Lições práticas de métodos matemáticos em Engenharia Ambiental

Nelson Luís Dias nldias@ufpr.br

6 de Março de 2017

©Nelson Luís da Costa Dias, 2017. Todos os direitos deste documento estão reservados. Este documento não está em domínio público. Cópias para uso acadêmico podem ser feitas e usadas livremente, e podem ser obtidas em http://nldias.github.io. Este documento é distribuído sem nenhuma garantia, de qualquer espécie, contra eventuais erros aqui contidos.

Conteúdo

1	Difusão e tensores	3	
2	Diffusion, continued The Boussinesq equation Boltzmann e Boussinesq Misturas binárias Problemas difusivos		
3			
4			
5			
6			
7	Um problema não linear		
	7.1 A equação de Boussinesq não-linear	50	
	7.2 A regra de Leibnitz	54	
8	A Transformada de Fourier 5		
	8.1 Definição e o teorema da inversão	58	
	8.2 O cálculo de algumas transformadas	58	
	8.3 Linearidade; a transformada das derivadas	62	
	8.4 Um grande problema	63	
	8.5 O Teorema da convolução	64	
	8.6 O Teorema de Parseval	66	
	8.7 A fórmula da inversa da transformada de Laplace	66	
9	Difusão turbulenta	68	
10	Um problema parabólico cilíndrico	75	
11	Introdução ao método das características	81	
	11.1 O método das características e a classificação de Equações Dife-		
	renciais Parciais	88	

Lição 1

A equação de advecção-difusão: manipulação de tensores

7 de Março de 2016

Queremos obter a equação de advecção-difusão em notação indicial, ou de Einstein:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i}.$$

Acima, c é a concentração mássica, u_i são os componentes da velocidade em um fluido, e D é a difusividade. Difusividades de muitos tipos aparecem em diferentes contextos físicos. Mais tardes, nós vamos sofisticar as coisas um pouco, e considerar difusividades direcionais, de forma que o lado direito ficará

$$D_{ij}\frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Por enquanto, sejamos ortodoxos.

A notação de Einstein, ou indicial, é muito conveniente para encurtar expressões que envolvem vetores e tensores (aceite a palavra "tensor" por enquanto, e considere-a uma criatura que se parece com um vetor, só que maior e muito mais poderosa).

Por exemplo, a expressão

$$u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}$$

é uma forma condensada de escrever

$$u\frac{\partial c}{\partial x} + v\frac{\partial c}{\partial y} + w\frac{\partial c}{\partial z},$$

onde nós podemos "ver" que há um vetor velocidade $\mathbf{u} = (u, v, w)$ dentro da expressão. Acima, existe uma soma de 3 termos: como podemos resumi-la dentro de um símbolo de somatório? A melhor maneira parece ser renomear os elementos de \mathbf{u} , assim como os eixos coordenadores, da seguinte maneira:

$$u \rightarrow u_1$$
 $x \rightarrow x_1$
 $v \rightarrow u_2$ $y \rightarrow x_2$
 $w \rightarrow u_3$ $z \rightarrow x_3$

Com isso, a expressão tornou-se

$$\sum_{i=1}^{3} u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}.$$

A cereja no pudim é a convenção de Einstein:

Se um índice aparece repetido em uma expressão, ela (a expressão) deve ser lida como uma soma com o índice variando (no caso de fenômenos ocorrendo no \mathbb{R}^3) de 1 a 3.

Voltemos a nossa expressão original,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i},$$

e vamos agora abri-la com a convenção de Einstein. Ela se torna:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_1 \frac{\partial c}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial c}{\partial x_2} + u_3 \frac{\partial c}{\partial x_3} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x_1 \partial x_1} + \frac{\partial^2 c}{\partial x_2 \partial x_2} + \frac{\partial^2 c}{\partial x_3 \partial x_3} \right).$$

Conclui-se que Einstein era um sujeito bem econômico.

Já que estamos tão próximos do assunto, relembremos: dados dois vetores

$$\mathbf{u} = (u, v, w),$$
$$\mathbf{a} = (a, b, c),$$

seu produto interno é

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{a} = ua + vb + wc.$$

Em notação de Einstein isso é

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{a} = u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3 = u_i a_i$$
.

Voltando rapidamente ao lado esquerdo da equação de advecção-difusão, nós vemos um produto interno! $u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}$ é nada mais nada menos que o produto interno entre os vetores

$$(u_1, u_2, u_3)$$
 e $\left(\frac{\partial c}{\partial x_1}, \frac{\partial c}{\partial x_2}, \frac{\partial c}{\partial x_3}\right)$.

O segundo termo acima é o $\mathit{gradiente}$ da concentração c:

grad
$$c = \nabla c \equiv \left(\frac{\partial c}{\partial x_1}, \frac{\partial c}{\partial x_2}, \frac{\partial c}{\partial x_3}\right).$$

A divergência de um vetor g é definida (em coordenadas cartesianas) como

$$\operatorname{div} \boldsymbol{g} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{g} \equiv \frac{\partial g_1}{\partial x_1} + \frac{\partial g_2}{\partial x_2} + \frac{\partial g}{\partial x_3} = \frac{\partial g_i}{\partial x_i}.$$

Observe que grad e div podem ser interpretados simbolicamente como operações envolvendo um pseudo-vetor

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}\right).$$

Desta forma altamente metafórica, grad c é interpretado como o escalar c pósmultiplicado por ∇ , e div g é interpretado como o produto interno entre os "vetores" ∇ e g

Agora retornemos à equação de advecção-difusão: nós reconhecemos imediatamente que

$$u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} c.$$

Isso significa que podemos reescrever nossa equação:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} c = D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i}.$$

Nós agora temos duas notação diferentes dos dois lados da equação, o que é esteticamente desagradável. Existirá uma notação tensorial correspondente para o lado direito? Sim; primeiramente, observe que o lado direito é uma divergência:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x_1 \partial x_1} + \frac{\partial^2 c}{\partial x_2 \partial x_2} + \frac{\partial^2 c}{\partial x_3 \partial x_3} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\frac{\partial c}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\frac{\partial c}{\partial x_2} \right] + \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\frac{\partial c}{\partial x_3} \right].$$

Mas note que dentro dos colchetes vemos os componentes de of ∇c ! Portanto, a equação de advecção-difusão pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} c = D \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\nabla} c \right).$$

Esta última expressão ocorre tão frequentemente que recebeu um nome próprio, o *Laplaciano*:

$$\nabla^2 c \equiv \nabla \cdot \nabla c = \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i},$$

e podemos descansar brevemente

De onde vem a equação de advecção-difusão? Como ela é obtida? Ela vem de um balanço global de massa para a substância cuja concentração mássica é c. Eis aqui a ideia: considere uma certa região, que chamaremos $\mathscr C$, em um fluido. A região possui um volume, é "fechada", e possui uma superfície limitante, que denominaresmo $\mathscr S$. Agora, suponha que no fluido esteja misturado um escalar (que chamaremos de "escalar A", ou simplesmente "A").

Em mecânica do contínuo, as quantidades macroscópicas são sempre definidas, de forma postulatória, como quantidades deduzidas a partir de funções contínuas válidas ponto a ponto. Considere a massa total de A dentro de $\mathscr C$. Nós suporemos que existe uam função contínua e diferenciável, a *densidade de A* (que denominaremos ρ_A), cuja integral dá a massa total de A:

$$M_A = \int_{\mathscr{C}} \rho_A(\mathbf{x}, t) \, \mathrm{d}V.$$

É bom lembrar que a integral acima é uma integral *tripla*. Se você não se lembra dos detalhes, procure as fontes adequadas para estudar o assunto.

Seria ótimo se a massa de A dentro do volume material $\mathscr C$ se mantivesse constante. No entanto, nós não podemos evitar que A entre ou saia de $\mathscr C$, devido à difusão.

De fato, misture sal em água (por exemplo), e coloque a solução em um pequeno saco plástico de uns 200 ml. Em seguida, coloque o saco plástico dentro de um balde de água destilada de 10 l, e abra o saco plástico tão rapidamente quanto

possível. Instantaneamente, $\mathscr C$ é dado, aproximadamente, pelo região ocupada pelo saco plástico recém-removido, e isso delimita a fronteira entre água salgada e água destilada. Inevitavelmente, porém, se você fixar (mentalmente) essa região $\mathscr C$, o sal se difundirá para fora dela, enquanto a natureza tenta produzir equilíbrio dentro do balde como um todo.

Esse é um bom exemplo. Ele nos lembra de que existe "água destilada": existe uma substância pura B, o solvente de A (A é o soluto). B tem sua própria densidade, e sua própria massa:

$$M_B = \int_{\mathscr{L}} \rho_B(\mathbf{x}, t) \, \mathrm{d}V.$$

Note que B também sofrerá difusão: água destilada se difundirá para dentro de $\mathscr C$ no nosso exemplo. A massa total da solução, por outro lado, $n\~ao$ sofrerá difusão! A massa total em nosso sistema binário será

$$M = M_A + M_B$$
.

Obviamente, existe a densidade total ρ , dada por

$$\rho = \rho_A + \rho_B$$
.

Na abordagem postulatória de mecânica do contínuo, a massa total dentro de $\mathscr C$ é

$$M = \int_{\mathscr{C}} \rho(\mathbf{x}, t) \, \mathrm{d}V.$$

As leis de conservação para M são mais simples, porque não há difusão envolvida. A lei de conservação da massa total é

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} = 0.$$

A forma relativamente simples dessa lei de conservação é uma boa notícia. Infelizmente, também há complicações. O grande problema é que em geral $\mathscr C$ está em movimento. Em geral, fluidos se movem, e o campo de velocidade do fluido moverá $\mathscr C$, na medida em que cada uma das partículas dentro de $\mathscr C$ se move. Em mecânica do contínuo, nós chamamos $\mathscr C$ de uma região ou volume material, ou mesmo, simplesmente, um corpo, que se move (no caso mais geral). O que nós precisamos agora é definir como calcular matematicamente a taxa de variação de diferentes quantidades físicas macroscópicas dentro desse corpo (tais como sua energia interna, sua massa total, a massa de A, sua quantidade de movimento, etc.). No caso da massa total, por exemplo, o problema portanto é o cálculo simultâneo de

$$0 = \frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t},$$

$$M(t) = \int_{\mathcal{C}(t)} \rho(\mathbf{x}, t) \, \mathrm{d}V.$$

O grande problema aqui é que $\mathscr{C} = \mathscr{C}(t)$. Nós queremos calcular a derivada de uma integral cuja fronteira, ela mesma, é uma função de t. A solução matemática é chamada, em uma dimensão, de regra de Leibniz, e está disponível em

bons livros de Cálculo. Em 3 dimensões, sua generalização é conhecida, na comunidade de Mecânica dos Fluidos, como o Teorema do Transporte de Reynolds. A versão 1D é

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}x = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \, \mathrm{d}x + f(b,t) \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} - f(a,t) \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}.$$

A versão 3D, denominada Teorema do Transporte de Reynolds, vem em seguida. Mas, primeiro, notação. Os dinamicistas de fluidos possuem seu próprio símbolo para d/dt quando a derivada é calculada "ao longo do escoamento". Lembre-se de que $\mathscr C$ está se movendo, pois está sendo *advectado* pelo escoamento. Existe portanto um campo de velocidades, o que significa que existe em cada ponto do espaço-tempo uma função vetorial contínua e diferenciável (em princípio, e quantas vezes quanto necessário): a velocidade u(x,t).

Na Regra de Leibnitz existe um campo unidimensional de velocidade $u = d\xi/dt$. A fronteira é formada pelos dois limites a(t) e b(t), sendo suas velocidades da/dt e db/dt. Os dinamicistas de fluidos enfatizam esse ponto escrevendo as derivadas com um D maiúsculo, e chamam a derivada resultante de *derivada material*. A versão de "Mecânica dos Fluidos" da Regra de Leibnitz, portanto, escreve-se

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}x = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \, \mathrm{d}x + f(b,t) \frac{\mathrm{D}b}{\mathrm{D}t} - f(a,t) \frac{\mathrm{D}a}{\mathrm{D}t}.$$

Com a notação definida, eis o Teorema do Transporte de Reynolds:

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\mathscr{C}} f \, \mathrm{d}V = \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial f}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \oint_{\mathscr{C}} (\boldsymbol{n} \cdot [\boldsymbol{f}\boldsymbol{u}]) \, \mathrm{d}A.$$

Acima, f significa (resumidamente) qualquer função escalar do espaço-tempo $f(\mathbf{x},t)$, e \mathbf{u} é uma notação resumida para $u(\mathbf{x},t)$. O vetor \mathbf{n} é o vetor unitário normal apontando para fora em cada ponto da superfície $\mathscr S$ do corpo $\mathscr C$. A segunda integral do lado direito é uma integral de superfície fechada, e por isso usamos o símbolo ϕ .

A aplicação do Teorema do Transporte de Reynolds para a densidade total ρ , juntamente com o princípio de conservação de massa total, produz nossa primeira lei de conservação em uma forma matematicamente útil:

$$0 = \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\mathcal{C}} \rho \, \mathrm{d}V,$$

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\mathcal{C}} \rho \, \mathrm{d}V = \int_{\mathcal{C}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \oint_{\mathcal{C}} (\boldsymbol{n} \cdot [\rho \boldsymbol{u}]) \, \mathrm{d}A \implies$$

$$0 = \int_{\mathcal{C}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \oint_{\mathcal{C}} (\boldsymbol{n} \cdot [\rho \boldsymbol{u}]) \, \mathrm{d}A.$$

A última equação acima é a lei de conservação total de massa em um fluido cuja campo de densidade é $\rho(x,t)$, e cujo campo de velocidade é u(x,t). Em notação indicial, temos

$$0 = \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, dV + \oint_{\mathscr{S}} n_i(\rho u_i) \, dA.$$

As duas integrais acima são diferentes: uma é uma integral tripla (de volume), e a outra é uma integral dupla (de área). Além disso, embora muito útil, a equação é um balanço global, ou macroscópico. Ele serve para estimativas globais em

regiões finitas do espaço. Aplicações típicas em geral requrem hipóteses simplificadoras sobre a variação de ρ e de \boldsymbol{u} no espaço e no tempo, de maneira que as integrais possam ser calculadas, e relações úteis sejam obtidas entre um pequeno número de variáveis intervenientes no problema em questão. O excelente livro de Fox e McDonald (1981) ainda é uma grande fonte de inspiração.

Mas é possível obter muito mais. Nós podemos deduzir uma equação válida em cada *ponto* do espaço-tempo do escoamento, que representa uma balanço *local* de massa. Para isso, tudo de que necessitamos é um belo teorema atribuído a Gauss: o Teorema de Gauss, ou Teorema da Divergência. Seja $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$ um campo vetorial com propriedades suficientes de continuidade, diferenciabilidade, etc.. O Teorema é

$$\oint_{\mathscr{S}} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{v}) \, dA = \int_{\mathscr{C}} (\nabla \cdot \boldsymbol{v}) \, dV.$$

Em notação indicial,

$$\oint_{\mathscr{L}} n_i v_i \, \mathrm{d}A = \int_{\mathscr{L}} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \, \mathrm{d}V.$$

De volta à equação de balanço de massa, a segunda integral (de área) pode ser convertida em uma integral de volume por meio do Teorema da Divergência:

$$\oint_{\mathscr{S}} n_i(\rho u_i) \, \mathrm{d}A = \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} \, \mathrm{d}V.$$

Então, a equação de conservação de massa fica

$$0 = \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, dV + \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} \, dV,$$

$$0 = \int_{\mathscr{C}} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} \right] \, dV.$$

É claramente tentador afirmar que o termo dentro dos colchetes é nulo. Naturalmente, se ele é nulo, a igualdade macroscópica vale, mas isso não é o bastante. O que desejamos é que a última equação acima implique a nulidade do termo entre colchetes. Isso de fato acontece, pelo seguinte motivo: $\mathscr C$ é arbitrário. A equação de balanço vale para qualquer volume material instantaneamente ocupando a região $\mathscr C$, e podemos escolher literalmente $qualquer \mathscr C$ para nosso balanço. A equação de balanço integral representa uma lei universal, e vale para qualquer $\mathscr C$. A única maneira com que isso pode ser garantido, naturalmente, é se o termo entre colchetes for sempre nulo. Temos enfim nossa lei local, ou diferencial, de conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0,$$

E este é um bom ponto para pausarmos

Lição 2

Diffusion and tensors, continued

9 de Março de 2016

All the essential elements of the beautiful machinery that retrieves mathematical expressions for each of the conservation laws available from Physics are already in place. Its application will lead to all of these laws in convenient global and local forms. It is not our job to derive all of them: this is not a Fluid Mechanics course (although I am guilty of a fluid-mechanical bias), but an Applied Math course. We do not hesitate to wander a little further in Fluid Mechanics land (or should it be sea?), however.

All of the remaining laws will need an extra ingredient: a constitutive relation. We will only venture into diffusion. What is diffusion? How do you express it mathematically?

Going back to our salt water imaginary experiment, salt mass is slowly moving from regions of high salt concentration to regions of near-pristine freshwater. At each point, there is a *mass flux of salt*. It is a vector, and we will call it j. How is it defined? So that it will give the total mass of salt crossing a surface (in the presence of a *zero* velocity field!) during a certain amount of time Δt . Now if $\mathscr S$ is a surface, the total mass of salt crossing it during an interval of time Δt (starting from 0 for the sake of simplicity) will be

$$M_A = \left| \int_{t=0}^{\Delta t} \int_{\mathscr{S}} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{j}) \, \mathrm{d}A \, \mathrm{d}t \right|.$$

Pay attention to the *zero velocity field*: diffusion is something that occurs "on top" of the mean flow. Better still for our purposes: it happens relative to the moving (with the mean flow) body \mathscr{C} .

What does it mean in terms of a body $\mathscr C$ that contains a scalar A? That, instantly, it is gaining or losing mass at the rate

$$\frac{\mathrm{D}M_A}{\mathrm{D}t} = -\oint_{\mathscr{L}} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{j}) \, \mathrm{d}A.$$

The minus sign is due to the convention that n points outwards of the bounding surface \mathcal{S} : think about it!

Before we move on, we need a few more things. First, we need the definition of mass concentration of A. That is simple: we define c to be

$$c \equiv \frac{\rho_A}{\rho} \Rightarrow \rho_A = c\rho.$$

Next, who is *j*? How do we evaluate it? This turns out to be an empirical law (not directly derived from Physics, but consistent with physical constraints; in some simplified settings we can actually derive these laws from first principles, usually with the help of some statistics), that we will call a *constitutive relation*.

For *j* this is the celebrated *Fick*'s *law*:

$$\mathbf{j} = -\rho D \nabla c = -\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \mathbf{e}_i.$$

We know ρ : it is the total mass density. c is the mass concentration just introduced, and D is an empirical constant called the *molecular diffusivity of A in B*. The gradient is there for a reason: the steeper the concentration differences, the greater the flux will be; makes sense. The minus sign also makes a lot of sense, because mass of A will flow "down the gradient", *i.e.*, it will flow from regions where A is more concentrated to regions where it is less concentrated.

The new element above are the *basis vectors* e_1 , e_2 , e_3 . Remember your basic Analytic Geometry stuff: if \boldsymbol{v} is a vector, you can decompose it into three unit vectors along mutually perpendicular axes as

$$\boldsymbol{v} = u\boldsymbol{i} + v\boldsymbol{j} + w\boldsymbol{k}.$$

I am terribly sorry for having changed the meaning of j in the middle of the argument: it is now the unit vector along the y-axis. But you get the point, and this is how you learned it. We can quickly get rid of this inconsistency by rewriting

$$\mathbf{v} = u_1 \mathbf{e}_1 + u_2 \mathbf{e}_2 + u_3 \mathbf{e}_3 = u_i \mathbf{e}_i.$$

The e_i 's are the *basis* vectors, in our case three mutually perpendicular unit vectors pointing alone the 3 coordinate axes x_1 , x_2 and x_3 .

The mass flux vector j (restored to its principal meaning in this lecture) is, according to Fick's law,

$$\mathbf{j} = -\rho D \left[\frac{\partial c}{\partial x_1} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial c}{\partial x_2} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial c}{\partial x_3} \mathbf{e}_3 \right].$$

With the help of Fick's law, we calculate the rate of change of mass of A inside a body $\mathscr C$ as

$$\frac{\mathrm{D}M_A}{\mathrm{D}t} = \oint_{\mathscr{L}} (\boldsymbol{n} \cdot [\rho D \nabla c]) \, \mathrm{d}A.$$

This is the conservation law for the mass of *A*. But we also have Reynolds' Transport Theorem, which reads, in this case,

$$\frac{\mathrm{D}M_A}{\mathrm{D}t} = \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \int_{\mathscr{C}} \rho_A \, \mathrm{d}V = \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \oint_{\mathscr{C}} (\boldsymbol{n} \cdot [\rho_A \boldsymbol{u}]) \, \mathrm{d}A.$$

We can combine the two above into

$$\oint_{\mathcal{L}} (\boldsymbol{n} \cdot [\rho D \nabla c]) dA = \int_{\mathcal{L}} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV + \oint_{\mathcal{L}} (\boldsymbol{n} \cdot [\rho_A \boldsymbol{u}]) dA.$$

Indicial (that is: Einstein's) notation is always better to manipulate:

$$\oint_{\mathscr{L}} \left(n_i \rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) dA = \int_{\mathscr{L}} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV + \oint_{\mathscr{L}} (n_i \rho_A u_i) dA.$$

We know the "drill": the two area integrals can be converted to volume integrals by means of the Divergence Theorem, as follows:

$$\oint_{\mathcal{S}} \left(n_i \rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) dA, = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) dV,
\oint_{\mathcal{S}} \left(n_i \rho_A u_i \right) dA = \int_{\mathcal{C}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_A u_i \right) dV = \int_{\mathcal{C}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho c u_i \right) dV.$$

Putting everything together, we have

$$\int_{\mathscr{C}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) dV = \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial (\rho c)}{\partial t} dV + \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c u_i) dV,$$

or

$$\int_{\mathcal{C}} \left[\frac{\partial (\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c u_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \right] dV = 0$$

For exactly the same argument used previously for (total) mass conservation, the bracket is zero; without ado,

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho c u_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i}\right).$$

I would like to suggest that you always try to use the equation above: it is in what we call *conservative* form. This is particularly important in numerical implementations, because in this form it is easier to enforce mass conservation. There is no room for elaboration here, but it turns out that many numerical schemes fail to some extent to preserve mass. Beware.

Analytically, however, it is possible to simplify the equation further. For the better or worse, this is what most texts do. Let's show how. The left-hand side is simplified with the mass conservation equation as follows:

$$\begin{split} \frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho c u_i\right) &= c \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial c}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} + c \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} \\ &= c \underbrace{\left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i}\right]}_{\equiv 0} + \rho \underbrace{\left[\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}\right]}_{\equiv 0} \\ &= \rho \underbrace{\left[\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}\right]}_{= \infty}. \end{split}$$

The right-hand side is approximated as

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \approx \rho D \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial c}{\partial x_i} \right) = \rho D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i}.$$

This approximation is quite common (usually without any justification!) in Transport Phenomena and Fluid Mechanics applications. It says that ρD (not each one of them separately!) is approximately constant in space. Clearly, it gives rise to the appearance of the Laplacian. We will use it as unashamedly as many others,

but we will at least have told you that this is a little cheating to get better-looking, simpler, mathematical expressions.

Let's put everything together, and keep an equal sign (instead of \approx) for the sake of cleanliness:

$$\rho \left[\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \right] = \rho D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i};$$
$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i}.$$

This is the equation with which we started the lecture, and it was the lecture's goal to show you the mathematical details of its derivation ■

Now diffusion as we presented here is a *mathematical model* of something that occurs in nature. The first thing that was called this way was probably what we now call *molecular diffusion*, and this is how we derived it so far. It has to do with molecules, or ions, moving in a medium and generating transport of mass that is different from that strictly related to the *mean* flow.

In time, other "diffusions" became a matter of convenience, probably because most of the math was already in place! In groundwater and soil problems, often it is convenient to model things with analogies with Fick's law. and so is in turbulence. Often, in this cases we must re-interpret the physical meaning of c, u, etc.. For example, these variables will often represent *averages* of the turbulent flow, etc..

In particular, sometimes diffusion proceeds with different speeds on different directions. This is not going to happen in an *isotropic* medium, but often turbulent flows are anisotropic, or soils are layered and therefore diffusion in them is different along different directions. What is a sensible generalization of Ficks's law that allows for these effects?

The answer is: we need to "upgrade" D to something that still operates on ∇c , and that still produces the mass flux vector j, but now this "D" must be able to produce different effects over different directions. This means, essentially, that its effects, say, on $\partial c/\partial x$ and on $\partial c/\partial y$ need to be allowed to be different.

One thing that does this is a matrix product. In fact, look at

$$[j] = [D][\nabla c].$$

The brackes indicate matrices. For example,

$$[j] = \begin{bmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{bmatrix}; \qquad [\nabla c] = \begin{bmatrix} \frac{\partial c}{\partial x_1} \\ \frac{\partial c}{\partial x_2} \\ \frac{\partial c}{\partial x_2} \end{bmatrix}.$$

What about [D]? From what you know about matrix multiplication, for the matrix product proposed to work we must have a 3×3 matrix for D. Indeed,

$$[D] = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix}$$

The only problem is that matrices tie us down to particular coordinate systems, and we want to write our laws as generally as possible. For example, to represent the vector \mathbf{j} we say

$$\mathbf{j} = j_i \mathbf{e}_i$$
.

The advantage is that the $vete_i$ in the expression above represent any cartesian system, and we can produce as many such systems as we please by rigid-body rotations of the coordinate axes. On the other hand,

$$\begin{bmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{bmatrix}$$

represents *j* in one particular coordinate system.

Now, we need to pull the same trick, to write *D* as generally as possible, and not tie it down to one particular basis. This is how we do it:

$$D = D_{ij} e_i e_j$$
.

What emerges is a new object, *second-order tensor* D. It is written in boldface just like the vectors, and like the vectors it must represented in a basis. The basis for those objects are the groups of nine "basis vectors" $e_i e_j$, but to distinguish them from the ordinary basis vectors we will call them "basis tensors".

Differently from vectors, you cannot see them, but you *can* operate with them. Let's rederive the diffusion equation with directional diffusivity. The only thing that needs to be changed is the expression for the time rate of change of the mass of *A*, which we rewrite as follows. First, as you might be guessing, our generalized Fick's law is

$$j = D \cdot \nabla c$$
.

The product above is a kind of generalized dot product. It occurs between a second-order tensor D and a first-order tensor ∇c . It is really easy to evaluate, and it will mimic matrix multiplication. Here is how we do it (have faith!)

$$j = D_{ij} \mathbf{e}_{i} \mathbf{e}_{j} \cdot \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \mathbf{e}_{k}$$

$$= D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \mathbf{e}_{i} \underbrace{(\mathbf{e}_{j} \cdot \mathbf{e}_{k})}_{\delta_{jk}}$$

$$= D_{ij} \delta_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \mathbf{e}_{i}$$

$$= D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_{i}} \mathbf{e}_{i}.$$

We have discovered Kronecker's delta:

$$\delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j = k, \\ 0, & j \neq k. \end{cases}$$

To practice, let's unfold j_1 above:

$$j_1 = \left[D_{11} \frac{\partial c}{\partial x_1} + D_{12} \frac{\partial c}{\partial x_2} + D_{13} \frac{\partial c}{\partial x_3} \right] \boldsymbol{e}_1.$$

You can do the same for the other components.

One of the beautiful things of this scheme is that it becomes a snap to calculate the gradient of a vector, and the divergence of a tensor! Remember, the gradient was previously defined to operate on a scalar field, and the divergence was previously defined to operate on a vector field.

First, let us re-calculate the "standard" gradient and divergence, but with a new trick, which is to use ∇ "directly". If c is a scalar field, we can produce the gradient with

$$\nabla c = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} c$$

$$= \mathbf{e}_i \frac{\partial c}{\partial x_i}$$

$$= \frac{\partial c}{\partial x_i} \mathbf{e}_i.$$

This trick was already mentioned in last class when we talked about interpreting ∇ as a "pseudo-vector", but now its status has improved! Likewise, for the divergence,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = \boldsymbol{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot v_j \boldsymbol{e}_j$$

$$= \frac{\partial v_j}{\partial x_i} (\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j)$$

$$= \delta_{ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i}$$

$$= \frac{\partial v_i}{\partial x_i}.$$

Let's do the same with higher-order operands. Consider for example the velocity field u(x, t) in a flow. It has a gradient, and it is obtained as follows.

$$\nabla u = e_i \frac{\partial}{\partial x_i} u_j e_j$$
$$= \frac{\partial u_j}{\partial x_i} e_i e_j,$$

and that's it! Here is the divergence of a tensor $T = T_{ij}e_ie_j$:

$$\nabla \cdot T = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot T_{jk} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k$$

$$= \frac{\partial T_{jk}}{\partial x_i} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_k$$

$$= \delta_{ij} \frac{\partial T_{jk}}{\partial x_i} \mathbf{e}_k$$

$$= \frac{\partial T_{jk}}{\partial x_i} \mathbf{e}_k.$$

This all makes perfect sense. The gradient raises the order of the operand. The gradient of a first-order tensor is a second-order tensor. The divergence of a second-order tensor is a first-order tensor.

With this in place, our generalized ("directional") Fick's law will be as follows:

$$\frac{\mathrm{D}M_{A}}{\mathrm{D}t} = \oint_{\mathscr{S}} (\boldsymbol{n} \cdot \rho \boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{\nabla} c) \, dA$$

$$= \oint_{\mathscr{S}} \left([n_{i}\boldsymbol{e}_{i}] \cdot \left[\rho D_{jk}\boldsymbol{e}_{j}\boldsymbol{e}_{k} \cdot \boldsymbol{e}_{l} \frac{\partial}{\partial x_{l}} c \right] \right) dA$$

$$= \oint_{\mathscr{S}} \left([n_{i}\boldsymbol{e}_{i}] \cdot \left[\rho D_{jk}\boldsymbol{e}_{j}(\boldsymbol{e}_{k} \cdot \boldsymbol{e}_{l}) \frac{\partial c}{\partial x_{l}} \right] \right) dA$$

$$= \oint_{\mathscr{S}} \left([n_{i}\boldsymbol{e}_{i}] \cdot \left[\rho D_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \boldsymbol{e}_{j} \right] \right) dA.$$

This last expression is ready for the divergence theorem:

$$\frac{\mathrm{D}M_{A}}{\mathrm{D}t} = \int_{\mathscr{C}} \mathbf{e}_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \cdot \left[\rho D_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \mathbf{e}_{j} \right] dV$$

$$= \int_{\mathscr{C}} (\mathbf{e}_{i} \cdot \mathbf{e}_{j}) \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\rho D_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \mathbf{e}_{j} \right] dV$$

$$= \int_{\mathscr{C}} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\rho D_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \right] dV$$

$$= \int_{\mathscr{C}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\rho D_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_{k}} \right] dV.$$

The rest is the same, so we can put

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho D_{jk} \frac{\partial c}{\partial x_k} \right],$$

which is in conservative form. I will leave it for you to simplify it further with the equation of conservation of total mass, and with the assumption that the ρD_{jk} are constant in space.

Lição 3

The Boussinesq nonlinear differential equation for groundwater flow

14 de Março de 2016

Let us practice some of our acquired skills with an important equation. We will call it the Boussinesq equation. First of all: be careful, because there are many "Boussinesq equations" around. The one we will focus on is a model for groundwater flow. Moreover, there is a partial differential equation (which we will start with) and an ordinary differential equation. We will visit both.

We start our derivation looking at figure 3.1. The "wet" region of the soil is marked by gray, while the "dry" region is marked by light gray.

The figure shows a simple aquifer with a free surface h(x) (with water below). We call this the *phreatic surface*. There is no such thing in reality, because there is no sharp boundary between "wet" and "dry" regions in real soils. The soil moisture varies smoothly from completely saturated to drier as we move up. However, if you dig a hole in the ground, you will see that a free surface appears at some depth. We therefore make the simplification that there is a sharp wet-dry boundary in the soil. Its position is h(x).

We have delimited a material volume $\mathscr C$ with dashed lines in figure 3.1. We assume that the bottom (along the x axis) is impermeable. There is no mass flow across the top at all, because it has been conveniently located somewhat above the phreatic surface: even if the phreatic surface is moving up or down, it will not reach (immediately) the top dashed line that delimits this material volume. You may think that it is strange to draw a material volume a part of which has no water mass at all — and you are right, but this actually helps the analysis.

Across the closed surface of \mathscr{C} , therefore, there is only flow across the planes x=a and x=b. Flow across these planes extends up to h(a) and h(b), respectively.

In this problem, we need to obtain an expression for the mass flux in and out of \mathscr{C} . The medium (the soil) is complicated! There exists in fact a maze of interconnected channels carrying water, delimited by solid soil particles. We

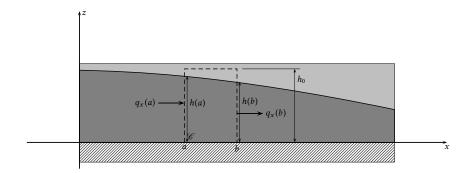


Figura 3.1: A material body mass balance for groundwater flow

define the soil's porosity as

$$n_d = \frac{V_p}{V_t},$$

where V_p is the volme of pores, and V_t is the total volume. Technically, the thing is indeed even more complicated, and we should use the *drainable* porosity. The reader is referred to Brutsaert (2005)'s book.

At any instant, the total mass of water within the material volume $\mathscr C$ is

$$M = \int_{\mathscr{C}} n\rho \, \mathrm{d}V,$$

where ρ is the density of water. We will be assuming that both n and ρ are constant throughout the soil.

The mass flux at any point across the plane x is given by Darcy's Law (once again, we need to be sketchy: look the subject up in Brutsaert (2005) and Bear (1972), for example). It reads

$$q = -\rho k_s \nabla \eta$$
,

where k_s is the *saturated hydraulic conductivity*, and $\eta(x, z)$ is the *hydraulic head* in the soil. The physical dimensions are as follows:

$$[q] = ML^{-2}T^{-1},$$

 $[\rho] = ML^{-3},$
 $[k_s] = LT^{-1},$
 $[\eta] = L,$
 $[\nabla \eta] = 1.$

You can verify that Darcy's law is dimensionally consistent (actually, it has to be, since it amounts to the definition of k_s). Notice that q is a vector, and that therefore, in the two-dimensional setting that we are working in, it has an x and a z component. We now invoke the *Dupuit-Forchheimmer hypothesis*: we assume that $\eta(x,z,t)=h(x,t)$, where h(x,t) is the (already introduced) height of the phreatic surface. It follows that

$$\nabla \eta = \frac{\partial h}{\partial x} \boldsymbol{e}_{x},$$

and that, therefore, q is horizontal. Moreover, since h(x, t) depends on x but not on z, the vetor q is constant along the plane x.

With q in place, the mass balance for \mathscr{C} is

$$0 = \int_{\mathscr{L}} \frac{\partial (n\rho)}{\partial t} \, dV + \oint_{\mathscr{L}} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q}) \, dA.$$

But if $n\rho = \text{constant}$, its partial derivative with respect to t is zero, right? Not so fast! In our approximation, ρ is an indicator function of the presence of water inside the material region \mathscr{C} : it drops from a constant value to zero as soon as we cross the phreatic surface upwards. Give it some thought: it means that the first integral is actually the rate of change of the total mass of water inside \mathscr{C} , and that it can be written

$$\int_{\mathscr{C}} \frac{\partial (n\rho)}{\partial t} \, dV = \int_{a}^{b} \left[\int_{z=0}^{h_0} \frac{\partial (n_d \rho)}{\partial t} \, dz \right] dx$$

$$= \int_{a}^{b} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{z=0}^{h_0} (n_d \rho) \, dz \right] dx$$

$$= \int_{a}^{b} (n_d \rho) \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{z=0}^{h(x)} \, dz \right] dx$$

$$= \int_{a}^{b} (n_d \rho) \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \, dx,$$

where a unit width in the y direction is implicit. Going from the second to the third line above, we used the fact that in this model there is only water below the phreatic surface h(x).

You are probably guessing, from our previous lectures, that the second integral can be handled with the Divergence Theorem, and you are right:

$$\oint_{\mathscr{S}} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q}) \, dA = \int_{a}^{b} \int_{z'=0}^{h_0} \frac{\partial q_x}{\partial x} \, dz dx$$
$$= \int_{a}^{b} \frac{\partial}{\partial x} \int_{z'=0}^{h_0} q_x \, dz dx.$$

Above, notice how q_x only exists below the phreatic surface h(x); therefore,

$$\oint_{\mathscr{S}} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q}) \, dA = \int_{a}^{b} \frac{\partial}{\partial x} \int_{z=0}^{h(x)} q_{x} \, dz dx$$

$$= \int_{a}^{b} \frac{\partial}{\partial x} \int_{z=0}^{h(x)} \left[-\rho k_{s} \frac{\partial h(x)}{\partial x} \right] \, dz dx$$

$$= \int_{a}^{b} \frac{\partial}{\partial x} \left[-\rho k_{s} h(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x} \right] \, dx.$$

Gathering everything,

$$0 = \int_{a}^{b} \left[\rho n \frac{\partial h}{\partial t} - \rho k_{s} \frac{\partial}{\partial x} \left(h \frac{\partial h}{\partial x} \right) \right] dx.$$

The same argument as before (validity of the integrand for any \mathscr{C} , etc.) gives us Boussinesq's equation:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{k_s}{n} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \right].$$

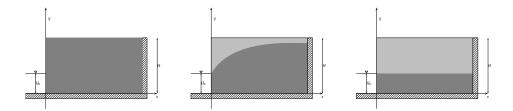


Figura 3.2: Esvaziamento de um maciço poroso

The equation itself is a great achievement: it was derived by Boussinesq in 1903 (Boussinesq, 1903). It can of course assume other forms, because we can consider two-dimensional flow in the horizontal, a sloping acquifer, etc.. Again, look it up in Brutsaert (2005) if you want more details.

Following Boussinesq, we will study a *linearized* problem first. Figure 3.2 shows three stages of the draining of an aquifer. At t = 0, the aquifer is saturated up to height H. At an intermediate time, there is a phreatic surface, and at $t = \infty$, the phreatic surface reaches (only asymptotically) the level H_0 of the adjoining channel to which water is draining.

One way to linearize the Boussinesq equation is this: let

$$\frac{\partial h}{\partial t} \approx \frac{k_s}{n} \frac{\partial}{\partial x} \overline{h} \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{k \overline{h}}{n} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}.$$

The most obvious (but not the only possible) value for para \overline{h} is $(H_0 + H)/2$, but pretty much any value between H_0 and H would be a valid (initial) attempt.

Problems involving partial differential equations (PDE's) require boundary conditions. Often, we call a condition in time an *initial condition*, although technically it is a boundary condition in the time dimension. For our problem, they are:

$$h(x,0) = H,$$

$$h(0,t) = H_0,$$

$$\frac{\partial h(L,t)}{\partial x} = 0,$$

and they have the following meanings:

 $h(x, 0) = H \Rightarrow$ Initially the phreatic level is H in the whole domain.

 $h(0, t) = H_0 \Rightarrow$ The phreatic level at x = 0 is H_0 for all t > 0.

 $\frac{\partial h(L)}{\partial x} = 0 \Rightarrow$ Due to the impermeable boundary on the right, there is no horizontal flux of water at x = L.

The second condition above is *nonhomogeneous*:

$$h(0, t) \neq 0.$$

This usually spells problems, because a standard tool to solve linear PDE's analytically is to employ *Sturm-Liouville* Theory, a theory that requires homogeneous boundary conditions. At this point, therefore, it is customary to change the problem into one with homogeneous boundary conditions. For the case at hand, here is how to do it: let

$$\phi(x,t)=h(x,t)-H_0;$$

Note that H_0 is constant; we obtain

$$\frac{\partial(\phi + H_0)}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2(\phi + H_0)}{\partial x^2} \implies \frac{\partial\phi}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2};$$

Then, the boundary conditions in ϕ are simpler!

$$\phi(x,0) = h(x,0) - H_0 = H - H_0,
\phi(0,t) = h(0,t) - H_0 = H_0 - H_0 = 0,
\frac{\partial \phi(L,t)}{\partial x} = \frac{\partial (h(L,t) - H_0)}{\partial x} = \frac{\partial h(L,t)}{\partial x} = 0,$$

so that now we have homogeneous boundary conditions.

The next step is the famous method of separation of variables. It consists of assuming

$$\phi(x,t) = X(x)T(t).$$

Get

$$\frac{\partial(XT)}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2(XT)}{\partial x^2} \implies XT' = \alpha^2 TX'' \implies \frac{1}{\alpha^2} \frac{T'}{T} = \frac{X''}{X} = \lambda.$$

Above, there is a function of t on the left-hand side, equal to a function of x on the right-hand side. This cannot be, unless they are both equal to the constant λ . This is the crux of the method of separation of variables. Let me tell you, right here, that this fortunate situation usually does not work in nonlinear problems.

At any rate, we have now two *ordinary differential equations* (ODE's):

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} - \lambda \alpha^2 T = 0,$$
$$\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}x^2} - \lambda X = 0.$$

The first is a *first-order equation*, because the highest derivative is 1. The second is a *second-order equation*, because the highest derivative is two.

We will need to match the solutions T(t) and X(x) to the initial and boundary conditions:

$$\phi(x,0) = X(x)T(0) = H - H(0),$$

$$\phi(0,t) = X(0)T(t) = 0,$$

$$\frac{\partial \phi(L,t)}{\partial x} = \frac{dX(L)}{dx}T(t) = 0.$$

Clearly, we will need to impose

$$X(0) = 0,$$
$$\frac{\mathrm{d}X(L)}{\mathrm{d}x} = 0.$$

We can go back to the initial condition $\phi(x,0)$ later on.

We solve the first one first:

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \lambda \alpha^2 T,$$

$$\frac{\mathrm{d}T}{T} = \lambda \alpha^2 \mathrm{d}t,$$

$$\int_{T_0}^{T(t)} \frac{\mathrm{d}T'}{T'} = \int_{t=0}^t \lambda \alpha^2 \mathrm{d}t',$$

$$\ln\left(\frac{T(t)}{T_0}\right) = \lambda \alpha^2 t,$$

$$T(t) = T_0 \exp\left(\lambda \alpha^2 t\right).$$

When I am solving problems using integrals, I always try to use *definite* integrals, and to put sensible limits of integration in them. This requires understanding clearly the role of *dummy integration variables*, such as T' and t'.

The second equation is much harder. The first thing to notice is that, magically, exp(rx) is a solution! Indeed,

$$X(x) = \exp(rx),$$

$$X'(x) = r \exp(rx),$$

$$X''(x) = r^2 \exp(rx).$$

If we put this back into the ODE, we get

$$r^{2} \exp(rx) - \lambda \exp(rx) = 0,$$
$$(r^{2} - \lambda) \exp(rx) = 0,$$
$$r^{2} = \lambda,$$
$$r = \pm \sqrt{\lambda}.$$

What this means is that there are two functions which solve the ODE:

$$\exp(\sqrt{\lambda}x)$$
 and $\exp(-\sqrt{\lambda}x)$.

Let's call the two roots r_1 and r_2 . Because the ODE is linear, any *linear combination* of them will also be a solution. Indeed,

$$X(x) = c_1 \exp(r_1 x) + c_2 \exp(r_2 x),$$

$$X''(x) = c_1 r_1^2 \exp(r_1 x) + c_2 r_2^2 \exp(r_2 x)$$

$$= c_1 \lambda \exp(r_1 x) + c_2 \lambda \exp(r_2 x)$$

$$= \lambda \left[c_1 \exp(r_1 x) + c_2 \exp(r_2 x) \right];$$

$$X''(x) - \lambda X = \lambda \left[c_1 \exp(r_1 x) + c_2 \exp(r_2 x) \right] - \lambda \left[c_1 \exp(r_1 x) + c_2 \exp(r_2 x) \right]$$

$$= 0.$$

So far we have effectively solved the equation. But we must also look at the sign of λ ! Notice that, if $\lambda < 0$, then r_1 and r_2 will be complex. Moreover, for $\lambda > 0$, there are more convenient forms to express the solution. Let us assume $\lambda > 0$, and that the solution $X(x) \in \mathbb{R}$. Given $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$, it is always possible to find $a, b \in \mathbb{R}$ such that

$$c_1 = \frac{1}{2}(a+b),$$

 $c_2 = \frac{1}{2}(a-b).$

Replacing these into the solution, we obtain

$$X(x) = \frac{1}{2}(a+b)e^{+\sqrt{\lambda}x} + \frac{1}{2}(a-b)e^{-\sqrt{\lambda}x}$$
$$= a\frac{e^{+\sqrt{\lambda}x} + e^{-\sqrt{\lambda}x}}{2} + b\frac{e^{+\sqrt{\lambda}x} - e^{-\sqrt{\lambda}x}}{2}$$
$$= a\cosh(\sqrt{\lambda}x) + b\sinh(\sqrt{\lambda}x).$$

Let us see if $\lambda > 0$ leads to a solution that satisfies our boundary conditions:

$$X(x) = a \cosh(\sqrt{\lambda}x) + b \sinh(\sqrt{\lambda}x),$$

$$\frac{dX}{dx} = \sqrt{\lambda} \left[a \sinh(\sqrt{\lambda}x) + b \cosh(\sqrt{\lambda}x) \right].$$

Now,

$$X(0) = 0 \implies a = 0,$$

$$\frac{dX(L)}{dx} = 0 \implies \sqrt{\lambda}b\cosh(\sqrt{\lambda}L) = 0 \Leftrightarrow b = 0.$$

Thus, $\lambda > 0$ produces only the trivial solution

$$X(x) \equiv 0.$$

This is no good: it clearly cannot result in the solution $\phi(x, t)$ that we are seeking for our groundwater problem.

We must, therefore, proceed, testing the other possible signs for λ . If $\lambda = 0$,

$$\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}x^2} = 0 \implies X(x) = ax + b$$

$$X(0) = 0 \implies b = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}X(L)}{\mathrm{d}x} = 0 \implies a = 0.$$

Again, $\lambda = 0$ gives us only the trivial solution.

Finally, if $\lambda < 0$, we need to express the solution in a more practical form. Observe that in terms of $\exp(\cdot)$, the solution is

$$X(x) = c_1 \exp(+\sqrt{\lambda}x) + c_2 \exp(-\sqrt{\lambda}x).$$

As it is, it is a complex number, because $\lambda < 0$. The first thing we need to do is to make this as explicit as possible:

$$\exp(+\sqrt{\lambda}x) = \exp(irx),$$

where $r = \sqrt{|\lambda|}$. Then,

$$X(x) = c_1 \exp(irx) + c_2 \exp(-irx).$$

At this point, we must realize that in principle X(x) is a complex number. This is not so good, because we are seeking a $real\ X(x)$ solution. Interestingly, we will fix this situation by letting c_1 and c_2 be complex as well.

So we want to write the solution in a purely real form. We can do this using two devices. First, we remember Euler's formula:

$$\exp(irx) = \cos(rx) + i\sin(rx).$$

The good news is that both r and x are real, so the $\cos(\cdot)$ and $\sin(\cdot)$ functions above are the good old real versions of these trigonometric functions (there *are* complex versions, but let us not care about them for the time being). Also, $\cos(\cdot)$ is an even function:

$$\cos(-x) = \cos(x),$$

while $sin(\cdot)$ is an odd function:

$$\sin(-x) = -\sin(x).$$

Using those facts, we rewrite the solution as

$$X(x) = c_1 \left[\cos(rx) + i\sin(rx) \right] + c_2 \left[\cos(rx) - i\sin(rx) \right]$$

= $(c_1 + c_2)\cos(rx) + (c_1 - c_2)i\sin(rx)$.

Let us think about it again: if X(x) is to be real, we need to have $c_1 + c_2$ real, and $(c_1 - c_2)$ i real as well: how can we do it? Making c_1 and c_2 complex conjugates. It is actually quite simple to do this: let a and b be real, and put

$$c_1 = \frac{1}{2}(a - bi),$$

 $c_2 = \frac{1}{2}(a + bi).$

Let us do the algebra now:

$$X(x) = \left[\frac{1}{2}(a-bi) + \frac{1}{2}(a+bi)\right]\cos(rx) + \left[\frac{1}{2}(a-bi) - \frac{1}{2}(a+bi)\right]i\sin(rx)$$
$$= a\cos(rx) - b(i\times i)\sin(rx)$$
$$= a\cos(rx) + b\sin(rx).$$

It worked: if $\lambda < 0$, the expression above (remember: $r = \sqrt{|\lambda|}$) is the real solution. Again, we try to match this solution to the boundary conditions

$$X(x) = a\cos(\sqrt{-\lambda}x) + b\sin(\sqrt{-\lambda}x),$$

$$\frac{dX}{dx} = \sqrt{-\lambda} \left[-a\sin(\sqrt{-\lambda}x) + b\cos(\sqrt{-\lambda}x) \right],$$

$$X(0) = 0 \implies a = 0,$$

$$\frac{dX(L)}{dx} = 0 \implies \sqrt{-\lambda}b\cos(\sqrt{-\lambda}L) = 0 \blacksquare$$

We don't want b to be zero: that would again give us a trivial solution. It is the cossine that must be zero:

$$\cos(r_n L) = 0,$$

$$r_n L = (n + \frac{1}{2})\pi = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \implies$$

$$r_n = (2n + 1)\frac{\pi}{2}\frac{1}{L}.$$

As you can see, an n has appeared. Why? Because for any $n \ge 0$, $\cos(r_n L) = 0$. What this means is that the corresponding λ 's are *eigenvalues*:

$$\sqrt{-\lambda_n} = (2n+1)\frac{\pi}{2}\frac{1}{L},$$
$$\lambda_n = -(2n+1)^2\frac{\pi^2}{2L^2}.$$

Moreover, for each n there will be a solution. They are

$$X_n(x) = b_n \sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right).$$

Obtaining the eigenvalues and eigenfunctions is the central part of any solution using the method of separation of variables. It is, in fact, an application of *Sturm-Liouville Theory*. In the last lecture, we applied the theory "in practice". Now you will remember that we were trying to find solutions of the form

$$\phi(x,t) = X(x)T(t)$$

Because we found infinitely many X_n 's, we must change this to:

$$\phi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} X_n(x) T_n(t).$$

The first thing to do is to calculate the $T_n(t)$'s. They are immediately obtained as

$$T_n(t) = T_{0n} \exp \left[-(2n+1)^2 \frac{\pi^2 \alpha^2}{2L^2} t \right]$$

Observe that the boundary conditions,

$$\phi(0,t) = 0,$$

$$\frac{\partial \phi(L,t)}{\partial x} = 0,$$

are already automatically obeyed. We are left to impose the initial condition:

$$\phi(x,0) = H - H_0.$$

At t = 0, then, we obtain:

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_{0n}b_n \sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right) = [H - H_0].$$

The constants T_{0n} and b_n are not independent! We must rewrite:

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n \sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right) = [H - H_0].$$

The final step of the solution is the calculation of the C_n 's. Here is how we do it:

$$\sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right)\sum_{n=0}^{\infty}C_n\sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right) = [H-H_0]\sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right),$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}C_n\sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right)\sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right) = [H-H_0]\sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right),$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}C_n\int_{x=0}^{L}\sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right)\sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right)dx =$$

$$[H-H_0]\int_{x=0}^{L}\sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right)dx.$$

The two integrals can be calculated really fast with the help of Maxima. If you run this script,

```
linel: 70;
declare([m,n], integer);
declare([L], noninteger);
assume(L > 0);
fm: sin((2*m +1)*%pi*x/(2*L));
fn: sin((2*n +1)*%pi*x/(2*L));
II: integrate(fm*fn,x,0,L);
I2: integrate(fm*fm,x,0,L);
I3: integrate(fm,x,0,L);
trigreduce(%);
```

you get:

```
(%i1) batch("maxints.max")
   (%i2) declare([m,n],integer)
                                             done
    (%i3) declare([L],noninteger)
   (%o3)
                                             done
   (\%i4) assume(L > 0)
                                            [L > 0]
   (%i5) fm:sin((1+2*m)*\%pi*x/(2*L))
                                        %pi (2 m + 1) x
10
11
    (\%i6) fn:sin((1+2*n)*\%pi*x/(2*L))
12
                                    %pi (2 n + 1) x
sin(-----)
13
14
15
   (%i7) I1:integrate(fm*fn,x,0,L)
16
17
   (%i8) I2:integrate(fm*fm,x,0,L)
18
19
21
    (%i9) I3:integrate(fm,x,0,L)
22
23
24
25
27
    (%i10) trigreduce(%)
29
                                             2 L
30
   (%o10)
                                        2 %pi m + %pi
```

Here is what it means:

$$m \neq n \Rightarrow \int_{x=0}^{L} \sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right) \sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right) dx = 0,$$

$$m \neq n \Rightarrow \int_{x=0}^{L} \sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right) \sin\left((2n+1)\frac{\pi x}{2L}\right) dx = \frac{L}{2},$$

$$\int_{x=0}^{L} \sin\left((2m+1)\frac{\pi x}{2L}\right) dx = \frac{2L}{\pi(2m+1)}.$$

Only n = m survives in the sum on the right-hand side. The result is

$$C_m \frac{L}{2} = [H - H_0] \frac{2L}{\pi (2m+1)}$$
$$C_m = [H - H_0] \frac{4}{\pi (2m+1)}.$$

Here is our solution:

$$h(x,t) = H_0 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4 \left[H - H_0 \right]}{\pi (2n+1)} \sin \left((2n+1) \frac{\pi x}{2L} \right) \exp \left[-(2n+1)^2 \frac{\pi^2 \alpha^2}{2L^2} t \right].$$

Lição 4

A transformação de Boltzmann, e a equação de Boussinesq

Nem sempre as "dimensões fundamentais" de um problema são M, L e T. Considere novamente a equação de Boussinesq,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{k_s}{n} \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \right],$$

Em um aquífero semi-infino (em x), inicialmente cheio até h_0 , conforme visto na figura 4.1.

O domínio espacial é $0 \le x < \infty$, e o domínio temporal é $t \ge 0$. Lembre-se de que o fluxo mássico de água através de um plano vertical é dado pela lei de Darcy,

$$q_x = -\rho k_s \frac{\partial h}{\partial x}.$$

Em princípio, as variáveis do problema (dadas pela equação diferencial parcial) e suas dimensões fundamentais são

$$[x] = L,$$
 $[t] = T,$
 $[h] = L,$
 $[h_0] = L,$
 $[k_s] = L T^{-1},$
 $[n_d] = 1.$

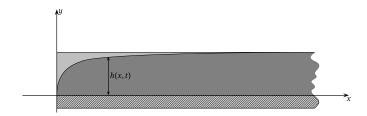


Figura 4.1: Drainage from a semi-infinite aquifer initially fully saturated.

Uma vez que n_d é adimensioanl, há 5 variáveis dimensionais, e duas dimensões indpendentes: esperamos encontrar 3 grupos adimensionais (a rigor, entretanto, é preciso montar a matriz dimensional do problema, e calcular seu posto: veja Dias (2016)). A forma geral da solução portanto deve ser do tipo $\Pi_3 = f(\Pi_1, \Pi_2)$. Isso é razoável, já que em termos das variáveis dimensionais, estamos procurando uma função h = h(x, t) de duas variáveis.

Em uma análise mais detida da física, entretanto, notamos que o vetor fluxo de massa q é horizontal. Além disso, neste particular problema as escalas horizontais são muito maiores do que as verticais. Isso sugere um conjunto diferente de dimensões fundamentais:

$$[x] = X,$$
 $[t] = T,$
 $[h] = Z,$
 $[h_0] = Z,$
 $[k_s] = X^2 Z^{-1} T^{-1},$
 $[n] = 1.$

Agora, estamos supondo que comprimentos horizontais possuem uma dimensão (X) distinta daquela de comprimentos verticais (Z).

Na lista acima, as dimensões de k_s foram obitdas da seguinte forma:

$$\begin{split} \llbracket \rho \rrbracket &= \mathsf{M} \, \mathsf{X}^{-1} \, \mathsf{Y}^{-1} \, \mathsf{Z}^{-1}, \\ \llbracket q_x \rrbracket &= \left[\rho k_s \frac{\partial h}{\partial x} \right] = \mathsf{M} \, \mathsf{Y}^{-1} \, \mathsf{Z}^{-1} \, \mathsf{T}^{-1}, \\ \llbracket k_s \rrbracket &= \left[q_x \right] \left[\left[p \right] \left[\frac{\partial h}{\partial x} \right] \right]^{-1} \\ &= \mathsf{M} \, \mathsf{Y}^{-1} \mathsf{Z}^{-1} \, \mathsf{T}^{-1} \left[\mathsf{M} \, \mathsf{X}^{-1} \, \mathsf{Y}^{-1} \, \mathsf{Z}^{-1} \, \mathsf{Z} \, \mathsf{X}^{-1} \right]^{-1} = \mathsf{X}^2 \, \mathsf{Z}^{-1} \, \mathsf{T}^{-1}. \end{split}$$

Isso sugere que há apenas dois grupos adimensionais, ou seja, que a solução do problema é da forma $\Pi_1 = \phi(\Pi_2)$. Mas isso é o tipo de resultado obtido com a integração de uma *equação diferencial ordinária*! Talvez haja uma maneira de reduzir o problema a uma EDO, e de fato há.

A única maneira de adimensionalizar h é divindido-a por h_0 ($\Pi_1 = h/h_0$). Portanto, primeiro nós reescrevemos

$$\frac{\partial \frac{h}{h_0}}{\partial t} = \frac{h_0 k_s}{n} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{h}{h_0} \frac{\partial \frac{h}{h_0}}{\partial x} \right]$$
$$\frac{\partial \Pi_1}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\Pi_1 \frac{\partial \Pi_1}{\partial x} \right]$$

onde $D = h_0 k_s / n$.

As variáveis restantes, x, t e D, têm que formar o outro parâmetro adimensional. É trivial verificar que ele é

$$\Pi_2 = \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$$
.

De fato,

$$[D] = Z X^2 Z^{-1} T^{-1} = X^2 T^{-1}.$$

O número adimensional 4 é introduzido apenas para simplificar a álgebra subsequente. Em seguida, será mais confortável escrever

$$\Phi = \Pi_1,$$

$$\xi = \Pi_2.$$

Estamos portanto procurando a função ϕ tal que

$$\Phi = \phi(\xi)$$
.

Note a distinção cuidadosa entre a função ϕ e a variável dependente Φ . Algumas vezes, esse tipo de distinção carrega demasiadamente a notação, e não é de fato necessária, mas muitas outras vezes (como no nosso caso aqui), ela vale muito a pena.

Com o auxílio da regra da cadeia, temos agora

$$\begin{split} \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) \right] \\ &= \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} \\ &= -\frac{xD}{4(Dt)^{3/2}} \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}; \\ \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{4Dt}} \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}; \\ \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= \phi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{4Dt}} \phi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}; \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right] &= \frac{1}{\sqrt{4Dt}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[\phi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} \right] \frac{\partial \xi}{\partial x}, \\ &= \frac{1}{4Dt} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[\phi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} \right]. \end{split}$$

Fazendo as substituições correspondentes na EDP original,

$$-\frac{xD}{4(Dt)^{3/2}}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = \frac{D}{4Dt}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\phi\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}\right]$$
$$-\frac{D}{4Dt}\frac{2x}{(4Dt)^{1/2}}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = \frac{D}{4Dt}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\phi\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}\right]$$
$$-\frac{D}{4Dt}\frac{2x}{(4Dt)^{1/2}}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = \frac{D}{4Dt}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\phi\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}\right]$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\phi\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}\right] + 2\xi\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = 0.$$

Essa é uma equação diferencial ordinária não-linear de ordem 2, com coeficientes não-constantes. Sua solução envolve duas condições de contorno em ϕ ou em sua derivada. As 3 condições originais eram

$$h(x, 0) = h_0,$$

 $h(0, t) = 0,$
 $h(\infty, t) = h_0.$

Agora, elas se tornam

$$\Phi(x,0) = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \phi(\infty) = 1,$$

$$\Phi(0,t) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \phi(0) = 0,$$

$$\Phi(\infty,t) = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \phi(\infty) = 1.$$

Há portanto apenas duas condições de contorno independentes para a EDO. A coincidência dos valores de duas das condições originais é uma condição necessária para que a transformação de Boltzmann funcione.

Nós vamos resolver a EDO de Boussinesq com um método denominado solução em série. A ideia é relativamente simples: algumas EDO's não podem ser resolvidas analiticamente em termos de uma forma fechada simples, envolvendo funções tais como sin, cos, exp, etc.. Uma alternativa atraente é procurar uma série que represente a solução:

$$\phi(\xi) = c_0 + c_1 \xi^{p_1} + c_2 \xi^{p_2} + c_3 \xi^{p_3} + \dots$$

Quando os expoentes $p_1, p_2, p_3 \dots$ são inteiros positivos nós estamos diante de uma série de Taylor, mas muitas vezes uma abordagem mais sofisticada, denominada Método de Frobenius, leva a expoentes não-inteiros (em geral racionais). No nosso caso, entretanto, nem mesmo o Método de Frobenius é aplicável, porque nossa EDO é não-linear.

Um ponto muito importante é o seguinte: o que acontece com a série em seus termos mais baixos quando $\xi \to 0$? Note que, dada a condição $\phi(0) = 0$, devemos ter $c_0 = 0$. Portanto,

$$\xi \to 0 \Rightarrow \phi(\xi) = c_1 \xi^{p_1} + \text{TOA},$$

onde TOA indica "termos de ordem alta". Em seguida, nós tentaremos encontrar o valor de p_1 .

Isso é possível por meio de uma análise assintótica. Comecemos por substituir a expressão acima na equação diferencial. Obviamente, isso não é a solução, mas sim uma aproximação válida apenas para ξ muito pequeno. Obtemos:

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[c_1 \xi^{p_1} \times c_1 p_1 \xi^{p_1 - 1} \right] + 2\xi c_1 p_1 \xi^{p_1 - 1} &\approx 0, \\ c_1^2 p_1 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[\xi^{2p_1 - 1} \right] + 2c_1 p_1 \xi^{p_1} &\approx 0, \\ c_1^2 p_1 (2p_1 - 1) \xi^{2p_1 - 2} + 2c_1 p_1 \xi^{p_1} &\approx 0, \\ c_1 (2p_1 - 1) \xi^{2p_1 - 2} + 2\xi^{p_1} &\approx 0. \end{split}$$

Naturalmente, não desejamos $c_1=0$. O segundo termo do lado esquerdo *nunca* será nulo, mas desde que $p_1>0$ ele se tornará tão pequeno quando desejemos quando $\xi\to 0$, e isso é suficiente para nós.

Continuando, suponha que $p_1 < 2$; então, $2p_1 - 2 < p_1$, e isso significa que $\xi^{2p_1-2} \to 0$ mais devagar do que ξ^{p_1} : para ξ pequeno, o primeiro termo será maior do que o segundo. Nós podemos anular este primeiro termo se fizermos

$$p_1 = 1/2$$
,

enquanto que devemos nos lembrar de que o segundo termo, que tende a zero mais rapidamente (ou seja, que é "menor") tem que ser deixado como está. Uma consequência interessante de fazermos $p_1 = 1/2$ é que

$$\lim_{\xi \to 0} \phi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = \text{const.}.$$

Fisicamente, o produto $\phi d\phi/d\xi$ é uma vazão. Isso está OK, porque deve haver uma vazão finita (fluindo através de uma área infinitamente pequena) em x=0 (e consequentemente em $\xi=0$, enquanto o aquífero se esvazia.

O grande problema da solução em série é a obtenção da constante acima, que está relacionada com c_1 . De fato, temos

$$\phi \sim c_1 \xi^{1/2},$$

$$\frac{d\phi}{d\xi} \sim \frac{1}{2} c_1 \xi^{-1/2},$$

$$\psi \equiv \phi \frac{d\phi}{d\xi} \sim \frac{1}{2} c_1^2.$$

Todas as soluções conhecidas em série dependem criticamente do valor de ψ_0 , definido como

$$2\psi_0 \equiv c_1^2$$
.

Existe uma única maneira "analítica" de obter ψ_0 (Chor, 2014); todas as demais são numéricas. Alternativas numéricas podem ser encontradas em Chor et al. (2013a) assim como em Dias (2016).

Todas as alternativas numéricas significam, na prática, resolver numericamente a equação diferencial ordinária. Nesse sentido, é um pouco frustrante ter que resolver toda a equação numericamente para só então poder obter c_1 ! Isso significa que na prática qualquer solução analítica "em série" só poderá ser obtida depois que a solução numérica tiver sido calculada. Esquecendo um pouco isso, vamos dar aqui o valor de c_1 :

$$c_1 = 1.15248832742930.$$

Considere agora uma expansão em série na forma

$$\phi(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{n/2}.$$

O interessante é que agora é possível obter *relações recursivas* entre os c_n 's. Inicialmente, tentemos uma série bem curta:

$$\phi(\xi) = c_1 \xi^{1/2} + c_2 \xi,$$

e substituamos na equação diferencial para ver no que dá. Com Maxima,

Vamos traduzir: para ξ pequeno, temos agora

$$c_1 \xi^{1/2} + 2c_2 \xi + \frac{0.86437c_2}{\sqrt{\xi}} + c_2^2 \approx 0.$$

Porém, à medida que ξ se torna pequeno, temos agora um termo que fica cada vez maior,

$$\frac{0.86437c_2}{\sqrt{\xi}}$$

e outro que permanece constante,

$$c_{2}^{2}.$$

Isso não é possível, a não ser, claro, que $c_2 = 0$. De posse dessa informação, tentemos o próximo termo:

$$\phi(\xi) = c_1 \xi^{1/2} + c_3 \xi^{3/2}.$$

Agora teremos:

```
(%i1) linel : 70 ;
1
2
   (%o1)
   (%i2) c[1] : 1.15248832792930 ;
                                1.1524883279293
   (\%i3) c[2] : 0 ;
6
   (%o3)
   (%i4) fi : sum( c[n]*xi^(n/2), n, 1, 3);
                               + 1.1524883279293 sqrt(xi)
10
   (%i5) eq : expand(diff(fi*diff(fi,xi),xi) + 2*xi*diff(fi,xi));
11
12
13
   (%o5) 3 c xi
                     + 3 c xi + 1.1524883279293 sqrt(xi)
14
                                                        + 2.3049766558586 c
15
16
```

Novamente, à medida em que ξ se torna pequeno, temos um termo que permanece constante,

$$2.3050c_3$$
.

Não queremos isso, e fazemos $c_3=0$. Seguimos portanto para uma solução do tipo

$$\phi(\xi) = c_1 \xi^{3/2} + c_4 \xi^2.$$

Agora teremos

```
(\%i1) linel : 70;
   (%o1)
   (%i2) c[1] : 1.15248832792930 ;
                                1.1524883279293
   (%o2)
   (\%i3) c[2] : 0 ;
   (%o3)
   (\%i4) c[3] : 0 ;
8
   (%o4)
   (%i5) fi : sum(c[n]*xi^(n/2), n, 1, 4);
10
                            + 1.1524883279293 sqrt(xi)
11
                         хi
12
   (%i6) eq : expand(diff(fi*diff(fi,xi),xi) + 2*xi*diff(fi,xi));
13
14
15
16
17
                                                  + 1.1524883279293 sqrt(xi)
```

Finalmente, temos algo aqui! Desprezando os termos de maior ordem (em ξ^2), nossa solução é

$$\phi(\xi) \approx [c_1 + 4.3218c_4] \, \xi^{1/2} \approx 0;$$

isso tem solução, como mostra a continuação da sessão de Maxima:

donde $c_4 = -2.6666 \times 10^{-1}$.

Uma análise cuidadosa e analítica das relações de recursão que estamos encontrando por tentativa e erro produz (Chor et al., 2013a)

$$c_n = -\frac{n+2}{4n} \sum_{k=1}^{n+3} k c_k c_{n-k+4}.$$

Os dois coeficientes nulos se repetirão após c_4 ($c_5 = c_6 = 0$), e assim por diante. Na verdade, é melhor trabalhar com a série contendo apenas coeficientes não nulos, na forma

$$\phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^{\frac{3n+1}{2}},$$

que dá a relação de recorrência

$$a_{n+1} = -\frac{1}{a_0(3n+5)} \left[\frac{4(3n+1)a_n}{3n+3} + \frac{3n+5}{2} \sum_{k=1}^n a_k a_{n-k+1} \right].$$

O programa em Maxima a seguir calcula 50 valores de a_n , a partir de n = 1:

```
a[0]: 1.15248832742929 ;
3 fi : sum(a[n]*x^((3*n+1)/2),n,0,M);
4 eq : expand( diff(fi*diff(fi,x),x) + 2*x*diff(fi,x) );
  cond : [] ;
  file_output_append : true ;
  with_stdout("se_xi.txt",print(string(float(a[0]))));
8 for n: 0 thru M-1 do (
      eqqu : ev(coeff(eq,x,(3*n+1)/2),cond),
      this : solve(eqqu,a[n+1]),
10
11
      cond : append(cond,this),
      this : first(this),
12
      a[n+1] : rhs(this),
13
      with_stdout("se_xi.txt",print(float(a[n+1])))
14
  );
```

A tabela a seguir (Chor et al., 2013b) dá os 11 primeiros valores:

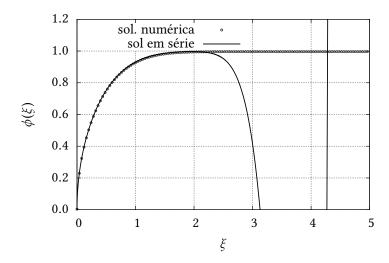


Figura 4.2: Comparação da integração numérica do problema de Boussinesq para um aquífero semi-infinito com a solução em série (11 termos).

Coeficiente	Valor
$\overline{a_0}$	$+1,15248832742929 \times 10^{+0}$
a_1	$-0,26666666666667 \times 10^{+0}$
a_2	$+0.046276679827463 \times 10^{+0}$
a_3	$-6,4894881692528425 \times 10^{-4}$
a_4	$-9,4517828664332276 \times 10^{-4}$
a_5	$-2,5400784492116708 \times 10^{-5}$
a_6	$+3,5810599703874529 \times 10^{-5}$
a_7	$+3,8844564686017651 \times 10^{-6}$
a_8	$-1,4163383082670557 \times 10^{-6}$
a_9	$-3,2740710683167304 \times 10^{-7}$
a_{10}	$+4,5534502970990704 \times 10^{-8}$

Ao mesmo tempo, uma solução numérica de $\phi(\xi)$ e de $\psi(\xi)$ é mostrada na figura 4.2. É obviamente interessante compararmos uma solução numérica com a série que obtivemos. Soluções numéricas são propostas e estudadas em profundidade em Chor (2014), Chor et al. (2013a) e Chor et al. (2015). Uma solução numérica também é apresentada em Dias (2016). A figura 4.2 mostra a comparação das duas, com os 11 termos cujos coeficientes a_n estão dados na tabela acima.

O que está acontecendo? A série (linha contínua) e a solução numérica concordam muito bem até um pouco depois de $\xi=2$. Logo depois, entretanto, a série (a rigor a soma de seus 11 primeiros termos) diverge violentamente, mergulhando para baixo e depois reaparecendo um pouco depois de $\xi=4$ "indo para cima". O problema, analisado em detalhe em Chor (2014) e Chor et al. (2013a), é que o raio de convergência de nossa série é *finito*. O raio de convergência da série é R=2.3757445 (Chor et al., 2013a).

Para valores além de (aproximadamente) 2, a série que obtivemos não pode ser aplicada. Uma alternativa de "continuar" a solução analítica para além desse ponto é obter uma *aproximação assintótica* para a solução. Fazemos isso expan-

dindo a equação diferencial,

$$\phi \frac{\mathrm{d}^2 \phi}{\mathrm{d}\xi^2} + \left[\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} \right]^2 + 2\xi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = 0,$$

e em seguida notando que a solução $\phi \approx 1$ após $\xi = 2$. Então, substituímos esse valor na equação acima, e encontramos uma equação diferencial aproximada

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}\xi^2} + \left[\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi}\right]^2 + 2\xi\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = 0.$$

Agora, temos uma equação sem ϕ , envolvendo apenas as suas derivadas de ordem 1 e 2. Isso permite imediatamente a aplicação de uma técnica denominada "redução de ordem", e que é óbvia:

$$f(\xi) = \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi},$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + f^2 + 2\xi f = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + 2\xi f = -f^2.$$

Esta é uma equação de Bernoulli (Dias, 2016, seção 8.4), e pode ser resolvida com a transformação de variáveis:

$$g = f^{-1},$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\xi} = -f^{-2}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} \Rightarrow$$

$$-f^{-2}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} - \frac{2\xi}{f} = 1,$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\xi} - 2\xi g = 1.$$

Temos agora uma EDO *linear*, *de 1^a ordem*, que Maxima sabe resolver facilmente:

```
(%i1) edo : 'diff(g,x) - 2*x*g - 1 ;
   (%i2) ode2(edo,g,x);
                             2
x sqrt(%pi) erf(x)
g = %e (------+ %c)
    (%o2)
10
   (%i3) f : 1/rhs(%);
11
12
13
14
    (%o3)
                                    sqrt(%pi) erf(x)
15
17
   (%i4) fi : integrate(f,x);
18
                                 sqrt(%pi) erf(x)
log(-----+ %c)
20
   (%o4)
21
```

Portanto,

$$\phi(\xi) = \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\operatorname{erf}(\xi) + k_1\right) + k_2$$

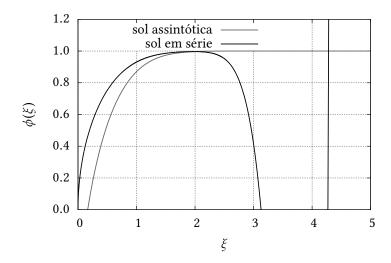


Figura 4.3: Combinação da solução em série com 11 termos com uma solução assintótica da equação de Boussinesq.

Podemos simplificar:

$$\phi(\xi) = \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\operatorname{erf}(\xi) + \frac{\sqrt{\pi}}{2}c_1\right) + k_2,$$

$$\phi(\xi) = \ln\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\operatorname{erf}(\xi) + c_1\right)\right] + k_2,$$

$$\phi(\xi) = \ln\left[\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right] + \ln\left(\operatorname{erf}(\xi) + c_1\right) + k_2,$$

$$\phi(\xi) = \ln\left(\operatorname{erf}(\xi) + c_1\right) + c_2.$$

Desejamos que $\phi(\infty) = 1$:

$$1 = \ln(1 + c_1) + c_2$$
.

Uma forma elegante — e nada óbvia — de atender a essa condição é fazer

$$c_2 = \ln\left(\frac{1}{1+c_1}\right) + 1,$$

$$\phi(\xi) = \ln\left(\frac{\operatorname{erf}(\xi) + c_1}{1+c_1}\right) + 1.$$

Em $\xi=2$, a soma dos 11 primeiros termos de nossa série vale $\phi(\xi)\approx 0.993981$. Façamos

$$0.993981 = \ln\left(\frac{\operatorname{erf}(2) + c_1}{1 + c_1}\right) + 1 \Rightarrow$$

$$c1 = 2.909725086888533 \times 10^{-1}.$$

Plotemos agora a série juntamente com a nossa aproximação assintótica, na figura 4.3. Note como o "casamento" de ambas é bastante satisfatório: podemos portanto utilizar na prática nossa série (com 11 termos, por exemplo) até $\xi=2$, e a aproximação assintótica, com o valor de c_1 obtido acima, a partir desse ponto.

Lição 5

Misturas binárias

No início deste capítulo nós vamos seguir a essência da abordagem de Bird et al. (1960, cap. 16): ela permite entender claramente o significado de difusão molecular de uma substância em um fluido, e em nossa opinião evita totalmente confusões comuns a respeito do papel da difusão e da advecção em meios contínuos.

Além disso, nós vamos considerar, por simplicidade, apenas misturas binárias, com um soluto A dissolvido em um solvente B. A generalização para misturas com mais de 2 componentes é óbvia.

Em uma mistura binária nós postulamos a existência em cada ponto de uma densidade para cada componente, \mathcal{D}_A e \mathcal{D}_B , de tal maneira que as massas totais de A e B em um volume material \mathscr{C} são, respectivamente,

$$M_A = \int_{\mathscr{C}} \rho_A \, dV, \qquad M_B = \int_{\mathscr{C}} \rho_B \, dV.$$

É evidente que, em cada ponto, devemos ter

$$\rho = \rho_A + \rho_B.$$

Note que essa abordagem postulatória é compatível com a visão tradicional em Mecânica do Contínuo. Prosseguindo, nós também postulamos a existência de campos de velocidade para cada espécie, U_A e U_B , cujas integrais em um volume material são a quantidade de movimento total de cada espécie, respectivamente P_A e P_B . Por analogia com as equações acima, temos

$$P_A = \int_{\mathscr{C}} \rho_A \boldsymbol{u}_A \, dV, \qquad P_B = \int_{\mathscr{C}} \rho_B \boldsymbol{u}_B \, dV.$$

Agora, a quantidade de movimento total do corpo que ocupa $\mathscr C$ deve ser

$$P = \int_{\mathscr{C}} \rho \, \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}V,$$

onde \boldsymbol{u} é a velocidade do fluido em cada ponto, de tal forma que devemos ter

$$\rho \boldsymbol{u} = \rho_A \boldsymbol{u}_A + \rho_B \boldsymbol{u}_B.$$

O ponto fundamental agora é perceber que é extremamente difícil, senão impossível, medir diretamente u_A e u_B . Em seu lugar, é muito mais simples trabalhar unicamente com o campo de velocidade u do fluido como um todo em cada ponto. Para tanto, nós definimos o vetor fluxo difusivo de massa de A:

$$\boldsymbol{j}_A = \rho_A \left[\boldsymbol{u}_A - \boldsymbol{u} \right].$$

A concentração mássica (ou fração de massa) de A é

$$c_A \equiv \frac{\rho_A}{\rho}$$
,

e vale a lei de Fick em cada ponto:

$$\mathbf{j}_A = -\rho D \nabla c$$
,

onde D é a difusividade molecular de A na mistura. Relações totalmente análogas também valem para o solvente B.

Finalmente, das equações acima obtém-se:

$$j_A + j_B = \rho_A [\mathbf{u}_A - \mathbf{u}] + \rho_B [\mathbf{u}_B - \mathbf{u}]$$
$$= \rho_A \mathbf{u}_A + \rho_B \mathbf{u}_B - (\rho_A + \rho_B) \mathbf{u}$$
$$= \rho \mathbf{u} - \rho \mathbf{u} = 0.$$

Essa equação é válida em todos os pontos de um fluido, exceto talvez em uma superfície onde haja um fluxo líquido de A para dentro da massa de fluido. Este é um ponto muito importante, pois nosso objetivo neste capítulo é estudar com razoável detalhe o que acontece quando existe injeção de massa para dentro de um fluido.

Prosseguindo, o balanço integral de A é tão simples quanto

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{C}} \rho_{A} \, dV + \oint_{\mathcal{S}} \rho_{A} \left(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{u}_{A} \right) \, dA$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{C}} \rho_{A} \, dV + \oint_{\mathcal{S}} \rho_{A} \left(\boldsymbol{n} \cdot \left[\boldsymbol{u}_{A} - \boldsymbol{u} + \boldsymbol{u} \right] \right) \, dA;$$

$$- \oint_{\mathcal{S}} \rho_{A} \left(\boldsymbol{n} \cdot \left[\boldsymbol{u}_{A} - \boldsymbol{u} \right] \right) \, dA = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{C}} \rho_{A} \, dV + \oint_{\mathcal{S}} \rho_{A} \left(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{u} \right) \, dA,$$

$$- \oint_{\mathcal{C}} \left(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{j}_{A} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{C}} \rho_{A} \, dV + \oint_{\mathcal{S}} \rho_{A} \left(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{u} \right) \, dA,$$

onde a introdução de j_A na última linha segue-se de sua definição. Uma dedução totalmente análoga vale para B.

A aplicação dos teoremas da divergência e da localização para A e para B produz, agora, duas equações diferenciais de balanço de massa:

$$\begin{split} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_A u_i}{\partial x_i} &= -\frac{\partial J_{A,i}}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \frac{\partial \rho_B u_i}{\partial x_i} &= -\frac{\partial J_{B,i}}{\partial x_i}. \end{split}$$

A soma das duas tem que restaurar a equação da continuidade; dada as equações

$$\rho = \rho_A + \rho_B,$$

$$\rho \mathbf{u} = \rho_A \mathbf{u}_A + \rho_B \mathbf{u}_B,$$

segue-se necessariamente que

$$\frac{\partial j_{A,i}}{\partial x_i} + \frac{\partial j_{B,i}}{\partial x_i} \equiv 0.$$

Esta equação vale sempre; duas coisas podem acontecer. No caso mais geral, qualquer difusão molecular do soluto A é compensada por difusão molecular,

também do solvente B, de uma certa forma, "no sentido oposto". Note entretanto que ela estipula que é a soma das divergências dos fluxos difusivos de massa que é nula. Uma situação particular que pode ocorrer é o caso em que $j_A = {\rm const.}$ e $j_B = 0$; portanto é possível ocorrer fluxo difusivo apenas do soluto, desde que a sua divergência seja nula. É comum a confusão entre um fluxo e sua divergência nas equações de um meio contínuo, e este é um bom exemplo para explicitar sua diferença.

Consideremos agora uma situação em que temos um escoamento predominantemente horizontal (na direção "x") de uma mistura sobre uma placa através da qual ocorre uma injeção de um fluxo de massa de A, constante e igual a \dot{m}_A . Suponha também que não há fluxo de massa de B através da placa, ou seja, que $\rho_B \mathbf{u}_B = 0$ em z = 0. A conclusão a que chegamos, imediatamente, é que existe uma velocidade advectiva de A w_{A0} , normal à placa, dada por

$$\dot{m}_A = \rho_A w_{A0}$$

Isso induz uma velocidade média vertical no escoamento em z = 0, pois

$$\rho w_0 = \rho_A w_{A0} \Rightarrow w_0 = \frac{\dot{m}_A}{\rho}.$$

A existência desta velocidade média "induzida" pela injeção de massa de A é muitas vezes denominada "escoamento de Stefan".

Uma parte de \dot{m}_A é de natureza difusiva:

$$j_{A0} = \rho_A(w_{A0} - w_0)$$
$$= \rho_A w_{A0} - \rho_A w_0 \Rightarrow$$
$$\rho_A w_{A0} = j_{A0} + \rho_A w_0.$$

Portanto,

$$\rho w_0 = j_{A0} + \rho_A w_0,$$

$$(\rho - \rho_A) w_0 = j_{A0} = -\rho D \frac{\partial c}{\partial z},$$

$$(1 - c) w_0 = -D \frac{\partial c}{\partial z},$$

$$w_0 = -\frac{D}{1 - c} \frac{dc(0)}{dz}.$$

Compare a equação acima com a equação (3) de Browers e Chesters (1991).

Suponhamos agora que o escoamento apresenta uma concentração de A igual a c_0 em c=0, e igual a c_δ em $z=\delta$. A equação de advecção-difusão de A (que já estudamos na lição 1) será no nosso caso simplificada (supondo regime permanente e um problema bidimensional) para

$$u\frac{\partial c}{\partial x} + w\frac{\partial c}{\partial z} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right).$$

Se pudermos, ainda mais, desprezar os termos advectivo e difusivo horizontais, ficaremos com

$$w\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}z} = D\frac{\mathrm{d}^2c}{\mathrm{d}z^2}.$$

Além disso, se nossas hipóteses para o fluxo de massa vertical de A (e também o de B) valerem não somente na superfície, mas em toda a região $0 \le z \le \delta$, teremos

$$-\frac{D}{1-c} \left[\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}z} \right]^2 = D \frac{\mathrm{d}^2 c}{\mathrm{d}z^2},$$
$$-\left[\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}z} \right]^2 = (1-c) \frac{\mathrm{d}^2 c}{\mathrm{d}z^2}.$$

Interessantemente, Browers e Chesters (1991) sequer listam a equação diferencial! É evidente que, se estivermos lendo o *paper* deles, teremos que entender (ou seja, refazer) como eles obtêm a solução deste sub-problema. Este é, agora, o nosso objetivo nesta lição.

As condições de contorno do problema serão

$$c(0) = c_0,$$

$$c(\delta) = c_{\delta}.$$

Browers e Chesters (1991) dão a solução analítica:

$$c(z) = 1 - (1 - c_0) \exp \left[\ln \left(\frac{1 - c_{\delta}}{1 - c_0} \right) \frac{z}{\delta} \right].$$

Não sabemos (ainda) como eles a obtiveram, mas podemos ao menos verificar se a expressão acima de fato resolve a equação diferencial. Esta é uma abordagem "de trás para frente", mas nenhuma abordagem válida, ainda que deselegante, deve ser descontada em Matemática Aplicada! Além disso, existem símbolos demais na expressão da solução, *que não afetam as derivadas em relação a z*!. Façamos portanto

$$c(z) = 1 - (1 - c_0) \exp(kz),$$

$$c'(z) = -(1 - c_0)k \exp(kz),$$

$$c''(z) = -(1 - c_0)k^2 \exp(kz).$$

Os dois lados da equação diferencial, agora, são

$$-\left[\frac{dc}{dz}\right]^2 = -(1 - c_0)^2 k^2 \exp(2kz),$$

$$(1 - c)\frac{d^2c}{dz^2} = -(1 - c_0)^2 k^2 \exp(2kz).$$

Eles são iguais, e portanto a solução está correta. Mas como ela foi obtida? Da seguinte maneira:

$$f = 1 - c;$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} = -\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}z};$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{\mathrm{d}^2 c}{\mathrm{d}z^2} \Rightarrow$$

$$-f\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}z^2} + \left[\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}\right]^2 = 0.$$

Essa equação em f é ligeiramente mais simples do que a original em c. Além disso, um pouco surpreendentemente, ela pode ser manipulada! Veja:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} \right) = \frac{1}{f} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} \times \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z};$$
$$\mathrm{d} \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} \right) = \frac{\mathrm{d}f}{f} \times \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z};$$
$$\frac{\mathrm{d} \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} \right)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}} = \frac{\mathrm{d}f}{f}.$$

A integral de ambos os lados acima é o ln!

$$\ln\left|\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}\right| = \ln|f| + \ln|k'|;$$

$$\ln\left|\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z}\right| = \ln|k'f|;$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} = \pm k'f;$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}z} = kf;$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = k\mathrm{d}z;$$

$$\ln|f| = kz + b'';$$

$$|f| = \exp(b'')\exp(kz);$$

$$f = \pm b'\exp(kz).$$

Portanto,

$$c = 1 - b \exp(kz)$$
.

Precisamos ainda fazer com que valham as condições de contorno do problema. Elas geram o sistema de equações

$$c_0 = 1 - b,$$

 $c_{\delta} = 1 - b \exp(k\delta)$

Da primeira,

$$b = 1 - c_0$$
.

Levando este resultado na segunda,

$$c_{\delta} = 1 - (1 - c_0) \exp(k\delta);$$

$$c_{\delta} - 1 = -(1 - c_0) \exp(k\delta);$$

$$(1 - c_{\delta}) = (1 - c_0) \exp(k\delta);$$

$$\exp(k\delta) = \frac{1 - c_{\delta}}{1 - c_0};$$

$$k\delta = \ln\left[\frac{1 - c_{\delta}}{1 - c_0}\right];$$

$$k = \frac{1}{\delta} \ln\left[\frac{1 - c_{\delta}}{1 - c_0}\right],$$

e isso completa a solução da equação diferencial.

Lição 6

Mais problemas difusivos com transformações de similaridade

A transformação de Boltzmann, apresentada no capítulo 5, é frequentemente útil em problemas difusivos. Talvez o mais clássico seja o problema em que um meio inicialmente com concetração nula de um soluto A é submetido, instantaneamene, a uma concentração c_0 em z=0. A equação governante é

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2};$$

as condições inicial e de contorno são

$$c(z, 0) = 0,$$

$$c(0, t) = c_0,$$

$$c(\infty, t) = 0.$$

Duas condições numericamente iguais $c(z,0)=c(\infty,t)=0$ sugerem fortemente que a transformação de Boltzmann se aplica. Procuramos agora uma solução da forma

$$\phi = \phi(\xi),$$

com

$$\phi = \frac{c}{c_0},$$

$$\xi = \frac{z}{\sqrt{4Dt}} = \frac{z}{\sqrt{4D}}t^{-1/2}.$$

A mudança de variáveis acima envolve o uso da regra da cadeia:

$$\begin{split} \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{z}{\sqrt{4D}} t^{-3/2} \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{z}{\sqrt{4D}t} t^{-1} \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -\frac{1}{2t} \xi \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi}. \end{split}$$

Para as derivadas em z,

$$\begin{split} \frac{\partial c}{\partial z} &= \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} \\ &= \frac{1}{\sqrt{4Dt}} \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi}; \\ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} \right] \frac{\partial \xi}{\partial z} \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} \left[\frac{1}{\sqrt{4Dt}} \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} \right] \frac{1}{\sqrt{4Dt}} \\ &= \frac{1}{4Dt} \frac{\mathrm{d}^2 c}{\mathrm{d}\xi^2} \end{split}$$

Substituímos agora em

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2},$$

$$-\frac{1}{2t} \xi \frac{dc}{d\xi} = \frac{D}{4Dt} \frac{d^2 c}{d\xi^2},$$

$$\frac{d^2 c}{d\xi^2} + 2\xi \frac{dc}{d\xi} = 0.$$

É mais elegante trabalhar com variáveis adimensionais. Dividindo por c_0 ,

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}\xi^2} + 2\xi \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = 0.$$

As duas condições de contorno em ϕ serão:

$$\phi(0) = 1,$$

$$\phi(\infty) = 0.$$

Não é difícil resolver a equação diferencial *em si*, utilizando redução de ordem!

$$g \equiv \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi};$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\xi} + 2\xi g = 0;$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{g} = -2\xi \mathrm{d}\xi;$$

$$\int_{g_0}^{g(\xi)} \frac{\mathrm{d}g'}{g'} = -2 \int_0^{\xi} \xi' \mathrm{d}\xi';$$

$$\ln \frac{g(\xi)}{g_0} = -\mathrm{e}^{-\xi^2};$$

$$g(\xi) = -g_0 \mathrm{e}^{-\xi^2};$$

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\xi} = -g_0 \mathrm{e}^{-\xi^2}$$

$$\int_{\phi=0}^{\phi(\xi)} \mathrm{d}\phi' = -g_0 \int_{\xi=0}^{\xi} \mathrm{e}^{-\xi'^2} \mathrm{d}\xi'$$

$$\phi(\xi) - \phi_0 = -\frac{g_0 \sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\xi);$$

$$\phi(\xi) = \phi_0 - \frac{g_0 \sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\xi).$$

Alguns pontos são importantes se você está vendo este problema pela primeira vez. Um, nós precisamos usar a definição da função erro erf(ξ):

$$\operatorname{erf}(\xi) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\xi} e^{-u^2} du.$$

A função erro precisa ser introduzida porque a integral correspondente não pode ser obtida em termos de funções transcedentais elementares (sen, cos, tg, ..., exp, ln), polinômios, ou funções racionais dessas coisas. A maioria das linguagens computacionais científicas disponíveis no mercado dispõe de uma função erf. A função erf(ξ) é *ímpar*; e valem

$$\operatorname{erf}(0) = 0$$
,
 $\operatorname{erf}(\infty) = 1$.

Dois, precisamos calcular g_0 . Note que a condição de contorno

$$\phi_0 = \frac{c(0,t)}{c_0}$$

já foi "embutida" na integração da equação diferencial. Mas

$$\phi(\infty) = 0 = \phi_0 - \frac{g_0\sqrt{\pi}}{2} \Rightarrow$$

$$\frac{g_0\sqrt{\pi}}{2} = \phi_0 \Rightarrow$$

$$\phi(\xi) = \phi_0 \left[1 - \operatorname{erf}(\xi)\right] \blacksquare$$

Considere agora uma equação diferencial totalmente diferente:

$$u\frac{\partial q}{\partial x} = D\frac{\partial^2 q}{\partial z^2}$$

Naturalmente, trata-se de uma versão simplificada (e estacionária: note a ausência da derivada parcial em relação ao tempo) da equação geral de difusão-advecção. Nós vamos utilizá-la para resolver o problema esboçado na figura 6.1, que ficou conhecido na literatura como "O problema de Sutton".

Nesse problema, ar seco sopra sobre um lago, sobre o qual se forma uma camada-limite interna de ar úmido, à medida que o vento (representado por um perfil uniforme em x e em z de velocidade u advecta ar sobre o lago.

É importante notar que a física é totalmente diferente daquela que usamos para deduzir a equação de advecção-difusão no capítulo 1! Aqui, q é a umidade específica m'edia; u é a velocidade do vento m'edia; e D é a difusividade turbulenta de vapor d'água na vertical.

Vamos especificar as condições de contorno deste problema:

$$q(0, z) = q_a,$$

$$q(x, 0) = q_0,$$

$$q(x, \infty) = q_a.$$

Olhando para a figura e considerando a física do problema você consegue explicálas?

Observe também que $q(0,z)=q(x,\infty)$ sugere fortemente, mais uma vez, a transformação de Boltzmann. Sejamos claros: desejamos reaproveitar a solução

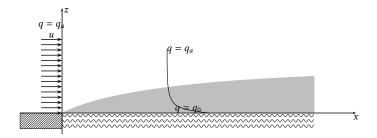


Figura 6.1: "O problema de Sutton"

que já obtivemos no início deste capítulo! Para tanto, seria muito bom se q(0,z)=0. Mas isso não é um grande problema. Primeiramente, faça

$$X = \frac{q - q_a}{q_0 - q_a};$$

esta é uma transformação linear na variável q, e portanto segue-se imediatamente que vale

$$u\frac{\partial X}{\partial x} = D\frac{\partial^2 X}{\partial z^2}.$$

Na variável X, as condições de contorno são

$$X(0, z) = 0,$$

$$X(x, 0) = 1,$$

$$X(x, \infty) = 0.$$

De fato, tentemos

$$\xi = \frac{z}{\sqrt{4Dx/u}}.$$

Esta variável é adimensional:

$$[\![\xi]\!] = \frac{\mathsf{L}}{(\mathsf{L}^2 \, \mathsf{T}^{-1} \mathsf{L} \mathsf{T} \, \mathsf{L}^{-1})^{1/2}} = 1.$$

Nosso procedimento agora repete o do início do capítulo, "com x no lugar de t":

$$\begin{split} \frac{\partial \mathcal{X}}{\partial x} &= \frac{\mathrm{d}\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{z}{\sqrt{4D/u}} x^{-3/2} \frac{\mathrm{d}\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{z}{\sqrt{4Dx/u}} x^{-1} \frac{\mathrm{d}\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -\frac{1}{2x} \xi \frac{\mathrm{d}\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi}. \end{split}$$

Para as derivadas em z,

$$\begin{split} \frac{\partial \mathcal{X}}{\partial z} &= \frac{\mathrm{d} \mathcal{X}}{\mathrm{d} \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} \\ &= \frac{1}{\sqrt{4Dx/u}} \frac{\mathrm{d} \mathcal{X}}{\mathrm{d} \xi}; \\ \frac{\partial^2 \mathcal{X}}{\partial z^2} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d} \xi} \left[\frac{\mathrm{d} \mathcal{X}}{\mathrm{d} \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} \right] \frac{\partial \xi}{\partial z} \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d} \xi} \left[\frac{1}{\sqrt{4Dx/u}} \frac{\mathrm{d} \mathcal{X}}{\mathrm{d} \xi} \right] \frac{1}{\sqrt{4Dx/u}} \\ &= \frac{1}{4Dx/u} \frac{\mathrm{d}^2 \mathcal{X}}{\mathrm{d} \xi^2} \end{split}$$

Substituímos agora em

$$u\frac{\partial X}{\partial x} = D\frac{\partial^2 X}{\partial z^2},$$
$$-u\frac{1}{2x}\xi\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}\xi} = \frac{D}{4Dx/u}\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}\xi^2},$$
$$\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}\xi^2} + 2\xi\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} = 0.$$

As duas condições de contorno em ϕ serão:

$$X(0) = 1,$$
$$X(\infty) = 0.$$

O problema que temos em mãos é exatamente o mesmo de antes, de forma que já temos a solução!

$$X(\xi) = 1 - \operatorname{erf}(\xi) \blacksquare$$

Considere agora a seguinte mudança aparentemente simples na nossa EDP. Vamos trocar u constante por uma função de z.

Considere a seguinte variação do "problema de Sutton":

$$u\frac{\partial X}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D\frac{\partial X}{\partial z} \right]; \qquad X(0,z) = 0, \ X(x,0) = 1, \ X(x,\infty) = 0.$$

Suponha agora que u e D variam com z segundo

$$u(z) = az^m,$$

$$D(z) = bz^n.$$

Nós vamos supor que vale uma forma bem forte da *analogia de Reynolds* (Reynolds, 1900; Dias, 2013):

$$E/\rho = -D\frac{\partial q}{\partial z},$$

$$\tau/\rho = +D\frac{\partial u}{\partial z} = Dmaz^{m-1} = mabz^{n+m-1}.$$

Aqui, E é o fluxo de massa turbulento de vapor d'água, e τ é o fluxo de quantidade de movimento turbulento. Uma idéia importante em mecânica dos fluidos é que τ

não depende de z em uma região próxima da superfície, denominda "sub-camada dinâmica". Se τ não depende de z, então, devemos ter

$$n + m = 1$$
.

Além disso, az^m e bz^n não deixam claras as dimensões! Podemos contornar esse problema usando um outro conceito clássico em mecânica dos fluidos e turbulência: o conceito de rugosidade da superfície. Escrevamos então as equações em termos da velocidade de atrito u_* e dessa rugosidade:

$$\tau/\rho \equiv u_*^2,$$

$$\frac{u}{u_*} = c \left(\frac{z}{z_0}\right)^m.$$

Note também que teremos

$$\tau/\rho = u_*^2 = mab.$$

Agora, é possível obter D em função de u_*, z_0, c e m da seguinte forma:

$$u(z) = az^m = cu_* \left(\frac{z}{z_0}\right)^m,$$

$$D(z) = bz^n = du_* z_0 \left(\frac{z}{z_0}\right)^{1-m}.$$

As equações acima foram escritas de forma a explicitar as dimensões físicas corretas de u e de D. Nelas, c e d (ao contrário de a e de b) são coeficientes adimensionais. Em seguida,

$$mab = u_*^2,$$

$$m\left(cu_*z_0^{-m}\right)\left(du_*z_0^m\right) = u_*^2,$$

$$d = \frac{1}{mc}.$$

Desse modo, a expressão para a difusividade turbulenta será

$$D = \frac{u_*}{mc} z_0^m z^{1-m}.$$

Reforcemos nosso ponto: nas equações acima, m e c são adimensionais; $[u_*] = [u] = \mathsf{L}\mathsf{T}^{-1}$; $[x] = [z] = [z_0] = \mathsf{L}$ e $[D] = \mathsf{L}^2\mathsf{T}^{-1}$. Usando a variável de similaridade

$$\xi = \frac{mc^2}{(2m+1)^2} \left(\frac{z}{z_0}\right)^{2m} \frac{z}{x},$$

vamos obter uma equação diferencial *ordinária* na variável independente ξ , e as condições de contorno que ela deve atender. Trata-se de um exercício de aplicação sistemática da regra da cadeia:

$$\begin{split} \xi &= \left[\frac{mc^2}{(2m+1)^2} z_0^{-2m}\right] z^{2m+1} x^{-1}; \\ \frac{\partial \xi}{\partial x} &= -\left[\frac{mc^2}{(2m+1)^2} z_0^{-2m}\right] z^{2m+1} x^{-2}; \\ \frac{\partial \xi}{\partial z} &= (2m+1) \left[\frac{mc^2}{(2m+1)^2} z_0^{-2m}\right] x^{-1} z^{2m} = \left[\frac{mc^2}{(2m+1)} z_0^{-2m}\right] x^{-1} z^{2m}. \end{split}$$

Agora,

$$\begin{split} u\frac{\partial X}{\partial x} &= u\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x} \\ &= -u\left[\frac{mc^2}{(2m+1)^2}z_0^{-2m}\right]z^{2m+1}x^{-2}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -cu_*\left(\frac{z}{z_0}\right)^m\left[\frac{mc^2}{(2m+1)^2}z_0^{-2m}\right]z^{2m+1}x^{-2}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} \\ &= -\frac{mc^3}{(2m+1)^2}u_*z_0^{-3m}z^{3m+1}x^{-2}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi}; \\ &= -\left[\frac{mc^3u_*z_0^{-3m}}{(2m+1)^2}\right]z^{3m+1}x^{-2}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi}; \\ D\frac{\partial X}{\partial z} &= \frac{u_*}{mc}z_0^mz^{1-m}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi}\frac{\partial\xi}{\partial z} \\ &= \frac{u_*cz_0^m}{(2m+1)}\left[\frac{mc^2}{(2m+1)}z_0^{-2m}\right]x^{-1}z^{2m}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} \\ &= \left[\frac{u_*cz_0^{-m}}{(2m+1)}\right]z^{m+1}x^{-1}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi}; \\ \frac{\partial}{\partial z}\left[D\frac{\partial X}{\partial z}\right] &= \left[\frac{u_*cz_0^{-m}}{(2m+1)}\right]\left[(m+1)x^{-1}z^m\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} + z^{m+1}x^{-1}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}\xi^2}\frac{\partial\xi}{\partial z}\right] \\ &= \left[\frac{u_*cz_0^{-m}}{(2m+1)}\right]\left[(m+1)x^{-1}z^m\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} + \left[\frac{mc^2}{(2m+1)}z_0^{-2m}\right]z^{3m+1}x^{-2}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}\xi^2}\right] \\ &= \left[\frac{u_*cz_0^{-m}}{(2m+1)}\right](m+1)x^{-1}z^m\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi} + \left[\frac{u_*mc^3z_0^{-3m}}{(2m+1)^2}\right]z^{3m+1}x^{-2}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}\xi^2}. \end{split}$$

Reunindo todos os termos na equação diferencial original:

$$-u\frac{\partial \mathcal{X}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left[D\frac{\partial \mathcal{X}}{\partial z} \right] = 0;$$

$$\left[\frac{mc^{3}u_{*}z_{0}^{-3m}}{(2m+1)^{2}} \right] z^{3m+1}x^{-2}\frac{d\mathcal{X}}{d\xi} + \left[\frac{u_{*}cz_{0}^{-m}}{(2m+1)} \right] (m+1)x^{-1}z^{m}\frac{d\mathcal{X}}{d\xi} + \left[\frac{u_{*}mc^{3}z_{0}^{-3m}}{(2m+1)^{2}} \right] z^{3m+1}x^{-2}\frac{d^{2}\mathcal{X}}{d\xi^{2}} = 0;$$

$$(2m+1) \left[\frac{mc^{2}z_{0}^{-2m}}{(2m+1)^{2}} \right] z^{2m+1}x^{-1}\frac{d\mathcal{X}}{d\xi} + (m+1)\frac{d\mathcal{X}}{d\xi} + (2m+1) \left[\frac{mc^{2}z_{0}^{-2m}}{(2m+1)^{2}} \right] z^{2m+1}x^{-1}\frac{d^{2}\mathcal{X}}{d\xi^{2}} = 0.$$

A equação diferencial que se obtém é

$$(2m+1)\xi\frac{\mathrm{d}\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi}+(m+1)\frac{\mathrm{d}\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi}+(2m+1)\xi\frac{\mathrm{d}^2\mathcal{X}}{\mathrm{d}\xi^2}=0.$$

As condições de contorno em $X(\xi)$ são as mesmas de antes:

$$X(0) = 1,$$

$$X(\infty) = 0.$$

Vale a pena, por simplicidade, escrever

$$\beta = (2m+1),$$

$$\delta = (m+1).$$

e então reduzir a ordem:

$$F = \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\xi},$$

$$\beta\xi\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\xi} + \beta\xi F + \delta F = 0.$$

Curiosamente, esta é também uma equação separável:

$$\begin{split} \beta \xi \mathrm{d}F + \beta \xi F \mathrm{d}\xi + \delta F \mathrm{d}\xi &= 0, \\ \beta \mathrm{d}F + \beta F \mathrm{d}\xi + \delta F \frac{\mathrm{d}\xi}{\xi} &= 0, \\ \beta \frac{\mathrm{d}F}{F} + \beta \mathrm{d}\xi + \delta \frac{\mathrm{d}\xi}{\xi} &= 0, \\ \frac{\mathrm{d}F}{F} &= -\left(1 + \frac{\delta}{\beta \xi}\right) \mathrm{d}\xi, \end{split}$$

Por simplicidade, vamos supor que F > 0, $\xi > 0$ (vai funcionar). Então,

$$\ln F = -\xi + \left(-\frac{\delta}{\beta}\ln(\xi)\right) + c_1$$

$$= -\xi + \ln(\xi)^{-\delta/\beta} + c_1,$$

$$F(\xi) = \exp\left(c_1 - \xi + \ln(\xi)^{-\delta/\beta}\right)$$

$$= k_1 e^{-\xi} \xi^{-\frac{\delta}{\beta}}.$$

Uma solução já está praticamente disponível:

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d} \mathcal{X}}{\mathrm{d} \xi} &= k_1 \mathrm{e}^{-\xi} \xi^{-\frac{\delta}{\beta}}; \\ \int_{\xi}^{\infty} \mathrm{d} \mathcal{X} &= k_1 \int_{\xi}^{\infty} \mathrm{e}^{-y} y^{-\frac{\delta}{\beta}} \, \mathrm{d} y; \\ \mathcal{X}(\infty) - \mathcal{X}(\xi) &= k_1 \int_{\xi}^{\infty} \mathrm{e}^{-y} y^{-\frac{\delta}{\beta}} \, \mathrm{d} y. \end{split}$$

Com um pouco de tarimba, é possível ver a função Gama completa:

$$\Gamma\left(1 - \frac{\delta}{\beta}\right) = \int_0^\infty e^{-y} y^{-\frac{\delta}{\beta}} dy.$$

Além disso, existe a Gama incompleta, cuja definição é

$$P(a,\xi) \equiv \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^{\xi} e^{-t} t^{a-1} dt.$$

Temos então, em termos dessas criaturas:

$$\mathcal{X}(\infty) - \mathcal{X}(\xi) = k_1 \left[\Gamma \left(1 - \frac{\delta}{\beta} \right) - \int_0^{\xi} e^{-y} y^{-\frac{\delta}{\beta}} dy \right]$$
$$= k_1 \Gamma \left(1 - \frac{\delta}{\beta} \right) \left[1 - P \left(1 - \frac{\delta}{\beta}, \xi \right) \right]$$
$$-\mathcal{X}(\xi) = k_1 \Gamma \left(1 - \frac{\delta}{\beta} \right) \left[1 - P \left(1 - \frac{\delta}{\beta}, \xi \right) \right].$$

Mas P(a, 0) = 0; com X(0) = 1 temos:

$$-1 = -\mathcal{X}(0) = k_1 \Gamma \left(1 - \frac{\delta}{\beta} \right),$$

$$k_1 = -\frac{1}{\Gamma \left(1 - \frac{\delta}{\beta} \right)},$$

e

$$\mathcal{X}(\xi) = 1 - P\left(1 - \frac{\delta}{\beta}, \xi\right) \blacksquare$$

Lição 7

Um problema parabólico não-linear

A equação de Boussinesq não-linear

A equação de Boussinesq para águas subterrâneas, adimensionalizada, tem a forma

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial \eta}{\partial x} \right).$$

As condições de contorno que utilizaremos são

$$\eta(0,t)=0, \qquad t\geq 0,$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial x}(1,t) = 0, \qquad t \ge 0.$$

A condição inicial que utilizaremos é *incompleta*, e envolve apenas um ponto do perfil inicial:

$$\eta(1,0) = 1;$$

em um problema linear tradicional, a condição correspondente seria

$$\eta(x,0) = f(x).$$

Conforme veremos, o problema tem solução analítica possível apenas para uma particular forma para f(x): as soluções que obteremos serão *auto-similares*. O que isso significa, e porque as soluções analíticas desse problema não-linear são apenas possíveis para particulares formas funcionais de f(x) ficará claro na sequência.

Tentaremos o método de separação de variáveis (que raramente funciona em problemas não-lineares — mais vai funcionar neste caso!)

$$\eta = X(x)T(t)$$

e substituímos na equação original, que nos dá

$$X\frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(XTT\frac{dX}{dx} \right)$$
$$X\frac{dT}{dt} = T^2 \frac{d}{dx} \left(X\frac{dX}{dx} \right)$$
$$\frac{1}{T^2} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{X} \frac{d}{dx} \left(X\frac{dX}{dx} \right) = c_1.$$

Num ambiente tradicional, procuraríamos agora o problema de Sturm-Liouville; no entanto, nenhuma das duas equações diferenciais que nós podemos obter a partir do método de separação de variáveis produz um problema de Sturm-Liouville! Estamos perdidos, e a Teoria de Sturm-Liouville não nos guiará para a solução. Precisaremos ser mais "empíricos", e ir tateando no rumo da solução. A equação ordinária em T é

$$\frac{dT}{T^2} = c_1 dt,$$

$$-\frac{1}{T} - c_2 = c_1 T$$

$$-\frac{1}{T} = c_2 + c_1 T$$

$$-T = \frac{1}{c_2 + c_1 T}$$

$$= \frac{1}{c_2 + c_1 T} \times \frac{c_2}{c_2}$$

$$= \frac{1}{c_2} \frac{1}{c_2 + c_1 t} \times \frac{1}{\frac{1}{c_2}}$$

$$= \frac{1}{c_2} \frac{1}{1 + \frac{c_1}{c_2} t} \equiv \frac{1}{c_2} \frac{1}{(1 + at)}.$$

Nesse ponto, nós "descobrimos" um tipo de solução que tem a forma

$$\eta = \frac{X/c_2}{-(1+at)}.$$

É claro que é conveniente mudarmos um pouco a forma da solução; sem perda de generalidade, fazemos

$$-F(x) \equiv \frac{X(x)}{c_2} \Rightarrow \eta(x,t) = \frac{F(x)}{1+at}.$$

Essa é a forma na qual procuraremos, a partir de agora, uma solução. Note também que, uma vez que a equação de Boussinesq que estamos tentando resolver é não linear, não há a possibilidade de somar (infinitos) termos de uma série: ou resolvemos o problema com uma única F(x), ou nada feito! Portanto, a solução apontada acima é uma solução *auto-similar*: a forma da superfície freática, F(x), uma vez atingida, não muda mais!

É nesse sentido que a solução que estamos obtendo não é suficientemente "geral": na verdade, nós estamos encontrando a solução de um problema após a superfície freática ter evoluído, desde uma forma inicial arbitrária f(x), para a forma auto-similar F(x) que se manterá até o fim do problema.

Prosseguindo,

$$\frac{1}{X} \frac{d}{dx} \left(X \frac{dX}{dx} \right) = c_1,$$

$$\frac{1}{\frac{-X}{c_2}} \frac{d}{dx} \left(\left(\frac{-X}{c_2} \right) \frac{d}{dx} \left(\frac{-X}{c_2} \right) \right) = -\left(\frac{c_1}{c_2} \right) = -a,$$

$$\frac{1}{F} \frac{d}{dx} \left(F \frac{dF}{dx} \right) = -a.$$

Com a ajuda de

$$F\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\frac{F^2}{2} \right),$$

ficamos com

$$\frac{1}{F} \frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{F^2}{2} \right) \right] = -a$$
$$\frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{F^2}{2} \right) \right] = -aF.$$

A substituição que se segue é à primeira vista um pouco estranha, mas válida!

$$p = \frac{d}{dx} \left(\frac{F^2}{2} \right),$$
$$\frac{dp}{dx} = -aF,$$
$$dx = \frac{d(F^2/2)}{p}.$$

A idéia é eliminar x (!), do que resulta

$$\frac{\mathrm{d}p}{\frac{\mathrm{d}(F^2/2)}{p}} = -aF,$$

$$p\mathrm{d}p = -aF(F\mathrm{d}F),$$

$$\frac{p^2}{2} = -a\frac{F^3}{3} + c_3.$$

Podemos agora reintroduzir a dependência em x; ao mesmo tempo, mudamos as variáveis de integração de x para ξ , e de F para y:

$$\left[\frac{dF^2/2}{dx}\right]^2 = -\frac{2a}{3}F^3 + 2c_3,$$

$$\frac{d}{d\xi}\left(\frac{y^2}{2}\right) = \left(2c_3 - \frac{2a}{3}y^3\right)^{1/2},$$

$$\frac{ydy}{\left(2c_3 - \frac{2a}{3}y^3\right)^{1/2}} = d\xi.$$

Agora, integramos para recuperar os símbolos x e F:

$$\int_0^F \frac{y \, \mathrm{d}y}{\left(2c_3 - \frac{2a}{3}y^3\right)^{1/2}} = \int_0^x d\xi$$
$$\int_0^{F(x)} \frac{y \, \mathrm{d}y}{\left(2c_3 - \frac{2a}{3}y^3\right)^{1/2}} = x.$$

Observe que o que é calculável é o lado *esquerdo*: portanto, é mais natural pensar em (quer dizer: calcular) x(F) do que F(x)!

As integrais acima dão conta das condições de contorno, mas ainda precisamos impor nossa "condição inicial" $\partial \eta(1,t)/\partial x=0$, que se traduz em

$$\frac{\mathrm{d}F(1)}{\mathrm{d}x} = 0.$$

Mas como não "temos" F(x), e sim x(F), nós vamos precisar da regra de Leibnitz:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}x = \int_{a}^{b} \frac{\partial f}{\partial t} \, \mathrm{d}x + f(b,t) \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} - f(a,t) \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}.$$

Para não interrompermos a narrativa interessante de obter a solução de uma E.D.P. não-linear, será melhor se aceitarmos a validade da regra de Leibniz por enquanto. Depois que tivermos resolvido o problema, voltaremos a ela, e a deduziremos. Seguindo,

$$1 = \frac{F}{\left(2c_3 - \frac{2a}{3}F^3\right)^{1/2}} \frac{dF}{dx},$$
$$\frac{dF}{dx} = \frac{\left(2c_3 - \frac{2a}{3}F^3\right)}{F}.$$

Porém,

$$F(1) = 1,$$
$$\frac{\mathrm{d}F(1)}{\mathrm{d}x} = 0,$$

donde

$$2c_3 - \frac{2a}{3} = 0 \implies c_3 = \frac{a}{3};$$

donde nós retornamos para

$$x = \int_0^{F(x)} \frac{y \, \mathrm{d}y}{\left(2c_3 - \frac{2a}{3}y^3\right)^{1/2}},$$
$$x = \left(\frac{3}{2a}\right)^{1/2} \int_0^{F(x)} \frac{y \, \mathrm{d}y}{(1 - y^3)^{1/2}}.$$

É claro que falta obter o valor de a; usando uma das condições de contorno,

$$\eta(1,0) = 1,$$

$$F(1) = 1,$$

$$1 = \left(\frac{3}{2a}\right)^{1/2} \int_0^1 y(1-y^3)^{-1/2} \, \mathrm{d}y.$$

O valor de a fica assim implicitamente determinado. Em termos de funções da Física Matemática, entretanto, é conveniente avançar um pouco mais, e utilizar a $função\ Beta$. Ela é definida por

$$B(p,q) = \int_0^1 u^{p-1} (1-u)^{q-1} du.$$

A função Beta é convenientemente tabelada (ou programada!) em diversas referências.

A comparação entre as duas últimas equações acima sugere imediatamente $u = y^3$; então,

$$y = u^{1/3},$$

$$dy = \frac{1}{3}u^{-2/3} du,$$

$$1 = \left(\frac{1}{6a}\right)^{1/2} \int_0^1 u^{-1/3} (1 - u)^{-1/2} du$$

$$1 = \left(\frac{1}{6a}\right)^{1/2} B(2/3, 1/2),$$

$$a = [B(2/3, 1/2)]^2/6.$$

Retornemos agora para o cálculo de x(F):

$$x = \left(\frac{3}{2a}\right)^{1/2} \int_0^{F(x)} y(1 - y^3)^{1/2} \, \mathrm{d}y$$

$$= \left(\frac{3 \times 6}{2[B(2/3, 1/2)]^2}\right)^{1/2} \int_0^{F(x)} y(1 - y^3)^{1/2} \, \mathrm{d}y$$

$$= \frac{3}{B(2/3, 1/2)} \int_0^{F(x)} y(1 - y^3)^{1/2} \, \mathrm{d}y$$

$$= \frac{1}{B(2/3, 1/2)} \int_0^{F^3(x)} u^{-1/3} (1 - u)^{-1/2} \, \mathrm{d}u.$$

A equação acima é uma função Beta incompleta $I_{F^3}(2/3,1/2)$ (veja Press et al., 1992, seção 6.4). Portanto,

$$x = I_{E^3}(2/3, 1/2)$$

A regra de Leibnitz

A regra de Leibnitz é

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}x = f(b,t) \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} - f(a,t) \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} + \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \, \mathrm{d}x.$$

Uma demonstração particularmente interessante da regra de Leibnitz é baseada em uma abordagem *lagrangeana* do significado da integral do lado esquerdo da equação acima. A idéia é interpretar que a(t) e b(t) são as posições de partículas materiais que, em t = 0, delimitam o intervalo $[\alpha, \beta]$ (veja a figura 7.1).

Agora, cada ponto desse intervalo também é uma partícula que descreve um movimento unidimensional do tipo

$$x = X(\xi, t),$$

onde ξ é a posição da partícula em t=0. Observe que ξ é um marcador que define qual é a partícula, entre α e β , cujo movimento está sendo descrito (veja a linha tracejada na figura 7.1). Em particular,

$$a(t) = X(\alpha, t), \qquad \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial X(\alpha, t)}{\partial t},$$

$$b(t) = X(\beta, t), \qquad \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial X(\beta, t)}{\partial t}$$

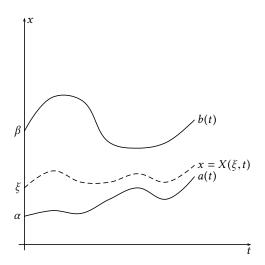


Figura 7.1: Uma dedução lagrangeana da regra de Leibnitz.

(veja a figura 7.1). A derivada total de $x = X(\xi, t)$ é

$$dx = \frac{\partial X}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial X}{\partial t} dt. \tag{7.1}$$

Para cada valor fixo de t, mudamos a variável de x para ξ , de modo que a integral do lado esquerdo da equação da regra de Leibnitz torna-se

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(X(\xi,t),t) \frac{\partial X}{\partial \xi} d\xi.$$

O integrando dessa expressão é uma função apenas de t, e os limites de integração, α e β , não dependem de t. Dessa forma, é possível agora fazer

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\alpha}^{\beta} f\left(X(\xi,t),t\right) \frac{\partial X}{\partial \xi} \,\mathrm{d}\xi = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\partial}{\partial t} \left[f\left(X(\xi,t),t\right) \frac{\partial X}{\partial \xi} \right] \,\mathrm{d}\xi
= \int_{\alpha}^{\beta} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(f\left(X(\xi,t),t\right) \right) \frac{\partial X}{\partial \xi} + f \frac{\partial^{2} X}{\partial t \partial \xi} \right] \,\mathrm{d}\xi
= \int_{\alpha}^{\beta} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(f\left(X(\xi,t),t\right) \right) \frac{\partial X}{\partial \xi} + f \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial X}{\partial t} \right] \,\mathrm{d}\xi.$$

Este é um ponto que requer cuidado! Observe:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(f\left(X(\xi,t),t\right)\right) = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t};$$

portanto,

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}t &= \int_{\alpha}^{\beta} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{\partial X}{\partial \xi} + f \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial X}{\partial t} \right] \, \mathrm{d}\xi \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \frac{\partial X}{\partial \xi} + f \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial X}{\partial t} \right) \frac{\partial X}{\partial \xi} \right] \, \mathrm{d}\xi. \end{split}$$

Note o surgimento de $\partial X/\partial t$: é conveniente dar-lhe um nome:

$$u(x,t) = u(X(\xi,t),t) \equiv \frac{\partial X(\xi,t)}{\partial t}.$$

É evidente que u indica a velocidade de cada partícula. Agora, nós voltamos de uma integral em ξ para uma integral em x:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}t = \int_{\alpha}^{\beta} \left[u \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial u}{\partial x} \right] \frac{\partial X}{\partial \xi} \, \mathrm{d}\xi$$

$$= \int_{\alpha}^{\beta} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (uf)}{\partial x} \right] \frac{\partial X}{\partial \xi} \, \mathrm{d}\xi$$

$$= \int_{a(t)}^{b(t)} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (uf)}{\partial x} \right] \, \mathrm{d}x$$

$$= u(x,t) f(x,t) \Big|_{a(t)}^{b(t)} + \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \, \mathrm{d}x.$$

Finalmente, em vista de nossas definições para u(t), a(t) e b(t),

$$\begin{split} u(a(t),t) &= \frac{\partial X(\alpha,t)}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}, \\ u(b(t),t) &= \frac{\partial X(\beta,t)}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t}; \end{split}$$

Com isso, nó obtemos, finalmente, a regra de Leibnitz:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{a(t)}^{b(t)} f(x,t) \, \mathrm{d}t = f(b,t) \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} - f(a,t) \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} + \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \, \mathrm{d}x =$$

A dedução acima nada mais é do que a versão unidimensional do *teorema do transporte de Reynolds* (Kundu, 1990, cap. 4): esse último desempenha um papel fundamental em Mecânica dos Fluidos.

A regra de Leibnitz é extremamente útil! Por exemplo, em Finnigan (2006), encontramos o seguinte trecho:

Generalizing the time averaging operator in Eq. (1) to a moving average filter, we define,

$$\overline{\phi(t)}^P = \frac{1}{2P} \int_{t-P}^{t+P} \phi(t') \, \mathrm{d}t'$$

...and it's straightforward to show that

$$\frac{\partial \, \overline{c}^{P}}{\partial t} = \overline{\frac{\partial c}{\partial t}}^{P} \dots$$

A prova depende da regra de Leibnitz: primeiramente,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{2P} \int_{-P}^{P} \frac{\partial c}{\partial \tau} d\tau$$
$$= \frac{1}{2P} \left[c(P) - c(-P) \right],$$

onde nós omitimos o sobrescrito P por simplicidade. Do outro lado da igualdade nós precisamos da regra de Leibnitz:

$$\begin{split} \frac{\partial \overline{c}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2P} \int_{t-P}^{t+P} c(\tau) \, \mathrm{d}\tau \\ &= \frac{1}{2P} \frac{\partial}{\partial t} \int_{t-P}^{t+P} c(\tau) \, \mathrm{d}\tau \\ &= \frac{1}{2P} \left[c(t+P) \frac{\mathrm{d}(t+P)}{\mathrm{d}t} - c(t-P) \frac{\mathrm{d}(t-P)}{\mathrm{d}t} \right] + \frac{1}{2P} \int_{t-P}^{t+P} \underbrace{\frac{\partial c(\tau)}{\partial t}}_{\equiv 0} \, \mathrm{d}\tau \\ &= \frac{1}{2P} \left[c(P) - c(-P) \right] \quad \blacksquare \end{split}$$

Lição 8

A Transformada de Fourier

A transformada de Fourier é uma das ferramentas mais poderosas de Matemática Aplicada. Ela é usada para decompor uma função de acordo não com o seu comportamento local ("f(x)"), mas com o comportamento sobre um conjunto de escalas (" $\widehat{f}(k)$ "), onde k é um número de onda (uma frequência angular). À medida que nos acostumarmos com o cálculo de transformadas de Fourier, e com suas propriedades, nós poderemos começar a "entender" o par $f(x) \leftrightarrow \widehat{f}(k)$ como duas faces de uma mesma moeda, ou seja: como uma única *entidade*, que nós usualmente identificamos no domínio do espaço-tempo (f(x)), mas que possui uma existência igualmente "real" e válida no domínio da frequência ($\widehat{f}(k)$).

Definição e o teorema da inversão

A transformada de Fourier será definida neste texto como

$$\mathscr{F}\lbrace f(x)\rbrace(k) = \widehat{f}(k) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \tag{8.1}$$

O resultado mais importante de toda a teoria, sem dúvida, é o

Teorema 8.1 (Teorema da inversão) Se $\widehat{f}(k)$ é definida por (8.1), então

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{f}(k) e^{ikx} dk.$$
 (8.2)

O cálculo de algumas transformadas

Esta é uma seção de "mãos à obra", com alguns cálculos de transformadas de Fourier resolvidos.

Calcule f(k) para

$$f(x) = e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2}.$$

A fração no argumento é para nos lembrarmos de que em geral, em aplicações, é preciso levar em consideração as dimensões físicas. Assim, se x é uma distância ao longo de uma reta,

$$[x] = [a] = L.$$

O cálculo padrão é

$$\widehat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} e^{-ikx} dx$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left[\left(\frac{x}{a}\right)^2 + ikx\right]} dx.$$

Aqui, o "truque" padrão é "completar o quadrado". Observe como x aparece com as potências 2 e 1 acima; a idéia é encontrar um binômio de x e uma constante que resulte em um quadrado perfeito. A técnica é sistemática:

$$(\alpha + \beta)^2 = \alpha^2 + 2\alpha\beta + \beta^2,$$

$$\alpha = \frac{x}{a},$$

$$2\alpha\beta = ikx,$$

donde

$$\beta = \frac{ikx}{2\alpha} = \frac{ikxa}{2x} = \frac{ika}{2},$$
$$\beta^2 = -\frac{k^2a^2}{4}.$$

Agora,

$$\left(\frac{x}{a}\right)^{2} + ikx = \left(\frac{x}{a}\right)^{2} + ikx - \frac{k^{2}a^{2}}{4} + \frac{k^{2}a^{2}}{4}$$
$$= \left(\frac{x}{a} + \frac{ika}{2}\right)^{2} + \frac{k^{2}a^{2}}{4}$$

A transformada desejada é

$$\widehat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{a} + \frac{ika}{2}\right)^2 - \frac{k^2a^2}{4}} dx$$
$$= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{a} + \frac{ika}{2}\right)^2} dx.$$

Essa não é uma integral elementar, e precisa ser calculada com um certo cuidado. Faça

$$z = \xi + i\eta = \frac{x}{a} + \frac{ika}{2}$$
, $dz = dx/a$,

e reescreva

$$\widehat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} a e^{-\frac{k^2 a^2}{4}} \int_{-\infty + \frac{ika}{2}}^{+\infty + \frac{ika}{2}} e^{-z^2} dz.$$

Essa é uma integral de *linha* no plano complexo; em primeiro lugar, note que neste exemplo a parte real de z não é x, mas sim $\xi = x/a$; a parte imaginária é η , e o caminho de integração é a reta $\eta = ka/2$. Em seguida, note que $g(z) = e^{-z^2}$ é uma função *analítica* em todo o plano

Em seguida, note que $g(z) = e^{-z^2}$ é uma função *analítica* em todo o plano $\xi \times \eta$, e portanto pelo Teorema de Cauchy qualquer integral em um contorno fechado de g(z) é nula. Em seguida, considere o contorno mostrado na figura 8.1.

Pelo Teorema de Cauchy, então,

$$\int_{ABCD} g(z) \, \mathrm{d}z = 0.$$

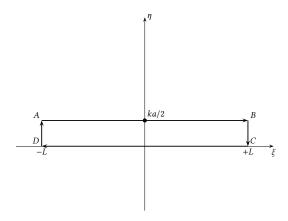


Figura 8.1: O contorno de integração de $g(z) = e^{-z^2}$.

O trecho CD produz uma integral puramente real, e bem conhecida no $\lim L \to \infty$:

$$\lim_{L \to \infty} \int_{CD} g(z) dz = \lim_{L \to \infty} \int_{+L}^{-L} e^{-x^2} dx = -\sqrt{\pi}.$$

A esperança aqui é que $\left|\int_{BC,DA}\right|\to 0$ quando $L\to\infty$, de tal maneira que a integral que precisamos calcular, $\int_{AB}g(z)\,\mathrm{d}z$, seja dada em função da integral conhecida $\int_{CD}g(z)\,\mathrm{d}z$.

A verificação não é muito difícil:

$$\left| \int_{BC} g(z) \, dz \right| \le \int_{BC} |g(z) \, dz|$$

$$= \int_{\eta=0}^{ka/2} \left| e^{-z^2} \right| \, dz$$

$$= \int_{\eta=0}^{ka/2} \left| e^{-(L+i\eta)^2} \right| \, d\eta$$

$$= \int_{\eta=0}^{ka/2} \left| e^{-(L^2+i2L\eta-\eta^2)} \right| \, d\eta$$

$$= e^{-L^2} \int_{\eta=0}^{ka/2} \left| e^{-i2L\eta} \right| \left| e^{-\eta^2} \right| \, d\eta$$

$$= e^{-L^2} \int_{\eta=0}^{ka/2} e^{-\eta^2} \, d\eta \to 0 \text{ quando } L \to \infty.$$

Por um procedimento similar,

$$\lim_{L \to \infty} \left| \int_{DA} f(z) \, \mathrm{d}z \right| = 0.$$

Consequentemente,

$$\int_{-\infty + ika/2}^{+\infty + ika/2} g(z) dz + \int_{+\infty}^{-\infty} e^{-x^2} dx = 0,$$

$$\int_{-\infty + ika/2}^{+\infty + ika/2} g(z) dz = -\int_{+\infty}^{-\infty} e^{-x^2} dx = +\sqrt{\pi}.$$

A transformada de Fourier desejada pode agora ser calculada, finalmente:

$$\widehat{f}(k) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\pi} a e^{-\frac{k^2 a^2}{4}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} a e^{-\frac{k^2 a^2}{4}}.$$

Se

$$f(x) = \frac{1}{1 + \left(\frac{x}{a}\right)^2} = \frac{a^2}{x^2 + a^2},$$

obtenha $\widehat{f}(k)$.

$$\widehat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{a^2}{x^2 + a^2} e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{a^2}{x^2 + a^2} \left[\cos(kx) - i \sin(kx) \right] dx$$

$$= \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1 + \left(\frac{x}{a}\right)^2} \cos\left(ka\frac{x}{a}\right) d\left(\frac{x}{a}\right),$$

pois o integrando envolvendo sen (\cdot) é uma função ímpar e a integral correspondente se anula.

Fazendo $\xi = x/a$,

$$\widehat{f}(k) = \frac{2a}{2\pi} \int_{\xi=0}^{\infty} \frac{\cos(ka\xi)}{1+\xi^2} \,\mathrm{d}\xi = \frac{a}{2} \mathrm{e}^{-|ka|} \,\blacksquare$$

Se

$$\widehat{g}(k) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi}, & |k| < k_0, \\ 0, & |k| > k_0, \end{cases}$$

calcule g(x).

$$g(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_0}^{+k_0} e^{+ikx} dk$$

$$= \frac{1}{2\pi i x} \int_{-k_0}^{+k_0} e^{+ikx} d(ikx)$$

$$= \frac{1}{2\pi i x} \left[e^{+ik_0 x} - e^{-ik_0 x} \right]$$

$$= \frac{1}{\pi x} \operatorname{sen}(k_0 x) \blacksquare$$

Calcule a transformada de Fourier de

$$f(x) = \begin{cases} 0, & |x| > 1; \\ x+1, & -1 \le x \le 0; \\ 1-x, & 0 < x \le 1. \end{cases}$$

Note que f é par.

$$\mathscr{F}\left\{f(x)\right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \left[\cos(kx) - i\sin(kx)\right] dx$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cos(kx) dx$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{1} f(x) \cos(kx) dx = \frac{1 - \cos k}{k^2} \blacksquare$$

Linearidade; a transformada das derivadas

A transformada de Fourier é linear: se f(x) e g(x) são duas funções transformáveis, então

$$\mathscr{F}\left\{\alpha f(x) + \beta g(x)\right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [\alpha f(x) + \beta g(x)] e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{\alpha}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx + \frac{\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) e^{-ikx} dx$$

$$= \alpha \widehat{f}(k) + \beta \widehat{g}(k). \tag{8.3}$$

Suponha que f(x) e $\widehat{f}(k)$ possuam um comportamento muito bom no infinito, de tal maneira que

$$\lim_{x \to +\infty} f(x) = 0,\tag{8.4}$$

$$\lim_{k \to +\infty} \widehat{f}(k) = 0. \tag{8.5}$$

Intuitivamente, essas condições são necessárias para a existência "clássica" das integrais (8.1) e (8.2). A integral (??), por outro lado, sugere que nós poderemos tomar liberdades consideráveis com transformadas de Fourier e ainda assim obter resultados corretos. Mas vamos aos poucos. Calculemos a transformada de Fourier da derivada de f(x), integrando por partes:

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \, \mathrm{d}x$$
$$= \frac{1}{2\pi} \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x) + (\mathrm{i}k) \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}x \right]_{-\infty}^{+\infty};$$

usando (8.4),

$$\mathscr{F}\left\{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right\} = \frac{\mathrm{i}k}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}x$$
$$= \mathrm{i}k \widehat{f}(k). \tag{8.6}$$

E é claro que isso pode ser estendido para a *n*-ésima derivada:

$$\mathscr{F}\left\{\frac{\mathrm{d}^n f}{\mathrm{d}x^n}\right\} = (\mathrm{i}k)^n \widehat{f}(k). \tag{8.7}$$

Juntas, a propriedade de linearidade (8.3) e a fórmula para as derivadas (8.7) vão permitir transformar equações diferenciais em algébricas. Esse é um dos grandes poderes da transformada de Fourier.

Uma relação oposta a (8.7) é ocasionalmente útil:

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{\mathrm{d}\widehat{f}}{\mathrm{d}k}\right\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \frac{\mathrm{d}\widehat{f}}{\mathrm{d}k} \, \mathrm{d}k$$
$$= \left[\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \widehat{f}(k) - (\mathrm{i}x) \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{f}(k) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k\right]_{-\infty}^{+\infty};$$

usando (8.5),

$$\mathscr{F}^{-1}\left\{\frac{\mathrm{d}\widehat{f}}{\mathrm{d}k}\right\} = -(\mathrm{i}x)\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{f}(k)\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k$$
$$= -\mathrm{i}xf(x). \tag{8.8}$$

Novamente, isso pode ser estendido para a *n*-ésima derivada:

$$\mathscr{F}^{-1}\left\{\frac{\mathrm{d}^n\widehat{f}}{\mathrm{d}k^n}\right\} = (-\mathrm{i}x)^n f(x). \tag{8.9}$$

Um grande problema

Utilizando a transformada de Fourier, resolva

$$\begin{split} \frac{\partial c}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \qquad -\infty < x < +\infty, \\ c(x,0) &= \frac{M}{A} \delta(x). \end{split}$$

Nas equações acima, M representa uma massa de soluto injetada instantaneamente em x=0; A possui dimensão de área, para fazer com que c possua dimensão de concentração volumétrica (ML⁻³).

A transformada de Fourier da equação diferencial é

$$\frac{\mathrm{d}\widehat{c}}{\mathrm{d}t} = (\mathrm{i}k)^2 D\,\widehat{c}$$

Note que usamos uma derivada ordinária em relação ao tempo, pois embora \widehat{c} seja função de k e t, não há derivadas de \widehat{c} em relação ao número de onda k. A EDO acima é de fácil solução:

$$\widehat{c}(k,t) = \widehat{c}_0 e^{-Dk^2t}.$$

Agora,

$$\widehat{c}_0 = \frac{M}{2\pi A} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = \frac{M}{2\pi A},$$

donde

$$\widehat{c}(k,t) = \frac{M}{2\pi A} e^{-Dk^2t}.$$

Agora, do nosso primeiro exemplo de cálculo de transformadas de Fourier, sabemos que

$$\frac{2\sqrt{\pi}}{a} e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} \leftrightarrow e^{-\frac{k^2 a^2}{4}},$$
$$\frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} \leftrightarrow \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{k^2 a^2}{4}}.$$

Logo,

$$Dt = \frac{a^2}{4},$$

$$a^2 = 4Dt,$$

$$a = 2\sqrt{Dt},$$

$$c(x,t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Dt}}e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \blacksquare$$

O Teorema da convolução

A convolução entre as funções f(x) e g(x) (no sentido da transformada de Fourier; não confundir com a operação de convolução associada à transformada de Laplace) é

$$[f * g](x) \equiv \int_{\xi = -\infty}^{+\infty} f(x - \xi)g(\xi) \,\mathrm{d}\xi. \tag{8.10}$$

Teorema 8.2 (Teorema da convolução).

$$\mathscr{F}\{f*g\} = 2\pi \widehat{f}(k)\widehat{g}(k). \tag{8.11}$$

A transformada de Fourier da convolução é

$$\mathscr{F}[f * g](k) = \frac{1}{2\pi} \int_{x=-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \int_{y=-\infty}^{+\infty} f(x-y)g(y) \, dy \, dx \qquad (8.12)$$

Faça

$$\begin{array}{ccc}
\xi = x - y \\
\eta = y
\end{array} \Rightarrow \begin{array}{c}
x = \xi + \eta \\
y = \eta
\end{array} (8.13)$$

Nesses casos, sempre comece calculando o jacobiano! O jacobiano da transformação de variáveis é

$$\left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1.$$
 (8.14)

Continuando,

$$\begin{split} \mathscr{F}\left[f*g\right](k) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\xi=-\infty}^{+\infty} \int_{\eta=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\xi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\eta} f(\xi) g(\eta) \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} \right| \mathrm{d}\eta \ \mathrm{d}\xi \\ &= 2\pi \left[\frac{1}{2\pi} \int_{\xi=-\infty}^{+\infty} f(\xi) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\xi} \, \mathrm{d}\xi \right] \left[\frac{1}{2\pi} \int_{\eta=-\infty}^{+\infty} g(\eta) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\eta} \, \mathrm{d}\eta \right] \\ &= 2\pi \widehat{f}(k) \widehat{g}(k) \, \blacksquare \end{split}$$

O Teorema da convolução possui uma versão "inversa":

Teorema 8.3 (Teorema da convolução, versão inversa):

$$\mathscr{F}^{-1}\left\{\widehat{f}(k)\ast\widehat{g}(k)\right\} = f(x)g(x). \tag{8.15}$$

Um dos aspectos mais interessantes da operação de convolução é o seu uso na definição e uso de filtros. Tecnicamente, a filtragem de uma função ϕ com um filtro G é dada pela operação

$$\widetilde{\phi}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - \xi)\phi(\xi) \,\mathrm{d}\xi = G(x) * \phi(x). \tag{8.16}$$

Em (8.16), nós vamos supor que

$$G(\pm \infty) = 0. \tag{8.17}$$

Um fato importantíssimo é que a operação de filtragem comuta com a derivada em relação a x:

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}\widetilde{\phi}}{\mathrm{d}x} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - \xi) \phi(\xi) \, \mathrm{d}\xi = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left[G(x) * \phi(x) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}G(x - \xi)}{\mathrm{d}x} \phi(\xi) \mathrm{d}\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{\mathrm{d}G(x - \xi)}{\mathrm{d}\xi} \right] \phi(\xi) \mathrm{d}\xi \\ &= -G(x - \xi) \phi(\xi) \bigg|_{\xi = -\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - \xi) \frac{\mathrm{d}\phi(\xi)}{\mathrm{d}\xi} \, \mathrm{d}\xi \end{split}$$

Em virtude de (8.17),

$$\frac{\mathrm{d}\widetilde{\phi}}{\mathrm{d}x} = G(x) * \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x} = \frac{\widetilde{\mathrm{d}\phi}}{\mathrm{d}x}.$$
 (8.18)

É trivial mostrar que

$$\frac{\mathrm{d}^n \widetilde{\phi}}{\mathrm{d}x^n} = G(x) * \frac{\mathrm{d}^n \phi}{\mathrm{d}x^n} = \underbrace{\widetilde{\mathrm{d}^n \phi}}_{\mathrm{d}x^n} \blacksquare$$
 (8.19)

Uma aplicação particularmente poderosa de filtragem é a utilização de soluções envolvendo a delta de Dirac para gerar soluções mais gerais. Por exemplo, considere o problema

$$\frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \widetilde{\phi}}{\partial x^2}, \qquad \widetilde{\phi}(x,0) = f(x), \qquad -\infty < x < +\infty.$$

Do exemplo ??, sabemos que

$$\phi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}.$$

é solução de

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2},$$
$$\phi(x, 0) = \delta(x).$$

Aplicamos agora a convolução com f(x) a todas as linhas acima:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} * f(x) = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} * f(x),$$

$$\frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \widetilde{\phi}}{\partial x^2},$$

$$\widetilde{\phi}(x, 0) = \phi(x, 0) * f(x) = \delta(x) * f(x) = f(x).$$

Mas esse é exatamente o problema que desejamos resolver. Logo,

$$\widetilde{\phi}(x,t) = \phi(x,t) * f(x) = \int_{\xi = -\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}} f(\xi) \,\mathrm{d}\xi \blacksquare$$

O Teorema de Parseval

O Teorema de Parseval é a contrapartida da igualdade de Parseval para séries de Fourier, obtida na seção ??.

Teorema 8.4 (Teorema de Parseval). Se f(x) e g(x) são duas funções reais da variável real x,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x) dx = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{f}(-k)\widehat{g}(k) dk.$$

A prova parte de

$$\widehat{f}(-k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{ikx} dx, \qquad \widehat{g}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx.$$

Então,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{f}(-k)\widehat{g}(k) \, \mathrm{d}k = \int_{k=-\infty}^{+\infty} \widehat{g}(k) \frac{1}{2\pi} \int_{x=-\infty}^{+\infty} f(x) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}k$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{x=-\infty}^{+\infty} f(x) \int_{k=-\infty}^{+\infty} \widehat{g}(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k \, \mathrm{d}x$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{x=-\infty}^{+\infty} f(x) g(x) \, \mathrm{d}x \, \blacksquare$$

A fórmula da inversa da transformada de Laplace

Considere a identidade

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{F}(\omega) e^{i\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{t=-\infty}^{+\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt \right] e^{+i\omega t} d\omega.$$
 (8.20)

Suponha agora

$$F(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ e^{-\gamma t} f(t), & t \ge 0. \end{cases}$$

Suponha também que f(t) seja "de ordem exponencial": $f(t) < K \mathrm{e}^{c\,t}$, para $\gamma > c$; então,

$$e^{-\gamma t} f(t) < K e^{(c-\gamma)t} = K e^{-(\gamma - c)t} \rightarrow 0$$

quando $t \to \infty$.

Agora, de (8.20),

$$e^{-\gamma t} f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\omega = -\infty}^{+\infty} \left[\int_{t=0}^{\infty} e^{-\gamma t} f(t) e^{-i\omega t} dt \right] e^{+i\omega t} d\omega,$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\omega = -\infty}^{+\infty} \left[\int_{t=0}^{\infty} f(t) e^{-\frac{(\gamma + i\omega)t}{s}} dt \right] e^{+\frac{(\gamma + i\omega)t}{s}} d\omega.$$

Fazendo $s=\gamma+\mathrm{i}\omega$ e notando que ω está variando para γ constante, d $s=\mathrm{id}\omega\Rightarrow$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{s=\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} \left[\int_{t=0}^{\infty} f(t) e^{-st} dt \right] ds,$$

e isso define a fórmula de inversão:

$$\overline{f}(s) \equiv \int_0^\infty f(t) e^{-st} dt, \qquad (8.21)$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{s=v-i\infty}^{s=\gamma+i\infty} e^{+st} \overline{f}(s) ds.$$
 (8.22)

Todas as singularidades de $\overline{f}(s)$ devem estar à esquerda da reta $z = \gamma$.

Lição 9

Difusão turbulenta

Em um escoamento turbulento, nem sempre está claro o que queremos dizer com uma "partícula". Em particular, existe uma grande de riquezas em escoamentos turbulentos "plenamente desenvolvidos", e uma forma de lidar com essa multitude de escalas é definir algumas grandemente diferentes. A escala integral é definida matematicamente em termos da função de autocorrelação $\varrho(x)$ (em geral da velocidade longitudinal):

$$\ell = \int_0^\infty \varrho(x) \, \mathrm{d}x.$$

A microescala de Taylor λ é definida em termos da curvatura de $\varrho(x)$ na origem:

$$-\frac{2}{\lambda} \equiv \frac{\mathrm{d}^2 \rho}{\mathrm{d}x^2} \bigg|_{x=0}.$$

Finalmente temos a microescala de Kolmogorov:

$$\eta = (v^3/\epsilon)^{1/4}.$$

As partículas clássicas de Mecânica dos Fluidos têm que ser de tamanho η (ou menores): elas só "veem" difusão molecular, e campos suaves a seu redor. Já "partículas" de tamanho λ ou ℓ veem difusão turbulenta, e um mundo consideravelmente mais "agitado" em seu redor.

Introduzimos aqui, agora, o conceito de "difusividade turbulenta". Se F é o fluxo turbulento de um escalar cuja concentração é c, a difusividade turbulenta K desse escalar em um ponto do escoamento é definida via

$$F \equiv -\overline{\rho}K\frac{\mathrm{d}\overline{c}}{\mathrm{d}z}.$$

As barras sobre as variáveis indicam médias de Reynolds (1895). Em geral a difusividade turbulenta é *modelada* utilizando-se ideias dimensionais simples, tais como

$$K = c\sigma_{w}\ell$$

onde σ_w é uma escala de velocidade (por exemplo, neste caso estamos pensando no desvio-padrão da velocidade vertical), e c é uma constante adimensional. O fluxo turbulento, ele próprio, é em geral definido em termos de covariâncias com a velocidade vertical, como em

$$F = \overline{\rho} \overline{w'c'}.$$

Prosseguimos agora para a Teoria de Difusão Turbulenta de Taylor. Fazemos isso acompanhando uma partícula (no sentido de Kolmogorov!) lagrangeanamente:

$$Z(t) = Z(0) + \int_0^t W(\tau) d\tau.$$

Sem perda de generalidade, suponhamos $Z(0) \equiv 0$ (sempre), e

$$\overline{Z(t)} = 0.$$

Nossas médias agora devem ser consideradas também de um ponto de vista lagrangeano, como médias sobre um grande número de partículas. Se $Z_i(t)$ é a posição da i-ésima partícula e estamos lançando um número N muito grande delas,

$$\overline{Z(t)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} Z_i(t).$$

Consideremos agora o desvio quadrático médio de Z(t) em relação à origem. Claramente, isso é uma medida de quanto o conjunto de partículas irá se "dispersar" em torno da origem. Interessam-nos as quantidades

$$\overline{Z^2(t)}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\overline{Z^2(t)} \right].$$

Prosseguindo,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\overline{Z^2(t)} \right] = 2 \overline{Z(t)} \frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}t}.$$

Mas

$$W(t) = \frac{dZ}{dt};$$

$$Z(t) = \int_{t'=0}^{t} W(t') dt'.$$

Segue-se que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\overline{Z^2(t)} \right] = 2\overline{Z(t)}\overline{W(t)}$$

$$= 2\overline{\left[\int_{t'=0}^t W(t') \, \mathrm{d}t' \right] W(t)}$$

$$= 2\int_0^t \overline{W(t')}\overline{W(t)} \, \mathrm{d}t'.$$

Agora, se W(t) for um processo estocástico estacionário,

$$\overline{W(t')W(t)} = \overline{W(0)W(t-t')} \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\overline{Z^2(t)} \right] = 2 \int_0^t \overline{W(0)W(t-t')\,\mathrm{d}t'}.$$

Para prosseguirmos precisaremos agora introduzir a *função de autocorrelação* lagrangeana:

$$\varrho_L(\tau) \equiv \frac{1}{W^2} \overline{W(t)W(t+\tau)},$$

em que estaremos supondo que $\overline{W^2}$, ao contrário de $\overline{Z^2(t)}$, não depende de t (que é a mesma hipótese de estacionariedade de W(t) que fizéramos antes.

Com isso, temos agora:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\overline{Z^2(t)} \right] = 2\overline{W^2} \int_0^t \varrho_L(\tau) \, \mathrm{d}\tau;$$

$$\overline{Z^2(t)} = 2\overline{W^2} \int_0^t \int_0^{t'} \varrho_L(\tau) \, \mathrm{d}\tau \mathrm{d}t'.$$

Prosseguimos, integrando por partes:

$$f(t') \equiv \int_0^{t'} \varrho_L(\tau) \, d\tau;$$

$$\int_0^t f(t') \, dt' = t' f(t') \Big|_0^t - \int_0^t t' \varrho_L(t') \, dt'; \Rightarrow$$

$$\overline{Z^2(t)} = 2\overline{W^2} \left[t \int_0^t \varrho_L(\tau) \, d\tau - \int_0^t t' \varrho_L(t') \, dt' \right]$$

$$= 2\overline{W^2} \left[t \int_0^t \varrho_L(\tau) \, d\tau - \int_0^t \tau \varrho_L(\tau) \, d\tau \right]$$

$$= 2\overline{W^2} t \int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t} \right) \varrho_L(\tau) \, d\tau.$$

Prosseguimos agora com uma *análise assintótica*. Para valores pequenos de *t*:

$$0 \le \tau \le t \Rightarrow \varrho_L(\tau) \approx 1 \Rightarrow$$

$$\int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) d\tau = \frac{t}{2},$$

donde:

t pequeno:
$$\overline{Z^2(t)} \approx \overline{W^2}t^2$$
.

Por outro lado, considere a definição da escala integral lagrangeana:

$$\mathscr{T}_L \equiv \int_0^\infty \varrho_L(\tau) \, \mathrm{d}\tau.$$

Consideraremos que t é "grande" quando $t \gg \mathcal{T}_L$. Desejamos provar que

$$\lim_{t\to\infty}\int_0^t \frac{\tau}{t}\varrho_L(\tau)\,\mathrm{d}\tau=0.$$

Também vamos precisar, a rigor, do *Teorema Ergódico*: se W(t), além de ser um processo estacionário, for ergódico, então teremos que

$$\lim_{\tau\to\infty}\varrho_L(\tau)=0.$$

2016-05-08T13:39:25 A dedução a seguir está totalmente errada. Para corrigila, precisaremos de:

(Zwillinger, 1992, II.16, p. 65)

(Comparison test for convergence) Let f(x) and g(x) be continuous for $a \le x \le b$ with $0 \le |f(x)| \le g(x)$. If $\int_a^b g(x) dx$ converges, then $\int_a^b f(x) dx$ converges, and

$$0 \le \left| \int_a^b f(x) \, \mathrm{d}x \right| \le \int_a^b g(x) \, \mathrm{d}x.$$

Na linguagem de ϵ 's e δ 's, o limite acima significa o seguinte: dado qualquer $\delta > 0$ (tão pequeno quanto desejarmos), é sempre possível achar um t_{δ} tal que

$$\tau > t_{\delta} \Rightarrow |\varrho(\tau)| \leq \delta.$$

Agora, dado um valor t qualquer ("arbitrariamente grande"), escolhemos

$$\delta = \frac{\mathscr{T}^2}{t^2}.$$

Em seguida, dividimos a nossa integral em

$$I_{1} = \int_{0}^{t_{\delta}} \left| \frac{\tau}{t} \varrho(\tau) \right| d\tau,$$

$$I_{2} = \int_{t_{\delta}}^{t} \left| \frac{\tau}{t} \varrho(\tau) \right| d\tau.$$

Sabemos agora que

$$\left| \int_0^t \frac{\tau}{t} \varrho_L(\tau) \, d\tau \right| \le \int_0^t \left| \frac{\tau}{t} \varrho(\tau) \right| \, d\tau$$
$$\le I_1 + I_2.$$

Mas:

$$I_{1} \leq \int_{0}^{t_{\delta}} \frac{\tau}{t} |\varrho(\tau)| d\tau$$

$$\leq \int_{0}^{t_{\delta}} \frac{\tau}{t} d\tau$$

$$\leq \int_{0}^{t_{\delta}} \frac{t_{\delta}}{t} d\tau = \frac{t_{\delta}^{2}}{t} \to 0 \text{ quando } t \to \infty.$$

Por outro lado,

$$\begin{split} I_2 &\leq \int_{t_\delta}^t \frac{\tau}{t} |\varrho(\tau)| \, \mathrm{d}\tau \\ &\leq \int_{t_\delta}^t \frac{\tau}{t} \delta \, \mathrm{d}\tau \\ &= \frac{\delta}{t} \int_{t_\delta}^t \tau \, \mathrm{d}\tau = \frac{\delta}{2t} \left[t^2 - t_\delta^2 \right] \\ &= \frac{\mathcal{T}^2}{2t} \left[1 - \frac{t_\delta^2}{t^2} \right] \to 0 \text{ quando } t \to \infty. \end{split}$$

Consequentemente, quando $t\gg \mathcal{T}$, podemos usar

$$\lim_{t\to\infty}\int_0^t \left(1-\frac{\tau}{t}\right)\varrho_L(\tau)\,\mathrm{d}\tau = \int_0^\infty \varrho_L(\tau)\,\mathrm{d}\tau = \mathcal{T}_L;$$

então,

$$\overline{Z^2(t)} \approx 2\overline{W^2}t\mathscr{T}_L \blacksquare$$

Em resumo, nossos resultados são:

$$Z^{\mathrm{rms}} = W^{\mathrm{rms}}t, \qquad \qquad t \ll \mathscr{T}_{L};$$

 $Z^{\mathrm{rms}} = W^{\mathrm{rms}}\sqrt{2\mathscr{T}_{L}t}, \qquad \qquad t \ll \mathscr{T}_{L}.$

Agora nós mudamos nosso foco para o caminho de partículas lagrangenas. Cada partícula tem uma função temporal de posição do tipo

$$\mathbf{x} = X(\boldsymbol{\xi}, t).$$

Nesta equação, ξ é a posição da partícula em t=0. Em outras palavras,

$$\xi = X(\xi, 0).$$

Portanto, em t=0 X é a identidade. Agora, na ausência de difusão, a equação de transporte de um escalar cuja concentração é c é

$$\frac{\mathrm{D}c}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = 0.$$

A solução dessa equação é

$$c(X(\xi,t),t) = c(\xi,0).$$

Neste ponto, precisamos introduzir a função densidade de probabilidade $P(\mathbf{x}, t | \boldsymbol{\xi})$. Ela dá a densidade de probabilidade de que a partícula, partindo de $\boldsymbol{\xi}$ em t=0, alcance \boldsymbol{x} no instante t. O valor esperado da concentração em (\boldsymbol{x},t) será então, simplesmente,

$$\overline{c}(\mathbf{x},t) = \int_{\mathbf{\xi} \in \mathbb{R}^3} c(\mathbf{\xi},0) P(\mathbf{x},t|\mathbf{\xi}) d^3 \mathbf{\xi}.$$

Em particular, se toda a massa M do escalar estiver concentrada em $\xi = 0$,

$$\begin{split} c(\xi,0) &= M\delta(\xi); \\ \overline{c}(\boldsymbol{x},t) &= \int_{\xi \in \mathbb{R}^3} M\delta(\xi) P(\boldsymbol{x},t|\xi) \mathrm{d}^3 \xi \\ &= MP(\boldsymbol{x},t|0). \end{split}$$

Em uma dimensão, devemos nos lembrar de que

$$Z(t) = \int_{t'=0}^{t} W(t') dt'.$$

Nós interpretaremos a expressão acima utilizando o Teorema Central do Limite, de forma muito pouco rigorosa. Nós vamos considerar que Z(t) é uma variável aleatória produzida pela "soma" de um grande número de variáveis W(t'). Pelo Teorema Central do Limite, Z(t) deve ter distribuição normal. Mas nós já sabemos que o valor esperado de Z(t) é zero, e que seu desvio-padrão é $Z^{\rm rms}$. Para tempos "grandes", faremos

$$Z^{\rm rms} = \sigma_Z = \sigma_w \sqrt{2\mathcal{T}_L t}.$$

Admitindo em seguida que Z seja uma variável aleatória gaussiana, obteremos, imediatamente,

$$\overline{c}(z,t) = \frac{M}{\sqrt{2\pi}\sigma_Z} \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_Z^2}\right].$$

Esse resultado pode ser facilmente generalizado para 3 dimensões:

$$\overline{c}(x,y,z,t) = \frac{M}{(2\pi)^{3/2}\sigma_X\sigma_Y\sigma_Z} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma_X^2}\right] \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_Y^2}\right] \exp\left[-\frac{z^2}{2\sigma_Z^2}\right].$$

Por outro lado, no nosso capítulo passado (sobre a Transformada de Fourier), nós encontramos a solução do problema difusivo

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} = K_{zz} \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial z^2}; \qquad c(z,0) = M\delta(z); \qquad \lim_{z \to \pm \infty} = 0;$$

ela é

$$\overline{c}(z,t) = \frac{M}{\sqrt{4K_{zz}\pi t}} \exp\left[-\frac{z^2}{4K_{zz}t}\right]$$

Constatamos, com grande satisfação, que as soluções lagrangeana e euleriana do problema têm a mesma forma! Isso nos permite escrever uma expressão para a difusividade turbulenta K_{zz} . Para que os resultados sejam iguais,

$$2\sigma_Z^2 = 4K_{zz}t,$$

$$4\overline{W^2}\mathcal{T}_L t = 4K_{zz}t$$

$$K_{zz} = \overline{W^2}\mathcal{T}_L \blacksquare$$

Na sequência, nós vamos "construir" uma série de soluções de problemas de dispersão baseadas na técnica que apresentamos. Nossa primeira adaptação será considerar o problema *permanente*

$$\overline{u}\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = K_{zz}\frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial z^2}.$$

Formalmente, esta é uma equação de difusão similar à anterior, porém com t substituído por x/\overline{u} . Nossa condição inicial, entretanto, precisa ser especificada agora em x=0. Ela será (Kumar e Sharan, 2010, eq. (2.5))

$$\overline{c}(x=0,z) = \frac{q}{\overline{u}}\delta(z).$$

Nós podemos encontrar uma primeira solução para uma injeção contínua de massa de poluente $q([\![q]\!] = M_p \mathsf{T}^{-1})$ por meio de substituição simples:

$$\overline{c}(x,z) = \frac{q}{\overline{u}\sqrt{4\pi K_{zz}(x/\overline{u})}} \exp\left[-\overline{u}\frac{z^2}{4K_{zz}x}\right].$$

Esta é uma expressão muito mais "útil" em estudos de dispersão, que em geral são feitos para períodos de cerca de 1 h em condições "permanentes". A sua generalização mais ou menos óbvia para incluir o eixo dos y's é

$$\overline{c}(x,z) = \frac{q}{4\pi x \sqrt{K_{yy}K_{zz}}} \exp\left[-\frac{\overline{u}}{4x}\left(\frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}}\right)\right].$$

Difusão longitudinal: considere agora

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = K_{xx} \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial x^2},$$
$$\overline{c}(x,0) = \frac{M}{A} \delta(x).$$

Podemos tentar "adivinhar a solução" argumentando que, se \overline{u} for constante, no sistema de coordenadas $x' \times t$ com

$$x' = x - \overline{u}t$$

nós voltamos para a equação de difusão pura

$$\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial t} = K_{xx} \frac{\partial^2 \overline{\chi}}{\partial x'^2}.$$

Vamos tentar ganhar algum insight. Sejam

$$x = x' + ut,$$

$$\chi(x', t) = c(\underbrace{x' + ut}_{x}, t),$$

$$\frac{\partial \chi(x', t)}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t},$$

$$\frac{\partial \chi(x', t)}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x};$$

$$\frac{\partial^{2} \chi}{\partial x'^{2}} = K_{zz} \frac{\partial^{2} c}{\partial x^{2}}.$$

Portanto, de fato teremos

$$\frac{\partial \overline{\chi}}{\partial t} = K_{xx} \frac{\partial^2 \overline{\chi}}{\partial x'^2},$$
$$\overline{\chi}(x',0) = \overline{c}(x,0) = \frac{M}{A} \delta(x')$$

A solução é a conhecida

$$\overline{\chi}(x',t) = \frac{M}{A\sqrt{4K_{xx}\pi t}} \exp\left[-\frac{(x')^2}{4K_{xx}t}\right];$$

$$\overline{c}(x,t) = \frac{M}{A\sqrt{4K_{xx}\pi t}} \exp\left[-\frac{(x-\overline{u}t)^2}{4K_{xx}t}\right].$$

Finalmente, para a equação

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = K_{xx} \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial x^2} + K_{zz} \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial z^2},$$
$$\overline{c}(x, z, 0) = \frac{M}{L_y} \delta x \delta z$$

poderemos "adivinhar" a solução

$$\overline{c}(x,z,t) = \frac{M}{L_y \sqrt{4\pi K_{xx}t} \sqrt{4\pi K_{zz}t}} \exp\left[\frac{(x-\overline{u}t)^2}{4K_{xx}t} + \frac{z^2}{4K_{zz}t}\right]?$$

Aparentemente não, e ela está errada.

Lição 10

Um problema parabólico cilíndrico

Considere um anel cilíndrico com altura h, raio r, e espessura Δr "cravado" (virtualmente) no solo. A equação de balanço de massa para este volume de controle é

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho \, dV + \oint_{S} \rho(\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \, dS = 0. \tag{10.1}$$

A massa de água dentro do anel é

$$\int_{V} \rho \, dV = f \rho \left(2\pi r \Delta r h \right), \tag{10.2}$$

onde ρ é a massa específica da água (aqui suposta constante), e f é a porosidade do solo

Suponha por simplicidade que o fluxo médio \boldsymbol{u} é horizontal e perfeitamente radial, sendo dado pela lei de Darcy na forma

$$u_r = -k\frac{\partial h}{\partial r}. ag{10.3}$$

A integral de superfície será então

$$\oint_{S} \rho(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{u}) \, dS = 2\pi \rho \left\{ \left[-shk \frac{\partial h}{\partial s} \right]_{s=r+\Lambda r} + \left[shk \frac{\partial h}{\partial s} \right]_{s=r} \right\}$$
(10.4)

Donde

$$\frac{\partial}{\partial t} (2\pi f \rho r h) = \frac{\left[(r + \Delta r) h (h + \Delta r) k \frac{\partial h (r + \Delta r)}{\partial r} - r h (r) k \frac{\partial h (r)}{\partial r} \right]}{\Delta r}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left[r h \frac{k}{f} \frac{\partial h}{\partial r} \right] \tag{10.5}$$

Esta é a equação de Boussinesq, não-linear, para escoamento em solo. A linearização óbvia aqui é fazer $h=\bar{h}$ no termo intermediário do lado direito, obtendo-se

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\overline{h}k}{f} r \frac{\partial h}{\partial r} \right]$$
 (10.6)

A partir deste ponto fazemos $\alpha^2 = \overline{h}k/f$, e nos concentramos na solução de um problema linear. O problema que escolhemos é manter um cilindro de raio b e

altura H de solo inicialmente seco, rodeado por solo uniformemente saturado até a altura H. O problema se torna

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \alpha^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial h}{\partial r} \right]$$

com

$$h(r,0) = 0,$$
 $0 \le r \le b,$
 $h(b,t) = H,$
 $\frac{\partial h(0,t)}{\partial r} = 0.$

Uma das condições de contorno (em r=0) é homogênea (derivada nula), mas a outra (em r=b) não. Isso entretanto pode ser facilmente remediado, fazendo

$$h(r,t) = H + u(r,t),$$

o que produz

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial u}{\partial r} \right]$$

e

$$u(r,0) = -H, \qquad 0 \le r \le b,$$
 (10.7)

$$u(b,t) = 0, (10.8)$$

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial r} = 0. ag{10.9}$$

Substituindo

$$u(r,t) = RT$$

na equação diferencial,

$$\frac{\partial RT}{\partial t} = \alpha^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial RT}{\partial r} \right]$$

$$RT' = \frac{\alpha^2}{r} \frac{\partial rTR'}{\partial r}$$

$$RT' = \frac{a^2T}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dR}{dr} \right]$$

$$\frac{1}{\alpha^2} \frac{T'}{T} = \frac{1}{rR} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dR}{dr} \right] = -\lambda.$$

O sinal de menos em λ é arbitrário. Seria possível atacar diretamente o problema de Sturm-Liouville em R; resolvendo em vez disso para T, entretanto, obtemos

$$T(t) = T_0 e^{-\lambda \alpha^2 t}.$$

Usar $\lambda<0$ produz uma solução que explode quando $t\to\infty$, o que não é físico; usar $\lambda=0$ produz uma solução independente de t, o que também não é. Portanto, usaremos $\lambda>0$. O problema de Sturm-Liouville em R será

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left[r \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} \right] + \lambda r R = 0,$$

com condições de contorno homogêneas padrão:

$$\frac{\partial R(0)}{\partial r} = 0,$$

$$R(b) = 0.$$

é evidente que, na forma padrão da equação de Sturm-Liouville, temos p(r)=r, q(r)=0 e w(r)=r. Expandindo,

$$\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}r^2} + \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + \lambda R = 0$$

que deve ser comparada à equação geral de Bessel de ordem μ :

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x} \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} + \left(1 - \frac{\mu^2}{x^2}\right) y = 0$$

Fazemos portanto $\lambda = k^2$, e dividimos a equação em R por k^2 :

$$\frac{d^{2}R}{d(kr)^{2}} + \frac{1}{(kr)}\frac{dR}{d(kr)} + R = 0,$$

que está, agora, na forma de uma equação diferencial de Bessel de ordem zero.

A solução geral é da forma

$$R(r) = AJ_0(kr) + BY_0(kr),$$

e deve atender às condições de contorno homogêneas. Vamos nos recordar das formas de $J_0(kr)$, e $Y_0(kr)$.

A figura 10.1 mostra as funções J_0 e Y_0 . $Y_0(kr)$ possui uma singularidade logaritmica, e não pode atender à condição de derivada nula em r=0, a não ser que B=0. E quanto à derivada de J_0 em r=0? Uma rápida consulta a Abramowitz e Stegun (1972) (equação 9.1.10) fornece a série

$$J_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x^2/4)^k}{(k!)^2}.$$

Os expoentes de x são todos pares; $J_0(x)$ é uma função par, e $J_0'(0) = 0$. Portanto, $J_0(kr)$ atende à condição de contorno em r = 0. A condição de contorno homogênea em r = b requer

$$I_0(kb) = 0$$
:

Os autovalores $\lambda_n = k_n^2$ serão os *zeros* da função de Bessel de primeiro tipo, e ordem zero. Os 20 primeiros autovalores são dados por (Abramowitz e Stegun, 1972, Tabela 9.5, $1^{\frac{a}{2}}$ coluna) e reproduzidos na tabela 10.1

Com os autovalores em mãos, nós prosseguimos para obter a solução em série do problema. Ela será

$$h(r,t) = H + \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-k_n^2 \alpha^2 t} J_0(k_n r)$$

Em particular, como os $k_n b$ são os zeros de $J_0(x)$,

$$h(b,t) = H + \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-k_n^2 \alpha^2 t} \underbrace{J_0(k_n b)}_{=0} = 0.$$

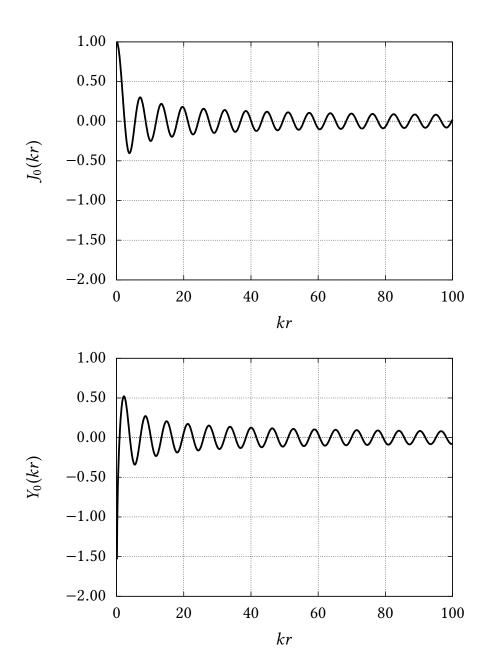


Figura 10.1: Funções de Bessel de ordem 0

Tabela 10.1: 20 primeiros zeros de $J_0(x)$.			
n	$k_n b$	n	$k_n b$
1	2,4048255577	11	33,7758202136
2	5,5200781103	12	36,9170983537
3	8,6537279129	13	40,0584257646
4	11,7915344391	14	43,1997917132
5	14,9309177086	15	46,3411883717
6	18,0710639679	16	49,4826098974
7	21,2116366299	17	52,6240518411
8	24,3524715308	18	55,7655107550
9	27,4934791320	19	58,9069839261
10	30.6346064684	20	62.0484691902

Tabela 10.1: 20 primeiros zeros de $I_0(x)$.

Finalmente, precisamos calcular os coeficientes A_n , o que fazemos impondo a condição inicial do problema:

$$h(r,0) = H + \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(k_n r) = 0$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(k_n r) = -H$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} A_n \int_{r=0}^{b} r J_0(k_n r) J_0(k_m r) dr = -H \int_{r=0}^{b} r J_0(k_m r) dr$$

$$A_m \int_{r=0}^{b} r J_0^2(k_m r) dr = -H \int_{r=0}^{b} r J_0(k_m r) dr.$$

A última linha foi obtida, como de costume, invocando a ortogonalidade das autofunções do problema de Sturm-Liouville.

Para calcular as duas integrais restantes, são necessários dois resultados padrão da teoria de funções de Bessel. O primeiro é (Jeffrey, 1995, 17.13.1.1-4)

$$\int_0^1 x J_n^2(ax) \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2} J_{n+1}^2(a), \ J_n(a) = 0.$$

Fazendo r = xb, dr = bdx, (e impondo $k_m = a/b$ na segunda linha abaixo):

$$\int_{r=0}^{b} \frac{r}{b} J_n^2(a \frac{r}{b}) \frac{dr}{b} = \frac{1}{2} J_{n+1}^2(a)$$
$$\int_{r=0}^{b} r J_n^2(k_m r) dr = \frac{b^2}{2} J_{n+1}^2(k_m b).$$

Já para a integral do lado direito, nós aplicamos diretamente a fórmula (Jeffrey, 1995, 17.12.1.1-1)

$$\int x J_0(ax) dx = \frac{x}{a} J_1(ax) \implies$$

$$\int_0^b r J_0(k_m r) dr = \frac{b}{k_m} J_1(k_m b),$$

donde

$$A_{m} \frac{b^{2}}{2} J_{1}^{2}(k_{m}b) = -H \frac{b}{k_{m}} J_{1}(k_{m}b),$$

$$A_{m} = -\frac{2H}{k_{m}b} \frac{1}{J_{1}(k_{m}b)},$$

$$h(r,t) = H - \frac{2H}{b} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-k_{n}^{2}\alpha^{2}t} \frac{J_{0}(k_{n}r)}{k_{n}J_{1}(k_{n}b)} \blacksquare$$

Lição 11

Introdução ao método das características

Considere a equação diferencial parcial de ordem 1

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \tag{11.1}$$

$$u(x,0) = g(x) \tag{11.2}$$

com c = constante. Suponha que t = T(s), x = X(s), e aplique a fórmula da derivada total; com u = U(s), temos:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial u}{\partial t}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}s}.$$
 (11.3)

Comparando (11.1) com (11.3):

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} = 1,\tag{11.4}$$

$$\frac{dT}{ds} = 1,$$

$$\frac{dX}{ds} = c,$$
(11.4)

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = 0,\tag{11.6}$$

com

$$U(s = 0) = u(X(0), T(0)) = g(X(0)).$$
(11.7)

A integração de (11.4)- (11.6) produz

$$T(s) = s + T(0);$$
 (11.8)

$$X(s) = cs + X(0);$$
 (11.9)

$$U(s) = \text{cte} = U(0) = g(X(0)).$$
 (11.10)

Na figura 11.1, note que é razoável fazer T(0) = 0, ou seja: impor que as origens de t e de s coincidam. Mas agora a máquina do cálculo diferencial e integral entra em ação, e nós nos tornamos apenas mecânicos!

$$u(x,t) = U(s)$$

$$= g(X(0))$$

$$= g(X(s) - cs)$$

$$= g(x - ct).$$
(11.11)

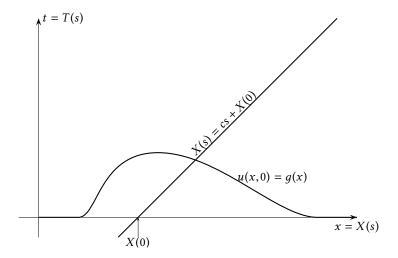


Figura 11.1: O método das características para a propagação de uma onda com celeridade constante c.

A solução é uma equação de onda: a forma da condição original, g(x), simplesmente se translada ao longo do tempo: veja a figura 11.1.

Resolva

$$\frac{\partial u}{\partial t} + t \frac{\partial u}{\partial x} = xt, \qquad u(x,0) = g(x)$$

com o método das características.

Faça u = U(s), x = X(s) e t = T(s) e escreva a derivada total:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}s};$$

Comparando,

$$\frac{dU}{ds} = X(s)T(s),$$

$$\frac{dT}{ds} = 1,$$

$$\frac{dX}{ds} = T(s).$$

Resolvendo o sistema acoplado,

$$T(s) = s = t;$$

$$\frac{dX}{ds} = s,$$

$$X(s) = \frac{1}{2}s^2 + X(0),$$

$$\frac{dU}{ds} = \left[\frac{1}{2}s^2 + X(0)\right]s,$$

$$= \frac{1}{2}s^3 + X(0)s;$$

$$U(s) = \frac{1}{8}s^4 + \frac{X(0)}{2}s^2 + U(0).$$

Mas:

$$U(0) = U(X(0), 0) = g(X(0));$$

$$U(s) = \frac{1}{8}s^4 + \frac{X(0)}{2}s^2 + g(X(0)).$$

Basta agora escrever:

$$X(0) = X(s) - \frac{1}{2}s^{2},$$

$$U(s) = \frac{1}{8}s^{4} + \frac{(X(s) - (1/2)s^{2})}{2}s^{2} + g\left(X(s) - (1/2)s^{2}\right);$$

$$u(x,t) = t^{4}/8 + (xt^{2}/2) - (t^{4}/4) + g(x - t^{2}/2) \blacksquare$$

Resolva

$$\frac{\partial u}{\partial x} + x^2 \frac{\partial u}{\partial y} = -yu \qquad u(0, y) = f(y),$$

com o método das características.

Faça u = U(s), y = Y(s) e x = X(s), e escreva a derivada total:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}s};$$

comparando,

$$\frac{dU}{ds} = -Y(s)U(s),$$

$$\frac{dX}{ds} = 1,$$

$$\frac{dY}{ds} = X(s)^{2}.$$

Resolvendo agora o sistema acoplado, impondo X(0) = 0,

$$X(s) = s;$$

$$\frac{dY}{ds} = s^{2},$$

$$Y(s) = \frac{1}{3}s^{3} + Y(0);$$

$$\frac{dU}{ds} = -\left[\frac{1}{3}s^{3} + Y(0)\right]U(s),$$

$$\frac{dU}{U} = -\left[\frac{1}{3}s^{3} + Y(0)\right]ds,$$

$$\ln\frac{U(s)}{U(0)} = -\left[\frac{1}{12}s^{4} + Y(0)s\right].$$

A condição inicial U(0) é obtida "mecanicamente":

$$U(0) = u(0, Y(0)) = f(Y(0)) = f(y - x^3/3),$$

onde nós já substituímos x = X(s) = s. Utilizando Y(0) mais uma vez:

$$u(x,y) = f(y - x^3/3) \exp\left[-\frac{1}{12}x^4 - (y - x^3/3)x\right]$$
$$= f(y - x^3/3) \exp\left[-yx + \frac{1}{4}x^4\right] \blacksquare$$

A "condição inicial" do método das características $não\ precisa\ ser\ em\ t=0.$ Considere o seguinte problema:

Seja

$$t\frac{\partial u}{\partial t} + x\frac{\partial u}{\partial x} = xt$$

com u=1 na curva $\Gamma: x+t=1$. Mostre que a solução é $U(s)=1+\frac{X_0T_0}{2}\left[\mathrm{e}^{2s}-1\right]$ sobre cada curva característica dada por $X(s)=X_0\mathrm{e}^s,\ T(s)=T_0\mathrm{e}^s,\ X_0+T_0=1$.

Suponha X = X(s), T = T(s) partindo de um ponto qualquer da curva $X_0 + T_0 = 1$ em uma direção transversal à mesma. Sobre a curva característica, U = U(s), e comparamos:

$$t\frac{\partial u}{\partial t} + x\frac{\partial u}{\partial x} = xt,$$
$$\frac{dT}{ds}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{dX}{ds}\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{dU}{ds}.$$

Obtemos:

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}s} &= X \Rightarrow X(s) = X_0 \mathrm{e}^s, \\ \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} &= T \Rightarrow T(s) = T_0 \mathrm{e}^s, \\ \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} &= XT = X_0 T_0 \mathrm{e}^{2s} \Rightarrow U(s) - U_0 = X_0 T_0 \left[\mathrm{e}^{2s}/2 - 1/2 \right]; \\ U(0) &= 1 \Rightarrow U_0 = 1; \\ U(s) &= 1 + X_0 T_0 \left[\mathrm{e}^{2s}/2 - 1/2 \right], \end{split}$$

 $com X_0 + T_0 = 1$

Considere agora, novamente,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, t)u \tag{11.12}$$

onde c(x, t) e f(x, t) são funções não especificadas de x e de t.

Faça u = U(s), x = X(s), t = T(s); então,

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}s}.$$

Comparando,

$$\frac{dU}{ds} = f(X(s), T(s))U(s),$$

$$\frac{dT}{ds} = 1,$$

$$\frac{dX}{ds} = c(X(s), T(s)).$$

Como sempre, t = T(s) = s; substituindo em X, temos a equação de uma linha característica no plano xt:

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = c(X, t),$$

cuja solução é da forma

$$X(t) = X(0) + \int_{\tau=0}^{t} c(X(\tau), \tau) d\tau.$$

Note que essa última equação ainda é *implícita* em X(t), mas isso não importa! O importante aqui é que podemos obter *em princípio* uma *família* de curvas em função do parâmetro X(0).

A forma de (11.12) é o mais importante aqui (sem "conhecermos" c(x,t), é impossível "resolver" completamente o problema): na próxima seção, nós vamos nos inspirar em (11.12) para generalizar o método das características para situações em que $\boldsymbol{u}(x,t)$ é um vetor, e aplicar essa generalização para classificar equações diferenciais parciais.

Utilizando o método das características, resolva

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \beta k \frac{\partial u}{\partial k} - \beta u + \nu k^2 u = 0, \qquad u(k,0) = f(k)$$

para u(k, t).

Suponha u = U(s), t = T(s), k = K(s):

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial u}{\partial k} \frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}s},$$

donde

$$\frac{dT}{ds} = 1,$$

$$\frac{dK}{ds} = -\beta K,$$

$$\frac{dU}{ds} = \beta U - vK^2 U.$$

Encontre: T=s (sem perda de generalidade, a constante de integração T(0)=0), $K(s)=\xi \mathrm{e}^{-\beta s}$. Agora, $K^2(s)=\xi^2\mathrm{e}^{-2\beta s}$, e

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}s} = \beta U - v \xi^2 \mathrm{e}^{-2\beta s} U.$$

Esta entretanto é uma equação separável:

$$\frac{dU}{U} = \beta ds - v\xi^2 e^{2\beta s} ds$$

$$\int_{u(\xi,0)}^{u(\xi,t)} \frac{dU}{U} = \int_0^t \beta ds - v\xi^2 e^{2\beta s} ds$$

$$\ln \frac{u(\xi,t)}{f(\xi)} = \beta t - \frac{v\xi^2}{2\beta} \left[1 - e^{-2\alpha t} \right]$$

$$u(k,t) = f(k) \exp \left[\beta t - \frac{vk^2 e^{2\beta t}}{2\beta} \left(1 - e^{-2\beta t} \right) \right]$$

$$u(k,t) = f(k) \exp \left[\beta t - \frac{vk^2}{2\beta} \left(e^{2\beta t} - 1 \right) \right] \blacksquare$$

Resolva a equação diferencial

$$\frac{\partial \psi}{\partial \kappa} + \alpha \kappa^{-5/3} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\left[\frac{5}{3} \kappa^{-1} + 2\alpha \kappa^{1/3}\right] \psi; \qquad \psi(\kappa, 0) = f(\kappa)$$

(onde α é uma constante, e $f(\kappa)$ é uma condição inicial conhecida), transformando o lado esquerdo na derivada total $d\psi/d\kappa$, identificando as linhas características, e integrando.

Este é obviamente um problema para ser resolvido pelo método das características; compare:

$$\begin{split} -\left[\frac{5}{3}\kappa^{-1} + 2\alpha\kappa^{1/3}\right]\psi &= \frac{\partial\psi}{\partial\kappa} + \alpha\kappa^{-5/3}\frac{\partial\psi}{\partial\tau},\\ \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\kappa} &= \frac{\partial\psi}{\partial\kappa} + \frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}\kappa}\frac{\partial\psi}{\partial\tau}. \end{split}$$

A equação característica é

$$\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}\kappa} = \alpha\kappa^{-5/3},$$

$$d\tau = \alpha\kappa^{-5/3} d\kappa,$$

$$\int_0^{\tau} dt = \alpha \int_{\gamma}^{\kappa} k^{-5/3} dk.$$

Note que na notação utilizada χ é a configuração de κ em $\tau=0$; integrando:

$$\tau = \frac{3\alpha}{2} \left[\chi^{-2/3} - \kappa^{-2/3} \right],$$

$$\frac{2\tau}{3\alpha} = \chi^{-2/3} - \kappa^{-2/3},$$

$$\chi^{-2/3} = \frac{2\tau}{3\alpha} + \kappa^{-2/3},$$

$$\chi(\kappa, \tau) = \left[\frac{2\tau}{3\alpha} + \kappa^{-2/3} \right]^{-3/2}.$$

De fato: $\tau = 0 \Rightarrow \chi = \kappa$. Agora integramos em κ :

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\kappa} = -\left[\frac{5}{3}\kappa^{-1} + 2\alpha\kappa^{1/3}\right]\psi,$$

$$\frac{d\psi}{\psi} = -\left[\frac{5}{3}\kappa^{-1} + 2\alpha\kappa^{1/3}\right]d\kappa,$$

$$\int_{f(\chi)}^{\psi(\kappa,\tau)} \frac{du}{u} = -\int_{\chi}^{\kappa} \left[\frac{5}{3}k^{-1} + 2\alpha k^{1/3}\right]dk,$$

$$\ln\frac{\psi(\kappa,\tau)}{f(\chi)} = -\frac{5}{3}\int_{\chi}^{\kappa} \frac{dk}{k} - 2\int_{\chi}^{\kappa} k^{1/3}dk,$$

$$\ln\frac{\psi(\kappa,\tau)}{f(\chi)} = -\frac{5}{3}\ln\frac{\kappa}{\chi} - \frac{3}{2}\left[\kappa^{4/3} - \chi^{4/3}\right],$$

$$\psi(\kappa,\tau) = f(\chi)\left(\frac{\kappa}{\chi}\right)^{-5/3} \exp\left[-\frac{3}{2}\left(\kappa^{4/3} - \chi^{4/3}\right)\right] \blacksquare$$

Resolva o problema de valor inicial

$$3x\frac{\partial u}{\partial x} + 3\frac{\partial u}{\partial y} = xy, \qquad u(x,0) = e^{-x^2}.$$

O método das características se impõe. Se

$$x = X(s),$$

$$y = Y(s),$$

são as equações paramétricas de uma curva no \mathbb{R}^2 ,

$$u = u(x, y) = u(X(s), Y(s)) = U(s),$$

isto é: u = U(s) é uma *nova* função de s. Escrevemos agora lado a lado a equação diferencial parcial original e a derivada total de U:

$$xy = 3x \frac{\partial u}{\partial x} + 3 \frac{\partial u}{\partial y},$$
$$\frac{dU}{ds} = \frac{\partial u}{\partial X} \frac{dX}{ds} + \frac{\partial u}{\partial Y} \frac{dY}{ds}.$$

Deste par, obtemos 3 equações ordinárias:

$$\frac{dX}{ds} = 3X(s), \qquad X(0) = \xi,$$

$$\frac{dY}{ds} = 3, \qquad Y(0) = 0,$$

$$\frac{dU}{ds} = X(s)Y(s), \qquad U(0) = u(\xi, 0) = e^{-\xi^2}.$$

Que merecem ser integradas:

$$\frac{dX}{X} = 3ds,$$

$$\ln \frac{X}{\xi} = 3s,$$

$$X = \xi e^{3s};$$

$$Y = 3s;$$

$$\frac{dU}{ds} = \xi e^{3s} 3s,$$

$$U(s) - U(0) = 3\xi \int_0^s z e^{3z} dz$$

$$= \frac{((3s - 1)e^{3s} + 1)\xi}{3}.$$

Recuperamos agora as variáveis originais:

$$s = y/3,$$

$$\xi = x/e^{3s} = x/e^{y};$$

$$u(x,y) = U(s) = U(0) + \frac{((3s-1)e^{3s} + 1)\xi}{3}$$

$$= e^{-\xi^{2}} + \frac{((3s-1)e^{3s} + 1)\xi}{3}$$

$$= e^{-(x/e^{y})^{2}} + \frac{((y-1)e^{y} + 1)\frac{x}{e^{y}}}{3} \blacksquare$$

Obtenha $\phi(x, t)$ pelo método das características:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + e^{-t} \frac{\partial \phi}{\partial x} = x, \qquad \phi(x, 0) = f(x).$$

Faça
$$\phi(x, t) = F(s)$$
 sobre $x = X(s)$ e $t = T(s)$:

$$\phi(X(s), T(s)) = F(s);$$

$$\frac{dF}{ds} = \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{dT}{ds} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{dX}{ds};$$

$$\frac{dT}{ds} = 1 \Rightarrow T(s) = \underbrace{T(0)}_{\equiv 0} + s,$$

$$\frac{dX}{ds} = e^{-t} = e^{-s},$$

$$\int_{X(0)}^{X(s)} d\xi = \int_{0}^{s} e^{-\tau} d\tau,$$

$$X(s) - X(0) = 1 - e^{-s} \Rightarrow X(0) = X(s) - 1 + e^{-s}.$$

Mas

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + e^{-t} \frac{\partial \phi}{\partial x} = x,$$

$$\frac{dF}{ds} = X(0) + 1 - e^{-s},$$

$$F(s) - F(0) = \int_{\tau=0}^{s} \left[X(0) + 1 - e^{-tau} \right] d\tau$$

$$F(s) = F(0) + (X(0) + 1)s + (e^{-s} - 1)$$

$$F(0) = f(X(0)) = f(x - 1 + e^{-t});$$

$$\phi(x, t) = F(s) = f(x - 1 + e^{-t}) + (x - 1 + e^{-t} + 1)t + (e^{-t} - 1)$$

$$\phi(x, t) = f(x - 1 + e^{-t}) + (x + e^{-t})t + (e^{-t} - 1) \blacksquare$$

O método das características e a classificação de Equações Diferenciais Parciais

Suponha agora que $\boldsymbol{u}(x,t) \in \mathbb{R}^2$; a generalização de (11.12) para duas dimensões é

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + C(x,t) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x} = F(x,y) \cdot \boldsymbol{u}, \tag{11.13}$$

onde C e F são tensores, representados por matrizes 2×2 em uma base particular. Supondo como antes que $x=X(s),\,t=T(s),$ a derivada total de ${\pmb u}$ em relação a s é

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial x}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}s}.$$

A comparação com (11.13) sugere

$$\frac{dT}{ds} = 1,$$

$$\frac{dX}{ds} = C(X(s), T(s)).$$

A segunda equação acima, entretanto, é absurda: o lado esquerdo é um escalar, e o lado direito é um tensor. É preciso lidar com cada uma das funções incógnitas de \boldsymbol{u} separadamente.

Suponha agora que C possua dois autovetores LI, associados a dois autovalores λ_1 e λ_2 . Nesse caso, podemos escrever (11.13) na base dos autovetores como

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix},$$

ou

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} = f_{11} u_1 + f_{12} u_2, \tag{11.14}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} = f_{21} u_1 + f_{22} u_2. \tag{11.15}$$

Essa é uma situação muito mais próxima do método das características unidimensional que apresentamos na seção anterior. Por exemplo, podemos fazer $t = T_1(s)$, $x = X_1(s)$, $u_1 = U_1(s)$, e obter

$$\frac{\mathrm{d}U_1}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial u_1}{\partial t} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\mathrm{d}X_1}{\mathrm{d}s}.$$

A comparação com (11.14) produz

$$\frac{dT_1}{ds} = 1,$$

$$\frac{dX_1}{ds} = \lambda_1.$$

É evidente que o mesmo pode ser feito para (11.15). Isso nos dará duas curvas parametrizadas em s: $(x,t) = (X_1(s), T_1(s))$ e $(x,t) = (X_2(s), T_2(s))$. Essas são as curvas características do sistema (11.13).

A conexão com equações diferenciais parciais de ordem *dois* se segue. Considere uma equação diferencial parcial de ordem 2, linear, do tipo

$$A\phi_{xx} + 2B\phi_{xy} + C\phi_{yy} = F. \tag{11.16}$$

Nós vamos permitir que A, B, C sejam funções genéricas de x, y, e que o termo F seja ainda mais geral. Por exemplo, F poderá conter inclusive derivadas de ordem 1 de ϕ . O plano é reescrever (11.16) na forma

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + C \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} = \mathbf{F}.$$

Isso pode ser feito com

$$u = \phi_x$$
 e $v = \phi_u$

donde se seguem duas equações acopladas:

$$Au_x + 2Bu_y + Cv_y = F,$$

$$v_x = u_y;$$

melhor ainda,

$$u_x + \frac{2B}{A}u_y + \frac{C}{A}v_y = \frac{F}{A},$$
$$v_x - u_y = 0.$$

Agora temos a forma "correta":

$$\frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2B/A & C/A \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial y} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F/A \\ 0 \end{bmatrix}.$$

A matriz da equação acima possui os autovalores

$$\lambda_{1,2} = \frac{B}{A} \pm \frac{\sqrt{B^2 - AC}}{A}.$$

Dependendo dos autovalores que nós encontrarmos, nós classificaremos a EDP (11.16) como se segue:

$$\Delta = B^2 - AC \begin{cases} < 0 & \text{Elítica,} \\ = 0 & \text{Parabólica,} \\ > 0 & \text{Hiperbólica.} \end{cases}$$

Vejamos, a seguir, alguns exemplos de interesse prático em Engenharia.

Classifique e analise a equação da difusão,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$

Fazendo $x=x,\,t=y$ em (11.16), temos $A=\alpha^2,\,B=0$ e C=0. Consequentemente, $B^2-AC=0$, e a EDP é parabólica. Existe apenas um autovalor, $\lambda=0$.

Classifique e analise a equação da onda,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$

De forma análoga à do Exemplo ??, $A = c^2$, B = 0 e C = -1; $B^2 - AC = c^2 >$, e a EDP é hiperbólica.

Classifique e analise a equação de Laplace,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0.$$

Com A = 1, B = 0 e C = 1, $B^2 - AC = 1$, e a equação é elítica.

Classifique e analise a equação de difusão-advecção,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0.$$

Com A = -D, B = 0 e C = 0, $B^2 - AC = 0$, e a equação é parabólica.

Exercícios Propostos

Mostre que

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[h \frac{\partial h}{\partial x} \right]$$

é uma EDP parabólica.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x},$$
$$h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x},$$
$$B^2 - AC = 0 - h \times 0 = 0 \blacksquare$$

Bibliografia

- Abramowitz, M. e Stegun, I. A., editores (1972). *Handbook of mathematical functions*. Dover Publications, Inc., New York.
- Bear, J. (1972). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover Publications, Inc., New York.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., e Lightfoot, E. N. (1960). *Transport phenomena*. John Wiley and Sons, New York.
- Boussinesq, J. (1903). Sur le débit, en temps de sécheresse, d'une source alimentée par une nappe d'eaux d'infiltration. *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci*, 136:1511–1517.
- Browers, H. J. H. e Chesters, A. K. (1991). Film models for transport phenomena with fog formation: the classical film model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(1):1–11.
- Brutsaert, W. (2005). *Hydrology. An introduction*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Chor, T., Dias, N. L., e de Zarate, A. R. (2015). New analytical solutions to the nonlinear Boussinesq equation for groundwater flow. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics*, 3(1):010526–1 010526–6.
- Chor, T., Dias, N. L., e de Zárate, A. R. (2013a). An exact series and improved numerical and approximate solutions for the Boussinesq equation. *Water Resour. Res.*, 49:7380–7387.
- Chor, T. L. G. (2014). Novas soluções analíticas para a equação não-linear de Boussinesq para águas subterrâneas. Tese de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental. Universidade Federal do Paraná.
- Chor, T. L. G., Dias, N. L., e de Zarate, A. R. (2013b). Solução em série da equação de Boussinesq para fluxo subterrâneo utilizando computação simbólica. Em *Anais, XX Simpósio Brasileiro de Recursos hídricos*, Bento Gonçalves, RS.
- Dias, N. L. (2013). Research on atmospheric turbulence by Wilfried Brutsaert and collaborators. *Water Resour. Res.*, 49:7169–7184.
- Dias, N. L. (2016). *Uma introdução aos métodos matemáticos para Engenha*ria. UFPR. Versão 2016-03-01T15:59:33. Disponível em http://www.lemma. ufpr.br/nldias.

BIBLIOGRAFIA 92

Finnigan, J. (2006). The storage term in eddy flux calculations. *Agricultural and Forest Meteorology*, 136:108 – 113.

- Fox, R. W. e McDonald, A. T. (1981). *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. Guanabara Dois, Rio de Janeiro.
- Jeffrey, A. (1995). *A handbook of mathematical formulas and integrals*. Academic Press, San Diego.
- Kumar, P. e Sharan, M. (2010). An analytical model for dispersion of pollutants from a continuous source in the atmospheric boundary layer. *Proceedings of the Royal Society A*, 466:383–406.
- Kundu, P. K. (1990). Fluid Mechanics. Academic Press, San Diego.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., e Flannery, B. P. (1992). *Numerical Recipes in C; The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2ª edição.
- Reynolds, O. (1895). On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, 186:123–164.
- Reynolds, O. (1900). On the extent and action of the heating surface of steam boilers, Proceedings of the Literary and Philosophical Society of Manchester, Vol XIV, session 1874-5. Em *Papers on Mechanical and Physical Subjects*, páginas 81–85. Cambridge University Press.
- Zwillinger, D. (1992). *Handbook of Integration*. Jones and Bartlett, Boston London.