

Equação do calor e o problema da adega

Caio Tomás de Paula¹

¹Departamento de Matemática, Universidade de Brasília, Brasil.

Relatório entregue como parte do trabalho final do curso de Introdução a Métodos Computacionais em Equações Diferenciais Parciais (IMCEDP) do Programa de Pós-Graduação em Matemática (PPGMAT), ministrado pelo prof. Dr. Yuri Dumaesq Sobral no segundo semestre letivo de 2023 da Universidade de Brasília. O objetivo do trabalho foi resolver, numericamente, a equação do calor. Foi utilizada [2] como referência principal para o trabalho, além das notas de aula do curso.

I. INTRODUÇÃO

Estamos interessados em estudar a variação da temperatura do solo terrestre a uma dada profundidade x no instante t . Desconsiderando a curvatura da terra e a variação diária de temperatura da superfície, podemos modelar a distribuição de temperatura $u(x, t)$ à profundidade x no tempo t por uma equação do calor unidimensional:

$$u_t = \kappa u_{xx}.$$

A difusividade térmica do solo terrestre será considerada $\kappa = 6.3\text{m}^2/\text{ano}$. Note que estamos desconsiderando o calor oriundo do núcleo da Terra, já que não há forçamento na equação. Vamos assumir que $u \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$. Vamos também assumir que a temperatura $f(t)$ na superfície ($x = 0$) assume apenas dois valores: uma temperatura de “verão” durante metade do ano e uma temperatura de “inverno” durante a outra metade. Esse padrão se repete todo ano, i.e., a temperatura é periódica em $x = 0$ com período de 1 ano.

Em símbolos,

$$f(t) = \begin{cases} T_v, & 0 \leq t < 1/2 \\ T_w, & 1/2 \leq t \leq 1, \end{cases}$$

onde T_v denota a temperatura no verão e T_w denota a temperatura no inverno, com t em anos.

Vamos tomar a condição inicial $u(x, 0) = f(t)e^{-q_1 x}$, com $q_1 = 0.71\text{m}^{-1}$. Por fim, vamos tomar $u(L, t) = 0$, com L suficientemente longo para que essa condição seja válida.

Em resumo, queremos resolver o PVIC

$$\begin{cases} u_t = \kappa u_{xx}, & 0 \leq x \leq L, t \geq 0 \\ u(x, 0) = f(t)e^{-q_1 x} \\ u(0, t) = f(t) \\ u(L, t) = 0 \end{cases}$$

Queremos resolver este problema numericamente e responder a algumas perguntas. Mais especificamente, vamos resolver este problema usando tanto o método de Euler explícito (e mostrar sua ordem) quanto o método de Crank-Nicolson, encontrar a profundidade ideal para uma adega de vinhos e resolver uma variação do problema com difusividade variável.

II. UMA ANÁLISE TEÓRICA

Antes de partir para a solução numérica, vamos fazer algumas considerações sobre a solução analítica do problema. Primeiro, note que podemos escrever

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{2\pi i n t / T}, \quad (2.1)$$

com $C_n \in \mathbb{C}$ tais que $\overline{C_n} = C_{-n}$ e $T = 1$ ano. É possível mostrar¹ que, em um tempo t , uma substância se difunde aproximadamente $\sqrt{\kappa t}$ unidades. Sendo assim, na escala de tempo de interesse (1 ano), temos

$$\sqrt{\kappa T} = \sqrt{6.3} \approx 2.5 \text{ m}. \quad (2.2)$$

Vamos tomar o *ansatz*

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \omega_n(x) e^{2\pi i n t / T}, \quad (2.3)$$

com $C_n \in \mathbb{C}$ tais que $\overline{C_n} = C_{-n}$, de modo que u é real. Vamos impor as seguintes condições:

- (i) cada uma das parcelas satisfaz a equação do calor
- (ii) $\omega_n(0) \equiv 1$, de modo que a representação de $f(t)$ seja recuperada
- (iii) $\omega_n(x)$ é limitado e tende a 0 quando $x \rightarrow \infty$ ($n \neq 0$), uma vez que a temperatura a profundidades muito grandes não é sensível a variações de temperatura na superfície.

A condição (i) nos dá

$$\frac{d^2 \omega_n}{dx^2} = p_n^2 \omega_n, \quad p_n^2 = \frac{2\pi i n}{\kappa T}. \quad (2.4)$$

Consequentemente,

$$p_n = \pm(1 \pm i)q_n, \quad \text{com } q_n = \sqrt{\frac{|n|\pi}{\kappa T}} > 0 \quad (2.5)$$

e o sinal \pm depende do sinal de n . Desta forma, a solução geral da EDO de ω_n é dada por

$$\omega_n(x) = A_n e^{(1 \pm i)q_n x} + B_n e^{-(1 \pm i)q_n x}. \quad (2.6)$$

¹ [2, p. 129]

Da condição (iii) segue que $A_n \equiv 0$ e da condição (ii) segue que $B_n \equiv 1$. Portanto, obtemos

$$\omega_n(x) = e^{-(1 \pm i)q_n x} \quad (2.7)$$

e, assim,

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{-(1 \pm i)q_n x} e^{2\pi i n t / T}. \quad (2.8)$$

Escrevendo $C_n = |C_n| e^{-i\gamma_n}$, segue que

$$u(x, t) = C_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} |C_n| e^{-q_n x} \cos\left(\frac{2\pi n t}{T} + \gamma_n - q_n x\right). \quad (2.9)$$

Vamos interpretar esta solução. Note que o termo do cosseno representa uma onda de frequência $2\pi n/T$ e número de onda q_n . Por conta disto, a n -ésima “onda parcial” se propaga com velocidade

$$\frac{2\pi n}{q_n T} = \sqrt{\frac{4\pi\kappa|n|}{T}}. \quad (2.10)$$

Como há um amortecimento exponencial na direção de propagação e este amortecimento cresce com $\sqrt{|n|}$, segue que a contribuição mais importante para a solução vem do termo com $n = 1$. Para os valores numéricos que estamos considerando, segue que

$$q_1 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{4\pi\kappa}{T}} \approx 0.71 \text{m}^{-1}. \quad (2.11)$$

Agora, note que o ponto x_1 tal que $q_1 x_1 = \pi$ é tal que a temperatura $u(x_1, t)$ é oposta em fase à temperatura $u(0, t)$. Dito de outro modo, $x_1 = \pi/q_1 \approx 4.4\text{m}$ é a profundidade na qual a temperatura do solo tem fase oposta à temperatura da superfície. Isto significa que se na superfície a temperatura é de verão então à profundidade x_1 a temperatura é de inverno. Além disso, a variação de temperatura é $e^{-\pi} \approx 4\%$ da variação na superfície. Isto torna esta profundidade ideal para uma adega de vinhos!

III. MÉTODOS NUMÉRICOS

Começamos resolvendo a equação com o método de Euler explícito,

$$u_{\ell}^{n+1} = u_{\ell}^n + \mu(u_{\ell+1}^n - 2u_{\ell}^n + u_{\ell-1}^n), \quad (3.1)$$

que converge para $\kappa\mu \leq 1/2$. Por conta desta restrição ao número de Courant, não podemos escolher Δt e Δx de forma displicente.

Também utilizamos o método de Crank-Nicolson para resolver o problema. Este método, dado por

$$-\alpha u_{\ell+1}^{n+1} + (1+2\alpha)u_{\ell}^{n+1} - \alpha u_{\ell-1}^{n+1} = \alpha u_{\ell+1}^n + (1-2\alpha)u_{\ell}^n + \alpha u_{\ell-1}^n \quad (3.2)$$

com $\alpha = \kappa\mu/2$ é implícito, incondicionalmente estável e consistente (logo convergente pelo Teorema de Equivalência de Lax). Consequentemente, temos maior liberdade na escolha de Δt e Δx ,

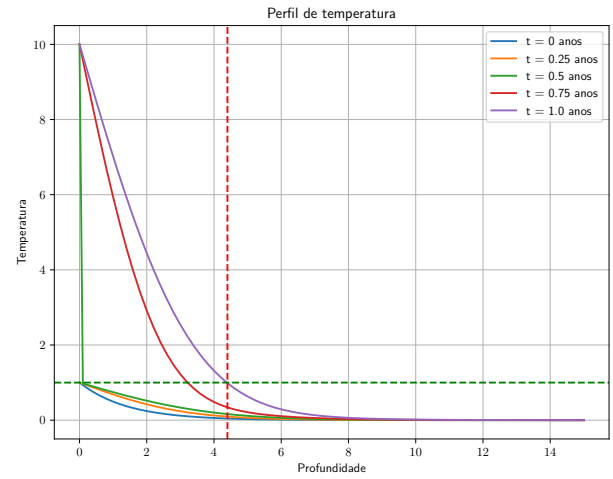


Figura 1. Perfil de temperatura para diferentes instantes de tempo calculado usando o método de Euler explícito. A reta pontilhada vermelha representa a profundidade $x = 4.4\text{m}$, enquanto a reta pontilhada verde representa a temperatura $y = 1$. O perfil de temperatura ao final de 1 ano (curva roxa) passa pelo encontro entre as duas retas pontilhadas, mostrando que à profundidade de 4.4m a temperatura tem fase oposta à da superfície.

o que torna este método mais indicado para o cômputo da solução por grandes intervalos de tempo. A implicitude do método nos obriga a resolver um sistema linear a cada iteração, dado por

$$\begin{bmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & \ddots & \vdots \\ 0 & -\alpha & 1+2\alpha & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\alpha \\ 0 & \cdots & 0 & -\alpha & 1+2\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

sendo N a quantidade de pontos na malha espacial. Para resolver tal sistema, usamos o [algoritmo da matriz tridiagonal](#) (ou de Thomas).

IV. RESULTADOS

Começamos resolvendo a equação utilizando o método de Euler explícito. Tomamos um intervalo espacial de 0m a 15m e um intervalo temporal de 0 a 1 ano. Os valores de Δx e Δt foram tomados de maneira que $\kappa\mu \leq 1/2$ para que o método convergisse. A Figura IV exibe o perfil de temperatura em diferentes instantes obtidos pelo método de Euler. Podemos ver uma mudança abrupta em $t = 0.5$, causada pela mudança na condição de contorno à esquerda (superfície) de inverno para verão. Na figura também são exibidas as retas $x = 4.4\text{m}$ (em vermelho) e $y = 1$ (em verde). Observe que a curva roxa, correspondente ao perfil de temperatura ao final de 1 ano, passa pelo encontro das retas, i.e., pelo ponto (4.4, 1). Isso recupera o resultado obtido na análise teórica de que à profundidade 4.4m a temperatura tem fase oposta à temperatura da superfície (e, consequentemente, é inverno a essa temperatura enquanto é verão na superfície).

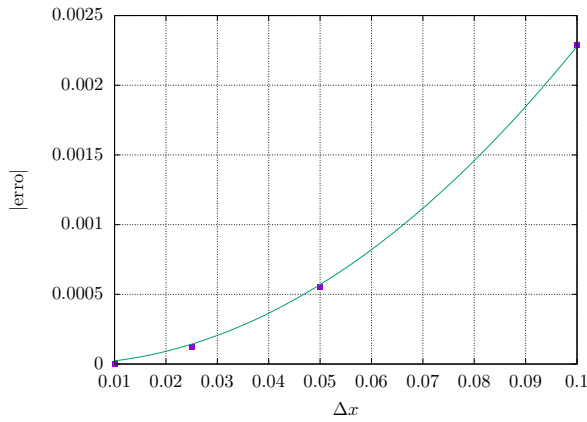


Figura 2. Validação da ordem do método de Euler explícito. Fit da forma $f(x) = ax^2$. Erro encontrado de 0.8727%.

Um vídeo mostrando a evolução do perfil de temperatura pode ser encontrado [neste link](#). Para validar a ordem deste esquema, tomamos como referência o ponto $(t_r, x_r) = (1 \text{ ano}, 5 \text{ m})$. Calculamos $T(t_r, x_r)$ para 4 valores de Δx : $\Delta x_1 = 0.1$, $\Delta x_2 = 0.05$, $\Delta x_3 = 0.025$ e $\Delta x_4 = 0.01$. o erro foi calculado como $|\Delta x_i - \Delta x_4|$, com $1 \leq i \leq 4$. O fit realizado foi do tipo $f(x) = ax^2$ e o erro encontrado no ajuste foi de 0.8727%. Isto valida a ordem 2 do método.

Também resolvemos o problema usando o método de Crank-Nicolson. Mantemos as mesmas escolhas de intervalos, discretização e passos de tempo por simplicidade, mas a estabilidade incondicional do método nos fornece uma margem de manobra maior para escolher estes parâmetros. A implicitude deste método nos obriga a resolver um sistema linear a cada

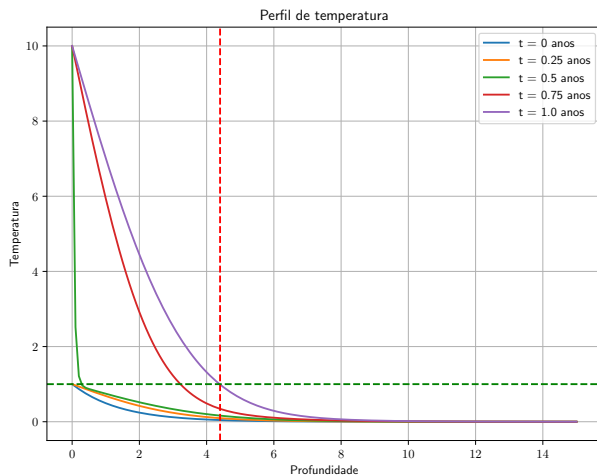


Figura 3. Perfil de temperatura para diferentes instantes de tempo calculado usando o método de Crank-Nicolson. A reta pontilhada vermelha representa a profundidade $x = 4.4\text{m}$, enquanto a reta pontilhada verde representa a temperatura $y = 1$. O perfil de temperatura ao final de 1 ano (curva roxa) passa pelo encontro entre as duas retas pontilhadas, mostrando que à profundidade de 4.4m a temperatura tem fase oposta à da superfície.

iteração temporal. Para tanto, utilizamos o algoritmo de Thomas, próprio para resolver sistemas lineares tridiagonais.

A Figura IV exhibe o perfil de temperatura em diferentes instantes obtidos pelo método de Crank-Nicolson. Assim como foi o caso para o método de Euler, podemos ver uma mudança abrupta em $t = 0.5$, causada pela mudança na condição de contorno à esquerda (superfície) de inverno para verão. Na figura também são exibidas as retas $x = 4.4\text{m}$ (em vermelho) e $y = 1$ (em verde) e, assim como para o método de Euler, vemos que o resultado obtido na análise teórica de que à profundidade 4.4m a temperatura tem fase oposta à temperatura da superfície (e, consequentemente, é inverno a essa temperatura enquanto é verão na superfície) é recuperado.

Um vídeo mostrando a evolução do perfil de temperatura pode ser encontrado [neste link](#).

Por fim, consideramos o problema

$$u_t = (\kappa(x)u_x)_x, \quad (4.1)$$

com $\kappa(x) = (6.3 + x)^\alpha$ e sujeito às mesmas condições de contorno e condição inicial previamente citadas. Dito de outro modo, vamos considerar que a difusividade aumenta com a profundidade (quanto mais fundo, mais rapidamente o calor se difunde). Consideramos apenas os casos $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$.

Para integrar esta equação, lançamos mão de um método de volumes finitos: para cada iteração na malha espacial, tomamos

$$\bar{\kappa}_i = \frac{1}{2} (\kappa(x_i) + \kappa(x_{i-1})) \quad (4.2)$$

e aplicamos o método de Euler com $\bar{\kappa}_i$. Consideramos o mesmo domínio de antes: $0 \leq x \leq 15$ e $0 \leq t \leq 1$. Para que o método convergisse, fixamos $\Delta x = 0.1$ e tomamos Δt suficientemente pequeno para que

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2\kappa_{\max}}, \quad (4.3)$$

com $\kappa_{\max} = (6.3 + x_{\max})^\alpha = 21.3^\alpha$. A Figura IV traz os perfis de temperatura para $\alpha = 1$ (azul) e $\alpha = 2$ (laranja) ao final de 1 ano. A reta verde pontilhada marca a temperatura da superfície no inverno. Vemos que a profundidade ideal para a adega aumenta, indo para $x^{\alpha=1} \approx 5.4\text{m}$ e $x^{\alpha=2} \approx 13.4\text{m}$.

V. CÓDIGOS UTILIZADOS

Este projeto pode ser encontrado [neste link](#), incluindo os códigos utilizados para o cômputo da solução e o código-fonte deste documento.

VI. BIBLIOGRAFIA

- [1] Arieh Iserles, **Cambridge Texts in Applied Mathematics: A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations**, 2nd edition (Cambridge University Press, 2008)
- [2] C.C. Lin, L.A. Segel, **Classics in Applied Mathematics 1: Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences**, (Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998)

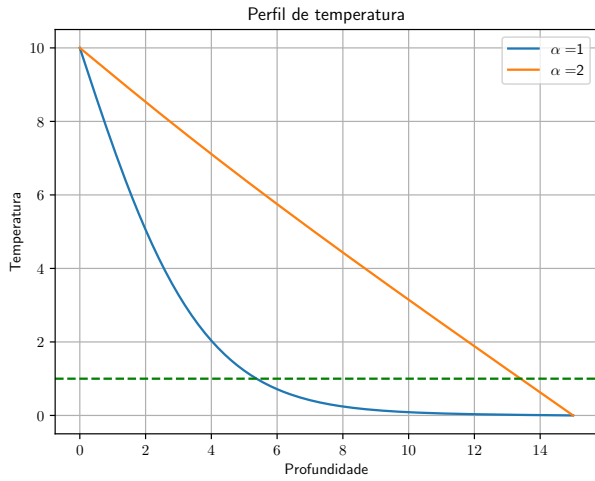


Figura 4. Perfil de temperatura para $t = 1$ considerando $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$. Vemos que a profundidade ideal para a adega aumenta, indo para $x^{\alpha=1} \approx 5.4\text{m}$ e $x^{\alpha=2} \approx 13.4\text{m}$.

Apêndice A: O método de Thomas para solução de sistemas tridiagonais

Seja

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} \quad (\text{A1})$$

um sistema linear tridiagonal. O método de Thomas é um método que resolve tais sistemas em $O(n)$ operações², realizando uma primeira varredura para eliminar os a_i 's seguida de uma substituição inversa. Este algoritmo não é estável para o caso geral. Não obstante, o método de Crank-Nicolson nos dá $b_i = 1 + 2\alpha$, $a_i = c_i = -\alpha$ e, neste caso, a matriz do sistema é estritamente diagonalmente dominante e o algoritmo é estável.

A primeira etapa do método consiste de uma varredura para o cômputo de novos coeficientes c'_i e d'_i dados por

$$c'_i = \begin{cases} \frac{c_i}{b_i}, & i = 1 \\ \frac{c_i}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & 2 \leq i \leq n-1 \end{cases} \quad (\text{A2})$$

e

$$d'_i = \begin{cases} d_i, & i = 1 \\ \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & 2 \leq i \leq n \end{cases} \quad (\text{A3})$$

Calculados os novos coeficientes, a solução é dada por

$$\begin{aligned} x_n &= d'_n \\ x_i &= d'_i - c'_i x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1. \end{aligned}$$

² Compare com as $O(n^3)$ operações necessárias para a eliminação gaussiana.