# IPRJ - Métodos Numéricos para Equações Diferenciais

# Trabalho 2

**Professor: Grazione Souza** 

Nome do aluno: Pedro Henrique Couto Silva

Matrícula: 202020466311

Nome do aluno: Vinicius Carvalho Monnerat Bandeira

Matrícula: 202020466711

#### **RESUMO**

Neste relatório, analisou-se a solução de um modelo de difusão em regime estacionário, descrito por equações diferenciais de segunda ordem. Utilizou-se o método das diferenças finitas para discretizar e resolver numericamente o comportamento da concentração de uma substância em um domínio dividido em duas regiões distintas, cada uma com diferentes parâmetros de difusão. A modelagem incluiu a discretização do domínio, a construção da matriz de coeficientes e do vetor de termos constantes, além da implementação de condições de contorno do tipo Dirichlet e Neumann. Foram realizadas simulações para diferentes valores dos parâmetros de difusão D, ka, e kb, além de condições de fronteira variadas. Os resultados demonstram como a difusão da substância é afetada pelas variações desses parâmetros e das condições de contorno, permitindo uma análise aprofundada do comportamento da concentração ao longo do domínio.

# SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	3
1 ENTENDENDO O PROBLEMA	3
2 MODELANDO O PROBLEMA	4
2.1 Discretização do domínio	4
2.2 Preenchimento da matriz A e do vetor b	4
2.2.1 Matriz A	5
2.2.2 Vetor b	5
2.3 Implementação das condições de contorno	6
2.4 Obtendo os resultados	6
2.4 Generalizando o problema.	7
3 APLICANDO O MÉTODO	8
3.1 Escolhendo o N ideal para a solução	9
4 ANÁLISES DAS SIMULAÇÕES	10
4.1 Diferentes coeficientes de difusão	10
4.2 Diferentes parâmetros ka	11
4.3 Diferentes parâmetros kb	12
4.4 Diferentes condições de contorno na fronteira esquerda	13
CONCLUSÃO	14
APÊNDICE A	15

## INTRODUÇÃO

A modelagem matemática de fenômenos físicos é uma ferramenta essencial na compreensão e predição do comportamento de sistemas reais. No estudo de processos de transporte, como a difusão de substâncias em um meio, as equações diferenciais parciais desempenham um papel fundamental ao descrever a variação espacial e temporal de propriedades, como concentração e temperatura. O presente relatório tem como objetivo analisar a solução de um modelo de difusão em regime estacionário, onde a concentração C(x) de uma substância é governada por um sistema de equações diferenciais de segunda ordem.

Neste trabalho, o método das diferenças finitas será utilizado para discretizar e resolver numericamente as equações diferenciais, permitindo determinar o perfil de concentração C(x) ao longo do domínio. O método de diferenças finitas é amplamente utilizado na solução de equações diferenciais devido à sua simplicidade e capacidade de lidar com geometrias complexas e condições de contorno variadas. A análise incluirá a implementação do método e a obtenção de resultados para diferentes configurações dos parâmetros D,  $k_a$  e  $k_b$ .

### 1 ENTENDENDO O PROBLEMA

O modelo em questão é descrito pelas seguintes equações diferenciais:

$$D\frac{d^2C}{dx^2} - k_a C = 0, 0 \ge x < L, \tag{1}$$

$$D\frac{d^{2}C}{dx^{2}} - k_{b}C = 0, L \ge x < L + L_{f'}$$
 (2)

Onde D é o coeficiente de difusão, C(x) é a concentração da substância, e  $k_a$  e  $k_b$  são parâmetros dependentes da posição. Essas equações descrevem o comportamento da concentração em duas regiões distintas: uma que se estende de 0 a L, e outra de L até  $L+L_f$  com diferentes características físicas. As condições de contorno são dadas por  $C(x=0)=C_e$  e  $\left(\frac{dC}{dx}\right)_{x=L+L_f}=0$ , impondo restrições sobre o comportamento da concentração nas extremidades do domínio.

#### 2 MODELANDO O PROBLEMA

### 2.1 Discretização do domínio

O método das diferenças finitas consiste em dividir o domínio  $[0, L + L_f]$  em N pontos igualmente espaçados, com cada ponto separado por uma distância  $\Delta x$ :

Figura 1 - Discretização do domínio

```
1 # Discretização do domínio

2 dx = (L + Lf) / (N - 1)

3 x = \text{np.linspace}(0, L + Lf, N)
```

Fonte: O autor

Assim, cada ponto  $C_i$  representa a concentração da substância na posição  $x_i$ .

### 2.2 Preenchimento da matriz A e do vetor b

No contexto do método de diferenças finitas para resolver equações diferenciais, a matriz A e o vetor b são componentes fundamentais do sistema linear que representa a discretização das equações diferenciais e das condições de contorno. A matriz e o vetor são preenchidos da seguinte forma:

Figura 2 - Preenchimento da matriz e do vetor

```
1  for i in range(1, N-1):
2    if x[i] < L:
3         A[i, i-1] = D / dx**2
4         A[i, i] = -2 * D / dx**2 - ka
5         A[i, i+1] = D / dx**2
6    else:
7         A[i, i-1] = D / dx**2
8         A[i, i] = -2 * D / dx**2 - kb
9         A[i, i] = D / dx**2</pre>
```

#### 2.2.1 Matriz A

A matriz A é uma matriz de coeficientes que resulta da discretização das equações diferenciais. Cada linha da matriz A corresponde a uma equação linear que representa a aproximação da equação diferencial em um ponto específico do domínio discretizado.

#### 2.2.2 Vetor b

O vetor b é o vetor de termos constantes que resulta da aplicação das condições de contorno e de quaisquer termos constantes presentes nas equações diferenciais. Cada elemento do vetor b corresponde ao termo constante da equação linear associada a um ponto específico do domínio.

Para a maioria dos pontos internos do domínio, os termos constantes são zero, a menos que haja uma fonte ou sumidouro de concentração. No entanto, as condições de contorno introduzem termos constantes específicos no vetor b.

### 2.3 Implementação das condições de contorno

Dadas as informações de 2.1 e 2.2, pode-se adicionar as condições de contorno do sistema:

Figura 3 - Condições de contorno

```
    # Condições de contorno
    A[0, 0] = 1.0
    b[0] = CE
    A[-1, -2] = -1.0 / dx
    A[-1, -1] = 1.0 / dx
```

Fonte: O autor

Em um problema de difusão, as condições de contorno são essenciais para definir o comportamento da concentração nas fronteiras do domínio. Nesse caso, utiliza-se:

Condição de Dirichlet: Define um valor fixo para a concentração em uma fronteira.

Condição de Neumann: Define a derivada espacial na fronteira, representando um fluxo zero ou constante de concentração.

Essas condições permitem que o sistema seja fechado matematicamente e bem definido fisicamente.

#### 2.4 Obtendo os resultados

Para obter o resultado da concentração no domínio, basta resolver o sistema linear formado pela matriz A e o vetor b.

Figura 4 - Resolução do sistema

1 np.linalg.solve(A, b)

Fonte: O autor

### 2.4 Generalizando o problema

Para obter o resultado de uma maneira generalizada para um dado problema de dimensão x, basta definir uma função que receba os parâmetros de contorno.

Figura 4 - Resolução do problema generalizado

```
def difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N):
  # Discretização do domínio
  dx = (L + Lf) / (N - 1)
  x = \text{np.linspace}(0, L + Lf, N)
  # Matriz de coeficientes e vetor de termos constantes
  A = np.zeros((N, N))
  b = np.zeros(N)
  for i in range(1, N-1):
     if x[i] < L:
       A[i, i-1] = D / dx**2
       A[i, i] = -2 * D / dx**2 - ka
       A[i, i+1] = D / dx^{**2}
     else:
       A[i, i-1] = D / dx**2
       A[i, i] = -2 * D / dx**2 - kb
       A[i, i+1] = D / dx**2
  A[0, 0] = 1.0
  b[0] = CE
  A[-1, -2] = -1.0 / dx
  A[-1, -1] = 1.0 / dx
  return np.linalg.solve(A, b), x
```

Fonte: O autor

## 3 APLICANDO O MÉTODO

Para aplicar o método desenvolvido, basta definir os parâmetros de contorno do problema e executar a função, assim o retorno será a concentração do problema para cada valor x e os valores de x do domínio.

Figura 5 - Parâmetros iniciais de exemplo

```
D = 1.0 # Coeficiente de difusão

ka = 1.0 # Parâmetro ka

kb = 1.0 # Parâmetro kb

L = 1.0 # Comprimento L

Lf = 1.0 # Comprimento Lf

CE = 5.0 # Concentração na fronteira x=0

N = 100 # Número de pontos de grade
```

Fonte: O autor

Obtendo a solução:

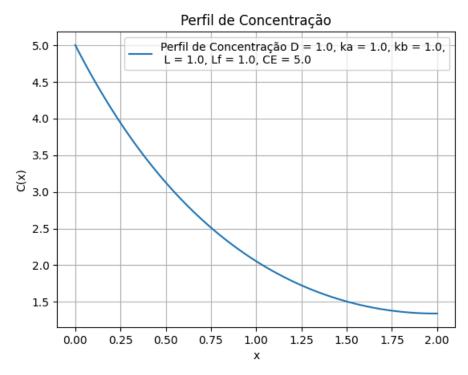
Figura 6 - Obtendo a solução para o exemplo proposto

```
1 C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
```

Fonte: O autor

Plotando o resultado para o domínio de exemplo:

Figura 7 - Resultado da solução para o exemplo proposto

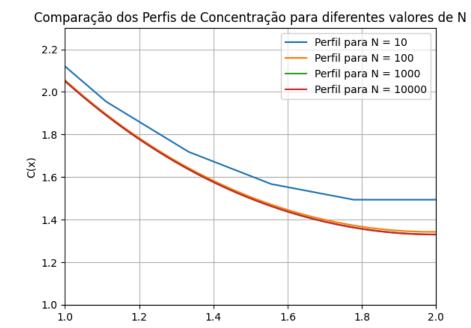


## 3.1 Escolhendo o N ideal para a solução

A escolha do número de pontos *N* influencia diretamente a precisão da solução. Com um número pequeno de pontos, a discretização pode sub-representar o comportamento da concentração, enquanto um número muito grande de pontos aumenta o custo computacional sem garantir melhor precisão, dependendo da estabilidade do esquema numérico.

Como proposto, o domínio das simulações estará disposto em [0, L = 1] e  $[L, L_f = L + 1]$ . Assim, para definir o valor ideal foi experimentado variando o valor de N.

Figura 8 - Resultado da solução para o exemplo proposto



Como é possível observar, as curvas de N=1000 e N=10000 se igualam, enquanto que as curvas de menor N não apresentam tanto detalhe. Logo, pensando no custo computacional, N=1000 é um valor adequado para as simulações no domínio escolhido.

# 4 ANÁLISES DAS SIMULAÇÕES

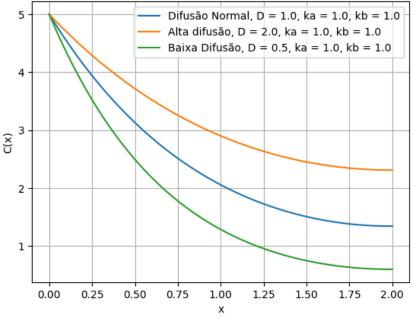
Nesta seção, será estudado os efeitos das mudanças do Coeficiente de difusão D, do parâmetro  $k_a$  e do parâmetro  $k_b$  e por fim diferentes condições na fronteira esquerda para comprimentos de domínio L=1 e  $L_f=L+1$ .

#### 4.1 Diferentes coeficientes de difusão

Para estudar como diferentes coeficientes de difusão afetam o comportamento, a condição de fronteira esquerda foi mantida constante em CE=5, e os parâmetros  $k_a=1$  e  $k_b=1$ . Espera-se que valores menores que 1 tenham uma difusão mais lenta ao longo do domínio e valores maiores sejam o oposto. O resultado foi o seguinte:

Figura 9 - Diferentes valores de difusão



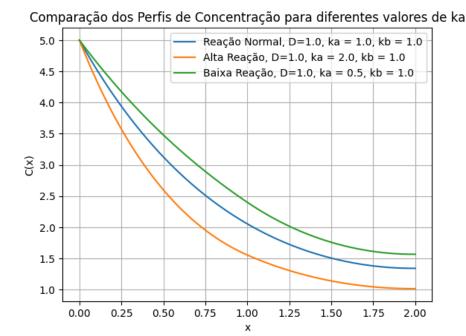


O plano destacado confirma o esperado para os diferentes valores de difusão.

# 4.2 Diferentes parâmetros $k_a$

O parâmetro  $k_a$  representa um termo de reação ou decaimento na equação diferencial de difusão. Ele afeta diretamente a taxa de variação da concentração ao longo do domínio [0,L]. Um valor alto implica uma taxa de reação ou decaimento maior. Isso resulta em uma diminuição mais rápida da concentração ao longo do domínio, logo a concentração tende a decair mais rapidamente, resultando em um perfil de concentração mais baixo. Para esse exemplo foi mantido como constante o valor de  $D=1,k_b=1$ . O resultado foi o seguinte:

Figura 10 - Diferentes valores de  $k_a$ 



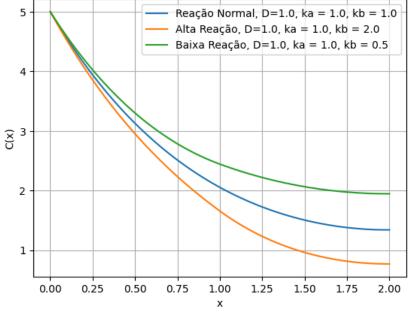
O plano destacado confirma o esperado para os diferentes valores de  $k_a$ .

# 4.3 Diferentes parâmetros $k_b$

O parâmetro  $k_b$ , similar a  $k_a$  representa um termo de reação ou decaimento na equação diferencial de difusão. Diferente de  $k_a$ ,  $k_b$  afeta diretamente a taxa de variação da concentração ao longo do domínio  $[L,L_f]$ . Da mesma forma, um valor alto implica uma taxa de reação ou decaimento maior. Isso resulta em uma diminuição mais rápida da concentração ao longo do domínio, logo a concentração tende a decair mais rapidamente, resultando em um perfil de concentração mais baixo. Para esse exemplo foi mantido como constante o valor de  $D=1,k_a=1$ . O resultado foi o seguinte:

Figura 11 - Diferentes valores de  $k_b$ 



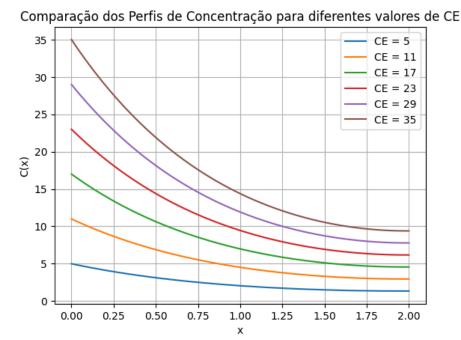


O plano destacado confirma o esperado para os diferentes valores de  $k_b$ .

## 4.4 Diferentes condições de contorno na fronteira esquerda

O valor de CE representa a concentração na fronteira (x=0). Ele é uma condição de contorno essencial que define a concentração inicial da substância no início do domínio. Um valor alto implica uma concentração inicial alta na fronteira. Isso resulta em um perfil de concentração mais alto ao longo do domínio. Logo, a concentração tende a ser maior em todos os pontos do domínio, pois a condição de contorno inicial é mais elevada. Para a visualização das curvas de diferentes CE, foi mantido D=1,  $k_a=1$  e  $k_b=1$ . O resultado foi o seguinte:

Figura 12 - Perfil de diferentes valores de CE



O plano destacado confirma o esperado para os diferentes valores de CE.

### **CONCLUSÃO**

Neste estudo, foi aplicado o método das diferenças finitas para resolver o problema de difusão unidimensional, considerando diferentes parâmetros de difusão e reação, além de diversas condições de contorno. A análise realizada demonstrou a influência significativa de cada um desses fatores no comportamento da concentração ao longo do domínio.

O coeficiente de difusão traz influência na definição do perfil de concentração, com valores mais elevados resultando em perfis mais suaves, enquanto valores menores levaram a gradientes mais acentuados. Os parâmetros de reação  $k_a$  e  $k_b$ , por sua vez, impactaram diretamente a taxa de decaimento da concentração nas duas regiões do domínio, confirmando que taxas de reação mais elevadas aceleram a diminuição da substância ao longo do espaço.

Para as condições de contorno, variar o valor da concentração fixa na fronteira esquerda resultou em perfis de concentração mais elevados ou mais baixos, dependendo do valor adotado. De modo geral, os resultados obtidos validam a eficácia do método das diferenças finitas na solução do problema de difusão proposto.

O estudo aqui proposto pode ser encontrado em https://github.com/ViniciusCMB/Metodos\_Num.git

**Bibliotecas** 

```
In [78]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

Função para resolver o problema de uma dimensão

```
In [79]: def difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N):
             # Discretização do domínio
             dx = (L + Lf) / (N - 1)
             x = np.linspace(0, L + Lf, N)
             # Matriz de coeficientes e vetor de termos constantes
             A = np.zeros((N, N))
             b = np.zeros(N)
             # Preenchimento da matriz A e do vetor b
             for i in range(1, N-1):
                 if x[i] < L:
                     A[i, i-1] = D / dx**2
                     A[i, i] = -2 * D / dx**2 - ka
                     A[i, i+1] = D / dx**2
                 else:
                     A[i, i-1] = D / dx**2
                     A[i, i] = -2 * D / dx**2 - kb
                     A[i, i+1] = D / dx**2
             # Condições de contorno
             A[0, 0] = 1.0
             b[0] = CE
             A[-1, -2] = -1.0 / dx
             A[-1, -1] = 1.0 / dx
             # Resolução do sistema linear
             return np.linalq.solve(A, b), x
```

Parâmetros do problema

```
In [80]: D = 1.0 # Coeficiente de difusão
ka = 1.0 # Parâmetro ka
kb = 1.0 # Parâmetro kb
L = 1.0 # Comprimento L
Lf = 1.0 # Comprimento Lf
CE = 5.0 # Concentração na fronteira x=0
N = 100 # Número de pontos de grade
```

Obtem a resolução do sistema linear e o dominio de dimensão

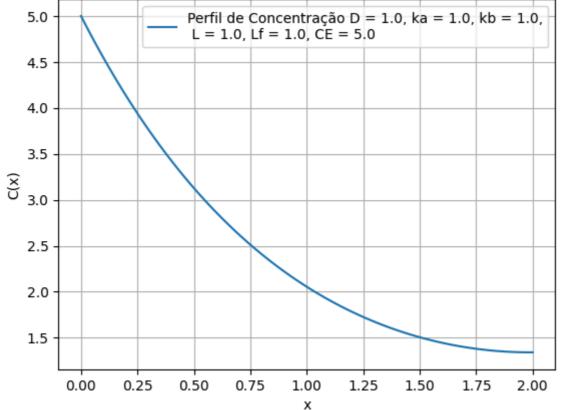
```
In [81]: C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
C
```

```
, 4.90371185, 4.80942502, 4.71710102, 4.62670216,
Out[81]: array([5.
                4.53819157, 4.45153311, 4.36669141, 4.28363186, 4.20232055,
                4.12272429, 4.04481061, 3.96854771, 3.89390445, 3.82085038,
                3.74935569, 3.67939118, 3.61092832, 3.54393915, 3.47839634,
                3.41427314, 3.35154338, 3.29018146, 3.23016233, 3.1714615 ,
                3.11405501, 3.05791943, 3.00303186, 2.94936989, 2.89691162,
                2.84563564, 2.79552103, 2.74654733, 2.69869456, 2.65194318,
                2.60627412, 2.56166874, 2.51810882, 2.4755766 , 2.43405472,
                2.39352623, 2.35397459, 2.31538366, 2.27773768, 2.2410213 ,
                2.20521953, 2.17031775, 2.13630173, 2.10315758, 2.07087177,
                2.03943113, 2.00882283, 1.97903437, 1.9500536, 1.92186869,
                1.89446813, 1.86784075, 1.84197567, 1.81686234, 1.79249052,
                1.76885025, 1.74593188, 1.72372607, 1.70222374, 1.68141613,
                1.66129475, 1.64185137, 1.62307807, 1.60496718, 1.58751131,
                1.57070334, 1.55453641, 1.53900392, 1.52409953, 1.50981716,
                1.49615098, 1.4830954 , 1.47064512, 1.45879503, 1.44754031,
                1.43687636, 1.42679883, 1.41730361, 1.40838682, 1.40004483,
                1.39227422, 1.38507183, 1.37843472, 1.37236018, 1.36684573,
                1.36188911, 1.35748832, 1.35364154, 1.35034721, 1.34760399,
                1.34541076, 1.34376662, 1.3426709 , 1.34212315, 1.34212315])
```

### Plota a solução

```
In [82]: plt.plot(x, C, label='Perfil de Concentração D = ' + str(D) + ', ka = ' + str(ka) + '
    plt.xlabel('x')
    plt.ylabel('C(x)')
    plt.grid()
    titulo = 'Perfil de Concentração'
    plt.title(titulo)
    plt.legend()
    # plt.show()
    plt.savefig('docs/img/trab2/'+titulo+'.png')
```

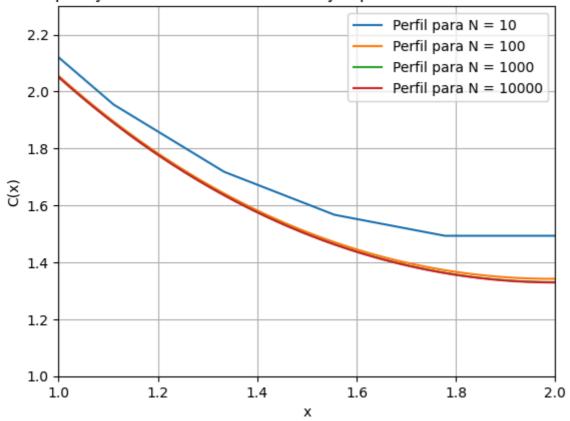




```
In [83]: # Parâmetros do problema
D = 1.0 # Coeficiente de difusão
ka = 1.0 # Parâmetro ka
kb = 1.0 # Parâmetro kb
```

```
L = 1.0 # Comprimento L
Lf = 1.0 # Comprimento Lf
CE = 5.0
         # Concentração na fronteira x=0
N = 10 # Número de pontos de grade
C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
plt.plot(x, C, label=f'Perfil para N = {N}')
N = 100
C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
plt.plot(x, C, label=f'Perfil para N = {N}')
N = 1000
C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
plt.plot(x, C, label=f'Perfil para N = {N}')
N = 10000
C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
plt.plot(x, C, label=f'Perfil para N = {N}')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('C(x)')
plt.grid()
plt.axis([1, 2, 1, 2.3])
titulo = 'Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de N'
plt.title(titulo)
plt.legend()
# plt.show()
plt.savefig('docs/img/trab2/'+titulo+'.png')
```

# Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de N



```
In [84]: # Parâmetros do problema
D = 1.0  # Coeficiente de difusão
ka = 1.0  # Parâmetro ka
kb = 1.0  # Parâmetro kb
L = 1.0  # Comprimento L
Lf = 1.0  # Comprimento Lf
CE = 5.0  # Concentração na fronteira x=0
N = 1000  # Número de pontos de grade
C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
```

```
plt.plot(x, C, label=f'Difusão Normal, D = {D}, ka = {ka}, kb = {kb}')

D = 2.0

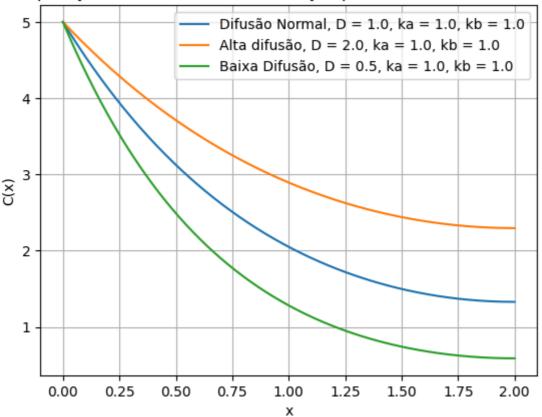
C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
plt.plot(x, C, label=f'Alta difusão, D = {D}, ka = {ka}, kb = {kb}')

D = 0.5

C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
plt.plot(x, C, label=f'Baixa Difusão, D = {D}, ka = {ka}, kb = {kb}')

plt.xlabel('x')
plt.ylabel('C(x)')
plt.grid()
titulo = 'Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de D'
plt.title(titulo)
plt.legend()
# plt.show()
plt.savefig('docs/img/trab2/'+titulo+'.png')
```

# Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de D

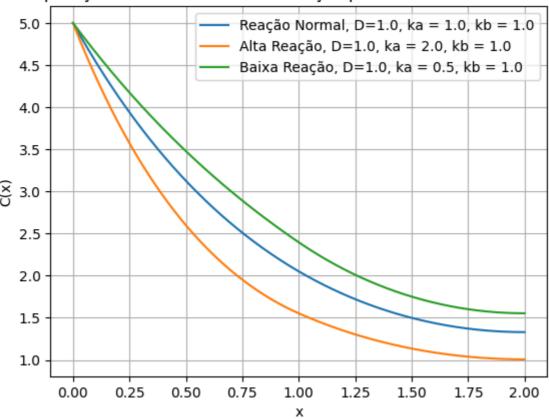


```
In [85]:
         # Parâmetros do problema
         D = 1.0 # Coeficiente de difusão
         ka = 1.0 # Parâmetro ka
         kb = 1.0 # Parâmetro kb
         L = 1.0 # Comprimento L
         Lf = 1.0 # Comprimento Lf
                   # Concentração na fronteira x=0
         CE = 5.0
         N = 1000 # Número de pontos de grade
         C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
         plt.plot(x, C, label=f'Reação Normal, D={D}, ka = {ka}, kb = {kb}')
         ka = 2.0
         kb = 1.0
         C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
         plt.plot(x, C, label=f'Alta Reação, D={D}, ka = {ka}, kb = {kb}')
         ka = 0.5
         kb = 1.0
         C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
```

```
plt.plot(x, C, label=f'Baixa Reação, D={D}, ka = {ka}, kb = {kb}')

plt.xlabel('x')
plt.ylabel('C(x)')
plt.grid()
titulo = 'Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de ka'
plt.title(titulo)
plt.legend()
# plt.show()
plt.savefig('docs/img/trab2/'+titulo+'.png')
```

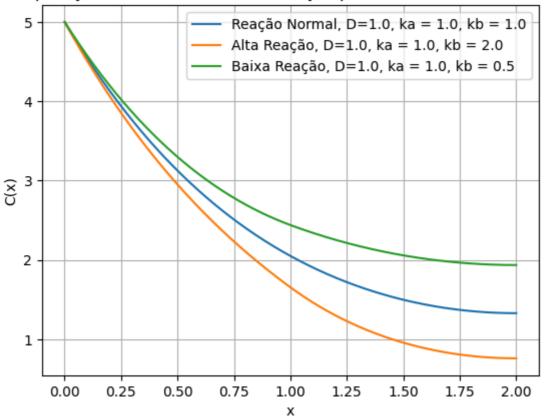
# Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de ka



```
In [86]:
         # Parâmetros do problema
         D = 1.0 # Coeficiente de difusão
         ka = 1.0 # Parâmetro ka
         kb = 1.0 # Parâmetro kb
         L = 1.0 # Comprimento L
         Lf = 1.0 # Comprimento Lf
         CE = 5.0
                  # Concentração na fronteira x=0
         N = 1000 # Número de pontos de grade
         C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
         plt.plot(x, C, label=f'Reação Normal, D={D}, ka = {ka}, kb = {kb}')
         ka = 1.0
         kb = 2.0
         C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
         plt.plot(x, C, label=f'Alta Reação, D={D}, ka = {ka}, kb = {kb}')
         ka = 1.0
         kb = 0.5
         C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
         plt.plot(x, C, label=f'Baixa Reação, D={D}, ka = {ka}, kb = {kb}')
         plt.xlabel('x')
         plt.ylabel('C(x)')
         plt.grid()
         titulo = 'Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de kb'
         plt.title(titulo)
         plt.legend()
```

```
# plt.show()
plt.savefig('docs/img/trab2/'+titulo+'.png')
```

# Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de kb



Plotando para diferentes concentrações

```
# Parâmetros do problema
In [87]:
         D = 1.0 # Coeficiente de difusão
         ka = 1.0 # Parâmetro ka
         kb = 1.0 # Parâmetro kb
         L = 1.0 # Comprimento L
         Lf = 1.0 # Comprimento Lf
         CE_values = np.arange(5, 36, 6) # Concentração na fronteira x=0
         N = 1000 # Número de pontos de grade
         for CE in CE_values:
             C, x = difusao_1d(D, ka, kb, L, Lf, CE, N)
             plt.plot(x, C, label=f'CE = {CE}')
         plt.xlabel('x')
         plt.ylabel('C(x)')
         plt.grid()
         titulo = 'Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de CE'
         plt.title(titulo)
         plt.legend()
         # plt.show()
         plt.savefig('docs/img/trab2/'+titulo+'.png')
```

# Comparação dos Perfis de Concentração para diferentes valores de CE

