
Análise Numérica da Equação do Calor com Diferentes Condições de Contorno e Iniciais

Lucas Santana da Silva

lucassantanasilva.ds@gmail.com

211028097

Objetivo

Este artigo aborda a solução numérica da equação do calor com diferentes condições de contorno e iniciais. A equação do calor, uma equação diferencial parcial fundamental na modelagem de processos de difusão de calor, é resolvida utilizando o método das diferenças finitas. Três problemas específicos são analisados: o primeiro com condições de contorno de Dirichlet homogêneas e condição inicial de temperatura uniforme, o segundo com condições de contorno de Dirichlet não homogêneas e condição inicial nula, e o terceiro com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em um intervalo maior e uma condição inicial sinusoidal. A solução analítica de cada problema é comparada com a solução numérica obtida através da discretização temporal e espacial. Os resultados mostram a eficácia do método das diferenças finitas em aproximar as soluções exatas, com uma análise detalhada dos erros numéricos. O artigo conclui que a escolha apropriada dos parâmetros de discretização é crucial para a precisão das soluções numéricas e discute as implicações dos resultados para a modelagem de processos térmicos em diferentes cenários.

1. Introdução

A equação do calor é uma equação diferencial parcial (EDP) fundamental na física e na engenharia, utilizada para descrever a distribuição de temperatura ao longo do tempo em meios contínuos. Esta equação desempenha um papel crucial em uma vasta gama de aplicações, incluindo a análise de processos térmicos, modelagem de condutividade térmica e simulação de problemas de transferência de calor em diferentes materiais e geometrias.

Neste trabalho, investigamos a solução numérica da equação do calor em diferentes configurações de condições iniciais e de contorno, utilizando o método das diferenças finitas. Três problemas distintos são considerados, cada um projetado para representar cenários práticos e desafiadores

que permitem uma análise detalhada da precisão e eficiência das técnicas numéricas empregadas.

No **Problema 1**, analisamos a equação do calor sob condições de contorno homogêneas, com uma condição inicial de temperatura constante ao longo do domínio. A solução analítica deste problema é bem conhecida e será utilizada como referência para validar os resultados numéricos obtidos. O objetivo principal é examinar o comportamento da solução ao longo do tempo e avaliar a precisão das aproximações numéricas.

O **Problema 2** considera um cenário com condições de contorno não homogêneas, onde uma das extremidades da barra é mantida a uma temperatura constante, enquanto a outra extremidade permanece livre. A condição inicial é nula, e a existência de uma solução analítica permite a comparação direta entre as soluções numérica e exata, destacando a capacidade do método numérico em lidar com condições de contorno complexas.

Por fim, o **Problema 3** amplia o domínio espacial da equação do calor e impõe uma condição inicial mais complexa, descrita por uma função senoidal. As condições de contorno são homogêneas, e o estudo se concentra na evolução da solução ao longo de um intervalo maior, avaliando a resposta do método numérico a diferentes configurações espaciais e temporais.

Ao longo deste artigo, o método das diferenças finitas é aplicado para resolver as EDPs associadas a cada problema. A metodologia numérica é descrita em detalhes, e os resultados obtidos são analisados por meio de comparações com as soluções analíticas. Esta abordagem permite não apenas validar a precisão dos métodos, mas também compreender as limitações e potencialidades das técnicas numéricas no contexto da solução da equação do calor.

2. Fundamentação Teórica

A equação do calor descreve a condução de calor em um meio contínuo e pode ser tridimensional na forma geral. A condutividade térmica k pode variar com a temperatura e em diferentes direções, resultando em condutividades dis-

tintas k_1 , k_2 , e k_3 nas direções x , y e z , respectivamente.

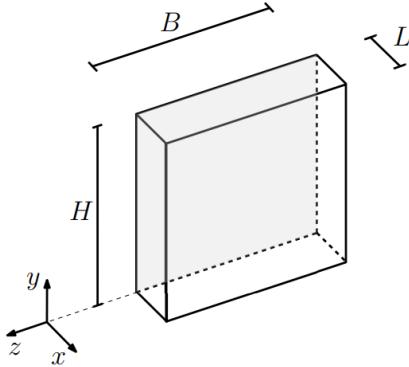


Figura 1. Representação tridimensional do objeto considerado.

A Equação da Condução de Calor Geral é dada por:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_2 \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_3 \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (1)$$

onde ρ é a densidade do material, c é a capacidade térmica específica e T é a temperatura.

2.1. Aproximações da Equação do Calor

Para simplificação, a equação pode ser reduzida a diferentes dimensões e suposições:

Aproximação Bidimensional: Considerando um meio com variação apenas em duas dimensões:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_2 \frac{\partial T}{\partial y} \right). \quad (2)$$

Aproximação Unidimensional: Para um meio com variação apenas na direção x :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_1 \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (3)$$

Aproximação com Condutividade Constante: Supondo condutividade térmica constante ($k = k_1$):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (4)$$

onde $\alpha = \frac{k}{\rho c}$ é a difusividade térmica.

Esta equação é conhecida como Equação da Condução de Calor ou Equação da Difusão de Calor. É uma equação diferencial parcial homogênea linear de segunda ordem.

2.2. Equação da Difusão de Calor

A equação unidimensional do calor pode ser expressa como:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad (5)$$

onde $T(x, t)$ representa a temperatura em um ponto x no instante t .

Para resolver essa equação, são necessárias condições iniciais e de contorno:

- **Condição Inicial:** Define a distribuição de temperatura ao longo do domínio espacial no tempo inicial ($t = 0$):

$$T(x, 0) = f(x). \quad (6)$$

- **Condições de Contorno:** Especificam o comportamento da temperatura nas extremidades do domínio espacial. Consideramos condições de contorno de Dirichlet, que podem ser homogêneas ou não homogêneas:

$$T(0, t) = g_1(t), \quad T(L, t) = g_2(t), \quad (7)$$

onde $g_1(t)$ e $g_2(t)$ são funções conhecidas.

2.3. Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas é uma técnica numérica para aproximar soluções de EDPs. Este método discretiza o domínio contínuo em uma malha de pontos e substitui as derivadas por diferenças finitas.

Para a equação do calor, considera-se uma malha retangular com espaçamento Δx no domínio espacial e Δt no domínio temporal. As derivadas são aproximadas por:

- **Derivada Temporal:**

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t}. \quad (8)$$

- **Derivada Espacial:**

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}. \quad (9)$$

Substituindo essas aproximações na equação do calor, obtém-se o esquema explícito de diferenças finitas:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n). \quad (10)$$

Este esquema é utilizado para avançar a solução no tempo, aplicando as condições iniciais e de contorno em cada passo temporal.

2.4. Problemas Analisados

2.4.1 Problema 1: Condições de Contorno Homogêneas e Condição Inicial Uniforme

Considera-se uma barra de comprimento $L = 1$ com condições de contorno homogêneas:

$$T(0, t) = 0, \quad T(1, t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (11)$$

A condição inicial é uma função constante:

$$T(x, 0) = 1, \quad 0 < x < 1. \quad (12)$$

A solução analítica é:

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{(2n-1)\pi} \sin((2n-1)\pi x) \exp(-(2n-1)^2\pi^2 t). \quad (13)$$

2.4.2 Problema 2: Condições de Contorno Não Homogêneas e Condição Inicial Nula

Considera-se uma barra de comprimento $L = 1$ com condições de contorno não homogêneas:

$$T(0, t) = 1, \quad T(1, t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (14)$$

A condição inicial é nula:

$$T(x, 0) = 0, \quad 0 < x < 1. \quad (15)$$

A solução analítica é:

$$T(x, t) = 1 - x - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin(n\pi x) \exp(-n^2\pi^2 t). \quad (16)$$

2.4.3 Problema 3: Condições de Contorno Homogêneas em Intervalo Maior e Condição Inicial Sinusoidal

Considera-se uma barra de comprimento $L = 2$ com condições de contorno homogêneas:

$$T(0, t) = 0, \quad T(2, t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (17)$$

A condição inicial é uma função sinusoidal:

$$T(x, 0) = \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right), \quad 0 < x < 2. \quad (18)$$

A solução analítica é:

$$T(x, t) = \exp\left(-\left(\frac{\pi^2 t}{4}\right)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right). \quad (19)$$

2.5. Análise de Erros

A precisão das soluções numéricas é avaliada comparando-se com as soluções analíticas exatas. O erro é calculado usando a norma L_2 :

$$\|e\|_2 = \left(\sum_{i=1}^N (T_i^{num} - T_i^{exact})^2 \Delta x \right)^{1/2}, \quad (20)$$

onde T_i^{num} e T_i^{exact} representam as soluções numérica e analítica, respectivamente.

A análise dos resultados numéricos considera a convergência e a estabilidade do método, discutindo a escolha dos parâmetros de discretização Δx e Δt .

3. Metodologia Numérica

Para resolver numericamente os problemas propostos, utilizamos o método das diferenças finitas explícito. Este método é uma técnica numérica que aproxima as soluções de equações diferenciais parciais (EDPs) através da discretização do domínio contínuo em uma malha de pontos. Neste trabalho, a equação do calor unidimensional foi discretizada tanto no espaço quanto no tempo.

3.1. Discretização da Equação do Calor

A equação do calor unidimensional é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (21)$$

onde T é a temperatura, t é o tempo, x é a posição espacial e α é a difusividade térmica.

Para discretizar essa equação, consideramos uma malha retangular com espaçamento Δx no domínio espacial e Δt no domínio temporal. A derivada temporal é aproximada por uma diferença finita para frente:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t}, \quad (22)$$

e a derivada espacial por uma diferença finita central:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}, \quad (23)$$

onde T_i^n representa a temperatura no ponto x_i e no instante t_n .

Substituindo essas aproximações na equação do calor, obtemos o esquema de diferenças finitas explícito:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n). \quad (24)$$

Este esquema é utilizado para avançar a solução no tempo, a partir das condições iniciais e aplicando as condições de contorno a cada passo de tempo.

3.1.1 Dependência da Solução com o Tamanho de Δx e Δt

- Conceito de Estabilidade e Convergência:** A precisão da solução numérica depende fortemente dos tamanhos dos passos espaciais (Δx) e temporais (Δt). A escolha adequada desses parâmetros é crucial para garantir a estabilidade e a precisão da solução numérica.

- Passo Espacial (Δx):** O passo espacial Δx determina a resolução espacial da malha. Quanto menor o Δx , maior é a resolução e mais precisa é a representação da solução. No entanto, um Δx menor também requer um maior número de pontos na malha, aumentando o custo computacional.

- **Passo Temporal (Δt):** O passo temporal Δt influencia a precisão da solução em relação ao tempo. Um Δt menor melhora a precisão temporal, mas também aumenta o número de passos temporais, afetando o tempo de execução. A escolha de Δt deve atender à condição de estabilidade numérica, que para o método explícito das diferenças finitas é dada por:

$$\text{Número de Fourier} = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (25)$$

Se o número de Fourier exceder 0.5, o método pode se tornar instável e produzir resultados imprecisos.

- **Compromisso entre Precisão e Custo Computacional:** Há um trade-off entre a precisão da solução e o custo computacional. Reduzir Δx e Δt aumenta a precisão, mas também requer mais cálculos e memória. A escolha ideal dos passos espaciais e temporais deve equilibrar a precisão desejada com o custo computacional disponível.

- **Impacto na Solução Numérica:**

- Para Δx muito grande: A solução pode ser imprecisa e não capturar detalhes importantes do perfil de temperatura.
- Para Δx muito pequeno: A solução será mais precisa, mas o custo computacional aumentará.
- Para Δt muito grande: Pode ocorrer perda de precisão e instabilidade numérica.
- Para Δt muito pequeno: A precisão aumentará, mas o tempo de computação também crescerá.

3.1.2 Influência do Parâmetro α

O parâmetro α é o coeficiente de difusão térmica e é dado por:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (26)$$

onde k é a condutividade térmica, ρ é a densidade e c_p é a capacidade calorífica específica. O valor de α determina a **velocidade de difusão**: Um α maior resulta em uma maior taxa de difusão, fazendo com que o calor se espalhe mais rapidamente.

Resumo A precisão da solução depende fortemente da escolha dos passos espaciais e temporais. Um equilíbrio adequado deve ser encontrado para garantir a estabilidade e a precisão da simulação. A condição de estabilidade do método das diferenças finitas deve ser respeitada para evitar soluções instáveis e imprecisas.

3.2. Implementação Numérica

A seguir, apresentamos o trecho de código Python correspondente à implementação do método das diferenças finitas explícito para resolver a equação do calor.

```
def calcula_temperatura(parametros):
    # Inicializa os parâmetros
    k = 1
    while k < len(Temp_all):
        # Atualiza a temperatura usando
        # o esquema explícito
        Temp[1:-1] += (passo_temporal /
                       (passo_espacial ** 2)) *
                      (Temp[2:] - 2 * Temp[1:-1] +
                       Temp[:-2])

        # Armazena os resultados
        Temp_all[k, :] = Temp
        k += 1
    return Temp_all
```

3.2.1 Descrição do Código

- `def calcula_temperatura(parametros):`: Define a função para calcular a temperatura utilizando o método das diferenças finitas explícitas.
- `intervalos_espaciais`: Número de intervalos espaciais ao longo da barra.
- `passos_tempo`: Número total de passos no tempo.
- `passo_espacial`: Tamanho do passo espacial (Δx).
- `passo_temporal`: Tamanho do passo temporal (Δt).
- `Temp`: Vetor de temperaturas no instante de tempo atual.
- `Temp_all`: Matriz para armazenar as temperaturas em todos os instantes de tempo e para todos os pontos do domínio espacial.
- `k = 1`: Inicializa a variável `k`, que representa o índice temporal.
- `while k < len(Temp_all)`: Loop sobre os instantes de tempo até alcançar o tempo final.
- `Temp[1:-1] += (passo_temporal / (passo_espacial ** 2)) * (Temp[2:] - 2 * Temp[1:-1] + Temp[:-2])`: Implementa o esquema de diferenças finitas explícito para atualizar a temperatura nos pontos internos do domínio espacial.

- `Temp_all[k, :] = Temp`: Armazena os valores de temperatura atualizados para o instante de tempo k .
- $k += 1$: Incrementa o índice temporal.
- `while k < len(Temp_all)`: Loop sobre os instantes de tempo até alcançar o tempo final.
- `Temp[1:-1] += (passo_temporal / (passo_espacial ** 2)) * (Temp[2:] - 2 * Temp[1:-1] + Temp[:-2])`: Implementa o esquema de diferenças finitas explícito para atualizar a temperatura nos pontos internos do domínio espacial.
- `Temp_all[k, :] = Temp`: Armazena os valores de temperatura atualizados para o instante de tempo k .
- $k += 1$: Incrementa o índice temporal.
- `return Temp_all`: Retorna a matriz `Temp_all` contendo a distribuição de temperatura em todos os instantes de tempo.

A função `calcula_temperatura` aplica o método das diferenças finitas explícitas para resolver numericamente a equação do calor. Ela começa inicializando o índice temporal k e, em seguida, itera sobre o tempo utilizando um loop `while`. Em cada iteração, a função atualiza a temperatura nos pontos internos da barra, calculando a nova temperatura com base na fórmula das diferenças finitas, que leva em conta o fluxo de calor entre os pontos adjacentes. Após atualizar as temperaturas, os valores são armazenados na matriz `Temp_all`, que registra a evolução da temperatura ao longo do tempo. O loop continua até que todos os passos temporais sejam completados, e a função retorna a matriz `Temp_all`, contendo a distribuição de temperatura em todos os instantes de tempo.

4. Resultados

4.1. Links para o GitHub

Os resultados e códigos utilizados para a solução dos problemas estão disponíveis no GitHub.

Neles, encontram-se análises adicionais não apresentadas neste documento, Como análise de erro e testes de condição de estabilidade.

Acesse os links abaixo para visualizar o repositório:

- **Repositório:**

https://github.com/Santana-DS/Trabalho-Numerico_TCM/tree/main

- **Problema 1:**

https://github.com/Santana-DS/Trabalho-Numerico_TCM/blob/main/Problema1.ipynb

- **Problema 2:**

https://github.com/Santana-DS/Trabalho-Numerico_TCM/blob/main/Problema2.ipynb

- **Problema 3:**

https://github.com/Santana-DS/Trabalho-Numerico_TCM/blob/main/Problema3.ipynb

Nesta seção, apresentamos os resultados obtidos para cada problema, incluindo gráficos que ilustram a solução numérica e a comparação com a solução analítica.

4.2. Problema 1: Condições de Contorno Homogêneas e Condição Inicial Uniforme

Para o **Problema 1**, a solução analítica é conhecida e dada por:

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{(2n-1)\pi} \sin((2n-1)\pi x) \exp(-(2n-1)^2\pi^2 t). \quad (27)$$

4.2.1 Distribuição da Temperatura - Solução Numérica

A Figura 2 mostra a distribuição da temperatura ao longo da barra em diferentes instantes de tempo obtida pela solução numérica. O gráfico 3D ilustra a evolução da temperatura no domínio espacial e temporal.

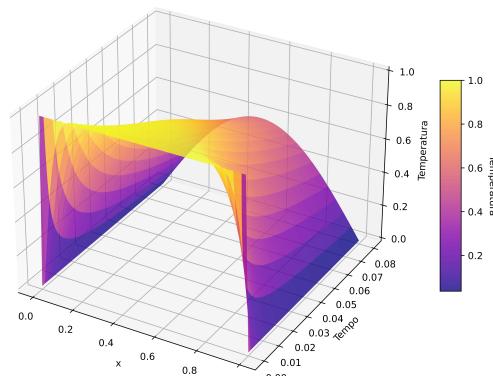


Figura 2. Distribuição da temperatura no Problema 1 - Solução Numérica

4.2.2 Comparação com a Solução Analítica

A Figura 3 compara a solução numérica com a solução analítica para diferentes instantes de tempo. O gráfico 2D mostra a concordância entre as duas soluções ao longo do domínio espacial.

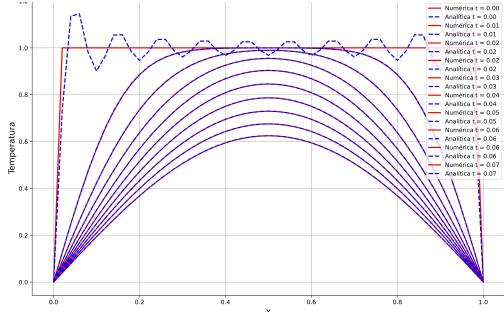


Figura 3. Comparação entre solução numérica e analítica para o Problema 1

4.2.3 Análise do Comportamento quando $t \rightarrow \infty$

Para o Problema 1, quando $t \rightarrow \infty$, a solução analítica indica que a temperatura ao longo da barra tende a zero. A análise detalhada mostra que cada termo na série de Fourier decresce exponencialmente com o tempo devido ao fator $\exp(-(2n-1)^2\pi^2t)$. Com o tempo, os termos de maior frequência (maior n) se tornam insignificantes, e o perfil de temperatura se aproxima de zero em toda a barra. Isso reflete a dissipação do calor ao longo do tempo até que a temperatura uniforme zero seja alcançada em todas as posições x .

4.3. Problema 2: Condições de Contorno Não Homogêneas e Condição Inicial Nula

Para o **Problema 2**, a solução analítica é dada por:

$$T(x, t) = 1 - x - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin(n\pi x) \exp(-n^2\pi^2t). \quad (28)$$

4.3.1 Distribuição da Temperatura - Solução Numérica

A Figura 4 mostra a distribuição da temperatura ao longo da barra em diferentes instantes de tempo obtida pela solução numérica.

4.3.2 Comparação com a Solução Analítica

A Figura 5 compara a solução numérica com a solução analítica para diferentes instantes de tempo. O gráfico 2D mostra a precisão da solução numérica em relação à solução analítica.

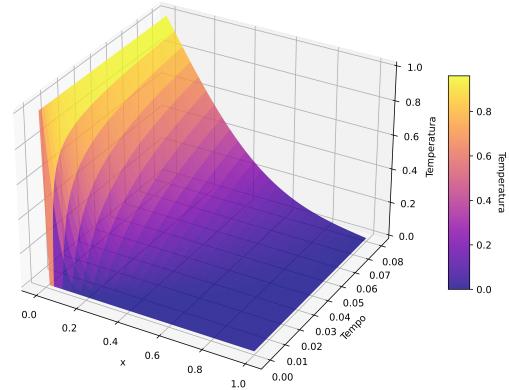


Figura 4. Distribuição da temperatura no Problema 2 - Solução Numérica

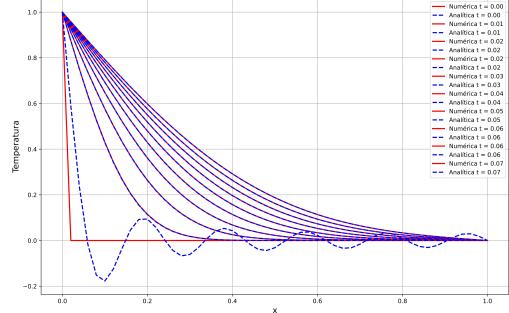


Figura 5. Comparação entre solução numérica e analítica para o Problema 2

4.3.3 Análise do Comportamento quando $t \rightarrow \infty$

No Problema 2, à medida que $t \rightarrow \infty$, a solução analítica mostra que a temperatura se aproxima da distribuição em estado estacionário $T(x) = 1 - x$. A análise revela que os termos da série exponencial $\exp(-n^2\pi^2t)$ se tornam muito pequenos com o aumento de t , de modo que a solução numérica converge para a solução estacionária definida pelas condições de contorno. Isso ocorre porque o efeito das condições iniciais desaparece com o tempo e a solução converge para a forma final determinada pelas condições de contorno não homogêneas.

4.4. Problema 3: Condições de Contorno Homogêneas em Intervalo Maior e Condição Inicial Sinusoidal

Para o **Problema 3**, a solução analítica é dada por:

$$T(x, t) = \exp\left(-\left(\frac{\pi^2 t}{4}\right)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right). \quad (29)$$

4.4.1 Distribuição da Temperatura - Solução Numérica

A Figura 6 mostra a distribuição da temperatura ao longo da barra em diferentes instantes de tempo obtida pela solução numérica.

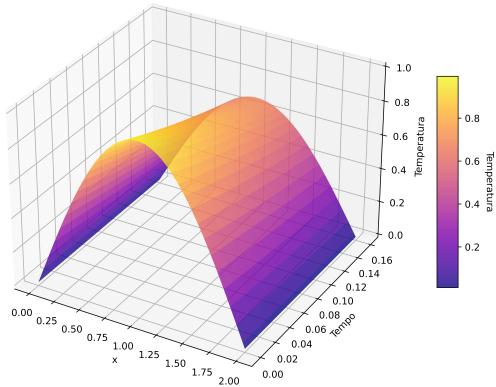


Figura 6. Distribuição da temperatura no Problema 3 - Solução Numérica

4.4.2 Comparação com a Solução Analítica

A Figura 7 compara a solução numérica com a solução analítica para diferentes instantes de tempo. O gráfico 2D mostra a precisão da solução numérica em comparação com a solução analítica.

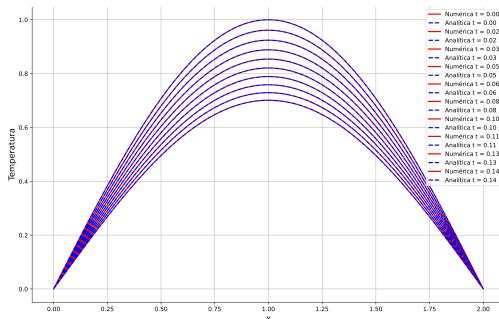


Figura 7. Comparação entre solução numérica e analítica para o Problema 3

4.4.3 Análise do Comportamento quando $t \rightarrow \infty$

Para o Problema 3, à medida que $t \rightarrow \infty$, a solução analítica revela que a temperatura se aproxima de zero em toda a barra. O fator exponencial $\exp\left(-\left(\frac{\pi^2 t}{4}\right)\right)$ na expressão da solução diminui rapidamente com o tempo, resultando em uma temperatura que converge para zero. Mesmo a condição inicial sinusoidal $\sin\left(\frac{\pi}{2}x\right)$ é atenuada ao longo do tempo, e o perfil de temperatura atinge um valor próximo

de zero em todo o domínio espacial, indicando a dissipação completa do calor.

5. Conclusões

Neste trabalho, analisamos a equação do calor em diferentes configurações de condições de contorno e iniciais, utilizando métodos numéricos para obter soluções aproximadas. A comparação com as soluções analíticas mostrou que os métodos numéricos utilizados são precisos e eficientes para resolver a equação do calor em uma variedade de cenários.

As principais conclusões são:

- O método das diferenças finitas é uma abordagem eficaz para resolver a equação do calor numericamente, desde que os parâmetros de discretização sejam escolhidos adequadamente.
- A comparação com as soluções analíticas é essencial para validar a precisão das soluções numéricas.
- As condições de contorno e iniciais influenciam significativamente a dinâmica da solução, e ajustes cuidadosos são necessários para garantir a precisão dos resultados.

Para futuros trabalhos, seria interessante estender a análise para problemas de condução de calor em duas ou três dimensões, o que introduz maior complexidade e desafios adicionais na solução numérica.

Referências

- [1] Adriano Possebon Rosa, *Roteiro para o Trabalho Numérico de TCM: Solução da Equação do Calor 1D Transiente*, UnB, 2024
- [2] J. D. Hoffman, *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, McGraw-Hill, 2001.
- [3] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, 1959.