Equações de Calor e Advecção resolvidas pelo Método das Diferenças Finitas

Danielle dos Santos Chagas; Shaian José Anghinoni² Ilum Escola de Ciência Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) Campinas, Brasil

Resumo Este trabalho aborda as Equações de Calor e Advecção resolvidas pelo Método das Diferenças Finitas. Através da análise numérica, busca-se compreender e resolver problemas relacionados à transferência de calor e à dispersão de concentração. Na seção sobre a Equação de Calor, são apresentados conceitos fundamentais, como a transferência de energia e a lei fenomenológica de Fourier. Já na seção sobre a Equação de Advecção, é mostrado como a dispersão de concentração pode ser modelada e resolvida numericamente. As conclusões destacam a importância do uso de métodos numéricos para obter soluções precisas e eficientes, evidenciando o comportamento do calor ao longo do tempo e do espaço, bem como o transporte de substâncias com a equação da advecção. Essas conclusões contribuem para o avanço da compreensão e aplicação desses fenômenos na ciência.

Palavras-chave. Equação de calor, Equação de advecção, Diferenças Finitas.

1 Introdução

1.1 Equação de Calor

Considerando o ponto de vista da Termodinâmica, o calor é resultado de uma energia transferida para o sistema devido à mudança de temperatura entre o próprio sistema e seus arredores [1]. Quando um sistema experiencia diferentes temperaturas em suas extremidades, uma corrente de energia flui da região quente para a região fria, ao nível macroscópico este fenômeno é descrito pela lei fenomenológica de Fourier [4].

Widder [13] apresenta dois postulados interessantes sobre o calor:

a) A quantidade de aumento na quantidade de calor ΔQ em um material é diretamente proporcional à massa m do material e ao aumento da temperatura Δu :

$$\Delta Q = cm\Delta u,\tag{1}$$

onde c é o calor específico do material. E b) Numa barra reta de material homogêneo podemos considerar lados isolados, de comprimento Δx e seção transversal constante A. Se suas duas extremidades forem mantidas constantemente em duas temperaturas diferentes que diferem de Δu , a temperatura ao longo da barra ira variar linearmente, e a quantidade de fluxo dependerá da mudança de temperatura $\Delta u/\Delta x$. Além disso, esta quantidade ΔQ é diretamente proporcional a A, a $\Delta u/\Delta x$ e a Δt , a quantidade de tempo decorrido:

¹danielle220038@ilum.cnpem.br

²shaian220071@ilum.cnpem.br

$$\Delta Q = -lA \frac{\Delta u}{\Delta x} \Delta t,\tag{2}$$

onde l é uma constante de condutividade termal do material e o fluxo na direção de um x crescente acontece quando $\Delta x/\Delta u<0$.

Se tomarmos que as propriedades do material, a distribuição inicial de temperatura e a fonte de calor irão variar apenas com x, e a distância ao longo do comprimento, esperamos que a distribuição de temperatura em qualquer momento varie apenas com x. Isso resulta numa equação diferencial em uma dimensão espacial. Como a solução pode variar no tempo, podemos escrever como u(x,t) a temperatura no ponto x e no tempo t, onde a < x < b representa um comprimento finito da barra. A solução resultante disso é embasada por uma equação de difusão calor, dada como:

$$u_t(x,t) = (\kappa(x)u_x(x,t))_x + \psi(x,t), \tag{3}$$

onde $\kappa(x)$ é o coeficiente de condutividade térmica, que pode variar com x, e $\psi(x,t)$ é a fonte de calor [7].

Vamos desconsiderar alguns termos, que falam sobre impor fontes de temperatura, por exemplo, que tornam a equação um pouco mais complexa, e manteremos outros. Reorganizando de tal forma que nossa equação do calor se tornará:

$$u_t = \kappa u_{xx} \tag{4}$$

A equação do calor é tão importante que pode ser aplicada em diferentes áreas do conhecimento. Na cosmologia dissipativa, área que estuda modelos cosmológicos com processos dissipativos como viscosidade e condução de calor nas dinâmicas do Universo, foi usada para estudar a evolução da temperatura em um espaço-tempo fluido em expansão [8]. Na biologia, a equação do calor foi utilizada no contexto da hipertermia oncológica para descrever os processos e o balanço energético envolvidos no tratamento [11] e modelar a transferência de calor em tecidos vivos [6]. Pode ser usada também para representam estudar a evolução de um sistema ou processo físico [2] e troca de calor entre fases de um sistema [3].

1.2 Equação de Advecção

A advecção é um fenômeno de transporte em que um fluido transporta consigo massas, calor ou outras propriedades à medida que flui. A equação da advecção linear é uma Equação Diferencial Parcial (EDP) unidimensional que descreve a transferência unidimensional de massa, calor ou outras propriedades de uma região do fluido para outra região através do movimento intrínseco do fluido. Essa equação desempenha um papel fundamental no estudo de processos de transporte em diversos campos científicos, permitindo compreender como as propriedades físicas se propagam ao longo do fluido e como ocorrem as interações entre diferentes regiões.

A equação é dada por

$$u_t + \mu u_x = 0$$

no domínio do espaço $0 \ge x \ge 1$ e $0 \ge t \ge 1$ no dominio do tempo, são as condições de fronteira e a condição inicial do problema é dada por $u(x,0) = \eta(x) = x(1-x)$. Temos também as condições $u(x,t) = \eta(x-\mu t)$ e o valor $\mu = 0.25$, que nos dá os componentes da velocidade do fluido na direção de x.

O termo μu_x é chamado de velocidade advectiva, onde μ é uma constante e u é uma função desconhecida de x e t. Esse termo representa a taxa de variação da função u em relação à coordenada x multiplicada pela constante μ . Em outras palavras, a velocidade advectiva está relacionada à taxa de mudança da propriedade transportada pelo fluido na direção x.

A equação da advecção pode ser aplicada em diferentes áreas, como dinâmica dos fluidos, ciência atmosférica, ciências oceanográficas e fenômenos de transporte. Na dinâmica dos fluidos, ela é empregada para representar o transporte de poluentes, calor e outras substâncias dentro de um fluido [9, 10].

2 Metodologia

Abaixo estão descritos os materiais e métodos utilizados para realizar esse trabalho:

2.1 Teoria das Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas é um método numérico utilizado para aproximar soluções de equações diferenciais. Ele substitui as derivadas nas equações diferenciais por aproximações de diferenças finitas e isso resulta em um sistema de equações algébricas, que pode ser facilmente resolvido em um computador. O método é uma abordagem discreta das derivadas e envolve a aproximação das derivadas de uma função em um número finito de pontos. Essas aproximações são, então, utilizadas para resolver a equação diferencial [5, 7].

Vamos considerar u(x) representando uma função de uma variável que podemos diferenciar a função várias vezes e cada derivada é uma função limitada bem definida em um intervalo que contém um ponto de interesse \bar{x} . Para uma aproximação de $u'(\bar{x})$ pela aproximação da diferença finita baseado somente nos valores de u com um número finito de pontos próximos de (\bar{x}) , podemos usar:

$$D_{+}u(\bar{x}) \equiv \frac{u(\bar{x}+h) - u(\bar{x})}{h},\tag{5}$$

para valores pequenos de h. Isso se dá devido à definição padrão da derivada como o valor limite dessa expressão quando como h $\to 0$. Notamos que $D_+u(\bar x)$ é a inclinação da reta que interpola u nos pontos $\bar x$ e $\bar x + h$. A expressão 5 é uma aproximação unilateral, uma vez que u é avaliado apenas em valores de $x \ge \bar x$. Outra aproximação unilateral seria:

$$D_{-}u(\bar{x}) \equiv \frac{u(\bar{x}) - u(\bar{x} - h)}{h}.$$
(6)

Essas aproximações (Equações 5 e 6) são chamadas de diferença finita à direita e à esquerda, ou, diferença progressiva e regressiva, respectivamente [12]. Cada uma dessas aproximações fornece uma aproximação de primeira ordem precisa para $u\bar{x}$, o que significa que o tamanho do erro é aproximadamente proporcional a ele mesmo, ou seja, $\mathcal{O}(h)$. Ainda, podemos fazer uma aproximação centrada, que é a soma das equações 5 e 6, dada pela seguinte equação:

$$D_0 x(\bar{x}) \equiv \frac{u(\bar{x} + h) - u(\bar{x} + h)}{2h} = \frac{1}{2} ((D_+ u\bar{x}) + (D_- u\bar{x})) \tag{7}$$

Essa é a inclinação da reta que interpola u em $\bar{x}-h$ e $\bar{x}+h$, e é simplesmente a média das duas aproximações de um lado definidas acima. É esperado que a centrada forneça uma melhor aproximação do que qualquer uma das aproximações de um lado, por ser uma aproximação de segunda ordem precisa.

Podemos obter a aproximação da segunda derivada, que é o principal ponto do trabalho, aplicando a diferença finita à esquerda e, em seguida, à direita. De tal modo que:

$$D_{+}u(D_{-}u(x)) = \frac{1}{h}(D_{-}u(x+h) - D_{-}u(x))$$
(8)

$$D_{+}u(D_{-}u(x)) = \frac{1}{h} \left(\frac{u(x+h) - u(x)}{h} - \frac{u(x) - u(x-h)}{h} \right)$$
(9)

$$D_2 u(x) = \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2}$$
(10)

$$= D_2 u(x) \tag{11}$$

Usaremos, então, essa expressão dada por $D_2u(x)$ para a resolução dos nossos problemas envolvendo as equações de calor e advecção.

2.2 Lógica computacional

2.3 Equação do calor

Utilizando a equação 11, resolveremos o sistema $u_t = \kappa u_{xx}$. A resolução do problema com a substituição dos valores e o termo u(x, t + h) isolado ficaremos com a seguinte expressão:

$$u(x,t+h) = u(x,t-h) + 2\kappa h \left[\frac{u(x+m,t) - 2u(x,t) + u(x-m,t)}{m^2} \right]$$
(12)

Para a aplicação no algoritmo, que foi desenvolvido no Octave, vamos considerar $0 \le x \le 1$ e $0 \le t \le 1$, em que $\kappa = 0.5$, $u(x,0) = x(1-x)^2$, u(0,t) = 0 e u(1,t) = 0.

Definimos os parâmetros necessários, como condutividade térmica, comprimento e tempo do intervalo, e o número de pontos na partição espacial e temporal. Em seguida, discretizamos o domínio e calculamos a variação da temperatura em cada ponto ao longo do tempo e então aplicamos as condições iniciais e de contorno para obter a distribuição de temperatura em uma representação tridimensional da grade espacial-temporal.

2.4 Equação de advecção

Utilizando a equação 11, resolveremos o sistema $u_t + \mu u_x = 0$ com o método da diferença finita atrasada. Temos, portanto, a seguinte expressão após a substituição dos valores e isolarmos o termo u_t :

$$u(x,t+h) = u(x,t) - \frac{\mu h}{2\kappa} (u(x+h,t) + u(x-h,t))$$
(13)

Para a aplicação no algoritmo que foi desenvolvido no Octave, vamos considerar $0 \le x \le 1$ e $0 \le t \le 1$, $\mu = 0.25$, $u(x, 0) = \eta(x) = x(1 - x)$ e $u(x, t) = \eta(x - \mu t)$.

Discretizamos o domínio espacial e temporal em uma grade de pontos e definimos parâmetros como o coeficiente de difusão " μ "e o número de pontos na direção "x"e no tempo "t". Em seguida, aplicamos condições iniciais e de contorno apropriadas. Utilizando a equação de advecção discreta, iteramos sobre os pontos da grade para obter a solução numérica em cada ponto. Os resultados obtidos são visualizados em uma representação tridimensional da grade espacial-temporal.

Ambos os códigos estarão disponíveis no material suplementar desse trabalho.

3 Resultados

Abaixo estão as interpretações gráficas da solução do problema do calor e da advecção.

3.1 Equação do calor

Dado o gráfico da imagem 1 podemos observar como o calor se comporta considerando a temperatura, espaço e o tempo. O primeiro ponto que vale a pena comentar é que a temperatura tende a zero conforme o tempo passa. Se consideramos um sistema em que não há adição de calor e em sua configuração inicial existe um ponto com temperatura maior, o calor se espalhará até ser uniforme em todos os pontos. Podemos ver que é isso que ocorre no sistema sendo estudado, ele começa com temperatura maior na posição na metade do eixo x e com as bordas em menor temperatura e segue se espalhando ao longo do tempo e espaço. Podemos entender então o equilíbrio térmico que essa equação descreve. No gráfico 2 podemos ver um recorte sem o domínio do tempo, em que é exemplificado o fato do calor estar localizado no meio do espaço.

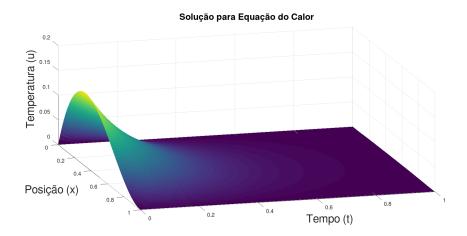


Figura 1: Gráfico representativo da equação do calor resolvida em três dimensões, sendo o eixo x a posição, o eixo y o domínio do tempo e o eixo z o da temperatura.

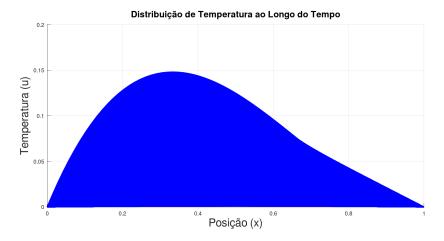


Figura 2: Gráfico representativo em duas dimensões da equação do calor, o eixo x representa a posição e o eixo y a temperatura.

3.2 Equação de Advecção

Como dito anteriormente a equação da advecção descreve o transporte de uma substância qualquer, e como ela se comporta por um fluxo de fluido. Temos então os eixos que representam como a substância é transportada pelo domínio ao longo do tempo, espaço e sua concentração. Nas bordas, ditas pelas condições de contorno, podemos fazer associação com as bordas de um rio, se não temos a influência de canais de entrada e saída que alterem o fluxo, temos que o maior, se não todo, o comportamento interessante se concentra no meio.

Na Figura 3, observamos um comportamento de decaimento do fluxo, se pensarmos numa partícula na mesma posição conforme o tempo, nesse topo do gráfico, observamos que ela começa numa velocidade maior e com o tempo perde velocidade.

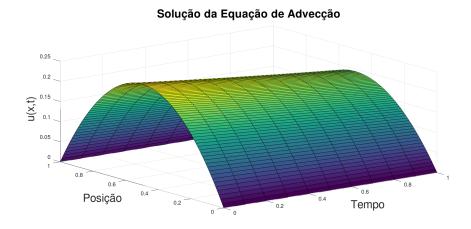


Figura 3: Gráfico representativo da equação da advecção resolvida em três dimensões, com eixo x representando a posição, o eixo y representando o tempo e o eixo u(x, t) representando a concentração.

Na Figura 4, podemos observar o mesmo comportamento, onde temos essas linhas ficando mais "baixas".

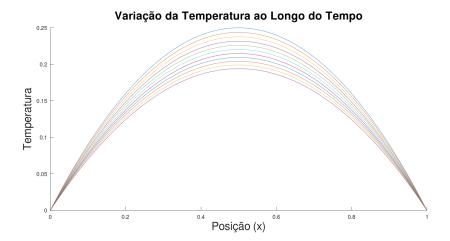


Figura 4: Gráfico representativo da equação da advecção resolvida em duas dimensões, com eixo x representando a posição, o eixo y representando temperatura.

Se colocarmos valores mais elevados de μ , podemos analisar que, nesse modelo, ele tenderá a estabilizar mais rápido. Como visto abaixo, para valores de $\mu=1,\,\mu=2$ e $\mu=3$:

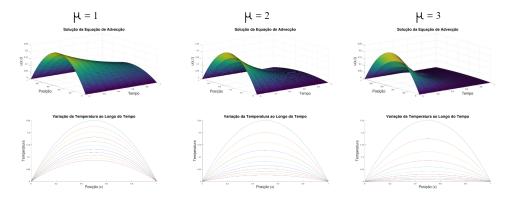


Figura 5: Gráfico representativo da equação da advecção resolvida em duas dimensões para diferentes valores de μ .

4 Conclusões

Nas conclusões deste trabalho, foi demonstrado como as Equações de Calor e Advecção podem ser modeladas e resolvidas numericamente pelo Método das Diferenças Finitas. Através da análise dos resultados, foram obtidas importantes observações sobre o comportamento do calor e da dispersão de concentração ao longo do tempo e do espaço.

No caso da Equação de Calor, foi constatado que, em sistemas sem adição de calor, a temperatura tende a se igualar em todos os pontos ao longo do tempo. Isso indica que o calor se propaga gradualmente, partindo de regiões com temperatura mais alta para as regiões com temperatura mais baixa. Essa compreensão é relevante para áreas como engenharia térmica, climatização de ambientes e análise de processos de aquecimento e resfriamento.

No caso da Equação de Advecção, foi verificado que a dispersão de concentração ocorre de forma gradual, espalhando-se uniformemente ao longo do tempo e do espaço, em sistemas sem adição de concentração. Esse comportamento é crucial em áreas como engenharia ambiental, engenharia química e meteorologia, onde a dispersão de poluentes ou substâncias químicas desempenha um papel fundamental.

As conclusões obtidas neste trabalho fornecem uma base sólida para a compreensão e aplicação das Equações de Calor e Advecção. Essas informações são essenciais para o desenvolvimento de soluções eficientes e precisas para problemas relacionados à transferência de calor e à dispersão de concentração. Compreender esses fenômenos é fundamental para otimizar processos, garantir a segurança e contribuir para o avanço científico e tecnológico em diversas áreas de estudo.

5 Contribuições dos autores

Danielle dos Santos Chagas: Equação de Advecção – escrita, resolução e computacional, Redação – revisão e edição, Conclusões.

Shaian José Anghinoni: Equação do calor – escrita, resolução e computacional, Teoria das Diferenças Finitas, Redação – revisão e edição.

Referências

- [1] P. W. Atkins e Julio De Paula. **Atkins' Physical chemistry**. eng. 8th ed. New York: W.H. Freeman, 2006. ISBN: 9780716787594.
- [2] Erik Burman e Lauri Oksanen. "Data assimilation for the heat equation using stabilized finite element methods". Em: (2016). DOI: 10.48550/ARXIV.1609.05107. URL: https://arxiv.org/abs/1609.05107.
- [3] Laurent Desvillettes, François Golse e Valeria Ricci. "Derivation of a homogenized two-temperature model from the heat equation". Em: (2013). DOI: 10.48550/ARXIV.1305.6920. URL: https://arxiv.org/abs/1305.6920.
- [4] Abhishek Dhar, Anupam Kundu e Aritra Kundu. "Anomalous Heat Transport in One Dimensional Systems: A Description Using Non-local Fractional-Type Diffusion Equation". Em: Frontiers in Physics 7 (nov. de 2019), p. 159. ISSN: 2296-424X. DOI: 10.3389/fphy.2019. 00159. URL: https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fphy.2019.00159/full.
- [5] Sergei K. Godunov e I. Bohachevsky. "Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics". Em: **Matematičeskij sbornik** 47(89).3 (1959), pp. 271–306. URL: https://hal.science/hal-01620642.
- [6] Jordan Hristov. "Bio-Heat Models Revisited: Concepts, Derivations, Nondimensalization and Fractionalization Approaches". Em: Frontiers in Physics 7 (nov. de 2019), p. 189. ISSN: 2296-424X. DOI: 10.3389/fphy.2019.00189. URL: https://www.frontiersin.org/ article/10.3389/fphy.2019.00189/full.
- [7] Randall J. LeVeque. Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems. Philadelphia, PA: Society for Industrial e Applied Mathematics, 2007. ISBN: 9780898716290.
- [8] R Maartens. "Dissipative cosmology". Em: Classical and Quantum Gravity 12.6 (jun. de 1995), pp. 1455-1465. ISSN: 0264-9381, 1361-6382. DOI: 10.1088/0264-9381/12/6/011.
 URL: https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0264-9381/12/6/011.

- [9] Olusegun Adeyemi Olaiju et al. "Achieving a sustainable environment using numerical method for the solution of advection equation in fluid dynamics". Em: **Chemical Engineering Transactions** 63 (2018), pp. 631–636. DOI: 10.3303/CET1863106. URL: https://doi.org/10.3303/CET1863106.
- [10] Qammar Rubbab et al. "Numerical simulation of advection—diffusion equation with caputo-fabrizio time fractional derivative in cylindrical domains: Applications of pseudo-spectral collocation method". en. Em: Alexandria Engineering Journal 60.1 (fev. de 2021), pp. 1731—1738. ISSN: 11100168. DOI: 10.1016/j.aej.2020.11.022. URL: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1110016820306049.
- [11] A Szasz e Gy. Vincze. "Dose concept of oncological hyperthermia: Heat-equation considering the cell destruction". en. Em: **Journal of Cancer Research and Therapeutics** 2.4 (2006), p. 171. ISSN: 0973-1482. DOI: 10.4103/0973-1482.29827. URL: https://journals.lww.com/10.4103/0973-1482.29827.
- [12] Vinícius Francisco Wasques. "Notas de Matemática: Análise Numérica". Ilum Escola de Ciência, mai. de 2023.
- [13] D. V. Widder. **The heat equation**. Pure and applied mathematics, a series of monographs and textbooks. New York: Academic Press, 1975. ISBN: 9780127485409.