

1. MODELO MATEMÁTICO:

Seja P a função concentração de partículas, tal que

$$P = P(x, t) \quad (1)$$

O fenômeno da difusão anômala de partículas é modelado conforme:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \beta K_2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \beta(1 - \beta) K_4 \frac{\partial^4 P}{\partial x^4} \quad (2)$$

$$P(0, t) = 0 \quad t > 0 \quad (3)$$

$$P(L, t) = 0 \quad t > 0 \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \right|_{x=0} = 0 \quad t > 0 \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \right|_{x=L} = 0 \quad t > 0 \quad (6)$$

$$P(x, 0) = \text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \quad 0 \leq x \leq L \quad (7)$$

A solução analítica deste problema é

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

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

$$\left. \frac{\partial P}{\partial t} \right|_i^n \approx \frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{\Delta t} \quad (9)$$

$$\left. \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \right|_i^{n+1} \approx \frac{P_{i-1}^{n+1} - 2P_i^{n+1} + P_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \quad (10)$$

$$\left. \frac{\partial^4 P}{\partial x^4} \right|_i^{n+1} \approx \frac{P_{i-2}^{n+1} - 4P_{i-1}^{n+1} + 6P_i^{n+1} - 4P_{i+1}^{n+1} + P_{i+2}^{n+1}}{\Delta x^2} \quad (11)$$

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

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

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

$$P_i^{n+1} - P_i^n = \kappa_1 \left[P_{i-1}^{n+1} - 2P_i^{n+1} + P_{i+1}^{n+1} \right] + \kappa_2 \left[P_{i-2}^{n+1} - 4P_{i-1}^{n+1} + 6P_i^{n+1} - 4P_{i+1}^{n+1} + P_{i+2}^{n+1} \right] \quad (13)$$

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

$$P_i^{n+1} - \kappa_1 [P_{i-1}^{n+1} - 2P_i^{n+1} + P_{i+1}^{n+1}] - \kappa_2 [P_{i-2}^{n+1} - 4P_{i-1}^{n+1} + 6P_i^{n+1} - 4P_{i+1}^{n+1} + P_{i+2}^{n+1}] = P_i^n \quad (14)$$

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

$$-\kappa_2 P_{i-2}^{n+1} + (4\kappa_2 - \kappa_1) P_{i-1}^{n+1} + (1 + 2\kappa_1 - 6\kappa_2) P_i^{n+1} + (4\kappa_2 - \kappa_1) P_{i+1}^{n+1} - \kappa_2 P_{i+2}^{n+1} = P_i^n \quad (15)$$

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

i = 0:

$$P_0^{n+1} = 0 \quad (16)$$

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

$$\frac{2P_i^{n+1} - 5P_{i+1}^{n+1} + 4P_{i+2}^{n+1} - P_{i+3}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (17)$$

$$2P_0^{n+1} - 5P_1^{n+1} + 4P_2^{n+1} - P_3^{n+1} = 0 \quad (18)$$

i = N-1:

$$P_{N-1}^{n+1} = 0 \quad (19)$$

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.

$$\frac{-P_{i-3}^{n+1} + 4P_{i-2}^{n+1} - 5P_{i-1}^{n+1} + 2P_i^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (20)$$

$$-P_{N-4}^{n+1} + 4P_{N-3}^{n+1} - 5P_{N-2}^{n+1} + 2P_{N-1}^{n+1} = 0 \quad (21)$$

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

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -5 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_2 & a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_0^{n+1} \\ P_1^{n+1} \\ P_2^{n+1} \\ P_3^{n+1} \\ \vdots \\ P_i^{n+1} \\ \vdots \\ P_{N-3}^{n+1} \\ P_{N-2}^{n+1} \\ P_{N-1}^{n+1} \\ P_N^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ P_2^n \\ P_3^n \\ P_4^n \\ \vdots \\ P_i^n \\ \vdots \\ P_{N-4}^n \\ P_{N-3}^n \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

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