1. MODELO MATEMÁTICO:

Seja C a função concentração de partículas, tal que

$$C = C(x,t) \tag{1}$$

O fenômeno da difusão anômala de partículas é modelado conforme:

$$\boldsymbol{\frac{\partial C}{\partial t} = \beta K_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta(1-\beta) K_4 \frac{\partial^4 C}{\partial x^4}} \tag{2}$$

$$C(0,t) = 0 \qquad t > 0 \tag{3}$$

$$C(L,t) = 0 \qquad t > 0 \tag{4}$$

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_{x=0} = 0 \qquad t > 0 \tag{5}$$

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_{x=L} = 0 \qquad t > 0 \tag{6}$$

$$C(x,0) = sen\left(\frac{\pi x}{L}\right) \qquad 0 \leq x \leq L \tag{7}$$

A solução analítica deste problema é

$$\boldsymbol{C(x,t) = exp(-\beta K_2 \pi^2 t) exp(-\beta(1-\beta) K_4 \pi^4 t) sen\left(\frac{\pi x}{L}\right)} \tag{8}$$

Para as derivadas na Eq. (2) utilizaremos as seguintes aproximações:

$$\left.\frac{\partial C}{\partial t}\right|_i^n \approx \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \tag{9}$$

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial^2 x}\right|_i^{n+1} \approx \frac{C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \tag{10}$$

$$\left.\frac{\partial^4 C}{\partial^4 x}\right|_i^{n+1} \approx \frac{C_{i-2}^{n+1} - 4C_{i-1}^{n+1} + 6C_i^{n+1} - 4C_{i+1}^{n+1} + C_{i+2}^{n+1}}{\Delta x^2} \tag{11}$$

Considerando uma malha de N nós tal que $i = 0, 1, 2, \ldots N-3, N-2, N-1$, para nós internos ($i = 2, 3, \ldots, N-3$, a discretização da Eq. (2)

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = \beta K_2 \left[\frac{C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right] - \beta(1-\beta) K_4 \left[\frac{C_{i-2}^{n+1} - 4C_{i-1}^{n+1} + 6C_i^{n+1} - 4C_{i+1}^{n+1} + C_{i+2}^{n+1}}{\Delta x^2}\right] \tag{12}$$

Introduzindo $\kappa_1 = \dfrac{\beta K_2 \Delta t}{\Delta x^2}$ e $\kappa_2 = -\dfrac{\beta(1-\beta) K_4 \Delta t}{\Delta x^2}$

$$C_i^{n+1} - C_i^n = \kappa_1 \left[C_{i-1}^{n+1} + 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1}\right] + \kappa_2 \left[C_{i-2}^{n+1} - 4C_{i-1}^{n+1} + 6C_i^{n+1} - 4C_{i+1}^{n+1} + C_{i+2}^{n+1}\right] \tag{13}$$

Como buscamos uma formulação implícita para o esquema numérico, separamos os termos no tempo presente, n, dos termos no próximo passo de tempo, $n+1$:

$$C_i^{n+1} - \kappa_1 \left[C_{i-1}^{n+1} + 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1} \right] - \kappa_2 \left[C_{i-2}^{n+1} - 4C_{i-1}^{n+1} + 6C_i^{n+1} - 4C_{i+1}^{n+1} + C_{i+2}^{n+1} \right] = C_i^n \tag{14}$$

Organizando os termos nas mesmas posições, a formulação do problema é:

$$\boldsymbol{-\kappa_2 C_{i-2}^{n+1} + (4\kappa_2 - \kappa_1) C_{i-1}^{n+1} + (1 - 2\kappa_1 - 6\,\kappa_2) C_i^{n+1} + (4\kappa_2 - \kappa_1) C_{i+1}^{n+1} - \kappa_2 C_{i+2}^{n+1} = C_i^n} \tag{15}$$

Para completar o sistema de equações, utilizamos as informações do contorno (Eqs. 3, 4, 5 e 6).

i = 0:

$$\boldsymbol{C_0^{n+1} = 0} \tag{16}$$

Para a condição do segundo tipo, não podemos utilizar diretamente uma derivada centrada (pois não há ponto à esquerda do domínio). Utilizaremos então uma aproximação avançada de segunda ordem

$$\frac{2C_i^{n+1} - 5C_{i+1}^{n+1} + 4C_{i+2}^{n+1} - C_{i+3}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \tag{17}$$

$$\boldsymbol{2C_0^{n+1} - 5C_1^{n+1} + 4C_2^{n+1} - C_3^{n+1} = 0} \tag{18}$$

i = N-1:

$$\boldsymbol{C_{N-1}^{n+1} = 0} \tag{19}$$

Para a condição do segundo tipo neste contorno, devido ao fato de não haver um ponto à direita do domínio, utilizaremos uma aproximação recuada ao invés de centrada para aproximar a derivada.

$$\frac{-C_{i-3}^{n+1} + 4C_{i-2}^{n+1} - 5C_{i-1}^{n+1} + 2C_i^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \tag{20}$$

$$\boldsymbol{-C_{N-4}^{n+1} + 4C_{N-3}^{n+1} - 5C_{N-2}^{n+1} + 2C_{N-1}^{n+1} = 0} \tag{21}$$

O conjunto destas equações algébricas pode ser representado em notação matricial. Adotando $a_1 = -\kappa_2$, $a_2 = 4\kappa_2 - \kappa_1$ e $a_3 = 1 - 2\kappa_1 - 6\kappa_2$, temos

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -5 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_0^{n+1} \\ C_1^{n+1} \\ C_2^{n+1} \\ C_3^{n+1} \\ \vdots \\ C_i^{n+1} \\ \vdots \\ C_{N-3}^{n+1} \\ C_{N-2}^{n+1} \\ C_{N-1}^{n+1} \\ C_N^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_1^n \\ C_2^n \\ C_3^n \\ C_4^n \\ \vdots \\ C_i^n \\ \vdots \\ C_{N-4}^n \\ C_{N-3}^n \\ C_{N-2}^n \\ 0 \end{bmatrix}$$

Este é um problema na forma $Ax = b$, ou seja, precisamos resolver o sistema de equações para obter as novas estimativas da concentração.