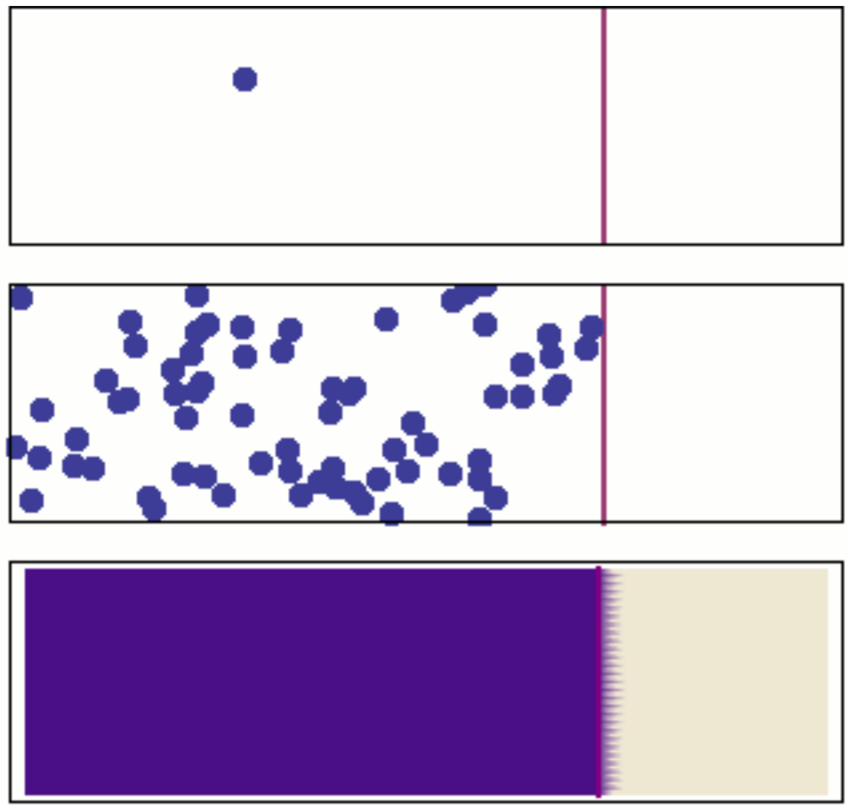
Difusão em diferenças finitas

Marcelo Bianchi & Victor Sacek

Difusão

- É um processo de transporte de massa ou de energia que ocorre em regiões onde existem diferenças de concentração. O transporte por difusão dá-se de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração.

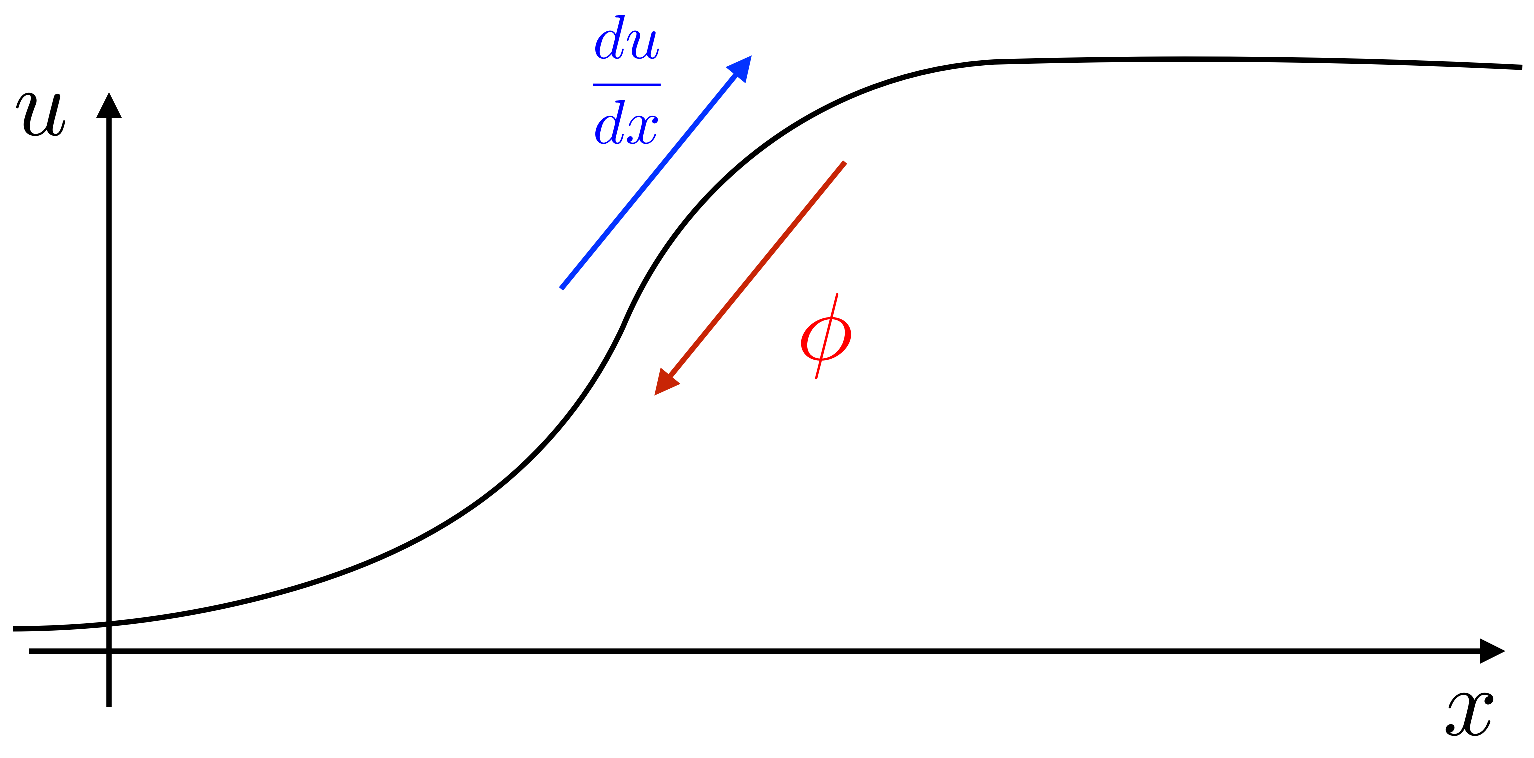
- O transporte por difusão é quantificado pela densidade de fluxo ϕ, que é a quantidade de substância ou energia transportada por unidade de área por unidade de tempo.



Primeira Lei de Fick

- Para muitos problemas físicos, a difusão segue a primeira lei de Fick, em que o fluxo é proporcional ao gradiente da concentração e ocorre no sentido contrário a concentração.

- Em 1D:

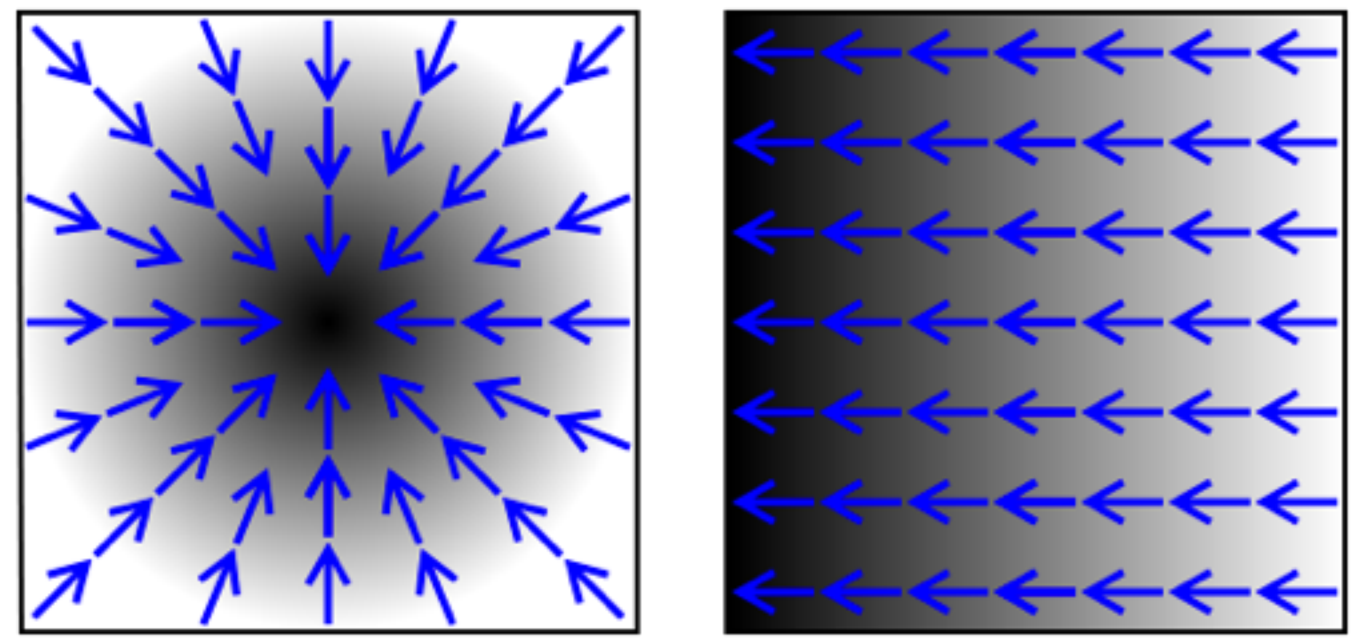


$$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

Primeira Lei de Fick

Em 1D: $$\phi = -\alpha \frac{du}{dx}$$

Em *n*-D: $$\vec{\phi} = -\alpha \nabla u$$



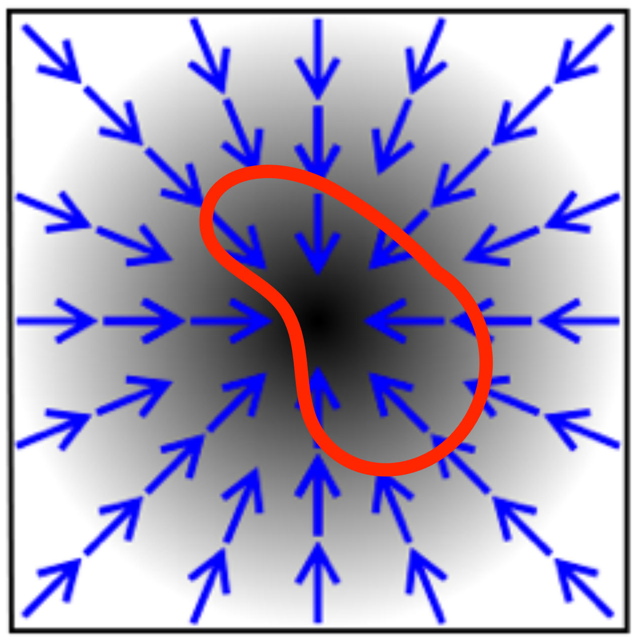
∇u: gradiente de *u*

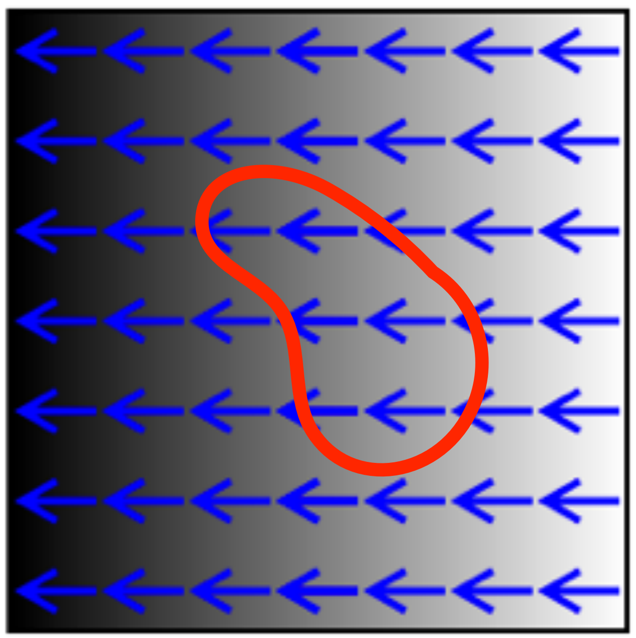
Em 2D: $$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial u}{\partial y}\mathbf{j}$$

Em 3D: $$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial u}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial u}{\partial z}\mathbf{k}$$

Variação de *u* em um certo volume (3D) ou área (2D)

$$Q = \int_V u \; dV$$





$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\int_V u \; dV = \int_V \frac{\partial u}{\partial t} dV = -\oint_S \vec{\phi} \cdot \vec{n} dS$$

Dedução da equação de difusão

$$\int_V \frac{\partial u}{\partial t}\, dV = -\oint_S \vec{\phi} \cdot \vec{n} dS$$

teorema do divergente

$$\int_V \frac{\partial u}{\partial t}\, dV = -\int_V \nabla \cdot \vec{\phi} dV$$

$\nabla \cdot \vec{\phi}$: divergente de $\vec{\phi}$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{\phi}$$

Em 2D: $$\nabla \cdot \vec{\phi} = \frac{\partial \phi_x}{\partial x} + \frac{\partial \phi_y}{\partial y}$$

Em 3D: $$\nabla \cdot \vec{\phi} = \frac{\partial \phi_x}{\partial x} + \frac{\partial \phi_y}{\partial y} + \frac{\partial \phi_z}{\partial z}$$

Dedução da equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{\phi}$$ como $\vec{\phi} = -\alpha \nabla u$ $$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla u)$$

Se α é constante $$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

$\nabla^2 u$: laplaciano de u

Em 2D: $\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$

Em 3D: $\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$

Equação de difusão em 2D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} \right)$$

Aproximação em diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} \approx \frac{\Delta u}{\Delta x}$$

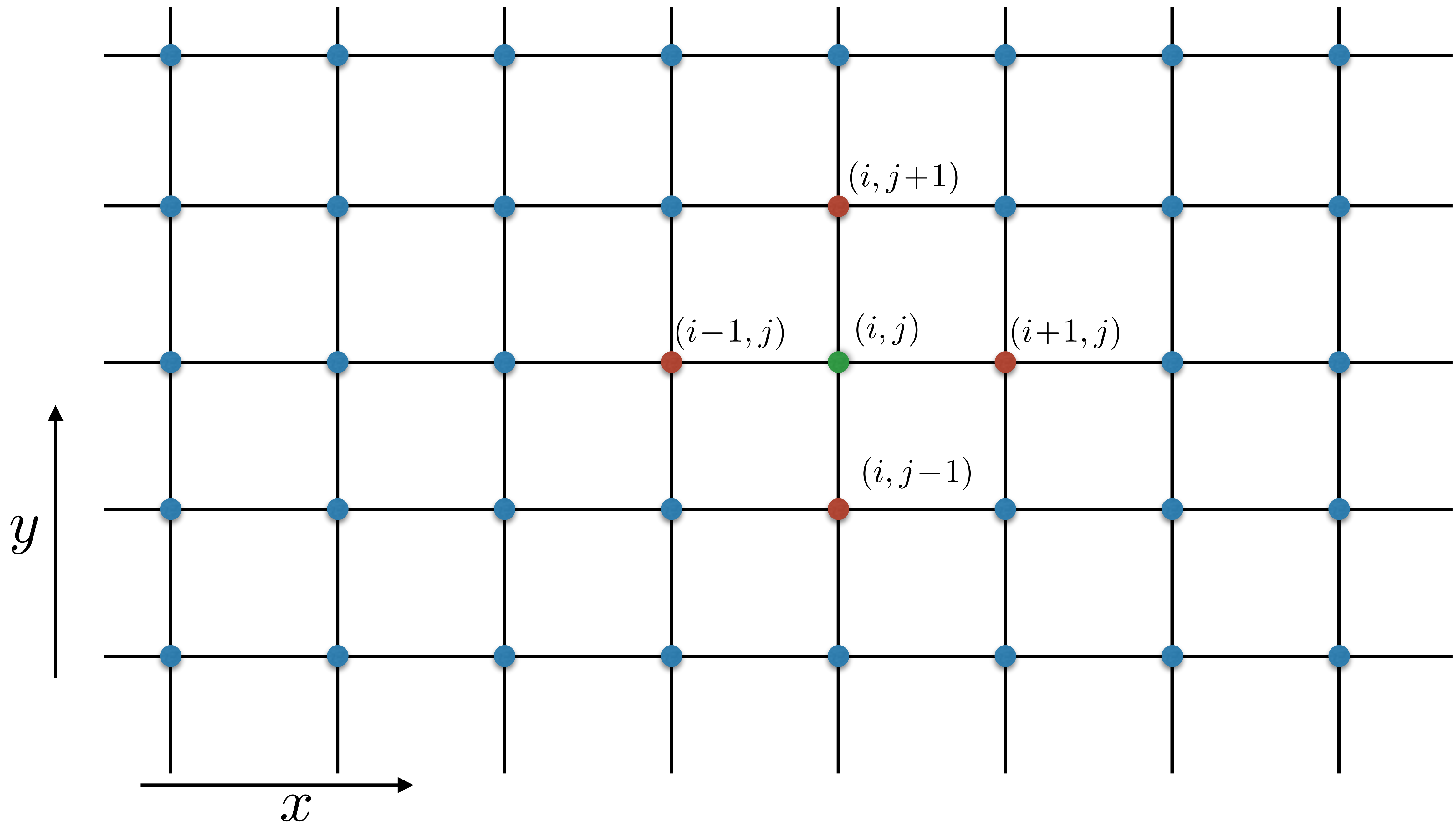
$\frac{\partial u}{\partial x} \approx$ $\quad \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \quad \frac{u_2 - u_1}{\Delta x} \quad \frac{u_3 - u_2}{\Delta x} \quad \frac{u_4 - u_3}{\Delta x} \quad \frac{u_5 - u_4}{\Delta x} \quad \frac{u_6 - u_5}{\Delta x} \quad \frac{u_7 - u_6}{\Delta x}$

$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx$ $\quad \frac{u_2 - 2u_1 + u_0}{\Delta x^2} \quad \frac{u_3 - 2u_2 + u_1}{\Delta x^2} \quad \frac{u_4 - 2u_3 + u_2}{\Delta x^2} \quad \frac{u_5 - 2u_4 + u_3}{\Delta x^2} \quad \frac{u_6 - 2u_5 + u_4}{\Delta x^2} \quad \frac{u_7 - 2u_5 + u_5}{\Delta x^2}$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Difusão em 2D
Diferenças finitas



$$\frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

Difusão em 2D
Diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

Aproximando o membro da direita por diferenças finitas obtemos

$$\alpha \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right)$$

Se $\Delta x = \Delta y$

$$\alpha \left(\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} \right)$$

Difusão em 2D
Diferenças finitas

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

Resta discretizar o termo da esquerda

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_{i,j}^{[futuro]} - u_{i,j}^{[presente]}}{\Delta t}$$

$$\frac{u_{i,j}^{[futuro]} - u_{i,j}^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} \right)$$

Mas esses *u's* são [*presente*] ou [*futuro*]?

Depende da formulação!!!

Difusão em 2D
Diferenças finitas

Formulação implícita

$$\frac{u_{i,j}^{[futuro]} - u_{i,j}^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} \right)^{[futuro]}$$

Vantagem: incondicionalmente estável

Desvantagem: mais difícil de implementar

Formulação explícita

$$\frac{u_{i,j}^{[futuro]} - u_{i,j}^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} \right)^{[presente]}$$

Desvantagem: condicionalmente estável

Vantagem: mais fácil de implementar (fácil de isolar o $u_{i,j}^{[futuro]}$)

Difusão em 2D
Diferenças finitas - formulação explícita

$$\frac{u^{[futuro]} - u^{[presente]}}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} \right)^{[presente]}$$

isolando o $u_{i,j}^{[futuro]}$

$$u_{i,j}^{[futuro]} = u_{i,j}^{[presente]} + \Delta t \alpha \left(\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} \right)^{[presente]}$$

chamando $r = \dfrac{\Delta t \alpha}{\Delta x^2}$

$$u_{i,j}^{[futuro]} = u_{i,j}^{[presente]} + r \left(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} \right)^{[presente]}$$

Difusão em 2D
Diferenças finitas - formulação explícita

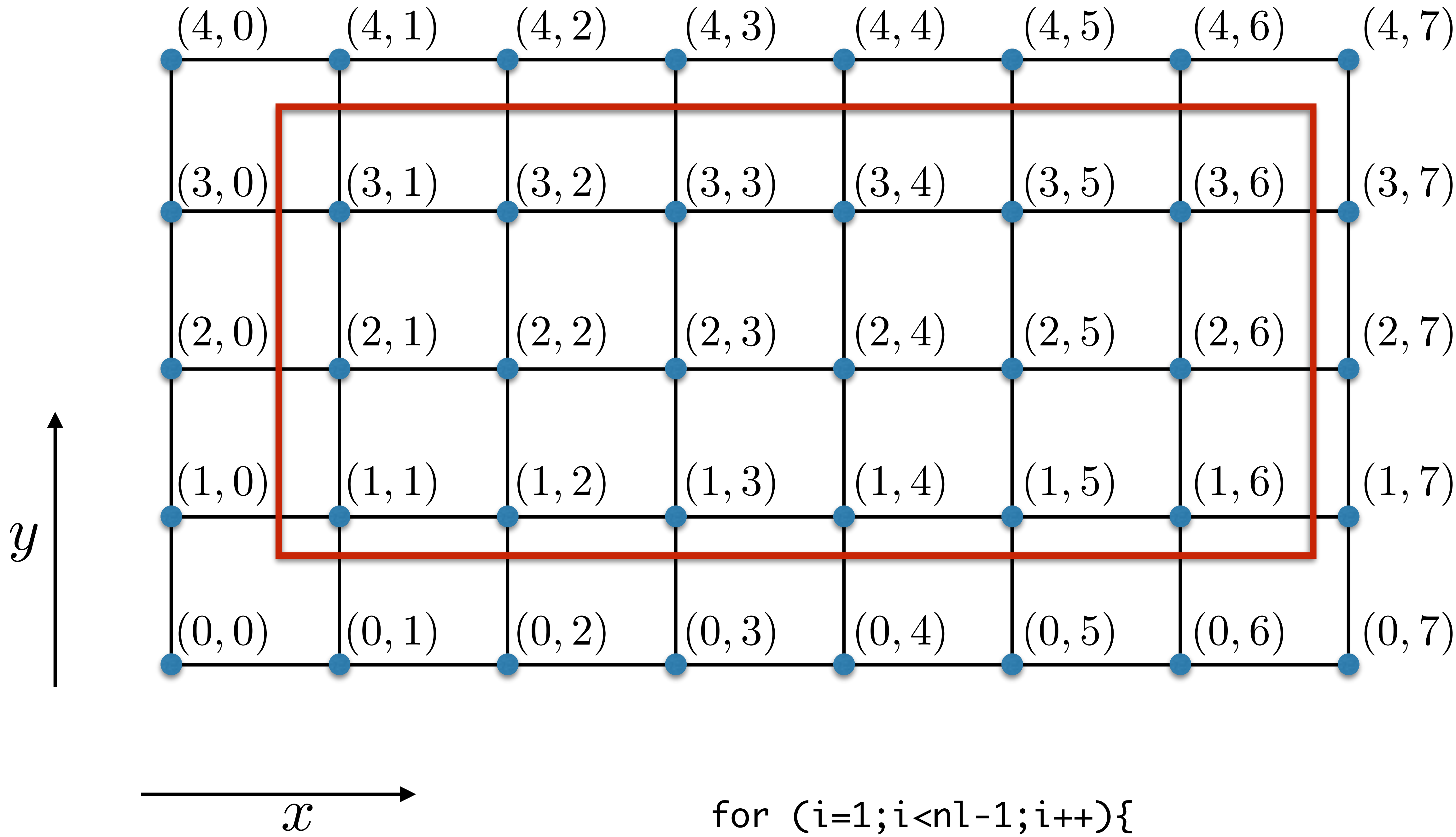
$$u_{i,j}^{[futuro]} = u_{i,j}^{[presente]} + r\left(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}\right)^{[presente]}$$

```
uf[i][j] = up[i][j] +
          r*(up[i+1][j]+up[i-1][j]+up[i][j+1]+up[i][j-1]-4*up[i][j]);
```

```
uf[k] = up[k] +
        r*(up[k+nc]+up[k-nc]+up[k+1]+up[k-1]-4*up[k]);
```

onde `k = i*nc+j`

Difusão em 2D
Diferenças finitas - Bordas




```
for (i=1;i<nl-1;i++){
     for (j=1;j<nc-1;j++){
          //atualiza o valor de uf
     }
}
```

Estabilidade do modelo de difusão para a formulação explícita

$$r = \frac{\Delta t \alpha}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{4}$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{4\alpha} = \Delta t_{max}$$

Opinião: Valor razoável para $\Delta t = \frac{\Delta t_{max}}{2} = \frac{\Delta x^2}{8\alpha}$

Exercício

- Escreva um programa sequencial que resolva a equação de difusão em 2D numericamente através do método das diferenças finitas.

- Use (se quiser) o esqueleto na pasta agg5935s/difu2D_seq.

- Esse EP vale nota!