

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática



Dissertação

Resolução de Equações de Difusão em Domínios Infinitos, Semi-Infinitos e Limitados: Métodos Matemáticos e Aplicações

Elisiane Cogoy da Silva

Pelotas, 2024

Elisiane Cogoy da Silva

**Resolução de Equações de Difusão em Domínios Infinitos, Semi-Infinitos e
Limitados: Métodos Matemáticos e Aplicações**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática

Orientador: Prof. Dr. Leslie Darien Pérez Fernández

Pelotas, 2024

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação da Publicação

S586r Silva, Elisiane Cogoy da

Resolução de equações de difusão em domínios infinitos, semi-infinitos elimitados [recurso eletrônico] : métodos matemáticos e aplicações / Elisiane Cogoy da Silva ; Léslie Darien Pérez Fernández, orientador. — Pelotas, 2024.

87 f.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2024.

1. Difusão. 2. Métodos de resolução. 3. Modelagem matemática. 4. Métodos matemáticos e aplicações. 5. Problemas de valores iniciais e de contorno. I. Fernández, Léslie Darien Pérez, orient. II. Título.

CDD 511.8

Elaborada por Ubirajara Buddin Cruz CRB: 10/901

**Resolução de Equações de Difusão em Domínios Infinitos, Semi-Infinitos e
Limitados: Métodos Matemáticos e Aplicações**

por

Elisiane Cogoy da Silva

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, PPGMMat,
do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como parte dos
requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Modelagem Matemática

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Leslie Darien Pérez Fernández – Orientador (UFPel)

Prof. Dr. Claus Haetinger (UFPEL)

Prof. Dr. Daniela Buske (UFPEL)

Profa. Dra. Fernanda Tumelero (FURG)

Pelotas, 21 de novembro de 2024.

AGRADECIMENTOS

A realização desta dissertação é o resultado de uma jornada marcada por muitos desafios, aprendizado e crescimento pessoal. Não teria sido possível chegar até aqui sem o apoio e a colaboração de muitas pessoas.

Em primeiro lugar, gostaria de expressar minha mais profunda gratidão ao meu orientador, Prof. Dr. Leslie Darien Pérez Fernández, pela confiança depositada em mim e por sua orientação dedicada ao longo deste trabalho. Sua paciência, sabedoria e disponibilidade foram fundamentais para o desenvolvimento desta dissertação.

Aos membros da banca examinadora, Claus Haetinger, Daniela Buske e Fernanda Tumelero, pela disponibilidade em avaliar esta dissertação e pelas contribuições valiosas para o aprimoramento deste trabalho.

Sou profundamente grata à minha família, pelo amor, paciência e apoio incondicional durante todos os momentos desta trajetória. Agradeço por acreditarem em mim e por me darem forças nos momentos mais difíceis.

A todos, meu muito obrigada!

RESUMO

SILVA, Elisiane Cogoy da. **Resolução de Equações de Difusão em Domínios Infinitos, Semi-Infinitos e Limitados: Métodos Matemáticos e Aplicações.** 2024. 87 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2024.

Esta dissertação apresenta uma análise detalhada e abrangente das metodologias utilizadas na resolução de problemas envolvendo a equação de difusão, que é fundamental para descrever processos de transporte em diversos campos, como física, química, biologia, engenharia e finanças, tornando essencial uma compreensão profunda de suas soluções. A intenção desse estudo é servir como um compêndio, um guia de referência destinado tanto para estudantes iniciantes quanto a profissionais que utilizam a equação de difusão em suas pesquisas e práticas, pois oferece uma introdução clara e estruturada à equação de difusão e suas diversas soluções, com exemplos e explicações detalhadas. Assim, os alunos podem desenvolver uma compreensão sólida dos conceitos teóricos e, para profissionais que já atuam na área, serve como um guia de referência, compilando uma variedade de métodos analíticos. Este trabalho pode se tornar uma ferramenta valiosa tanto para a comunidade acadêmica quanto para a prática profissional, pois facilita a aprendizagem, a aplicação e a pesquisa contínua sobre a equação de difusão, contribuindo significativamente para o avanço do conhecimento e promovendo a conexão entre a teoria e a prática, essencial para o desenvolvimento de soluções inovadoras e eficazes.

Palavras-chave: Difusão, modelagem matemática, problemas de valores iniciais e de contorno, métodos de resolução. Métodos Matemáticos e Aplicações

ABSTRACT

SILVA, Elisiane Cogoy da. **Solving Diffusion Equations in Infinite, Semi-Infinite and Bounded Domains: Mathematical Methods and Applications.** 2024. 87 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2024.

This dissertation presents a detailed and comprehensive analysis of the methodologies used to solve problems involving the diffusion equation, which is fundamental for describing transport processes in various fields such as physics, chemistry, biology, engineering, and finance, making a deep understanding of its solutions essential. The purpose of this study is to serve as a compendium, a reference guide intended for both beginning students and professionals who use the diffusion equation in their research and practice. It offers a clear and structured introduction to the diffusion equation and its various solutions, with detailed examples and explanations. Thus, students can develop a solid understanding of the theoretical concepts, and for professionals already working in the field, it serves as a reference guide, compiling a variety of analytical methods. This work can become a valuable tool for both the academic community and professional practice, as it facilitates learning, application, and continuous research on the diffusion equation, significantly contributing to the advancement of knowledge by promoting a connection between theory and practice, which is essential for the development of innovative and effective solutions.

Keywords: Diffusion, mathematical modeling, initial and boundary-value problems, solution methods.

LISTA DE FIGURAS

1	Solução fundamental $G(x,t)$ para $k = 100$. Fonte: autoral.	24
2	Solução fundamental $G(x,t)$ para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$. Primeira linha: vista superior; segunda linha: perfis espaciais (esquerda) e temporais (direita). Fonte: autoral.	25
3	Solução $u(x,t)$ do PVI (15) e (16) com $k = 100$ e condição inicial $u_0(x) = \sin x$ (esquerda), $u_0(x) = \arctan x$ (centro) , e $u_0(x) = e^{-x^2}$ (direita). Fonte: autoral.	26
4	Solução $u(x,t)$ do PVI com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ (colunas da esquerda para a direita) e condição inicial $u_0(x) = \sin x$ (primeira linha), $u_0(x) = \arctan x$ (segunda linha) , e $u_0(x) = e^{-x^2}$ (terceira linha). Fonte: autoral.	27
5	Perfis espaciais das soluções na Figura 4 para $t \in \{0,1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.	27
6	Solução $u(x,t)$ do PVI (40) e (41) com $k = 100$ e fonte $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot} x$ (à esquerda) e $f(x,t) = t(1 - e^{-x^2})$ (à direita). Fonte: autoral.	29
7	Solução $u(x,t)$ do PVI (40) e (41) com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e fonte $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot} x$ (primeira linha) e $f(x,t) = t(1 - e^{-x^2})$ (segunda linha). Fonte: autoral.	29
8	Perfis espaciais das soluções na Figura 7 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.	30
9	Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 100$ com os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.	32
10	Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 0,1$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.	32
11	Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 0,5$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.	33
12	Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 2$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.	33
13	Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 10$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.	34
14	Perfis espaciais das Figuras 10-13. Fonte: autoral.	35

15	Solução $u(x,t)$ do PVIC (58)-(60) com $k = 100$ e $u_0(x)$ de (37)-(39). Fonte: autoral.	37
16	Solução $u(x,t)$ do PVIC (58)-(60) com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e $u_0(x)$ de (37)-(39). Fonte: autoral.	38
17	Perfis espaciais da figura 16 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.	39
18	Solução $u(x,t)$ do PVIC (66)-(68) com $k = 100$ e $f(x,t)$ de (47) e (48). Fonte: autoral.	41
19	Solução $u(x,t)$ do PVIC (66)-(68) com $k \in \{0,1, 0,5, 2, 10\}$ e $f(x,t)$ de (47) e (48). Fonte: autoral.	42
20	Perfis espaciais da Figura 19 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.	43
21	Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 100$. Fonte: autoral.	45
22	Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,1$. Fonte: autoral.	45
23	Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,5$. Fonte: autoral.	46
24	Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 2$. Fonte: autoral.	46
25	Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 10$. Fonte: autoral.	47
26	Perfis espaciais das Figuras 22-25 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.	48
27	Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$ que resultam de trocar x por t em (37)-(39) para $k = 100$. Fonte: autoral.	50
28	Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 0,1$. Fonte: autoral.	51
29	Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$ obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 0,5$. Fonte: autoral.	51
30	Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 2$. Fonte: autoral.	52
31	Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 10$. Fonte: autoral.	52
32	Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 28 ($k = 0,1$). Fonte: autoral.	53
33	Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 29 ($k = 0,5$). Fonte: autoral.	53
34	Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 30 ($k = 2$). Fonte: autoral.	54
35	Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 31 ($k = 10$). Fonte: autoral.	54
36	Solução $u(x,t)$ do PVIC (87)-(89) com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e $u_0(x)$ de (37)-(39). Fonte: autoral.	57

37	Solução $u(x,t)$ do PVIC (96)-(98) com $k \in \{0.1, 0.5, 2, 10\}$ e $f(x,t)$ de (47) e (48). Fonte: autoral.	59
38	Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,1$. Fonte: autoral.	61
39	Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,5$. Fonte: autoral.	61
40	Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 2$. Fonte: autoral.	62
41	Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 10$. Fonte: autoral.	62
42	Solução $u(x,t)$ em (127) do problema (109)-(111) com $k = 1$, $l = \pi$ e $u_0(x) = \text{sen } x$. Fonte: autoral.	66
43	Solução $u(x,t)$ em (129) do problema (109)-(111) com $k = 1$, $l = 1$ e $u_0(x) = x(1 - x)$. Fonte: autoral.	67
44	Solução $u(x,t)$ em (139) do problema (130)-(132) com $k = 1$, $l = \pi$ e $f(x,t) = e^t \text{sen } x$. Fonte: autoral.	69
45	Solução $u(x,t)$ em (141) do problema (130)-(132) com $k = 1$, $l = 1$ e $f(x,t) = tx(1 - x)$. Fonte: autoral.	70
46	Solução $u(x,t)$ em (139) do problema (142)-(144) com $k = 1$, $l = \pi$, $f(x,t) = e^t \text{sen } x$ e $u_0(x) = \text{sen } x$. Fonte: autoral.	71
47	Solução $u(x,t)$ em (139) do problema (142)-(144) com $k = 1$, $l = 1$, $f(x,t) = tx(1 - x)$ e $u_0(x) = x(1 - x)$. Fonte: autoral.	72
48	Comparação entre duas abordagens analíticas e com experimentos para a distribuição da temperatura no solo. Fonte: autoral.	74

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	12
1.1 História do estudo da difusão e revisão bibliográfica	12
1.2 Objetivos	15
1.3 Estrutura da dissertação	17
2 PRELIMINARES	18
2.1 Princípio de Duhamel	18
2.2 Problemas de Sturm-Liouville e séries de Fourier	19
3 PROBLEMAS EM DOMÍNIOS INFINITOS	22
3.1 Problema com equação homogênea e condição inicial não homogênea	22
3.1.1 Formulação do problema	22
3.1.2 Resolução do problema	22
3.1.3 Exemplos	26
3.2 Problema com equação não homogênea e condição inicial homogênea	28
3.2.1 Formulação do problema	28
3.2.2 Resolução do problema	28
3.2.3 Exemplos	28
3.3 Problema com equação não homogênea e condição inicial não homogênea	30
3.3.1 Formulação do problema	30
3.3.2 Resolução do problema	30
3.3.3 Exemplos	31
4 PROBLEMAS EM DOMÍNIOS SEMI-INFINITOS	36
4.1 Problema com equação homogênea com condição inicial não homogênea e condição de contorno de Dirichlet homogênea	36
4.1.1 Formulação do problema	36
4.1.2 Resolução do problema	36
4.1.3 Exemplos	37
4.2 Problema com equação não homogênea e condições inicial e de contorno de Dirichlet homogêneas	40
4.2.1 Formulação do problema	40
4.2.2 Resolução do problema	40
4.2.3 Exemplos	41
4.3 Problema com equação não homogênea com condições inicial não homogênea e de contorno de Dirichlet homogênea	44
4.3.1 Formulação do problema	44

4.3.2	Resolução do problema	44
4.3.3	Exemplos	44
4.4	Problema com equação homogênea e condições inicial e de contorno de Dirichlet não homogêneas	49
4.4.1	Formulação do problema	49
4.4.2	Resolução do problema	49
4.4.3	Exemplos	50
4.5	Problema com equação homogênea, condição de contorno de Neumann homogênea e condição inicial não homogênea	54
4.5.1	Formulação do problema	55
4.5.2	Resolução do problema	55
4.5.3	Exemplos	56
4.6	Problema com equação não homogênea e condição de contorno de Neumann e condição inicial homogêneas	58
4.6.1	Formulação do problema	58
4.6.2	Resolução do problema	58
4.6.3	Exemplos	58
4.7	Problema com equação não homogênea com condição inicial não homogênea e de contorno de Neumann homogênea	60
4.7.1	Formulação do problema	60
4.7.2	Resolução do problema	60
4.7.3	Exemplos	60
5	PROBLEMAS EM DOMÍNIOS LIMITADOS	63
5.1	Problema com equação homogênea, condições de contorno homogêneas e condição inicial não homogênea	63
5.1.1	Formulação do problema	63
5.1.2	Resolução do problema	63
5.1.3	Exemplos	65
5.2	Problema com equação não homogênea e condições de contorno e inicial homogêneas	67
5.2.1	Formulação do problema	67
5.2.2	Resolução do problema	68
5.2.3	Exemplos	68
5.3	Problema com equação não homogênea, condições de contorno homogêneas e condição inicial não homogênea	70
5.3.1	Formulação do problema	70
5.3.2	Resolução do problema	70
5.3.3	Exemplos	71
6	ALGUMAS APLICAÇÕES	73
6.1	Condução do calor no solo	73
6.2	Transporte de um poluente em um aquífero	75
7	CONCLUSÕES	77
REFERÊNCIAS		80

1 INTRODUÇÃO

1.1 História do estudo da difusão e revisão bibliográfica

A difusão é o movimento de partículas ou substâncias de uma região de alta concentração para uma região de baixa concentração, resultando em uma distribuição homogênea dessas partículas ao longo do tempo. Esse processo é impulsionado pela energia térmica das partículas, que causa movimentos aleatórios, também conhecidos como movimento browniano, que é o movimento aleatório de partículas pequenas que estão suspensas em um fluido (líquido ou gás), resultante das colisões com as moléculas do fluido. Este fenômeno foi observado pela primeira vez em 1827 pelo botânico escocês Robert Brown enquanto ele estudava o movimento de grãos de pólen na água (BROWN, 1828). Posteriormente, foi interpretado por Albert Einstein e, quase ao mesmo tempo, pelo físico polonês Marian von Smoluchowski (MEHRER; STOLWIJK, 2009), confirmando os resultados de Einstein, conectando assim a difusão com a termodinâmica e o movimento browniano. Albert Einstein utilizou a equação de difusão para descrever o movimento aleatório de partículas suspensas em um fluido (EINSTEIN, 1905). Marian Smoluchowski trabalhou no movimento browniano e na difusão. Também foi observado nos primeiros estudos experimentais de Thomas Graham, no qual se aceitava que a difusão ocorria apenas em gases e líquidos (GRAHAM, 1829, 1833). Avanços ocorreram com as formulações matemáticas de Joseph Fourier que desenvolveu a teoria de condução de calor (FOURIER, 1822). Adolf Fick estabeleceu as bases da difusão molecular, introduzindo a primeira lei de Fick, que relaciona o fluxo de difusão ao gradiente de concentração, e a segunda lei de Fick, que é a equação de difusão (FICK, 1855a,b).

A difusão pode ocorrer em diferentes mecanismos: difusão molecular, que ocorre devido ao movimento térmico das moléculas, sendo predominante em gases e líquidos (lei de Fick); difusão térmica, que é o movimento de partículas causado por gradientes de temperatura, movendo-se de regiões quentes para regiões frias (lei de Fourier); difusão por pressão, que é o movimento de partículas causado por gradientes de pressão. Ainda, ela descreve fenômenos físicos de transporte e propagação como

a distribuição da temperatura em um material ao longo do tempo e a dispersão de nutrientes ou outras substâncias químicas em células e tecidos. É indispensável na engenharia, ciências naturais, biologia, medicina, tecnologia de materiais e processos industriais. Em finanças, por exemplo, os processos difusivos são usados para modelar a evolução dos preços de ativos em mercados financeiros. Em geociências modela a transferência de calor no interior da Terra. Em ciências ambientais modela a dispersão de poluentes no ar, na água e no solo, sendo imprescindível para a avaliação de impactos ambientais, planejamento urbano e desenvolvimento de políticas de controle de poluição.

Além disso, conforme descrito por Feynman em suas *Lectures on Physics* (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 2013), os fenômenos difusivos desempenham um papel crucial em diversos domínios científicos. A difusão é fundamental na explicação de processos como a transferência de calor em materiais sólidos, a condução elétrica em semicondutores, a propagação de partículas em meios heterogêneos e a polarização dielétrica. Feynman também destaca a importância da difusão em processos químicos, como a mistura de substâncias em soluções. Esses exemplos ilustram a versatilidade dos fenômenos difusivos e a relevância de compreendê-los para avançar em múltiplas áreas do conhecimento científico e tecnológico.

A equação de difusão é uma equação diferencial em derivadas parciais muito utilizada para a modelagem e análise de processos de difusão em sistemas naturais e artificiais. Formalmente, a equação de difusão é expressa na forma geral $u_t = ku_{xx}$, que mostra como a quantidade u muda ao longo do tempo e do espaço devido ao processo de difusão. Nessa equação u representa a concentração da substância no ponto x e no tempo t , sendo a quantidade que se difunde, e k é o coeficiente de difusão, que pode depender das propriedades do meio e da substância em questão. A solução da equação de difusão depende das condições iniciais e de contorno do sistema. Diversas técnicas e métodos numéricos podem ser utilizados para resolver casos específicos. A solução desta equação fornece uma compreensão detalhada de como uma quantidade se distribui em um meio. Em áreas como a engenharia térmica, a química e as ciências ambientais, a difusão de calor e de substância é frequentemente modelada em domínios infinitos ou semi-infinitos, na qual as condições de contorno e iniciais podem ser complexas e não lineares. Quando os problemas não podem ser tratados por métodos analíticos tradicionais, então essas situações exigem métodos numéricos avançados que podem fornecer soluções precisas e eficientes.

A relevância deste estudo está na aplicação prática das soluções obtidas para problemas reais, como na ecologia espacial e biologia evolutiva (LAM; LOU, 2022), na física das construções (MENDES et al., 2019), na condução do calor (FOURIER, 1822; HAHN; ÖZİŞIK, 2012), em fenômenos atmosféricos (HANNA; BRIGGS; HOSKER, 1982) incluindo meteorológicos (STULL, 1988) e dispersão de poluentes (ARYA,

1998; MING et al., 2017), em fenômenos geológicos como a transferência de calor por condução em intrusões magmáticas (COSTA et al., 2023), e na restauração e interpolação de imagens (BARBU, 2019). A metodologia apresentada amplia a compreensão teórica dos fenômenos difusivos e oferece ferramentas para a engenharia aplicada, melhorando a eficiência de sistemas térmicos em diversos contextos. De fato, fenômenos de transferência de calor e massa, e os métodos matemáticos, computacionais e experimentais desenvolvidos para estudá-los, têm recebido particular atenção (MADHUSUDANA, 1996; TRITT, 2004; TALER; DUDA, 2006; BAEHR; STEPHAN, 2006; WANG; ZHOU; WEI, 2008; JIJI, 2009; HAHN; ÖZİŞIK, 2012; KAKAÇ; YENER; NAVEIRA-COTTA, 2018; HRISTOV; BENNACER, 2019).

Neste trabalho foi estudada a resolução de problemas de valores iniciais e de contorno para equações de difusão em domínios unidimensionais. Cada método de resolução foi aplicado a problemas específicos para demonstrar sua eficácia e limitações por meio de exemplos ilustrativos, cujos resultados serão analisados. Esperamos que este trabalho contribua para a compreensão da resolução de problemas relacionados às equações de difusão espacialmente unidimensionais, fornecendo ferramentas práticas para cientistas e profissionais que lidam com problemas de difusão em suas áreas de atuação. Além disso, a comparação entre os diferentes métodos permite a escolha da técnica mais adequada para resolver problemas específicos.

Dentre os métodos usualmente utilizados para resolver problemas difusivos estão: a transformada de Laplace (SCHIFF, 1999) inclusive com inversão numérica (LEMOS et al., 2021; MARCOLINO; PÉREZ-FERNÁNDEZ; COSTA, 2021) e combinada com métodos multicamada para modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera (COSTA; RUI K. PÉREZ-FERNÁNDEZ, 2018); e a separação de variáveis (FOURIER, 1822), aplicado, por exemplo, à condução do calor (ARAÚJO; MÁRQUEZ, 2021), inclusive no solo (MEIRA et al., 2023), os quais serão estudados futuramente.

Outra motivação para estudar a equação de difusão em casos simples com coeficientes constantes, é que ela pode modelar o comportamento efetivo de meios difusivos heterogêneos, cujas equações de difusão têm coeficientes rapidamente oscilantes. Essa abordagem leva ao conceito de homogeneização, uma técnica poderosa em análise matemática e física aplicada que permite simplificar a descrição de materiais complexos ao considerar suas propriedades médias em uma escala maior. A homogeneização matemática é um conjunto de rigorosos métodos que transformam problemas complexos de coeficientes rapidamente variáveis em problemas mais simples com coeficientes efetivos constantes.

Métodos de homogeneização matemática (tais como convergência em duas escalas (NGUETSENG, 1989; ALLAIRE, 1992), homogeneização assintótica (BENSOUS-SAN; LIONS; PAPANICOLAU, 1978; BAKHVALOV; PANASENKO, 1989), Σ -, G -, Γ -e H -convergências (NGUETSENG, 2003; SPAGNOLO, 1976; DE GIORGI, 1984; MU-

RAT; TARTAR, 1997), homogeneização de tangente de segunda ordem (PONTE CASTAÑEDA; TIBERIO, 2000; PONTE CASTAÑEDA, 2002), e funções teste oscilantes (TARTAR, 2009)) assumem que a microestrutura dos materiais heterogêneos cujos modelos pretendem resolver é periódica. Inclusive, uma abordagem comum no estudo de materiais heterogêneos com microestrutura aleatória é aproximá-la mediante a replicação periódica de um elemento representativo de volume (TALBOT, 1999, 2000; LIPTON; TALBOT, 2001; TALBOT; WILLIS, 2004). Uma alternativa para homogeneizar materiais micro-heterogêneos não periódicos é o método de dois espaços (KELLER, 1977, 1980).

Assim, a homogeneização é útil em meios micro-heterogêneos, a qual as propriedades físicas variam rapidamente em pequenas escalas espaciais ou temporais. A ideia é encontrar uma equação de difusão efetiva que represente o comportamento médio do sistema heterogêneo. Algumas aplicações da homogeneização em problemas de natureza difusiva são: a forma pura (LIMA et al., 2016; LUZ; PÉREZ-FERNÁNDEZ; BRAVO-CASTILLERO, 2016; LEITZKE; PÉREZ-FERNÁNDEZ; BRAVO-CASTILLERO, 2017); a combinação com a transformada de Laplace (JESUS et al., 2016) e com métodos multicamadas (COSTA et al., 2019), e sua aplicação à modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera (RUI et al., 2017, 2018; COSTA; PÉREZ-FERNÁNDEZ; BRAVO-CASTILLERO, 2019); o transporte de espécies químicas (NG, 2006); potenciais periódicos na equação de Schrödinger (NÁ-RAIGH; O'KIELY, 2013); e fluxos não lineares com energia limitada (LIMA, 2020).

Ainda, fenômenos difusivos de diversas naturezas podem ocorrer dentro do mesmo contexto, como evidenciado, por exemplo, no Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc^2), ocorrido em 25/07/2024, em que a difusão apareceu na separação de fase em proteínas (PUCCINELLI; BORDIN, 2024), angiogênese e padrões vasculares (ROSA; TRAVASSO; BORDIN, 2024), modelagem do câncer do sangue (ROSSATO; BORDIN, 2024), radioterapia (BRUM et al., 2024), glioblastoma e modelo de Swanson (CÁURIO Jr.; RIBEIRO; PETERSEN, 2024) e modelo de Allen Cahn na evolução de células cancerígenas (BANDEIRA; BUSKE; QUADROS, 2024).

1.2 Objetivos

Estudar e resolver problemas de difusão unidimensional em diferentes tipos de domínios, incluindo domínios infinitos, semi-infinitos e limitados.

Objetivos específicos:

1. Estudar a resolução de problemas em domínios infinitos para equação de difusão, tanto homogênea quanto não homogênea, com condições iniciais homogêneas e não homogêneas. Em particular:
 - Problema com equação homogênea e condição inicial não homogênea;

- Problema com equação não homogênea e condição inicial homogênea;
 - Problema com equação não homogênea e condição inicial não homogênea.
2. Analisar a resolução de problemas em domínios semi-infinitos para equação de difusão, tanto homogênea quanto não homogênea, com condições iniciais homogêneas e não homogêneas. Em particular:
- Problema com equação homogênea, condição inicial não homogênea e condição de contorno de Dirichilet homogênea;
 - Problema com equação não homogênea, condição inicial e de contorno de Dirichilet homogêneas;
 - Problema com equação não homogênea e condição inicial não homogênea e condição de contorno de Dirichilet homogênea;
 - Problema com equação homogênea, condição inicial e de contorno de Dirichilet não homogêneas;
 - Problema com equação homogênea, condição de contorno de Neumann homogênea e condição inicial não homogênea;
 - Problema com equação não homogênea e condição de contorno de Neumann e condição inicial homogêneas;
 - Problema com equação não homogênea com condição inicial não homogênea e de contorno de Neumann homogênea.
3. Investigar a resolução de problemas em domínios limitados para equação de difusão, tanto homogênea quanto não homogênea, com condições iniciais homogêneas e não homogêneas. Em particular:
- Problema com equação homogênea, condições de contorno homogêneas e condição inicial não homogênea;
 - Problema com equação não homogênea e condições de contorno e inicial homogêneas;
 - Problema com equação não homogênea, condições de contorno homogêneas e condição inicial não homogênea.
4. Indicar algumas aplicações, como:
- Condução do calor no solo;
 - Transporte de um poluente em um aquífero .

1.3 Estrutura da dissertação

Além deste capítulo introdutório, esta dissertação está organizada em mais seis capítulos e referências: o capítulo 2 atende as preliminares e os capítulos 3, 4 e 5 atendem aos objetivos específicos, e estão estruturados em seções subdivididas em subseções para a formulação do problema, a resolução do problema e os exemplos; enquanto o capítulo 6 apresenta algumas aplicações dos problemas e o capítulo 7 é dedicado a apresentar as conclusões do trabalho.

2 PRELIMINARES

2.1 Princípio de Duhamel

O princípio de Duhamel é uma técnica na teoria das equações diferenciais para a resolução de problemas de valor inicial para equações diferenciais lineares não homogêneas. Ele permite obter a solução de um problema não homogêneo em termos da solução de um problema homogêneo auxiliar. Foi nomeado em homenagem ao matemático francês Jean-Marie Constant Duhamel (1797-1872), que contribuiu significativamente para a matemática aplicada e a física matemática no século XIX. Em seus estudos sobre a propagação de calor, Duhamel desenvolveu esse método para resolver equações diferenciais não homogêneas que envolvem uma fonte variável no tempo, o que permite expressar a solução de um problema não homogêneo como uma integral que envolve a solução do problema homogêneo correspondente.

Para ilustrar a aplicação do princípio de Duhamel, considere o seguinte problema de Cauchy para uma equação diferencial ordinária (EDO) linear não homogênea de primeira ordem:

$$T' + aT = f(t), \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad T(0) = 0, \quad (1)$$

em que $a \in \mathbb{R}$ é uma constante e f é uma função integrável, cuja solução é

$$T(t) = \int_0^t f(\tau) e^{-a(t-\tau)} d\tau. \quad (2)$$

Agora, considere a seguinte família de problemas de Cauchy indexada por τ :

$$[T^{(\tau)}]' + aT^{(\tau)} = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+^*, \quad T^{(\tau)}(0) = f(\tau), \quad (3)$$

cuja solução é

$$T^{(\tau)}(t) = f(\tau) e^{-at}, \quad (4)$$

que é o integrando da solução (2) do problema de Cauchy original (1) depois de substituir t por $t - \tau$. Portanto, o princípio de Duhamel pode ser enunciado como o seguinte

Teorema (LOGAN, 2015): A solução do problema (1) é

$$T(t) = \int_0^t T^{(\tau)}(t - \tau)d\tau, \quad (5)$$

em que $T^{(\tau)}(t)$ é a solução do problema (3). ■

2.2 Problemas de Sturm-Liouville e séries de Fourier

A teoria de Sturm-Liouville estuda um tipo de problema de autovalor para equações diferenciais ordinárias, muito estudado na matemática aplicada, física matemática, modelagem de fenômenos físicos e naturais. Essa teoria foi desenvolvida pelos matemáticos franceses Jacques Charles François Sturm (1803-1855) e Joseph Liouville (1809-1882). Formalmente, o problema de Sturm-Liouville consiste em uma equação da forma:

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + [\lambda w(x) - q(x)]y = 0, \quad a < x < b \quad (6)$$

sujeito a condições de contorno homogêneas:

$$\alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = 0, \quad \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = 0, \quad (7)$$

onde $y(x)$ é a incógnita, λ é o parâmetro do problema (chamado de autovalor), $p(x), q(x), w(x)$ são funções dadas, com $p(x)$ e $w(x)$ assumidas como positivas e contínuas no intervalo $[a,b]$, e as constantes $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ definem as condições de contorno. O objetivo do problema é encontrar as funções $y(x)$ e os valores de λ para os quais a equação diferencial (6) é satisfeita junto com as condições de contorno (7). Os valores de λ para os quais existem soluções não triviais $y(x)$ são chamados autovalores, e as funções $y(x)$ são chamadas de autofunções.

Especificamente, para problemas de Sturm-Liouville regulares, tem-se o seguinte
Teorema (LOGAN, 2015): Sejam $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$, $p \in C^1(a,b)$, $p(x) \neq 0$, $\forall x \in (a,b)$, e $q \in C^0(a,b)$. Então, o problema de Sturm-Liouville regular

$$-[p(x)X'(x)]' + q(x)X(x) = \lambda X(x), \quad x \in (a,b), \quad (8)$$

$$\alpha_1 X(a) + \beta_1 X'(a) = 0, \quad \alpha_2 X(b) + \beta_2 X'(b) = 0, \quad (9)$$

tem infinitos autovalores $\lambda = \lambda_n \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$, tais que $\lim_{n \rightarrow \infty} |\lambda_n| = \infty$, e as autofunções correspondentes $X = X_n : [a,b] \rightarrow \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$, formam uma família ortogonal completa em $L^2(a,b)$ (espaço das funções de quadrado integrável), ou seja, para todo $f \in L^2(a,b)$ existem $c_n \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$, tais que $f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n X_n$ na norma de $L^2(a,b)$. ■

A ortogonalidade em $L^2(a,b)$ das autofunções X_n , $n \in \mathbb{N}$, significa que

$$\langle X_n, X_m \rangle = \begin{cases} \|X_n\|^2, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}, \quad (10)$$

em que $\|g\| = \sqrt{\langle g, g \rangle}$ é a norma de $L^2(a,b) \ni g$ em função do produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)dx, \quad (11)$$

de maneira que a representação de $f \in L^2(a,b)$ em série de autofunções $f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n X_n$ na norma de $L^2(a,b)$ significa que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| f - \sum_{n=1}^N c_n X_n \right\| = 0. \quad (12)$$

Logo, em virtude da linearidade do produto interno e da ortogonalidade das autofunções X_n , $n \in \mathbb{N}$, segue que os coeficientes da representação $f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n X_n$ são $c_n = \langle f, X_n \rangle / \|X_n\|^2$, $n \in \mathbb{N}$, o qual define a chamada série de Fourier generalizada de $f \in L^2(a,b)$ na família ortogonal completa das autofunções X_n , $n \in \mathbb{N}$.

No contexto dos problemas difusivos estudados nesta dissertação, os problemas de Sturm-Liouville correspondentes são do tipo

$$X'' + \lambda X = 0, \quad x \in (0,l), \quad X(0) = X(l) = 0. \quad (13)$$

Na análise a seguir, confere-se que o problema (13) produz autofunções, ou seja, tem soluções não triviais, apenas para $\lambda > 0$.

- Caso $\lambda < 0$. Seja $\ell \in \mathbb{R}^*$ tal que $\lambda = -\ell^2$. Logo, a equação do problema (13) é $X'' - \ell^2 X = 0$, cuja equação característica $\Lambda^2 - \ell^2 = 0$ tem soluções reais $\Lambda = \pm\ell$, as quais conduzem à solução geral $X(x) = C_1 e^{-\ell x} + C_2 e^{\ell x}$. As constantes $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ são constantes arbitrárias, cujos valores correspondentes às condições de contorno são obtidos do sistema de equações algébricas lineares $C_1 + C_2 = 0$ e $C_1 e^{-\ell l} + C_2 e^{\ell l} = 0$, o qual é homogêneo e tem solução única, de onde $C_1 = C_2 = 0$ e, portanto, $X \equiv 0$, ou seja, o problema (13) tem solução trivial para $\lambda < 0$.
- Caso $\lambda = 0$. A equação do problema (13) é $X'' = 0$, cuja solução geral é $X(x) = C_1 x + C_2$. As constantes $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ são constantes arbitrárias, cujos valores correspondentes às condições de contorno são obtidos de $C_2 = 0$ e $C_1 l + C_2 = 0$,

de onde $C_1 = C_2 = 0$ e, portanto, $X \equiv 0$, ou seja, o problema (13) tem solução trivial para $\lambda = 0$.

- Caso $\lambda > 0$. Seja $\ell \in \mathbb{R}^*$ tal que $\lambda = \ell^2$. Logo, a equação do problema (13) é $X'' + \ell^2 X = 0$, cuja equação característica $\Lambda^2 + \ell^2 = 0$ tem soluções complexas $\Lambda = \pm \ell i$, as quais conduzem à solução geral $X(x) = C_1 \cos \ell x + C_2 \sin \ell x$, em que $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ são constantes arbitrárias, cujos valores correspondentes às condições de contorno são obtidos de $C_1 = 0$ e $C_1 \cos \ell l + C_2 \sin \ell l = 0$, de onde $C_1 = C_2 = 0$ e, portanto, tem-se a solução trivial $X \equiv 0$. Alternativamente, para não ter solução trivial, além de $C_1 = 0$, faz-se $C_2 = 1$, de maneira que deve cumprir-se que $\sin \ell l = 0$, de onde $\ell l = n\pi$, $n \in \mathbb{N}$, ou seja, $\ell = \ell_n = n\pi/l$ produzindo os autovalores $\lambda = \lambda_n = n^2\pi^2/l^2$, $n \in \mathbb{N}$, e, portanto, o problema de Sturm-Liouville (13) tem como soluções não triviais as autofunções $X(x) = X_n(x) = \sin(n\pi x/l)$, $n \in \mathbb{N}$, para $\lambda > 0$.

Fica claro que os autovalores obtidos para $\lambda > 0$ cumprem que $\lim_{n \rightarrow \infty} |\lambda_n| = \infty$ e, ainda, é possível conferir a ortogonalidade das autofunções obtidas, conforme o teorema enunciado acima. Além disso, observa-se que as autofunções obtidas produzem um caso particular de série de Fourier trigonométrica ou clássica: uma série de Fourier seno para $f \in L^2(0,l)$ da forma

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad c_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx, \quad (14)$$

em que, segundo o teorema de Dirichlet (LOGAN, 2015), a igualdade se cumpre nos pontos $x \in (0,l)$ em que f é contínua, enquanto a série converge para a média dos limites laterais nos pontos em que f é descontínua. Finalmente, observa-se que é possível trocar uma ou ambas as condições de contorno no problema de Sturm-Liouville (13) por condições de Neumann ou Robin e realizar uma análise semelhante em função do sinal do λ . Isto produzirá autovalores e autofunções, mas ainda com os primeiros apresentando módulos crescentes os primeiros e as segundas sendo ortogonais e completas.

No seguinte capítulo serão estudados problemas em domínios infinitos.

3 PROBLEMAS EM DOMÍNIOS INFINITOS

3.1 Problema com equação homogênea e condição inicial não homogênea

3.1.1 Formulação do problema

A equação de difusão com fonte nula em domínios infinitos é dada por:

$$u_t - ku_{xx} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^* \quad (15)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (16)$$

em que a difusividade $k \in \mathbb{R}_+^*$ é uma constante, $u(x,.) \in C^1(\mathbb{R}_+)$ para cada $x \in \mathbb{R}$, $u(.,t) \in C^2(\mathbb{R})$ para cada $t \in \mathbb{R}_+$, e $u_0 \in C^2(\mathbb{R})$ é conhecido. Sujeita à condição inicial em $t = 0$ representada por u_0 , em que o referido problema modela fenômenos difusivos. Em geral, esse tipo de problema representa a variação de densidade em processos de difusão.

3.1.2 Resolução do problema

Para resolver o problema de Cauchy, será considerado o seguinte problema auxiliar no qual a condição inicial é uma condição de salto unitário em $x = 0$, também conhecida como Função de Heaviside. No contexto utilizado, realizou-se uma análise dimensional em que w e w_0 são densidades, x é a posição (m), t é o tempo (s) e k é a difusividade (m^2/s).

$$w_t - kw_{xx} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0 \quad (17)$$

$$w(x,0) = w_0 H(x), \quad (18)$$

em que $H(x)$ é a função de Heaviside, ou seja, até $x = 0$ essa condição é zero e a partir de $x = 0$ é uma constante representada pela expressão w_0 , considerada nesse caso igual a um, dada por

$$H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}. \quad (19)$$

É esperado que a solução seja da forma $\frac{w}{w_0} = f\left(\frac{x}{\sqrt{4kt}}\right)$ e $z = \frac{x}{\sqrt{4kt}}$, em que $\frac{w}{w_0}$, $\frac{x}{\sqrt{4kt}}$ são grandezas adimensionais. Logo, temos que:

$$w = w_0 f(z). \quad (20)$$

Ao substituir a equação (20) na equação (17) e aplicar a regra da cadeia em relação a t e x , tem-se:

$$w_t = w_z z_t = -\frac{w_0}{2} f'(z) \frac{x}{\sqrt{4kt^3}} \quad (21)$$

$$w_x = w_z z_x = \frac{w_0}{\sqrt{4kt}} f'(z) \quad (22)$$

$$w_{xx} = \frac{w_0}{4kt} f''(z) \quad (23)$$

Substituindo as equações (21) e (23) em (17), encontramos uma EDO para obter $f(z)$:

$$f''(z) + 2zf'(z) = 0. \quad (24)$$

Aplicando a regra da cadeia encontramos:

$$y(z) = C_1 e^{-z^2}. \quad (25)$$

Pelo teorema fundamental do cálculo, a solução da integral definida é dada por:

$$g(x) = \int_a^x f(t) dt, \quad (26)$$

$$y(z) = C_1 \int_0^z e^{-r^2} dr + C_2. \quad (27)$$

Logo, com $C_i = w_0 C_i$, onde $i = 1, 2$, a solução geral é:

$$w(x,t) = C_1 \int_0^{\frac{x}{\sqrt{4kt}}} e^{-r^2} dr + C_2. \quad (28)$$

A função que define condição inicial é dividida em duas partes. Vamos considerar a primeira parte positiva para x , quando $t \rightarrow 0$ o limite de integração tende para $+\infty$.

$$w(x,0) = C_1 \int_0^{+\infty} e^{-r^2} dr + C_2 = w_0 \quad x > 0. \quad (29)$$

Para $-x$ em que a condição inicial é zero, $t \rightarrow 0$ o limite de integração tende para $-\infty$, ou seja,

$$w(x,0) = -C_1 \int_{-\infty}^0 e^{-r^2} dr + C_2 = 0 \quad x < 0. \quad (30)$$

Como a função gaussiana é simétrica com relação a $r = 0$, a área sob a curva

é $\sqrt{\pi}$. Devido a simetria, cada lado da curva (de 0 a $+\infty$ e de $-\infty$ a 0) representa a metade dessa área, ou seja, $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

$$\int_0^{+\infty} e^{-r^2} dr = \int_{-\infty}^0 e^{-r^2} dr = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \quad (31)$$

Substituindo (31) em (29) e (30), temos:

$$C_1 = \frac{w_0}{\sqrt{\pi}} \text{ e } C_2 = \frac{w_0}{2}. \quad (32)$$

Logo, a solução do problema auxiliar (20) é:

$$w(x,t) = \frac{w_0}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{\sqrt{4kt}}} e^{-r^2} dr + \frac{w_0}{2}. \quad (33)$$

Seja w a solução da equação de difusão, então sua derivada em relação à posição também é solução da equação (15).

Para $w_0 = 1$ em (33), temos:

$$G(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}} e^{-\frac{x^2}{4kt}}. \quad (34)$$

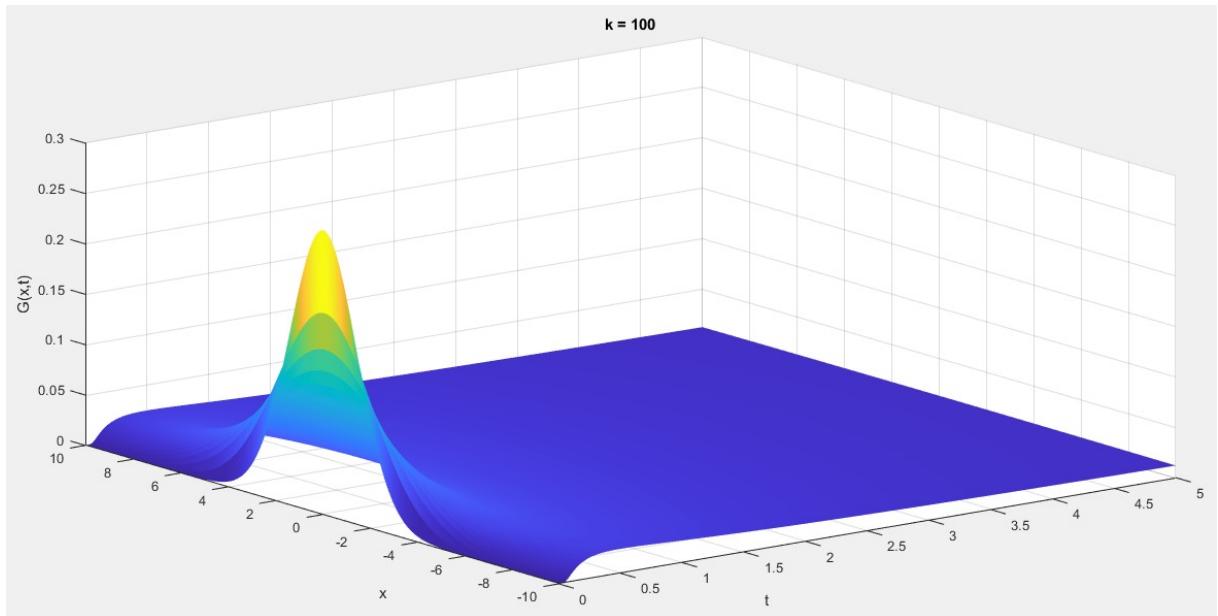


Figura 1: Solução fundamental $G(x,t)$ para $k = 100$. Fonte: autoral.

Na Figura 1, no início a distribuição está altamente concentrada, mas, à medida que o tempo avança, a concentração se espalha rapidamente e a altura do pico central

diminui.

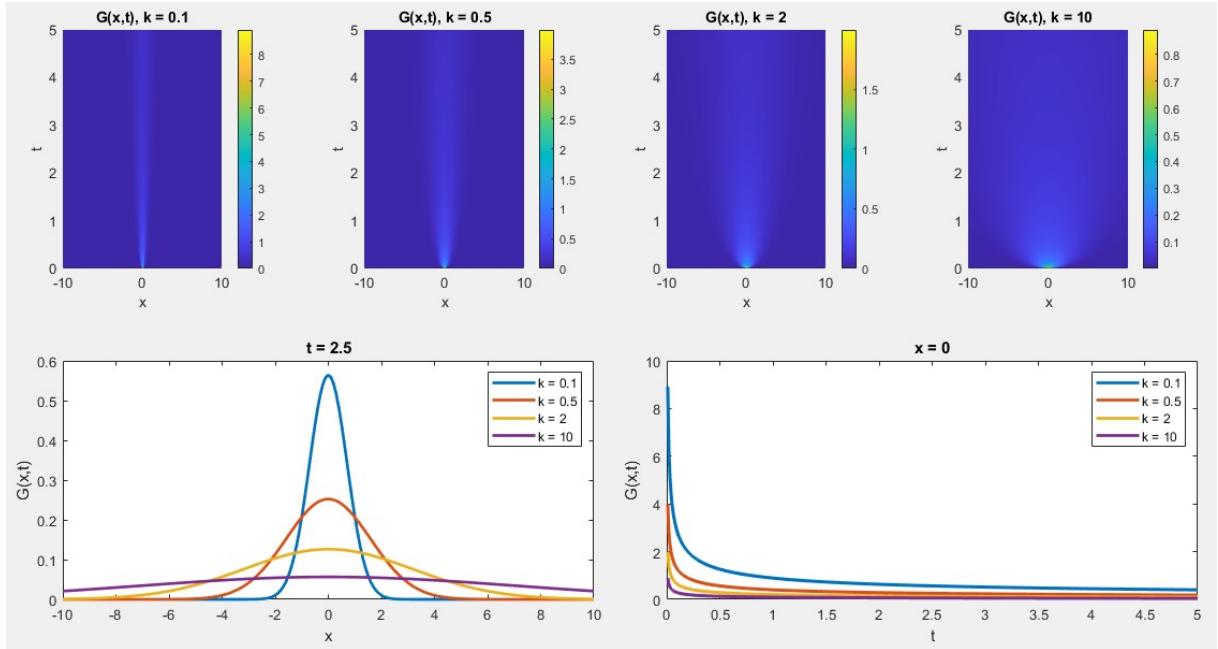


Figura 2: Solução fundamental $G(x,t)$ para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$. Primeira linha: vista superior; segunda linha: perfis espaciais (esquerda) e temporais (direita). Fonte: autoral.

Na Figura 2, para valores menores de k , resulta em difusão lenta, com a concentração permanecendo altamente localizada por mais tempo, enquanto valores maiores de k resultam em difusão rápida, com a concentração se espalhando rapidamente.

A função $G(x,t)$ representa a solução fundamental da equação de difusão e a distribuição da difusividade que resulta de uma fonte pontual de calor localizada em $x = 0$ e transfere inicialmente uma unidade de calor $G(x,0) = w_0 = 1$, ou seja, em $t = 0$ a solução em $G(x,0)$ é um. Porém, se a fonte inicial estiver localizada em outra posição $x = y$, diferente de $x = 0$, essa solução aparece deslocada e é representada por $G(x - y, t)$ no argumento espacial da função $G(x,y)$.

Se a quantidade que é transferida para o sistema não é mais unitária, mas sim $u_0(y)$, então a solução correspondente será $u_0(y)$ multiplicada pela solução fundamental deslocada até essa posição, ou seja, $u_0(y)G(x - y, t)$.

Finalmente, se u_0 é uma função contínua e limitada, então pode-se superpor os efeitos de todas as fontes pontuais $u_0(y)$, para $y \in \mathbb{R}_+^*$, para obter a solução geral:

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(y)G(x - y, t)dy, \quad (35)$$

a qual, substituindo a solução fundamental (34), é

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u_0(y)}{\sqrt{4\pi kt}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4kt}} dy. \quad (36)$$

Então, a equação (36) é a solução do problema de Cauchy original (15) e (16), a qual cumpre a condição inicial para $t \rightarrow 0$.

3.1.3 Exemplos

A Figura 3 apresenta o comportamento da solução (36) para $k = 100$ e três condições iniciais diferentes: senoidal, arcotangente e gaussiana, dadas por:

$$u_0(x) = \sin x, \quad (37)$$

$$u_0(x) = \arctan x, \quad (38)$$

$$u_0(x) = e^{-x^2}. \quad (39)$$

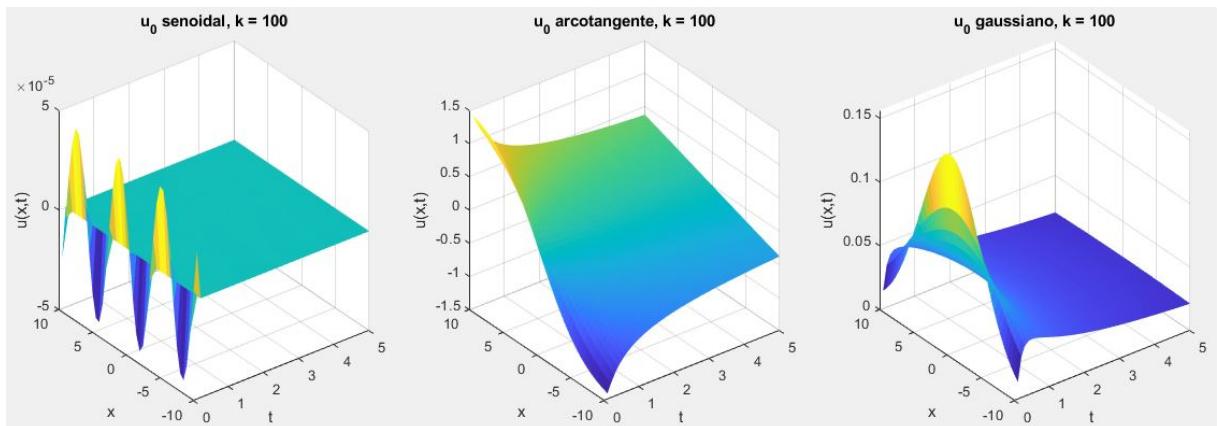


Figura 3: Solução $u(x,t)$ do PVI (15) e (16) com $k = 100$ e condição inicial $u_0(x) = \sin x$ (esquerda), $u_0(x) = \arctan x$ (centro), e $u_0(x) = e^{-x^2}$ (direita). Fonte: autoral.

A Figura 3 nos mostra que as três condições iniciais tendem ao estado de equilíbrio quando a densidade está uniformemente distribuída. Na condição gaussiana, a região de maior densidade está no centro do domínio e se espalha em direção às extremidades. Na arcotangente, as regiões de maior e menor densidades estão nas extremidades e se espalham em direção ao centro do domínio. Na condição senoidal, o comportamento é similar ao da arcotangente, porém a distribuição de densidades máximas e mínimas ocorre localmente, em direção aos pontos de menor densidade.

A Figura 4 apresenta o comportamento da solução (36) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e, na Figura 5, os perfis espaciais correspondentes.

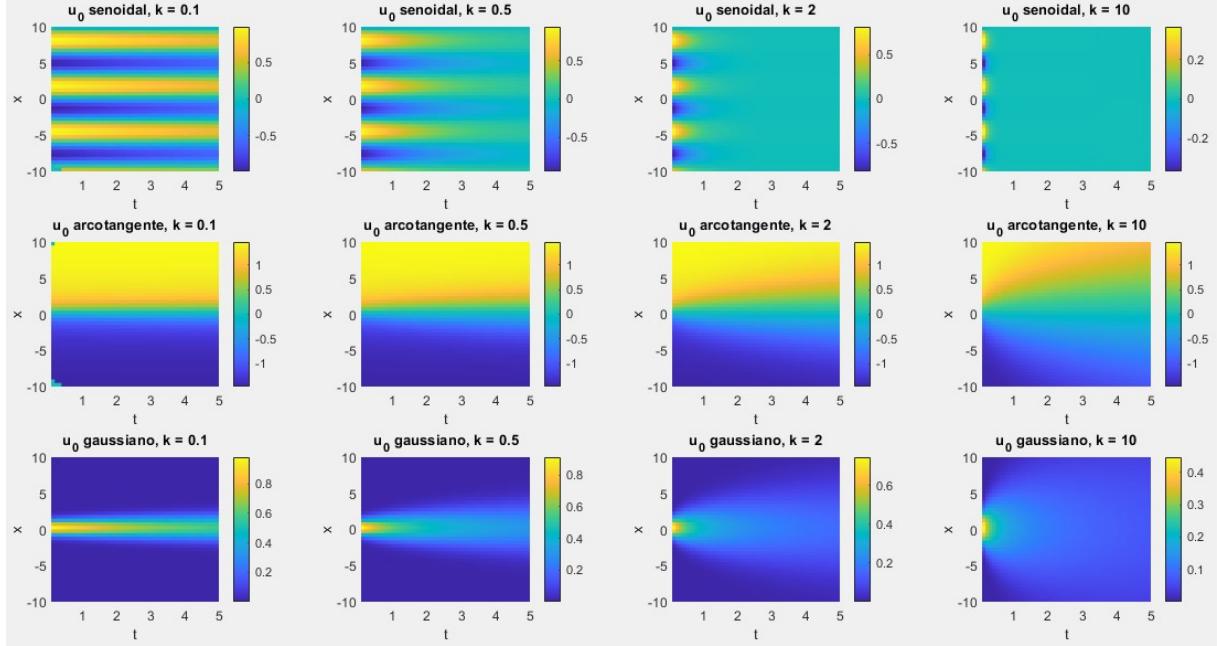


Figura 4: Solução $u(x,t)$ do PVI com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ (colunas da esquerda para a direita) e condição inicial $u_0(x) = \sin x$ (primeira linha), $u_0(x) = \arctan x$ (segunda linha) , e $u_0(x) = e^{-x^2}$ (terceira linha). Fonte: autoral.

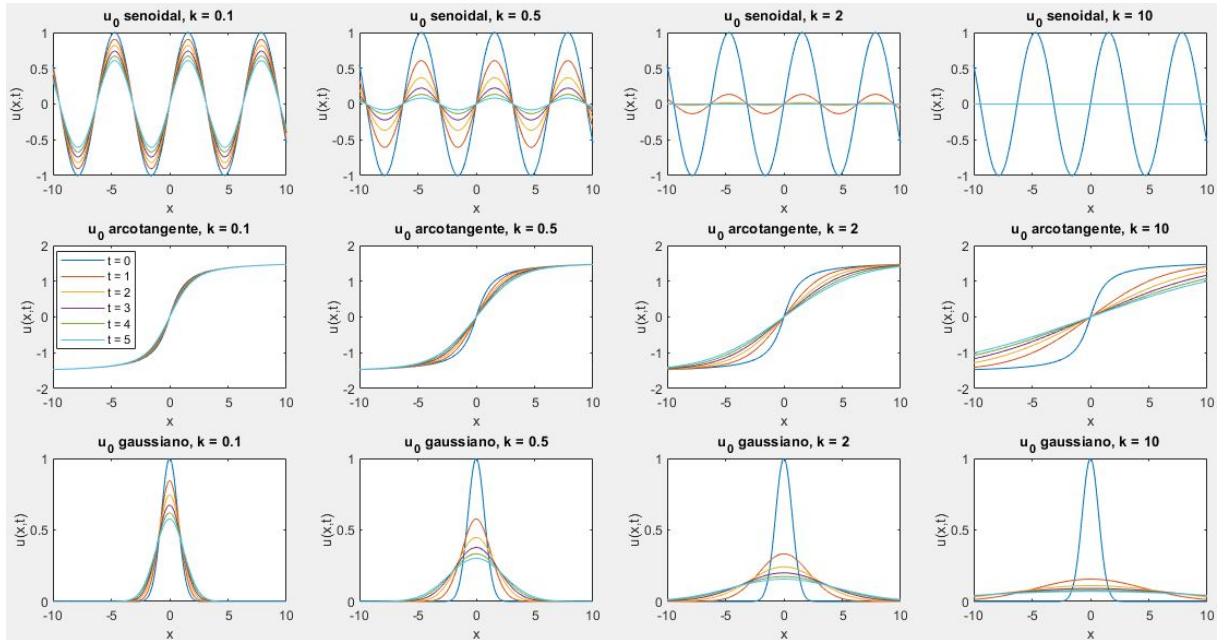


Figura 5: Perfis espaciais das soluções na Figura 4 para $t \in \{0,1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.

Nas Figuras 4 e 5, para cada condição inicial o seu efeito desaparece mais rapidamente com o valor de k aumentando, atingido seu estado de equilíbrio, ou seja, a distribuição uniforme da densidade mais rapidamente para k maiores.

3.2 Problema com equação não homogênea e condição inicial homogênea

3.2.1 Formulação do problema

Nesta seção consideramos o seguinte PVI com fonte $f \in C(\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^*)$:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^* \quad (40)$$

$$u(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (41)$$

3.2.2 Resolução do problema

A solução do PVI (40) e (41) é obtida do princípio de Duhamel (LOGAN, 2015) como

$$u(x,t) = \int_0^t u^{(\tau)}(x,t-\tau)d\tau, \quad (42)$$

em que $u^{(\tau)}(x,t)$ é a solução do seguinte problema de Duhamel

$$u_t^{(\tau)} - ku_{xx}^{(\tau)} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^*, \quad (43)$$

$$u^{(\tau)}(x,0) = f(x,\tau), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (44)$$

o qual tem a mesma estrutura que o problema (15) e (16) estudado na Seção 3.1. Logo, a solução do problema de Duhamel (43) e (44) pode ser expressa como, substituindo (35) trocando $u_0(y)$ por $f(y,\tau)$:

$$u^{(\tau)}(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y,\tau) G(x-y,t) dy, \quad (45)$$

em que $G(x,t)$ é dada por (34).

Portanto, a solução do PVI (40) e (41) é obtida ao substituir (45) em (42):

$$u(x,t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} f(y,\tau) G(x-y,t-\tau) dy d\tau. \quad (46)$$

3.2.3 Exemplos

A Figura 6 apresenta o comportamento da solução (46) para $k = 100$ e duas fontes diferentes, dadas por:

$$f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot} x, \quad (47)$$

$$f(x,t) = t \left(1 - e^{-x^2}\right). \quad (48)$$

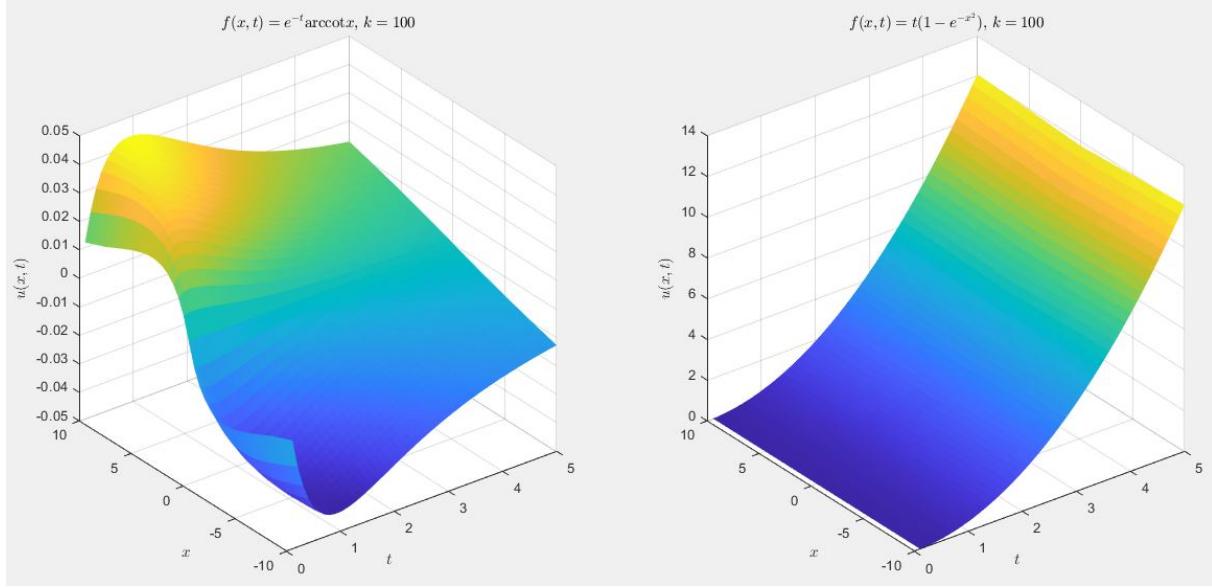


Figura 6: Solução $u(x,t)$ do PVI (40) e (41) com $k = 100$ e fonte $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot} x$ (à esquerda) e $f(x,t) = t(1 - e^{-x^2})$ (à direita). Fonte: autoral.

Podemos observar na Figura 6 que, para a fonte $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot} x$, a dispersão é rápida devido ao grande valor de k , mas a amplitude decresce exponencialmente com t . Quando a fonte é $f(x,t) = t(1 - e^{-x^2})$, a dispersão é rápida devido ao grande valor de k , e a amplitude cresce linearmente com t .

A Figura 7 apresenta o comportamento da solução (46) para $k \in \{0.1, 0.5, 2, 10\}$, e na Figura 8, os perfis espaciais correspondentes.

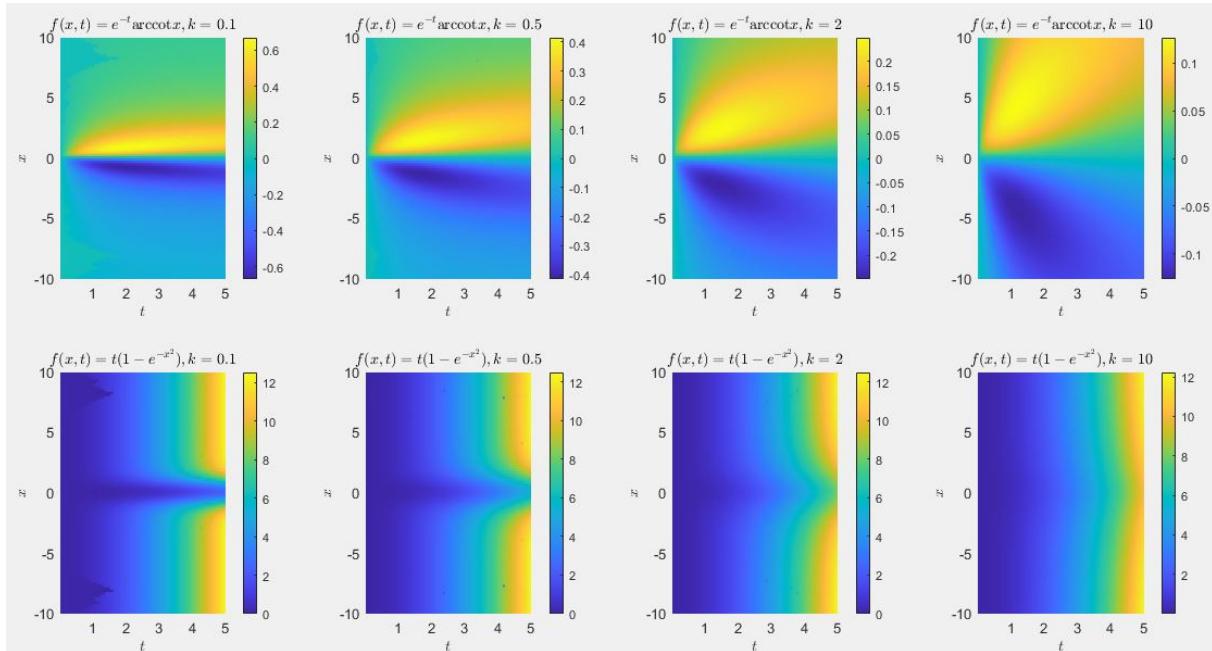


Figura 7: Solução $u(x,t)$ do PVI (40) e (41) com $k \in \{0.1, 0.5, 2, 10\}$ e fonte $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot} x$ (primeira linha) e $f(x,t) = t(1 - e^{-x^2})$ (segunda linha). Fonte: autoral.

Na primeira linha da Figura 7, observamos que, à medida que o valor de k au-

menta, a dispersão ao longo do domínio se torna maior, resultando em soluções mais planas e uniformes. Isso faz com que as características específicas das fontes iniciais se percam conforme o tempo avança.

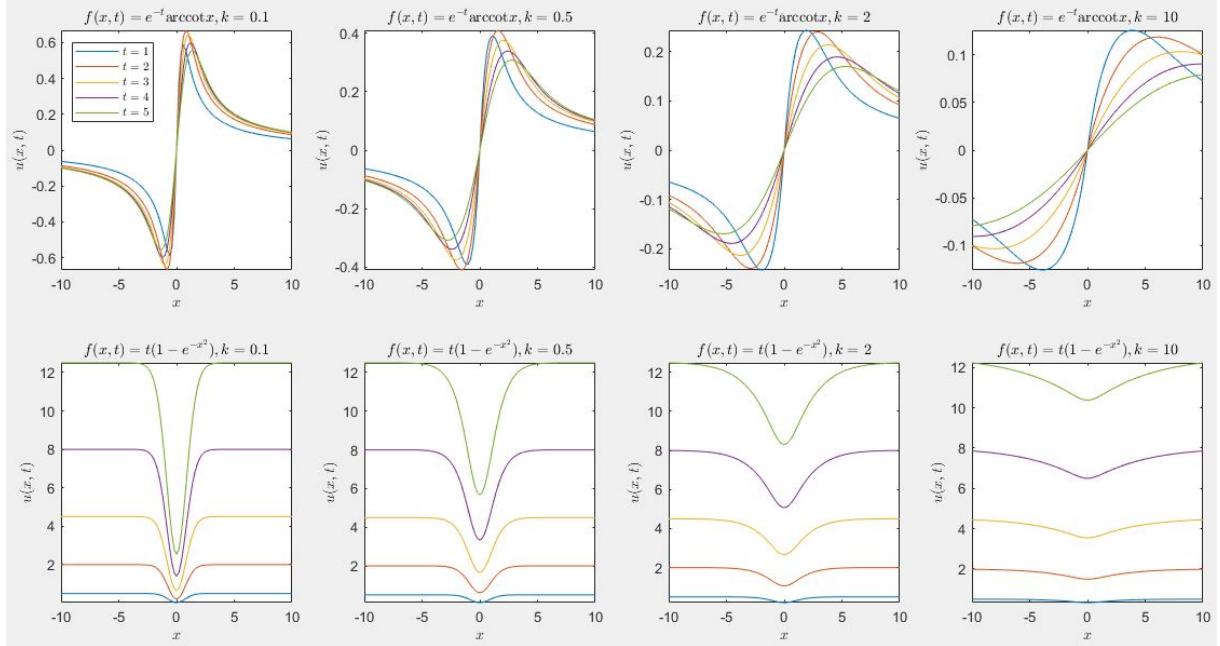


Figura 8: Perfis espaciais das soluções na Figura 7 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.

Na Figura 8, em relação ao espaço, na segunda linha observa-se que quanto maior o k maior é a dispersão e menor é a amplitude.

3.3 Problema com equação não homogênea e condição inicial não homogênea

3.3.1 Formulação do problema

Nessa seção, consideramos o seguinte PVI com fonte $f \in C(\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^*)$ e condição inicial $u_0 \in C^2(\mathbb{R})$ dado por:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^*, \quad (49)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (50)$$

3.3.2 Resolução do problema

Observe que, pela linearidade de (49), o princípio de superposição permite procurar a solução da forma $u = v + w$, em que v e w são, respectivamente, as soluções

dos PVIs

$$v_t - kv_{xx} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^* \quad (51)$$

$$v(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (52)$$

e

$$w_t - kw_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+^* \quad (53)$$

$$w(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (54)$$

Como o PVI (51) e (52) é como o PVI (15) e (16), sua solução $v(x,t)$ pode ser expressa de maneira semelhante à equação (35), obtida em 3.1, substituindo u por v :

$$v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(y) G(x-y, t) dy. \quad (55)$$

De maneira similar, como o PVI (53) e (54) é semelhante o PVI (40) e (41), na solução $w(x,t)$ pode ser expressa como a equação (46), obtida em 3.2, substituindo u por w :

$$w(x,t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} f(y, \tau) G(x-y, t-\tau) dy d\tau. \quad (56)$$

Sendo assim, em virtude do princípio de superposição, a solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) é dada pela soma de (55) e (56):

$$u(x,t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} f(y, \tau) G(x-y, t-\tau) dy d\tau + \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(y) G(x-y, t) dy. \quad (57)$$

3.3.3 Exemplos

A Figura 9 apresenta o comportamento da solução $u(x,t)$ em (57) para $k = 100$, considerando as três condições iniciais $u_0(x)$ dadas em (37)-(39) da Subseção 3.1.3 e os dois termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) da Subseção 3.2.3. Note que, de fato, a solução $u(x,t)$ nesta Subseção é a superposição das soluções obtidas nas Subseções 3.1.3 e 3.2.3.

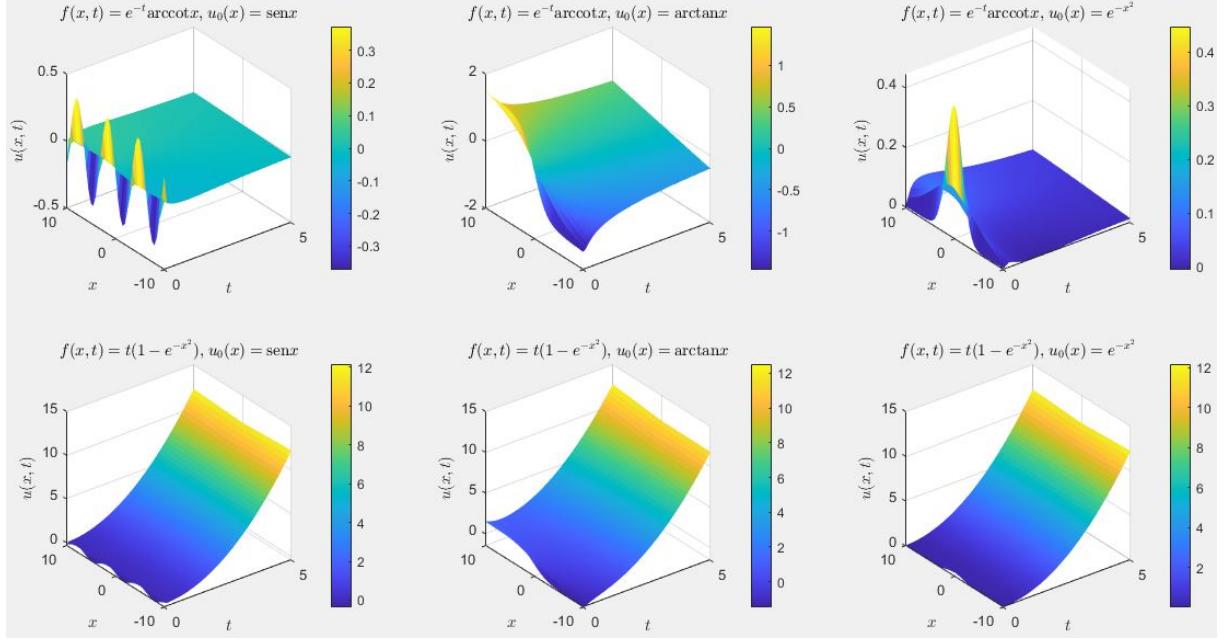


Figura 9: Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 100$ com os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.

A Figura 9 apresenta o comportamento da solução $u(x,t)$ em (57) para $k = 100$. Inicialmente, a distribuição segue o padrão oscilante da função seno, mas com o passar do tempo, a difusão suaviza essas oscilações, resultando em uma distribuição mais uniforme.

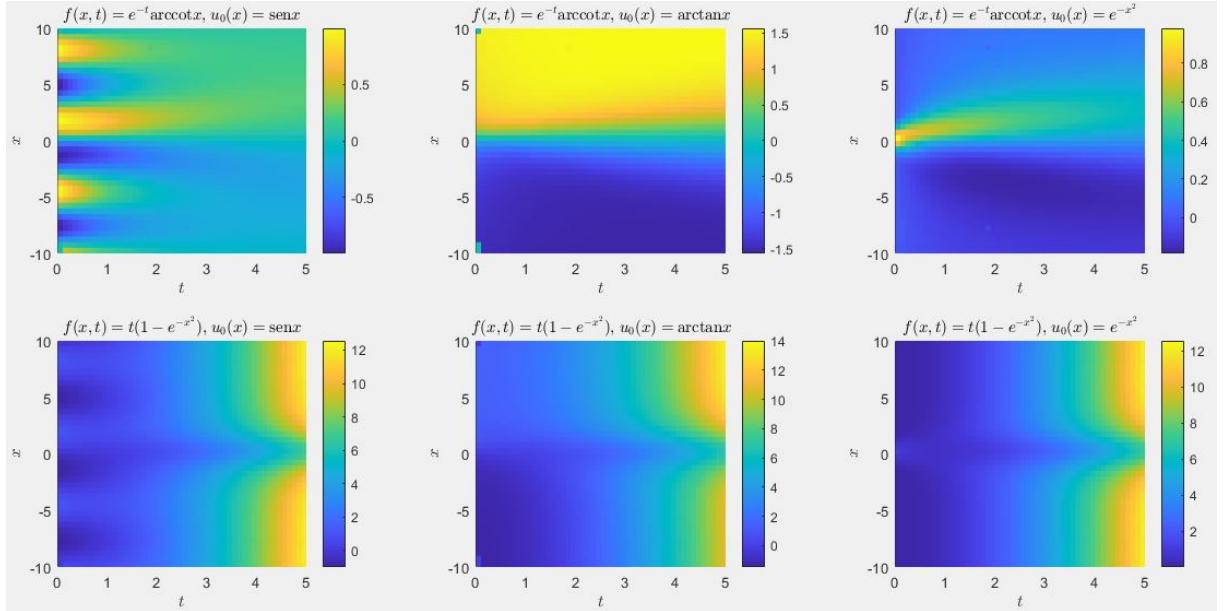


Figura 10: Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 0,1$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.

A Figura 11 apresenta o comportamento da solução $u(x,t)$ em (57) para $k = 0,5$.

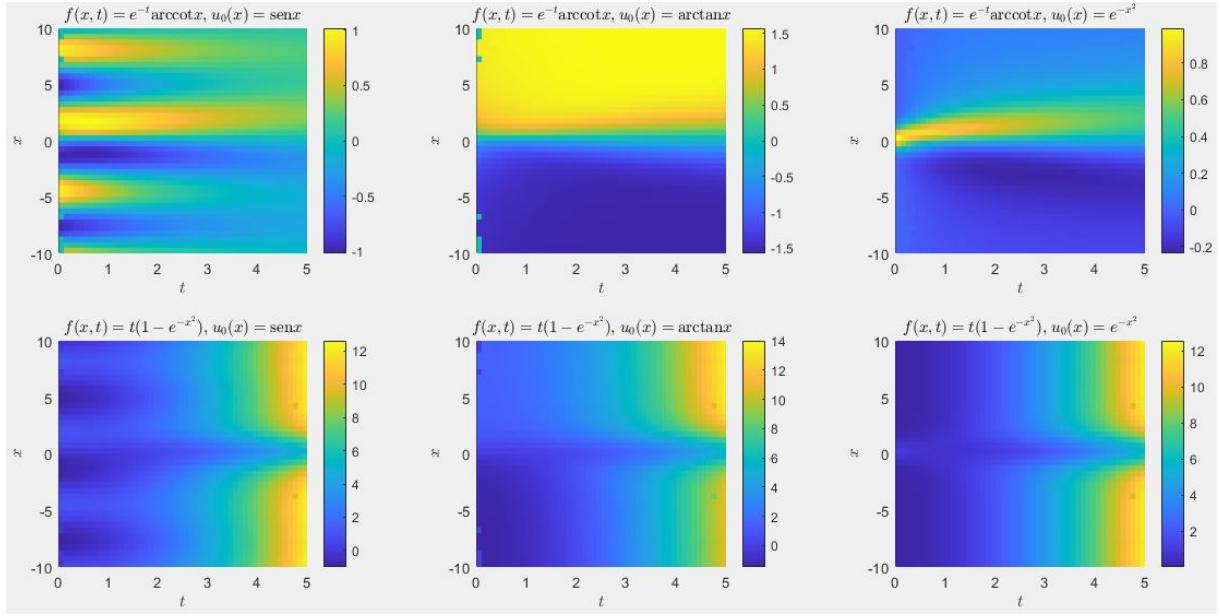


Figura 11: Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 0,5$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.

A Figura 12 apresenta o comportamento da solução $u(x,t)$ em (57) para $k = 2$.

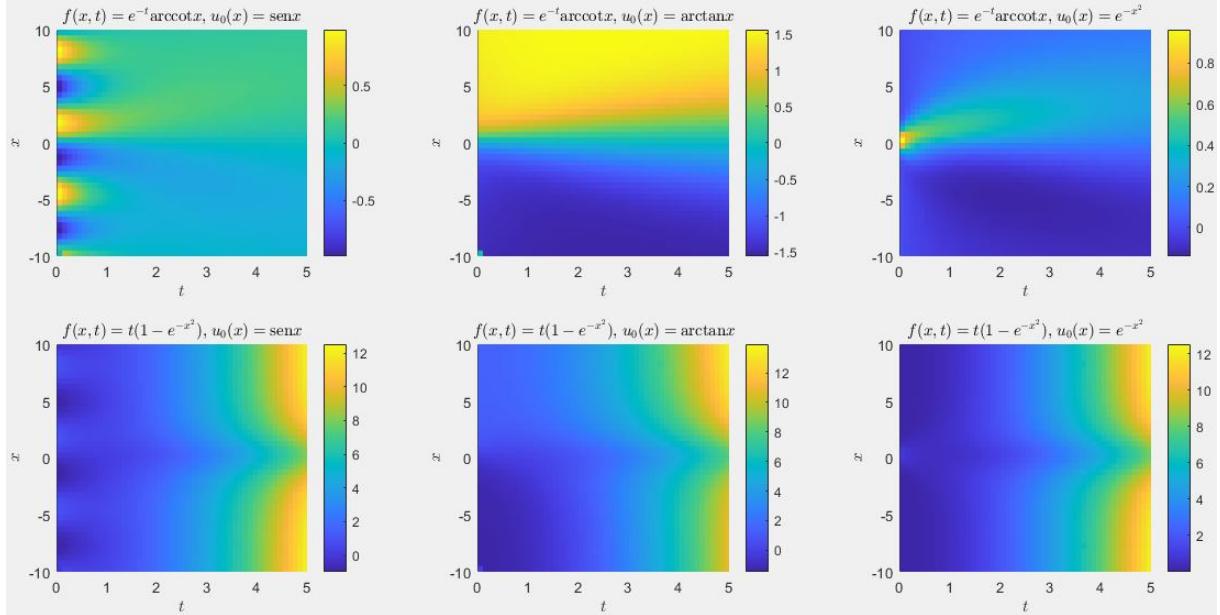


Figura 12: Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 2$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.

A figura 13 apresenta o comportamento da solução $u(x,t)$ em (57) para $k = 10$.

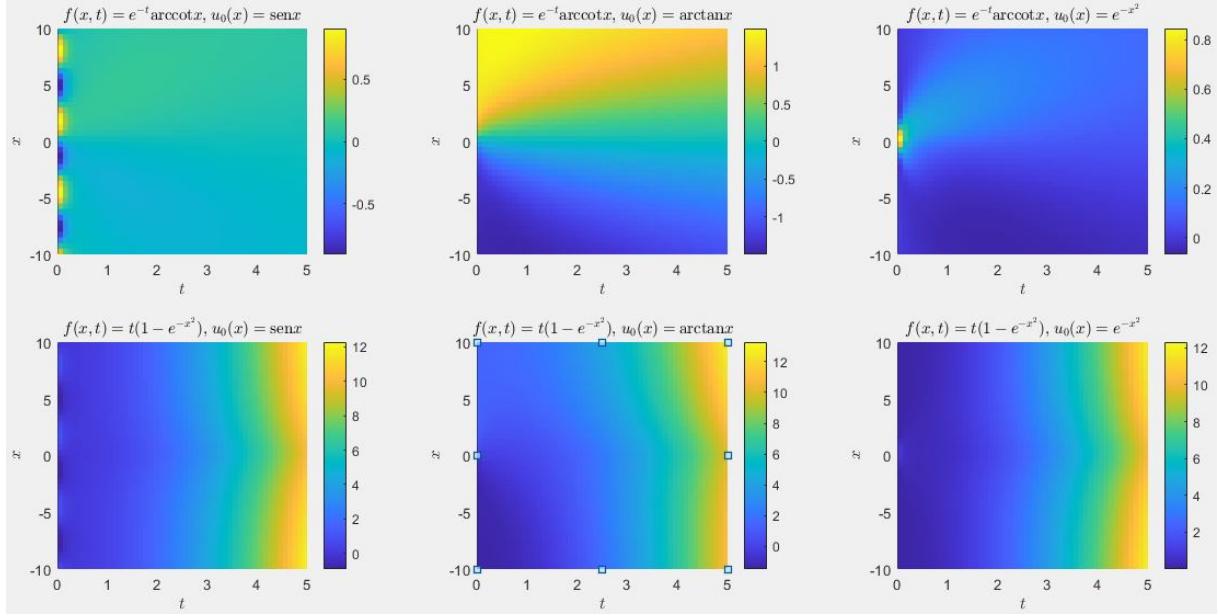


Figura 13: Solução $u(x,t)$ do PVI (49) e (50) para $k = 10$ considerando os termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) e as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39). Fonte: autoral.

Nas Figura 10 a 13, a solução $u(x,t)$ mostra claramente o efeito da difusão sobre a condição inicial e a função fonte ao longo do tempo para diferentes valores de k . Valores menores de k resultam em difusão lenta, com a solução permanecendo concentrada por mais tempo, enquanto valores maiores de k resultam em difusão rápida e com a solução se espalhando rapidamente.

A Figura 14 apresenta os perfis espaciais correspondentes às Figuras 10-13. Conforme o coeficiente de difusão aumenta, a amplitude da solução diminui ao longo do tempo.

No seguinte capítulo serão estudados problemas em domínios semi-infinitos.

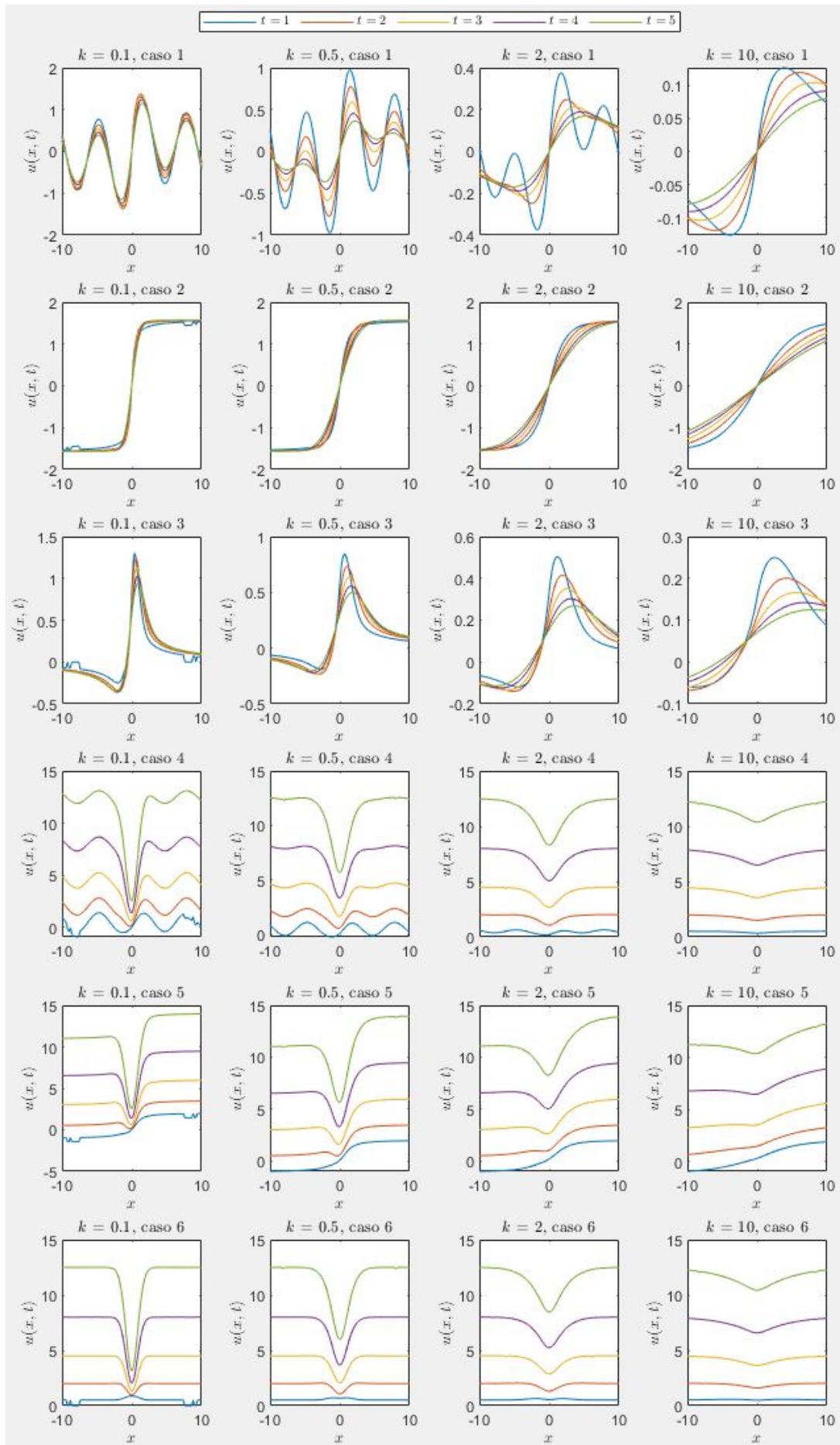


Figura 14: Perfis espaciais das Figuras 10-13. Fonte: autoral.

4 PROBLEMAS EM DOMÍNIOS SEMI-INFINITOS

4.1 Problema com equação homogênea com condição inicial não homogênea e condição de contorno de Dirichlet homogênea

4.1.1 Formulação do problema

Vamos considerar problemas em domínio semi-infinito, ou seja, em que a posição varia apenas no semieixo positivo, para a equação de difusão homogênea com condição de contorno homogênea e condição inicial não homogênea. A condição de contorno é válida em parte da fronteira desse domínio semi-infinito e a condição inicial é válida em uma outra porção da fronteira desse domínio.

Considere o seguinte PVIC (Problema de Valor Inicial de Contorno) para a equação de difusão com fonte nula, condição inicial não homogênea e condição de contorno homogênea:

$$u_t - ku_{xx} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*, \quad (58)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (59)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad (60)$$

com $u_0(0) = 0$ para garantir a compatibilidade entre as condições.

A solução desse PVIC será obtida a partir da solução do problema de Cauchy correspondente, ou seja, o problema de Cauchy para $x \in \mathbb{R}$ no domínio infinito, cuja solução já foi obtida na Seção 3.1.

4.1.2 Resolução do problema

Seja $v : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $v = u$ para $x > 0$, em que u é a solução do PVIC (58)-(60) e v_0 é a extensão antissimétrica ou ímpar a todo \mathbb{R} da condição inicial u_0 , ou seja, $v_0(x) = u_0(x)$ para $x \geq 0$ e $v_0(x) = -u_0(-x)$ para $x < 0$. Assim, temos o problema auxiliar de Cauchy

$$v_t - kv_{xx} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (61)$$

$$v(x,0) = v_0(x) = \begin{cases} u_0(x), & x \geq 0 \\ -u_0(x), & x < 0 \end{cases}, \quad x \in \mathbb{R} \quad (62)$$

cuja solução é

$$v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_0(y)G(x-y,t)dy. \quad (63)$$

Em (63), dividimos a integral nas partes positiva e negativa em x , levando em conta que v_0 é a extensão ímpar de u_0 . Introduzindo uma troca de variável, podemos juntar as integrais em uma só, no intervalo $(0, +\infty)$:

$$\begin{aligned} v(x,t) &= - \int_{-\infty}^0 u_0(-y)G(x-y,t)dy + \int_0^{+\infty} u_0(y)G(x-y,t)dy, \\ &= - \int_0^{+\infty} u_0(y)G(x-y,t)dy + \int_0^{+\infty} u_0(y)G(x-y,t)dy. \end{aligned} \quad (64)$$

Logo, a solução u do PVIC é a restrição para $x > 0$ da solução v do problema auxiliar:

$$u(x,t) = \int_0^{+\infty} u_0(y) (G(x-y,t) - G(x+y,t)) dy, \quad x > 0, \quad t > 0. \quad (65)$$

4.1.3 Exemplos

A Figura 15 apresenta a solução (65) para $k = 100$ e as três condições iniciais senoidal, arcotangente e gaussiana, dadas por (37)-(39), respectivamente.

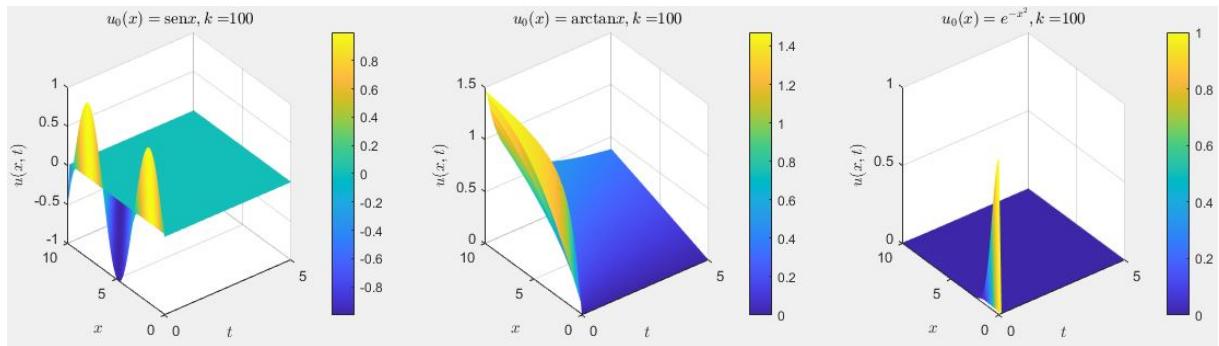


Figura 15: Solução $u(x,t)$ do PVIC (58)-(60) com $k = 100$ e $u_0(x)$ de (37)-(39). Fonte: autoral.

Na Figura 15, devido ao grande valor de k , a difusão ocorre rapidamente, espalhando-se ao longo do espaço x e do tempo t , resultando em uma distribuição mais ampla.

A Figura 16 apresenta o comportamento da solução (65) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$

e as três condições iniciais senoidal, arcotangente e gaussiana dadas por (37)-(39), respectivamente. Os perfis espaciais correspondentes são apresentados na Figura 17.

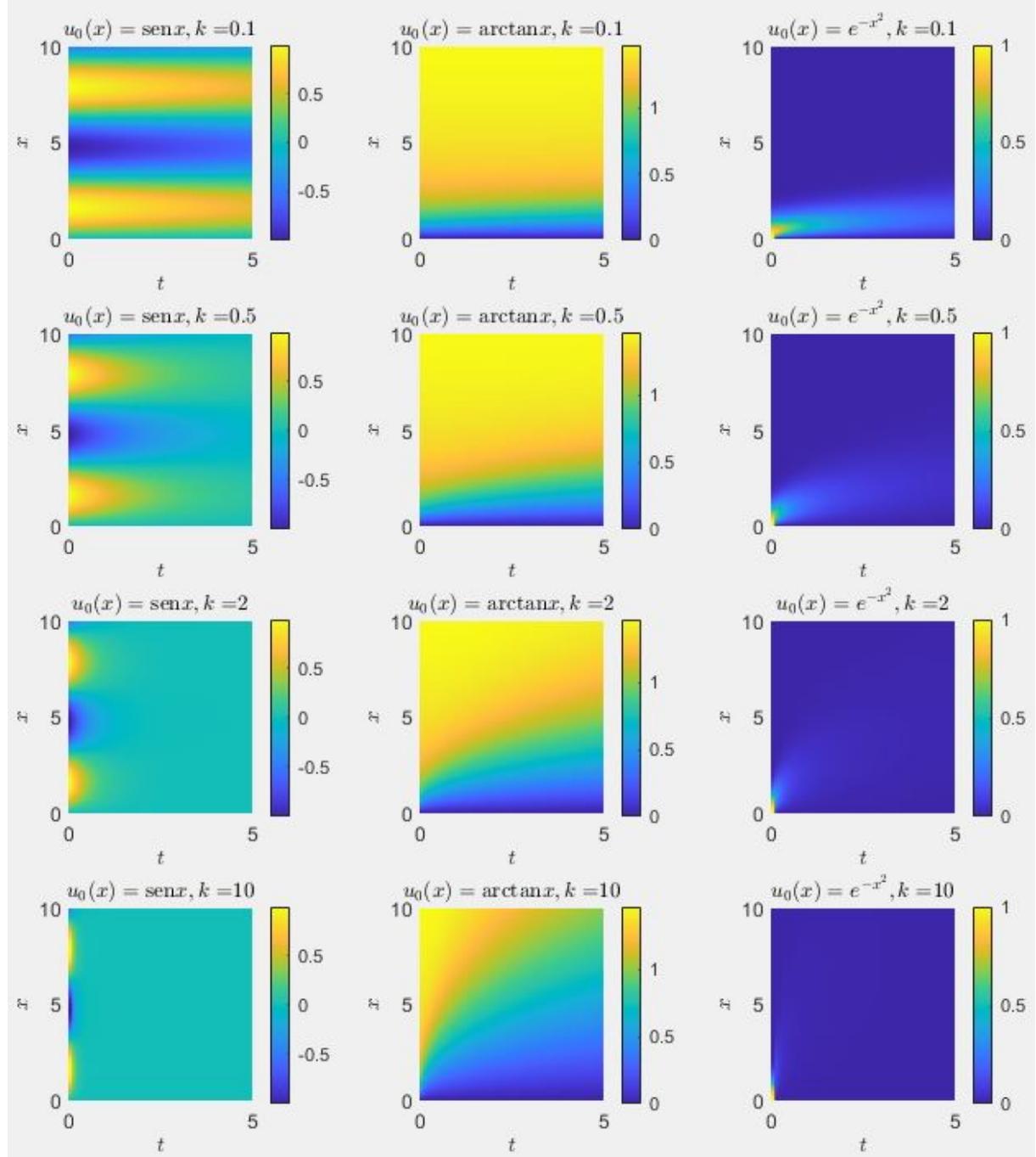


Figura 16: Solução $u(x,t)$ do PVIC (58)-(60) com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e $u_0(x)$ de (37)-(39). Fonte: autoral.

Para diferentes valores de k , a difusão afeta significativamente o comportamento da solução. Com valores menores de k , as características das condições iniciais são preservadas por mais tempo, enquanto com valores maiores de k , a difusão é rápida e a solução se torna suave e uniforme rapidamente. A análise das três condições iniciais

(senoidal, arcotangente e gaussiana) mostra como a difusão influencia a atenuação e o espalhamento das formas iniciais ao longo do tempo.

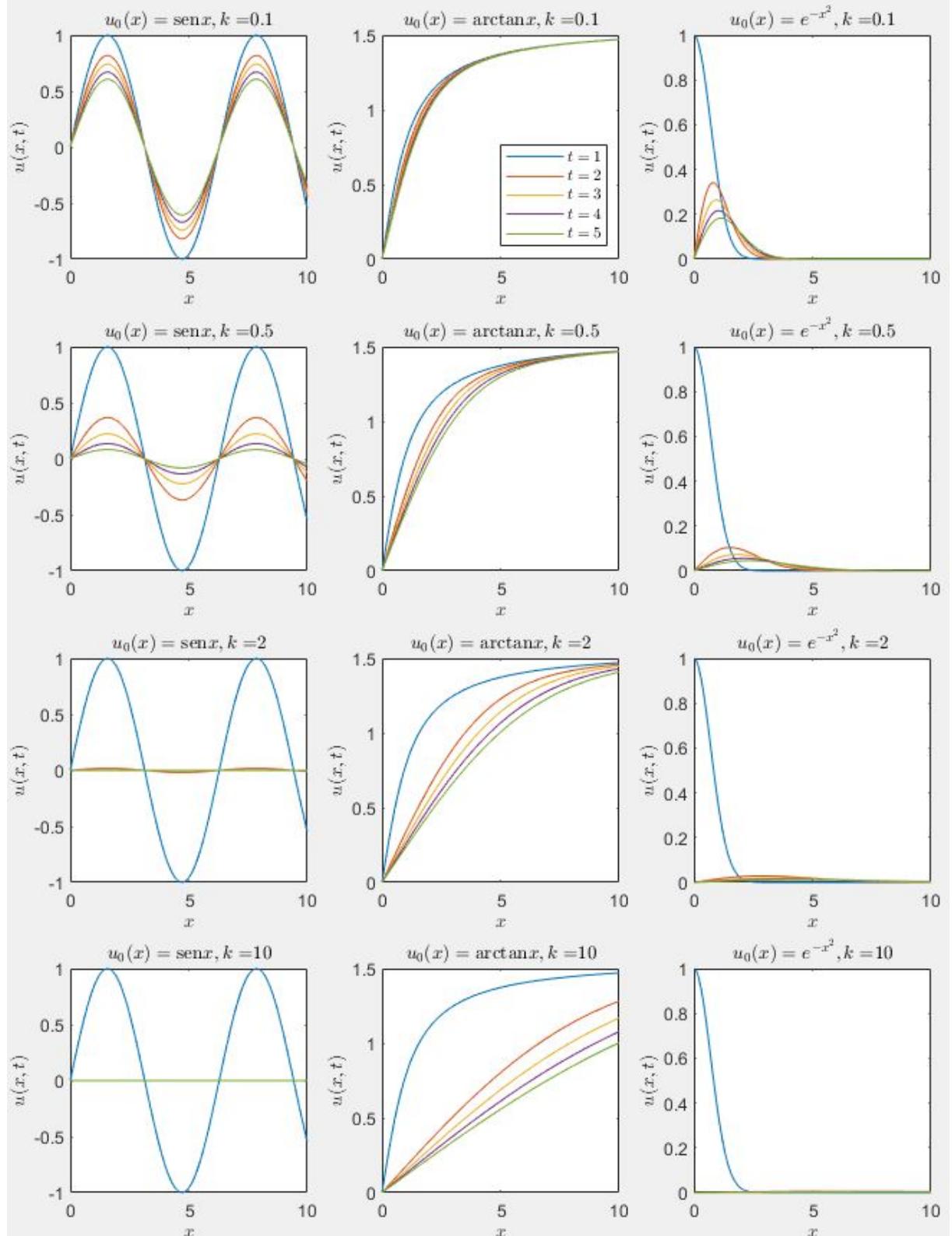


Figura 17: Perfis espaciais da figura 16 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.

Os perfis espaciais ao longo do tempo mostram como a difusão afeta as diferentes

condições iniciais para vários valores de k . À medida que k aumenta, a difusão se torna mais rápida, suavizando e espalhando as distribuições iniciais mais rapidamente. Isso resulta em perfis que se tornam mais planos e uniformes, à medida que o tempo avança.

4.2 Problema com equação não homogênea e condições inicial e de contorno de Dirichlet homogêneas

4.2.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte PVIC com fonte $f \in C(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+)$:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (66)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (67)$$

$$u(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (68)$$

4.2.2 Resolução do problema

A solução do PVIC (66)-(68) é obtida do princípio de Duhamel como

$$u(x,t) = \int_0^t u^{(\tau)}(x,t-\tau)d\tau, \quad (69)$$

em que $u^{(\tau)}(x,t)$ é a solução do seguinte problema de Duhamel

$$u_t^{(\tau)} - ku_{xx}^{(\tau)} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (70)$$

$$u^{(\tau)}(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (71)$$

$$u^{(\tau)}(x,0) = f(x,\tau), \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (72)$$

o qual tem a mesma estrutura que o problema (58)-(60) estudado na Seção 4.1. Logo, a solução do problema de Duhamel (70)-(72) é semelhante à (65), substituindo $u_0(y)$ por $f(y,\tau)$:

$$u^{(\tau)}(x,t) = \int_0^{+\infty} f(y,\tau) (G(x-y,t) - G(x+y,t)) dy, \quad x > 0, \quad t > 0 \quad (73)$$

em que $G(x,t)$ é dada por (34).

Portanto, a solução do PVIC (70)-(72) é obtida ao substituir (73) em (69):

$$u(x,t) = \int_0^t \int_0^{+\infty} f(y,\tau) (G(x-y,t-\tau) - G(x+y,t-\tau)) dy d\tau. \quad (74)$$

4.2.3 Exemplos

A Figura 18 apresenta o comportamento da solução (74) para $k = 100$ e os dois termos fonte dados por (47) e (48), respectivamente.

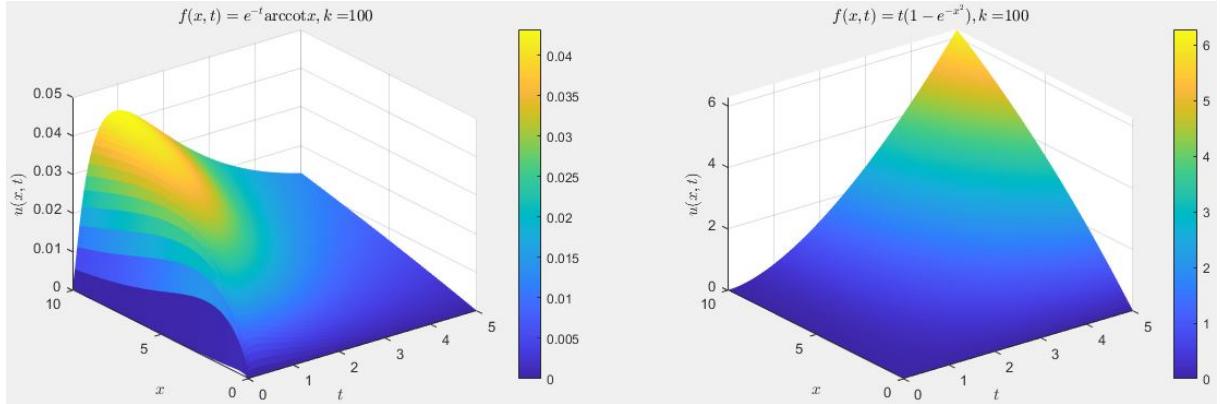


Figura 18: Solução $u(x,t)$ do PVIC (66)-(68) com $k = 100$ e $f(x,t)$ de (47) e (48). Fonte: autoral.

Para $k = 100$, a difusão é muito rápida, resultando em soluções que se espalham amplamente e se tornam muito suaves ao longo do tempo.

A Figura 19 apresenta o comportamento da solução (74) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e os dois termos fonte dados por (47) e (48), respectivamente. A Figura 20 apresenta os perfis espaciais correspondentes para $t \in \{1,2,3,4,5\}$.

Nas Figuras 19 e 20, a fonte $e^{-t}\operatorname{arcot}(x)$ decresce rapidamente ao longo tempo devido ao fator e^{-t} , enquanto fonte $t(1-e^{-x^2})$ cresce linearmente em t , e as soluções correspondentes seguem esses comportamentos para t crescente. Com k aumentando, a difusão se torna mais rápida, suavizando e espalhando as distribuições iniciais mais rapidamente.

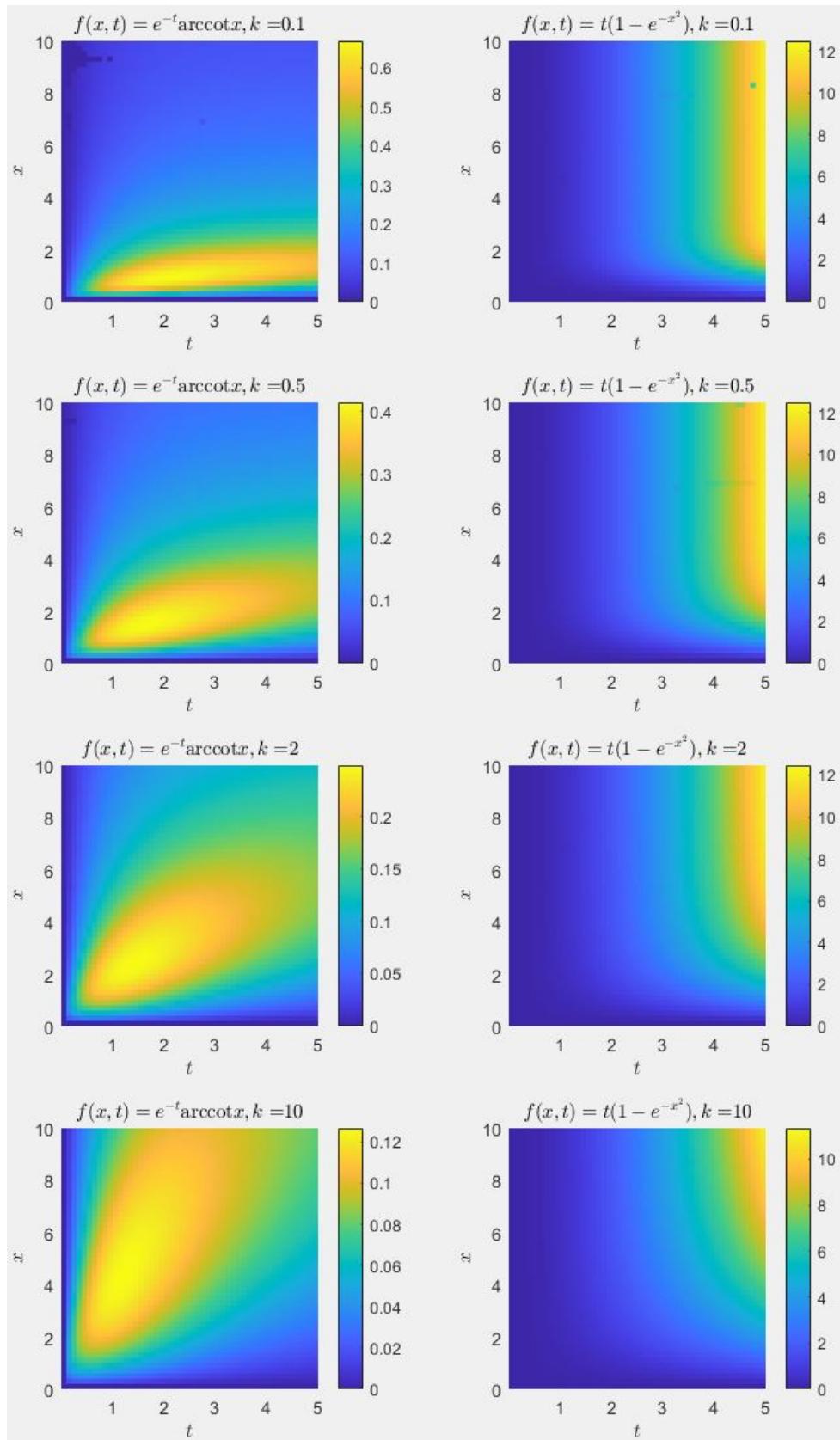


Figura 19: Solução $u(x,t)$ do PVIC (66)-(68) com $k \in \{0.1, 0.5, 2, 10\}$ e $f(x,t)$ de (47) e (48). Fonte: autoral.

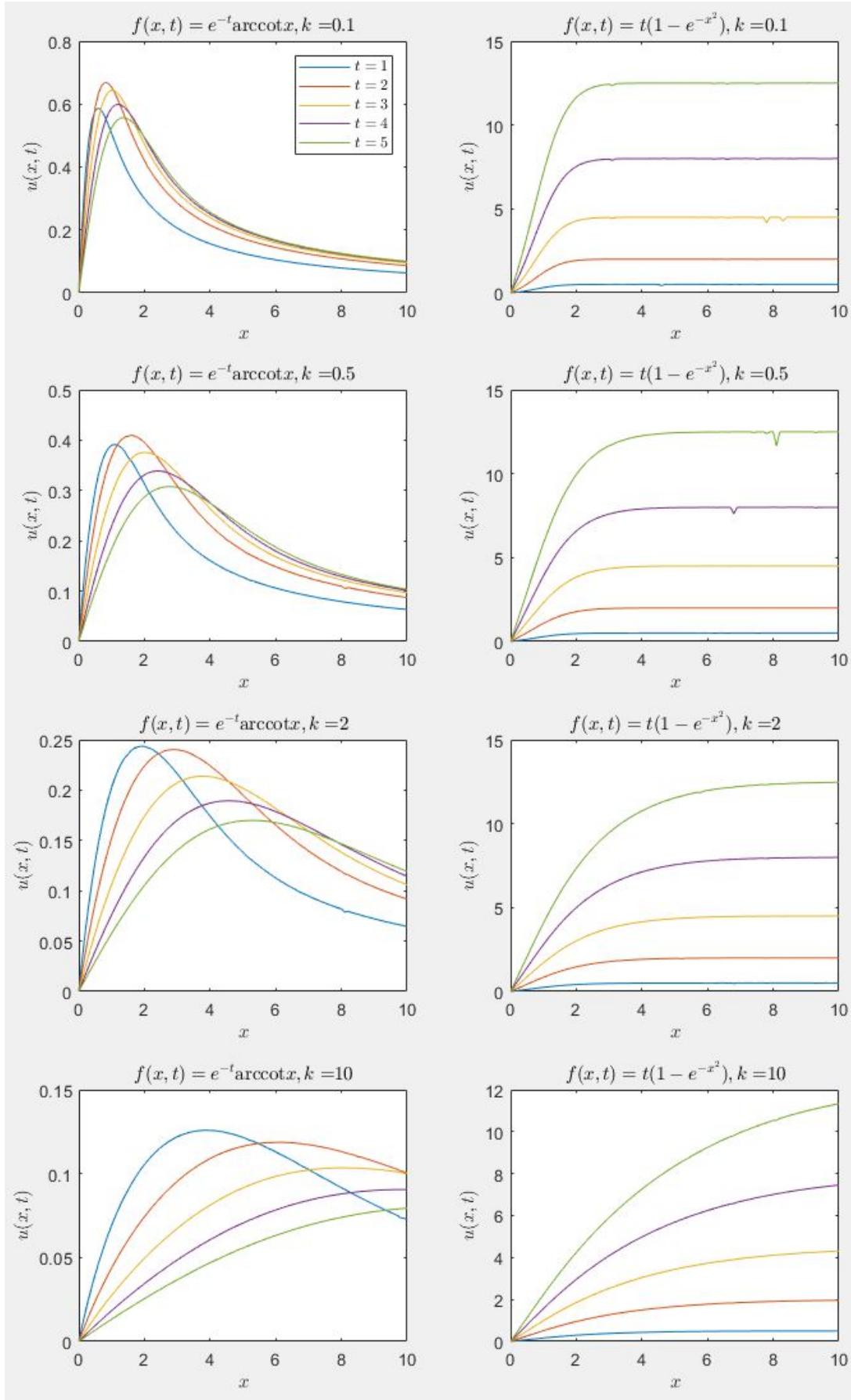


Figura 20: Perfis espaciais da Figura 19 para $t \in \{1,2,3,4,5\}$. Fonte: autoral.

4.3 Problema com equação não homogênea com condições inicial não homogênea e de contorno de Dirichlet homogênea

4.3.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte PVIC com fonte $f \in C(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+)$:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (75)$$

$$u(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (76)$$

$$u(x,0) = u_0, \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (77)$$

4.3.2 Resolução do problema

A solução do PVIC (75)-(77) é obtida pelo princípio de superposição, onde, ao definir $u = v + w$, o problema é decomposto em dois subproblemas, um como (58)-(60) para v e o outro como (66)-(68) para w . Portanto, a solução é obtida somando as soluções (65) e (74) dos problemas nas Seções 4.1 e 4.2

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \int_0^{+\infty} u_0(y)(G(x-y,t) - G(x+y,t))dy \\ &\quad + \int_0^t \int_0^{+\infty} f(y,\tau) (G(x-y,t-\tau) - G(x+y,t-\tau)) dy d\tau. \end{aligned} \quad (78)$$

4.3.3 Exemplos

A Figura 21 apresenta a solução $u(x,t)$ em (78) para $k = 100$, considerando as três condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) da subseção 3.1.3 e os dois termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) da subseção 4.2.3. Note que, de fato, a solução $u(x,t)$ nesta subseção é a superposição das soluções obtidas nas subseções 4.1.3 e 4.2.3.

A difusão é extremamente rápida, resultando em soluções que se espalham amplamente e se tornam muito suaves ao longo do tempo. A solução é inicialmente influenciada pela condição inicial, mas à medida que o tempo avança, a contribuição da função fonte se torna predominante.

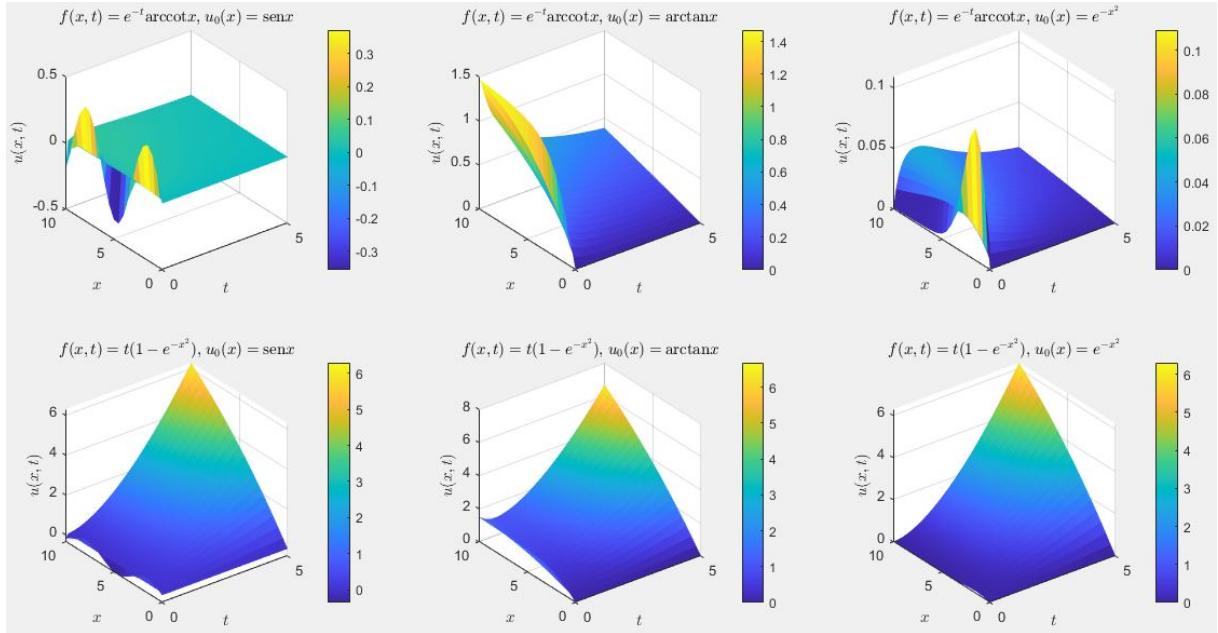


Figura 21: Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 100$. Fonte: autoral.

As Figuras 22-25 apresentam o comportamento da solução $u(x,t)$ em (78) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$, cujos perfis espaciais são apresentados na Figura 26.

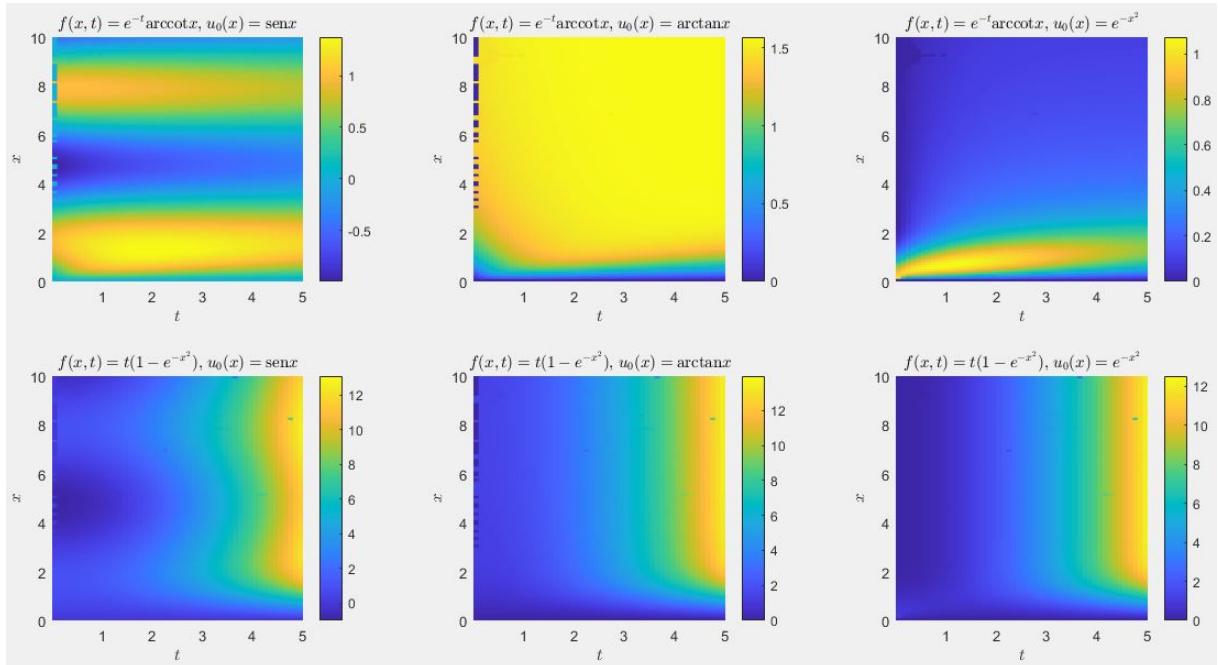


Figura 22: Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,1$. Fonte: autoral.

Na Figura 22, a solução $u(x,t)$ é altamente concentrada ao redor de $x = 0$. À medida que o tempo aumenta, a densidade de valores de $u(x,t)$ diminui em $x = 0$ e começa a se espalhar ao longo do eixo x .

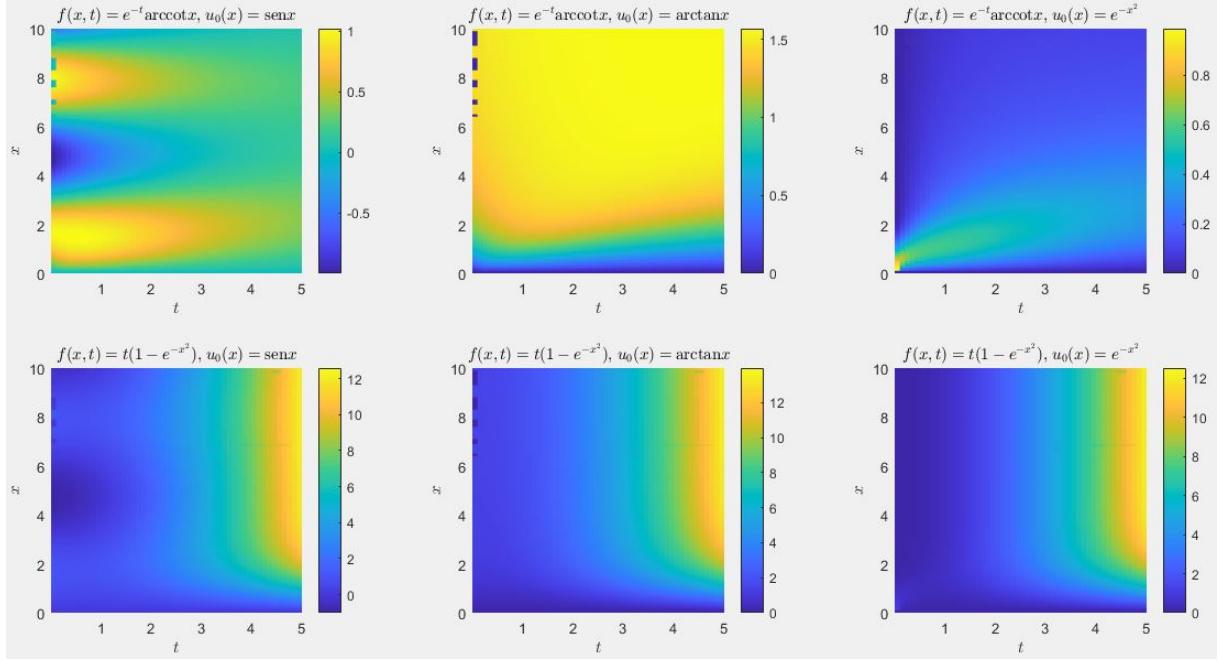


Figura 23: Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,5$. Fonte: autoral.

Na Figura 23, a solução $u(x,t)$ está concentrada ao redor de $x = 0$, mas menos do que para $k = 0,1$. À medida que o tempo avança, a densidade de valores de $u(x,t)$ diminui em $x = 0$ e começa a se espalhar um pouco mais rápido ao longo do eixo x .

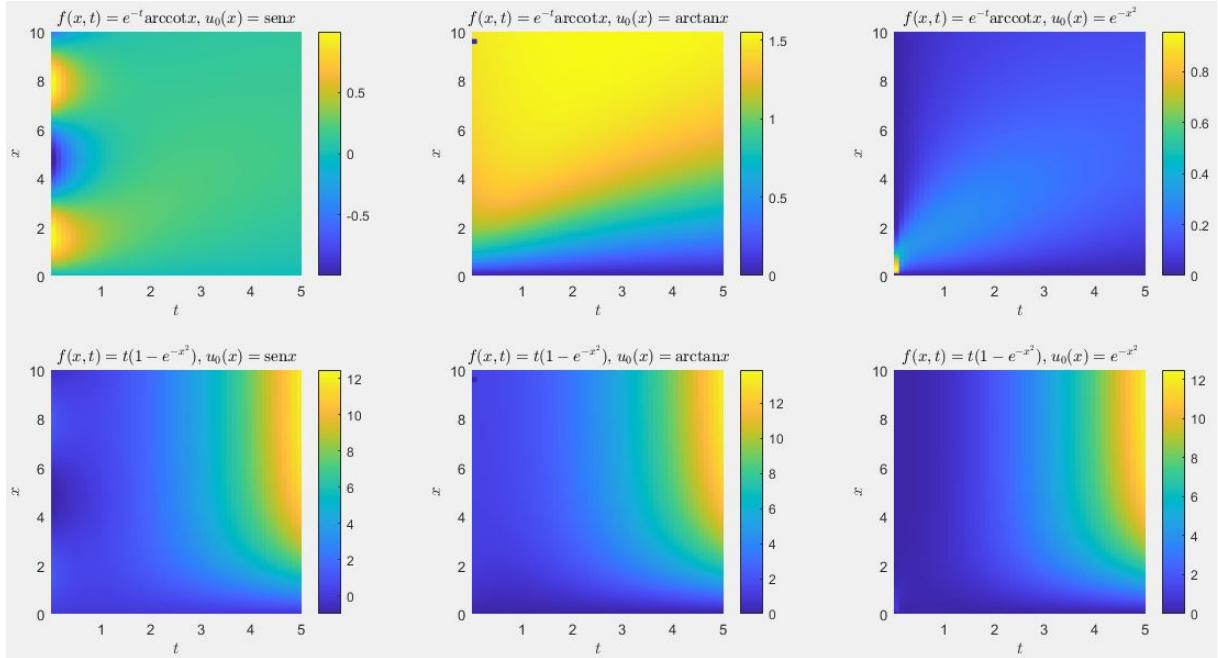


Figura 24: Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 2$. Fonte: autoral.

Na Figura 24, a solução $u(x,t)$ se concentra ao redor de $x = 0$, mas de forma muito menos intensa do que para $k = 0,1$. À medida que o tempo aumenta a densidade de

$u(x,t)$ diminui em $x = 0$ e se espalha bem mais rápido ao longo do eixo x .

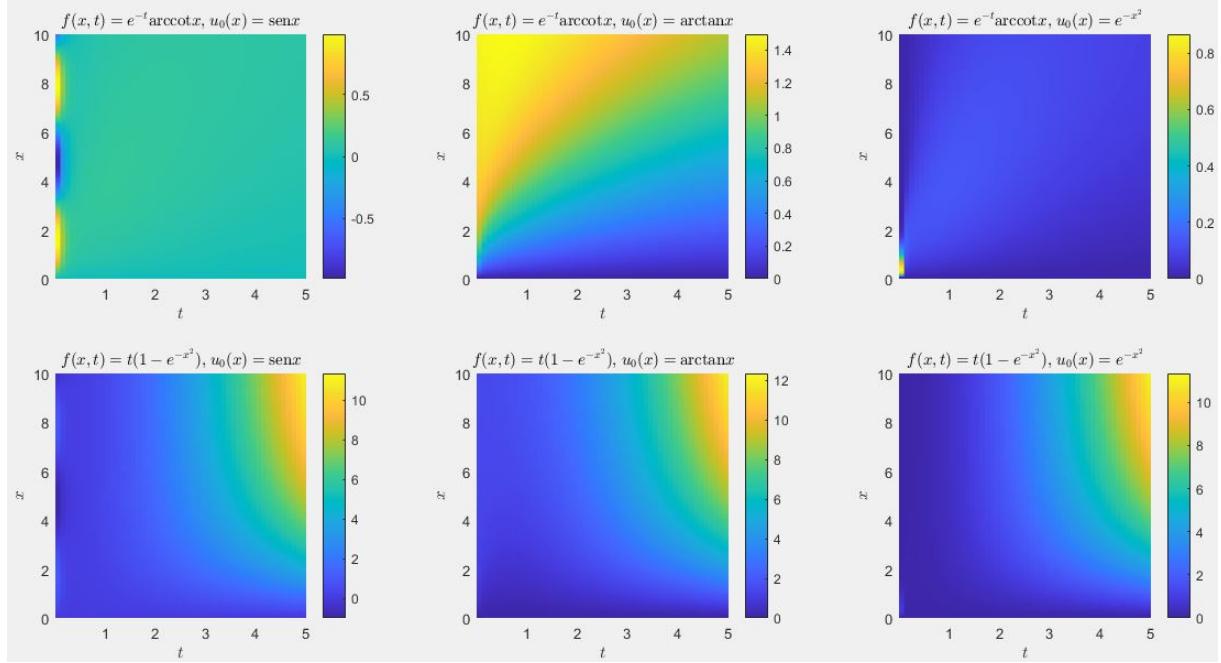


Figura 25: Solução $u(x,t)$ em (78) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 10$. Fonte: autoral.

Na Figura 25, a solução $u(x,t)$ começa a se espalhar rapidamente devido ao alto valor de k . À medida que o tempo avança, a densidade de valores de $u(x,t)$ diminui em $x = 0$ e se espalha muito rapidamente, resultando em uma distribuição muito ampla ao longo do eixo x .

A Figura 26 reúne os perfis espaciais para $t \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ das realizações da solução $u(x,t)$ em (78) nas Figuras 22-25. Cada coluna de gráficos corresponde ao valor da difusividade $k \in \{0, 0, 1, 0, 5, 2, 10\}$, enquanto as linhas correspondem às combinações de condição inicial $u_0(x)$ em (37)-(39) e termo fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) na mesma ordem que nas Figuras 22-25. Nos perfis espaciais é possível observar de forma unificada os comportamentos da solução descritos após as Figuras 22-25.

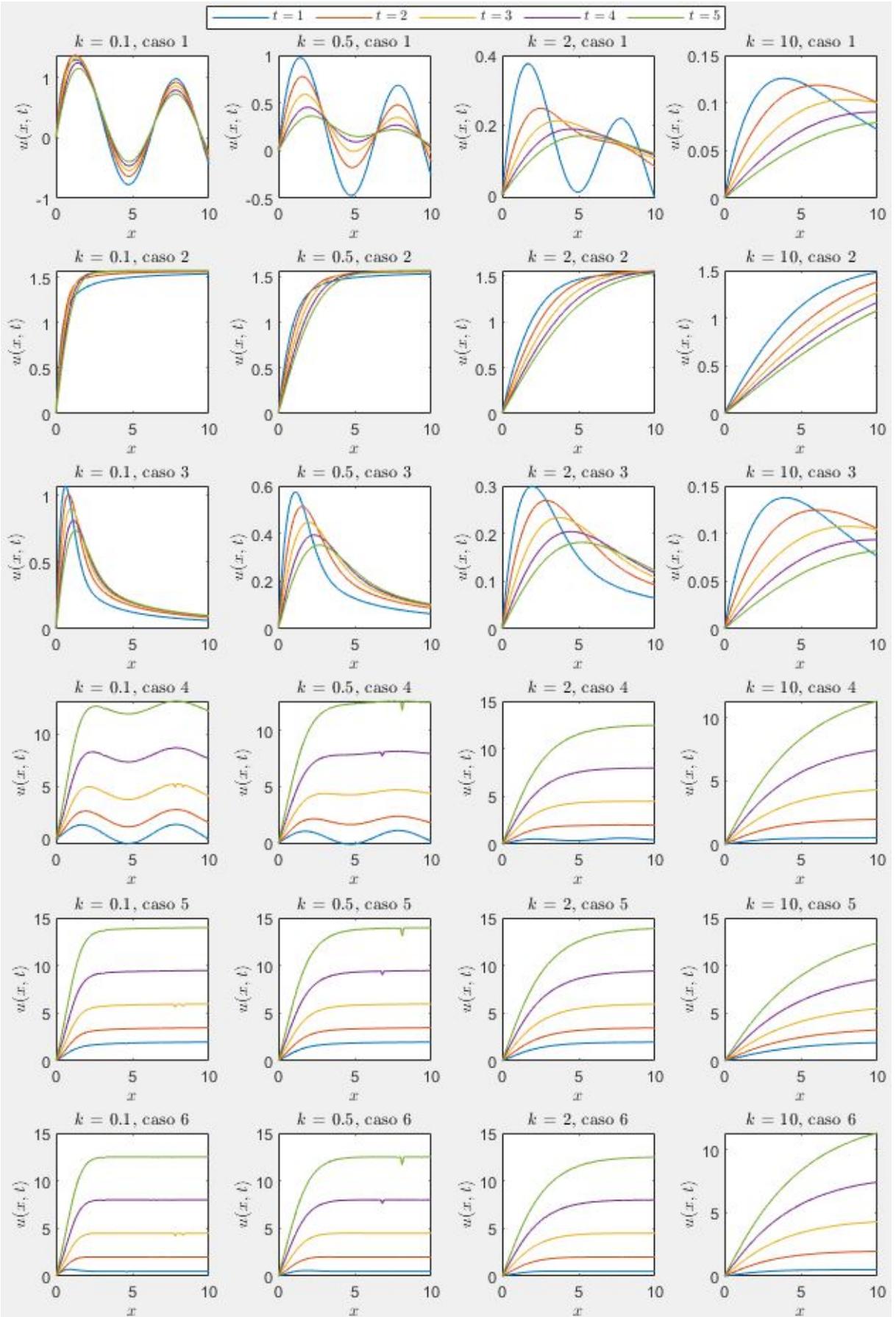


Figura 26: Perfis espaciais das Figuras 22-25 para $t \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$. Fonte: autoral.

4.4 Problema com equação homogênea e condições inicial e de contorno de Dirichlet não homogêneas

4.4.1 Formulação do problema

Nas seções anteriores, consideramos PVICs com condição de contorno homogênea, o que permitiu estender a condição inicial a todo \mathbb{R} de forma contínua. Nesta seção, consideramos o seguinte PVIC com condição de contorno não homogênea:

$$u_t - ku_{xx} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+, \quad (79)$$

$$u(0,t) = u^0(t), \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (80)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad (81)$$

em que $u^0 \in C^1(\mathbb{R}_+)$ é limitada e $u^0(0) = u_0(0)$ para garantir a compatibilidade das condições.

4.4.2 Resolução do problema

A solução do PVIC (79)-(81) é obtida mediante a homogeneização da condição de contorno (80), empregando a troca de variáveis $v(x,t) = u(x,t) - u^0(t)$ para podermos considerar a extensão antissimétrica e contínua da condição inicial. Isso resulta no seguinte problema:

$$v_t - kv_{xx} = -u_t^0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (82)$$

$$v(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (83)$$

$$v(x,0) = v_0(x), \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (84)$$

em que $v_0(x) = u_0(x) - u^0(0)$. Observe que o problema (82)-(84) é do mesmo tipo que o problema (75)-(77) estudado na Seção 4.3. Logo, sua solução $v(x,t)$ é

$$\begin{aligned} v(x,t) &= \int_0^{+\infty} v_0(y)(G(x-y,t) - G(x+y,t))dy \\ &\quad - \int_0^t \int_0^{+\infty} u_t^0(y,\tau) (G(x-y,t-\tau) - G(x+y,t-\tau)) dy d\tau. \end{aligned} \quad (85)$$

Assim, a solução $u(x,t)$ do problema (79)-(81) é obtida como $u(x,t) = v(x,t) + u^0(t)$:

$$\begin{aligned} u(x,t) &= u^0(t) + \int_0^{+\infty} (u_0(y) - u^0(0))(G(x-y,t) - G(x+y,t))dy \\ &\quad - \int_0^t u_t^0(\tau) \left(\int_0^{+\infty} (G(x-y,t-\tau) - G(x+y,t-\tau)) dy \right) d\tau. \end{aligned} \quad (86)$$

4.4.3 Exemplos

A Figura 27 apresenta o comportamento da solução $u(x,t)$ em (86) para $k = 100$, com as três condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) da Subseção 3.1.3 e as três condições de contorno $u^0(t)$, que resultam da substituições x por t nas Equações (37)-(39).

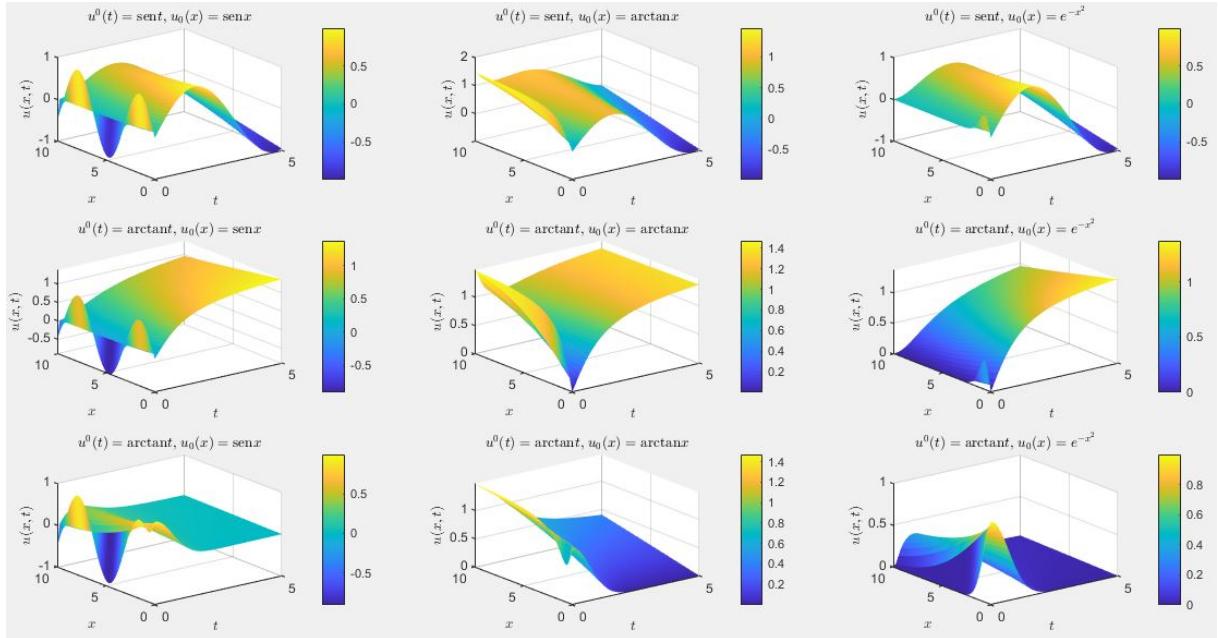


Figura 27: Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$ que resultam de trocar x por t em (37)-(39) para $k = 100$. Fonte: autoral.

As Figuras 28-31 apresentam o comportamento da solução $u(x,t)$ em (86) para $k \in \{0.1, 0.5, 2, 10\}$, com as três condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e as três condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39). A Figura 32 apresenta os perfis espaciais correspondentes par $t \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$.

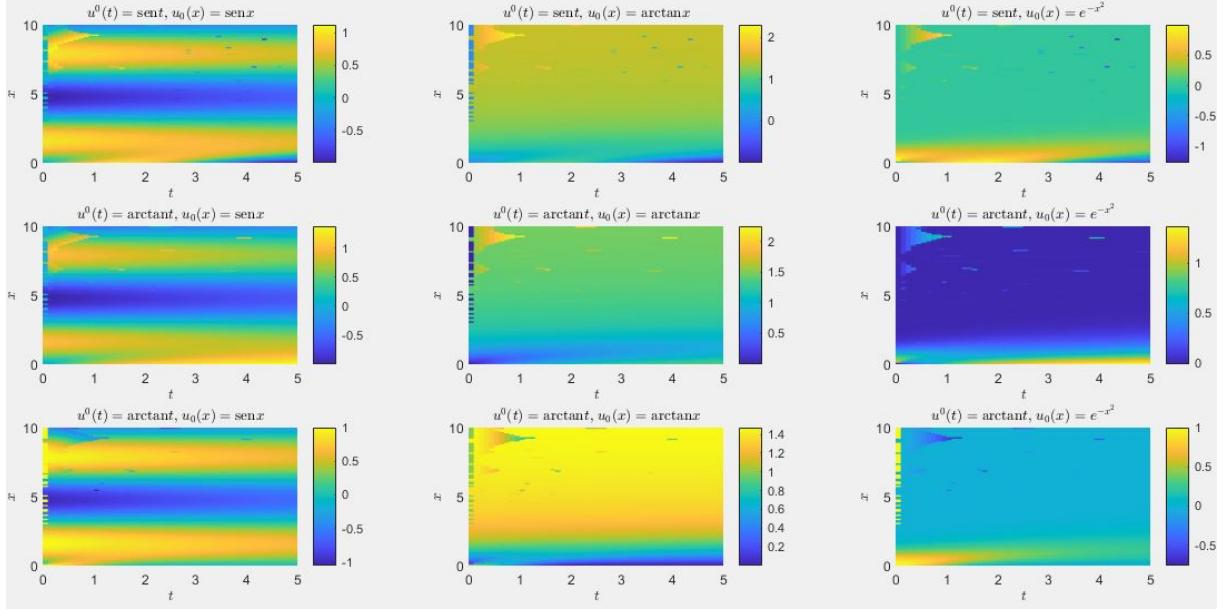


Figura 28: Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 0,1$. Fonte: autoral.

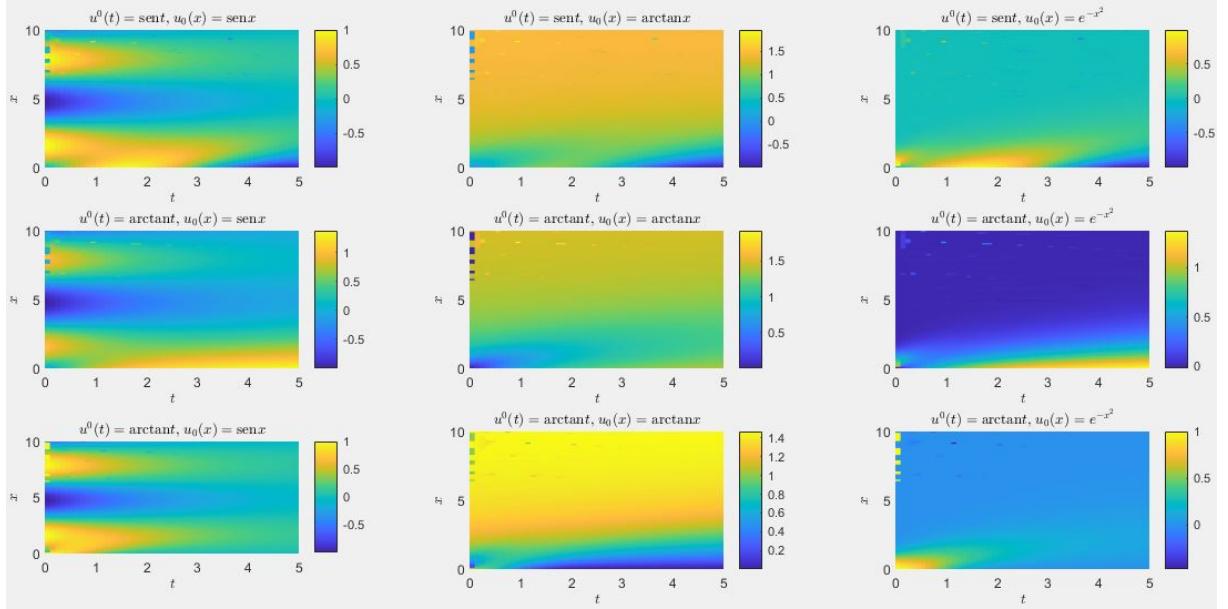


Figura 29: Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$ obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 0,5$. Fonte: autoral.

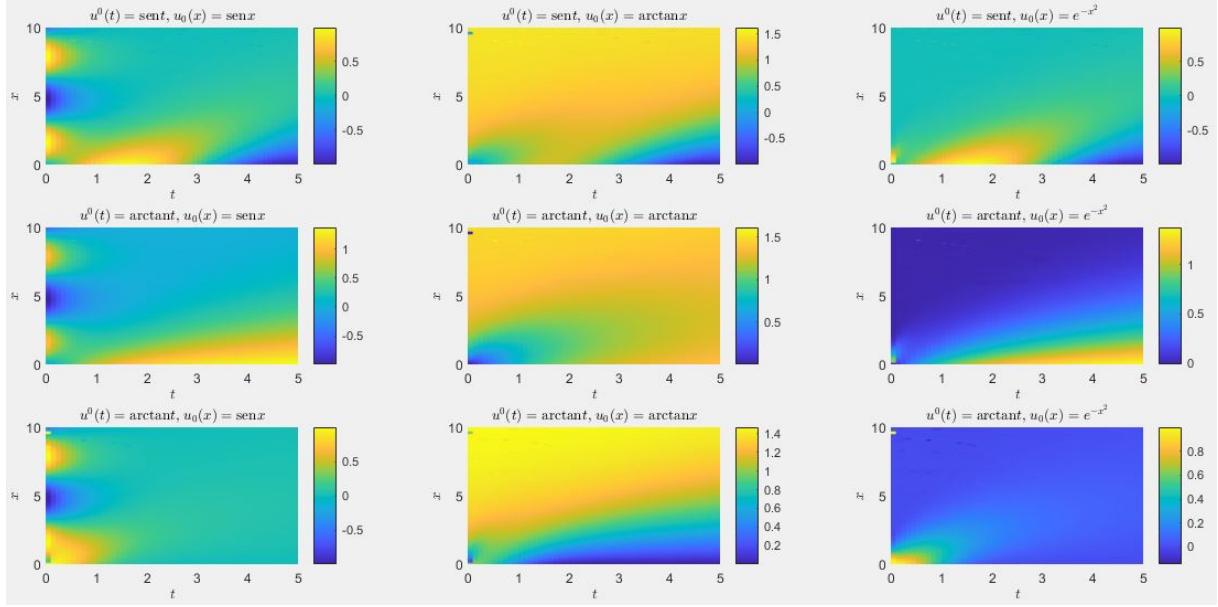


Figura 30: Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 2$. Fonte: autoral.

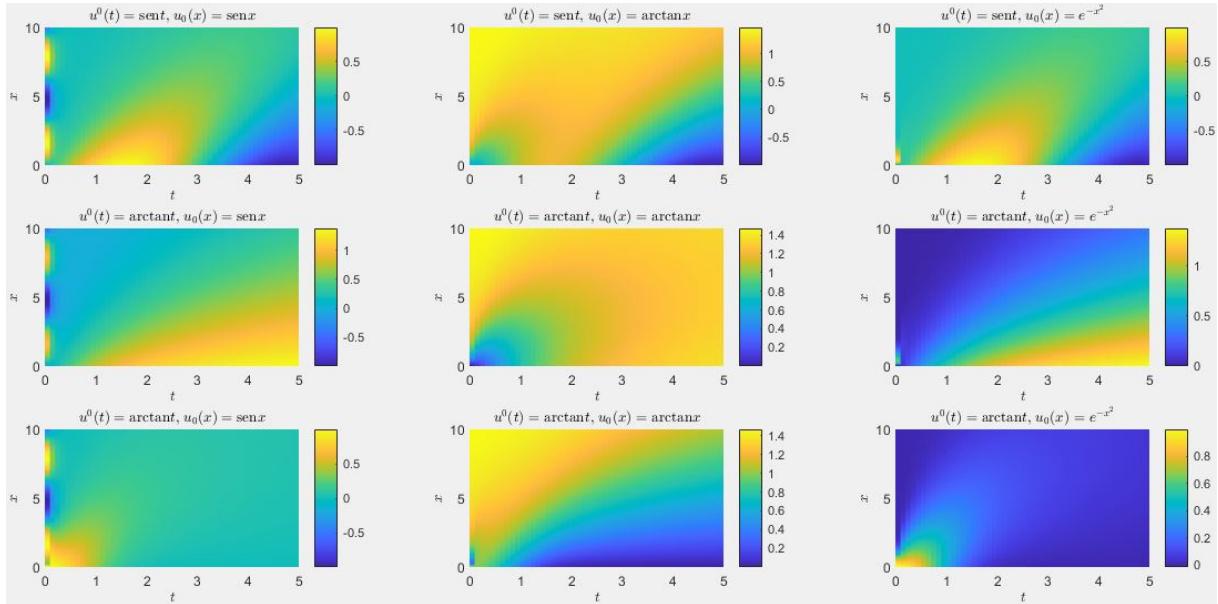


Figura 31: Solução $u(x,t)$ em (86) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e condições de contorno $u^0(t)$, obtidas substituindo x por t nas equações (37)-(39) para $k = 10$. Fonte: autoral.

Nas Figuras 27-31, a solução $u(x,t)$ mostra o efeito da difusão sobre a condição inicial e a função fonte ao longo do tempo para diferentes valores de k . Valores menores de k resultam em uma difusão lenta, com a solução permanecendo concentrada por mais tempo, enquanto valores maiores de k resultam em difusão rápida, com a solução se espalhando amplamente e rapidamente. Isto é observado também nas Fi-

guras 32-35, as quais apresentam os perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ das Figuras 28-31 para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$, respectivamente.

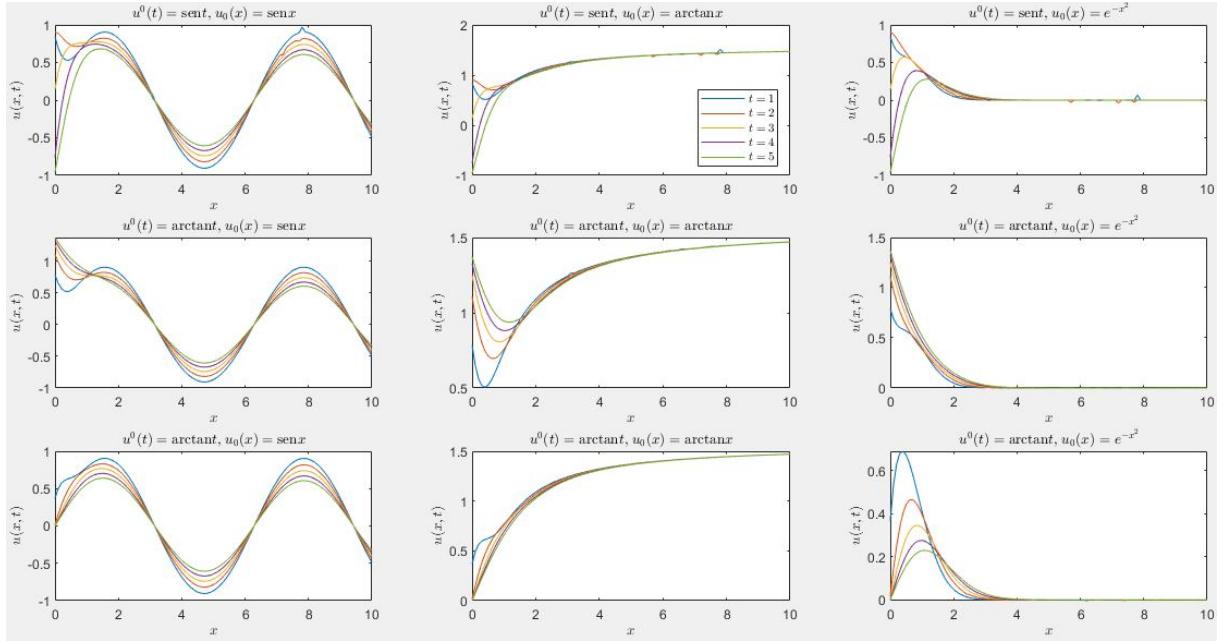


Figura 32: Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 28 ($k = 0,1$). Fonte: autoral.

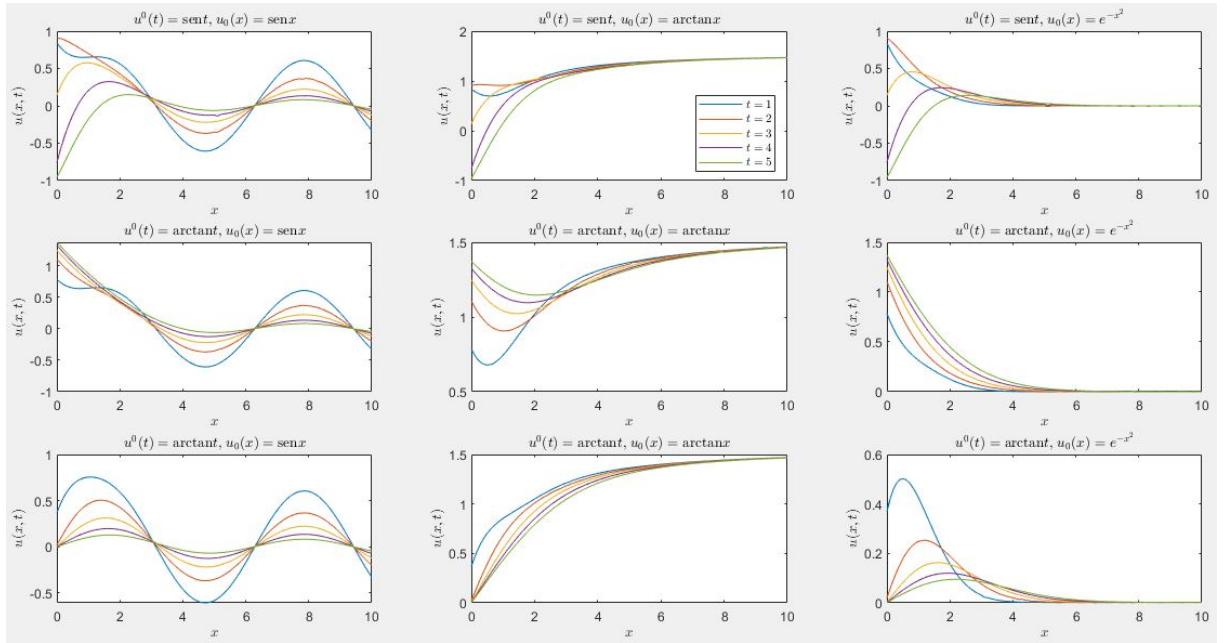


Figura 33: Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 29 ($k = 0,5$). Fonte: autoral.

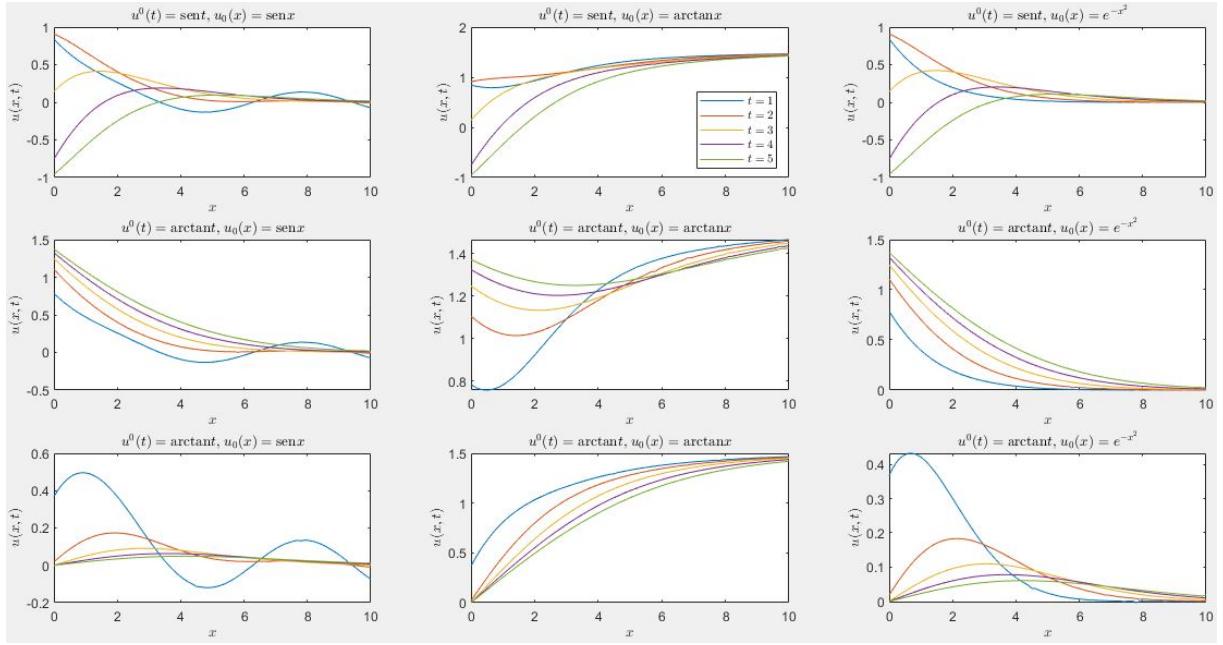


Figura 34: Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 30 ($k = 2$). Fonte: autoral.

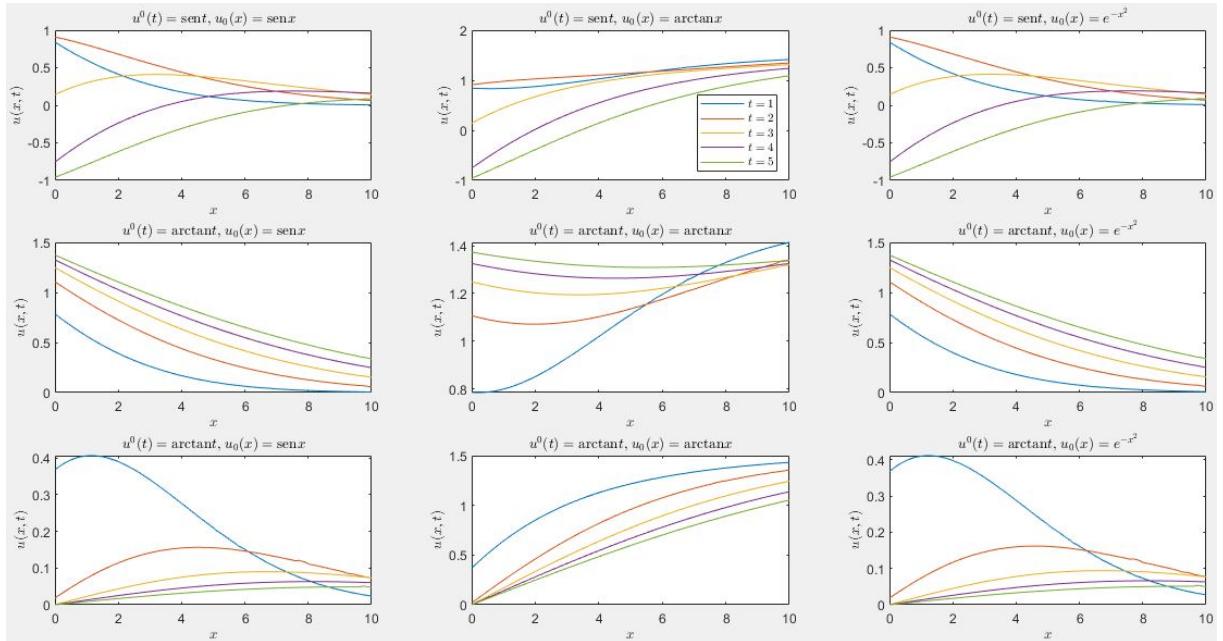


Figura 35: Perfis espaciais para $t \in \{1,2,3,4,5\}$ da Figura 31 ($k = 10$). Fonte: autoral.

4.5 Problema com equação homogênea, condição de contorno de Neumann homogênea e condição inicial não homogênea

Neste capítulo, nos problemas estudados até a seção anterior, as condições de contorno consideradas foram de Dirichlet. A partir desta seção, consideraremos condições de Neumann para estudar a influência do tipo de condição de contorno no comportamento da solução.

4.5.1 Formulação do problema

Considere a equação de difusão com fonte nula em domínio semi-infinito, sujeita a uma condição de contorno de Neumann homogênea e uma condição inicial não homogênea da forma

$$u_t - ku_{xx} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (87)$$

$$u_x(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (88)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}_+, \quad (89)$$

em que $u'_0(0) = 0$ para compatibilidade com a condição de contorno (88). Observe que a única diferença com o problema estudado na Seção 4.1 é que, aqui, a condição de contorno é de Neumann.

4.5.2 Resolução do problema

Seja $v : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $v = u$ para $x > 0$, em que u é a solução do PVIC (87)-(89) e v_0 é a extensão simétrica ou par de $u_0(x)$ para todo \mathbb{R} da condição inicial $u_0(x)$, ou seja, $v_0(x) = u_0(x)$ para $x \geq 0$ e $v_0 = u_0(-x)$ para $x < 0$. Assim, temos o seguinte problema auxiliar de Cauchy:

$$v_t - kv_{xx} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (90)$$

$$v(x,0) = v_0(x) = \begin{cases} u_0(x), & x \geq 0 \\ u_0(-x), & x < 0 \end{cases}. \quad (91)$$

Observando que o PVI auxiliar (90)-(91) tem a mesma estrutura do problema estudado na Seção 3.1, segue que sua solução é

$$v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_0(y)G(x-y,t)dy. \quad (92)$$

Para explicitar a forma de (92), vamos dividir a integral em partes. Sabemos que v_0 é u_0 e menos seu argumento y . Precisamos transformar a primeira parte da integral para poder uni-la à segunda parte, introduzindo uma troca de variável sendo com a mesma letra y , obtendo a nova variável $-y$.

$$v(x,t) = \int_{-\infty}^0 u_0(-y)G(x-y,t)dy + \int_0^{+\infty} u_0(y)G(x-y,t)dy. \quad (93)$$

Para inverter a ordem de integração multiplicamos por menos um na primeira parte. Se $-y$ vale $-\infty$ então y é $+\infty$. Sendo assim, invertemos a primeira integral, obtemos a mesma variável e o mesmo limite de integração podendo ficar com uma integral.

Dessa forma, já temos v definida para todo \mathbb{R} e para x a restrição de v de x positivo.

$$v(x,t) = \int_0^{+\infty} u_0(y)G(x+y,t)dy + \int_0^{+\infty} u_0(y)G(x-y,t)dy. \quad (94)$$

Logo, a solução u do PVIC original é a restrição para $x > 0$ da solução v do problema auxiliar de Cauchy:

$$u(x,t) = \int_0^{+\infty} u_0(y)(G(x-y,t) + G(x+y,t))dy, \quad x > 0, \quad t > 0. \quad (95)$$

Observe que a diferença entre a solução (95) do PVIC (87)-(89) com condição de contorno de Neumann e a solução (65) do PVIC (58)-(60) com condição de contorno de Dirichlet é apenas o sinal do segundo termo do integrando.

4.5.3 Exemplos

A Figura 36 apresenta o comportamento da solução (95) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e as três condições iniciais senoidal, arcotangente e gaussiana dadas por (37)-(39), respectivamente. Comparando com a Figura 16, correspondente ao PVIC com condição de contorno de Dirichlet, observa-se uma mudança significativa no comportamento específico para cada condição inicial, mesmo mantendo-se o comportamento genérico esperado de espalhamento tendente à uniformidade na distribuição da grandeza difundida.

Na Figura 36, a função senoidal para $k = 0,1$ mostra padrões variados bem definidos, com faixas claras correspondendo às oscilações da função. Para $k = 0,5$, a figura mostra uma transição suave entre regiões de alta e baixa concentração. Para $k = 2$, a figura mostra padrões menos marcados, com uma transição quase contínua entre as regiões. Para $k = 10$, mostra uma distribuição quase plana, com as oscilações iniciais completamente dissipadas. Com a função arcotangente, a figura mostra uma distribuição que se espalha gradualmente para as bordas. A função gaussiana mostra uma concentração densa no meio do domínio, que vai se espalhando até que fique uma distribuição quase constante.

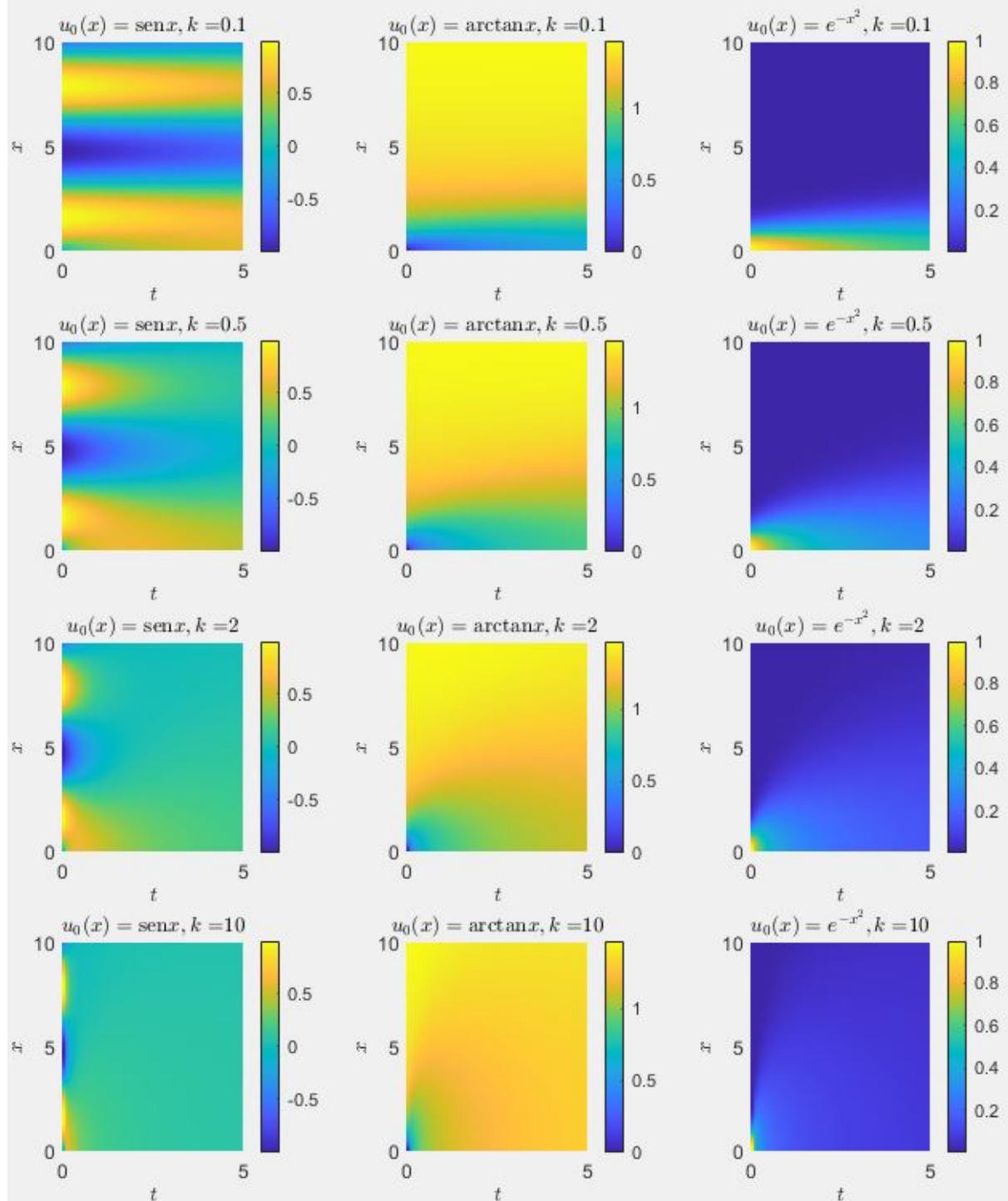


Figura 36: Solução $u(x,t)$ do PVIC (87)-(89) com $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e $u_0(x)$ de (37)-(39). Fonte: autoral.

4.6 Problema com equação não homogênea e condição de contorno de Neumann e condição inicial homogêneas

4.6.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte PVIC com fonte $f \in C(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+)$:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (96)$$

$$u_x(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (97)$$

$$u(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (98)$$

4.6.2 Resolução do problema

A solução do PVIC (96)-(98) é obtida do princípio de Duhamel como

$$u(x,t) = \int_0^t u^{(\tau)}(x,t-\tau)d\tau, \quad (99)$$

em que $u^{(\tau)}(x,t)$ é a solução do seguinte problema de Duhamel

$$u_t^{(\tau)} - ku_{xx}^{(\tau)} = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (100)$$

$$u_x^{(\tau)}(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (101)$$

$$u^{(\tau)}(x,0) = f(x,\tau), \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (102)$$

o qual tem a mesma estrutura que o problema (87)-(89) estudado na Seção 4.5. Logo, a solução do problema de Duhamel (100)-(102) é obtida da solução (95), substituindo $u_0(y)$ por $f(y,\tau)$:

$$u^{(\tau)}(x,t) = \int_0^{+\infty} f(y,\tau) (G(x-y,t) + G(x+y,t)) dy, \quad x > 0, \quad t > 0 \quad (103)$$

em que $G(x,t)$ é dada por (34).

Portanto, a solução do PVIC (100)-(102) é obtida ao substituir (103) em (99):

$$u(x,t) = \int_0^t \int_0^{+\infty} f(y,\tau) (G(x-y,t-\tau) + G(x+y,t-\tau)) dy d\tau. \quad (104)$$

4.6.3 Exemplos

A Figura 37 apresenta o comportamento da solução (104) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$ e os dois termos fonte dados por (47) e (48), respectivamente. Comparando com a Figura 19, correspondente ao PVIC com condição de contorno de Dirichlet, observa-se uma mudança significativa no comportamento específico para cada condição inicial, mesmo mantendo-se o comportamento genérico esperado de espalhamento tendente

à uniformidade na distribuição da grandeza difundida.

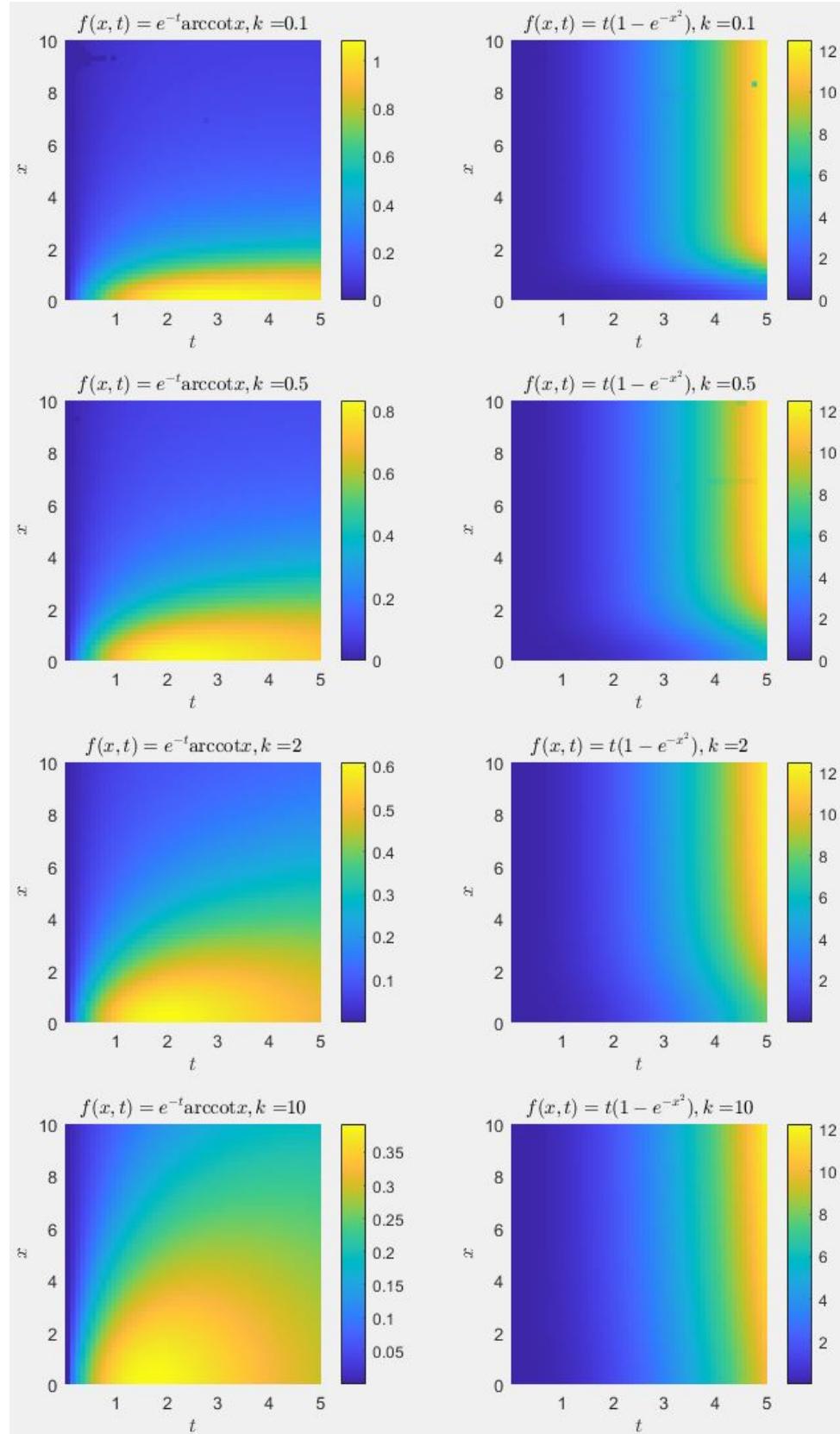


Figura 37: Solução $u(x,t)$ do PVIC (96)-(98) com $k \in \{0.1, 0.5, 2, 10\}$ e $f(x,t)$ de (47) e (48). Fonte: autoral.

Na Figura (37), para $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot}(x)$, a solução decresce ao longo do tempo, resultando em uma dispersão mais lenta e concentrada nas fases iniciais. Para $f(x,t) = e^{-t} \operatorname{arccot}(x)$, a função mostra uma dispersão mais ampla, enquanto $f(x,t) = t(1 - e^{-x^2})$ apresenta uma concentração maior na região central.

4.7 Problema com equação não homogênea com condição inicial não homogênea e de contorno de Neumann homogênea

4.7.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte PVIC com fonte $f \in C(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+)$:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \quad (105)$$

$$u_x(0,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+ \quad (106)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}_+ \quad (107)$$

4.7.2 Resolução do problema

A solução do PVIC (105)-(107) é obtida pelo princípio de superposição, onde, ao definir $u = v + w$, o problema é decomposto em dois subproblemas: um, como (87)-(89) para v , e o outro, como (96)-(98) para w . Portanto, a solução é obtida somando as soluções (95) e (104) dos problemas nas Seções 4.5 e 4.6

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \int_0^{+\infty} u_0(y)(G(x-y,t) + G(x+y,t))dy \\ &+ \int_0^t \int_0^{+\infty} f(y,\tau) (G(x-y,t-\tau) + G(x+y,t-\tau)) dyd\tau. \end{aligned} \quad (108)$$

4.7.3 Exemplos

As Figuras 38-41 apresentam o comportamento da solução $u(x,t)$ em (108) para $k \in \{0,1; 0,5; 2; 10\}$.

Na Figura 38, a solução $u(x,t)$ para um valor baixo de k resulta em uma concentração mais acentuada da solução perto do ponto inicial, indicando uma alta densidade perto do ponto de origem e uma dispersão lenta ao longo do tempo.

Na Figura 39, a solução $u(x,t)$ mostra um padrão mais suave em comparação a $k = 0,1$. As cores ou níveis de contorno indicam uma dispersão que se afasta do ponto de origem, mas ainda há uma concentração significativa no centro.

Na Figura 40, a solução $u(x,t)$ é rápida e a solução se espalha pelo espaço de maneira mais uniforme e suave no espaço. Os níveis de contorno indicam uma dispersão que ocupa uma área maior e se afasta rapidamente do ponto inicial.

Na Figura 41, a solução $u(x,t)$ mostra uma distribuição diversificada, com pouca

variação de densidade ao longo do espaço. A solução se espalha rapidamente e atinge um estado quase uniforme em um tempo curto.

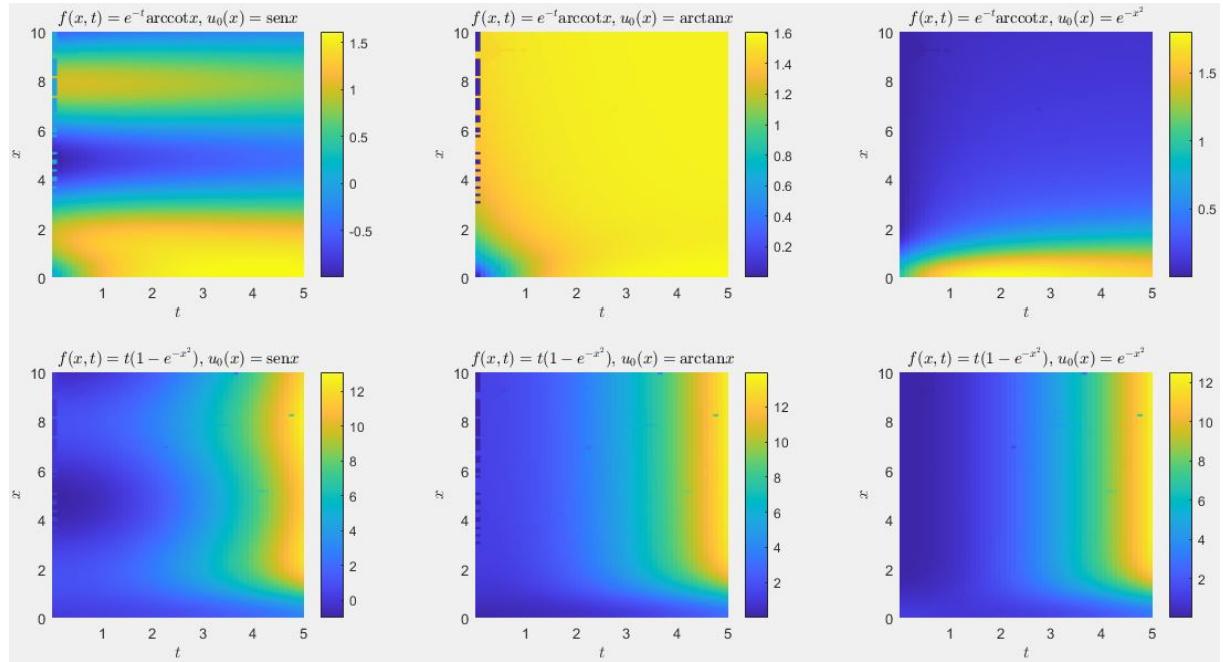


Figura 38: Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,1$. Fonte: autoral.

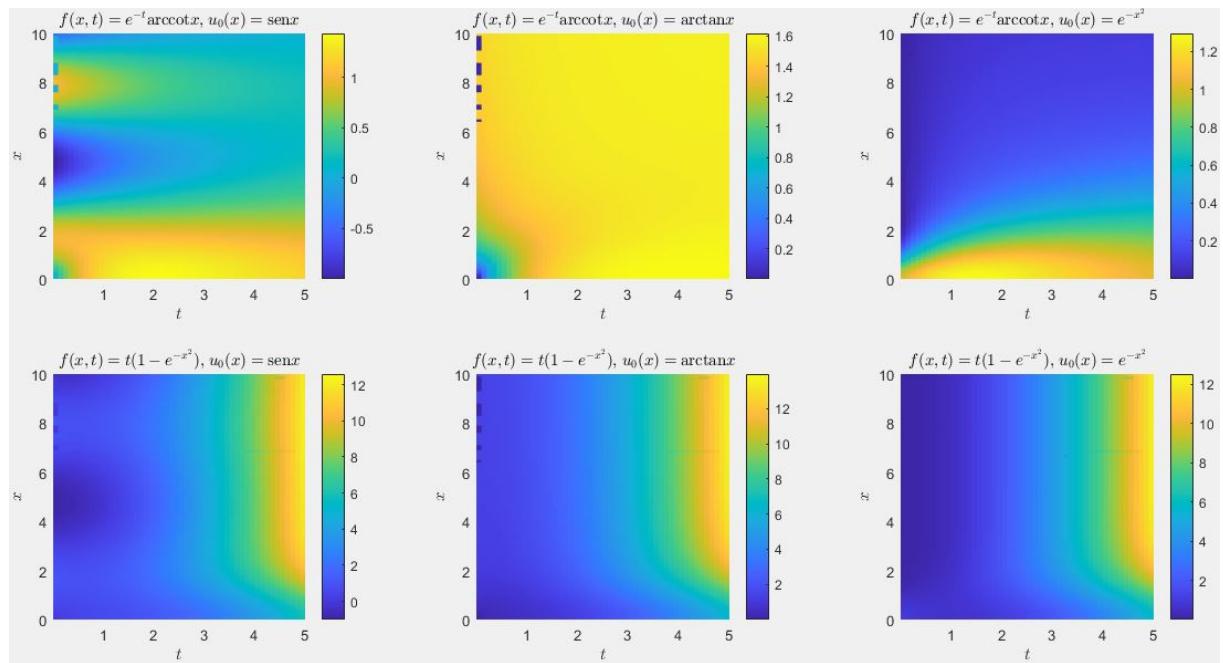


Figura 39: Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 0,5$. Fonte: autoral.

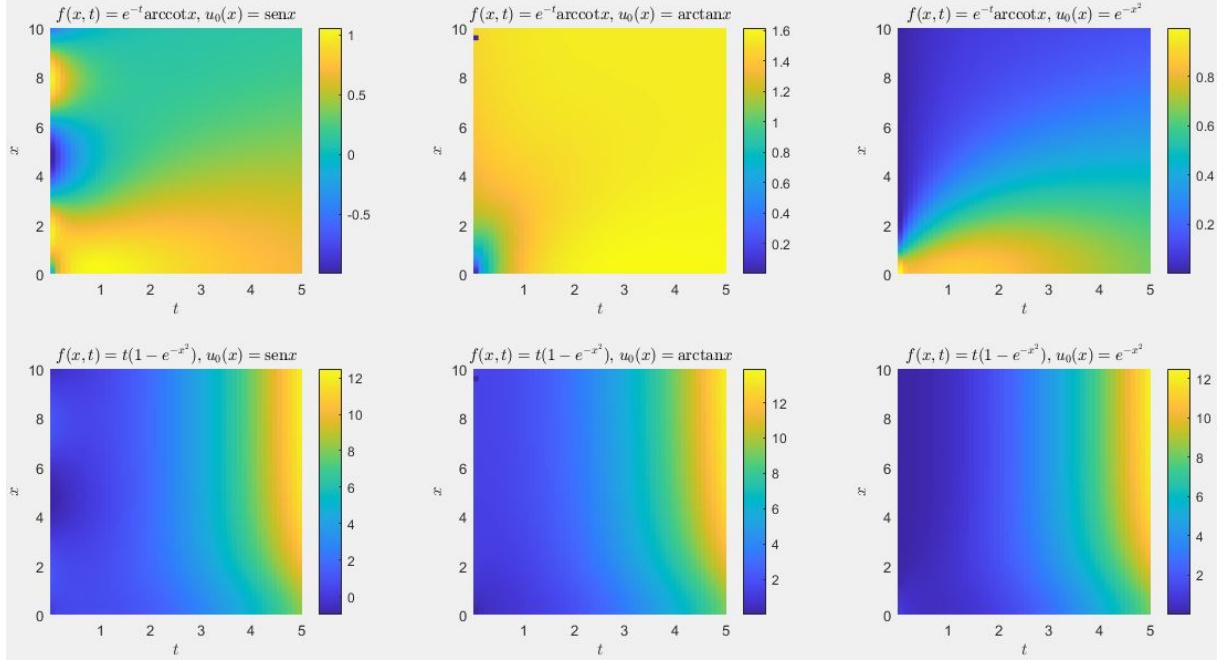


Figura 40: Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 2$. Fonte: autoral.

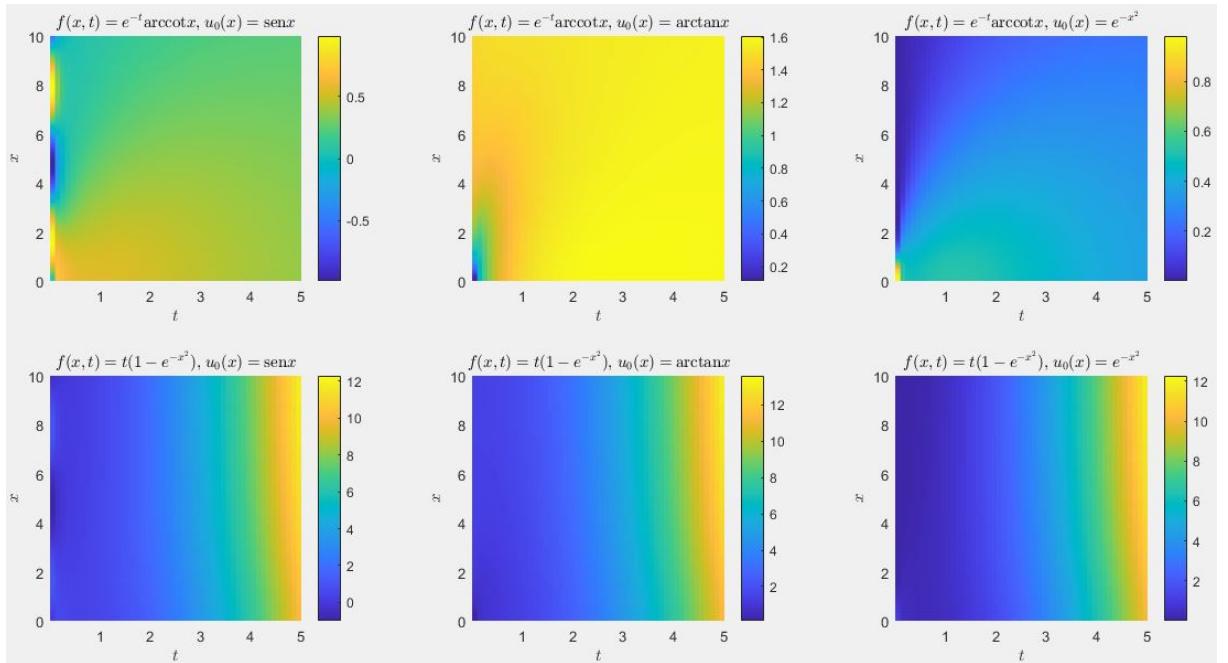


Figura 41: Solução $u(x,t)$ em (108) para as condições iniciais $u_0(x)$ em (37)-(39) e termos fonte $f(x,t)$ em (47)-(48) para $k = 10$. Fonte: autoral.

No seguinte capítulo serão estudados problemas em domínios limitados.

5 PROBLEMAS EM DOMÍNIOS LIMITADOS

5.1 Problema com equação homogênea, condições de contorno homogêneas e condição inicial não homogênea

5.1.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte tipo de problemas de valores iniciais e de contorno:

$$u_t - ku_{xx} = 0, \quad (x,t) \in (0,l) \times \mathbb{R}_+^*, \quad (109)$$

$$u(0,t) = u(l,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (110)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0,l], \quad (111)$$

em que $u_0(0) = u_0(l) = 0$ para compatibilidade entre as condições de contorno e inicial. Observamos que as condições de contorno de Dirichlet (110) (ou qualquer uma delas) podem ser trocadas por condições de Neumann ou Robin, segundo a situação real que se pretenda modelar. Contudo, o procedimento de resolução apresentado a seguir, o método de separação de variáveis de Fourier, não é afetado por mudanças desse tipo, pois apenas mudaram as condições do problema de Sturm-Liouville correspondente.

5.1.2 Resolução do problema

Para resolver o problema (109)-(111), utilizaremos a técnica de separação de variáveis, ou seja, assumimos que a solução admite uma fatoração da forma

$$u(x,t) = X(x)T(t). \quad (112)$$

Substituindo (112) em (109), temos

$$X(x)T'(t) = kX''(x)T(t), \quad (113)$$

na qual dividimos ambos os lados por $kX(x)T(t)$ para separar variáveis e obter

$$\frac{T'(t)}{kT(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda, \quad (114)$$

em que $\lambda \in \mathbb{R}$ é uma constante de separação que resulta da igualdade de funções de variáveis diferentes em (114). A partir de (114), obtém-se as duas seguintes equações diferenciais ordinárias para os fatores temporal $T(t)$ e espacial $X(x)$, respectivamente, da incógnita $u(x,t)$:

$$T'(t) + \lambda k T(t) = 0, \quad (115)$$

e

$$X''(x) + \lambda X(x) = 0. \quad (116)$$

A solução principal de (115) é

$$T(t) = e^{-\lambda kt}, \quad (117)$$

para qualquer $\lambda \in \mathbb{R}$. Por outro lado, a solução de (116) depende do sinal de λ e das condições de contorno obtidas de subsituir a fatoração (112) nas condições de contorno (110) do problema, como segue:

$$X(0)T(t) = X(l)T(t) = 0 \implies X(0) = X(l) = 0. \quad (118)$$

Observe que a equação diferencial (116) sujeita às condições de contorno em (118), constitui o problema de Sturm-Liouville estudado na seção 2.2, de onde seguem os autovalores λ_n e as autofunções $X_n(x)$, $n \in \mathbb{N}$, dados por

$$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{l^2}, \quad X_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (119)$$

de onde, junto com (117), tem-se

$$T_n(t) = \exp \left\{ -\frac{n^2\pi^2 kt}{l^2} \right\}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (120)$$

Logo, da fatoração (112), junto com as autofunções em (119) e a família de exponenciais (120), obtém-se a família

$$u_n(x,t) = X_n(x)T_n(t) = \sin \frac{n\pi x}{l} \exp \left\{ -\frac{n^2\pi^2 kt}{l^2} \right\}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (121)$$

de soluções da equação diferencial (109) que cumprem as condições de contorno (110). Porém, observa-se que, em geral, nenhuma das funções $u_n(x,t)$ em (121) cumpre a condição inicial, pois $u_n(x,0) = X_n(x)T_n(0) = X_n(x) \neq u_0(x)$. Por outro lado,

Iembrando do teorema enunciado na Seção 2.2, é possível obter a série de Fourier da condição inicial $u_0(x)$ em termos das autofunções $X_n(x)$, pois, se considerarmos a solução $u(x,t)$ como uma superposição ponderada da família das $u_n(x,t)$, ou seja,

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x,t), \quad (122)$$

segue que a condição inicial $u_0(x)$ tem uma representação em série de Fourier em termos das autofunções $X_n(x)$ com os mesmos coeficientes que (122). Com efeito,

$$u_0(x) = u(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n X_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad (123)$$

de onde, empregando ortogonalidade das autofunções $X_n(x)$ em (119), tem-se (14) com $f \equiv u_0$ e $c_n \equiv C_n$, $n \in \mathbb{N}$, ou seja,

$$u_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad C_n = \frac{2}{l} \int_0^l u_0(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx, \quad (124)$$

e, portanto, a solução $u(x,t)$ do problema original (109)-(111) é

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin \frac{n\pi x}{l} \exp \left\{ -\frac{n^2 \pi^2 k t}{l^2} \right\}, \quad C_n = \frac{2}{l} \int_0^l u_0(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx. \quad (125)$$

5.1.3 Exemplos

Observa-se em (125) que a solução $u(x,t)$ depende da difusividade $k > 0$ apenas no expoente negativo do fator temporal exponencial, de onde segue, como esperado, que a difusão ocorrerá mais rapidamente para valores maiores de k . Ainda, o fator temporal exponencial faz com que a solução cumpra que $\lim_{k \rightarrow \infty} u(x,t) = \lim_{t \rightarrow \infty} u(x,t) = 0$ independentemente da condição inicial $u_0(x)$. Com tais considerações, vamos considerar $k = 1$ nos exemplos a seguir.

5.1.3.1 Condição inicial senoidal

Consideramos aqui a condição inicial $u_0(x) = \sin x$ na solução (125) do problema original (109)-(111), e veremos o seu comportamento no domínio espacial $(0,\pi)$. Observamos que, em LEMOS et al. (2021), resolvemos um problema semelhante com condição inicial $u_0(x) = \sin \pi x$ e domínio espacial $(0,1)$, pela abordagem alternativa da transformada de Laplace das formas puramente analítica e semi-analítica, com inversão numérica da transformada de Laplace pelo algoritmo Talbot Fixo de ABATE; VALKÓ (2004). Ainda, aproveitamos para declarar que, em SILVA; PÉREZ-FERNÁNDEZ (2021), aplicamos com sucesso essa abordagem semi-analítica

da transformada de Laplace para resolver o problema homogeneizado das oscilações forçadas de uma barra microperiódica funcionalmente graduada.

Neste caso, de (125) tem-se que

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-n^2 t} \sin nx, \quad C_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin x \sin nx \, dx, \quad (126)$$

de onde, em virtude da ortogonalidade em $L^2(0,\pi)$ da família de autofunções $X_n(x) = \sin nx$, $n \in \mathbb{N}$, que contém a condição inicial para $n = 1$, ou seja, $X_1(x) = u_0(x)$, tem-se que os coeficientes são $C_n = \delta_{1n}$, sendo δ_{mn} a delta de Kronecker ($\delta_{mn} = 1$ se $m = n$ e $\delta_{mn} = 0$ se $m \neq n$). Logo, com tais considerações, de (126) segue que a solução é

$$u(x,t) = e^{-t} \sin x, \quad (127)$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 42.

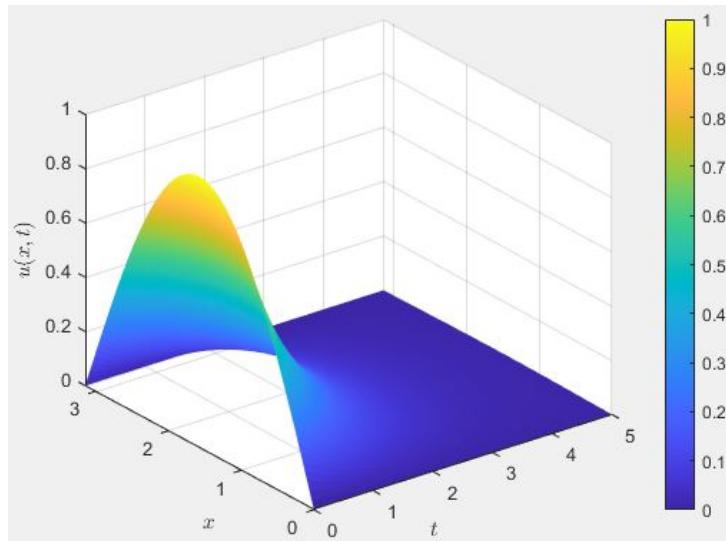


Figura 42: Solução $u(x,t)$ em (127) do problema (109)-(111) com $k = 1$, $l = \pi$ e $u_0(x) = \sin x$. Fonte: autoral.

A Figura 42 forma uma curva suave que atinge o pico no meio, ou seja, em $x = \frac{\pi}{2}$, e vai se espalhando conforme o tempo vai passando até atingir o equilíbrio.

5.1.3.2 Condição inicial polinomial quadrática

Consideramos agora a condição inicial $u_0(x) = x(1-x)$ na solução (125) do problema original (109)-(111), e veremos o seu comportamento no domínio espacial $(0,1)$. Neste caso, de (125), tem-se que:

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-n^2 \pi^2 t} \sin n\pi x, \quad C_n = 2 \int_0^1 x(1-x) \sin n\pi x \, dx, \quad (128)$$

de onde, integrando por partes duas vezes para obter os coeficientes C_n , $n \in \mathbb{N}$, tem-se que $C_n = 8/n^3\pi^3$ para n ímpar e $C_n = 0$ para n par, respectivamente. Logo, com tais considerações, de (126) segue que a solução é

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8e^{-(2n-1)^2\pi^2t} \sin((2n-1)\pi x)}{(2n-1)^3\pi^3}, \quad (129)$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 43.

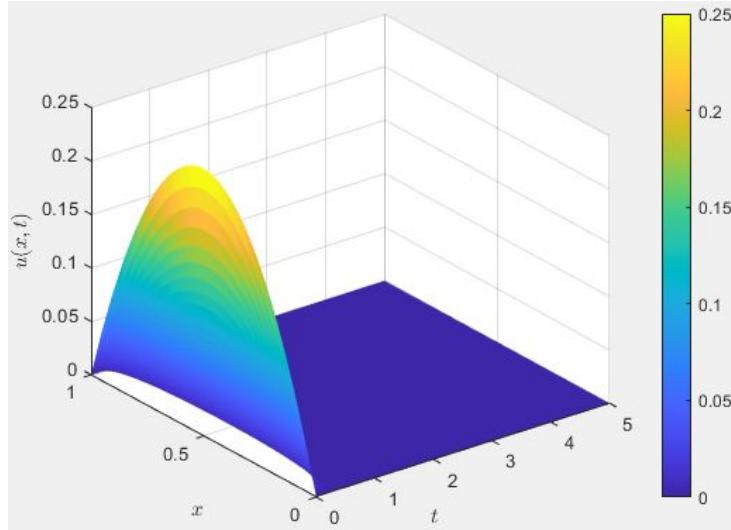


Figura 43: Solução $u(x,t)$ em (129) do problema (109)-(111) com $k = 1$, $l = 1$ e $u_0(x) = x(1-x)$. Fonte: autoral.

Na Figura 43, a curva inicial é uma parábola com pico no meio do intervalo $x = 0,5$. A curva começa a baixar suavemente, se dissipando, a forma parabólica vai ficando cada vez mais achatada até atingir o equilíbrio.

5.2 Problema com equação não homogênea e condições de contorno e inicial homogêneas

5.2.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte tipo de problemas de valores iniciais e de contorno:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in (0,l) \times \mathbb{R}_+^*, \quad (130)$$

$$u(0,t) = u(l,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (131)$$

$$u(x,0) = 0, \quad x \in [0,l], \quad (132)$$

em que $f(0,t) = f(l,t) = 0$ para compatibilidade com as condições de contorno no problema auxiliar de Duhamel que resulta da aplicação desse princípio.

5.2.2 Resolução do problema

Para resolver o problema (130)-(132), utilizaremos o princípio de Duhamel, com base na solução (125) obtida na Seção 5.1. Especificamente, a solução do problema (130)-(132) é

$$u(x,t) = \int_0^t u^{(\tau)}(x,t-\tau)d\tau, \quad (133)$$

em que $u^{(\tau)}(x,t)$ é a solução do problema auxiliar de Duhamel

$$u_t^{(\tau)} - ku_{xx}^{(\tau)} = 0, \quad (x,t) \in (0,l) \times \mathbb{R}_+^*, \quad (134)$$

$$u^{(\tau)}(0,t) = u^{(\tau)}(l,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (135)$$

$$u^{(\tau)}(x,0) = f(x,\tau), \quad x \in [0,l]. \quad (136)$$

Observamos que o problema de Duhamel (134)-(136) tem a mesma estrutura que o problema (109)-(111) estudado na Seção 5.1. Logo, sua solução $u^{(\tau)}(x,t)$ terá o mesmo formato que (125) trocando $u_0(x)$ por $f(x,\tau)$. Especificamente,

$$u^{(\tau)}(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} D_n(\tau) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} \exp \left\{ -\frac{n^2\pi^2 kt}{l^2} \right\}, \quad D_n(\tau) = \frac{2}{l} \int_0^l f(x,\tau) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx, \quad (137)$$

de onde a solução $u(x,t)$ do problema (130)-(132) é obtida ao substituir (137) em (133), trocando t por $t-\tau$, ou seja,

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} E_n(t) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l}, \quad E_n(t) = \int_0^t D_n(\tau) \exp \left\{ -\frac{n^2\pi^2 k(t-\tau)}{l^2} \right\} d\tau, \quad (138)$$

em que $D_n(\tau)$ é dado em (137).

5.2.3 Exemplos

Nos exemplos a seguir, consideramos $k = 1$.

5.2.3.1 Fonte temporalmente exponencial e espacialmente senoidal

Consideramos aqui o problema (130)-(132) com o termo fonte $f(x,t) = e^t \operatorname{sen} x$ no domínio $(0,\pi)$. Logo, segue de (137) que $C_1(\tau) = e^\tau$ e $C_n(\tau) = 0$, $n > 1$. Logo, a solução do problema de Duhamel é $u^{(\tau)}(x,t) = e^{-(t-\tau)} \operatorname{sen} x$, a qual, substituída em (133), produz a solução

$$u(x,t) = \operatorname{senh} t \operatorname{sen} x, \quad (139)$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 44.

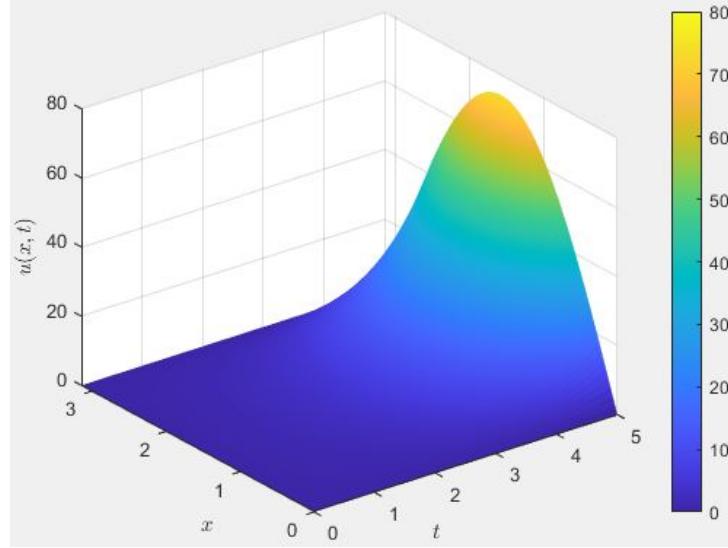


Figura 44: Solução $u(x,t)$ em (139) do problema (130)-(132) com $k = 1$, $l = \pi$ e $f(x,t) = e^t \operatorname{sen} x$. Fonte: autoral.

Na Figura 44, a solução descreve a difusão de uma função fonte que depende exponencialmente do tempo e é senoidal no espaço .

5.2.3.2 *Fonte temporalmente linear e espacialmente polinomial quadrática*

Consideramos agora o termo fonte $f(x,t) = tx(1-x)$ no domínio $(0,1)$. Logo, segue de (137) que $C_n(\tau) = 8\tau/n^3\pi^3$ para n par e $C_n(\tau) = 0$ para n ímpar. Logo, a solução do problema de Duhamel é

$$u^{(\tau)}(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8\tau e^{-(2n-1)^2\pi^2t} \operatorname{sen}((2n-1)\pi x)}{(2n-1)^3\pi^3}, \quad (140)$$

a qual, substituída em (133), produz a solução

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8(e^{-(2n-1)^2\pi^2t} + (2n-1)^2\pi^2t - 1) \operatorname{sen}((2n-1)\pi x)}{(2n-1)^7\pi^7}, \quad (141)$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 45.

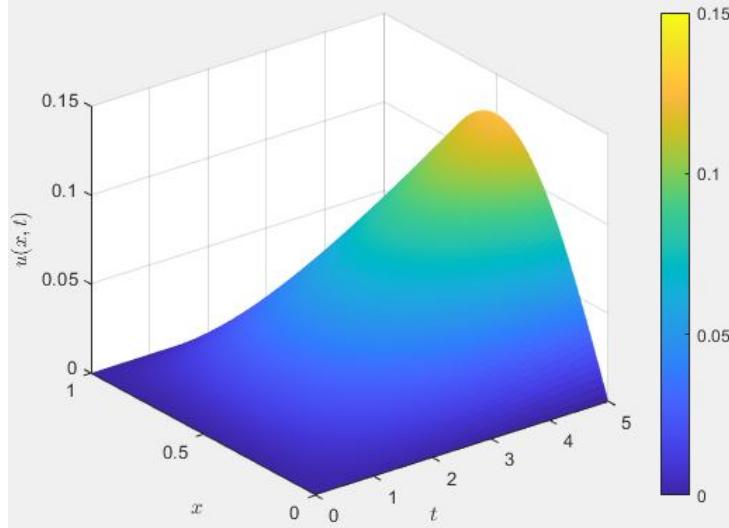


Figura 45: Solução $u(x,t)$ em (141) do problema (130)-(132) com $k = 1$, $l = 1$ e $f(x,t) = tx(1 - x)$. Fonte: autoral.

A Figura 45, mostra uma transição suave entre as regiões de alta e baixa concentração, com uma amplitude crescente no centro do domínio, refletindo o aumento da influência da fonte.

5.3 Problema com equação não homogênea, condições de contorno homogêneas e condição inicial não homogênea

5.3.1 Formulação do problema

Nesta seção, consideramos o seguinte tipo de problemas de valores iniciais e de contorno:

$$u_t - ku_{xx} = f(x,t), \quad (x,t) \in (0,l) \times \mathbb{R}_+^*, \quad (142)$$

$$u(0,t) = u(l,t) = 0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (143)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0, l], \quad (144)$$

em que $f(0,t) = f(l,t) = 0$ e $u_0(0) = u_0(l) = 0$ para compatibilidade com as condições de contorno.

5.3.2 Resolução do problema

A solução do PVIC (142)-(144) é obtida pelo princípio de superposição, onde, ao definir $u = v + w$, o problema é decomposto em dois subproblemas: um, como (109)-(111) para v , e o outro, como (130)-(132) para w , respectivamente. Portanto, a solução é obtida somando as soluções (125) e (138) dos problemas estudados nas seções 5.1 e 5.2, respectivamente. Assim, a solução $u(x,t)$ do problema (142)-(144) é

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} F_n(t) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l}, \quad F_n(t) = C_n \exp \left\{ -\frac{n^2 \pi^2 k t}{l^2} \right\} + E_n(t), \quad (145)$$

em que

$$C_n = \frac{2}{l} \int_0^l u_0(x) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx, \quad E_n(t) = \int_0^t D_n(\tau) \exp \left\{ -\frac{n^2 \pi^2 k(t-\tau)}{l^2} \right\} d\tau, \quad (146)$$

com

$$D_n(\tau) = \frac{2}{l} \int_0^l f(x,\tau) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{l} dx. \quad (147)$$

5.3.3 Exemplos

Nos exemplos a seguir, consideramos $k = 1$.

5.3.3.1 Fonte temporalmente exponencial e espacialmente senoidal, e condição inicial senoidal

Consideramos aqui o problema (142)-(144) com termo fonte $f(x,t) = e^t \operatorname{sen} x$ e condição inicial $u_0(x) = \operatorname{sen} x$ no domínio $(0,\pi)$. A solução $u(x,t)$ é a superposição de (127) e (139) obtendo-se:

$$u(x,t) = \cosh t \operatorname{sen} x, \quad (148)$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 46.

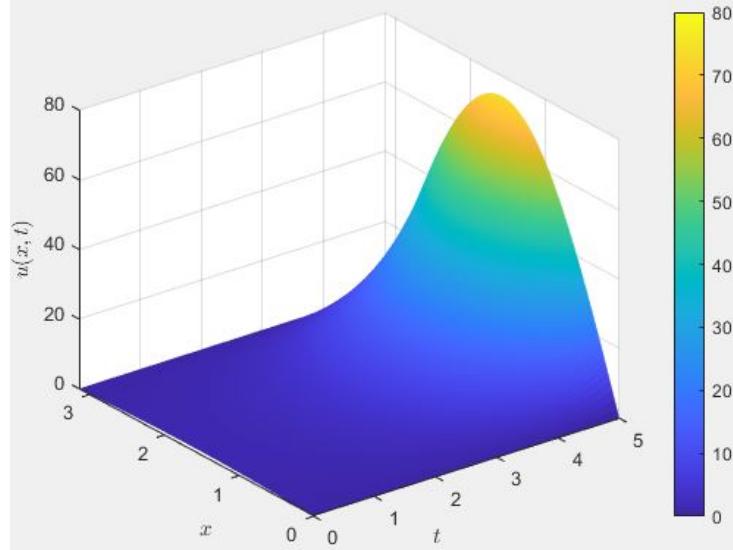


Figura 46: Solução $u(x,t)$ em (139) do problema (142)-(144) com $k = 1$, $l = \pi$, $f(x,t) = e^t \operatorname{sen} x$ e $u_0(x) = \operatorname{sen} x$. Fonte: autoral.

Na Figura 46, a solução resulta em uma distribuição uniforme conforme o tempo avança, e uma amplitude maior na região central.

5.3.3.2 Fonte temporalmente linear e espacialmente polinomial quadrática, e condição inicial polinomial quadrática

Consideramos aqui o problema (142)-(144) com termo fonte $f(x,t) = tx(1-x)$ e condição inicial $u_0(x) = x(1-x)$ no domínio $(0,1)$. A solução $u(x,t)$ é a superposição de (129) e (141) obtendo-se

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8(((2n-1)^4\pi^4 + 1)e^{-(2n-1)^2\pi^2t} + (2n-1)^2\pi^2t - 1)\sin((2n-1)\pi x)}{(2n-1)^7\pi^7}, \quad (149)$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 47.

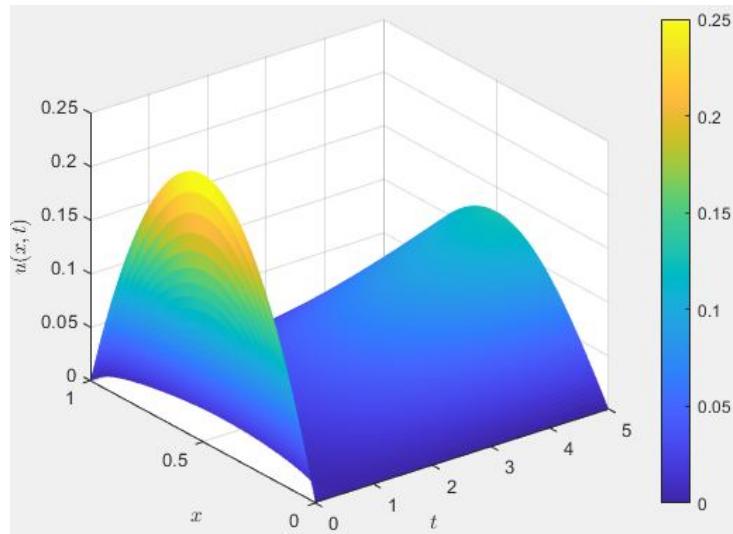


Figura 47: Solução $u(x,t)$ em (139) do problema (142)-(144) com $k = 1$, $l = 1$, $f(x,t) = tx(1-x)$ e $u_0(x) = x(1-x)$. Fonte: autoral.

Na Figura 47, observa-se uma concentração máxima no centro do domínio e valores próximos de zero nas extremidades. O formato é semelhante a uma parábola, com uma elevação de nível na região central. À medida que o tempo avança, a figura apresenta uma distribuição suave, com o máximo de concentração ainda no centro do domínio, mas agora com uma transição mais gradual para as extremidades. A amplitude é maior do que nos tempos iniciais, refletindo o efeito acumulado da fonte.

No seguinte capítulo serão estudadas algumas aplicações.

6 ALGUMAS APLICAÇÕES

6.1 Condução do calor no solo

BRUM (2013) estudou o seguinte problema da condução do calor no solo:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad (z,t) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*, \quad (150)$$

$$T(0,t) = T_0 + \theta_0 \sin \omega t, \quad T(+\infty,t) = T_0, \quad t \in \mathbb{R}_+, \quad (151)$$

em que $T(z,t)$ é a temperatura do solo em função da profundidade z e do tempo t , $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$ é condutividade térmica do solo considerado homogêneo e semi-infinito, T_0 é a temperatura média, θ_0 é a amplitude da oscilação térmica da superfície do solo e ω é sua frequência, de maneira que $\tau = 2\pi/\omega$ é o período.

Observe que (150)-(151) é um problema em domínio infinito, mas, em contraste com os problemas estudados no Capítulo 4, apresenta uma condição de contorno para $z \rightarrow +\infty$ no lugar de uma condição inicial.

Com tais considerações, BRUM (2013) resolveu o problema (150)-(151) por separação de variáveis, mas não empregando séries de Fourier como no Capítulo 5, senão utilizando uma técnica de autovalores complexos, chegando na solução

$$T(z,t) = T_0 + \theta_0 \exp \left\{ -\sqrt{\frac{\omega}{2\alpha}} z \right\} \sin \left(\omega t - \sqrt{\frac{\omega}{2\alpha}} z \right). \quad (152)$$

Por outro lado, em BARBOSA et al. (2024), consideramos a abordagem desenvolvida na Seção 4.4 para o problema definido pela equação diferencial (150), a condição de contorno em $z = 0$ de (151), e, em lugar da condição de contorno em $z \rightarrow +\infty$ de (151), a condição inicial obtida de (152) fazendo $t = 0$:

$$T(z,0) = T_0 - \theta_0 \exp \left\{ -\sqrt{\frac{\omega}{2\alpha}} z \right\} \sin \left(\sqrt{\frac{\omega}{2\alpha}} z \right). \quad (153)$$

Assim, na coluna da esquerda da Figura 48, a solução $T(z,t)$ do problema (150), (151)₁ e (153), que obtivemos em BARBOSA et al. (2024) como (86) pela abordagem

da Seção 4.4 é comparada com a solução (152) do problema (150), (151) obtida por BRUM (2013) para $\alpha = 0,057\text{m}^2/\text{dia}$, $T_0 = 18,7^\circ\text{C}$, $\theta_0 = 6,28^\circ\text{C}$ e $\tau = 365$ dias correspondentes a medições realizadas em 2007 para um lote de solo argiloso do município de Viamão-RS, obtendo-se um erro máximo absoluto de $0,1975^\circ\text{C}$.

Ainda, na coluna da direita da Figura 48, os perfis espaciais das duas soluções analíticas são apresentadas em comparação com dados experimentais correspondentes a um dia de verão (26/01/2007) e um dia de inverno (28/07/2007), respectivamente. Em todos os casos, observa-se o cumprimento da condição no infinito, ou seja, que a temperatura $T(z,t)$ tende para a temperatura média T_0 à medida que aumenta a profundidade z e em qualquer dia t do ano. Em geral, observa-se uma ótima concordância entre as duas abordagens analíticas, havendo também boa concordância com os experimentos.

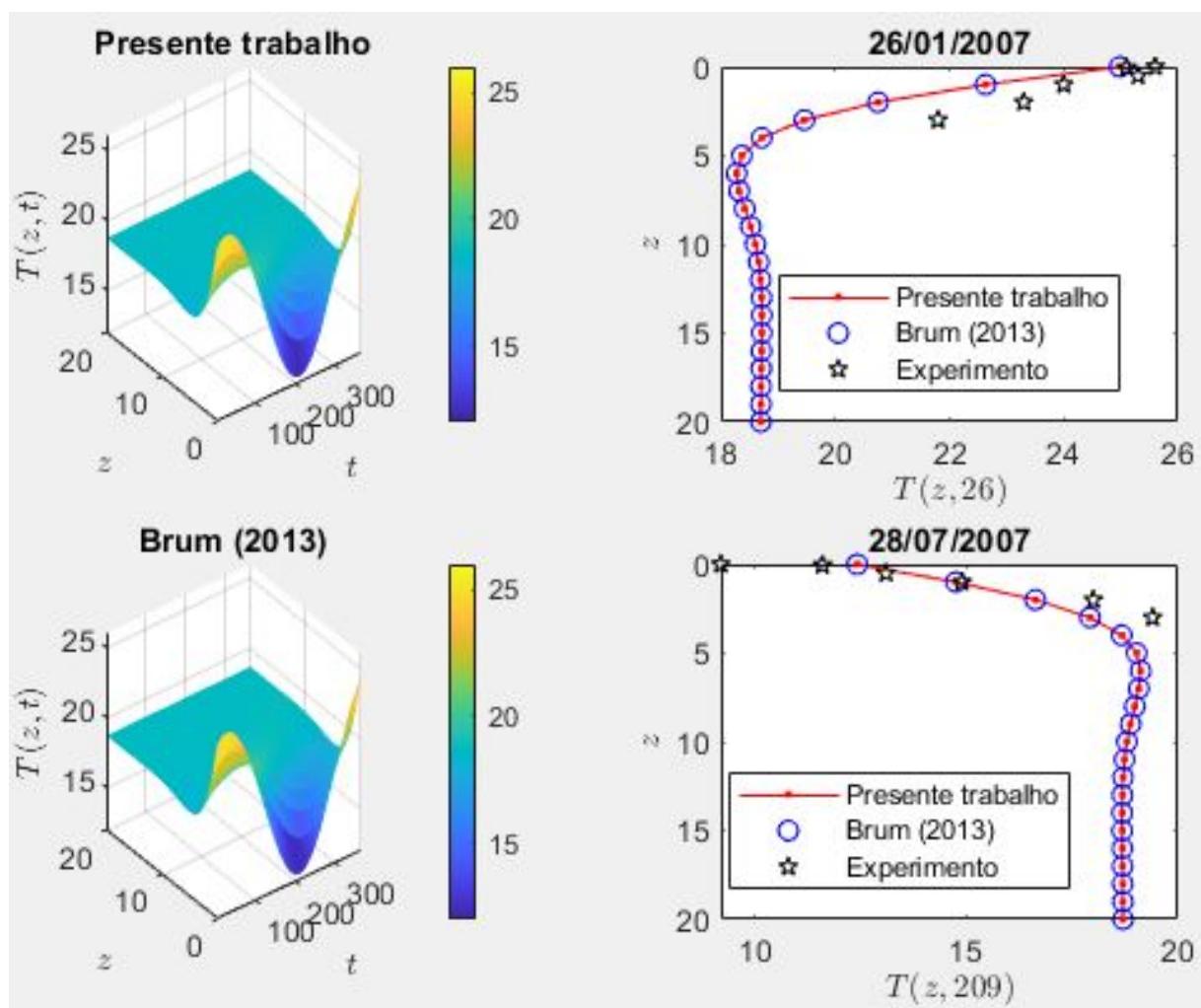


Figura 48: Comparação entre duas abordagens analíticas e com experimentos para a distribuição da temperatura no solo. Fonte: autoral.

6.2 Transporte de um poluente em um aquífero

Chama-se aquífero ao solo ou à formação geológica cuja permeabilidade permite o armazenamento ou o fluxo de água. Assim, a água (junto às partículas, substâncias e/ou microorganismos que ela contém e/ou transporta) ocupa e flui pela rede de espaços (poros) no interior da matriz sólida e absorvente do solo. Sendo assim, se algum poluente contamina a água, ele será transportado junto, trazendo potencialmente diversos impactos ecológicos e à saúde pública negativos. Logo, resulta importante, para a prevenção de tais impactos, o estudo prévio desse fenômeno mediante, por exemplo, a modelagem matemática.

Para ilustrar essa abordagem, seguimos LOGAN (2015) para formular uma equação diferencial a partir de uma lei de conservação para a concentração $C(x,t)$ do poluente em um aquífero cilíndrico longo de seção transversal A e isolado lateralmente. O poluente é transportado pela água, a qual ocupa uma fração volumétrica ω com relação ao volume total do aquífero. A lei de conservação para o poluente afirma que, em uma porção arbitrária $[a,b] \ni x$ do aquífero, a taxa de variação da sua concentração é igual ao seu fluxo para o interior da porção em $x = a$, menos seu fluxo para o exterior da porção em $x = b$, mais a taxa de adsorção/dessorção $S_t(x,t)$ do poluente pelas partículas de solo no aquífero, em que $S(x,t)$ é a quantidade do poluente adsorvida/dessorvida. Assim, a lei de conservação é formulada como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \omega C(x,t) Adx = A\phi(a,t) - A\phi(b,t) - \int_a^b \omega S_t(x,t) Adx, \quad (154)$$

em que o fluxo $\phi(x,t)$ é formado por contribuições de três fenômenos de transporte, a saber, advecção (transporte volumétrico), difusão molecular (movimento aleatório de partículas em água parada medido via lei de Fick) e dispersão cinemática (espalhamento tortuoso pelas redes de poros interconectados), cujos fluxos são,

$$\phi_{adv} = AVC, \quad \phi_{mol} = -A\omega D_{mol}C_x, \quad \phi_{cin}(x,t) = -A\omega D_{cin}C_x, \quad (155)$$

respectivamente, em que V é a velocidade de infiltração ou de Darcy, $D_{mol} > 0$ é o coeficiente de difusão molecular, e $D_{cin} = D_{cin}(V)$ é o coeficiente de dispersão cinemática (em geral, $D_{cin} \gg D_{mol}$). Assim, o fluxo total $A\phi(x,t)$ é a soma dos três fluxos em (155). Substituindo (155) na lei de conservação (154) e levando em conta a arbitrariedade da porção $[a,b]$, obtém-se a lei de conservação em forma diferencial

$$C_t = DC_{xx} - vC_x - S_t, \quad (156)$$

em que $D = D_{mol} + D_{cin}$, e $v = V/\omega$ é a velocidade média. Observe que a lei de conservação (156) tem duas incógnitas, $C(x,t)$ e $S(x,t)$, pelo qual uma relação de

fechamento é necessária. Aqui supomos que $S(x,t) = KC(x,t)$, $K > 0$, a qual, de substituir-se em (156), produz a equação de reação-advecção-dispersão

$$C_t = DC_{xx} - vC_x - KC, \quad (157)$$

a qual se transforma na equação de difusão $c_t = Dc_{xx}$ mediante a troca de variáveis

$$C(x,t) = c(x,t)e^{\alpha x - \beta t}, \quad \alpha = \frac{v}{2D}, \quad \beta = K + \frac{v^2}{4D}. \quad (158)$$

Portanto, seria suficiente fornecer condições inicial e de contorno adequadas para a nova variável de concentração $c(x,t)$ para podermos aplicar as metodologias estudadas nesta dissertação. Ainda, outras abordagens metodológicas analíticas e computacionais para problemas multidimensionais para equações como (157) em contextos similares ao desta aplicação são encontradas. por exemplo, em CAMELO (2024), KONRADT (2024) e SILVA (2016, 2024).

No seguinte capítulo apresentam-se as conclusões desta dissertação.

7 CONCLUSÕES

Nesse trabalho, estudamos a resolução de problemas de equações de difusão homogêneas e não homogêneas em domínios espacialmente infinitos, semi-infinitos e limitados com condições iniciais homogêneas e não homogêneas, abordando os objetivos específicos 1, 2 e 3.

Para resolver os problemas foram aplicadas a função de Heaviside, o princípio de Duhamel e o princípio de superposição. Nos domínios infinitos e semi-infinitos, a função de Heaviside simplifica a formulação de soluções básicas na solução fundamental do problema de difusão, permitindo lidar com problema de perturbações localizadas. Para domínios limitados, ela permite construir soluções por partes, facilitando a aplicação de métodos como séries de Fourier e funções de Green.

O princípio de Duhamel permitiu converter um problema complexo, em decorrência de termos não homogêneos dependentes do tempo, em uma solução simples e acessível. Essa abordagem fundamentada na linearidade, demonstrou ser não apenas eficiente sob o ponto de vista analítico, como também fisicamente intuitiva, ao permitir que a solução fosse interpretada como o acúmulo das contribuições instantâneas do termo fonte. Essa perspectiva transforma o princípio de Duhamel em uma ferramenta importante para modelar diversos aspectos práticos, a exemplo da propagação de calor em sistemas de geração térmica pulsante, a difusão de emissões com emissão intermitente e propagação de ondas de concentração em reações químicas acopladas ao transporte difusivo.

O princípio de superposição é uma importante ferramenta na resolução de equações de difusão, fundamentada na linearidade dessas equações diferenciais. Essa característica permite que soluções de problemas complexos sejam construídas pela soma das soluções de problemas mais simples. Essa abordagem modular não apenas simplifica a análise matemática, mas também fornece uma visão clara e estruturada das características físicas envolvidas.

No Capítulo 1, foi apresentada uma breve história sobre a difusão e a revisão bibliográfica sobre o referido tema.

No Capítulo 2, falamos sobre o Princípio de Duhamel, problemas de Sturm-Liouville

e séries de Fourier.

No Capítulo 3, foram estudados os problemas para domínios infinitos. Primeiro, na Seção 3.1, foi construída a solução fundamental correspondente à equação homogênea e condição inicial unitária na origem, a qual foi utilizada para obter a solução para uma condição inicial contínua e limitada arbitrária. Em seguida, na Seção 3.2, estudou-se a equação não homogênea sujeita a uma condição inicial homogênea, cuja solução foi obtida mediante o princípio de Duhamel utilizando a solução para equação homogênea e condição inicial não homogênea. O Capítulo 3 se encerra com a Seção 3.3, em que o princípio de superposição é utilizado para obter a solução da equação não homogênea sujeita à condição inicial também não homogênea, em termos das duas soluções obtidas nas duas seções anteriores.

No Capítulo 4, foram estudados os problemas para domínios semi-infinitos. Na Seção 4.1, a solução em domínio semi-infinito foi construída em termos da restrição da solução para domínio infinito, obtida tomando a extensão antissimétrica da condição inicial, em termos da solução para equação homogênea com condição inicial não homogênea e condição de contorno de Dirichlet homogênea. Na Seção 4.2, temos a equação não homogênea sujeita a condições inicial e de contorno de Dirichlet homogêneas, cuja solução foi obtida mediante o princípio de Duhamel em termos da solução do problema da Seção 4.1. Para a Seção 4.3, consideramos a equação não homogênea com condição de contorno de Dirichlet homogênea e condição inicial não homogênea, onde a solução é obtida pelo princípio de superposição das soluções dos problemas das Seções 4.1 e 4.2. Na Seção 4.4, consideramos a equação homogênea e condições inicial e de contorno de Dirichlet não homogêneas, onde a solução é obtida mediante homogeneização da condição de contorno mediante uma troca de variáveis que transforma o problema em outro como o da Seção 4.4. Na Seção 4.5, consideramos a equação homogênea, condição de contorno de Neumann homogênea e condição inicial não homogênea, em que a solução é a restrição da solução do problema auxiliar em domínio infinito obtido considerando a extensão simétrica da condição inicial. Para a Seção 4.6, consideramos a equação não homogênea, e condições de contorno de Neumann e inicial homogênea, onde a solução é obtida do princípio de Duhamel. Na Seção 4.7, consideramos a equação não homogênea, condição de contorno de Neumann homogênea e condição inicial não homogênea, em que a solução é obtida pelo princípio de superposição das soluções dos problemas nas Seções 4.5 e 4.6.

No Capítulo 5, foram estudados os problemas para domínios limitados. Primeiro, na Seção 5.1, consideramos a equação homogênea e condições de contorno de Dirichlet e condição inicial não homogêneas, em que a solução é obtida pelo método de separação de varáveis de Fourier. Na Seção 5.2, consideramos a equação não homogênea, condições de contorno de Dirichlet homogêneas e condição inicial ho-

mogênea, onde a solução é obtida pelo princípio de Duhamel com base na solução da Seção 5.1. Na Seção 5.3, consideramos a equação não homogênea, condições de contorno de Dirichlet homogêneas e condição inicial não homogêneas, em que a solução é obtida pelo princípio de superposição das soluções obtidas nas Seções 5.1 e 5.2.

Para todos os casos estudados nos Capítulos 3, 4 e 5 foram apresentados exemplos para vários tipos de condições iniciais e termos fonte. Os exemplos tratados ao longo desse estudo permitiram uma análise dos métodos de resolução, evidenciando suas potencialidades, essa abordagem prática reforçou a relevância bdos mesmos. Além de contribuir para o aprofundamento teórico no campo das equações de difusão.

Este estudo buscou oferecer ferramentas práticas para aqueles que trabalham com problemas de difusão em suas áreas de atuação, podendo servir também como base de pesquisa para professores e estudantes.

No Capítulo 6 foram mostradas algumas aplicações. Na Seção 6.1 apresentamos um modelo simplificado para a condução de calor no solo, em que a solução é obtida como na Seção 4.3 e é comparada com a solução obtida por separação de variáveis na literatura e também com experimentos, e observando-se uma ótima concordância entre as duas abordagens analíticas, havendo também boa concordância com os experimentos. Na Seção 6.2 apresentamos a obtenção, via lei de conservação, de uma equação de reação-advecção-dispersão para o transporte de um poluente em um aquífero, a qual é transformada em uma equação de difusão homogênea mediante uma troca de variáveis, de maneira que seria suficiente fornecer condições iniciais e de contorno adequadas para uma nova incógnita e assim poder aplicar as metodologias estudadas nesta dissertação.

No futuro pretende-se estudar e aplicar outras abordagens metodológicas de resolução como as transformadas integrais (principalmente de Fourier e de Laplace) e os métodos numéricos (especialmente de diferenças finitas), as combinações entre elas e com as apresentadas nesta dissertação. Além disso, pretende-se estudar problemas em duas e três dimensões espaciais e investigar possíveis generalizações dos métodos estudados no caso unidimensional na dissertação. Ainda, pretende-se considerar não-linearidades que representam fenômenos difusivos mais complexos como por exemplo, quando a difusividade depende da densidade. Ainda mais, pretende-se considerar a difusão em meios heterogêneos, em que a difusividade depende da posição. Observa-se que é possível considerar várias outras generalizações mediante a combinação das situações descritas acima. Observa-se também que outras abordagens analíticas, semi-analíticas ou numéricas de resolução serão necessárias para tais situações mais complexas.

REFERÊNCIAS

- ABATE, J.; VALKÓ, P. P. Multi-precision Laplace transform inversion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.60, n.5, p.979–993, 2004.
- ALLAIRE, G. Homogenization and two-scale convergence. **SIAM Journal on Mathematical Analysis**, v.23, p.1482–1518, 1992.
- ARAÚJO, J. C.; MÁRQUEZ, R. G. Distribuição de temperaturas em cilindros circulares infinitos: alguns casos de importância prática. **C.Q.D. – Revista Eletrônica Paulista de Matemática**, v.21, p.52–68, 2021.
- ARYA, S. P. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. Oxford: University Press, 1998. 320p.
- BAEHR, H. D.; STEPHAN, K. **Heat and Mass Transfer**. 2^a.ed. Berlin: Springer, 2006.
- BAKHVALOV, N. S.; PANASENKO, G. P. **Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media**. Dordrecht: Kluwer, 1989.
- BANDEIRA, J. G. P.; BUSKE, D.; QUADROS, R. S. **Equação de Allen Cahn na modelagem da evolução temporal de células cancerígenas**. Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc^2), https://www.youtube.com/live/eidHQ4UEBRs?si=92jI3Y04N_ICoMIq.
- BARBOSA, F. M. M.; SILVA, E. C.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRUM, R. S. Solução da equação de difusão: aplicações na modelagem da difusão de calor no solo. In: **10^a Conferência Sul em Modelagem Computacional**. 2024. (submetido).
- BARBU, T. **Novel Diffusion-Based Models for Image Restoration and Interpolation**. Cham: Springer, 2019. 134p.
- BENSOUSSAN, A.; LIONS, J.-L.; PAPANICOLAU, G. **Asymptotic Analysis for Periodic Structures**. Amsterdam: North-Holland, 1978.

BROWN, R. A brief account of microscopical observations, made in the months of June, July, and August, 1827 on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. **The Edinburgh New Philosophical Journal**, v.5, p.358–371, 1828.

BRUM, F. L. S.; BORDIN, J. R.; BONATTO, A.; PIANOSCHI, T. A. **Uma técnica inovadora no tratamento do câncer**: radioterapia VHEE focalizada. Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc^2), https://www.youtube.com/live/eidHQ4UEBRs?si=92jI3Y04N_ICoMIq.

BRUM, R. S. **Modelagem computacional de trocadores de calor solo-ar**. 2013. Dissertação de Mestrado — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Universidade Federal de Rio Grande.

CAMELO, S. M. **Análise da dispersão de poluentes no solo usando fluidodinâmica computacional**. 2024. Tese de Doutorado — Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Estadual da Paraíba.

COSTA, C. P.; FERREIRA, A. M.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. An ADMM-AHM integrated approach for problems with rapidly oscillating coefficients. **Defect and Diffusion Forum**, v.396, p.81–90, 2019.

COSTA, C. P.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Pollutant dispersion modeling via mathematical homogenization and integral transform-based multi-layer methods. In: SANTOS, L. B. L.; NEGRI, R. G.; CARVALHO, T. J. (Ed.). **Towards Mathematics, Computers and Environment: A Disasters Perspective**. Springer, 2019. p.59–82.

COSTA, C. P.; RUI K. PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D. Different numerical inversion algorithms of the Laplace transform for the solution of the advection-diffusion equation with non-local closure in air pollution modeling. **Trends in Computational and Applied Mathematics**, v.9, p.43–58, 2018.

COSTA, T. B.; SCHRAMM, M.; PETERSEN, C. Z.; TUMELERO, F. Conductional heat transfer in magmatic intrusions. **Ciência e Natura**, v.45, p.e75134(1–14), 2023.

CÁURIO Jr., J. L.; RIBEIRO, A. A.; PETERSEN, C. Z. **Glioblastoma, BNCT e o modelo de Swanson**. Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc^2), https://www.youtube.com/live/eidHQ4UEBRs?si=92jI3Y04N_ICoMIq.

DE GIORGI, E. G -operators and Γ -convergence. In: **Proceedings of the International Congress of Mathematicians (Vol. 2)**. 1984. p.1175–1191.

EINSTEIN, A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. **Annalen der Physik**, v.17, p.549–560, 1905.

FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. **The Feynman Lectures on Physics**. Online.ed. Pasadena: California Institute of Technology, 2013.

FICK, A. Ueber Diffusion. **Annalen der Physik und Chemie von J. C. Poggendorff**, v.94, p.59–86, 1855.

FICK, A. On liquid diffusion. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, v.10, p.30–39, 1855.

FOURIER, J.-B. J. **Théorie Analytique de la Chaleur**. Paris: Didot, 1822. 663p.

GRAHAM, T. A short account on experimental researches on the diffusion of gases through each other, and their separations by mechanical means. **Quarterly Journal of Science, Literature and Art**, v.27, p.74–83, 1829.

GRAHAM, T. On the law of the diffusion of gases. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, v.2, p.175–190, 269–276, 351–358, 1833.

HAHN, D. W.; ÖZİŞIK, M. N. **Heat Conduction**. 3^a.ed. Hoboken: Wiley, 2012. 752p.

HANNA, S. R.; BRIGGS, G. A.; HOSKER, R. P. **Handbook on Atmospheric Diffusion**. Springfield: U.S. Department of Energy, 1982. 110p.

HRISTOV, J.; BENNACER, R. **Heat Conduction: Methods, Applications and Research**. New York: Nova Science Publishers, 2019.

JESUS, N. F.; COSTA, C. P.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Homogeneização matemática e transformadas integrais na modelagem de meios heterogêneos microperiódicos. In: **Anais do 1º Congresso de Simulação e Otimização do Sul**. 2016. p.1–10.

JIJI, L. M. **Heat Conduction**. 3^a.ed. Berlin: Springer, 2009.

KAKAÇ, S.; YENER, Y.; NAVIERA-COTTA, C. P. **Heat Conduction**. 5^a.ed. Boca Raton: CRC Press, 2018.

KELLER, J. B. Effective behavior of heterogeneous media. In: **Proceedings of the Symposium on Statistical Mechanics and Statistical Methods in Theory and Applications**. 1977. p.631–644.

KELLER, J. B. Darcy's law for flow in porous media and the two-space method. In: STERNBERG, R. L.; KALINOWSKI, A. J.; PAPADAKIS, J. S. (Ed.). **Nonlinear Partial Equations in Engineering and Applied Science**: Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics. Dekker, 1980. v.54, p.429–443.

KONRADT, J. **Modelagem matemática aplicada a dispersão de poluentes em aterros sanitários**. 2024. Dissertação de Mestrado — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

LAM, K.-Y.; LOU, Y. **Introduction to Reaction-Diffusion Equations**. Cham: Springer, 2022. 328p.

LEITZKE, B. S.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Effective heat conduction in microperiodic functionally graded rods via asymptotic homogenization. In: **Anais do XX Encontro Nacional de Modelagem Computacional e VIII Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais**. 2017. p.1236(1–7).

LEMOS, C. H.; COSTA, C. P.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; FERREIRA, A. M.; SILVA, E. C. Análise do Desempenho de métodos numéricos de inversão da transformada de Laplace. **Intermaths**, v.2, p.75–90, 2021.

LIMA, M. P. **Homogeneização da equação de difusão com fluxo não linear e energia limitada em meios microperiódicos**. 2020. Tese de Doutorado — Programa de Pós-Greaduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal de Rio Grande do Sul.

LIMA, M. P.; LAZZARI, L.; FERNANDEZ, L. S.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Homogeneização assintótica da equação do calor para meios unidimensionais periódicos continuamente heterogêneos. **Vetor**, v.26, p.73–83, 2016.

LIPTON, R.; TALBOT, D. R. S. Bounds for the effective conductivity of a composite with an imperfect interface. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v.457, p.1501–1517, 2001.

LOGAN, J. D. **Applied Partial Differential Equations**. 3^a.ed. Cham: Springer, 2015. 300p.

LUZ, L. N. M.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Homogeneização assintótica de um problema para a equação do calor unidimensional com coeficiente microperiódico contínuo por partes. In: **Anais do XXII Encontro Regional de Estudantes de Matemática da Região Sul**. 2016. p.1–5.

MADHUSUDANA, C. V. **Thermal Contact Conductance**. New York: Springer, 1996.

- MARCOLINO, I. H. T.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; COSTA, C. P. Análise do Desempenho de métodos numéricos de inversão da transformada de Laplace. **Intermaths**, v.2, p.75–90, 2021.
- MEHRER, H.; STOLWIJK, N. A. Heroes and highlights in the history of diffusion. **Diffusion Fundamentals**, v.11, n.1, p.1–32, 2009.
- MEIRA, J.; MENDES, C. S.; BRUM, R. S.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D. Modelagem matemática da difusão térmica no solo para aplicações em trocadores de calor solo-solo. **Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão**, v.8, p.2540(1–9), 2023.
- MENDES, N.; CHHAY, M.; BERGER, J.; DUTYKH, D. **Numerical Methods for Diffusion Phenomena in Building Physics**. Cham: Springer, 2019. 263p.
- MING, T.; PENG, C.; GONG, T.; LI, Z. **Pollutant Dispersion in Built Environment**. Singapore: Springer, 2017. 135p.
- MURAT, F.; TARTAR, L. H -convergence. In: CHERKAEV, A.; KOHN, R. (Ed.). **Topics in the Mathematical Modelling of Composite Materials. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications**. Springer, 1997. v.31, p.21–43.
- NG, C.-O. Dispersion in steady and oscillatory flows through a tube with reversible and irreversible wall reactions. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v.462, p.481–515, 2006.
- NGUETSENG, G. A general convergence result for a functional related to the theory of homogenization. **SIAM Journal on Mathematical Analysis**, v.20, p.608–623, 1989.
- NGUETSENG, G. Homogenization structures and applications I. **Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen**, v.22, p.73–108, 2003.
- NÁRAIGH, L. O.; O'KIELY, D. Homogenization theory for periodic potentials in the Schrödinger equation. **European Journal of Physics**, v.34, p.19–31, 2013.
- PONTE CASTAÑEDA, P. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations: I-theory. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v.50, p.737–757, 2002.
- PONTE CASTAÑEDA, P.; TIBERIO, E. A second-order homogenization method in finite elasticity and applications to black-filled elastomers. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v.48, p.1389–1411, 2000.
- PUCCINELLI, T.; BORDIN, J. R. **Separação de fase líquido-líquido em proteínas**. Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc²), https://www.youtube.com/live/eidHQ4UEBRs?si=92jI3Y04N_ICoMIq.

ROSA, R. C.; TRAVASSO, R.; BORDIN, J. R. **Phase-field modeling for angiogenesis and vascular patterning.** Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc^2), https://www.youtube.com/live/eidHQ4UEBRs?si=92jI3Y04N_ICoMIq.

ROSSATO, R. G.; BORDIN, J. R. **Modelagem do câncer no sangue utilizando agentes e um modelo tipo caça e caçador.** Encontro de Modelagem Computacional do Câncer do IFM/UFPel (emc^2), https://www.youtube.com/live/eidHQ4UEBRs?si=92jI3Y04N_ICoMIq.

RUI, K.; COSTA, C. P.; FERREIRA, A. M.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera combinando o ADMM com homogeneização matemática. **Scientia Plena**, v.13, p.049902(1–9), 2017.

RUI, K.; COSTA, C. P.; FERREIRA, A. M.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D.; BRAVO-CASTILLERO, J. Combinação do ADMM com homogeneização matemática na modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.33, p.329–335, 2018.

SCHIFF, J. L. **The Laplace Transform: Theory and Applications.** New York: Springer, 1999.

SILVA, A. L. **Modelagem e simulação numérica do transporte de poluentes em meios porosos com reações químicas.** 2016. Dissertação de Mestrado — Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Estadual da Paraíba.

SILVA, A. L. **Desenvolvimento de um software para o estudo da dispersão tridimensional transiente de poluentes em aquíferos utilizando fluidodinâmica computacional (CFD).** 2024. Tese de Doutorado — Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Estadual da Paraíba.

SILVA, E. C.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D. Homogeneização da equação da onda. In: **Anais do XXIII Encontro da Pós-Graduação da UFPel.** 2021. p.CE02412.

SPAGNOLO, S. Convergence in energy for elliptic operators. In: **Proceedings of the Third Symposium on the Numerical Solution of Partial Differential Equations.** 1976. p.469–499.

STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology.** Dordrecht: Kluwer, 1988. 680p.

TALBOT, D. R. S. Bounds which incorporate morphological information for a nonlinear composite dielectric. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v.455, p.3617–3628, 1999.

TALBOT, D. R. S. Improved bounds for the effective properties of a nonlinear two-phase elastic composite. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v.48, p.1285–1294, 2000.

TALBOT, D. R. S.; WILLIS, J. R. Bounds for the effective constitutive relation of a nonlinear composite. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v.460, p.2705–2723, 2004.

TALER, J.; DUDA, P. **Solving Direct and Inverse Heat Conduction Problems**. Berlin: Springer, 2006.

TARTAR, L. **The General Theory of Homogenization: A Personalized Introduction**. Heidelberg: Springer, 2009.

TRITT, T. **Thermal Conductivity: Theory, Properties, and Applications**. New York: Kluwer/Plenum, 2004.

WANG, L.; ZHOU, X.; WEI, X. **Heat Conduction: Mathematical Models and Analytical Solutions**. Berlin: Springer, 2008.

Resolução de Equações de Difusão em Domínios Infinitos, Semi-Infinitos e Limitados: Métodos Matemáticos e Aplicações – Elisiâne Cogoy da Silva



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS

Instituto de Física e Matemática

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática



Dissertação

**Resolução de Equações de Difusão em Domínios Infinitos,
Semi-Infinitos e Limitados: Métodos Matemáticos e
Aplicações**

ELISIANE COGOY DA SILVA

Pelotas, 2024