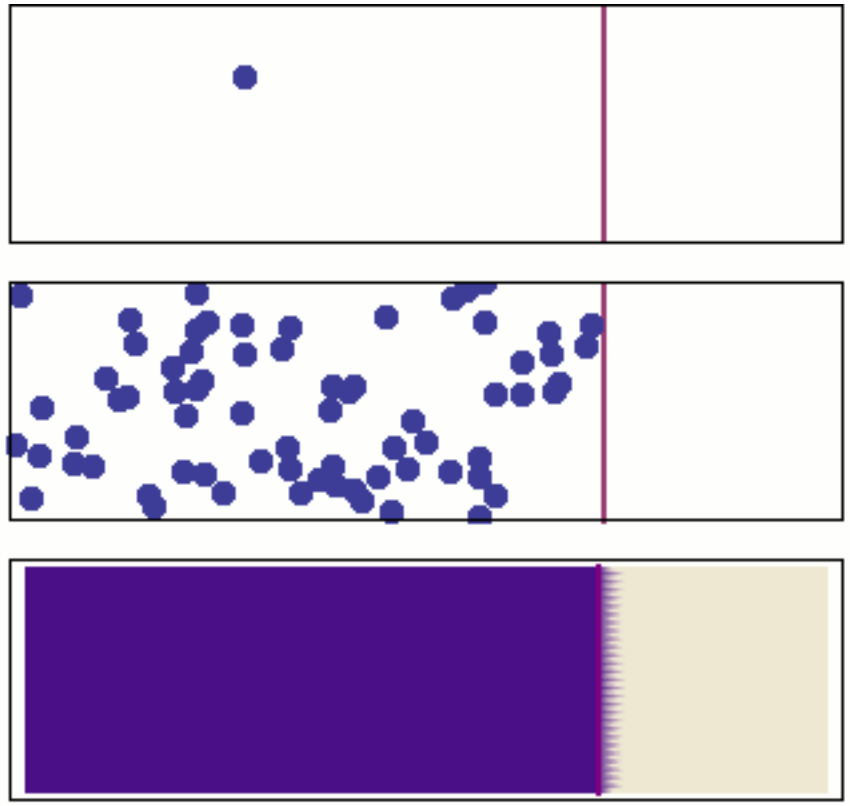
O que é difusão

Photo: Rainer Knäpper, Free Art License (http://artlibre.org/licence/lal/en/), https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diffusion_v2_20101120.ogv

Difusão

- É um processo de transporte de massa ou de energia que ocorre em regiões onde existem diferenças de concentração. O transporte por difusão dá-se de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração.

- O transporte por difusão é quantificado pela densidade de fluxo ϕ, que é a quantidade de substância ou energia transportada por unidade de área por unidade de tempo.



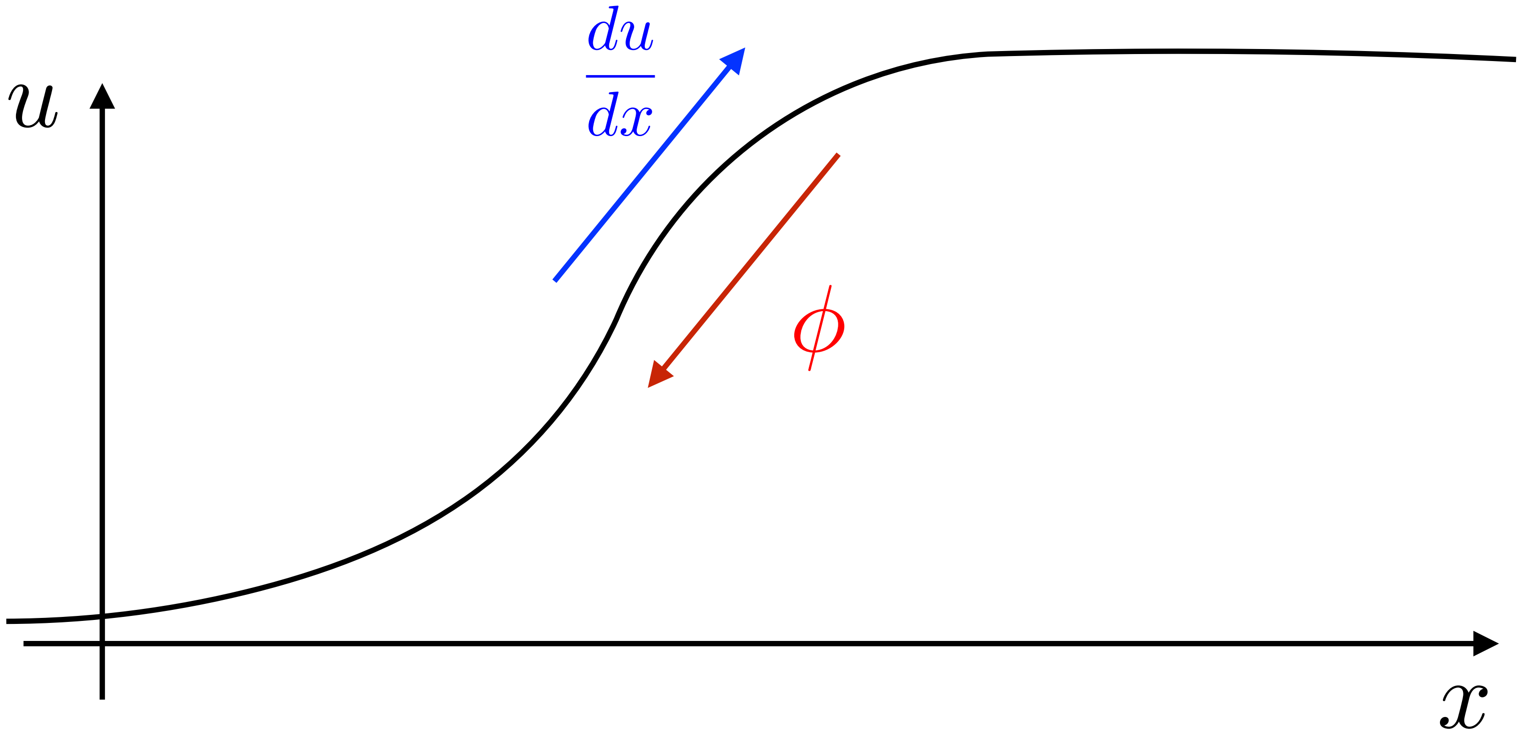
https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion

Primeira Lei de Fick

Adolf Fick (1829–1901)
https://en.wikipedia.org/wiki/Adolf_Eugen_Fick

- Para muitos problemas físicos, a difusão segue a primeira lei de Fick, em que o fluxo é proporcional à variação da concentração e ocorre no sentido contrário a concentração.

- Em 1D:



$$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

Densidade de fluxo

O transporte de massa ou de energia é quantificado pela densidade de fluxo.

A densidade de fluxo ϕ é a quantidade de material ou energia que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo.

Por exemplo, se a concentração é dada em kg/m^3, a densidade de fluxo é expressa em kg/m^2/s:

δM	$u = \dfrac{\delta M}{\delta V}$	$\phi = \dfrac{\delta M}{A \delta t}$
[kg]	[kg/m^3]	[kg/m^2/s]
Quantidade de matéria	Concentração	Densidade de fluxo

$$\phi = \frac{\delta M}{A\delta t}$$

[kg/m²/s]

Densidade
de fluxo

$$u = \frac{\delta M}{\delta V}$$

[kg/m³]

Concentração

$$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

$$\alpha$$

[m²/s]

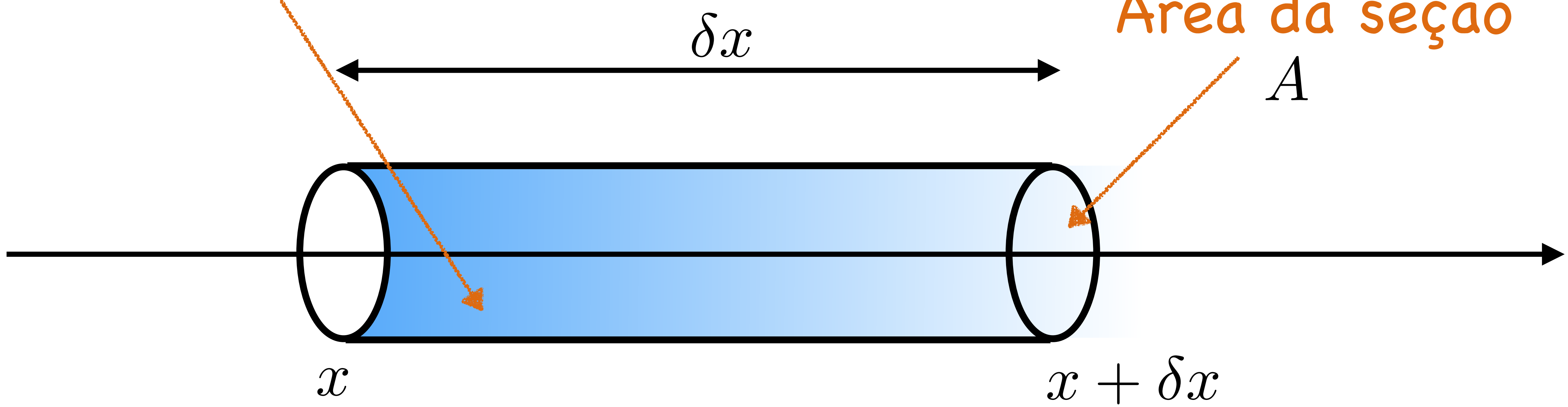
Difusividade

Dedução

$$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

Concentração u variável no tempo e no espaço

Área da seção A



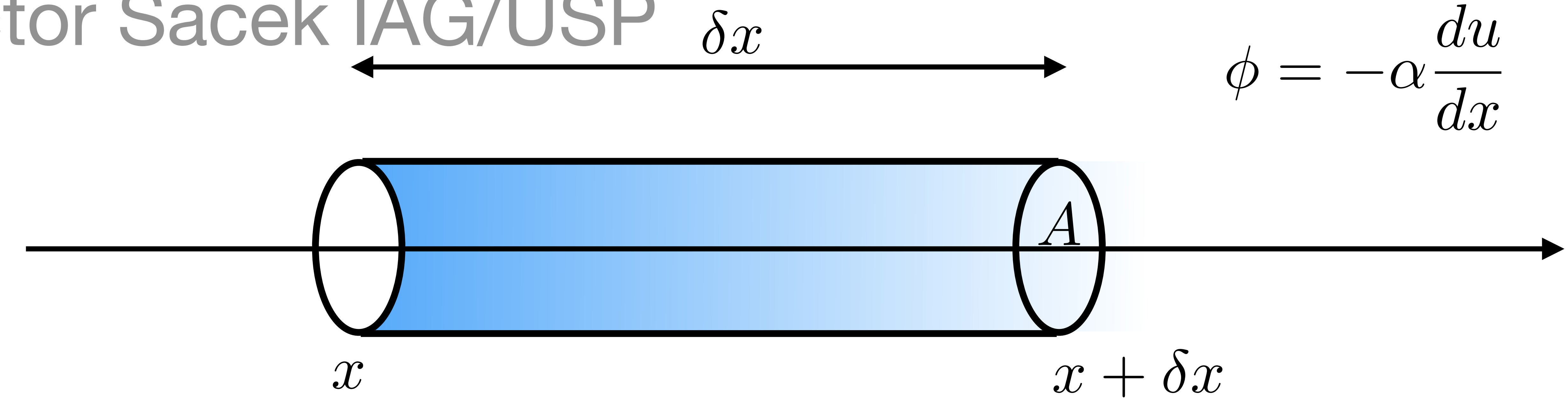
Volume: $\delta V = A \delta x$

No instante t:

Fluxo em x: $$\phi(x) = -\alpha \frac{du(x,t)}{dx}$$

Fluxo em $x + \delta x$: $$\phi(x+\delta x) = -\alpha \frac{du(x+\delta x, t)}{dx}$$

$$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$



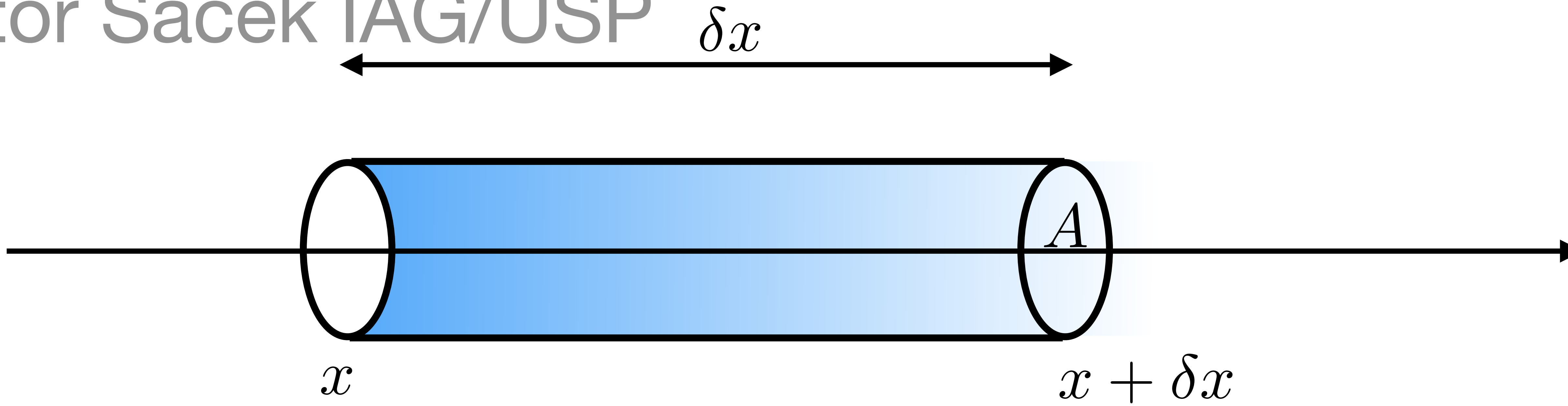
$$\phi(x) = -\alpha \frac{du(x,t)}{dx} \qquad \phi(x+\delta x) = -\alpha \frac{du(x+\delta x, t)}{dx}$$

Entre os instantes t e $t + \delta t$, uma certa quantidade de substância entra no volume em x e outra quantidade sai em $x + \delta x$

Entrada em x: $\phi(x) A \delta t$

Saída em $x + \delta x$: $\phi(x + \delta x) A \delta t$

Variação total de substância:
$$\begin{aligned} \delta M &= \phi(x) A \delta t - \phi(x+\delta x) A \delta t \\ &= [\phi(x) - \phi(x+\delta x)] A \delta t \end{aligned}$$

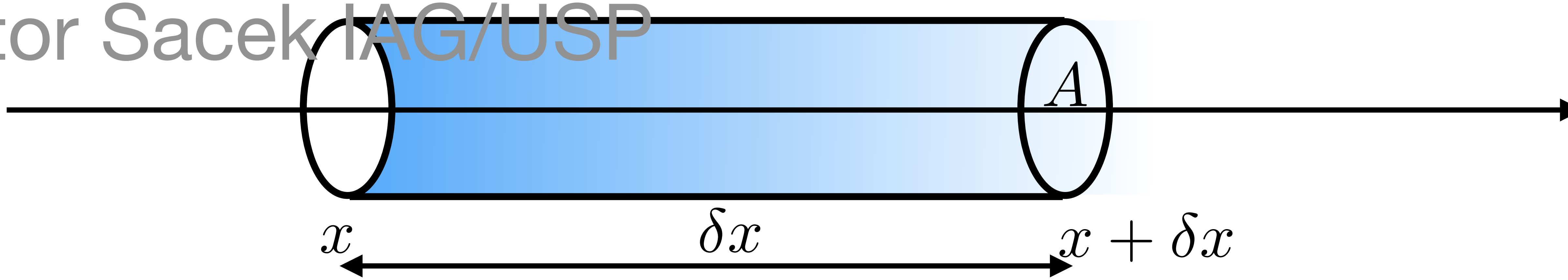


Quantidade total de substância no instante t

$$M(t) = \delta V \frac{u(x,t) + u(x+\delta x, t)}{2}$$

Quantidade total de substância no instante $t + \delta t$

$$M(t+\delta t) = \delta V \frac{u(x,t+\delta t) + u(x+\delta x, t+\delta t)}{2}$$



Pela conservação de massa temos:

$$\delta M = M(t+\delta t) - M(t)$$

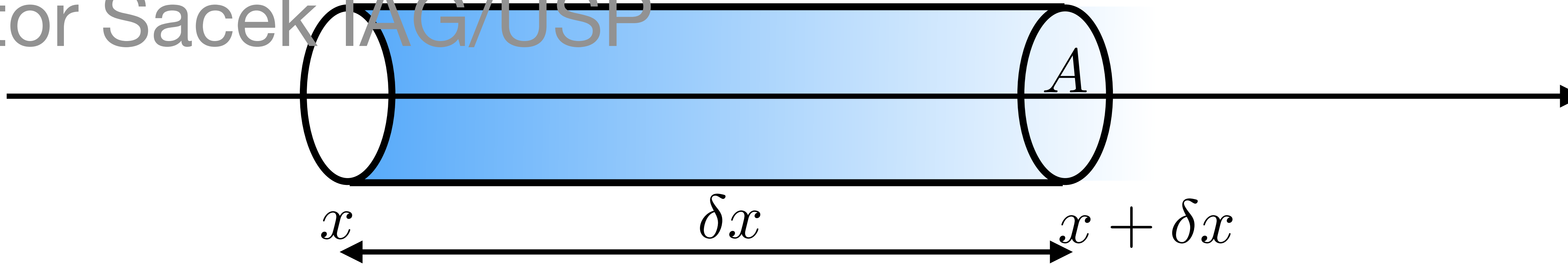
$$[\phi(x) - \phi(x+\delta x)]A\delta t =$$

$$\delta V \left[\frac{u(x,t+\delta t) + u(x+\delta x, t+\delta t)}{2} - \frac{u(x,t) + u(x+\delta x, t)}{2} \right]$$

Como $\phi(x) = -\alpha \dfrac{du(x,t)}{dx}$ e $\phi(x+\delta x) = -\alpha \dfrac{du(x+\delta x, t)}{dx}$

$$\alpha \left[\frac{du(x+\delta x, t)}{dx} - \frac{du(x,t)}{dx} \right] A\delta t =$$

$$A\delta x \left[\frac{u(x,t+\delta t) + u(x+\delta x, t+\delta t)}{2} - \frac{u(x,t) + u(x+\delta x, t)}{2} \right]$$

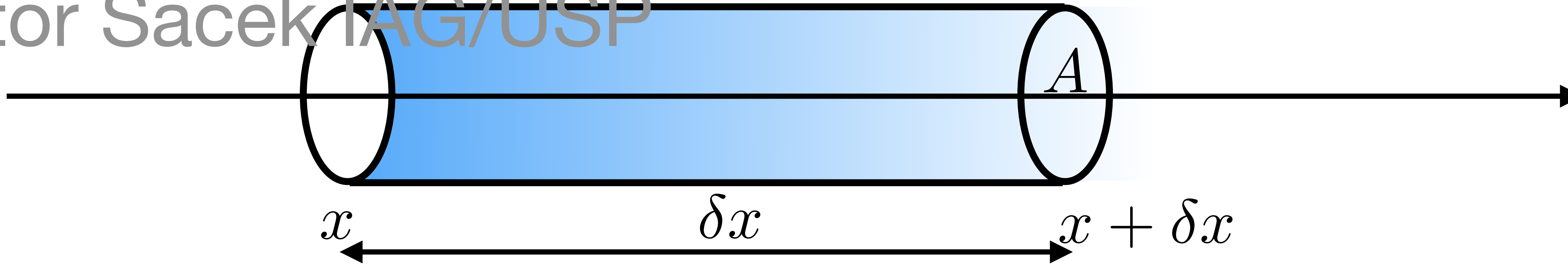


$$\alpha\left[\frac{du(x+\delta x,t)}{dx}-\frac{du(x,t)}{dx}\right]A\delta t =$$

$$A\delta x\left[\frac{u(x,t+\delta t)+u(x+\delta x,t+\delta t)}{2}-\frac{u(x,t)+u(x+\delta x,t)}{2}\right]$$

$$\alpha\frac{\left[\frac{du(x+\delta x,t)}{dx}-\frac{du(x,t)}{dx}\right]}{\delta x}=$$

$$\left[\frac{u(x,t+\delta t)-u(x,t)}{2\delta t}+\frac{u(x+\delta x,t+\delta t)-u(x+\delta x,t)}{2\delta t}\right]$$



$$\alpha \frac{\left[\frac{du(x+\delta x,t)}{dx} - \frac{du(x,t)}{dx}\right]}{\delta x} =$$

$$\left[\frac{u(x,t+\delta t) - u(x,t)}{2\delta t} + \frac{u(x+\delta x,t+\delta t) - u(x+\delta x,t)}{2\delta t}\right]$$

Para $\delta t \to 0$ e $\delta x \to 0$

$$\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial t}$$

$$\boxed{\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t}}$$

Equação de difusão

Victor Sacek IAG/USP

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

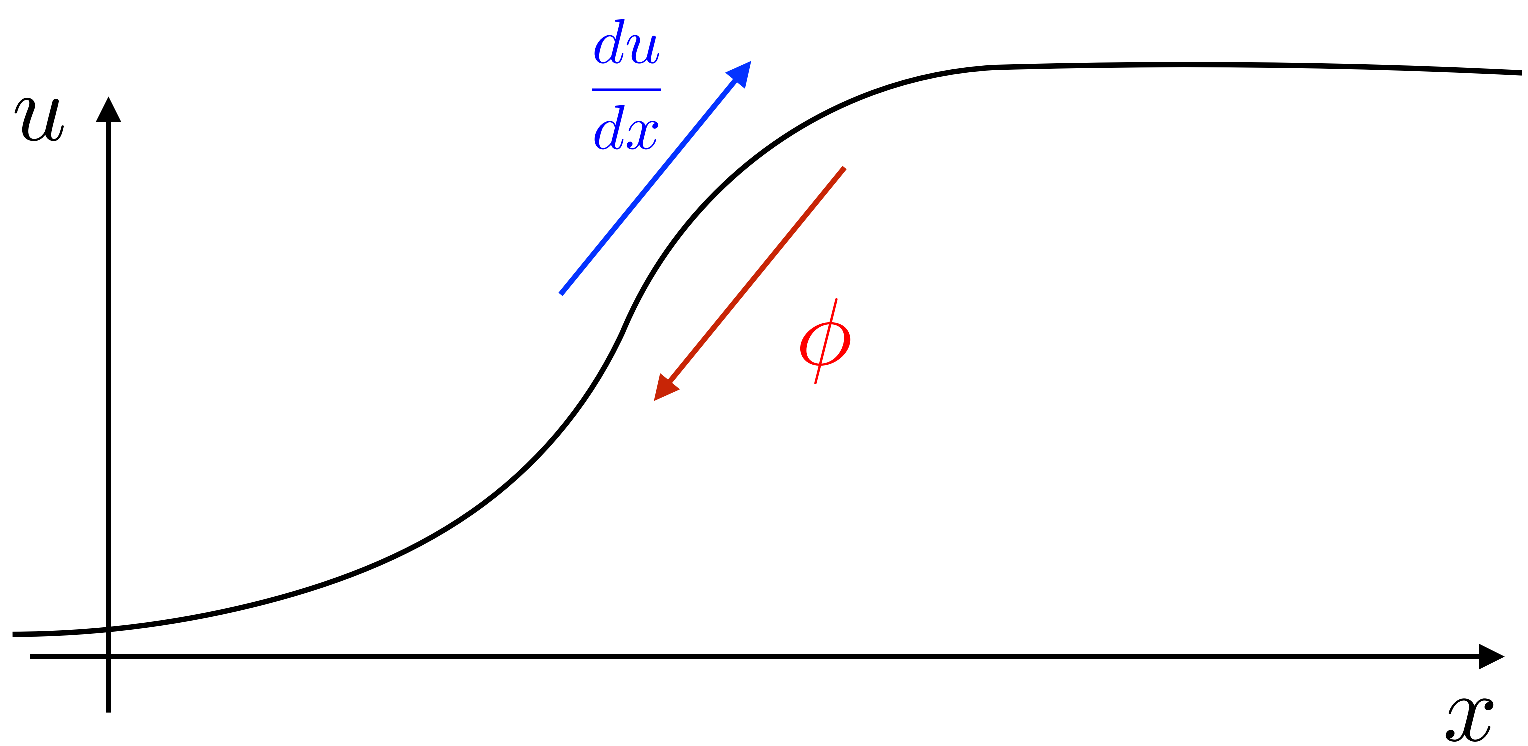
Equação de difusão

Dedução da equação em n-dimensões

Primeira Lei de Fick

- Para muitos problemas físicos, a difusão segue a primeira lei de Fick, em que o fluxo é proporcional ao gradiente da concentração e ocorre no sentido contrário a concentração.

- Em 1D:

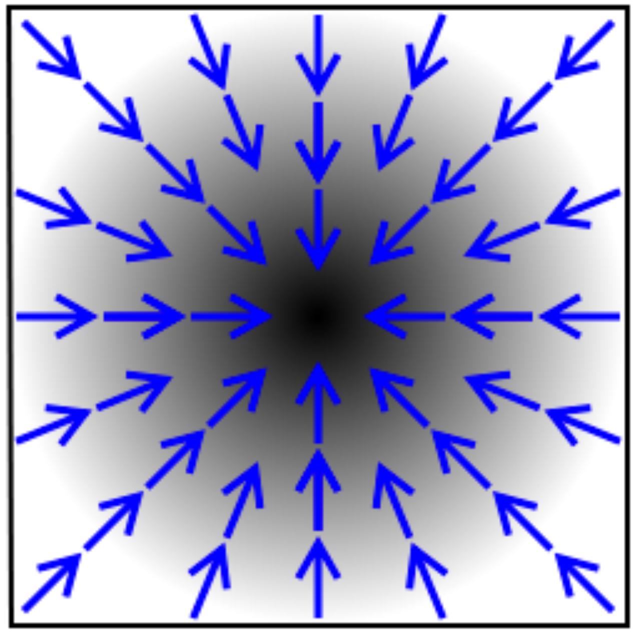


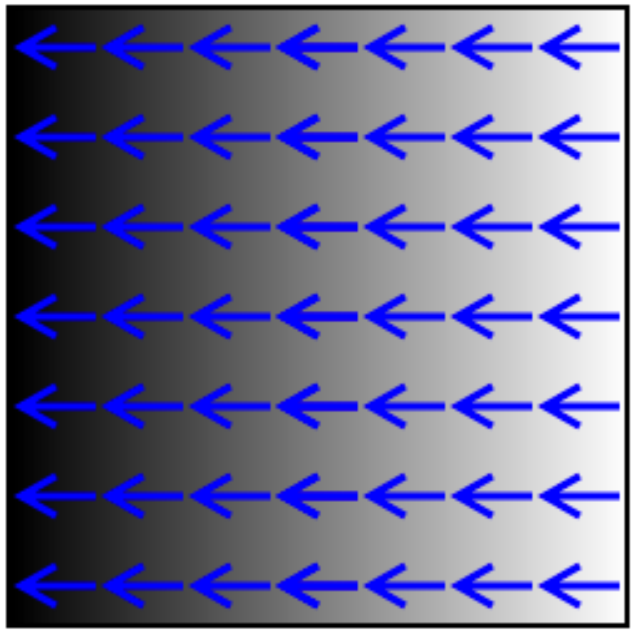
$$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

Primeira Lei de Fick

Em 1D: $$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

Em *n*-D: $$\vec{\phi} = -\alpha \nabla u$$





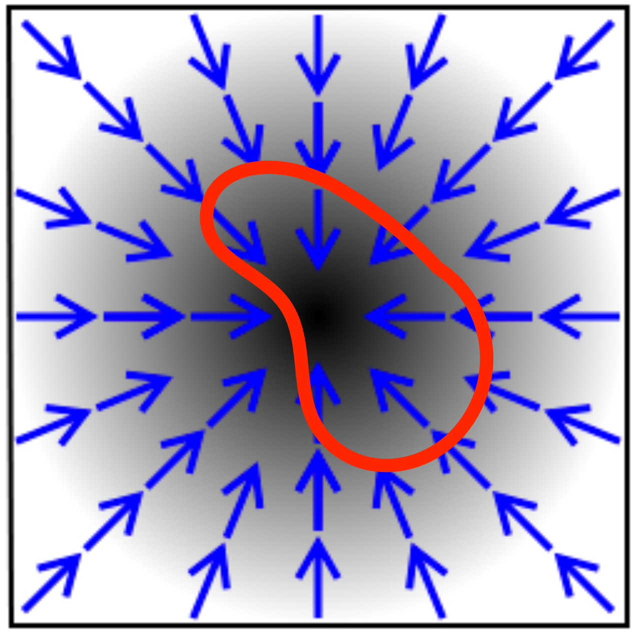
∇u: gradiente de *u*

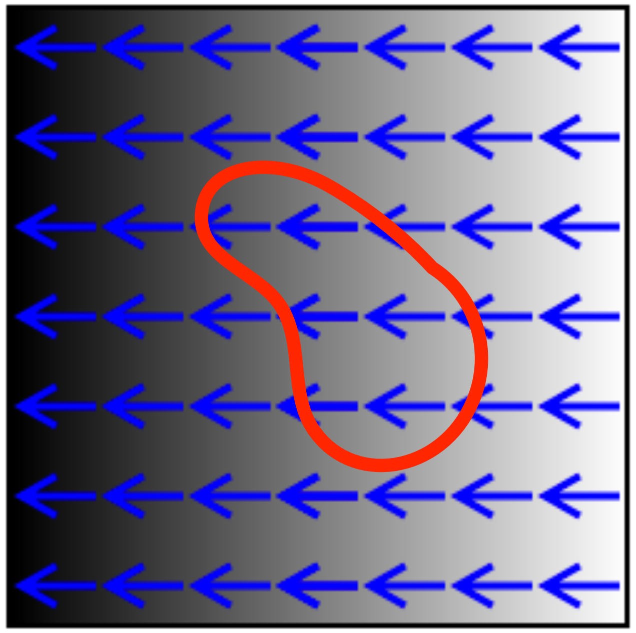
Em 2D: $$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial u}{\partial y}\mathbf{j}$$

Em 3D: $$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial u}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial u}{\partial z}\mathbf{k}$$

Variação de *u* em um certo volume (3D) ou área (2D)

$$Q = \int_V u \; dV$$





$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\int_V u \; dV = \int_V \frac{\partial u}{\partial t} dV = -\oint_S \vec{\phi}\cdot\vec{n} dS$$

Dedução da equação de difusão

$$\int_V \frac{\partial u}{\partial t}\, dV = -\oint_S \vec{\phi}\cdot\vec{n}\, dS$$

teorema do divergente

$$\int_V \frac{\partial u}{\partial t}\, dV = -\int_V \nabla\cdot\vec{\phi}\, dV$$

$\nabla\cdot\vec{\phi}$: divergente de $\vec{\phi}$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla\cdot\vec{\phi}$$

Em 2D: $$\nabla\cdot\vec{\phi} = \frac{\partial \phi_x}{\partial x} + \frac{\partial \phi_y}{\partial y}$$

Em 3D: $$\nabla\cdot\vec{\phi} = \frac{\partial \phi_x}{\partial x} + \frac{\partial \phi_y}{\partial y} + \frac{\partial \phi_z}{\partial z}$$

Dedução da equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{\phi}$$ como $\vec{\phi} = -\alpha \nabla u$ $$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla u)$$

Se α é constante $$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

$\nabla^2 u$: laplaciano de u

Em 2D: $\nabla^2 u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$

Em 3D: $\nabla^2 u = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial z^2}$

Equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)$$

2D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

3D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

Victor Sacek IAG/USP

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

Equação de difusão

Soluções analíticas

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Utilizando-se o método de separação de variáveis temos:

$$u(x,t) = X(x) \cdot T(t) \qquad (1)$$

Substituindo (1) na equação de difusão:

$$X(x)T'(t) = \alpha T(t) X''(x)$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$X(x)T'(t) = \alpha T(t)X''(x)$$

$$\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C \qquad (2)$$

Constante de separação de variável

A equação (2) tem soluções de forma diversa dependendo se

$C > 0$, $C = 0$ ou $C < 0$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C > 0$:

Assumindo que $C = \lambda^2$, sendo λ um número real não nulo

Temos que

$$\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \lambda^2$$

$$T' - \lambda^2 \alpha T = 0$$

Busca-se uma solução da forma $T(t) = e^{pt}$ para esta EDO homogênea.

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C > 0$:

$$T' - \lambda^2 \alpha T = 0$$

$$T(t) = e^{pt} \qquad T'(t) = pe^{pt}$$

$$pe^{pt} - \lambda^2 \alpha e^{pt} = 0$$

$$e^{pt}\left(p - \lambda^2 \alpha\right) = 0$$

$$p = \lambda^2 \alpha$$

Assim uma solução geral seria dada por:

$$T(t) = e^{\lambda^2 \alpha t}$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C > 0$:

$$\frac{X''}{X} = \lambda^2 \;\; \rightarrow X'' - \lambda^2 X = 0$$

Busca-se, novamente, uma solução da seguinte forma: $X(x) = e^{qx}$

$$q^2 e^{qx} - \lambda^2 e^{qx} = 0 \rightarrow \; e^{qx}\left(q^2 - \lambda^2\right) = 0 \;\; \rightarrow \;\; q = \pm\lambda$$

Temos assim duas soluções particulares: $X_1(x) = e^{\lambda x}$ e $X_2(x) = e^{-\lambda x}$

tal que a solução geral pode ser dada por:

$$X(x) = \gamma e^{\lambda x} + \theta e^{-\lambda x}$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C > 0$:

$$X(x) = \gamma e^{\lambda x} + \theta e^{-\lambda x}$$

$$T(t) = e^{\lambda^2 \alpha t}$$

$$u(x,t) = X(x) \cdot T(t) \qquad (1)$$

$$u(x,t) = \left(\gamma e^{\lambda x} + \theta e^{-\lambda x}\right) e^{\lambda^2 \alpha t}$$

Porém esta não é uma função limitada

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C < 0$:

Assumindo que $C = -\lambda^2$, sendo λ um número real não nulo

Temos que

$$\frac{1}{\alpha}\frac{T'}{T} = -\lambda^2 \quad \rightarrow T' + \alpha\lambda^2 T = 0$$

$$T(t) = e^{pt} \qquad\qquad T'(t) = pe^{pt}$$

$$pe^{pt} + \alpha\lambda^2 e^{pt} = 0 \rightarrow e^{pt}\left(p + \alpha\lambda^2\right) = 0 \quad \rightarrow p = -\alpha\lambda^2$$

$$T(t) = e^{-\alpha\lambda^2 t}$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C < 0$:

$$\frac{X''}{X} = -\lambda^2 \;\; \rightarrow X'' + \lambda^2 X = 0$$

Busca-se, novamente, uma solução da seguinte forma: $X(x) = e^{qx}$

$$q^2 e^{qx} + \lambda^2 e^{qx} = 0 \;\; \rightarrow e^{qx}\left(q^2 + \lambda^2\right) = 0$$

$$\rightarrow q^2 = -\lambda^2 \;\; \rightarrow q = \pm\lambda i$$

$$X(x) = \gamma e^{\lambda i x} + \theta e^{-\lambda i x}$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C < 0$:

$$X(x) = \gamma e^{\lambda i x} + \theta e^{-\lambda i x}$$

$$T(t) = e^{-\alpha\lambda^2 t}$$

$$u(x,t) = X(x)\cdot T(t) \qquad (1)$$

$$u(x,t) = \left(\gamma e^{\lambda i x} + \theta e^{-\lambda i x}\right) e^{-\alpha\lambda^2 t}$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$u(x,t) = \left(\gamma e^{\lambda i x} + \theta e^{-\lambda i x}\right) e^{-\alpha\lambda^2 t}$$

Fórmula de Euler:

$$e^{\lambda i x} = \cos\lambda x + i\sin\lambda x \qquad e^{-\lambda i x} = \cos\lambda x - i\sin\lambda x$$

$$u(x,t) = (D\sin\lambda x + E\cos\lambda x)\, e^{-\alpha\lambda^2 t}$$

Solução da equação de difusão pelo método de separação de variáveis no caso 1D

$$\boxed{\frac{1}{\alpha}\frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = C}$$

Para $C = 0$:

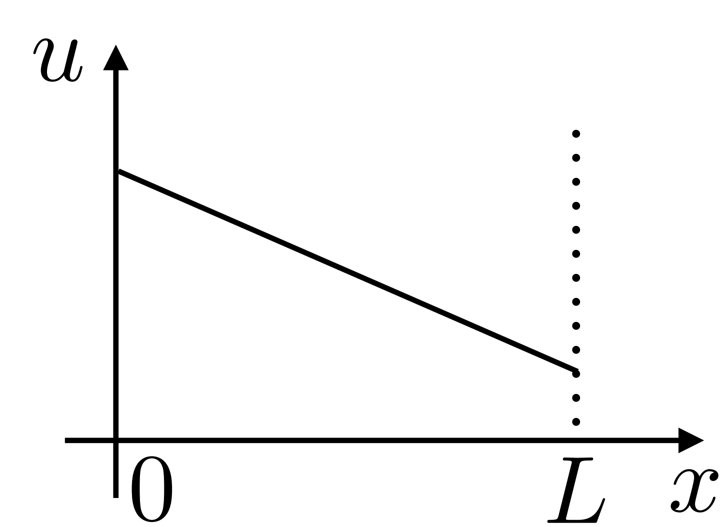
$$\frac{1}{\alpha}\frac{T'}{T} = 0 \rightarrow T' = 0 \rightarrow T(t) = A$$

$$\frac{X''}{X} = 0 \rightarrow X'' = 0 \rightarrow X' = B \rightarrow X = Bx + C$$

Assim:

$$u(x,t) = A \cdot (Bx + C)$$

$$u(x,t) = ax + b$$



Victor Sacek IAG/USP

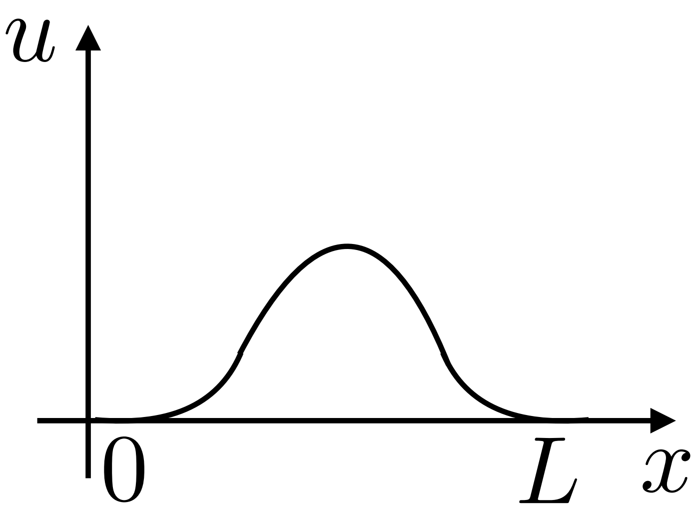
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

Equação de difusão

Aplicação no contexto de condução térmica em sólidos

Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$



Condição inicial $\quad u(x,0) = f(x) \;\; \forall\, x \in [0, L]$

Condição de contorno $\quad u(0,t) = u(L,t) = 0 \;\; \forall\, t \geq 0$

$$u(x,t) = (D \sin \lambda x + E \cos \lambda x)\, e^{-\alpha \lambda^2 t}$$

$\sin(\lambda L) = 0$ $\qquad$ 0 pois $u(0,t) = 0$

$$\lambda L = k\pi \;\rightarrow \lambda = \frac{k\pi}{L}$$

Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$u_k(x,t) = D_k \sin(\lambda x) e^{-\alpha\lambda^2 t}$$

$$= D_k \sin\frac{k\pi}{L} x \cdot e^{-\alpha \frac{k^2\pi^2}{L^2} t}$$

$$f(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(x,t)$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} D_k \sin\frac{k\pi}{L} x \cdot e^{-\alpha \frac{k^2\pi^2}{L^2} t}$$

Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$f(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(x,t)$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} D_k \sin \frac{k\pi}{L} x \cdot e^{-\alpha \frac{k^2 \pi^2}{L^2} t}$$

$$f(x,0) = f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} D_k \sin \frac{k\pi}{L} x$$

Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$f(x,0) = f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} D_k \sin \frac{k\pi}{L} x$$

Comparação com séries de Fourier:

$$u = \frac{2\pi}{p}$$

$$f(x) \;=\; \cancelto{0}{a_0} + \sum_{k=1}^{\infty} \cancelto{0}{a_k \cos kux} + b_k \sin kux$$

$$b_k = \frac{2}{p} \int_p f(x) \sin k \frac{2\pi}{p} x dx$$

Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$f(x,0) = f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} D_k \sin \frac{k\pi}{L} x$$

$$\frac{\pi}{L} = \frac{2\pi}{p} \to p = 2L$$

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin kux$$

$$u = \frac{2\pi}{p}$$

$$b_k = \frac{2}{p} \int_p f(x) \sin k \frac{2\pi}{p} x dx$$

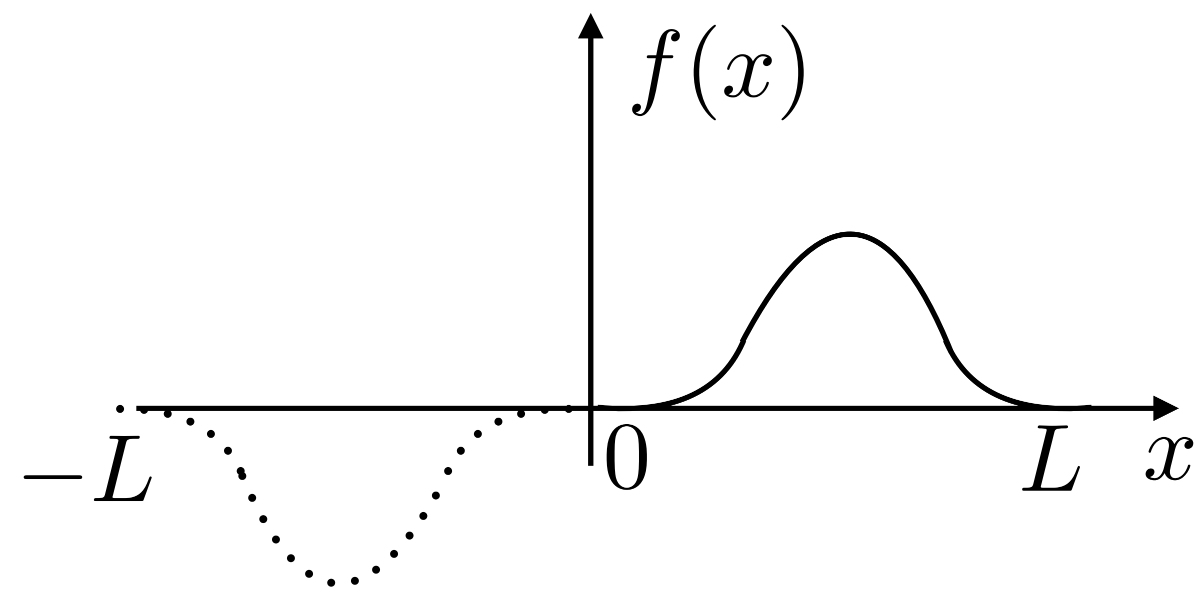
$$D_k = b_k = \frac{1}{L} \int_{-L}^{L} f(x) \sin \frac{k\pi x}{L} dx$$

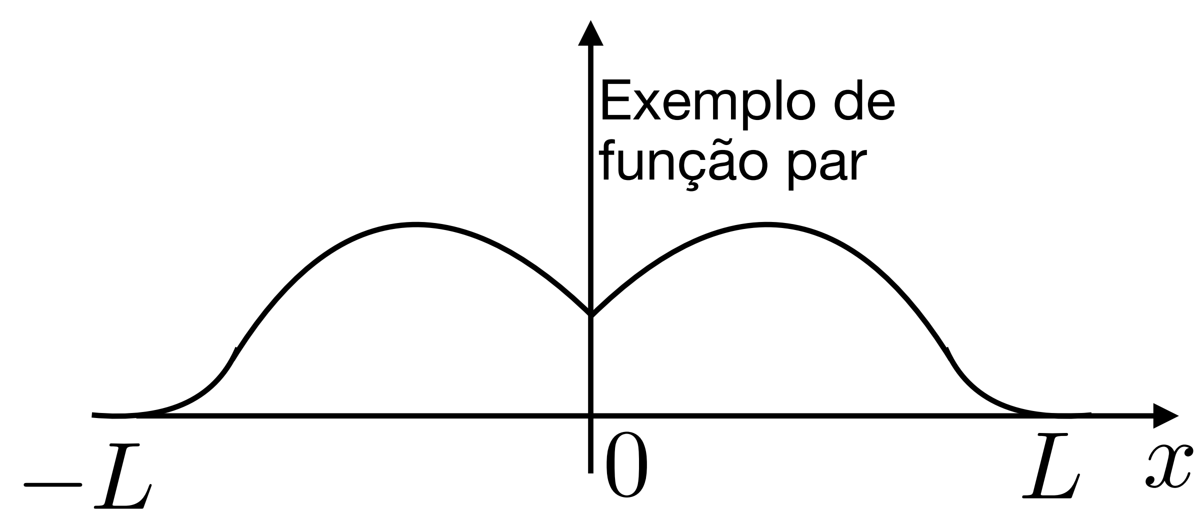
Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$D_k = b_k = \frac{1}{L}\int_{-L}^{L} f(x)\sin\frac{k\pi x}{L}dx$$

Função ímpar Função ímpar

Função par





$$D_k = \frac{2}{L}\int_{0}^{L} f(x)\sin\frac{k\pi x}{L}dx$$

Exemplo de aplicação: Equação de calor

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

$$u(x,0) = f(x) \ \ \forall \ x \in [0, L]$$

$$u(0,t) = u(L,t) = 0 \ \ \forall \ t \geq 0$$

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} D_k \sin \frac{k\pi}{L} x \cdot e^{-\alpha \frac{k^2 \pi^2}{L^2} t}$$

$$D_k = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin \frac{k\pi x}{L} dx$$