

Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental

Tomás L. Chor

**Novas soluções analíticas para a equação não-linear de Boussinesq
para águas subterrâneas**

Curitiba
2014

Tomás L. Chor

**Novas soluções analíticas para a equação não-linear de Boussinesq
para águas subterrâneas**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Paraná como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental.

Orientador: Nelson Luís da Costa Dias

Curitiba

2014

-
- C551n Chor, Tomás L.
Novas soluções analíticas para a equação não-linear de Boussinesq para águas subterrâneas / Tomás L. Chor. – Curitiba, 2014.
167f. : il., tab., graf.
- Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental.
- Orientador: Nelson Luís da Costa Dias.
Bibliografia: p. 163-167.
1. Águas subterrâneas. 2. Equação de Boussinesq. I. Dias, Nelson Luís da Costa. II. Universidade Federal do Paraná. III. Título.

CDD: 551.49

TERMO DE APROVAÇÃO

TOMÁS L. CHOR

NOVAS SOLUÇÕES ANALÍTICAS PARA A EQUAÇÃO NÃO-LINEAR DE BOUSSINESQ PARA ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Paraná pela seguinte banca examinadora:



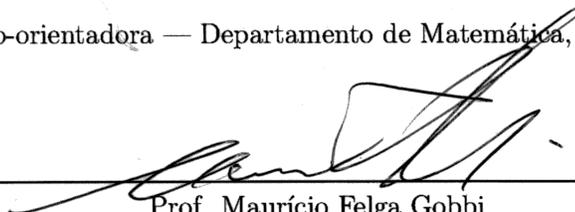
Prof. Nelson Luís Dias

Orientador — Departamento de Engenharia Ambiental, UFPR



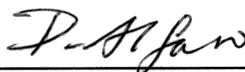
Prof.^a Ailín Ruíz de Zárate

Co-orientadora — Departamento de Matemática, UFPR



Prof. Maurício Felga Gobbi

Departamento de Engenharia Ambiental, UFPR



Prof. Daniel Alfaro Vigo

Departamento de Ciência da Computação, UFRJ

Curitiba, 27 de março de 2014.

Agradecimentos

Agradeço ao meu Orientador, Professor Nelson Luís Dias, pela atenção e apoio que me deu e pela liberdade que me concedeu ao trabalhar na minha dissertação.

À minha co-orientadora, Professora Ailín Ruiz de Zárate, pela grande ajuda e pela grande atenção que dedicou a este trabalho.

Aos professores Maurício Felga Gobbi e Daniel Alfaro Vigo por terem se disponibilizado a participar da banca de defesa.

À minha família pelo suporte que sempre me deu.

Aos meus amigos.

Resumo

Neste trabalho nós estudamos a equação diferencial não linear de Boussinesq para águas subterrâneas com ênfase em hidrologia. Uma revisão sobre a equação é feita, bem como o desenvolvimento de fundamentação teórica para seu entendimento. A solução da equação é implementada numericamente e suas condições de contorno e inicial são estudadas a fim de transformar o problema em um problema de valor inicial. As implicações hidrológicas da determinação correta das condições iniciais são estudadas. A equação é então resolvida para um aquífero infinito com condições de contorno constantes de três maneiras diferentes: uma com a abordagem baseada nas variáveis dependentes padrão e outras duas com abordagens alternativas para a dependência entre as variáveis. Todas as resoluções se baseiam em expansões em série da solução.

Abstract

In this work we studied the nonlinear differential Boussinesq equation for groundwater flow with an emphasis in hydrology. We present a review of the equation as well as theoretical foundations for its understanding. The solution for the equation is implemented numerically and its boundary and initial conditions are studied in order to transform the problem into an initial value problem. The hydrological implications of the correct determination of the initial conditions are studied. The equation is then solved for an infinite aquifer with constant boundary conditions in three distinct ways: one with the classical variables approach and two with alternative approaches for variable dependence. All of the solutions are based in series expansions of the solution.

Lista de Figuras

2.1	Representação de um volume de controle em um meio poroso	18
2.2	Representação de uma maciço inclinado retangular com recarga.	21
2.3	Maciço poroso	25
2.4	Solução obtida por Boussinesq para diversos instantes.	27
2.5	Maciço poroso	28
3.1	Gráficos da vazão e descarga acumulada para um aquífero idealizado	42
3.2	Exemplos da aproximação para a vazão em função da altura inicial da água	50
4.1	Gráfico das funções ϕ e ψ para o caso homogêneo e o caso $\phi_0 = 0.6$	57
5.1	Função de Blasius no plano complexo.	60
5.2	Representação de ϕ no plano complexo para $\phi_0 = 0$, $\phi_0 = 0,4$, $\phi_0 = 0,6$ e $\phi_0 = 0,8$	66
5.3	Função ϕ no plano complexo com $\phi_0 = 1.2$ (esquerda) e $\phi_0 = 1.4$ (direita).	67
5.4	Exemplo do comportamento de uma singularidade.	67
5.5	Representação de $\xi(\phi)$ no plano complexo para $\phi_0 = 0$, $\phi_0 = 0,3$, $\phi_0 = 0,6$ e $\phi_0 = 0,9$	68

5.6	Caminho da integração feita no plano complexo para encontrar a localização das singularidades mais próximas da origem.	68
5.7	Caminho da integração feita no plano complexo para encontrar a localização de singularidades à direita e mais próximas da origem.	69
5.8	A distância de singularidades no plano complexo de ϕ até a origem	69
6.1	Variáveis ξ e ψ em função da variável independente ϕ obtidas com a série desenvolvida nesta seção.	72
6.2	Função $\psi(\xi)$ e $\phi(\xi)$ obtidas invertendo-se o resultado da série apresentada nesta seção.	73
6.3	A função $\psi(\phi)$ calculada com a série definida em (6.15) para o caso $\phi_0 = 0$ (acima) e $\phi_0 = 0,5$ (abaixo).	75
C.1	A função ϕ calculada pela série desenvolvida com a relação de recorrência (C.26) e programada com 8797 termos.	95
D.1	Série para diversos casos não homogêneos.	98
E.1	Função calculada com aproximação de Padé.	103
E.2	Gráfico de ϕ obtida numericamente (RKCK), através da aproximação de Padé (P_ϕ) e com a série inalterada.	103
F.1	Diferenças entre as aproximações deduzidas aqui e a resolução “exata” por RKCK para o caso $\phi_0 = 0,6$	110
G.1	Gráfico das diferenças entre os logaritmos do módulo dos coeficientes a_n . .	114
G.2	Diferenças entre os coeficientes para o caso de Blasius	115

G.3	Detalhe das diferenças dos coeficientes da série de Blasius	115
G.4	Relação entre $\ln a_n $ e n para a equação de Boussinesq e detalhe na relação entre $\ln a_n $ e n para a equação de Boussinesq	117
G.5	Detalhe na relação entre $\ln b_n $ e n para a equação de Blasius	118
G.6	Detalhe na relação entre $\ln a_n $ e n para os últimos termos da equação de Boussinesq.	118
G.7	Detalhe dos últimos termos calculados para a equação de Blasius.	119
G.8	Gráfico da função $G(L)$ e $G'(L)$	122
G.9	Gráfico com a estimativa de R por N	124
G.10	$ \Phi(\zeta) $ no plano complexo.	126
G.11	Caminho de integração utilizado para identificar as singularidades no plano complexo de ζ	126
G.12	Valores de Γ e de erros acumulados $\bar{\epsilon}$ calculados para vários valores de ρ	127
H.1	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,0$	130
H.2	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,05$	130
H.3	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,1$	131
H.4	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,15$	131
H.5	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,2$	132
H.6	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,25$	132
H.7	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,3$	133
H.8	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,35$	133

H.9	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,4$.	134
H.10	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,45$.	134
H.11	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,5$.	135
H.12	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,55$.	135
H.13	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,6$.	136
H.14	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,65$.	136
H.15	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,7$.	137
H.16	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,75$.	137
H.17	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,8$.	138
H.18	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,85$.	138
H.19	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,9$.	139
H.20	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,95$.	139
H.21	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,0$.	140
H.22	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,05$.	140
H.23	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,1$.	141
H.24	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,15$.	141
H.25	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,2$.	142
H.26	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,25$.	142
H.27	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,3$.	143
H.28	$\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,35$.	143

H.29 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,4$	144
H.30 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,45$	144
H.31 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,5$	145
H.32 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,55$	145
H.33 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,6$	146
H.34 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,65$	146
H.35 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,7$	147
H.36 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,75$	147
H.37 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,8$	148
H.38 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,85$	148
H.39 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,9$	149
H.40 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,95$	149
H.41 $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 2,0$	150

Lista de Tabelas

4.1	Primeiros seis coeficientes a_n (para o caso $\phi_a = 0$) e \bar{a}_n	56
C.1	Valores dos primeiros a_n s segundo a relação de recorrência apresentada na equação (C.26).	94
G.1	Estimativas para o raio de convergência obtidas com valores diferentes de N	123

Sumário

1	Introdução	15
2	Revisão bibliográfica e fundamentação teórica	17
2.1	Generalização matemática	22
2.2	Algumas soluções aproximadas	22
2.3	A aplicação a um domínio finito	24
2.4	A aplicação da equação parcial a um domínio semi-infinito	27
2.5	O problema na variável de Boltzmann e a relação com a equação de Blasius	29
2.6	Outras transformações de variáveis e soluções de similaridade	33
3	Implementação numérica e condições de contorno	36
3.1	Apresentação do problema e desenvolvimento de uma solução numérica . .	37
3.2	A equação de Boussinesq na Hidrologia de bacias	40
3.3	O método de Töpfer e as condições iniciais	44
3.4	Aproximação para ψ_0 em função de ϕ_0	47
4	Resolução geral do problema	52

5	Análises no plano complexo e raio de convergência	59
5.1	Análise do problema original	61
5.2	Análise do problema invertido	62
6	Resoluções alternativas	70
6.1	Resolução invertida do problema	70
6.2	Resolução do problema para a vazão	73
7	Conclusões	78
A	Apresentação da resolução de Boussinesq para a equação parcial normalizada	81
B	Transformação de variáveis entre a equação de Boussinesq e a equação de Blasius	88
C	Resolução do problema homogêneo	91
D	Resolução do problema não homogêneo	97
E	Aumentando o raio de convergência com uma aproximação de Padé	100
F	Soluções assintóticas	104
F.1	Aquífero com condições homogêneas baseado em Blasius	104
F.2	Aquífero com condições não-homogêneas	106
G	Estimativas alternativas do raio de convergência	111

G.1	Teste da razão	111
G.2	Teste da raiz	116
G.3	Estimativa iterativa	119
G.4	Estimativa por integração circular	124
H	Imagens do plano complexo	129
I	Alguns códigos em FORTRAN	151
I.1	Resolução numérica na reta real	151
I.2	Resolução no plano complexo	156

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho realiza uma análise aprofundada de uma equação diferencial não-linear de segunda ordem conhecida como equação de Boussinesq. A equação, que pode ser encontrada em Brutsaert (2005, página 384), trata do escoamento subterrâneo da água e não possui solução analítica que contemple uma condição inicial genérica, o que não impede que ela seja amplamente utilizada em mecânica dos fluidos ambiental. Suas aplicações nessa área incluem o dimensionamento de sistemas de irrigação e remediação de solo (Moutsopoulos, 2010), interpretações de hidrógrafas de recessão em aquíferos (Rupp e Selker, 2006) e previsão de ondas subterrâneas em meios porosos Liu e Wen (1997).

Fora da hidrologia, a equação pode ser classificada como uma equação de difusão não-linear, onde o coeficiente de difusão varia linearmente com a concentração da substância (Crank, 1975, páginas 4 e 119). Apesar dessa classificação, essa equação é utilizada em outros processos que não o de difusão de substâncias mas que podem ser modelados como processos de difusão, tais como problemas transferência de calor e dinâmica de populações.

O foco deste trabalho é a equação com condições de contorno constantes, o que permite uma mudança de variáveis conhecida como transformação de Boltzmann ao se considerar também um domínio semi-infinito. Essa mudança, apesar de reduzir a validade da equação, introduz uma variável de similaridade no problema e transforma a equação diferencial parcial em uma equação diferencial ordinária, na qual focaremos nossos esforços.

Mesmo a equação em uma variável não possui uma solução genérica, apesar de existirem várias soluções aproximadas. Dessa maneira, definimos o objetivo principal deste trabalho como resolvê-la da maneira mais geral possível, bem como analisar aspectos matemáticos da solução e algumas implicações físicas dos mesmos, tais como convergência da solução e o comportamento da mesma para condições de contorno diferentes.

Para atingir esses objetivos, nos valem de deduções de soluções em série para a representação da função e métodos numéricos para explorar aspectos da mesma no plano complexo, que por sua vez influenciam a convergência da série na reta real.

A organização do trabalho se dá da seguinte maneira. O Capítulo 2 faz uma revisão da literatura científica disponível sobre o assunto e introduz alguns conceitos teóricos básicos para o entendimento do conteúdo apresentado. No Capítulo 3 é apresentada uma solução numérica de alta precisão e é adaptado um método (originalmente proposto para a equação de Blasius) que tem por finalidade proporcionar estimativas corretas para as condições iniciais de modo a satisfazer a condição de contorno. O Capítulo 4 é dedicado ao desenvolvimento de uma solução geral para o problema proposto, o que é feito com uma série infinita. O Capítulo 5 estuda o raio de convergência para a série baseado em análises no plano complexo. O Capítulo 6 apresenta uma resolução em série para a equação com as variáveis não convencionais e desenvolve uma abordagem analítica para se determinar as condições iniciais para o problema que pode ser usada em substituição à abordagem desenvolvida no Capítulo 3. O Capítulo 7 apresenta as conclusões principais do trabalho.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica e fundamentação teórica

A equação que neste trabalho será denominada como “equação de Boussinesq” é uma formulação matemática para um problema de escoamento em maciços porosos não-confinados, ou seja, maciços que tenham a superfície superior em contato com a atmosfera. A dedução da forma geral da equação pode ser feita considerando-se um volume de controle \mathbb{V} em um meio poroso, conforme apresentado na Figura 2.1, definido pelos intervalos $x_0 \leq x \leq x_1$, $y_0 \leq y \leq y_1$, $z_0 \leq z \leq z_1$, onde z_0 é o fundo impermeável do maciço poroso e z_1 é o topo do mesmo. Aplicamos nesse volume a equação de balanço de massa

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\mathbb{V}} n_e \rho dV + \iint_{\mathbb{S}} \rho(\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = 0 \quad (2.1)$$

onde ρ é a densidade da água, t é o tempo, \vec{u} é o vetor velocidade de deslocamento da água, n_e é a porosidade efetiva do solo (detalhada mais à frente) e \mathbb{S} é a superfície do volume de controle, sendo que \vec{n} é o vetor paralelo à mesma em qualquer ponto.

Começamos negligenciando o fluxo não-saturado e supondo que existe uma superfície da água bem definida a uma altura z_s tal que

$$\rho = \begin{cases} \rho_0, & z < z_s, \\ 0, & z > z_s, \end{cases} \quad (2.2)$$

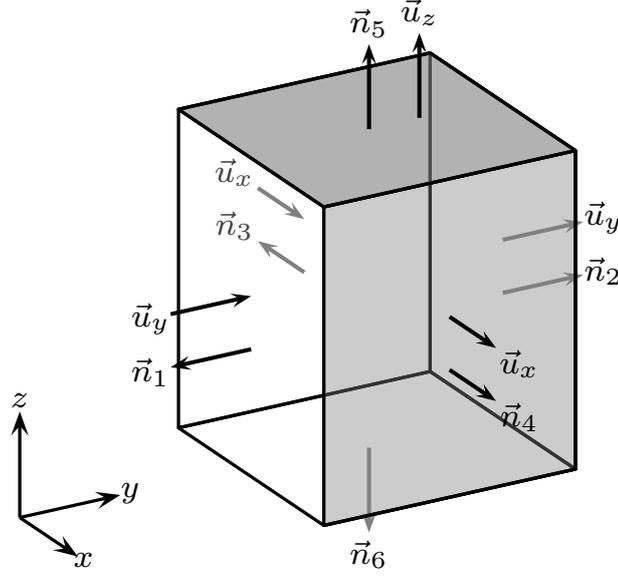


Figura 2.1: Representação de um volume de controle em um meio poroso onde u_i são as componentes do fluxo saturado e n_i são os vetores normais às superfícies.

onde ρ_0 é constante e considerando que z_s seja função de x e y . Dessa maneira redefinimos o volume de controle em z como $z_0 \leq z \leq z_s$ de maneira a reescrever o balanço de massa como

$$n_e \frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho_0 dV + \iint_S \rho_0 (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = 0. \quad (2.3)$$

Repare que supondo que u_z não depende de x ou y faz com que o fluxo em z_1 seja igual ao fluxo em z_s . Definimos então a altura da superfície freática $h(x, y, t)$ como

$$h(x, y, t) = \int_{z_0}^{z_s} dz, \quad (2.4)$$

o que nos permite escrever

$$n_e \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_0}^{x_1} \int_{y_0}^{y_1} h dy dx + \iint_S (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = 0. \quad (2.5)$$

Considerando o termo de fluxos de superfície de acordo com a geometria apresentada na Figura 2.1 temos

$$\begin{aligned} \iint_S (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS &= \iint_{S_1} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS + \iint_{S_2} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS + \\ &\quad \iint_{S_3} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS + \iint_{S_4} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS + \iint_{S_5} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS \end{aligned}$$

$$\oiint_{\mathbb{S}} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = \int_{x_0}^{x_1} \int_{z_0}^{z_s} [u_y(y_1) - u_y(y_0)] dz dx + \int_{y_0}^{y_1} \int_{z_0}^{z_s} [u_x(x_1) - u_x(x_0)] dz dy + \int_{y_0}^{y_1} \int_{x_0}^{x_s} [u_z(z_s)] dx dy.$$

Nesse ponto fazemos a suposição de que o fluxo dentro do aquífero independe de z e que $u_z(z_s)$ é uma taxa de infiltração $-I$, já que seu sentido é o oposto ao do eixo vertical. Dessa forma temos

$$\oiint_{\mathbb{S}} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = \int_{x_0}^{x_1} \left[u_y(y_1) \int_{z_0}^{z_s(y_1)} dz - u_y(y_0) \int_{z_0}^{z_s(y_0)} dz \right] dx + \int_{y_0}^{y_1} \left[u_x(x_1) \int_{z_0}^{z_s(x_1)} dz - u_x(x_0) \int_{z_0}^{z_s(x_0)} dz \right] dy - \int_{y_0}^{y_1} \int_{x_0}^{x_s} I dx dy \quad (2.7)$$

$$\oiint_{\mathbb{S}} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = \int_{x_0}^{x_1} [u_y(y_1)h(y_1) - u_y(y_0)h(y_0)] dx + \int_{y_0}^{y_1} [u_x(x_1)h(x_1) - u_x(x_0)h(x_0)] dy - \int_{y_0}^{y_1} \int_{x_0}^{x_s} I dx dy. \quad (2.8)$$

Supondo que o volume de controle é definido por intervalos $x_1 - x_0 = \Delta x$, $y_1 - y_0 = \Delta y$, $z_s - x_0 = \Delta z$, que são pequenos o suficiente, podemos passar os argumentos das integrais em (2.8) para fora e produzir

$$\oiint_{\mathbb{S}} (\vec{n} \cdot \vec{u}) dS = [u_y(y_1)h(y_1) - u_y(y_0)h(y_0)] \Delta x + [u_x(x_1)h(x_1) - u_x(x_0)h(x_0)] \Delta y - I \Delta x \Delta y, \quad (2.9)$$

que inserido na Equação (2.5) fornece

$$n_e \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_0}^{x_1} \int_{y_0}^{y_1} h dy dx + [u_y(y_1)h(y_1) - u_y(y_0)h(y_0)] \Delta x + [u_x(x_1)h(x_1) - u_x(x_0)h(x_0)] \Delta y - I \Delta x \Delta y = 0$$

$$n_e \frac{\partial h}{\partial t} \Delta x \Delta y + [u_y(y_1)h(y_1) - u_y(y_0)h(y_0)] \Delta x + [u_x(x_1)h(x_1) - u_x(x_0)h(x_0)] \Delta y - I \Delta x \Delta y = 0$$

$$n_e \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{[u_y(y_1)h(y_1) - u_y(y_0)h(y_0)]}{\Delta y} + \frac{[u_x(x_1)h(x_1) - u_x(x_0)h(x_0)]}{\Delta x} - I = 0. \quad (2.10)$$

Aplicando o limite na equação (2.10) para $\Delta x \rightarrow 0$ e $\Delta y \rightarrow 0$ obtemos

$$n_e \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(hu_x) + \frac{\partial}{\partial y}(hu_y) = I. \quad (2.11)$$

Consideramos também as equações de quantidade de movimento em um meio poroso inclinado no eixo x de um ângulo θ (Daly e Porporato, 2004),

$$\frac{\partial h}{\partial x} \cos \theta + \frac{u_x}{g} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{1}{g} \frac{\partial u_x}{\partial t} = -\text{sen } \theta - J_x, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial h}{\partial y} + \frac{u_y}{g} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{1}{g} \frac{\partial u_y}{\partial t} = -J_y, \quad (2.13)$$

onde g é a aceleração da gravidade e J_i é o termo de perda por fricção na direção i . Desconsiderando os termos inerciais da equação (2.13) e supondo $J_i = u_i/k_0$ (Daly e Porporato, 2004) temos

$$u_x = -k_0 \text{sen } \theta - k_0 \cos \theta \frac{\partial h}{\partial x}, \quad u_y = -k_0 \frac{\partial h}{\partial y}, \quad (2.14)$$

onde k_0 é a condutividade hidráulica saturada do maciço (também explicada em mais detalhes à frente).

Substituindo (2.14) em (2.11) temos a equação de Boussinesq bidimensional para aquíferos inclinados (Brutsaert, 2005, página 384):

$$n_e \frac{\partial h}{\partial t} = k_0 \left[\cos \theta \frac{\partial}{\partial x} \left(h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \text{sen } \theta \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(h \frac{\partial h}{\partial y} \right) \right] + I. \quad (2.15)$$

Uma representação de um aquífero com características compatíveis com a equação de Boussinesq está na figura 2.2, que apresenta um maciço retangular, inclinado e homogêneo cuja altura é H e adjacente a um corpo d'água de altura H_0 (que pode ser um rio, lago, trincheira de drenagem e etc.).

Após uma porção de solo ser drenada na natureza, uma parte do seu volume ainda continua preenchido por uma quantidade residual de água alojada entre as partículas sólidas. A razão entre o volume de vazios no solo e o volume total do solo após um esvaziamento natural do mesmo é então o que chamamos de porosidade efetiva n_e (também chamada de porosidade drenável). Dessa maneira n_e é diferente da razão entre o volume de vazios no solo e o volume total após um esvaziamento forçado.

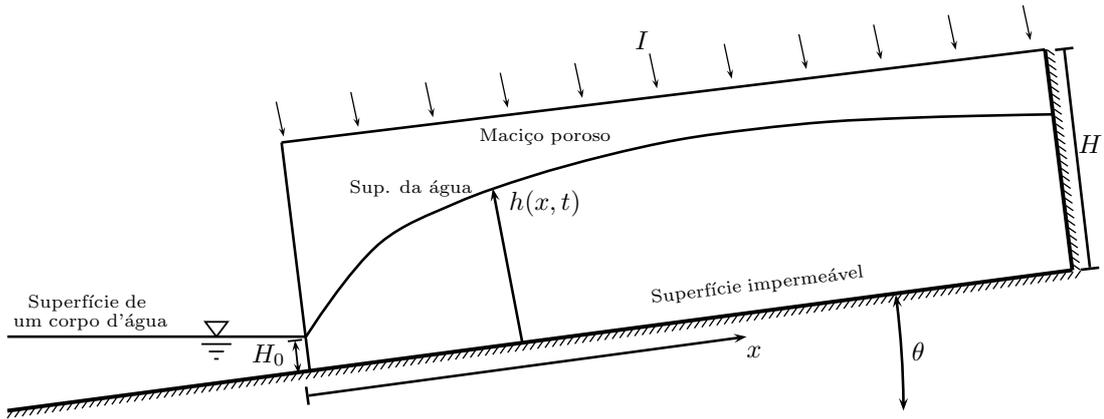


Figura 2.2: Representação de uma maciço inclinado retangular com recarga.

Já a propriedade k_0 , vem da suposição que existe uma condutividade hidráulica que é constante em todo o maciço enquanto o mesmo está saturado. Ela surge da lei de Darcy

$$\vec{u} = -k_0 \nabla h. \quad (2.16)$$

Valores típicos (adimensionais) para n_e giram em torno de 0,01 até 0,5, enquanto que valores em cm s^{-1} para k_0 giram em torno de 0,001 até 10. Essas duas propriedades dependem tanto da composição do solo quanto da maneira como o solo está disposto (compactado ou não, por exemplo).

Dois hipóteses principais estão inseridas na dedução da equação de Boussinesq: a hipótese de que os efeitos do fluxo não-saturado acima da linha d'água são negligenciáveis (e podem ser parametrizados por n_e), e a hipótese de que a distribuição de pressão no eixo vertical é hidrostática (Brutsaert, 2005), sendo que as linhas de corrente são consideradas paralelas ao fundo do maciço, o que é conhecido como suposição de Dupuit-Forchheimer.

Estudaremos a equação desconsiderando o eixo y e com $\theta = I = 0$, podendo-se dizer que o problema que trataremos é unidimensional e transiente. Dentro do escopo deste trabalho a equação de Boussinesq então pode ser escrita como

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{k_0}{n_e} \frac{\partial}{\partial x} \left(h \frac{\partial h}{\partial x} \right), \quad (2.17)$$

que trata de um maciço horizontal sem recarga.

2.1 Generalização matemática

De um ponto de vista matemático, a equação de Boussinesq sem recarga e com $\theta = 0$ (representando um domínio horizontal) pode ser generalizada para mais dimensões como

$$\frac{\partial h}{\partial t} = A' \nabla \cdot (\hat{D} \nabla h), \quad (2.18)$$

que é uma equação de difusão com \hat{D} sendo um coeficiente de difusão que pode variar com h , x ou t . Se supusermos uma variação em lei de potências $\hat{D} = A'' h^n$ temos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = A' \nabla \cdot (A'' h^n \nabla h) = A \nabla^2 h^m \quad (2.19)$$

com $m > 0$ e $A = A' A''$ são constantes e $n = m + 1$. Se h for entendido como uma concentração, essa equação é uma consequência da Lei de Fick (Heaslet e Alksne, 1961). O caso da equação de Boussinesq acontece quando supõe-se uma dependência linear do coeficiente de difusão, de modo que $n = 1$, fazendo surgir um laplaciano de h^2 do lado direito. Desta maneira a equação de Boussinesq, quando analisada em outros contextos, pode ser entendida como uma equação diferencial parabólica de difusão não linear (Crank, 1975), e é utilizada fora da hidrologia para modelar difusão não-linear de massa (Crank, 1975; Basak e Murty, 1981, 1977, 1978; Tolikas e Sidiropoulos, 1984), transmissão de doenças em populações (Busenberg e Travis, 1983) e condução de calor (Sablani et al., 2005).

Este trabalho, no entanto, se concentra na equação de Boussinesq aplicada à hidrologia. Nas próximas seções exploraremos algumas soluções aproximadas e analíticas já existentes para a equação de Boussinesq em hidrologia, sem preocupações com interpretações físicas fora desse contexto.

2.2 Algumas soluções aproximadas

Há várias resoluções disponíveis na literatura para a Equação (2.17); a maioria delas se baseia em aproximações. A aproximação mais utilizada para a equação é linearizar o problema introduzindo a variável \bar{h} (Moutsopoulos, 2010). O valor da variável \bar{h} está

obrigatoriamente entre H_0 e H , e corresponde a uma altura representativa da água. Não é necessário que a variável \bar{h} seja a média de h ao longo do tempo ou mesmo a média entre H_0 e H . A aplicação da linearização em (2.17) produz

$$n_e \frac{\partial h}{\partial t} = \bar{h} k_0 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}, \quad (2.20)$$

que tem a estrutura matemática da equação do calor unidimensional.

Quando a Equação (2.20) está sujeita às condições de contorno características de um aquífero infinito (cujas implicações veremos mais à frente neste capítulo),

$$h(x, 0) = H, \quad h(\infty, t) = H, \quad h(0, t) = H_0, \quad (2.21)$$

a sua resolução é imediata e seu resultado é

$$h = H \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\bar{D}t}} \right) \right], \quad (2.22)$$

com $\bar{D} = \frac{\bar{h}k_0}{n_e}$ e com

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\bar{z}^2) d\bar{z}. \quad (2.23)$$

Existem algumas variações nesta mesma técnica que visam melhorar o resultado, como a multiplicação dos dois lados da equação por h , porém os resultados são similares (Upadhyaya e Chauhan, 1998; Moutsopoulos, 2010).

Para o caso da Equação (2.20) estar sujeita a condições de contorno finitas,

$$h(x, 0) = H, \quad h(0, t) = H_0, \quad \frac{\partial h}{\partial x}(L, t) = 0, \quad (2.24)$$

onde L é o comprimento do aquífero (veja na Figura 2.3), uma resolução útil é a solução de Boussinesq (1903), que é amplamente utilizada nas análises de Brutsaert e Nieber (1977) para a hidrologia de bacias (tópico que será discutido na Seção 3.2). A sua solução baseia-se no fato de que a altura efetiva da água pode ser escrita como

$$\bar{h} \equiv pH, \quad (2.25)$$

sendo que o valor de p não pode ser deduzido analiticamente e é diferente para diferentes valores de H e H_0 . Para o caso $H_0 = 0$ geralmente utiliza-se $p = 0,3465$ (Brutsaert e

Lopez, 1998), que é um valor obtido através de análises numéricas. Voltaremos a tratar do valor de p na Seção 3.2.

Dessa forma a solução de Boussinesq (1903) é dada por

$$h(x, t) = H_0 + \frac{4}{\pi}(H - H_0) \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n x}{2L}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2 n^2 k_0 p H}{4n_e L^2} t\right). \quad (2.26)$$

É importante ressaltar que a Equação (2.26), que também é conhecida em engenharia de drenagem como solução de Glover (Luthin, 1973), é indicada para valores de H_0 próximos do valor de H , o que corresponde a casos onde h sofre pouca variação. Uma revisão mais aprofundada sobre resoluções aproximadas encontra-se em Moutsopoulos (2010). No resto deste capítulo nos concentraremos em apresentar soluções analíticas, deixando outras soluções aproximadas de lado.

2.3 A aplicação a um domínio finito

É comum que o problema seja adimensionalizado a fim de facilitar a aplicação de soluções em vários aquíferos diferentes. No caso de um maciço finito, consideramos a Figura 2.3, onde h é a altura da superfície d'água dentro do maciço, L é o comprimento do maciço poroso, H é a altura do maciço e H_0 é a altura do corpo d'água que dá a condição de contorno $h(0, t)$. O valor de H_0 pode ser maior ou menor que H (incluindo zero), porém nunca negativo. No caso de H_0 nulo, o fluxo é sempre para fora do aquífero e se dá idealmente por um ponto em $x = 0$.

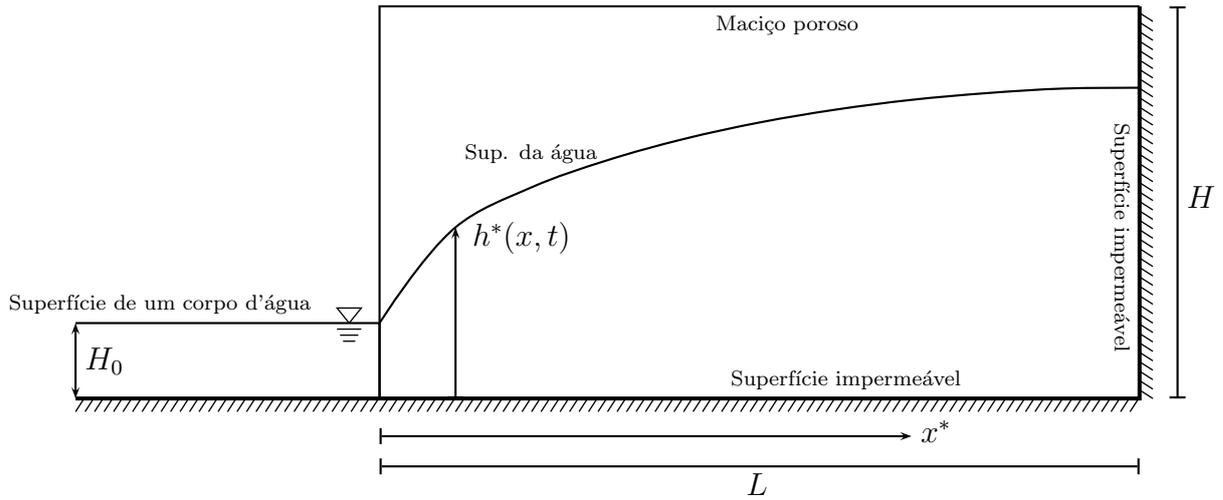


Figura 2.3: Representação de um maciço poroso retangular de altura H e comprimento L .

A adimensionalização de x e h é simples:

$$x^* = \frac{x}{L} \quad h^* = \frac{h}{H}. \quad (2.27)$$

Aplicando a Equação (2.27) em (2.17) temos

$$\frac{\partial h^*}{\partial \left(t \frac{k_0 H}{n_e L^2} \right)} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(h^* \frac{\partial h^*}{\partial x^*} \right). \quad (2.28)$$

A definição de um tempo t^* tal que

$$t^* = t \frac{k_0 H}{n_e L^2}, \quad (2.29)$$

nos fornece

$$\frac{\partial h^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(h^* \frac{\partial h^*}{\partial x^*} \right). \quad (2.30)$$

O próprio Boussinesq desenvolveu uma solução para a equação (2.30) com as condições de contorno

$$\begin{aligned} h^*(0, t) &= 0 \\ \frac{\partial h^*}{\partial x}(1, t^*) &= 0, \end{aligned} \quad (2.31)$$

que equivale a considerar a drenagem de um maciço saturado em um corpo d'água inicialmente vazio (uma trincheira de drenagem, por exemplo, que equivale a $H_0 = 0$).

A solução desenvolvida por ele se baseia na suposição de que h^* pode ser escrito como

$$h^*(x^*, t^*) = X(x^*)T(t^*), \quad (2.32)$$

chegando-se finalmente à solução da forma

$$\begin{aligned} T(t^*) &= \frac{-1}{C_1 t^* + C_2}, \\ x^* &= \frac{1}{B(\frac{2}{3}, \frac{1}{2})} \int_0^{F^3(x^*)} u^{-\frac{1}{3}} (1-u)^{-\frac{1}{2}} du, \end{aligned}$$

com

$$F(x^*) = -X(x^*)/C_2, \quad (2.33)$$

onde u é apenas uma variável de integração e $B(\frac{2}{3}, \frac{1}{2})$ é a Função Beta

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

e C_1 e C_2 são constantes obtidas através das condições de contorno.

Apesar de não haver uma expressão explícita para $F(x^*)$, pode-se obter uma função numericamente, variando-se os valores de $F(x^*)$ na integral (que vão até 1) e obtendo-se um valor correspondente para x^* . Repare que nesta resolução a condição inicial não é arbitrária e é dada pela curva

$$h^*(x^*, 0) = \frac{-X(x^*)}{C_2}, \quad (2.34)$$

o que faz com que esta resolução não seja considerada completa pois a própria solução impõe uma condição inicial. A dedução em mais detalhes está apresentada no Apêndice A.

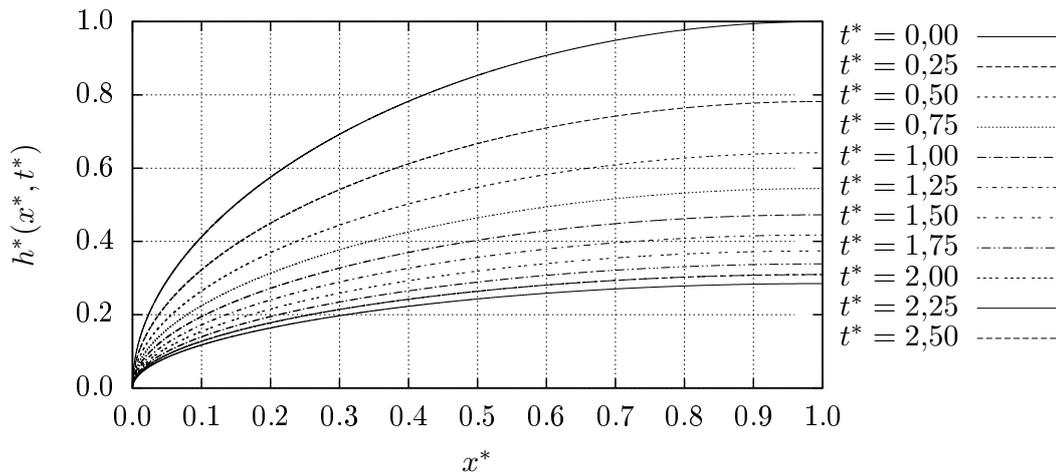


Figura 2.4: Solução obtida por Boussinesq para diversos instantes.

Ao que tudo indica $F(x^*)$ é um atrator do problema (Brutsaert, 2005). Isso significa que para qualquer condição inicial que seja imposta ao problema, $h^*(x^*, t^*)$ sempre tenderá para a forma de $F(x^*)$ e decairá com o passar do tempo, porém mantendo a mesma forma, como se pode ver na figura 2.4. Esse ponto é discutido em mais detalhes por Kan (2005).

2.4 A aplicação da equação parcial a um domínio semi-infinito

Para o problema semi-infinito, considere a Figura 2.5. Ela representa um maciço similar ao da Figura 2.3, porém com o eixo horizontal semi-infinito. Apesar da suposição de um maciço semi-infinito ser uma abstração matemática, portanto rigorosamente impossível no mundo real, soluções para esse tipo de condição encontram utilidade na prática como sendo boas aproximações para tempos de esvaziamento curtos.

Como um exemplo tomamos qualquer caso onde a altura inicial da água é horizontal. Nesses casos o único forçante, tanto em um maciço finito como em um semi-infinito, vem da condição em $x = 0$, que dará o fluxo para dentro ou para fora do aquífero. Em um aquífero finito, enquanto a solução não for influenciada pela condição em $x = L$, pode-se dizer que é indiferente para a mesma se o maciço é finito ou infinito, podendo um maciço

infinito ser a representação de um maciço cuja carga d'água ainda não sofreu influência da condição em $x = L$.

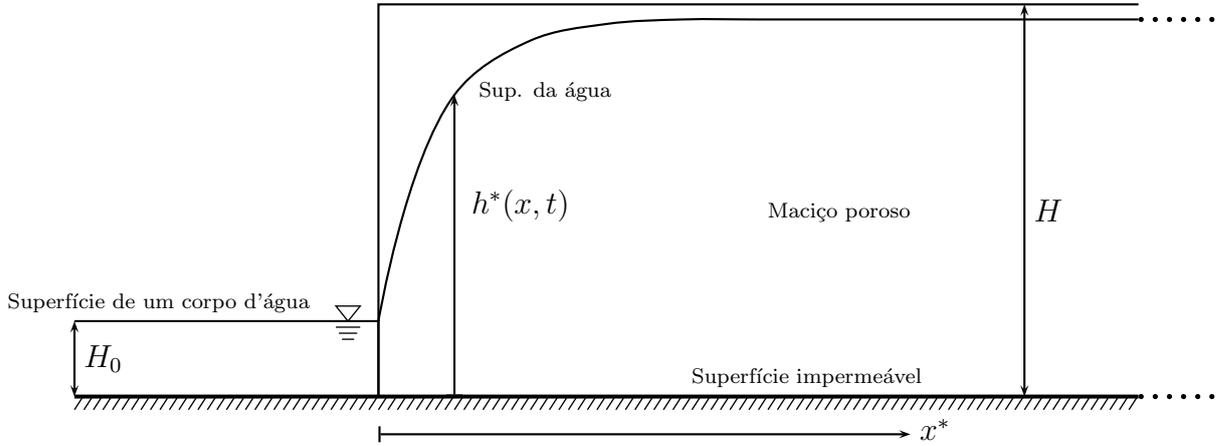


Figura 2.5: Representação de um maciço poroso semi-infinito de altura H .

Tanto quanto seja de nosso conhecimento, apenas Parlange et al. (2000) fornecem uma solução analítica sem nenhuma aproximação da equação sem ter que supor nenhuma relação de similaridade entre x e t . Os autores supõem uma solução na forma

$$\frac{k_0}{n_e}(H - h) = \sum_{i=1}^N A_i(t)x^i \quad (2.35)$$

para as condições de contorno

$$h(0, t) = H_0(t) \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t}(\infty, t) = 0, \quad (2.37)$$

deixando a condição inicial $h(x, 0)$ em aberto.

Substituindo a equação anterior em (2.17), descobre-se que a equação resultante só é satisfeita com $N = 2$, fornecendo a solução exata

$$\frac{k_0}{n_e}(H_0 - h) = \sqrt{\frac{k_0}{n_e}} \frac{\beta x}{t + \alpha} + \frac{x^2}{6(t + \alpha)}, \quad (2.38)$$

com

$$H_0(t) = \frac{1,5\beta^2}{t + \alpha} [C(t + \alpha)^{2/3} - 1], \quad (2.39)$$

e C , α e β sendo constantes arbitrárias.

Assim como a solução de Boussinesq, esta solução não contempla uma condição inicial arbitrária, portanto não é considerada geral. A condição inicial é dada por

$$\frac{k_0}{n_e}(H_0(0) - h(x, 0)) = \sqrt{\frac{k_0}{n_e}} \frac{\beta x}{\alpha} + \frac{x^2}{6\alpha}. \quad (2.40)$$

Uma particularidade desta solução é que para o caso onde $\beta < 0$ (*i.e.*, o fluxo de água indo do aquífero para o canal) o ponto $\bar{x} = 3$ sempre tem $\frac{dh}{dx} = 0$, que significa que o fluxo de água nesse ponto é nulo. Esse ponto pode ser obtido com

$$\bar{H}_0(\tau) - \bar{h} = -\frac{\bar{x}}{\tau + 1} + \frac{\bar{x}^2}{6(\tau + 1)}, \quad (2.41)$$

com

$$\bar{H}_0(\tau) = \frac{3}{2(\tau + 1)} [C\alpha^{2/3}(\tau + 1)^{2/3} - 1] \quad (2.42)$$

sendo a altura do corpo d'água normalizada, $\bar{x} = x\sqrt{n_e/k_0D}$ a distância normalizada, $\bar{h} = h/D$ a altura normalizada, $D = \frac{3}{2}\beta^2C$ e $\tau = t/\alpha$. Isso torna a solução para $\beta < 0$ equivalente a resolver um problema com as mesmas condições de contorno e possuindo uma superfície vertical impermeável em $\bar{x} = 3$ (domínio finito).

2.5 O problema na variável de Boltzmann e a relação com a equação de Blasius para a camada limite laminar

Para condições de contorno constantes a Equação (2.17) pode ser reescrita como uma equação ordinária não-linear de segunda ordem através de uma transformação de variáveis

conhecida como transformação de Boltzmann. Essa transformação consiste na criação das variáveis de similaridade

$$\phi(\xi) \equiv \frac{h(x, t)}{H} \quad (2.43)$$

$$\xi \equiv \frac{x}{\sqrt{4Dt}}, \quad (2.44)$$

com

$$D = H \frac{k_0}{n_e}, \quad (2.45)$$

onde ξ é a variável de similaridade do problema e ϕ continua sendo a altura da coluna d'água normalizada¹. Essa mudança de variáveis só é possível quando as condições de contorno para $x \rightarrow \infty$ e para $t = 0$ são as mesmas, ou seja, se as condições de contorno forem escritas como

$$h(x, 0) = H \phi(\xi = \infty) = K_1, \quad (2.46)$$

$$h(\infty, t) = H \phi(\xi = \infty) = K_2, \quad (2.47)$$

$$h(x, \infty) = H \phi(\xi = 0) = K_3, \quad (2.48)$$

$$h(0, t) = H \phi(\xi = 0) = K_4, \quad (2.49)$$

então K_1 tem que obrigatoriamente ser igual a K_2 e $K_3 = K_4$, caso contrário cria-se uma inconsistência nas condições de contorno da equação diferencial ordinária resultante. A mudança também “introduz” uma condição adicional ao problema em $h(x, t)$, já que o mesmo é definido apenas com três condições de contorno (*e.g.*, K_1 , K_3 e K_4), mas automaticamente satisfaz uma quarta (*e.g.*, K_2) quando a mudança para $\phi(\xi)$ for feita.

Essa transformação nos deixa com a equação

$$\frac{d}{d\xi} \left(\phi \frac{d\phi}{d\xi} \right) + 2\xi \frac{d\phi}{d\xi} = 0, \quad (2.50)$$

¹Apesar de ϕ e h representarem a mesma grandeza física, usaremos a variável h somente quando se tratar do problema nas variáveis x e t e reservaremos a variável ϕ para o problema na variável ξ .

que ainda é uma equação não-linear de segunda ordem, porém em apenas uma variável.

Punnis (1956), Heaslet e Alksne (1961) e Polubarinova-Kochina (1962) mostraram que através de uma simples mudança de variáveis a Equação (2.50) é equivalente à equação clássica de Blasius para uma camada-limite laminar em uma superfície plana. Introduzindo uma variável η e seguindo a mudança de Heaslet e Alksne (1961), que é dada por

$$\phi = \frac{df}{d\eta}(\eta), \quad \xi = \frac{1}{2}f(\eta), \quad (2.51)$$

a Equação (2.30) se transforma em

$$\frac{d^3 f}{d\eta^3} + \frac{1}{2}f \frac{d^2 f}{d\eta^2} = 0, \quad (2.52)$$

que é o problema de uma camada-limite laminar em um plano semi-infinito, com f sendo a função corrente e η sendo a variável de similaridade criada por H. Blasius. A dedução passo a passo encontra-se no Apêndice B.

O próprio Blasius resolveu este problema com uma série de potências do tipo

$$f(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{b}_n \eta^{3n+2} \quad (2.53)$$

para a qual ele deduz uma relação de recorrência (Blasius, 1908). Desde então este problema tem sido estudado e é tema de pesquisa até a atualidade, com diversos artigos de revisão disponíveis (Boyd, 1999, 2008; Fazio, 2008). Todos esses anos de pesquisa em cima deste problema resultaram em uma enorme carga de conhecimento sobre a equação e suas soluções, o que faz com que a transformação entre os problemas seja de grande valia, já que nos permite aplicar todo o avanço teórico disponível para a equação de Blasius à equação de Boussinesq, sobre a qual ainda se sabe pouco.

Heaslet e Alksne (1961) ainda desenvolveram uma solução em série de potências para (2.50) com as condições de contorno

$$\begin{aligned} \phi(0) &= 0 \\ \phi(\infty) &= 1, \end{aligned} \quad (2.54)$$

mas somente foram até o quarto termo e não apresentaram uma fórmula para os coeficientes ou a relação de recorrência. Esses coeficientes foram obtidos, segundo os autores, invertendo a expansão de Blasius para $f(\eta)$. O resultado foi a aproximação

$$\phi(\xi) \approx 1,1525\xi^{1/2} - \frac{4}{15}\xi^2 + 0,0462\xi^{7/2} - 0,00065\xi^5. \quad (2.55)$$

A solução com essas condições de contorno, no entanto, não foi mais explorada. Curiosamente, para a mesma equação porém com as condições de contorno

$$\begin{aligned} \phi(0) &= 1 \\ \phi(\infty) &= 0, \end{aligned} \quad (2.56)$$

Heaslet e Alksne (1961) desenvolveram uma solução na forma

$$\phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{d}_n \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right)^n, \quad (2.57)$$

provando que a solução do problema nesse caso não é assintótica, já que $\phi(\xi_0) = 0$. Os autores ainda encontraram o ponto ξ_0 analiticamente.

Para fins de simplificação, nos referiremos às condições dadas por (2.56) como condições não homogêneas e às condições dadas por (2.54) como condições homogêneas.

Segundo Telyakovskiy et al. (2002), é um fato conhecido a equação de Boussinesq ter uma velocidade de propagação finita (o que implica na existência de um ponto tal que $\phi(\xi_0) = 0$ no caso de (2.56)), porém o autor trabalha com condições não homogêneas, sendo possível que essa afirmação valha apenas para essas condições de contorno. A discussão sobre a existência ou não de um ponto ξ_0 não foi até agora encontrada em nenhuma referência abordando condições homogêneas.

2.6 Outras transformações de variáveis e soluções de similaridade

Algumas outras soluções de similaridade são aplicadas a construções um pouco diferentes do problema. Um bom exemplo disso é a resolução, também em série de potências, feita por Barenblatt (1952). Do modo como Barenblatt construiu o problema, a carga na origem é função do tempo, e não uma constante. Consideremos então um aquífero semi-infinito como o da Fig. 2.5 e definimos H_0 como

$$H_0 = h(0, t) = \sigma t^\alpha, \quad t > 0, \quad (2.58)$$

com as condições de contorno

$$h(\infty, t) = 0, \quad (2.59)$$

$$h(x, 0) = 0, \quad (2.60)$$

onde α é um coeficiente constante tal que $-1/3 < \alpha < \infty$ para ter sentido físico e σ é uma constante que impõe a taxa de decaimento ou crescimento de H_0 . A partir desta construção, pode-se fazer a transformação de similaridade

$$h = \sigma t^\alpha \phi(\xi) \quad (2.61)$$

$$\xi = x \sqrt{\frac{2n_e(\alpha + 1)}{\sigma k_0 t^{\alpha+1}}}, \quad (2.62)$$

que resulta na equação diferencial

$$\frac{d^2 \phi^2}{d\xi^2} + \frac{\xi}{2} \frac{d\phi^2}{d\xi} - \lambda \phi = 0, \quad (2.63)$$

onde $\lambda = \frac{\alpha}{\alpha+1}$, variando entre $-1/2$ e 1 . As condições de contorno em ξ são

$$\begin{aligned}\phi(0) &= 1 \\ \phi(\infty) &= 0.\end{aligned}\tag{2.64}$$

Devido às condições de contorno, a solução tem uma velocidade de propagação finita e pode-se substituir a segunda condição de contorno por (Song et al., 2007)

$$\phi(\xi_0) = 0.\tag{2.65}$$

Barenblatt (1952) deduziu uma solução em série de potências para esse problema como a definida em (2.57) (porém com definições ligeiramente diferentes para ϕ , ξ e d_n) e listou em seu artigo apenas os três primeiros termos da série porém não apresentou uma relação de convergência (Song et al., 2007). Song et al. (2007) então apresentaram a relação de recorrência

$$d_n = -\frac{2(n+1)}{n\xi_0^2} \sum_{k=2}^{n-1} d_k d_{n+1-k} + \frac{2\lambda + 1 - n}{n^2} d_{n-1}\tag{2.66}$$

e deduziram a posição de ξ_0 como

$$\xi_0 = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{d_n}{\xi_0} \right)^{-1/2},\tag{2.67}$$

que precisa ser resolvido iterativamente.

Ainda para o mesmo problema, Barenblatt (1952) provou que para os casos $\lambda = 1/2$ e $\lambda = -1/2$ a solução se reduz às funções

$$\phi(\xi) = 1 - \xi/2 \quad (0 \leq \xi \leq 2, \lambda = 1/2)\tag{2.68}$$

$$\phi(\xi) = 1 - \xi^2/8 \quad (0 \leq \xi \leq 2\sqrt{2}, \lambda = -1/2),\tag{2.69}$$

que, apesar de simples, são soluções analíticas exatas da equação.

Mais recentemente, Daly e Porporato (2004) encontraram uma solução para um maciço inclinado infinito em ambas as direções com duas transformações de variáveis sucessivas. A primeira delas supõe uma nova variável ω como

$$\omega = x - \bar{c}t,\tag{2.70}$$

onde $\bar{c} = k_0 \sin \theta / n_e$ é a velocidade média efetiva no solo quando $\partial h / \partial x = 0$. Essa transformação leva à equação

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \cos \theta \frac{k_0}{n_e} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(h \frac{\partial h}{\partial \omega} \right) \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \bar{K} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(h \frac{\partial h}{\partial \omega} \right). \quad (2.72)$$

A condição inicial suposta pelo autor é de um volume de água V_0 inicialmente concentrado no ponto $x = 0$ que está sujeito à condição

$$\int_{-\infty}^{\infty} h(x, t) dx = V_0 / n_e. \quad (2.73)$$

Essas condições permitem a aplicação da transformação de similaridade

$$u = \frac{h}{(V_0/n_e)^{2/3} (t\bar{K})^{-1/3}} \quad v = \frac{\omega}{(V_0/n_e)^{1/3} (t\bar{K})^{1/3}} \quad (2.74)$$

que, por sua vez, levam à equação diferencial ordinária (EDO)

$$\frac{d}{dv} \left(u \frac{du}{dv} + \frac{vu}{3} \right) = 0. \quad (2.75)$$

Essa EDO tem solução exata, que pode ser expressa em função das variáveis originais como

$$h(x, t) = \left(\frac{3}{32} \right)^{1/3} \frac{V_0^{2/3}}{(\bar{K}t)^{1/3}} - \frac{(x - \bar{c}t)^2}{6\bar{K}t}. \quad (2.76)$$

Os autores também utilizam a mesma abordagem para desenvolver uma solução bi-dimensional com simetria radial (chegando em um resultado da mesma forma) e uma solução pelo método chamado *traveling wave*.

Capítulo 3

Implementação numérica e condições de contorno

Neste capítulo nos concentramos nas soluções numéricas da equação de Boussinesq. Apresentamos um método para transformar o problema (que é de valor de contorno) em um problema de valor inicial e analisamos as implicações físicas e matemáticas de fazê-lo.

De agora até o fim deste trabalho trataremos apenas da equação de Boussinesq para um maciço infinito com condições de contorno $h^*(0, t) = H_0$ (com H_0 podendo ser zero, menor ou maior que H), $h^*(x, 0) = H$ e $h^*(x, \infty) = H_0$ (vide Figura 2.5) que pode ser modelado pela equação de Boussinesq com a aplicação da transformação de Boltzmann

$$\frac{d}{d\xi} \left(\phi \frac{d\phi}{d\xi} \right) + 2\xi \frac{d\phi}{d\xi} = 0 \quad (3.1)$$

com as condições de contorno

$$\phi(0) = \frac{H_0}{H} = \phi_0, \quad \phi(\infty) = 1, \quad (3.2)$$

reescritas aqui para referência rápida.

3.1 Apresentação do problema e desenvolvimento de uma solução numérica

Na literatura científica, o método Runge-Kutta tem sido amplamente utilizado como uma solução numérica que requer pouco esforço e de confiabilidade razoável. A sua implementação se faz reescrevendo (3.1) como duas equações de primeira ordem. Para isso, começamos definindo uma nova variável ψ como

$$\psi \equiv \phi \frac{d\phi}{d\xi}. \quad (3.3)$$

O fato de que ψ surge do termo $h\partial h/\partial x$, em combinação com a lei de Darcy, nos indica que essa variável está fortemente relacionada com o fluxo de água no aquífero. Dessa forma, os valores de ψ variam conforme a condição inicial do problema e o seu valor inicial determina se a condição $\phi(\infty) = 1$ será satisfeita, o que faz com que sua determinação seja fundamental para a resolução do problema. Definimos então

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \phi(\xi) \frac{d\phi}{d\xi}(\xi) = \lim_{\xi \rightarrow 0} \psi(\xi) \equiv \psi_0. \quad (3.4)$$

O valor de ψ_0 será diferente para cada valor de ϕ_0 . Vale ressaltar que para o caso $\phi(0) = 0$ (embora para ξ tendendo a 0, $\phi \rightarrow 0$ e $\frac{d\phi}{d\xi} \rightarrow \infty$) esse limite existe e é uma constante não-nula. O seu valor para esse caso será discutido mais à frente. Outro detalhe também é que para $H = H_0$, ou $\phi(0) = 1$, a constante é zero pois não há forçante no problema e o fluxo é nulo.

Reescrevemos então (3.1) como duas EDOs em ϕ e ψ :

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \frac{\psi}{\phi} \quad (3.5)$$

$$\frac{d\psi}{d\xi} = -2\xi \frac{\psi}{\phi}. \quad (3.6)$$

A aplicação de um método Runge-Kutta desde $\xi = 0$ no caso da condição inicial $\phi_0 \neq 0$ não encontra dificuldades. No entanto, apesar do método funcionar perfeitamente

para esses casos, o mesmo falha na primeira iteração para o caso homogêneo. Isso se dá pois ambas as equações possuem ϕ no denominador e “explodem” quando $\xi = 0$, já que $\phi(0) = 0$. Até hoje não existe uma maneira padrão de se contornar este problema. Yeh (1970), por exemplo, apenas resolveu problemas do tipo $\phi(\xi = 0) \neq 0$ e não abordou essa questão em seu artigo. Hogarth e Parlange (1999) contornaram este problema começando o método Runge-Kutta de $\xi = 0,01$ e assim evitaram a singularidade na origem.

Uma maneira de se contornar este problema é aplicar um esquema numérico diferente e que evite uma equação singular exclusivamente para o primeiro passo. A opção adotada neste trabalho, também apresentada em Chor et al. (2013), se vale de uma mudança de variáveis que elimina analiticamente a singularidade. Começamos por escrever a Equação (3.1) como

$$\frac{d}{d\xi} \left(\phi \frac{d\phi}{d\xi} + 2\xi\phi \right) - 2\phi = 0. \quad (3.7)$$

Definimos uma função $F(\xi)$ como sendo o termo entre parênteses de (3.7) e $G(\xi) = \phi^2(\xi)$, o que fornece

$$\frac{dF}{d\xi} = 2\sqrt{G} \quad \frac{dG}{d\xi} = 2F - 4\xi\sqrt{G}. \quad (3.8)$$

As condições de contorno nas novas variáveis são

$$G(0) = \phi_0^2 \quad G(\infty) = 1. \quad (3.9)$$

Vale a pena ressaltar que

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} F = \lim_{\xi \rightarrow 0} \psi = \psi_0, \quad (3.10)$$

o que faz com que as condições iniciais sejam

$$G(0) = \phi_0^2 \quad F(0) = \psi_0. \quad (3.11)$$

Essa mudança de variáveis é especialmente útil para o caso da condição inicial homogênea, no entanto pode ser utilizada para quaisquer valores de ϕ_0 . A cada passo, com os valores de F , ξ e G , pode-se recuperar as variáveis originais com $\phi = \sqrt{G}$ e com

$$\psi = F - 2\xi\sqrt{G}. \quad (3.12)$$

Ambas as equações em (3.8) possuem uma operação de raiz quadrada, o que faz com que as mesmas não sejam adequadas para integrações no plano complexo. O aparecimento da raiz quadrada restringe os caminhos de integração no plano complexo ao requerer *branch cuts* (cortes de ramificação), o que torna o procedimento mais complicado.

Para a solução numérica de (3.8) optamos por implementar o método conhecido como Runge-Kutta-Cash-Karp (RKCK) com passo adaptativo ao invés de usar o método Runge-Kutta padrão de quarta ordem. O método RKCK consiste em um método Runge-Kutta de 4ª ordem com seis avaliações onde se pode rearranjar as equações e realizar simultaneamente um método de 5ª ordem. O erro é estimado pela diferença entre as duas ordens (Press et al., 1993). Este método foi programado com um algoritmo controlador de passo que funciona especificando-se o erro máximo desejado em cada passo. O passo a ser dado é escolhido iterativamente de maneira a não superar este erro, que denominaremos ε . Dessa forma em regiões mais suaves pode-se utilizar um passo maior e poupar esforço computacional e em regiões onde o erro é mais acentuado diminui-se o passo até o tamanho necessário. O algoritmo para programação foi extraído de Press et al. (1993) e programado com precisão quádrupla em linguagem FORTRAN 90.

A estimativa de erro do método RKCK é feita ponto a ponto. Isso significa que erro fornecido por cada aplicação do método RKCK em um ponto é relativo apenas àquela iteração e não considera os pontos (ou iterações) anteriores. Como sabemos que o método RKCK é um método de passo progressivo, temos que o erro de cada passo é acumulado para os passos seguintes. Dessa maneira, se para i -ésima iteração do método a estimativa de erro fornecida pelo método é σ_i , temos que o erro absoluto em cada ponto ϵ_k pode ser definido como

$$\epsilon_k = \sum_{j=1}^k |\sigma_j|, \quad (3.13)$$

onde k é o número de iterações feitas até então. Valores comuns para ε ficam em torno de 1×10^{-15} , sendo que não há garantia no fim da solução numérica de um limite superior para o erro absoluto, já que o mesmo depende não só de ε , como também do número de iterações feitas.

3.2 A equação de Boussinesq na Hidrologia de bacias

A transformação do problema em um PVI passa obrigatoriamente pelo entendimento e determinação da variável ψ (definida na seção anterior), que matematicamente age como uma derivada de ϕ normalizada. Dessa forma, antes de passarmos aos métodos matemáticos de transformação do problema em um PVI, estudaremos ψ e sua principal aplicação em hidrologia de bacias como um estimador de vazão.

Analisando as Equações (3.3) e (3.4) tem-se que, se $\psi(\xi)$ se relaciona com o fluxo de água no aquífero, ψ_0 é de especial importância em hidrologia de bacias pois está relacionada com o fluxo de água na origem do aquífero (*i.e.*, interface com o corpo d'água) em diferentes instantes. Pela relação (2.44) e pelo fato de que a vazão de água Q em um ponto é

$$Q = k_0 h \frac{dh}{dx} \quad (3.14)$$

segue-se que

$$Q(x, t) = \frac{H^{3/2}(n_e k_0)^{1/2}}{2} \frac{\psi(\xi(x, t))}{t^{1/2}}, \quad (3.15)$$

onde $Q(x, t)$ é a vazão de água em função de t e x . É importante mencionar que em certos casos a equação de Boussinesq não fornece estimativas para a linha d'água de maneira satisfatória (o que leva à preferência pela equação de Richards (Steenhuis et al., 1999) em alguns casos), o que é atribuído principalmente à suposição de Dupuit-Forchheimer (DF) de que o fluxo é horizontal. É de conhecimento, no entanto, que a suposição de DF mesmo não produzindo (em alguns casos) estimativas precisas de nível d'água, ainda é capaz de produzir estimativas precisas de fluxo na interface entre aquífero e corpo d'água (Luthin, 1973, p. 151).

Tomamos o limite $\xi \rightarrow 0$, que é satisfeito apenas quando $t \rightarrow \infty$ ou com $x \rightarrow 0$. Concentramo-nos no caso onde $x = 0$, que é válido para qualquer tempo t . Logo temos que

$$Q_0(t) = \frac{H^{3/2}(n_e k_0)^{1/2}}{2} \frac{\psi_0}{t^{1/2}}, \quad (3.16)$$

$$\frac{dQ_0}{dt} = -\frac{H^{3/2}(n_e k_0)^{1/2}}{4} \frac{\psi_0}{t^{3/2}}, \quad (3.17)$$

nos dando a vazão de água na origem (Q_0) e sua derivada temporal em qualquer tempo. Dessas equações sai o parâmetro físico

$$D_0 = H^{3/2}(n_e k_0)^{1/2} \psi_0, \quad (3.18)$$

que é algumas vezes chamado de dessortividade (Brutsaert e Nieber, 1977).

Repare pela Equação (3.16) que a vazão na origem é infinita no tempo zero. Isso vem das condições iniciais, que supõem um aquífero completamente cheio em $t = 0$. Dessa forma em $x = 0$ o valor de h cai instantaneamente de H (em $t = 0$) para H_0 (no instante seguinte). Esse comportamento também acontece nos demais pontos do aquífero, no entanto é mais fácil de ser entendido se analisado na origem.

No entanto, apesar de $Q_0 \rightarrow \infty$ no instante inicial, a quantidade de água que sai do aquífero até um tempo finito T , que é dada pela integral

$$\hat{Q}(T) = \int_{t=0}^T Q_0(t) dt = D_0 T^{1/2}, \quad (3.19)$$

é uma quantidade finita, ao contrário do que acontece quando $T \rightarrow \infty$, que fornece $\hat{Q}(T \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$. Isso é esperado, já que supusemos um aquífero de dimensões infinitas, o que é válido apenas para tempos curtos. A Figura 3.1 apresenta a vazão específica na origem Q_0 e a vazão acumulada \hat{Q} em função do tempo em dias.

Um método bastante comum de análise de bacias é o método apresentado primeiramente por Brutsaert e Nieber (1977). Este método é utilizado para se deduzir os parâmetros da bacia (usualmente n_e e k_0) conhecendo-se os dados de vazão em um período de tempo. O método é baseado na suposição de que dQ_0/dt pode ser expressado como função de Q_0 :

$$\frac{dQ_0}{dt} = \mathbb{F}(Q_0). \quad (3.20)$$

O método é ainda especialmente efetivo se uma relação do tipo

$$\frac{dQ_0}{dt} = -\alpha Q_0^\beta \quad (3.21)$$

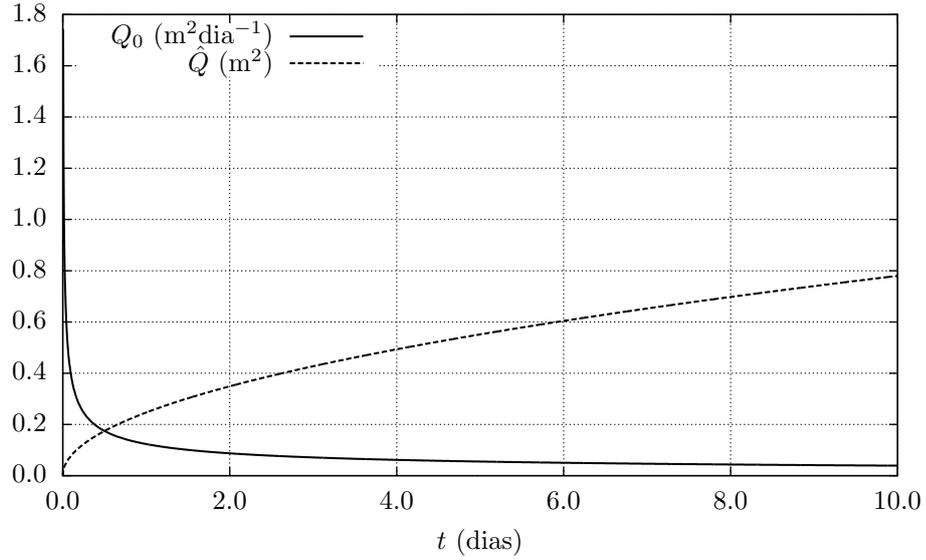


Figura 3.1: Gráficos da vazão e descarga acumulada para um aquífero com $n_e = 0,4$, $k_0 = 0,5$ m/dia, $H_0 = 1$ m e $H = 2$ m.

é válida. A transformação de Boltzmann cai neste último caso. Ainda pode ser mostrado (pelas Equações (3.16) e (3.17)) que para o caso da transformação de Boltzmann $\beta = 3$ e

$$\alpha = \frac{2}{H^3 n_e k_0 \psi_0^2}. \quad (3.22)$$

Nesse contexto, a solução desenvolvida aqui equivale a uma solução para tempos curtos, que são quando o nível da água ainda não “sentiu” os efeitos da parede impermeável e, portanto, a solução se comporta como se o maciço fosse infinito. Outras soluções que consideram um maciço finito (tais como a de Boussinesq (1904) e outras soluções aproximadas) devem ser usadas para tempos avançados, quando a solução sente o efeito da parede impermeável do maciço.

Para um método mais aplicado, pode-se definir a variável

$$\bar{Q} = 2Q_0 \bar{L}, \quad (3.23)$$

onde \bar{L} é a distância total de todos os tributários a montante da estação hidrológica onde se mede a vazão de rio \bar{Q} e o fator 2 se refere ao fato de que há fluxo para o rio vindo das duas margens. Desta maneira, a vazão medida pode ser entendida como

$$\frac{d\bar{Q}}{dt} = -\alpha_1 \bar{Q}^{\beta_1}, \quad (3.24)$$

onde $\beta_1 = 3$ e

$$\alpha_1 = \frac{1}{2H^3 k_0 n_e \psi_0^2 \bar{L}^2}, \quad (3.25)$$

onde ψ_0 varia com ϕ_0 .

Repare que substituindo na equação anterior $\psi_0 \approx 0,6642$, que é o valor aproximado para o caso homogêneo, obtemos

$$\alpha_1 \approx \frac{1,1334}{H^3 k_0 n_e \bar{L}^2}, \quad (3.26)$$

que é a equação (6a) de Brutsaert e Lopez (1998) e (18b) de Brutsaert e Nieber (1977), que consideram, para todos os efeitos, a aproximação de um corpo d'água com profundidade zero. Nesse ponto, a nossa Equação (3.25) é mais geral, pois permitimos que ψ_0 varie conforme a profundidade do corpo d'água.

Com o objetivo de determinar n_e e k_0 , precisamos de mais uma equação válida para tempos avançados (que deve, então, tratar obrigatoriamente de um aquífero finito). Escolhemos a solução aproximada desenvolvida por Boussinesq (1903) que é dada pela Equação (2.26), e que já que foi detalhada na Seção 2.2. A utilização dessa solução para estimar vazão produz

$$Q_0(t) = 2k_0 p H (H - H_0) L^{-1} \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \exp\left(-\frac{n^2 \pi^2 k_0 p H t}{4L^2 n_e}\right), \quad (3.27)$$

que pode ser analisada para tempos longos, reduzindo-se a

$$Q_0(t) = 2k_0 p H (H - H_0) L^{-1} \exp\left(-\frac{\pi^2 k_0 p H t}{4L^2 n_e}\right). \quad (3.28)$$

Apesar da Equação (3.28) ser aproximada, a mesma nos permite estimar a vazão para $H_0 \neq 0$, sendo portanto preferível em termos de generalidade à solução analítica de Boussinesq (1904).

Seguimos então o exemplo da Equação (3.24) e passamos a colocar a Equação (3.28) com (3.23) no formato

$$\frac{d\bar{Q}}{dt} = -\alpha_2 \bar{Q}^{\beta_2}, \quad (3.29)$$

o que produz $\beta_2 = 1$ e

$$\alpha_2 = \frac{\pi^2 k_0 p H \bar{L}^2}{n_e A^2}, \quad (3.30)$$

onde A é a área da bacia, aproximada por $= 2L\bar{L}$.

Ficamos agora com um sistema de duas incógnitas (n_e e k_0) e duas equações (Equações (3.30) e (3.25)). Isolamos então n_e e k_0 nesse sistema, o que produz

$$n_e = \left(\frac{p}{2}\right)^{1/2} \frac{\pi}{H\psi_0 A} (\alpha_2 \alpha_1)^{-1/2} \quad (3.31)$$

e

$$k_0 = \frac{A}{\sqrt{2p} H^2 \bar{L}^2 \pi \psi_0} \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)^{1/2}. \quad (3.32)$$

Nessa formulação, além de supormos $\psi_0 = \Psi_0(\phi_0)$, também somos obrigados a supor que o fator de escala p se comporta como $p = \bar{p}(\phi_0)$.

Introduzimos então a relação empírica $\bar{p} = (1 - p_0)\phi_0 + p_0$, onde p_0 é o valor de \bar{p} para o caso homogêneo, $p_0 = 0,3465$. A aplicação dessa relação com $H_0 = 0$ (e portanto $\phi_0 = 0$) fornece exatamente a mesma formulação apresentada por Brutsaert e Lopez (1998). No entanto uma função $\psi_0 = \Psi_0(\phi_0)$ ainda não existe na literatura. Nesse âmbito as próximas seções são dedicadas e desenvolver abordagens para se obter essa expressão.

3.3 O método de Töpfer e as condições iniciais

Nesta seção apresentamos uma maneira de se transformar o problema de valor de contorno em um problema de valor inicial (PVI).

Para cada condição inicial $\phi_0 \geq 0$, existe apenas uma condição inicial ψ_0 que satisfaz a condição de contorno na origem (Callegari e Friedman, 1968; Callegari e Nachman, 1978; Allan, 1997). Como qualquer solução desenvolvida a partir da origem (como soluções numéricas com métodos em marcha e expansões em série) ainda depende dessa condição inicial, na prática toda a solução depende da precisão com a qual a constante inicial é estimada.

É comum o valor de ψ_0 ser estimado a partir do método de tentativa e erro (escolhendo um ψ_0 que satisfaça melhor a condição de contorno $\phi(\infty) = 1$), como é intuitivo; ou ele é obtido da literatura. O valor de ψ_0 é diferente para cada condição de contorno, sendo que o valor que mais aparece na literatura é para o problema com condições homogêneas. Valores para outros casos dificilmente são apresentados em artigos. Pensando nisso definimos então

$$\psi_H \equiv \Psi_0(\phi_0 = 0). \quad (3.33)$$

Na literatura as melhores estimativas para ψ_H vêm de trabalhos sobre a camada-limite de Blasius (já que com condições homogêneas existe uma relação entre o problema de Boussinesq e o problema clássico de Blasius, como já foi comentado). O valor de ψ_H é de aproximadamente 0,66411467243039259.

A partir da Equação (2.51) prova-se a relação

$$\psi = 2 \frac{d^2 f}{d\eta^2}, \quad (3.34)$$

que é sempre válida. Para o caso homogêneo, podemos tomar o limite quando ξ (e η) tende a zero para deduzir

$$\psi_0 = 2\kappa, \quad (3.35)$$

onde

$$\kappa \equiv \frac{d^2 f}{d\eta^2}(0).$$

Apesar da dedução da relação anterior nunca haver sido formalmente apresentada até onde seja do conhecimento do autor, Parlange et al. (2001) já sabiam da mesma e a utilizaram em uma equação para a descarga de um aquífero (que foi baseada na equação de Boussinesq), ainda que apenas com 8 casas decimais de precisão.

Neste capítulo tornaremos a nossa solução auto-suficiente adaptando um método para determinar ψ_H com precisão arbitrária e que possibilita a resolução do problema com apenas uma execução do modelo. Mais à frente essa abordagem será estendida para todos os valores de ϕ_0 e ψ_0 .

Começamos com uma analogia ao problema de Blasius, que é o problema para o qual o método foi originalmente desenvolvido. O problema de Blasius também é um problema de condição de contorno, e a maneira mais simples e intuitiva de se resolver também é por tentativa e erro de maneira a determinar a constante κ até que a condição de contorno ($d^2 f/d\eta^2(\infty) = 1$) seja satisfeita. (Töpfer, 1912), no entanto, tornou a abordagem de tentativa e erro desnecessária ao realizar uma mudança de variáveis que transforma o problema de condição de contorno em um problema de condição inicial (Fazio, 2008). Isso tornou o problema mais fácil de ser resolvido e permitiu uma determinação precisa de κ (Parlange et al., 1981).

A seguir esse mesmo método será adaptado para a equação de Boussinesq, o que nos permitirá, desde que o erro seja controlado, estimar ψ_0 com a precisão desejada. O método consiste em aplicar a mudança de variáveis

$$\phi = \lambda^{-2}\phi^* \quad \psi = \lambda^{-3}\psi^* \quad \xi = \lambda^{-1}\xi^*, \quad (3.36)$$

que produz a equação

$$\frac{d}{d\xi^*} \left(\phi^* \frac{d\phi^*}{d\xi^*} \right) + 2\xi^* \frac{d\phi^*}{d\xi^*} = 0, \quad (3.37)$$

que é análoga à Equação (3.1), o que mostra que a Equação (3.1) é invariante à mudança de variáveis dada por (3.36).

Impõe-se então as condições

$$\phi^*(0) = \phi_0^* \quad \psi^*(0) = 1, \quad (3.38)$$

o que configura um problema de valor inicial.

Ao aplicar o limite $\xi \rightarrow \infty$ em (3.36) obtém-se o fator de escala λ como

$$\lambda = \left(\lim_{\xi^* \rightarrow \infty} \phi^*(\xi^*) \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.39)$$

ou mais simplificadamente:

$$\lambda = \phi^*(\infty)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.40)$$

A aplicação das condições em $\xi = 0$ produz

$$\phi_0 = \lambda^{-2}\phi_0^* \quad \psi_0 = \lambda^{-3}, \quad (3.41)$$

que nos permite encontrar ψ_0 como

$$\psi_0 = [\phi^*(\infty)]^{-\frac{3}{2}}. \quad (3.42)$$

O método, então, consiste em resolver a equação diferencial com um ϕ_0^* arbitrado até um valor de ξ grande o suficiente para ser considerado uma boa aproximação de $\xi \rightarrow \infty$, assim obtendo $\phi^*(\infty)$. Com o valor de $\phi^*(\infty)$ pode-se obter λ com (3.40) e obter a solução para o problema em ϕ através de (3.36) com condições iniciais dadas por (3.41).

Para a aplicação desse método geralmente utiliza-se soluções numéricas para obter-se o valor de $\phi^*(\infty)$, já que outros tipo de soluções não chegam até um ξ indefinidamente grande. Nesse caso utilizamos, como já foi descrito, o método RKCK.

Repare, no entanto, que ϕ_0 é diferente de ϕ_0^* por um fator λ^{-2} . Isso apenas não é verdade se $\lambda = 1$ (o que, se for verdade, significa que a estimativa inicial resolveu o problema sem a necessidade de mudança de escala) ou $\phi_0^* = 0$, que produz o caso homogêneo em ϕ e que está ligado ao problema clássico de Blasius, para qual o método foi desenvolvido. Isso significa que este método sozinho é adequado para o caso homogêneo porém pouco útil para casos onde $\phi_0 \neq 0$. Na próxima seção apresentamos uma abordagem para lidar com esse empecilho.

3.4 Aproximação para ψ_0 em função de ϕ_0

O método de Töpfer, como visto na seção anterior, funciona bem para o caso homogêneo (onde $\Psi_0 = \psi_H$ e onde as condições de contorno são compatíveis com as condições do problema clássico de Blasius) porém não consegue evitar a abordagem de tentativa e erro em outros casos. A seguir apresentamos uma abordagem que tenta corrigir esse aspecto do método; tanto para $\phi_0 < 1$ quanto $\phi_0 > 1$.

Começamos redefinindo as condições do problema invariante em ϕ^* como

$$\phi^*(0) = \phi_0^* \quad \psi^*(0) = \pm 1, \quad (3.43)$$

sendo que o caso $\psi^*(0) = 1$ é aplicado para casos onde $0 \leq \phi_0^* < 1$ e $\psi^*(0) = -1$ é aplicado para caso onde $1 < \phi_0^*$. Tal adaptação nos permite o uso do método para casos $\phi_0 > 1$ porém ainda nos obriga a utilizar o método da tentativa e erro se quisermos resolver o problema para um ϕ_0 específico.

Buscamos então uma resposta por meio de um ajuste de curvas. Aplicando o método de Töpfer para valores sucessivos de ϕ_0^* obtemos um número arbitrário de pares (ϕ_0, ψ_0) . Todos esses pares, segundo a teoria apresentada na seção anterior, resolvem o problema de valor de contorno desejado. É possível, então, a calibração dos coeficientes de uma expressão empírica para ψ_0 em função de ϕ_0 .

Vamos tratar inicialmente de casos onde $\phi_0 < 1$. A expressão escolhida deve satisfazer todas as características observadas nos dados gerados de ψ_0 como função de ϕ_0 . O método de Töpfer foi aplicado segundo a solução numérica detalhada na Seção 3.1 aproximando $\phi(\infty) \approx \phi(\xi = 50)$ e com um controle de erro que garante a precisão dos dados finais até 1×10^{-10} .

Supomos então que, para $\xi = 0$ e $\phi_0 < 1$, ψ_0 pode ser escrito como função de ϕ_0 segundo a expressão

$$\Psi_0(\phi_0) \approx (\psi_H^d + a\phi_0^b)^{\frac{1}{d}}(1 - \phi_0^c)(1 + f\phi_0^g)^e, \quad (3.44)$$

que garante que para quaisquer valores de a, b, c, d, e, f and g , as condições

$$\Psi_0(\phi_0 = 0) = \psi_H, \quad (3.45)$$

$$\Psi_0(\phi_0 = 1) = 0, \quad (3.46)$$

$$\frac{d\Psi_0}{d\phi_0}(\phi_0 = 0) = 0, \quad (3.47)$$

são satisfeitas. A condição de derivada nula com $\phi_0 = 0$ é estudada em mais detalhes na Seção 6.2.

Analogamente, supomos que para valores de ϕ_0 maiores que 1, ψ_0 pode ser escrito

como

$$\Psi_0(\phi_0) \approx (1 - \phi_0^{\bar{a}})(\bar{b} + \bar{c}\phi_0^{\bar{d}})^{\bar{e}}, \quad (3.48)$$

que garante que $\psi_0(\phi_0 = 1) = 0$ (única condição conhecida para essa faixa de valores).

Os parâmetros a , b , c , d , e , f e g foram obtidos com uma aplicação do método Levenberg-Marquardt com o programa GnuPlot (<http://www.gnuplot.info/>), que forneceu os valores $a = 0.7335420$, $b = 0.9992700$, $c = 0.9838109$, $d = 2.9478507$, $e = 0.1864231$, $f = 0.9675153$ e $g = 0.9341123$ para o caso $\phi_0 < 1$. Esses valores aplicados na Equação (3.44) fornecem os resultados apresentados na Figura 3.2, que mostra 500 pontos calculados com aplicações sucessivas do método de Töpfer e a aproximação (3.44). Os maiores erros (diferenças absolutas entre os dados e a Equação (3.44)) acontecem no intervalo $0 \leq \phi_0 \lesssim 0.2$. O erro máximo (8.44×10^{-8}) acontece para $\phi_0 = 3 \times 10^{-2}$.

Para o caso $\phi_0 > 1$, o mesmo método de estimativa dos coeficientes fornece os valores $\bar{a} = 1.03307$, $\bar{b} = 0.42704$, $\bar{c} = 0.766737$, $\bar{d} = 0.943232$ e $\bar{e} = 0.498194$; que tem erros similares ao caso anterior no intervalo $1 \leq \phi_0 < 5$. A Equação (3.48) com os valores calibrados dos coeficientes está apresentada na Figura 3.2 ao lado de pontos calculados numericamente. A aproximação não foi testada para valores de ϕ_0 maiores do que 5, porém os erros vão gradativamente aumentando conforme os valores de ϕ_0 desejados se distanciam da faixa $0 \leq \phi_0 < 5$.

Uma equação aproximada para ψ_0 em função de ϕ_0 (ou analítica) não foi encontrada na literatura para ser comparada. Apesar de uma estimativa para ψ_0 poder ser retirada da expressão para a dessortividade apresentada por Brutsaert e Nieber (1977), a mesma depende de um valor p que vem da linearização da equação de Boussinesq com uma altura d'água característica para a qual não há estimativa geral e precisa ser considerada caso a caso, portanto a mesma tem sua aplicabilidade limitada.

Mais à frente neste documento será apresentado um método analítico para a determinação de ψ_0 em função de ϕ_0 . Apesar do método analítico ter uma precisão arbitrária, o fato de o mesmo depender de uma soma faz com que uma precisão da ordem de 1×10^{-6} seja muito mais lenta computacionalmente do que a aproximação apresentada aqui (que

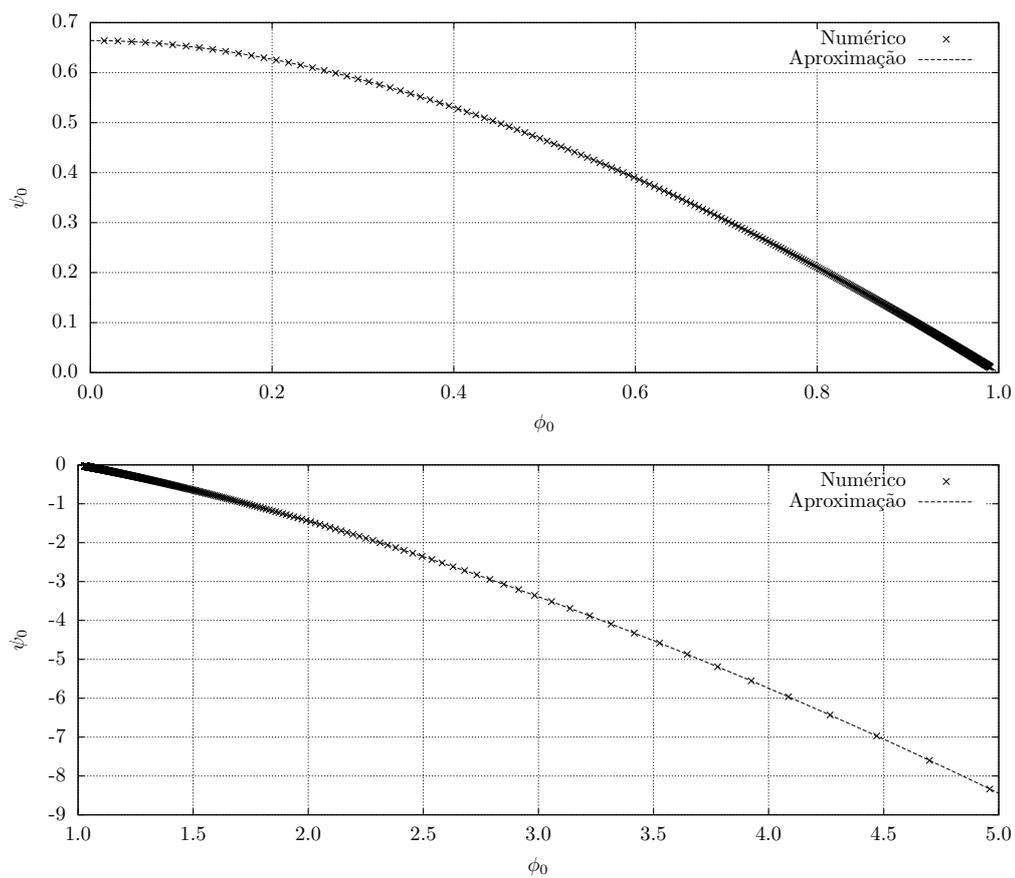


Figura 3.2: Exemplos da aproximação para $\psi_0(\phi_0)$. A figura de cima apresenta a Equação (3.44) enquanto que a de baixo apresenta a Equação (3.48).

obtem uma precisão mais satisfatória do que essa). Esse fator fez com que em todas as análises desse documento fossem usadas as expressões apresentadas nesta seção para se conseguir $\Psi_0(\phi_0)$, apesar de se tratar de uma aproximação, em substituição ao método baseado em uma equação analítica.

Capítulo 4

Resolução geral do problema

Neste capítulo procuramos desenvolver uma solução em série para o problema que seja expansível de qualquer ponto do domínio, o que nos permite utilizar o princípio da continuação analítica para reproduzir a função analiticamente em qualquer ponto do domínio. Isso implica que a série em questão tem que ser capaz de reproduzir o comportamento da função a partir tanto de pontos onde já sabemos ser singulares (a origem do problema homogêneo) quanto de pontos onde aparentemente não há singularidade alguma (e.g. qualquer ponto $\xi > 0$).

Para prosseguir com o desenvolvimento de uma solução em forma de uma série em ξ , consideramos a Equação (3.1) integrada de um ponto arbitrário ξ_a a ξ

$$\underbrace{\phi \frac{d\phi}{d\xi}}_I - \psi_a + 2 \left(\underbrace{\xi \phi \Big|_{\xi_a}^{\xi}}_{II} - \underbrace{\int_{\xi_a}^{\xi} \phi d\xi}_{III} \right) = 0, \quad (4.1)$$

onde $\psi_a = \psi(\xi_a)$.

Baseados nas soluções existentes na literatura (Heaslet e Alksne, 1961; Chor et al., 2013) e em soluções prévias obtidas aqui (e que estão detalhadas nos apêndices C e D por simplicidade), supomos que ϕ pode ser escrito como

$$\phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{n/2}. \quad (4.2)$$

Definimos analogamente ϕ_a como sendo $\phi(\xi_a)$. Pelas condições iniciais também temos que

$$a_0 = \phi_a. \quad (4.3)$$

Substituindo (termo a termo) a série definida em (4.1) segue então que

$$I = \phi \frac{d\phi}{d\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{n/2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{2} a_k (\xi - \xi_a)^{\frac{k-2}{2}} \quad (4.4)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{n+1} \frac{k}{2} a_k a_{n-k+1} \right) (\xi - \xi_a)^{\frac{n-1}{2}}. \quad (4.5)$$

Continuando o processo com os termos II e III temos também que

$$\begin{aligned} II = \xi \phi \Big|_{\xi_a}^{\xi} &= \left[(\xi - \xi_a + \xi_a) \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} \right]_{\xi_a}^{\xi} \\ &= \left[(\xi - \xi_a) \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} + \xi_a \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} \right]_{\xi_a}^{\xi} \\ &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} \right]_{\xi_a}^{\xi} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} - \xi_a a_0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Passando ao terceiro termo:

$$III = - \int_{\xi_a}^{\xi} \phi d\xi = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n+2} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}}. \quad (4.7)$$

Dessa forma o termo entre parênteses pode ser expresso como

$$II + III = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} - \xi_a a_0 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n+2} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} \quad (4.8)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n+2} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{n=0}^{\infty} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n}{2}} - \xi_a a_0 \quad (4.9)$$

Somando todos os termos devidamente integrados temos que a equação (4.1) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} &\sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{m+1} \frac{k}{2} a_k a_{m-k+1} \right) \xi^{\frac{m-1}{2}} - \psi_a \\ &+ 2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n+2} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{p=0}^{\infty} a_p (\xi - \xi_a)^{\frac{p}{2}} - \xi_a a_0 \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Agora surge a necessidade de que todos os somatórios tenha os mesmos índices contadores. Para isso introduz-se as relações

$$m = n + 3 \quad p = n + 2, \quad (4.11)$$

o que produz

$$\begin{aligned} \sum_{n=-3}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{n+4} \frac{k}{2} a_k a_{n-k+4} \right) (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} - \psi_a \\ + 2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n+2} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{n=-2}^{\infty} a_{n+2} (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} - \xi_a a_0 \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Considera-se agora cada valor de n separadamente até que os somatórios tenham os mesmos limites. Analisando separadamente então a equação para $n = -3$ temos

$$a_1 a_0 = 0. \quad (4.13)$$

A análise para $n = -2$ fornece

$$\frac{a_1^2}{2} + a_2 a_0 = \psi_a. \quad (4.14)$$

Resta agora

$$\sum_{n=-1}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{n+4} \frac{k}{2} a_k a_{n-k+4} \right) (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + 2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n+2} a_n (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} + \xi_a \sum_{n=-1}^{\infty} a_{n+2} (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} \right) = 0.$$

O único valor que sobra é $n = -1$. Analogamente então para $n = -1$ tem-se

$$3(a_1 a_2 + a_3 a_0) + 4\xi_a a_1 = 0. \quad (4.15)$$

Com todos os somatórios começando de 0 e indo até o infinito podemos cancelar a dependência de $(\xi - \xi_a)$ junto com o somatório anterior:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^{n+4} \frac{k}{2} a_k a_{n-k+4} + 2 \frac{n}{n+2} a_n + 2\xi_a a_{n+2} \right) (\xi - \xi_a)^{\frac{n+2}{2}} &= 0 \\ \sum_{k=1}^{n+4} k a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} &= 0 \\ (n+4) a_0 a_{n+4} + \sum_{k=1}^{n+3} k a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} &= 0 \\ (n+4) a_0 a_{n+4} + \frac{n+4}{2} \sum_{k=1}^{n+3} a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} &= 0. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Neste ponto somos forçados a considerar dois casos diferentes: o caso onde ϕ é nulo no ponto de expansão ($\phi_a = 0$) e o caso onde ϕ é não-nulo no ponto de expansão ($\phi_a \neq 0$). Se $\phi_a \neq 0$, então, pelas condições iniciais, $a_0 \neq 0$ e temos que

$$(n+4)a_0a_{n+4} = -\frac{n+4}{2} \sum_{k=1}^{n+3} a_k a_{n-k+4} - \frac{4n}{n+2} a_n - 4\xi_a a_{n+2}$$

$$a_{n+4} = -\frac{1}{(n+4)a_0} \left(\frac{n+4}{2} \sum_{k=1}^{n+3} a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} \right), \quad (4.17)$$

que é a relação de recorrência para uma série de Taylor, pois os coeficientes ímpares são nulos, o que será melhor explicado adiante.

Se, no entanto, $\phi_a = 0$, e portanto $a_0 = 0$, então temos

$$\frac{n+4}{2} \sum_{k=1}^{n+3} a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} = 0$$

$$\frac{(n+4)}{2} a_1 a_{n+3} + \frac{n+4}{2} \sum_{k=2}^{n+2} a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} = 0$$

$$a_{n+3} = -\frac{1}{(n+4)a_1} \left(\frac{n+4}{2} \sum_{k=2}^{n+2} a_k a_{n-k+4} + \frac{4n}{n+2} a_n + 4\xi_a a_{n+2} \right), \quad (4.18)$$

de maneira que temos duas relações de recorrência distintas. Chamaremos essa última de relação para uma série fracional.

Note pelas equações que definem os coeficientes que se a série é expandida a partir de um ponto onde ϕ_a é zero, então a série tem um comportamento de raiz quadrada perto do ponto de expansão, como era de se esperar pela solução feita especificamente para condições homogêneas (veja no Apêndice C).

Se, no entanto, a série é expandida a partir de um ponto onde $\phi_a \neq 0$, então vemos pelas Equações (4.13), (4.14) e (4.15) que a_1 e a_3 são nulos. Aplicando a relação de recorrência, dada pela Equação (4.17), para os seguintes coeficientes temos que nesse caso todo a_n é nulo quando n é ímpar. Isso anula todos os termos que possuem expoentes fracionais. Podemos então reescrever a série e a relação de recorrência para o caso $\phi_a \neq 0$ como

$$\phi(\xi) = \sum_n^{\infty} \bar{a}_n (\xi - \xi_a)^n \quad (4.19)$$

$$\bar{a}_{n+2} = -\frac{1}{(2n+4)\bar{a}_0} \left(\frac{2n+4}{2} \sum_{k=1}^{n+1} \bar{a}_k \bar{a}_{n-k+2} + \frac{8n}{2n+2} \bar{a}_n + 4\xi_a \bar{a}_{n+1} \right). \quad (4.20)$$

Tabela 4.1: Primeiros seis coeficientes a_n (para o caso $\phi_a = 0$) e \bar{a}_n .

n	a_n	\bar{a}_n
0	0	ϕ_a
1	$\sqrt{2\psi_a}$	ψ_a/ϕ_a
2	$-\frac{4}{3}\xi_a$	$-\frac{1}{2\bar{a}_0}(\bar{a}_1^2 + 2\xi_a\bar{a}_1)$
3	$-\frac{1}{4a_1}(2a_2^2 + 4\xi_a a_2)$	$-\frac{1}{3\bar{a}_0}(3\bar{a}_1\bar{a}_2 + \bar{a}_1 + 2\xi_a\bar{a}_2)$
4	$-\frac{1}{5a_1}(5a_2a_3 + \frac{4}{3}a_1 + 4\xi_a a_3)$	$-\frac{1}{4\bar{a}_0}(4\bar{a}_1\bar{a}_3 + 2\bar{a}_2^2 + \frac{8}{6}\bar{a}_2 + 2\xi_a\bar{a}_3)$
5	$-\frac{1}{6a_1}(6a_2a_4 + 3a_3^2 + \frac{8}{4}a_2 + 4\xi_a a_4)$	$-\frac{1}{10\bar{a}_0}(10\bar{a}_1\bar{a}_4 + 10\bar{a}_2\bar{a}_3 + 3\bar{a}_3 + 4\xi_a\bar{a}_4)$

Percebe-se pela Equação (4.19) que nesse caso a série possui apenas coeficientes inteiros, sendo, portanto, uma série de Taylor. Isso é esperado dada a solução para o caso especificamente não homogêneo (veja no Apêndice D). A tabela 4.1 apresenta os seis primeiros coeficientes \bar{a}_n e a_n para o caso $\phi_a = 0$ (obtidos com (4.20) e (4.18), respectivamente)

A Figura 4.1 mostra a expansão em série para dois casos. Apesar do raio de convergência da série em torno da origem nesse caso ser aproximadamente 2,3757 (Chor et al., 2013) para o caso homogêneo e 0,7 para $\phi_0 = 0,6$ (como será discutido adiante), a série é apresentada até $\xi = 5$ em ambos os casos, o que é um exemplo de aplicação do princípio da continuação analítica. Essa figura foi feita com três expansões sucessivas para o caso homogêneo e quatro para $\phi_0 = 0,6$. Por inspeção temos que há uma tendência de aumento do raio de convergência conforme expandimos a partir de pontos mais afastados da origem.

Até então, tanto quanto seja de conhecimento do autor, não havia uma solução para a equação de Boussinesq que fosse analítica e que pudesse ser usada em todo o domínio semi-infinito. Para esses casos de convergência limitada geralmente completa-se a convergência com uma aproximação assintótica válida para valores altos de ξ (vide Apêndice F) e aumenta-se a convergência da própria série com um acelerador de convergência, *e.g.*, uma Aproximação de Padé (vide Apêndice E).

A única restrição matemática que foi necessária para a dedução da série apresentada

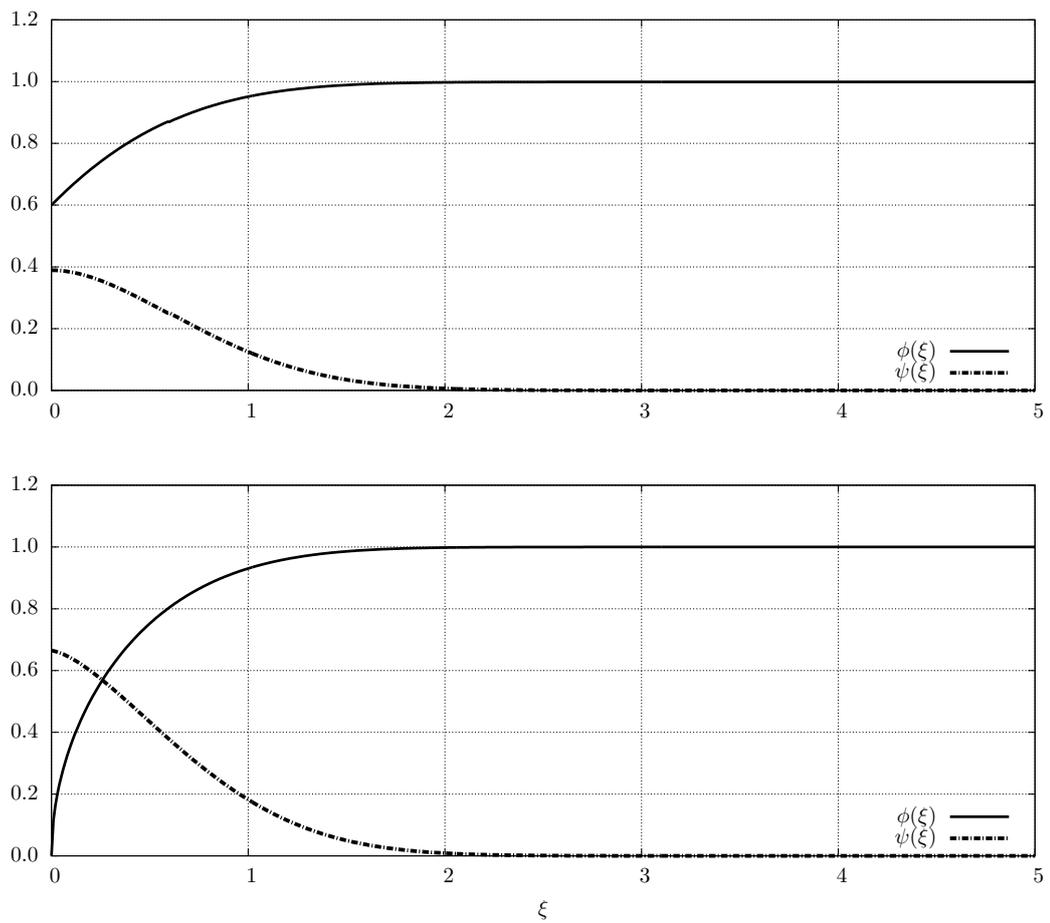


Figura 4.1: Gráfico das funções ϕ e ψ para o caso homogêneo (abaixo) e o caso $\phi_0 = 0.6$ (acima). Esta figura foi feita apenas com a expansão em série deduzida utilizando o princípio da continuação analítica e o programa utilizado está apresentado no Apêndice I.

neste capítulo foi $H \neq 0$. Todos os outros casos, no entanto, estão dentro do escopo dessa série. Dessa maneira, devido às limitações físicas e a limitação matemática discutida, a série é válida para quaisquer condições iniciais contempladas em $\phi_0 \geq 0$ e $H \geq 0$.

Capítulo 5

Análises no plano complexo e raio de convergência

Neste capítulo exploraremos a equação de Boussinesq no plano complexo. A principal razão para se fazer isso é o entendimento das singularidades que limitam a convergência das soluções em série, já que, segundo o teorema 3.3a de Henrici (1974a, p. 155), o raio de convergência de uma série de Taylor é dada pela distância desde o ponto de sua expansão até a singularidade mais próxima. Para o caso da série definida em (4.2) expandida a partir de um ponto singular, chega-se por inspeção numérica à conclusão de que o mesmo vale, desde que o próprio ponto de expansão não seja considerado como a singularidade mais próxima.

No caso da equação de Blasius, a localização das singularidades é bem conhecida: há três polos simples mais próximos e a uma distância da origem de $|\eta| = 5,6900380545$ (Boyd, 2008), sendo um deles no eixo negativo de η . Descobre-se que as singularidades são polos de ordem 1 supondo um comportamento assintótico perto das singularidades da forma

$$f \approx \frac{\rho_b}{(\eta - S_b)^\nu}, \quad (5.1)$$

onde ρ_b é o resíduo das singularidades e S_b é a distância da mesma da origem. Substituindo a aproximação anterior na equação (2.52) temos que $\rho_b = 6$ e $\nu = 1$, caracterizando um

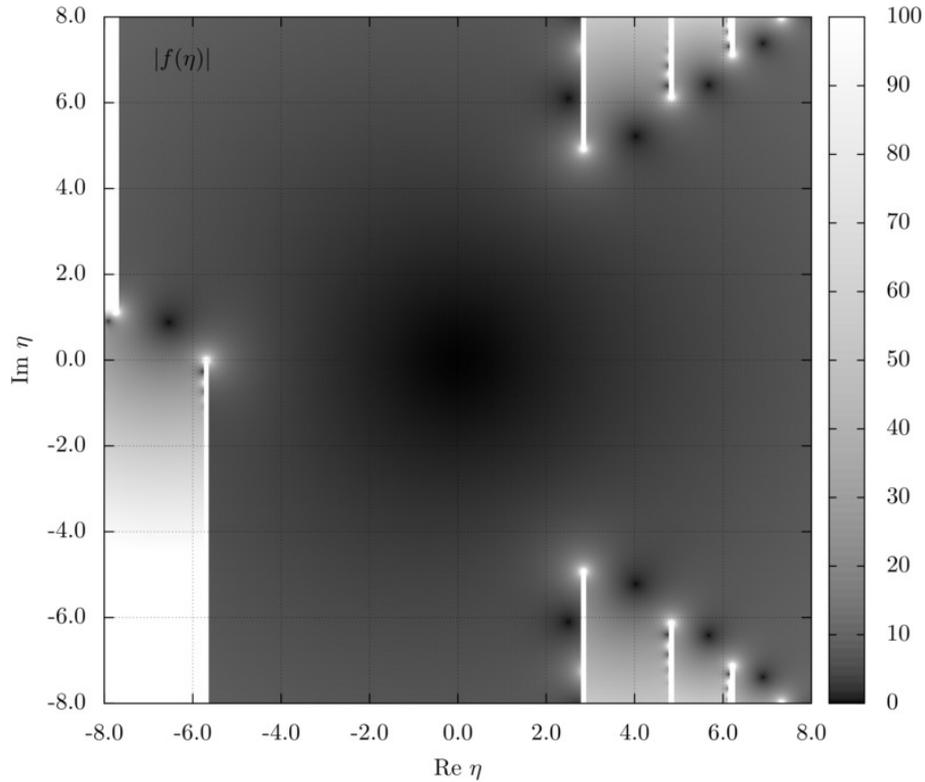


Figura 5.1: Função de Blasius no plano complexo. As linhas brancas verticais são fruto dos caminhos de integração utilizados para gerar a figura.

polo simples com um resíduo de exatamente 6. Os polos podem ser vistos na Figura 5.1 como seqüências de pontos brancos. As linhas brancas que seguem verticalmente a partir de cada ponto são fruto do procedimento de integração numérica utilizado para gerar a figura. Esse procedimento foi o mesmo utilizado para gerar todas as imagens de planos complexos deste trabalho e será detalhado mais adiante neste capítulo.

A abordagem descrita para o caso de Blasius não funciona na equação de Boussinesq. Como um exemplo, aproximando

$$\phi \approx \frac{\rho}{(\xi - S)^\nu} \quad (5.2)$$

e substituindo na equação (2.50), temos que $\nu = -1$, o que não caracteriza uma singularidade. Este fato indica que começamos com uma suposição equivocada de que a singularidade é um polo.

Devido à dificuldade de análise de singularidades analiticamente, passamos para uma

abordagem numérica para explorar o plano complexo com a equação de Boussinesq.

A mesma abordagem que foi apresentada para a reta real será utilizada no plano complexo: integração numérica com o método RKCK com controle de erro e passo adaptativo. A única diferença é a definição de todas as variáveis como variáveis complexas, ao invés de variáveis reais. Repare que a definição do erro como apresentado pela equação (3.13) abrange integrações no plano complexo, retornando um número real mesmo com σ_j sendo complexo. Portanto, a definição do erro absoluto continua a mesma.

5.1 Análise do problema original

Ao integrar a equação (3.1) no plano complexo tem-se a função $\phi(\xi)$ como mostrado nas Figuras 5.2 e 5.3 para várias condições iniciais. Figuras em tamanho maior e para outras condições iniciais podem ser encontradas no Apêndice H. Vemos que há vários pontos onde o módulo da função ϕ vai a zero, que são todos os pontos escuros que aparecem nas figuras. Uma integração por um caminho qualquer $s(\xi)$ que passe por algum desses pontos mostra um comportamento do módulo de ϕ similar ao ilustrado na Figura 5.4: um ponto onde o módulo da função é zero porém a derivada é infinita; daí o comportamento singular.

A explicação desse comportamento passa pela definição de $d\phi/d\xi$ em função da variável ψ (reescrita aqui para referência facilitada):

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \frac{\psi}{\phi}. \quad (5.3)$$

Fica claro pela Eq. (5.3) que (salvo casos onde $\psi = 0$) quando $\phi = 0$, a sua derivada é infinita, daí o comportamento característico mostrado na Fig. 5.4.

Nesse ponto fazemos a suposição de que não existem singularidades de outra natureza. Dessa maneira supomos que todas as singularidades em $\phi(\xi)$ são causadas pelo módulo de ϕ sendo nulo, sem exceções. Embora essa hipótese não tenha sido provada analiticamente, em todas as simulações numéricas feitas no decorrer do trabalho não foi encontrada nenhuma evidência contrária a essa suposição. Aceita a hipótese anterior, a

busca das singularidades agora se torna uma busca por pontos onde $\phi = 0$.

Como se pode ver nas Figuras 5.2 e 5.3, a disposição das singularidades muda não-linearmente de acordo com a condição inicial imposta. Um ponto de destaque é a condição $\phi_0 \approx 0,58$. Para $\phi_0 < 0,58$ a singularidade mais próxima da origem está no eixo negativo da reta real (ou zero para o caso homogêneo). Para condições $\phi_0 > 0,58$ as singularidades mais próximas são um par conjugado no segundo e terceiro quadrantes, sendo que para ϕ_0 perto porém maior que 0,58 vê-se claramente uma série (aparentemente infinita) de singularidades ordenadas (canto inferior direito da Fig. 5.2).

O objetivo agora é formular uma análise numérica que seja geral o suficiente para abranger todas as condições iniciais. É possível, como demonstrado no Apêndice G, fazer uso do teorema geral de Cauchy ou dos coeficientes da série para descobrir o raio de convergência de uma série a partir de um ponto através de sucessivas integrais fechadas. Esse procedimento deixa a desejar no quesito de praticidade, sendo muito custoso computacionalmente, principalmente se for utilizado para diferentes casos de ϕ_0 .

É pensando nisso que passamos para a próxima seção com o intuito de formular uma análise numérica geral e que seja computacionalmente fácil de ser realizada.

5.2 Análise do problema invertido

É numericamente difícil encontrar as singularidades em ϕ com ξ sendo a variável independente já que os métodos numéricos não funcionam na vizinhança de uma singularidade. Nós propomos aqui um método alternativo. Tratando ξ como a variável dependente e ϕ como independente consegue-se facilitar o tratamento das singularidades. Pode-se aplicar a regra da cadeia na equação (3.1) como

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\phi} \left(\phi \frac{d\phi}{d\xi} \right) \frac{d\phi}{d\xi} + 2\xi \frac{d\phi}{d\xi} &= 0 \\
\frac{d}{d\phi} \left(\frac{\phi}{\frac{d\xi}{d\phi}} \right) + 2\xi &= 0 \\
\frac{d}{d\phi} \left(\frac{\phi}{\xi'} \right) + 2\xi &= 0,
\end{aligned} \tag{5.4}$$

onde $\xi' = d\xi/d\phi$ e com as condições de contorno equivalentes

$$\xi(\phi_0) = 0 \quad \psi(\phi_0) = \psi_0. \tag{5.5}$$

Essa nova equação também pode ser transformada em duas EDOs:

$$\frac{d\psi}{d\phi} = -2\xi \quad \frac{d\xi}{d\phi} = \frac{\phi}{\psi}. \tag{5.6}$$

Repare que nesta configuração ψ continua com a mesma definição, logo a condição inicial ψ_0 é a mesma. Além disso, todas as derivadas infinitas $d\phi/d\xi$ correspondem agora a derivadas nulas $d\xi/d\phi$, que são mais fáceis de lidar numericamente.

Apesar do tratamento mais fácil dos pontos singulares ser uma grande vantagem, o grande trunfo desse método é que todos os pontos onde $d\phi/d\xi \rightarrow \infty$ (que são pontos singulares) são conhecidos nesta configuração, já que todos correspondem a $|\phi| = 0$, que é a origem do plano ϕ . Isso vem da suposição feita na seção anterior de que todos os pontos singulares na configuração $\phi(\xi)$ acontecem quando $\phi = 0$.

A localização das singularidades na configuração $\phi(\xi)$ (ou seja, os valores de ξ para os quais $d\phi/d\xi \rightarrow \infty$) são os diferentes valores que a função $\xi(\phi)$ assume em $\phi = 0$. Para uma mesma condição inicial, $\xi(\phi = 0)$ pode ter valores diferentes dependendo do caminho percorrido desde $\phi = \phi_0$ até $\phi = 0$.

Repare pelas Fig. 5.5 que na configuração $\xi(\phi)$ também existem singularidades no plano complexo, apesar de estarem em quantidade muito menor e de serem aparentemente “melhor organizadas”. Essas singularidades são polos (pontos brancos). Repare também que para $\phi_0 < 0,58$ o caminho entre ϕ_0 (ponto mas escuro, indicando $\xi(\phi_0) = 0$) até $\phi = 0$ pela reta real está livre de polos, o que não acontece com $\phi_0 > 0,58$.

Como consequência, tem-se que para condições iniciais $\phi_0 < 0,58$ a integração pode, a rigor, ser feita estritamente com variáveis reais. No entanto para condições iniciais $\phi_0 > 0,58$, o polo entre ϕ_0 e $\phi = 0$ na reta real obriga o uso de um caminho de integração (e variáveis) complexas. Dessa forma, para o método ser o mais genérico possível, definimos sempre um caminho primário pelo plano complexo independente da condição inicial imposta. O caminho está ilustrado na figura 5.6. Como esse caminho não contorna nenhuma singularidade (na forma $\xi(\phi)$), sempre encontramos a singularidade mais próxima da origem.

Para o caminho primário definimos $\delta = 3\phi_0/4$, o que faz com que o caminho real percorrido desde ϕ_0 , passando por A até a origem B seja sempre $2\phi_0$.

Caminhos secundários, como o que está representado na figura 5.7, também são possíveis. A cada volta que se dá no polo em $\phi = 1$ se descobre a localização de uma singularidade diferente na configuração $\phi(\xi)$. Caminhos de integração contornando o ponto $\phi = 1$ no sentido horário e anti-horário resultam cada um em uma das singularidades de um par conjugado de singularidades.

A figura 5.8 apresenta os resultados do método apresentado. Repare que o caminho primário definido é geral o suficiente para ser usado mesmo em condições onde $\phi_0 > 1$, logo esses resultados também estão apresentados (apesar de não serem foco dos nossos estudos). Vê-se que, como era de se esperar, a singularidade mais próxima da origem para $\phi_0 = 0$ é o próprio ponto $\phi = 0$. A singularidade mais próxima tende a uma distância infinita quando $\phi_0 = 1$, já que nessa condição não há forçante e a função é $\phi(\xi) = 1$ em todo o domínio.

Vê-se também um comportamento claramente não-linear em $\phi_0 \approx 0,58$, o que é outro indício que este ponto é de interesse para o estudo das singularidades.

Outro aspecto que vale a pena ser ressaltado é que, enquanto a singularidade mais próxima é fácil de ser encontrada, ainda não está claro qual a maneira de se determinar com certeza um caminho de integração em $\xi(\phi)$ de modo a determinar a localização de uma singularidade específica em $\phi(\xi)$. Um exemplo disso é a singularidade que se encontra

no quarto quadrante dos planos na Figura 5.2 e que não possui um par conjugado. Ainda não está claro qual o caminho de integração que tem que ser feito para se obter a sua localização, sendo que todos os esforços nessa direção até agora foram feitos com o método de tentativa e erro.

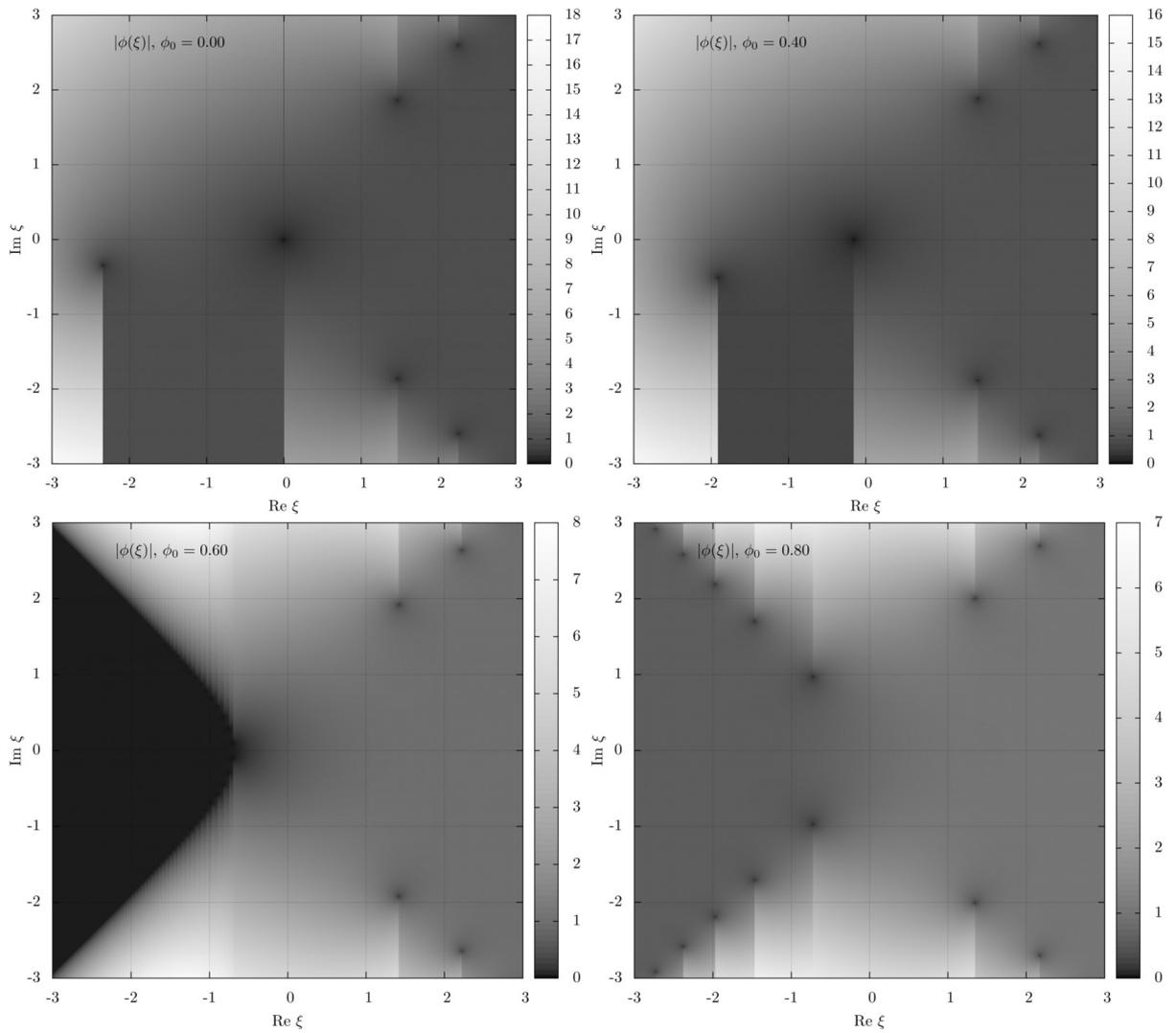


Figura 5.2: Representação de ϕ no plano complexo com $\phi_0 = 0$ (superior esquerdo), $\phi_0 = 0,4$ (superior direito), $\phi_0 = 0,6$ (inferior esquerdo) e $\phi_0 = 0,8$ (inferior direito). Para uma visualização com mais detalhes veja o Apêndice H.

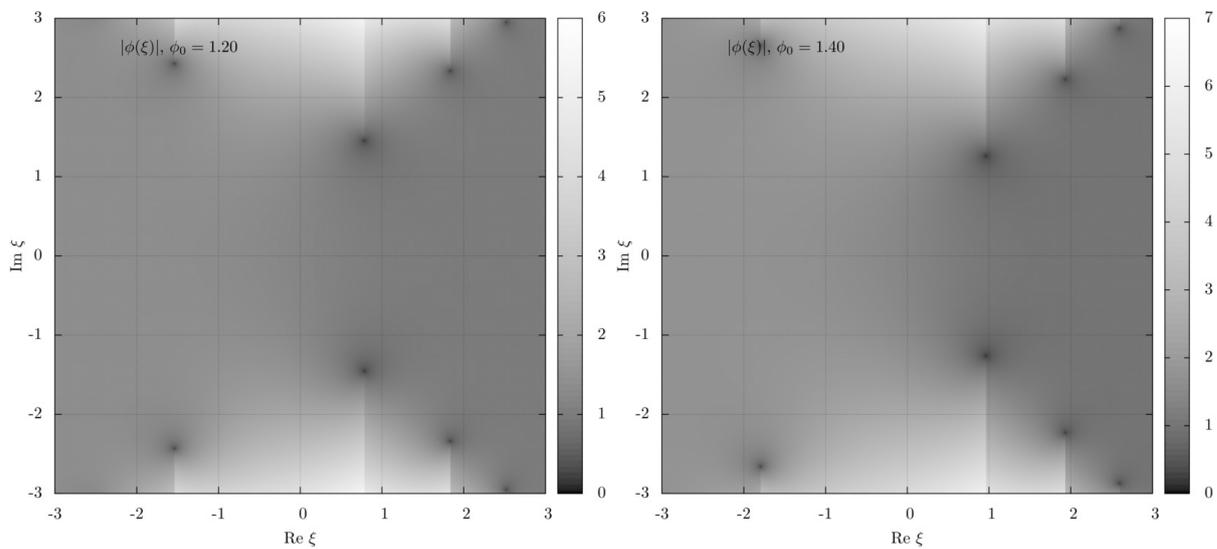


Figura 5.3: Função ϕ no plano complexo com $\phi_0 = 1.2$ (esquerda) e $\phi_0 = 1.4$ (direita).

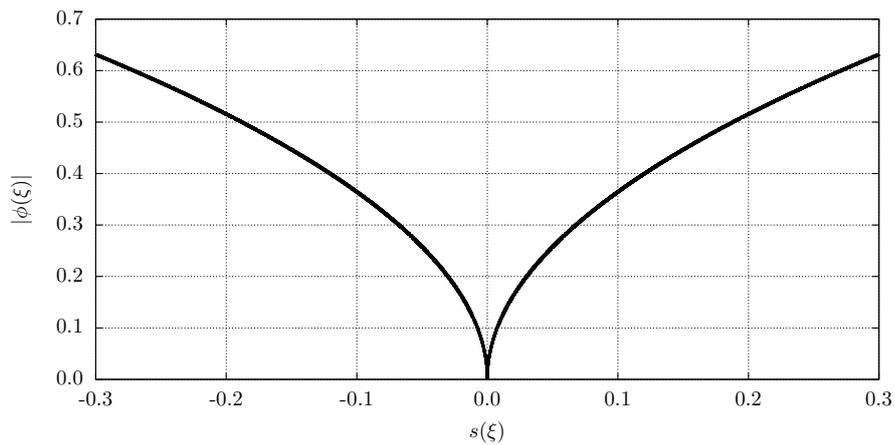


Figura 5.4: Exemplo do comportamento de uma singularidade.

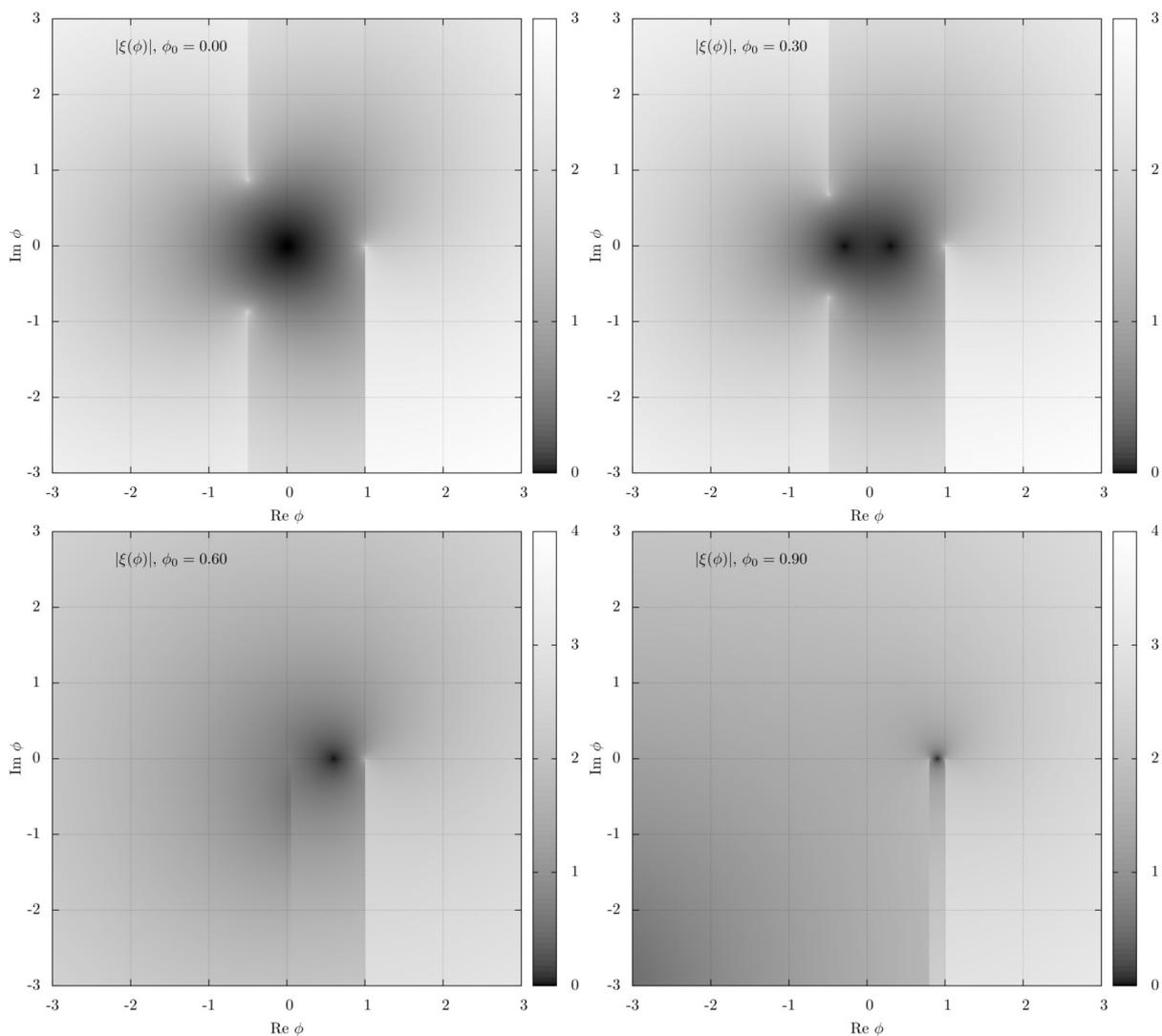


Figura 5.5: Representação de $\xi(\phi)$ no plano complexo para $\phi_0 = 0$ (superior esquerdo), $\phi_0 = 0,3$ (superior direito), $\phi_0 = 0,6$ (inferior esquerdo) e $\phi_0 = 0,9$ (inferior direito). Figuras mais detalhadas do plano complexo de $\xi(\phi)$ para condições de contorno variadas podem ser vistas no Apêndice H.

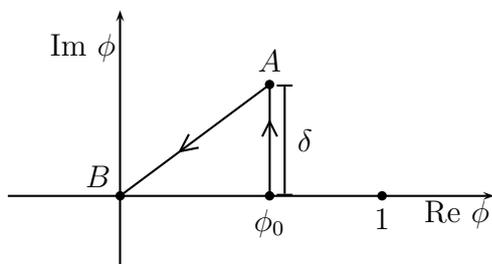


Figura 5.6: Caminho da integração feita no plano complexo para encontrar a localização das singularidades mais próximas da origem.

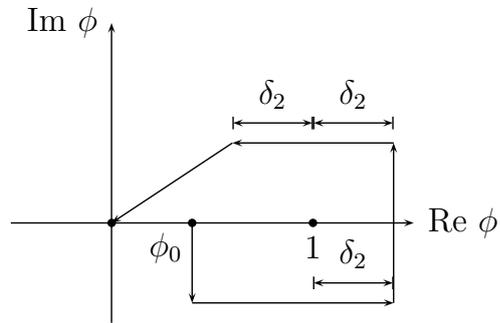


Figura 5.7: Caminho da integração feita no plano complexo para encontrar a localização de singularidades à direita e mais próximas da origem.

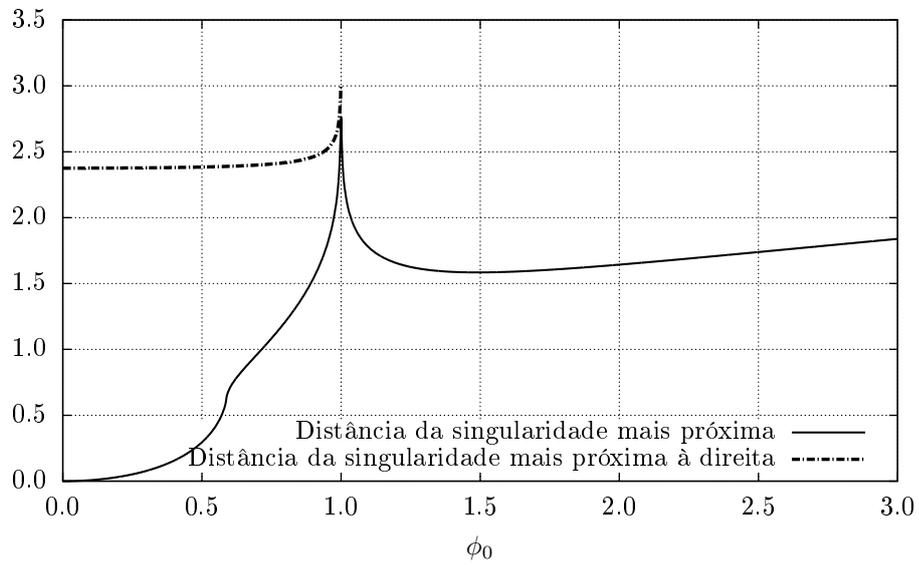


Figura 5.8: A distância de singularidades no plano complexo de ϕ até a origem. O programa utilizado para gerar esse gráfico está apresentado no Apêndice I.

Capítulo 6

Resoluções alternativas

Neste capítulo utilizamos algumas transformações algébricas para resolver o problema com as variáveis expressas de maneira não-convencional. A primeira transformação trata da variável ξ como variável dependente de ϕ , o que traz algumas vantagens interessantes do ponto de vista de hidrologia, enquanto que a segunda transformação omite a variável de similaridade ξ , tratando o fluxo ψ em função do nível d'água normalizado ϕ .

6.1 Resolução invertida do problema

Como discutido no capítulo anterior, a análise do plano complexo de $\xi(\phi)$ mostra que para condições iniciais $0 < \phi_0 < 1$ a singularidade mais próxima do ponto ϕ_0 é o polo em $\phi = 1$ (*i.e.*, $\xi(1) \rightarrow \infty$). Esse fato garante a convergência da série até este ponto, o que corresponde a toda a faixa de interesse em termos de hidrologia. Desta maneira, uma solução de $\xi(\phi)$ que seja válida no intervalo $\phi_0 \leq \phi < 1$ pode ser invertida, sendo que a solução invertida é capaz de reproduzir $\phi(\xi)$ em $\xi > 0$. Dessa forma, nos concentramos nesta seção na resolução da equação (5.4) com condições de contorno (5.5).

Começamos supondo que $\xi(\phi)$ pode ser escrito como

$$\xi(\phi) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n (\phi - \phi_0)^n, \quad (6.1)$$

que é uma série de Taylor expandida a partir de ϕ_0 . Note que esta definição de ξ satisfaz a condição $\phi(\xi = 0) = \phi_0$, já que a nossa condição é sempre dada na origem. Considere agora a Equação (5.4) integrada de ϕ_0 a ϕ e multiplicada por ξ' :

$$\phi - \xi'\psi_0 + 2\xi' \int_{\phi_0}^{\phi} \xi(\phi)d\phi = 0. \quad (6.2)$$

Substituindo (6.1) em (6.2) e reescrevendo ϕ como $(\phi - \phi_0) + \phi_0$ temos

$$(\phi - \phi_0) + \phi_0 - \psi_0 \sum_{m=1}^{\infty} mc_m(\phi - \phi_0)^{m-1} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} nc_n(\phi - \phi_0)^{n-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n}{n+1}(\phi - \phi_0)^{n+1} = 0. \quad (6.3)$$

O termo não-linear pode ser tratado como

$$\sum_{n=1}^{\infty} nc_n(\phi - \phi_0)^{n-1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{c_k}{k+1}(\phi - \phi_0)^{k+1} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{n-k+1}{k+1} c_k c_{n-k+1} \right) (\phi - \phi_0)^{n+1}, \quad (6.4)$$

e com a introdução da relação $m-1 = n+1$ é possível reescrever os somatórios em função de apenas um índice como

$$(\phi - \phi_0) + \phi_0 - \psi_0 \sum_{n=-1}^{\infty} (n+2)c_{n+2}(\phi - \phi_0)^{n+1} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{n-k+1}{k+1} c_k c_{n-k+1} \right) (\phi - \phi_0)^{n+1} = 0. \quad (6.5)$$

Uma análise da Equação (6.5) nos índices $m = -1$ e $m = 0$ nos deixa com

$$c_1 = \frac{\phi_0}{\psi_0} \quad (6.6)$$

$$c_2 = \frac{1}{2\psi_0}, \quad (6.7)$$

o que possibilita a eliminação da dependência de ϕ :

$$\begin{aligned} -\psi_0 \sum_{n=1}^{\infty} (n+2)c_{n+2}(\phi - \phi_0)^{n+1} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{n-k+1}{k+1} c_k c_{n-k+1} \right) (\phi - \phi_0)^{n+1} &= 0 \\ -\psi_0(n+2)c_{n+2} + 2 \sum_{k=1}^n \frac{n-k+1}{k+1} c_k c_{n-k+1} &= \textcircled{6.8} \end{aligned}$$

Isolando o termo de maior ordem no lado temos a relação de recorrência para os coeficientes c_n :

$$c_{n+2} = \frac{2}{(n+2)\psi_0} \sum_{k=1}^n \frac{n-k+1}{k+1} c_k c_{n-k+1}. \quad (6.9)$$

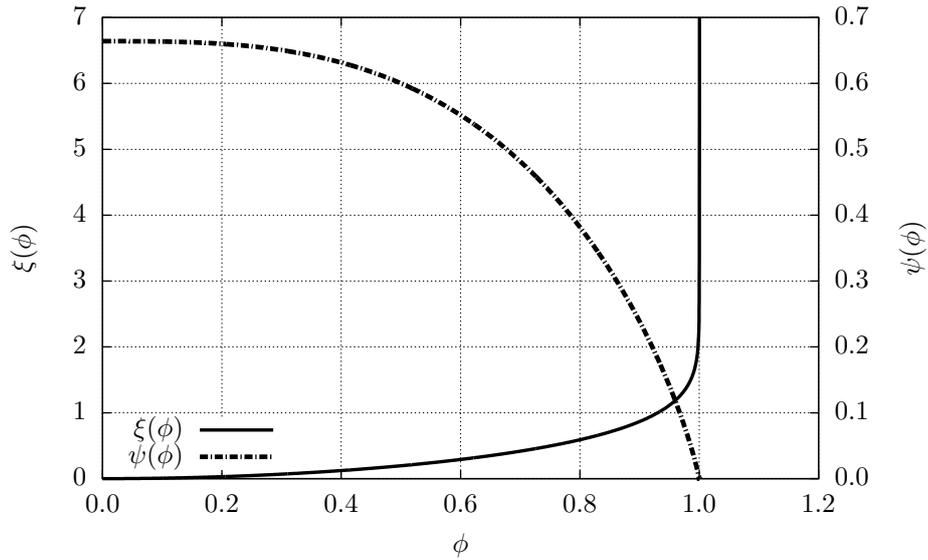


Figura 6.1: Variáveis ξ e ψ em função da variável independente ϕ obtidas com a série desenvolvida nesta seção.

Teoricamente, como já mencionado, uma série deste tipo é capaz de reproduzir a função em todo o domínio ξ com precisão arbitrária, porém, na prática, conforme chega-se perto do polo em $\phi = 1$ são necessários vários termos para uma precisão razoável já que a série vai gradativamente perdendo a validade na vizinhança de uma singularidade.

A Figura 6.1 mostra a curva $\xi(\phi)$ obtida com a série deduzida aqui. Repare no polo em $\phi = 1$ que aparece claramente. A curva de $\psi(\phi)$ é similar à curva que obtemos ao plotar $\psi_0(\phi_0)$, porém não é a mesma, já que a equação não é autônoma (depende da variável dependente ξ). A Figura 6.2 apresenta as curvas de ϕ e ψ nas variáveis “físicas”. A mesma foi obtida invertendo-se as curvas apresentadas na Figura 6.1. Repare que quanto mais termos forem utilizados na série $\xi(\phi)$, mais fácil será a convergência da mesma perto do polo. Isso permite que (após a inversão de volta à configuração $\phi(\xi)$) seja obtida uma série com um raio de convergência tão grande quanto a precisão numérica permitir.

A relação apresentada aqui e as análises feitas levando em conta ϕ como uma variável independente não foram encontradas nas referências pesquisadas, o que impede uma tentativa de comparação com resultados da literatura.

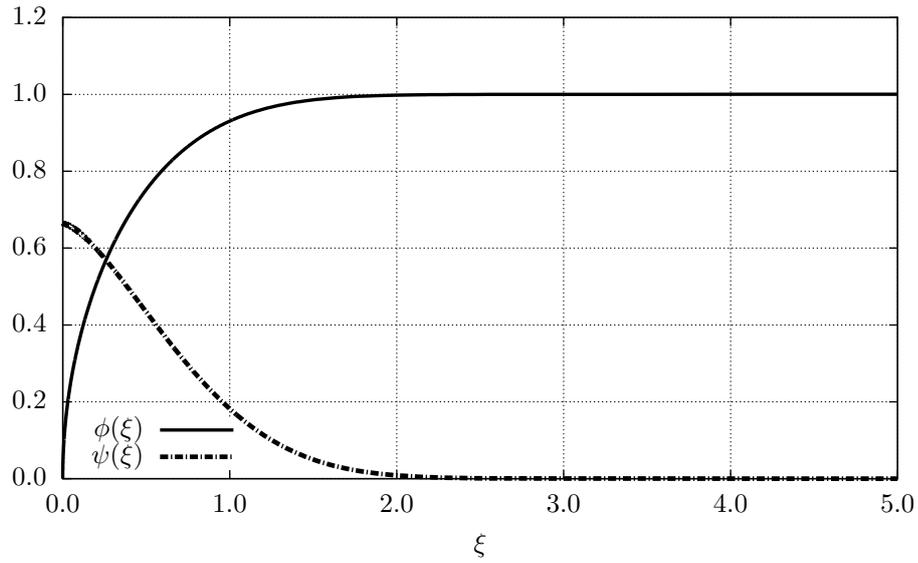


Figura 6.2: Função $\psi(\xi)$ e $\phi(\xi)$ obtidas invertendo-se o resultado da série apresentada nesta seção.

6.2 Resolução do problema para a vazão

Nesta seção nos concentramos em resolver o problema sem a dependência explícita da variável ξ . Como foi discutido na Seção 3.2, não só a variável ψ é de interesse especial para a Hidrologia como a determinação do seu valor na origem diz o quão precisa será toda a solução (no caso de uma solução desenvolvida a partir da origem). Portanto uma maneira de excluir ξ da equação original porém ainda mantendo um significado físico na equação é expressando (3.1) como ψ em função de ϕ .

Dividindo a Equação (3.6) por (3.5) tem-se que

$$\frac{d\psi}{d\phi} = -2\xi, \quad (6.10)$$

que derivada em relação a ϕ fornece

$$\frac{d^2\psi}{d\phi^2} = -2\frac{d\xi}{d\phi}. \quad (6.11)$$

Utilizando-se então novamente a Equação (3.5) tem-se

$$\psi \frac{d^2\psi}{d\phi^2} = -2\phi \quad (6.12)$$

que está sujeita às condições

$$\psi(\phi_0) = \psi_0 \quad \psi(1) = 0. \quad (6.13)$$

Como continua sendo de interesse trabalhar com um PVI, substituímos a condição em $\phi = 1$ por uma condição em $\phi = \phi_0$. Considere a definição de $d\psi/d\phi$ apresentada na Equação (5.6). A aplicação do limite nessa equação quando $\phi \rightarrow \phi_0$ nos permite então substituir as condições neste problema por

$$\psi(\phi_0) = \psi_0 \quad \frac{d\psi}{d\phi}(\phi_0) = 0, \quad (6.14)$$

considerando que $\xi = 0$ quando $\phi = \phi_0$.

A Equação (6.12), tal como a equação invertida (5.4), tem a vantagem de ser válida fisicamente apenas no domínio $\phi_0 \leq \phi \leq 1$, o que faz com que aumentem as chances de uma solução em série ser bem sucedida em representar a função em todo o domínio. No entanto, vê-se que a equação ainda é não linear e, portanto, difícil de ser resolvida por métodos convencionais. Tentamos então

$$\psi(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n (\phi - \phi_0)^n. \quad (6.15)$$

A condição em ϕ_0 já de saída fornece

$$b_0 = \psi_0.$$

A substituição da série na equação diferencial (com o termo não-linear já tratado como nas resoluções anteriores) nos deixa com

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^n (n-k+2)(n-k+1)b_k b_{n-k+2} \right) (\phi - \phi_0)^n = -2(\phi - \phi_0) - 2\phi_0. \quad (6.16)$$

A análise da equação anterior para $n = 0$ e 1 revela

$$b_2 = -\frac{\phi_0}{\psi_0} \quad b_3 = -\frac{1 + b_1 b_2}{3b_0}. \quad (6.17)$$

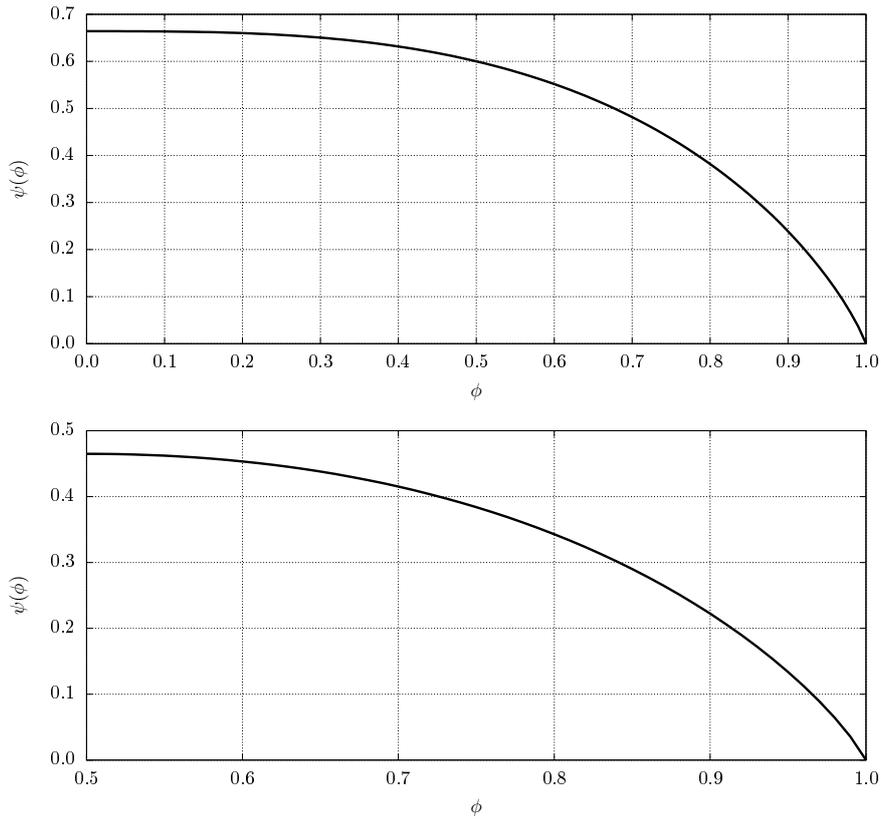


Figura 6.3: A função $\psi(\phi)$ calculada com a série definida em (6.15) para o caso $\phi_0 = 0$ (acima) e $\phi_0 = 0,5$ (abaixo).

Segue da definição da série em (6.15) e das condições iniciais apresentadas na Equação (6.14) que $b_1 = 0$, o que nos deixa com as condições para os primeiros termos

$$b_0 = \psi_0 \quad (6.18)$$

$$b_1 = 0 \quad (6.19)$$

$$b_2 = -\frac{\phi_0}{\psi_0} \quad (6.20)$$

$$b_3 = -\frac{1}{3\psi_0} \quad (6.21)$$

e nos permite escrever a relação de recorrência para os b_n s

$$b_{n+2} = -\frac{1}{\psi_0(n+2)(n+1)} \sum_{k=2}^n (n-k+2)(n-k+1)b_k b_{n-k+2}. \quad n \geq 2 \quad (6.22)$$

A série obtida é apresentada na Figura 6.3 para $\phi_0 = 0$ e para $\phi_0 = 0,5$. Análises numéricas indicam que a série não diverge em nenhum ponto do domínio finito quando

$\phi_0 < 1$. No entanto, para condições $\phi_0 > 1$ a série diverge antes de chegar na condição de contorno em 1, não sendo válida, portanto, em toda a região de interesse. Nos concentraremos então em análises com $\phi_0 < 1$, o que é de maior interesse para hidrologia de bacias.

O fato de que a série converge em 1 quando $\phi_0 < 1$, nos permite utilizar a condição de contorno em 1 (que até agora não foi utilizada) para estimar ψ_0 de uma maneira não numérica. Isso pode ser feito resolvendo-se a equação

$$\sum_{n=0}^{\infty} b_n (1 - \phi_0)^n = 0, \quad (6.23)$$

que tem que ser resolvida iterativamente para ψ_0 já que os b_n s dependem do próprio ψ_0 , que não pode ser isolado da relação.

Esse procedimento é muito mais rápido computacionalmente do que pelo método de Töpfer, e nos permite descobrir ψ_0 sem recorrer ao método de tentativa e erro inclusive para valores não nulos de ϕ_0 . No entanto, a equação aproximada desenvolvida no Capítulo 3 é muito mais rápida para uma mesma precisão. No caso da precisão padrão de 1×10^{-7} são necessários cerca de 50 000 termos para o método analítico. Se levarmos em conta que a cada iteração o programa precisa recalculer todos esses termos, vemos que nessas condições até mesmo a resolução numérica é mais fácil. No entanto para atingir uma precisão de 1×10^{-4} são necessários cerca de 100 termos e o método funciona bem.

Também não foi encontrado na literatura nenhum artigo sobre maneiras não-numéricas de se estimar a constante ψ_0 (ou κ). É possível que essa abordagem seja útil não só para hidrólogos, como também pesquisadores da área de mecânica dos fluidos e que utilizem a equação de Blasius não homogênea.

Com os resultados apresentados neste capítulo temos uma base satisfatória de conhecimento para resolver a equação de Boussinesq para um aquífero horizontal infinito sujeito a condições de contorno constantes com uso de pouco esforço computacional e com métodos analíticos. Dada uma condição inicial ϕ_0 , utiliza-se o conteúdo desenvolvido nesta seção para encontrar um valor de ψ_0 que atenda a condição de contorno. Com o valor de ψ_0 determinado existem duas opções analíticas: reproduzir a função com a solução geral uti-

lizando o princípio da continuação analítica ou reproduzi-la a partir da solução inversa $\xi(\phi)$. Qualquer uma das duas opções é mais vantajosa do que uma resolução numérica, sendo que com as análises no plano complexo do Capítulo 5 ainda pode-se determinar os pontos ótimos de expansão da série geral $\phi(\xi)$, o que otimiza a resolução.

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho a equação de Boussinesq para águas subterrâneas foi estudada tanto numérica quanto analiticamente. O foco foi dado para a equação aplicada a um domínio semi-infinito, o que corresponde a uma aproximação conhecida em hidrologia para um aquífero finito cuja superfície freática não sofreu ainda influência de uma parede impermeável localizada a uma distância finita da origem. A equação nesse caso passa por uma transformação de Boltzmann, o que introduz uma variável de similaridade ξ que faz com que a equação deixe de ser parcial, facilitando a sua resolução.

Apresentamos um esquema numérico baseado no método Runge-Kutta-Cash-Karp com passo adaptativo que tem como principais vantagens o controle de erro na solução e o tratamento de maneira analítica da singularidade na origem (que acontece para o caso homogêneo das condições de contorno). A transformação de variáveis usada no tratamento analítico da singularidade resolve de maneira simples o problema da implementação de um método Runge-Kutta na equação de Boussinesq para condições de contorno homogêneas, o que até então era um problema sem solução na literatura.

Um outro problema na solução da equação de Boussinesq como um PVI (que também acontece na sua resolução com métodos do tipo Runge-Kutta) foi contornado, que é a determinação das condições iniciais adequadas. Desenvolvemos neste trabalho duas maneiras para se obter um valor de ψ_0 compatível com um dado ϕ_0 de modo que a

condição de contorno fosse satisfeita: (i) por ajuste de curva e (ii) por meio de uma série de potências que reproduz $\psi(\phi)$. A segunda maneira, embora sofra da desvantagem de necessitar de uma abordagem iterativa, é (tanto quanto seja de nosso conhecimento) o primeiro método analítico para se encontrar a constante ψ_0 (e, portanto, a constante κ para o problema da camada-limite de Blasius).

A condição inicial ψ_0 também foi estudada do ponto de vista prático em hidrologia, sendo que foi desenvolvida uma expressão mais geral para o método de Brutsaert-Nieber de análise de bacias baseada nessas análises. Essa expressão (válida para o começo do esvaziamento) leva em consideração condições não homogêneas no corpo d'água adjacente ao aquífero (*i.e.*, $H_0 \neq 0$). Essa situação é mais realista do que a hipótese $H_0 = 0$, que, apesar de ser uma simplificação não necessariamente justificável, ainda é amplamente utilizada atualmente na literatura.

No Capítulo 4 também desenvolvemos uma solução para a equação de Boussinesq pelo método de séries da maneira mais geral possível (dentro das possibilidades da transformação de Boltzmann). A solução é inédita e pode ser expandida de qualquer ponto, o que faz com que ela possa ser usada para aplicar o princípio da continuação analítica. Esse fato torna possível reproduzir analiticamente a função $\phi(\xi)$ em todo o domínio ($0 \leq \xi < \infty$), o que não era possível antes dessa solução.

Não é possível, no entanto, reproduzir toda a função com apenas uma expansão, já que a série expandida a partir de qualquer ponto possui um raio de convergência finito, o que é fruto da presença de singularidades no plano complexo. Por essa razão o plano complexo foi investigado com uma solução numérica para que se pudesse estudar as singularidades. Desenvolveu-se então um método simples para localizar com precisão as singularidades que limitam a convergência da série. Isso foi feito no plano invertido, ou seja, com ξ em função de ϕ , o que é uma abordagem nova para este problema.

Ainda no formato $\xi(\phi)$, desenvolveu-se neste trabalho uma solução em série para a equação diferencial nessa configuração. Essa solução também é inédita na literatura e, dado que pode contar com precisão arbitrária dependendo de quantos termos forem utilizados, também tem o potencial de reproduzir toda a função $\phi(\xi)$ após uma (re-)inversão

de variáveis que as deixa na sua configuração original.

Ao todo, portanto, foram desenvolvidas três soluções em série ao longo do trabalho. Elas reproduzem $\phi(\xi)$, $\xi(\phi)$ e $\psi(\phi)$. Suas características resumidas são:

- $\phi(\xi)$: possui raio de convergência finito sempre, mas reproduz a função no domínio semi-infinito pelo princípio da continuação analítica;
- $\xi(\phi)$: apesar de necessitar de uma interpolação nos resultados e de um número muito grande de termos para convergir perto do polo em $\phi = 1$, também permite a reprodução da função em todo o domínio;
- $\psi(\phi)$: não pode ser colocado em função das variáveis físicas x e t porém permite encontrar as condições iniciais do problema analiticamente.

A teoria desenvolvida neste trabalho para a equação de Boussinesq aplicada a um maciço infinito faz com que este problema possa ser resolvido pela primeira vez de maneira completamente analítica; desde a determinação das condições iniciais até a obtenção da altura da água em qualquer ponto do aquífero e em qualquer tempo. É importante também lembrar que esses avanços são potencialmente importantes em outras áreas. O problema de Blasius, por exemplo, é diretamente beneficiado pela determinação analítica de ψ_0 . Outro exemplo são problemas de difusão não-linear. Como foi discutido no Capítulo 2, esses processos frequentemente são matematicamente equivalentes à equação de Boussinesq para um maciço horizontal, o que faz com que as soluções para problemas de difusão não-lineares em grande parte sofram das mesmas dificuldades que foram abordadas (e em alguns casos superadas) neste trabalho.

Apêndice A

Apresentação da resolução de Boussinesq para a equação parcial normalizada

Boussinesq resolve a Equação (2.30) usando um método de separação de variáveis que supõe h^* como sendo o produto

$$h^*(x^*, t^*) = X(x^*)T(t^*), \quad (\text{A.1})$$

de modo que

$$\frac{\partial h^*(x^*, t^*)}{\partial x^*} = \frac{dX(x^*)}{dx^*} T(t^*), \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial h^*(x^*, t^*)}{\partial t^*} = \frac{dT(t^*)}{dt^*} X(x^*). \quad (\text{A.3})$$

Essa transformação produz a equação

$$\frac{1}{T^2(t^*)} \frac{dT(t^*)}{dt^*} = \frac{1}{X(x^*)} \frac{d}{dx^*} \left[X(x^*) \frac{dX(x^*)}{dx^*} \right] = c_1. \quad (\text{A.4})$$

A integração dependente de t^* é facilmente resolvida:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{T(t^*)^2} \frac{dT(t^*)}{dt^*} &= c_1 \\
\frac{dT}{T^2} &= c_1 dt^* \\
-T^{-1} &= c_1 t^* + c_2 \\
T(t^*) &= \frac{-1}{c_1 t^* + c_2}.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

É conveniente definir uma outra função em “substituição” a $X(x^*)$:

$$\begin{aligned}
h^* &= X(x^*)T(t^*) \\
&= -X(x^*) \frac{1}{c_1 t^* + c_2} \\
&= \frac{-X(x^*)}{c_2} \frac{c_2}{c_1 t^* + c_2} \\
&= \frac{-X(x^*)}{c_2} \frac{1}{at^* + 1} \\
&= F(x^*) \frac{1}{at^* + 1},
\end{aligned} \tag{A.6}$$

onde $F(x^*) = \frac{-X(x^*)}{c_2}$ e $a = c_1/c_2$.

Com isso a parte da equação dependente de x^* fica

$$\frac{-1}{F c_2} \frac{d}{dx^*} \left[\frac{d(F^2 c_2^2)}{2 dx^*} \right] = c_1 \tag{A.7}$$

$$\frac{-c_2}{F} \frac{d}{dx^*} \left[\frac{d}{dx^*} \left(\frac{F^2}{2} \right) \right] = c_1, \tag{A.8}$$

definindo uma variável P como sendo

$$P = \frac{d}{dx^*} \left(\frac{F^2}{2} \right), \tag{A.9}$$

temos

$$\frac{dP}{dx^*} = -\frac{c_1}{c_2} F \tag{A.10}$$

$$\frac{dP}{F} = -a dx^*. \tag{A.11}$$

Relembrando que $dx^* = \frac{1}{P}d\frac{F^2}{2}$,

$$\frac{dP}{F} = -\frac{a}{P}d\frac{F^2}{2} \quad (\text{A.12})$$

$$PdP = -aFd\frac{F^2}{2} \quad (\text{A.13})$$

$$= -\frac{a}{2}FdF^2. \quad (\text{A.14})$$

O lado direito da equação pode ser integrado por meio de uma mudança de variáveis:

$$F^2 = u \quad (\text{A.15})$$

$$F = u^{1/2},$$

logo,

$$\begin{aligned} \int -\frac{a}{2}u^{1/2}du &= -\frac{a}{2}\frac{2}{3}u^{3/2} + c_3 \\ &= -\frac{a}{3}(F^2)^{3/2} + c_3 \\ &= -\frac{a}{3}F^3 + c_3. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Com a integração do lado esquerdo da equação (A.14), temos a relação

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

Utilizando a equação (A.9), temos

$$\begin{aligned} \frac{\left[\frac{d}{dx^*}\left(\frac{F^2}{2}\right)\right]^2}{2} &= -\frac{a}{3}F^3 + c_3 \\ \frac{1}{2}\left(F\frac{dF}{dx^*}\right)^2 &= -\frac{a}{3}F^3 + c_3 \\ F\frac{dF}{dx^*} &= \left[-\frac{2a}{3}F^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}} \\ dx^* &= \frac{FdF}{\left[-\frac{2a}{3}F^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

A integração da equação anterior com uma pequena mudança de variáveis para pre-

servar os símbolos x^* e $F(x^*)$ nos dá:

$$\int_0^{x^*} d\xi = \int_0^{F(x^*)} \frac{y dy}{\left[-\frac{2a}{3}y^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}}$$

$$x^* = \int_0^{F(x^*)} \frac{y dy}{\left[-\frac{2a}{3}y^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{A.18})$$

Nota-se que ainda há duas constantes a serem definidas, a e c_3 , portanto ainda não é possível a resolução da integral de maneira geral. O primeiro passo para se determinar as constantes é uma derivação de ambos os lados da equação em relação à variável x^* . Fazendo uso da regra de Leibniz,

$$\frac{dx^*}{dx^*} = \frac{d}{dx^*} \int_0^{F(x^*)} \frac{y dy}{\left[-\frac{2a}{3}y^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{A.19})$$

$$1 = \int_0^{F(x^*)} \frac{\partial}{\partial x^*} \frac{y}{\left[-\frac{2a}{3}y^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}} dy + \frac{F}{\left[-\frac{2a}{3}F^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}} \frac{dF}{dx^*} - 0.$$

Como y não é função de x^* , temos que:

$$\frac{\partial}{\partial x^*} \frac{y}{\left[-\frac{2a}{3}y^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}} = 0,$$

e então

$$\frac{F}{\left[-\frac{2a}{3}F^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}} \frac{dF}{dx^*} = 1$$

$$\frac{dF}{dx^*} = \frac{\left[-\frac{2a}{3}F^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}}{F}. \quad (\text{A.20})$$

Pelas características do problema, podemos afirmar que:

$$F(1) = 0 \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{dF(1)}{dx^*} = 0, \quad (\text{A.22})$$

logo, analisando a equação (A.20) no ponto $x^* = 1$ temos:

$$\begin{aligned} \frac{\left[-\frac{2a}{3}1^3 + 2c_3\right]^{\frac{1}{2}}}{1} &= 0 \\ -\frac{2a}{3} + 2c_3 &= 0 \\ c_3 &= \frac{a}{3}. \end{aligned} \tag{A.23}$$

Aplicando a equação (A.23) na equação (A.18) temos:

$$\begin{aligned} x^* &= \int_0^{F(x^*)} \frac{y dy}{\left[-\frac{2a}{3}y^3 + \frac{2a}{3}\right]^{\frac{1}{2}}} \\ x^* &= \left(\frac{3}{2a}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{F(x^*)} \frac{y dy}{(1 - y^3)^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \tag{A.24}$$

A equação (A.24) ainda possui a como constante a ser definida. Definimos a com a condição de contorno que nos resta: $F(1) = 1$.

$$\left(\frac{3}{2a}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^1 \frac{y}{(1 - y^3)^{\frac{1}{2}}} dy = 1. \tag{A.25}$$

Neste ponto percebe-se a semelhança com a função beta, aqui denotada por $B(p, q)$:

$$B(p, q) = \int_0^1 u^{p-1}(1 - u)^{q-1} du. \tag{A.26}$$

Uma maneira fácil de usar a função beta a nosso favor é chamar $u = y^3$:

$$u = y^3 \quad (\text{A.27})$$

$$u^{1/3} = y \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} \frac{dy}{du} &= \frac{1}{3}u^{-2/3} \\ dy &= \frac{1}{3}u^{-2/3}du. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Substituindo na equação:

$$\left(\frac{3}{2a}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^1 \frac{u^{1/3}}{(1-u)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{3}u^{-2/3}du = 1 \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{6a}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^1 u^{-\frac{1}{3}}(1-u)^{-\frac{1}{2}}du &= \\ \left(\frac{1}{6a}\right)^{\frac{1}{2}} B\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{2}\right) &= 1 \\ a &= \frac{[B(\frac{2}{3}, \frac{1}{2})]^2}{6}. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Substituindo nosso resultado na equação (A.24):

$$\begin{aligned} {}^*x &= \frac{3}{B(\frac{2}{3}, \frac{1}{2})} \int_0^{F(x^*)} \frac{ydy}{(1-y^3)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{1}{B(\frac{2}{3}, \frac{1}{2})} \int_0^{F^3(x^*)} u^{-\frac{1}{3}}(1-u)^{-\frac{1}{2}}du \\ x^* &= I(F^3(x^*)), \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

onde $I(F^3(x^*))$ é a chamada função beta incompleta de $F^3(x^*)$.

A função que desejamos está no limite da integral: $F(x^*)$. Isto dificulta a obtenção de uma expressão de F em função de x^* analiticamente, no entanto pode-se contornar este problema resolvendo x^* para vários valores de $F(x^*)$, assim tem-se uma função $x^*(F(x^*))$. Invertendo esta séries de dados obtém-se valores de F para diferentes x^* , ou seja, $F(x^*)$.

Essa característica implica que na prática não se pode impor uma condição inicial genérica para o problema, já que essa resolução exige que a condição inicial seja a função $F(x^*)$, que é definida com a integral da qual ela mesma é limite.

Percebe-se também que a forma da curva sempre se mantém a mesma e somente é atenuada, já que para qualquer tempo a forma de h^* é a equação $F(x^*)$ dividida por $at^* + 1$.

Apêndice B

Transformação de variáveis entre a equação de Boussinesq e a equação de Blasius

Neste capítulo definiremos uma mudança de variáveis cuja demonstração foi originalmente apresentada (ainda que um pouco diferente) por Polubarinova-Kochina (1962) mas que já havia sido usada por Heaslet e Alksne (1961).

Ao considerarmos a equação ordinária de Boussinesq (2.50), começamos por usar a propriedade da regra da cadeia para escrevê-la como

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\phi} \left(\phi \frac{d\phi}{d\xi} \right) \frac{d\phi}{d\xi} + 2\xi \frac{d\phi}{d\xi} &= 0 \\ \frac{d}{d\phi} \left(\phi \frac{d\phi}{d\xi} \right) + 2\xi &= 0, \end{aligned} \tag{B.1}$$

que é válida desde que $\frac{d\phi}{d\xi}$ seja não-nulo. Como essa condição apenas acontece em $\xi \rightarrow \infty$, este passo é válido para todo o domínio.

Agora definimos variáveis auxiliares η e f , tal que

$$\phi = \frac{df}{d\eta}(\eta) \tag{B.2}$$

$$\xi = Bf(\eta) \tag{B.3}$$

onde B é uma constante a ser definida no final. É importante ressaltar que a variável η , que na verdade é a variável independente na equação de Blasius, não tem significado físico conhecido no contexto da equação de Boussinesq. Seguindo a linha de raciocínio, temos que

$$\begin{aligned}\frac{d\phi}{d\xi} &= \frac{d}{d\xi} \left(\frac{df}{d\eta} \right) = \frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2} \frac{d\eta}{d\xi} = \frac{1}{B} \frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2} \frac{d\eta}{df} \\ \frac{d\phi}{d\xi} &= \frac{1}{B} \frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2} \frac{1}{\phi}.\end{aligned}\tag{B.4}$$

Trabalhando primeiro com o termo dentro do parênteses do lado esquerdo de (B.1)

$$\begin{aligned}\phi \frac{d\phi}{d\xi} &= \phi \frac{1}{B} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \frac{1}{\phi} \\ \phi \frac{d\phi}{d\xi} &= \frac{1}{B} \frac{d^2 f}{d\eta^2},\end{aligned}\tag{B.5}$$

o que nos permite escrever

$$\frac{d}{d\phi} \left(\frac{1}{B} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) + 2\xi = 0\tag{B.6}$$

$$\frac{1}{B} \frac{d}{d\eta} \left(\frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) \frac{d\eta}{d\phi} + 2\xi = 0.\tag{B.7}$$

Temos também que

$$\frac{d\eta}{d\phi} = \frac{d^2 \eta}{df^2},\tag{B.8}$$

o que nos deixa com

$$\begin{aligned}\frac{1}{B} \frac{d^3 f}{d\eta^3} \frac{d^2 \eta}{df^2} + 2\xi &= 0 \\ \frac{1}{B} \frac{d^3 f}{d\eta^3} + 2\xi \frac{d^2 f}{d\eta^2} &= 0 \\ \frac{d^3 f}{d\eta^3} + B2\xi \frac{d^2 f}{d\eta^2} &= 0 \\ \frac{d^3 f}{d\eta^3} + B^2 2f \frac{d^2 f}{d\eta^2} &= 0.\end{aligned}\tag{B.9}$$

Que é a forma da equação de Blasius, onde f é a função corrente de Blasius e η a variável independente. Para trabalhar-se com a equação de Blasius em sua forma mais

comum e que possui significado físico, tem-se que

$$\begin{aligned} B^2 2 &= \frac{1}{2} \\ B &= \frac{1}{2}, \end{aligned} \tag{B.10}$$

nos deixando finalmente com

$$\frac{d^3 f}{d\eta^3} + \frac{1}{2} f \frac{d^2 f}{d\eta^2} = 0. \tag{B.11}$$

Desta maneira, com (B.5) e (B.10), temos também que

$$\psi = 2 \frac{d^2 f}{d\eta^2}. \tag{B.12}$$

Apêndice C

Resolução do problema homogêneo

Neste capítulo analisamos e resolvemos a equação com condições de contorno homogêneas utilizando uma série com expoentes fracionais e deduzindo uma relação de recorrência que permite o cálculo de um número arbitrário de coeficientes. Grande parte do conteúdo deste apêndice bem como o estudo da série que se desenvolverá aqui está apresentado por Chor et al. (2013).

Começamos integrando a equação de Boussinesq em sua forma ordinária desde zero até ξ (com $\tilde{\xi}$ sendo uma variável de integração):

$$\int_0^\xi \left[\frac{d}{d\tilde{\xi}} \left(\phi \frac{d\phi}{d\tilde{\xi}} \right) + 2\tilde{\xi} \frac{d\phi}{d\tilde{\xi}} \right] d\tilde{\xi} = 0 \quad (\text{C.1})$$

$$\phi \frac{d\phi}{d\tilde{\xi}} \Big|_{\tilde{\xi}=0}^\xi + 2 \left(\phi \tilde{\xi} \Big|_{\tilde{\xi}=0}^\xi - \int_0^\xi \phi d\tilde{\xi} \right) = 0 \quad (\text{C.2})$$

$$\phi \frac{d\phi}{d\tilde{\xi}} - \psi_0 + 2 \left(\phi \tilde{\xi} - \int_0^\xi \phi d\tilde{\xi} \right) = 0, \quad (\text{C.3})$$

onde ψ_0 é definido como em (3.4). Lembrando que a equação nesse caso está sujeita às condições

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(\infty) = 1. \quad (\text{C.4})$$

Supomos ϕ sendo uma s rie do tipo

$$\phi(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{n/2}. \quad (\text{C.5})$$

  importante destacar que a defini o desta s rie j  imp e a condi o inicial $\phi(0) = 0$, pelo fato de n o existir termo independente ($n = 0$). Integrando $\phi(\xi)$ temos

$$\int_0^{\xi} \phi d\tilde{\xi} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1}, \quad (\text{C.6})$$

o que nos permite escrever

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{n/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{2} c_k \xi^{\frac{k}{2}-1} - \psi_0 + 2 \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} \right) = 0 \quad (\text{C.7})$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{n/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{2} c_k \xi^{\frac{k}{2}-1} - \psi_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(c_n - \frac{2}{n+2} c_n \right) \xi^{\frac{n}{2}+1} = 0 \quad (\text{C.8})$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{n/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{2} c_k \xi^{\frac{k}{2}-1} - \psi_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} = 0. \quad (\text{C.9})$$

O termo n o-linear pode ser reescrito como:

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \xi^{n/2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{2} c_k \xi^{\frac{k}{2}-1} = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^m c_k c_{m-k+1} \frac{k}{2} \right) \xi^{\frac{m-1}{2}}. \quad (\text{C.10})$$

Isso nos permite reescrever (C.9) como

$$\sum_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^m c_k c_{m-k+1} \frac{k}{2} \right) \xi^{\frac{m-1}{2}} - \psi_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} = 0. \quad (\text{C.11})$$

O pr ximo passo trata de identificar todos os termos em ξ^0 e igualar seus respectivos coeficientes a zero, j  que a igualdade tem que valer para valores diferentes de ξ . Os termos em ξ^0 s o apenas a constante ψ_0 e os termos em $m = 1$ da parte n o-linear da equa o, j  que nenhum outro m ou n produz uma constante. Com isso temos que

$$\sum_{k=1}^1 c_k c_{2-k} \frac{k}{2} - \psi_0 = 0 \quad (\text{C.12})$$

$$\frac{c_1^2}{2} - \psi_0 = 0$$

$$c_1 = \sqrt{2\psi_0}. \quad (\text{C.13})$$

O que resta da equação é

$$\sum_{m=2}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^m c_k c_{m-k+1} \frac{k}{2} \right) \xi^{\frac{m-1}{2}} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} = 0. \quad (\text{C.14})$$

Para podermos comparar os coeficientes em evidência, introduzimos a relação

$$\frac{m-1}{2} = \frac{n}{2} + 1 \quad (\text{C.15})$$

$$m = n + 3, \quad (\text{C.16})$$

o que, por sua vez, implica em

$$\sum_{n=-1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^{n+3} c_k c_{n-k+4} \frac{k}{2} \right) \xi^{\frac{n}{2}+1} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} = 0. \quad (\text{C.17})$$

Explicitamos agora todos os termos em $n = -1$ e $n = 0$ e os igualamos a zero separadamente, a começar por $n = -1$:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^2 c_k c_{3-k} \frac{k}{2} &= \frac{c_1 c_2 + 2c_1 c_2}{2} = 0 \\ c_1 c_2 \left(\frac{3}{2} \right) &= 0 \\ c_2 &= 0, \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

já que $c_1 \neq 0$.

Agora para $n = 0$:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 c_k c_{4-k} \frac{k}{2} &= \frac{c_1 c_3 + 2c_2 c_2 + 3c_1 c_3}{2} = 0 \\ \frac{c_1 c_3 + 3c_1 c_3}{2} &= 2c_1 c_3 = 0 \\ c_3 &= 0, \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

pois $c_1 \neq 0$, o que implica que podemos escrever

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{k=1}^{n+3} c_k c_{n-k+4} \frac{k}{2} \right) \xi^{\frac{n}{2}+1} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n \xi^{\frac{n}{2}+1} &= 0 \\ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \sum_{k=1}^{n+3} \left(c_k c_{n-k+4} \frac{k}{2} \right) + 2 \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n \right\} \xi^{\frac{n}{2}+1} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+3} (k c_k c_{n-k+4}) + 2 \left(\frac{n}{n+2} \right) c_n = 0 \quad (\text{C.21})$$

$$c_n = -\frac{n+2}{4n} \sum_{k=1}^{n+3} k c_k c_{n-k+4}. \quad (\text{C.22})$$

Tabela C.1: Valores dos primeiros a_n s segundo a relação de recorrência apresentada na equação (C.26).

a_0	$\sqrt{2i\psi_0}$
a_1	$-\frac{4}{15}$
a_2	$-\frac{1}{6a_0}(2a_1 + 3a_1^2)$
a_3	$-\frac{(99a_1+28)a_2}{99a_0}$
a_4	$-\frac{(42a_1+10)a_3+21a_2^2}{42a_0}$
\vdots	\vdots

Nota-se, no entanto, que o termo genérico c_n está posto em função dos termos anteriores e dos 3 termos seguintes. Isto pode ser resolvido com um pouco de álgebra. Explicitando fora do somatório as contribuições referentes a $k = 1$ e $k = n + 3$, temos

$$c_n = -\frac{n+2}{4n} \left(\sum_{k=2}^{n+2} [kc_k c_{n-k+4}] + (n+4)c_1 c_{n+3} \right). \quad (\text{C.23})$$

Explicitando o termo de mais alta ordem (c_{n+3}) na equação anterior, e com o conhecimento de que $c_2 = c_3 = 0$, temos

$$c_{n+3} = -\frac{1}{c_1(n+4)} \left(\frac{4n c_n}{n+2} + \sum_{k=2}^{n+2} kc_k c_{n-k+4} \right). \quad n \geq 1 \quad (\text{C.24})$$

Ao aplicar a relação para os primeiros coeficientes vemos que os a_n s seguem o padrão de um coeficiente não-nulo seguido de dois coeficientes nulos, o que nos permite escrever o somatório de forma mais específica:

$$\phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^{\frac{3n+1}{2}}, \quad (\text{C.25})$$

com a relação de recorrência

$$a_{n+1} = -\frac{1}{a_0(3n+5)} \left(\frac{4(3n+1)a_n}{3n+3} + \sum_{k=1}^n \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right] \right). \quad (\text{C.26})$$

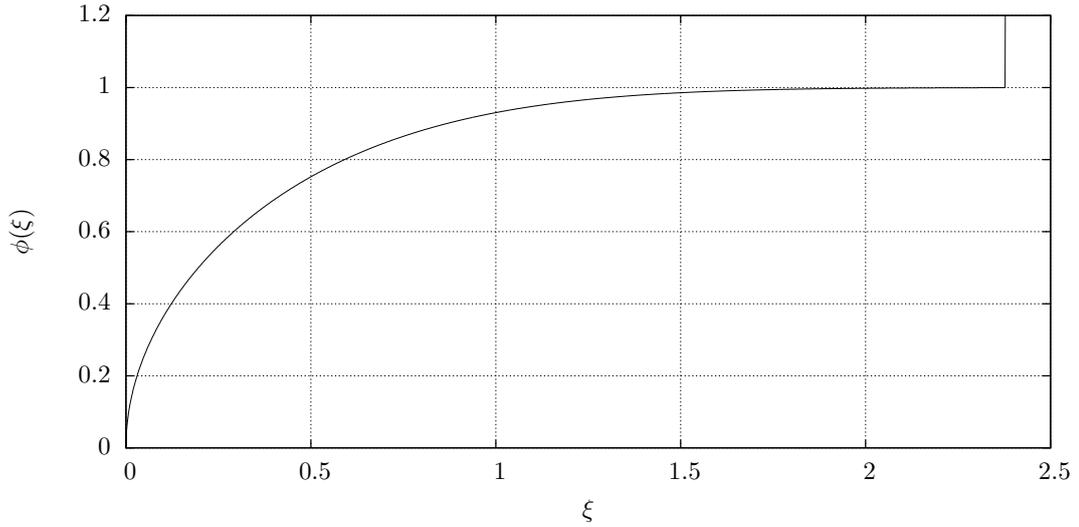


Figura C.1: A função ϕ calculada pela série desenvolvida com a relação de recorrência (C.26) e programada com 8797 termos.

Os primeiros coeficientes da série encontram-se na tabela C.1. A figura C.1 mostra os resultados obtidos com a série desenvolvida. Esta figura foi feita programando-se (C.26) com precisão quádrupla, o que nos permitiu calcular até o termo de número 8797. Pode-se ver que a série claramente diverge entre 2,25 e 2,5, nos indicando que podemos esperar o raio de convergência dentro dessa faixa.

Podemos já obter uma primeira aproximação para a_0 , que toma a forma

$$a_0 = \sqrt{2\psi_0},$$

utilizando (B.12). Utilizando o valor apresentado na tabela 4.1 de Boyd (2008) para $\frac{d^2 f}{d\eta^2}(0)$, uma primeira aproximação para a_0 é

$$a_0 \approx 1,1524883274292. \quad (\text{C.27})$$

Hogarth e Parlange (1999) já haviam utilizado esta relação (ainda que apenas com 5 casas decimais de precisão e extraíndo o valor para $\frac{d^2 f}{d\eta^2}(0)$ de Parlange et al. (1981)), porém sem nenhum tipo de dedução explícita.

O caso homogêneo deste problema é especialmente interessante do ponto de vista matemático pois a origem do domínio é uma singularidade do tipo raiz quadrada. Isto

significa que a origem é um *branch point*, onde o valor da função é zero e a sua derivada é infinita. Uma análise da definição da variável ξ ainda nos indica que para o caso homogêneo nas variáveis originais x e t essa singularidade ainda existe em x , já que para valores pequenos de ξ temos $\phi \sim a_0 \xi^{1/2}$. Considerando valores de $t \neq 0$ e $x \rightarrow 0$ tais que $\xi \sim 0$ tem-se

$$h(x, t) \sim Ha_0 \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right)^{1/2} = \frac{Ha_0}{(4Dt)^{1/4}} x^{1/2}, \quad (\text{C.28})$$

o que indica que para um t fixo não nulo, a origem se comporta como uma raiz quadrada.

Apêndice D

Resolução do problema não homogêneo

Consideramos neste Apêndice as condições de contorno não homogêneas

$$\phi(0) = \phi_0, \quad \phi(\infty) = 1, \quad \phi_0 > 0. \quad (\text{D.1})$$

Para a resolução da equação de Boussinesq para condições de contorno não homogêneas basta seguir a teoria de resolução por série de Taylor e supor uma expansão ao redor de zero como

$$\phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n. \quad (\text{D.2})$$

Essa definição faz com que seja possível substituir a Eq. (D.2) na equação de Boussinesq integrada (C.3), o que produz

$$\phi \frac{d\phi}{d\xi} - \psi_0 + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{n+1}\right) a_n \xi^{n+1} = 0. \quad (\text{D.3})$$

Após simplificação do termo não-linear segundo (D.2) temos

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^m (m-k+1) a_k a_{m-k+1} \right) \xi^m - \psi_0 + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{n+1} a_n \xi^{n+1} = 0. \quad (\text{D.4})$$

Introduzindo a relação $m = n + 1$, a equação (D.4) pode ser reescrita como

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^m (m-k+1) a_k a_{m-k+1} \right) \xi^m - \psi_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m-1}{m} a_{m-1} \xi^m = 0. \quad (\text{D.5})$$

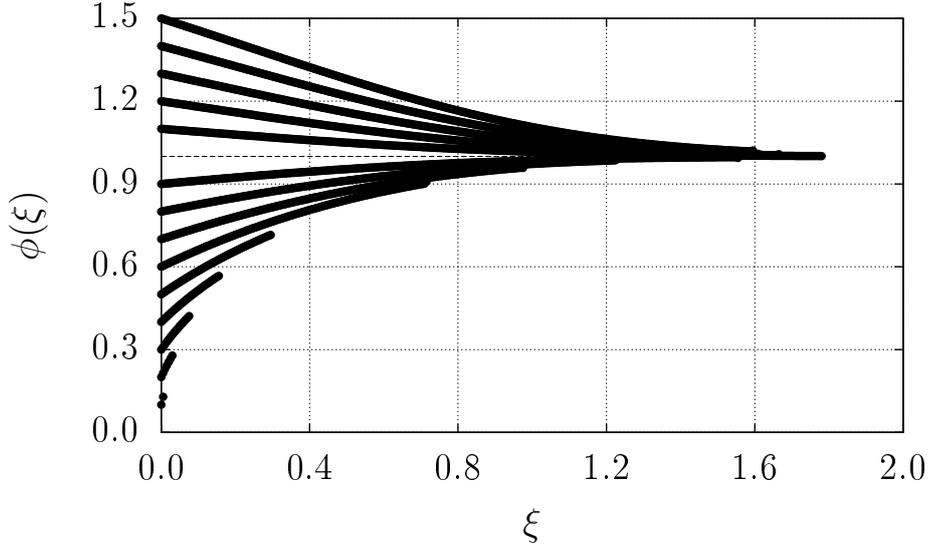


Figura D.1: Série para diversos casos não homogêneos.

A análise do valor $m = 0$ separadamente produz

$$a_1 = \frac{\psi_0}{a_0}, \quad (\text{D.6})$$

o que fornece, das Eqs. (D.1) e (3.4):

$$a_0 = \phi_0 \quad a_1 = \frac{d\phi}{d\xi}(0). \quad (\text{D.7})$$

Vê-se nesse ponto que as Eqs. (D.6) and (D.7) são compatíveis com a condição $\phi_0 > 0$ em (D.1). Ao permitir a ϕ_0 assumir o valor nulo vemos que o valor de a_1 tende a infinito, o que está de acordo com o que foi encontrado no Apêndice C para condições homogêneas.

Continuamos colocando ξ^m em evidência:

$$\sum_{m=1}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^m (m-k+1) a_k a_{m-k+1} + 2 \frac{m-1}{m} a_{m-1} \right) \xi^m = 0. \quad (\text{D.8})$$

Cancelando a dependência de ξ^m junto com a soma em m , rearranjando o termo de maior ordem para o lado esquerdo e renomeando m como n , obtemos assim a relação de recorrência para a série no caso não-homogêneo:

$$a_{n+1} = -\frac{1}{a_0(n+1)} \left(\frac{2(n-1)}{n} a_{n-1} + \sum_{k=1}^n (n-k+1) a_k a_{n-k+1} \right). \quad (\text{D.9})$$

A figura D.1 ilustra a série para vários valores diferentes de ϕ_0 . Vê-se claramente que a convergência da série depende desse valor, e que conforme o mesmo se aproxima de zero a suposição de uma série de Taylor começa a perder a validade, o que se expressa como uma diminuição da sua região de convergência.

Apêndice E

Aumentando o raio de convergência com uma aproximação de Padé

Uma opção para superar o raio de convergência da série utilizando a própria série é a implementação de uma aproximação de Padé. Neste Apêndice serão detalhados os passos para a implementação dessa ferramenta na série desenvolvida no Apêndice C para o caso homogêneo. O caso não-homogêneo não será detalhado já que o mesmo é uma aplicação direta da teoria da aproximação de Padé (Bender e Orszag, 1978, Cap. 3).

É comum uma aproximação de Padé de uma série de potências convergir para a função mesmo depois do raio de convergência (Bender e Orszag, 1978). Hogarth e Parlange (1999) utilizaram-se dessa técnica e conseguiram, com poucos termos, aplicar a série desenvolvida por Heaslet e Alksne (1961) até $\xi = 2,6$, que está claramente além do raio de convergência da série, portanto, optamos por este método como tentativa de aumentar a região de validade da nossa solução.

Apesar de Boyd (1997) ter apresentado um algoritmo a ser implementado em *Maple* para resolver equações diferenciais com uma aproximação de Padé, escolhemos neste trabalho implementar o nosso próprio algoritmo por questões de flexibilidade e precisão.

A ideia da aproximação de Padé é substituir uma série de potências por uma razão

de duas outras séries de potências construídas a partir dos coeficientes da série original. Definimos então uma aproximação de Padé para a série ϕ definindo primeiro variáveis ζ e y tais que

$$\zeta = \xi^{1/2} \tag{E.1}$$

$$y = \zeta^3, \tag{E.2}$$

de maneira a escrevermos

$$\phi = \xi^{1/2} \sum a_n \xi^{3n/2} \tag{E.3}$$

$$= \xi^{1/2} \sum a_n \zeta^{3n} \tag{E.4}$$

$$= \xi^{1/2} \sum a_n y^n. \tag{E.5}$$

Segundo Bender e Orszag (1978) podemos aplicar uma aproximação à soma $\sum a_n y^n$ na forma

$$P_M^N = \frac{\sum_{n=0}^N A_n y^n}{\sum_{n=0}^M B_n y^n}, \tag{E.6}$$

que pode ser reescrito em termos de ξ como

$$P_M^N = \frac{\sum_{n=0}^N A_n \zeta^{3n}}{\sum_{n=0}^M B_n \zeta^{3n}} \tag{E.7}$$

$$= \frac{\sum_{n=0}^N A_n \xi^{\frac{3n}{2}}}{\sum_{n=0}^M B_n \xi^{\frac{3n}{2}}}, \tag{E.8}$$

logo definimos a aproximação de Padé de ϕ , P_ϕ , como

$$P_\phi = \xi^{1/2} \frac{\sum_{n=0}^N A_n \xi^{\frac{3n}{2}}}{\sum_{n=0}^M B_n \xi^{\frac{3n}{2}}}, \tag{E.9}$$

que utiliza $N + M + 1$ coeficientes da equação original. B_0 é tomado como sendo 1 sem nenhuma perda de generalidade (Bender e Orszag, 1978).

Os coeficientes A_n e B_n da aproximação de Padé podem ser obtidos com simples operações matriciais

$$\underset{\sim}{\Lambda} \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_M \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a_{N+1} \\ a_{N+2} \\ \vdots \\ a_{N+M} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.10})$$

onde $\underset{\sim}{\Lambda}$ é uma matriz da forma

$$\Lambda_{ij} = a_{N+i-j} \quad (i \geq 1, j \leq M). \quad (\text{E.11})$$

Os coeficientes A_n são então definidos como

$$A_n = \sum_{j=0}^n a_{n-j} B_j, \quad (\text{E.12})$$

com $B_j = 0$ para $j > M$.

Quando os coeficientes N e M são iguais, tem-se uma sequência diagonal. Optamos por um Padé diagonal, já que na maioria dos casos a sua convergência é mais eficiente do que aproximações com N e M diferentes (Boyd, 1997). O resultado da série está na figura E.1.

A figura E.2 apresenta uma comparação entre todos os três métodos de resolução propostos aqui para o caso homogêneo: a solução numérica, a série inalterada e a série com a aplicação de uma aproximação de Padé. No eixo vertical temos, por questões de visualização, o eixo logaritimizado com a variável $1 - \phi(\xi)$, que é a distância das funções até a reta de valor unitário.

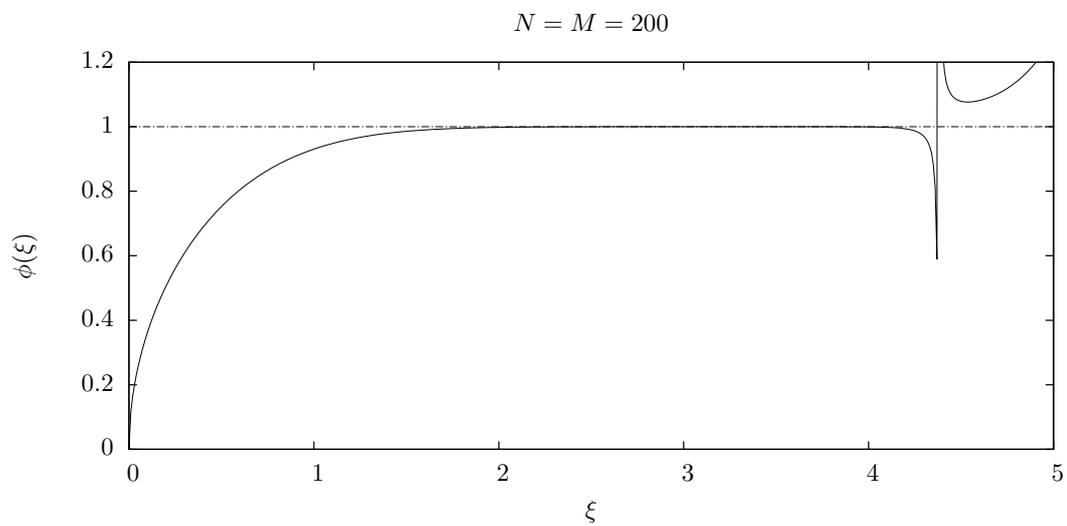


Figura E.1: Função calculada com aproximação de Padé.

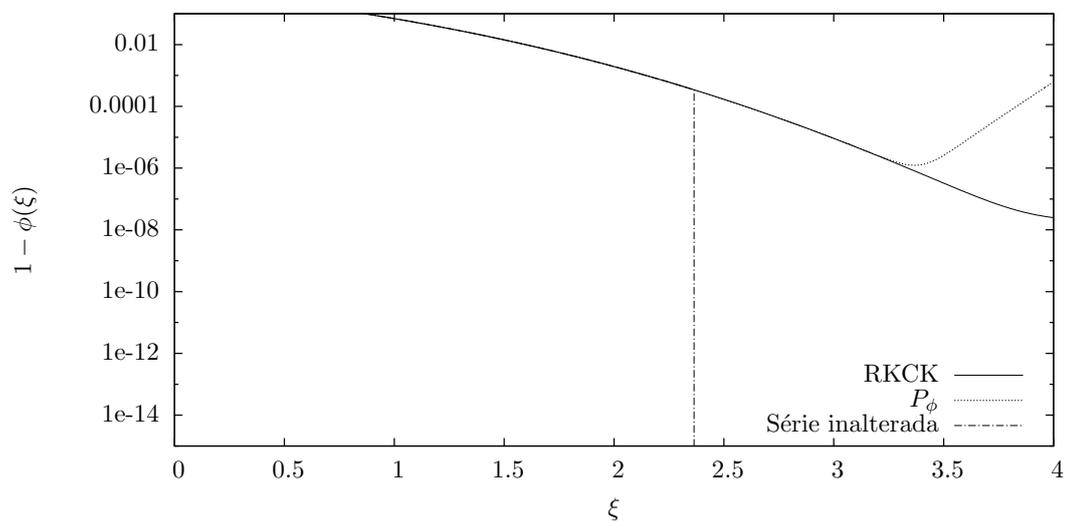


Figura E.2: Gráfico de ϕ obtida numericamente (RKCK), através da aproximação de Padé (P_ϕ) e com a série inalterada.

Apêndice F

Soluções assintóticas

Neste apêndice detalhamos duas soluções assintóticas para a equação de Boussinesq: uma delas se baseia em uma aproximação encontrada na literatura, que por sua vez se baseia em aproximações da equação de Blasius (válida apenas para o caso homogêneo) e a outra foi desenvolvida aqui para os propósitos deste trabalho. Ambas são válidas para a equação obtida após a transformação de Boltzmann.

F.1 Aquífero com condições homogêneas baseado em Blasius

A aproximação assintótica deduzida nesta seção se baseia na abordagem de Hogarth e Parlange (1999) e foi uma tentativa de reproduzir os resultados dos autores. No entanto, o resultado ao qual chegamos, apesar de ser da mesma forma básica da equação apresentada por eles, é superior em termos de precisão da representação da função de Boussinesq. Tentamos então aproximar a Eq. (3.1) com condições iniciais

$$\phi(0) = 0, \quad \phi(\infty) = 1. \quad (\text{F.1})$$

O ponto de partida utilizado por Hogarth e Parlange (1999) é uma aproximação da

equação de Blasius que pode ser escrita nas variáveis utilizadas aqui como

$$\phi \sim 1 - A\sqrt{\pi} \operatorname{erfc} \left(\frac{\eta + B}{2} \right), \quad (\text{F.2})$$

onde $B = -1.720787657520503$ (Boyd, 2008) e o coeficiente A foi obtido diretamente da Eq. (14) de Hogarth e Parlange (1999) como $A = 0.2337276186438419$. Esse valor é diferente do valor obtido pelos autores (0.23344), porém acreditamos que o valor obtido aqui é mais preciso, já que não utiliza nenhuma aproximação posterior, enquanto que a sua estimativa para A utiliza uma aproximação para $\frac{d^2 f}{d\eta^2}$ obtida de Parlange et al. (1981).

Considerando a aproximação para ψ tirada da Eq. (13) de Hogarth e Parlange (1999)

$$\psi \sim 2A \exp \left[- \left(\frac{\eta + B}{2} \right)^2 \right], \quad (\text{F.3})$$

e que pode ser prontamente deduzida a partir de (F.2), nós passamos para a integração de (F.2) com respeito a η o que (igualando o coeficiente de integração a B) produz

$$2\xi \sim (\eta + B)\phi + 2A \exp \left[- \left(\frac{\eta + B}{2} \right)^2 \right] \sim (\eta + B)\phi + \psi. \quad (\text{F.4})$$

Isolando $\eta + B$ e substituindo na Eq. (F.2) tem-se

$$\phi \sim 1 - A\sqrt{\pi} \operatorname{erfc} \left(\frac{2\xi - \psi}{2\phi} \right). \quad (\text{F.5})$$

Focamos agora no argumento da função erro presente na Eq. (F.5), e que pode ser aproximado por

$$\frac{2\xi - \psi}{2\phi} = \frac{2\xi}{2\phi} \left(1 - \frac{\psi}{2\xi} \right) \approx \frac{\xi}{\phi \left(1 + \frac{\psi}{2\xi} \right)}. \quad (\text{F.6})$$

Considerando o comportamento assintótico de (F.5) e (F.3) quando ξ tende a infinito é possível substituir ϕ (recursivamente) e ψ na equação (F.6) para obter

$$\frac{\xi}{\phi \left(1 + \frac{\psi}{2\xi} \right)} \approx \frac{\xi}{\left(1 - A\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\xi) \right) \left(1 + \frac{A}{\xi} \exp(-\xi^2) \right)}. \quad (\text{F.7})$$

Aplicando na Eq. (F.7) a aproximação da função erro complementar fornecida por (Jeffrey e Zwillinger, 2007, p. 889, Eq. 8.254) até o segundo termo, que é dada por

$$\operatorname{erfc}(\xi) \sim \frac{\exp(-\xi^2)}{\xi\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{1}{2\xi^2} \right), \quad (\text{F.8})$$

e excluindo o termo de maior ordem do denominador de (F.7) tem-se

$$\begin{aligned} \frac{2\xi}{\phi\left(1 + \frac{\psi}{2\xi}\right)} &\sim \frac{\xi}{1 - \frac{A}{\xi} \exp(-\xi^2) \left(1 - \frac{1}{2\xi^2}\right) + \frac{A}{\xi} \exp(-\xi^2)} \\ &\sim \frac{\xi}{1 + \frac{A}{2\xi^3} \exp(-\xi^2)} \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

no denominador; que substituído de volta na Eq. (F.5) fornece

$$\phi(\xi) \sim 1 - A\sqrt{\pi} \operatorname{erfc}\left(\frac{\xi}{1 + \frac{A}{2\xi^3} \exp(-\xi^2)}\right), \quad (\text{F.10})$$

que é a aproximação desejada.

Repare que apesar de seguirmos a ideia apresetanda em Hogarth e Parlange (1999) a equação resultante é um pouco diferente da apresentada pelos mesmos autores, sendo que a equação apresentada aqui é ligeiramente mais precisa.

F.2 Aquífero com condições não-homogêneas

A expansão da equação de Boussinesq leva a

$$\phi\phi'' + \phi'\phi' + 2\xi\phi' = 0, \quad (\text{F.11})$$

que pode ser aproximado por

$$\bar{\phi}\phi'' + \phi'\phi' + 2\xi\phi' \sim 0, \quad (\text{F.12})$$

coforme $\phi \rightarrow \bar{\phi}$. Lembrando que consideramos condições de contorno gerais nessa resolução:

$$\phi(0) = \phi_0, \quad \phi(\infty) = 1, \quad \phi_0 \geq 0. \quad (\text{F.13})$$

Se denotarmos $\phi' = y$ temos

$$\bar{\phi}y' + y^2 + 2\xi y = 0, \quad (\text{F.14})$$

que é uma equação de Bernoulli. Esse tipo de equação pode ser resolvida com uma mudança de variáveis conhecida (Greenberg, 1998, p. 32), no entanto resolveremos de um modo alternativo a seguir. Começamos por considerar uma equação similar linearizada:

$$\bar{\phi}y' + 2\xi y = 0, \quad (\text{F.15})$$

cuja solução é imediata:

$$y = K \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right). \quad (\text{F.16})$$

O próximo passo é utilizar o método de variação de parâmetros na equação original. Portanto supomos $K = K(\xi)$, o que, substituindo na equação original, fornece

$$\begin{aligned} \bar{\phi} \left[K' \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) - 2\frac{\xi}{\phi} K \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) \right] + K^2 \left[\exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) \right]^2 + 2\xi K \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) &= 0 \\ \bar{\phi} K' \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) - 2\xi K \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) + K^2 \left[\exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) \right]^2 + 2\xi K \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) &= 0 \\ \bar{\phi} K' \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) + K^2 \left[\exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) \right]^2 &= 0 \\ \bar{\phi} K' + K^2 \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

que resulta em

$$\begin{aligned} \frac{dK}{K^2} &= -\frac{1}{\phi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right) \\ K^{-1} &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\phi^{3/2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\sqrt{\phi}}\right) + C_1. \end{aligned} \quad (\text{F.18})$$

Esse resultado implica que y é da forma

$$y = \phi' = \frac{\exp\left(-\frac{\xi^2}{\phi}\right)}{\frac{\sqrt{\pi}}{2\phi^{3/2}} \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\sqrt{\phi}}\right) + C_1}. \quad (\text{F.19})$$

Integrando, tem-se a equação livre (sem a imposição de nenhuma condição de contorno) aproximada $\phi(\xi)$, que chamaremos de ϕ_{ap}

$$\phi_{ap} = \bar{\phi} \ln \left[C_1 + \frac{\sqrt{\pi} \operatorname{erf} \left(\frac{\xi}{\sqrt{\bar{\phi}}} \right)}{2\bar{\phi}^{1/2}} \right] + C_2. \quad (\text{F.20})$$

Por definição a equação para ψ sem nenhuma condição de contorno aplicada é

$$\psi = \frac{\exp \left(-\xi^2 / \bar{\phi} \right) \left\{ \bar{\phi} \ln \left[C_1 + \frac{\sqrt{\pi} \operatorname{erf} \left(\frac{\xi}{\sqrt{\bar{\phi}}} \right)}{2\bar{\phi}^{1/2}} \right] + C_2 \right\}}{\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\bar{\phi}}} \operatorname{erf} \left(\frac{\xi}{\sqrt{\bar{\phi}}} \right) + C_1} \quad (\text{F.21})$$

A aplicação da condição de contorno no infinito em ϕ_{ap} nos dá:

$$\begin{aligned} \phi_{ap} &= \bar{\phi} \ln \left[\frac{C_1 + \frac{\sqrt{\pi}}{2\bar{\phi}^{1/2}} \operatorname{erf}(\xi/\sqrt{\bar{\phi}})}{C_1 + \frac{\sqrt{\pi}}{2\bar{\phi}^{1/2}}} \right] + 1 \\ \phi_{ap} &= \bar{\phi} \ln \left[\frac{C_3 + \operatorname{erf}(\xi/\sqrt{\bar{\phi}})}{C_3 + 1} \right] + 1, \end{aligned} \quad (\text{F.22})$$

sendo que C_3 é uma constante que pode ser ajustada.

Se o objetivo for que a condição de contorno na origem também valha, temos

$$C_3 = \frac{\exp \left(\frac{\phi_0 - 1}{\bar{\phi}} \right)}{1 - \exp \left(\frac{\phi_0 - 1}{\bar{\phi}} \right)}, \quad (\text{F.23})$$

no entanto a aplicação dessa condição deve ser feita com cautela, já que a suposição inicial é de que ϕ tem um valor fixo $\bar{\phi}$, e a aplicação da condição de contorno em dois extremos diferente implica em dois valores distintos de ϕ .

A expressão ψ com a condição de contorno no infinito aplicada fornece

$$\psi = 2\sqrt{\frac{\bar{\phi}}{\pi}} \frac{\exp \left(-\xi^2 / \bar{\phi} \right) \left\{ \bar{\phi} \ln \left[\frac{C_3 + \operatorname{erf}(\xi/\sqrt{\bar{\phi}})}{C_3 + 1} \right] + 1 \right\}}{C_3 + \operatorname{erf}(\xi/\sqrt{\bar{\phi}})}, \quad (\text{F.24})$$

sendo que a constante C_3 também pode ser ajustada de maneira que $d\psi/d\xi = 0$ na origem, o que está mais de acordo com a função ψ real. Dessa maneira temos que

$$C_3 = \frac{\exp \left(1 - \frac{1}{\bar{\phi}} \right)}{1 - \exp \left(1 - \frac{1}{\bar{\phi}} \right)}. \quad (\text{F.25})$$

Todas as expressões anteriores, no entanto, dependem do valor de $\bar{\phi}$. Não pôde-se deduzir uma maneira satisfatória de se determinar esse valor analiticamente, porém pode-se dizer que, por aferição, uma expressão que mostrou-se ótima para modelar o seu valor foi

$$\bar{\phi} = \frac{\phi_0 + 3}{4}. \quad (\text{F.26})$$

Os resultados da equação (F.22) com (F.23) e (F.26) estão apresentados na figura F.1 junto com a solução numérica RKCK.

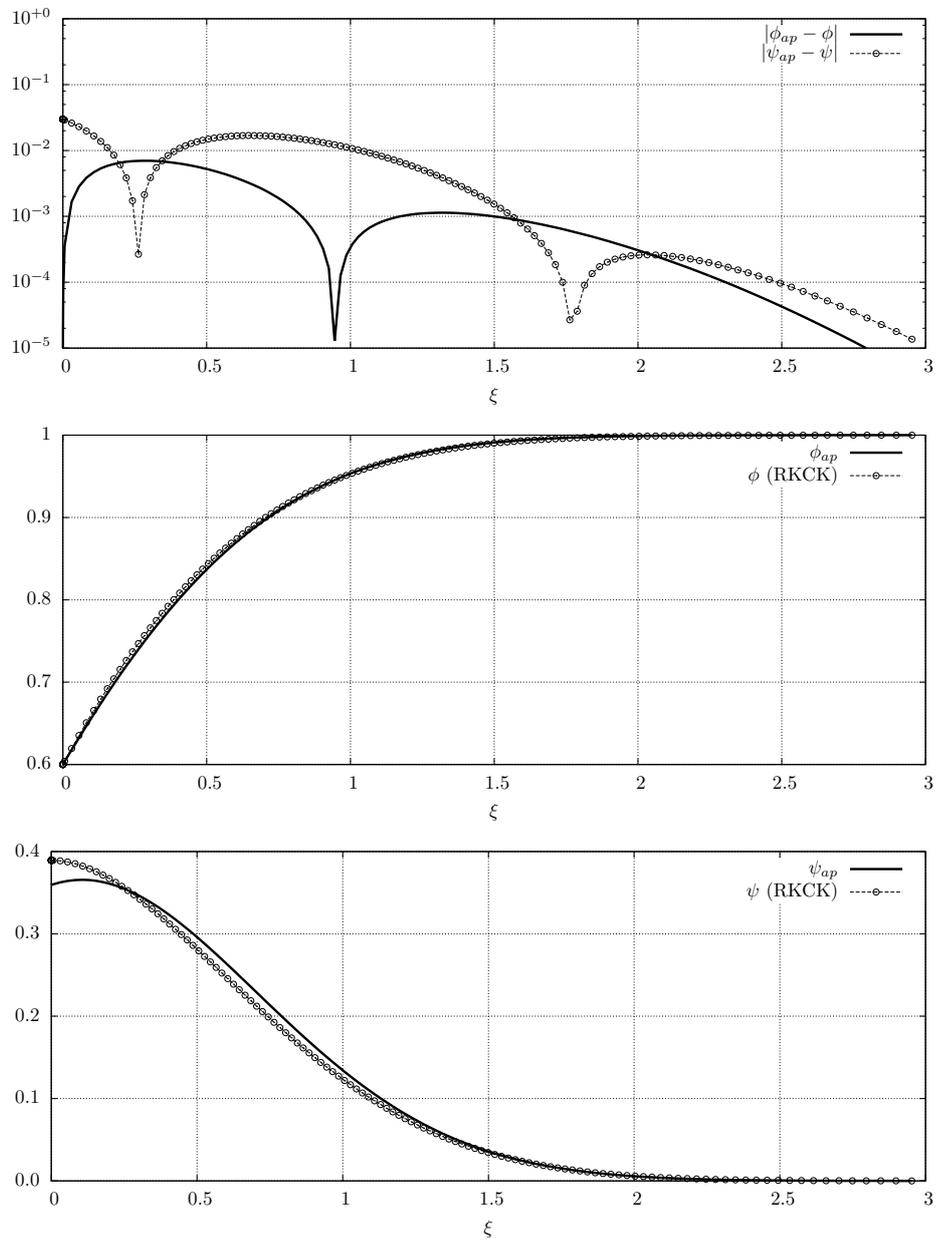


Figura F.1: Diferenças entre as aproximações deduzidas aqui e a resolução “exata” por RKCK para o caso $\phi_0 = 0,6$.

Apêndice G

Estimativas alternativas do raio de convergência

Neste apêndice quatro métodos para se estimar convergência de séries serão descritos e explicados. Todas são aplicadas à série desenvolvida para o caso homogêneo (*vide* Apêndice C), porém podem ser facilmente adaptadas para os casos não-homogêneos.

É importante destacar que todos os métodos apresentados aqui são obsoletos (para o caso das séries desenvolvidas aqui) se comparados ao método desenvolvido no Capítulo 5. Os métodos apresentados a seguir foram as primeiras tentativas deste trabalho de se obter região de validade da série e se baseiam em teoremas gerais. Esses mesmos métodos, no entanto, foram superados em termos de eficiência e facilidade pela abordagem baseada na equação invertida, que é específica para a equação de Boussinesq. Para outros casos, porém, os métodos a seguir apresentados podem se mostrar úteis.

G.1 Teste da razão

Segundo o teste da razão, para que uma série numérica convirja (*i.e.*, tenha uma soma finita quando o número de termos tende a infinito), ela tem que satisfazer a condição

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{P_{n+1}}{P_n} \right| < 1, \quad (\text{G.1})$$

onde os P_n s são os enésimos termos da série. O operador limite superior é equivalente ao operador limite quando o limite existe. Supomos que o limite existe. No caso da série de potências descrita por (C.5), cada termo depende de ξ , o que faz com que para cada ξ tenhamos uma soma diferente, logo no nosso caso o coeficiente que chamamos de P_n equivale a $a_n \xi^{\frac{3n+1}{2}}$. Dessa forma, podemos aplicar (G.1) para ϕ como

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1} \xi^{\frac{3(n+1)+1}{2}}}{a_n \xi^{\frac{3n+1}{2}}} \right| &< 1 \\ |\xi|^{\frac{3}{2}} \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| &< 1 \\ |\xi| &< \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| \right)^{-2/3}, \end{aligned} \quad (\text{G.2})$$

logo, definimos

$$L \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| \quad (\text{G.3})$$

e temos

$$|\xi| < L^{-2/3}, \quad (\text{G.4})$$

que diz que para valores ξ menores que $L^{-2/3}$ a série converge, e para valores maiores a série diverge. Podemos então dizer que $L^{-2/3}$ representa o raio de convergência, ao qual nos referiremos como R . Dessa maneira:

$$R = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| \right)^{-2/3} = L^{-2/3}. \quad (\text{G.5})$$

Com isto basta determinar L para determinar o raio de convergência. Há várias maneiras para se determinar L . A maneira mais satisfatória seria determiná-lo analiticamente,

porém o fato de não termos o termo geral da série e sim a relação de recorrência torna esta abordagem difícil, obrigando-nos a utilizar métodos numéricos. Uma maneira de se estimar L numericamente é primeiro aproximar a definição de L e omitir o limite:

$$L \approx \frac{|a_{n+1}|}{|a_n|} \quad (\text{G.6})$$

$$L |a_n| = |a_{n+1}|. \quad (\text{G.7})$$

Logaritimizando ambos os lados, a fim de diminuir os erros numéricos, temos

$$\begin{aligned} \ln(L |a_n|) &= \ln |a_{n+1}| \\ \ln L + \ln |a_n| &= \ln |a_{n+1}| \\ \ln L &= \ln |a_{n+1}| - \ln |a_n|. \end{aligned} \quad (\text{G.8})$$

Esta relação nos diz que a diferença dos logaritmos de $|a_n|$ em função de n deve tender a um valor constante, e esse valor equivale a $\ln L$. Pelo método dos mínimos quadrados, a estimativa para $\ln L$ é a média aritmética de $\ln |a_{n+1}| - \ln |a_n|$, logo, como primeira aproximação para L temos

$$\ln L = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N (\ln |a_{n+1}| - \ln |a_n|) = \frac{\ln |a_{N+1}| - \ln |a_0|}{N}. \quad (\text{G.9})$$

A figura G.1 apresenta os resultados para a equação de Boussinesq. A estimativa por esse método é de

$$R = 2,37637425809,$$

porém (como se pode ver no gráfico) o desvio padrão é alto demais para considerarmos esta estimativa confiável: 2,9.

Realizando passagens análogas com a equação de Blasius, pode-se chegar no mesmo método, com a única diferença que definiremos o limite no caso de Blasius como L_b e o raio de convergência como R_b , com a relação entre eles

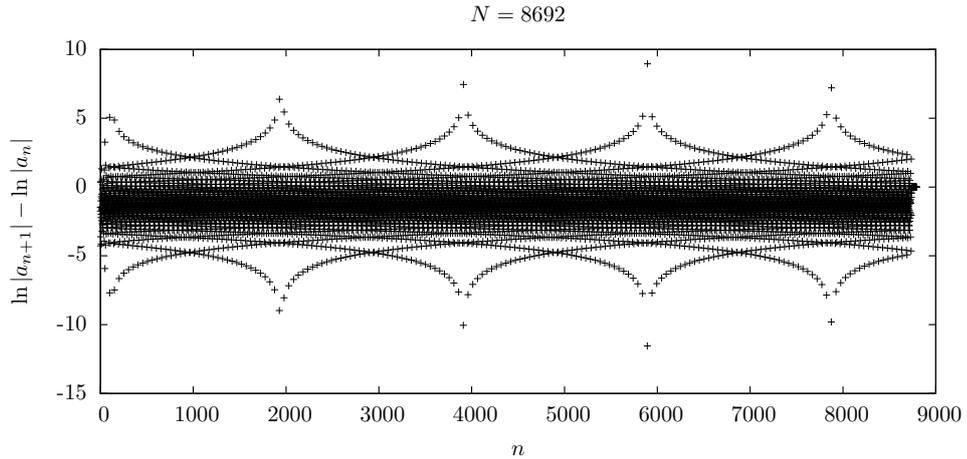


Figura G.1: Gráfico das diferenças entre os logaritmos do módulo dos coeficientes a_n . O gráfico foi feito excluindo-se os 50 primeiros termos (a fim de não dar valor ao comportamento transiente) e também os 50 últimos, para evitar erros numéricos, já que os últimos termos estão perto da precisão numérica do compilador.

$$R_b = L_b^{-1/3}. \quad (\text{G.10})$$

Ao analisar o gráfico dessa técnica na figura G.2, vê-se que, apesar de o método não ser acurado para tratar da equação de Boussinesq, ele se adapta muito bem à série de Blasius, nos permitindo claramente observar um comportamento transiente e um comportamento assintótico que é visto em mais detalhes na figura G.3.

Enquanto que a estimativa fornecida por Boyd (2008) para o raio de convergência da função de Blasius é de 5,6900380545, a nossa estimativa utilizando este método é de 5,6900383488 se considerarmos apenas os termos com $n > 800$, para não contabilizar o comportamento transiente. Este número está correto até a sexta casa decimal.

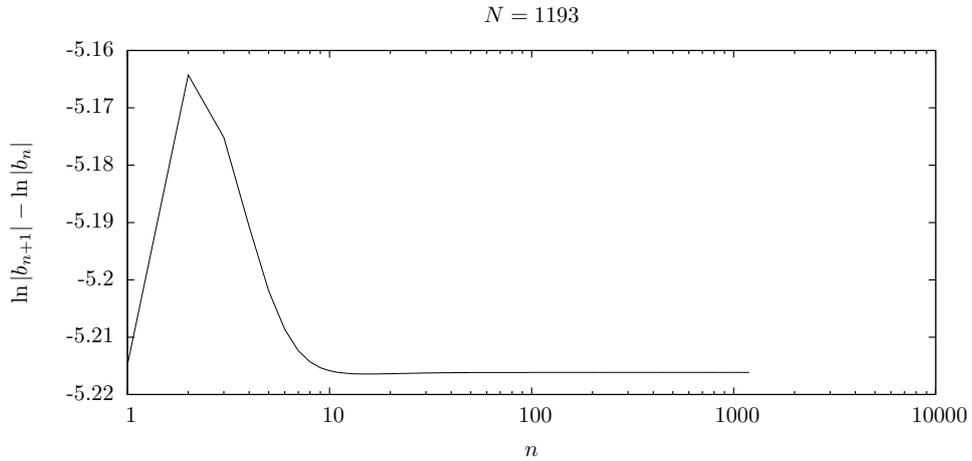


Figura G.2: Diferenças entre os logaritmos do módulo dos coeficientes para a função de Blasius. O eixo das abscissas está logaritimizado para enfatizar o comportamento claramente transiente evidente nos primeiros termos e que não é visto no gráfico da figura G.3.

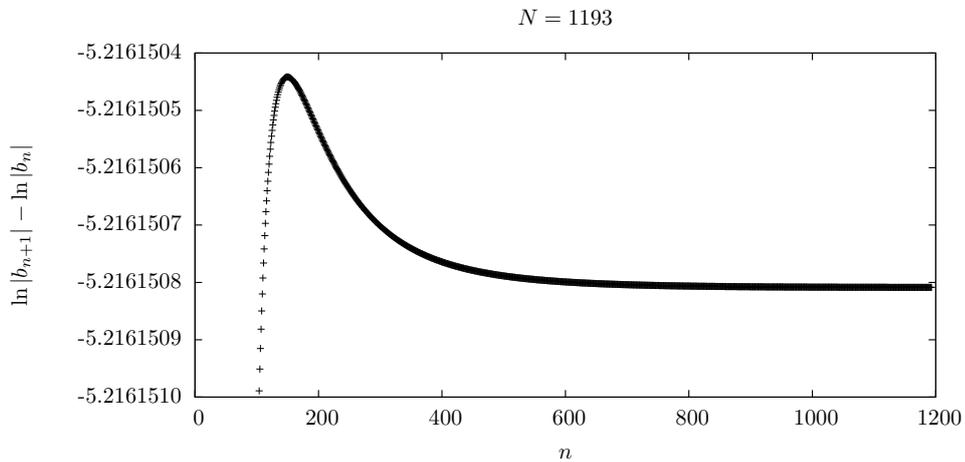


Figura G.3: Gráfico das diferenças entre os logaritmos do módulo dos coeficientes para a função de Blasius. Vê-se claramente os coeficientes entrando em um comportamento permanente para ns altos. É nessa região onde se obtém os melhores resultados para a estimativa de L_b .

G.2 Teste da raiz

Outra maneira de analisar a convergência é o teste da raiz. Segundo o teste da raiz, uma série de potências centrada em zero como a considerada anteriormente converge se

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n| |\xi|^{\frac{3n+1}{2}}} &< 1 \\
 \lim_{n \rightarrow \infty} |\xi|^{\frac{3}{2}} \sqrt[n]{|a_n| |\xi|^{\frac{1}{2}}} &< 1 \\
 |\xi|^{\frac{3}{2}} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(|a_n| |\xi|^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{n}} &< 1 \\
 |\xi|^{\frac{3}{2}} \left(\lim_{n \rightarrow \infty} |a_n|^{\frac{1}{n}} \right) \left(\lim_{n \rightarrow \infty} |\xi|^{\frac{1}{2n}} \right) &< 1 \\
 |\xi|^{\frac{3}{2}} \left(\lim_{n \rightarrow \infty} |a_n|^{\frac{1}{n}} \right) &< 1 \\
 |\xi|^{\frac{3}{2}} &< \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|} \right)^{-1} \\
 |\xi| &< \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|} \right)^{-2/3}. \tag{G.11}
 \end{aligned}$$

Dessa maneira, podemos dizer também que

$$R = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|} \right)^{-2/3} \tag{G.12}$$

e

$$L = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|}. \tag{G.13}$$

A relação anterior nos permite a aplicação de uma outra abordagem numérica para estimar L . Aproximando, então, o limite e aplicando o logaritmo natural à equação (G.13) temos que para ns suficientemente grandes

$$L \approx |a_n|^{\frac{1}{n}} \tag{G.14}$$

$$\ln L = \ln |a_n|^{\frac{1}{n}} \tag{G.15}$$

$$= \frac{1}{n} \ln |a_n| \tag{G.16}$$

$$\ln |a_n| = n \ln L. \tag{G.17}$$

Dessa maneira, o limite pode ser obtido ajustando-se uma reta para $\ln |a_n|$ em função de n . O coeficiente angular da reta será $\ln L$, e daí tira-se uma estimativa para L .

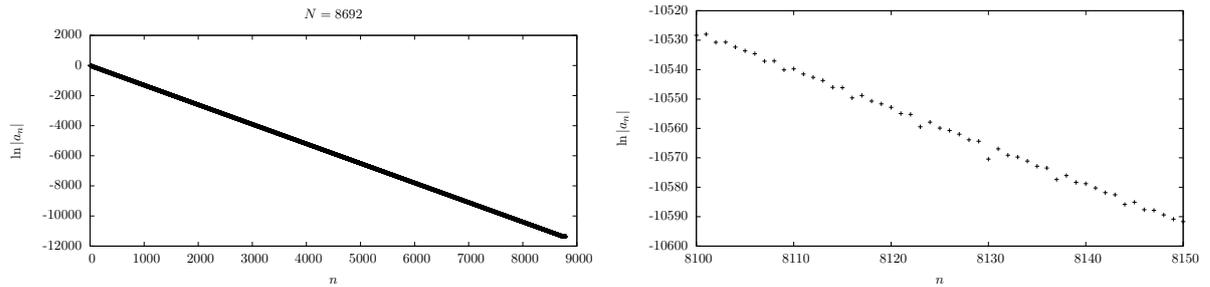


Figura G.4: Gráfico mostrando a relação entre $\ln |a_n|$ e n para a equação de Boussinesq (esquerda, onde o coeficiente angular ajustado para esta reta fornece uma estimativa para L) e detalhe na relação entre $\ln |a_n|$ e n para a equação de Boussinesq (direita).

A Figura G.4 apresenta gráfico de $\ln |a_n|$ por n . Apesar do gráfico inteiro apresentar-se visualmente reto (pelo gráfico do lado esquerdo), vê-se pelo gráfico do lado direito da Figura G.4, que apresenta os mesmos pontos porém em detalhe, que os coeficientes não apresentam um comportamento exatamente uniforme e mesmo para os coeficientes de mais alta ordem esta característica não muda. A estimativa para esse método é

$$R = 2,37652992,$$

que está em concordância até a segunda casa decimal com a estimativa pelo teste da razão.

Quando analisamos, no entanto, a mesma relação para o caso de Blasius, vemos que os coeficientes mantêm uma progressão muito mais uniforme, indicativo de que o método neste caso funciona melhor. De fato a estimativa neste caso para o raio de convergência é $R_b = 5,6900380059$, que tem uma precisão de 7 casas decimais; uma casa a mais do que a estimativa com o teste da razão.

Os últimos termos calculados para a função de Boussinesq também apresentam um comportamento peculiar. Vê-se no detalhe da figura G.6 que a diferença entre os últimos termos fica constante. É provável que isto seja um efeito de erros numéricos por estarmos próximos da precisão da máquina. Vale comentar que este efeito não aparece nos últimos termos da série de Blasius (como se pode ver na figura G.7), que também são calculados no limite da precisão quádrupla do compilador.

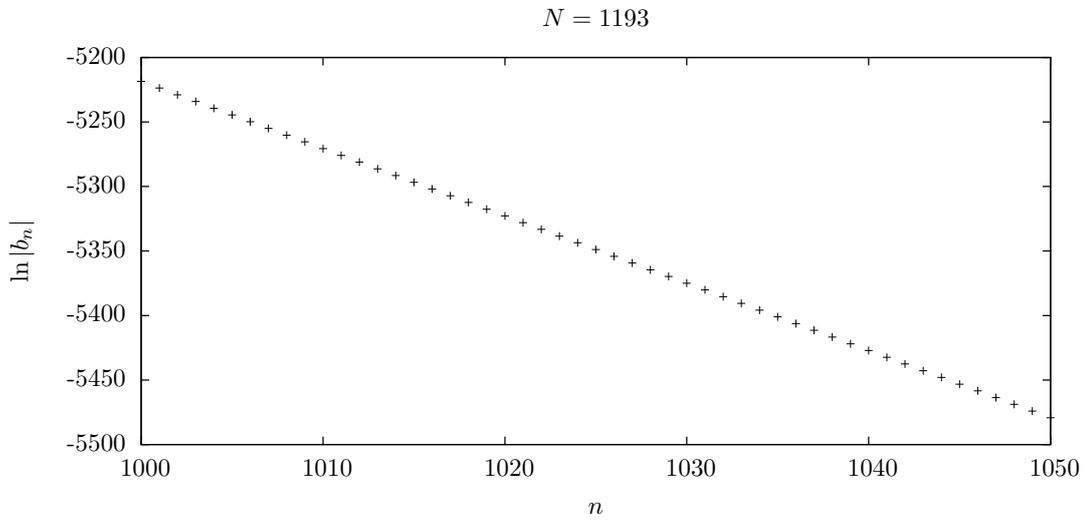


Figura G.5: Detalhe na relação entre $\ln |b_n|$ e n para a equação de Blasius, que mostra um padrão mais linear do que o exibido pelos coeficientes a_n s.

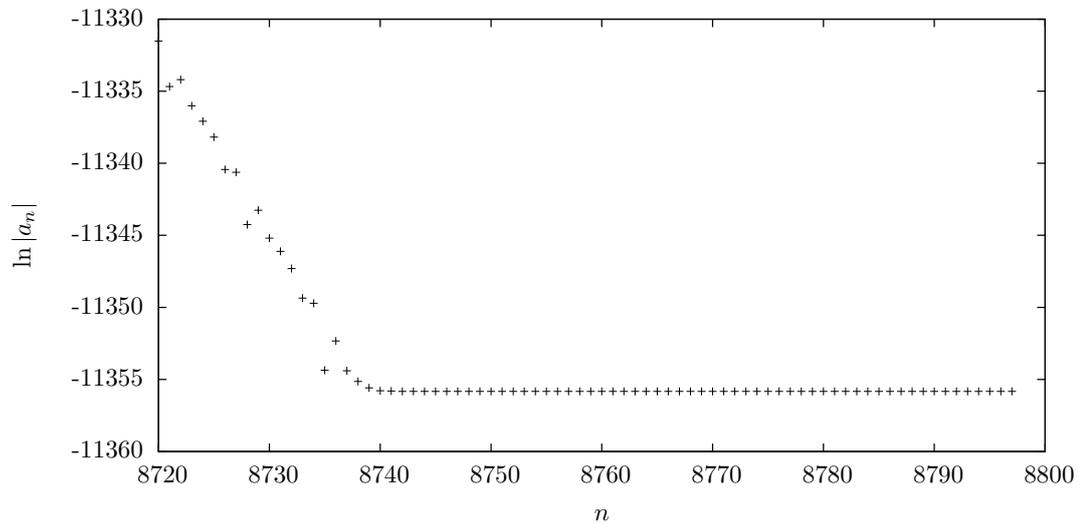


Figura G.6: Detalhe na relação entre $\ln |a_n|$ e n para os últimos termos da equação de Boussinesq.

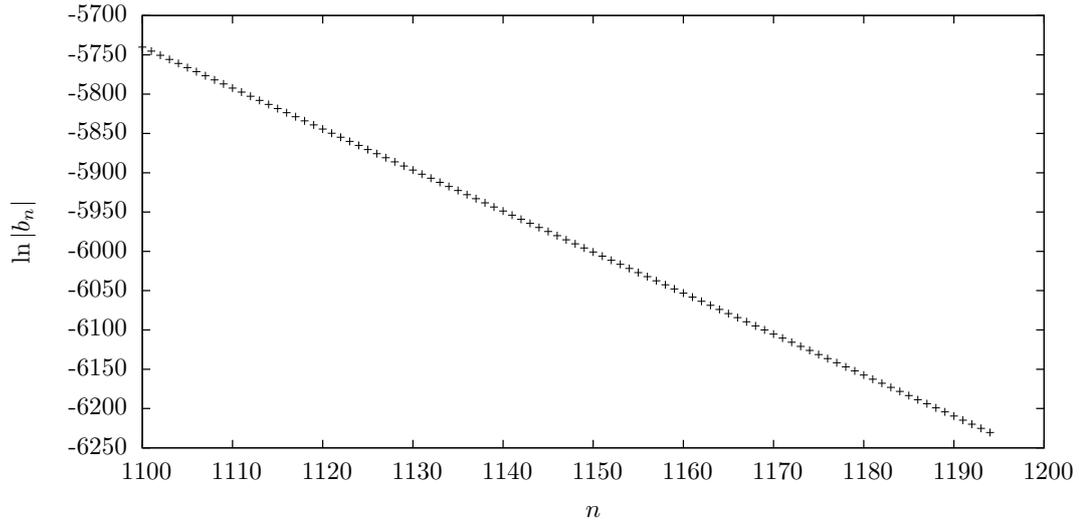


Figura G.7: Detalhe dos últimos termos calculados para a equação de Blasius.

G.3 Estimativa iterativa

Para deduzir um método iterativo, começamos com a relação de recorrência em mãos. Utilizamos o teste da razão e reescrevemos (G.3) com o termo a_{n+1} substituído pela relação de recorrência (C.26):

$$L = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{a_n a_0 (3n + 5)} \left(\frac{4(3n + 1) a_n}{3n + 3} + \sum_{k=1}^n [(3k + 1) a_k a_{n-k+1}] \right) \right| \quad (\text{G.18})$$

Como temos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{4(3n + 1) a_n}{a_n a_0 (3n + 5)(3n + 3)} \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{4(3n + 1)}{a_0 (3n + 5)(3n + 3)} \right| \quad (\text{G.19})$$

$$= 0, \quad (\text{G.20})$$

já que o denominador cresce mais rápido do o numerador conforme n aumenta, podemos escrever

$$L = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{a_n a_0 (3n + 5)} \sum_{k=1}^n [(3k + 1) a_k a_{n-k+1}] \right| \quad (\text{G.21})$$

Podemos tratar o somatório adicionando ao mesmo um somatório idêntico e depois

dividindo por dois. Dessa forma temos

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^n \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right] &= \frac{\sum_{k=1}^n \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right] + \sum_{k=1}^n \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right]}{2} \\
&= \frac{\sum_{k=1}^n \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right] + \sum_{k=n}^1 \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right]}{2} \\
&= \frac{\sum_{k=1}^n \left[(3n+5)a_k a_{n-k+1} \right]}{2} \\
\sum_{k=1}^n \left[(3k+1)a_k a_{n-k+1} \right] &= \frac{(3n+5)}{2} \sum_{k=1}^n a_k a_{n-k+1} \tag{G.22}
\end{aligned}$$

que pode ser substituído na expressão para L :

$$\begin{aligned}
L &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{(3n+5)}{2a_n a_0 (3n+5)} \sum_{k=1}^n a_k a_{n-k+1} \right| \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{2a_n a_0} \sum_{k=1}^n a_k a_{n-k+1} \right| \\
&= \frac{1}{2} \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{(a_1 a_n + a_2 a_{n-1} + a_3 a_{n-2} + \dots + a_n a_1)}{a_n a_0} \right| \\
&= \frac{1}{2} \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_1}{a_0} + \frac{a_2 a_{n-1}}{a_0 a_n} + \frac{a_3 a_{n-2}}{a_0 a_n} + \dots + \frac{a_n a_1}{a_n a_0} \right| \tag{G.23}
\end{aligned}$$

Considerado que o limite do módulo de uma função é o módulo do limite, se o mesmo existe, supomos que o limite existe e temos que

$$\begin{aligned}
L &= \frac{1}{2a_0} \left| \lim_{n \rightarrow \infty} \left(a_1 + \frac{a_2 a_{n-1}}{a_n} + \frac{a_3 a_{n-2}}{a_n} + \dots + \frac{a_n a_1}{a_n} \right) \right| \\
L &= \frac{1}{2a_0} \left| a_1 + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_2 a_{n-1}}{a_n} + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_3 a_{n-2}}{a_n} + \dots + a_1 \right|. \tag{G.24}
\end{aligned}$$

Definimos agora

$$\delta_n = \frac{a_n}{|a_n|},$$

de maneira a podermos representar a_n como

$$a_n = \delta_n |a_n|. \tag{G.25}$$

Considerando também que podemos reescrever as divisões dos coeficientes em função do limite L como

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|a_{n-1}|}{|a_n|} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|a_n|}{|a_{n+1}|} \\ &= \frac{1}{L},\end{aligned}$$

analogamente para

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|a_{n-2}|}{|a_n|} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{|a_{n-2}|}{|a_{n-1}|} \frac{|a_{n-1}|}{|a_n|} \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{|a_{n-2}|}{|a_{n-1}|} \right) \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{|a_{n-1}|}{|a_n|} \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{|a_n|}{|a_{n+1}|} \right) \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{|a_n|}{|a_{n+1}|} \right) \\ &= \frac{1}{L^2}\end{aligned}$$

e assim por diante na forma

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n-m}}{a_n} \right| = L^{-m}, \quad (\text{G.26})$$

temos que, dado um valor de n suficientemente grande, a equação (G.24) pode ser aproximada por

$$L \approx \frac{1}{2a_0} \left| a_1 + \frac{\delta_{n-1}}{\delta_n} a_2 L^{-1} + \frac{\delta_{n-2}}{\delta_n} a_3 L^{-2} + \dots + \frac{\delta_1}{\delta_n} a_n L^{1-n} \right|, \quad (\text{G.27})$$

em uma passagem onde também foi usada a equação (G.25).

Podemos então escrever (G.27) de modo mais compacto:

$$L \approx \frac{1}{2a_0} \left| \sum_{k=1}^n a_k \frac{\delta_{n-k+1}}{\delta_n} L^{1-k} \right|. \quad (\text{G.28})$$

Uma maneira simples de se chegar em uma estimativa de L com a equação (G.28) é utilizando o método de Newton. Definimos $G(l)$ como

$$G(l) \equiv l - \frac{1}{2a_0} \sum_{k=1}^n a_k \frac{\delta_{n-k+1}}{\delta_n} l^{1-k}, \quad (\text{G.29})$$

de maneira que queremos encontrar o valor $l = L$ para o qual $G(l) = 0$. Para não abrir mão da diferenciabilidade do somatório entre módulos em (G.28), supomos que seu valor

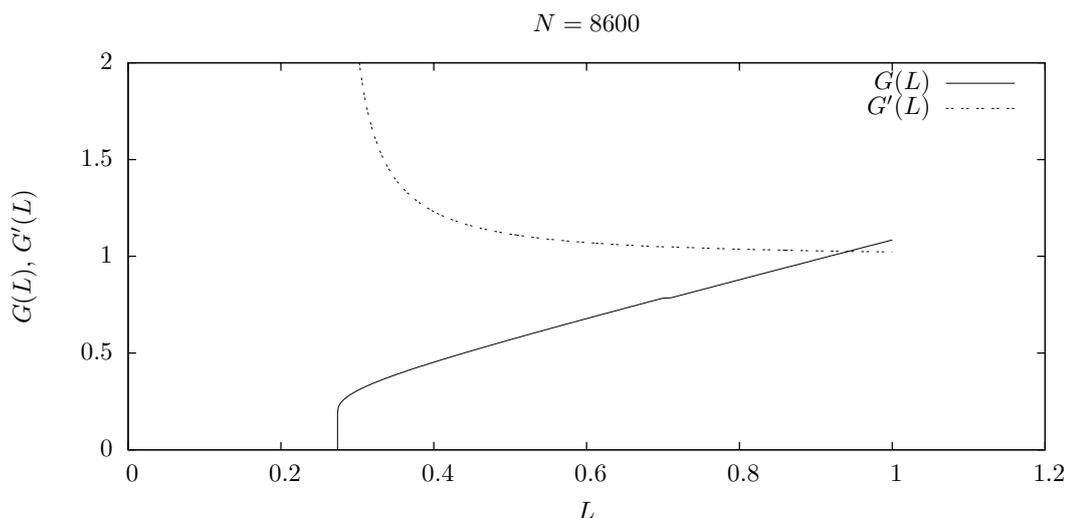


Figura G.8: Gráfico da função $G(L)$ e $G'(L)$. Valores abaixo de $L = 0,272$ não puderam ser calculados por questão de precisão da máquina.

será sempre positivo a fim de nos livrarmos do módulo. Analisando a função graficamente com vários N s diferentes, vê-se que isto é sempre verdade para valores de l maiores que L . Logo, desde que usemos valores de l à direita de onde $G(L)$ passa por zero, a suposição feita é válida.

Podemos utilizar o método de Newton, então, como

$$l_{i+1} = l_i - \frac{G(l_i)}{G'(l_i)}, \quad (\text{G.30})$$

sendo que

$$G'(l) = 1 - \frac{1}{2a_0} \sum_{k=1}^n a_k \frac{\delta_{n-k+1}}{\delta_n} (1-k)l^{-k} \quad (\text{G.31})$$

e onde os índices i dizem respeito à iteração.

É necessário cuidado ao definir a primeira aproximação de L para o método, já que necessitamos encontrar uma região que satisfaça os quesitos de implementação do método de Newton. Um desses quesitos é a região não possuir uma mudança no sinal da primeira nem da segunda derivada. A figura G.8 apresenta as funções $G(l)$ e sua derivada. Como estimativa inicial foram usadas estimativas anteriormente calculadas com os métodos da raiz e da razão.

Tabela G.1: Tabela com as estimativas para R obtidas com valores diferentes de N . R_N significa a estimativa de R calculada com N termos via equação (G.30). Quanto maior o N , mais confiável tende a ser a estimativa. O traço representa um número com o qual não foi possível a obtenção de uma estimativa pois o método divergiu.

N	R_N
10	—
50	2.885845546161449184
100	2.44962897052378040626
500	2.39222392931492515
1000	2.3905213326131866921
2000	2.380387960401748596
4000	2.37884597111545349894
6000	2.3774964602360336
8000	2.37715944601774394357
8700	2.377032027511682003

Para uma visualização de como o número de termos N influencia a estimativa de L e, conseqüentemente, de R , a figura G.9 mostra o raio de convergência como função de N dado pela equação (G.30). Apesar de alguns picos ocasionais percebe-se que claramente o método converge para um valor constante conforme mais termos são introduzidos no processo.

A tabela G.1 apresenta as estimativas para L utilizando valores diferentes para N . Vê-se que apesar de não ser possível um número tão preciso quanto as estimativas para o caso de Blasius, pode-se afirmar que o raio de convergência está aproximadamente em 2,3770 com uma precisão até a segunda casa decimal.

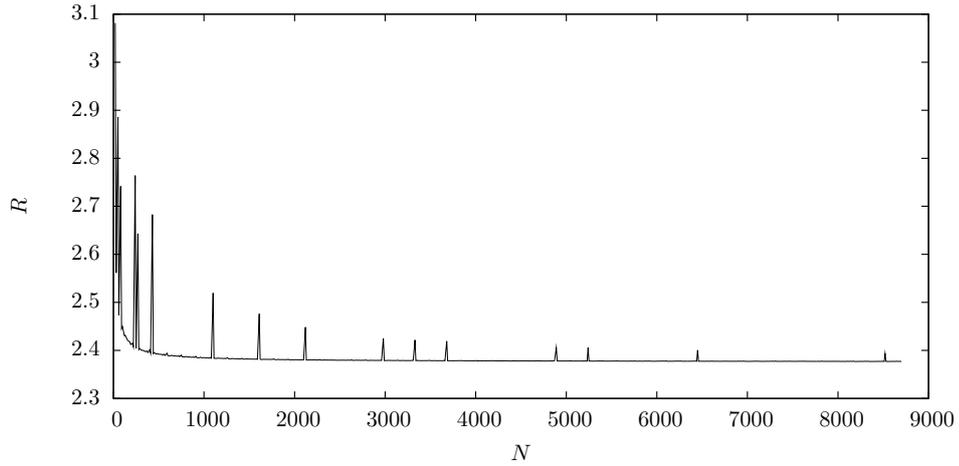


Figura G.9: Gráfico com a estimativa de R por N mostrando que, apesar da existência de alguns picos cuja origem é desconhecida, conforme N aumenta, a estimativa de R tende para um valor constante que consideramos correto. Os valores de N crescem de 10 em 10.

G.4 Estimativa por integração circular

Nesta seção nós desenvolvemos um método numérico que tem como objetivo estimar o raio de convergência R da série que resolve o problema homogêneo. Todas as definições relativas às integrações no plano complexo que foram apresentadas no texto (erro acumulado, RKCK e etc.) foram utilizadas nas integrações aqui apresentadas.

Pela mudança de variáveis $\zeta = \xi^{\frac{1}{2}}$ e $\Phi(\zeta) = \phi(\xi(\zeta))$, a Equação (3.1) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{d\zeta} \left(\frac{\Phi}{\zeta} \frac{d\Phi}{d\zeta} \right) + 4\zeta^2 \frac{d\Phi}{d\zeta} = 0, \quad (\text{G.32})$$

e a série que a resolve (Equação (C.5)) pode ser escrita como

$$\Phi(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \zeta^{3n+1}. \quad (\text{G.33})$$

A Equação (G.33), ao contrário de (C.5) é uma série de potências que se estende ao plano complexo considerando $\zeta \in \mathbb{C}$, o que faz com que o seguinte teorema se aplique (Henrici, 1974b, theorem 3.3a, pág. 155): o raio de convergência de uma série de potências é equivalente ao raio do maior círculo centrado na origem dentro do qual Φ é analítica,

como é descrito no Capítulo 5. Procuramos então saber a distância até a origem da singularidade mais próxima da mesma.

Reescrevendo a Equação (G.32) como o sistema

$$\frac{d\Phi}{d\zeta} = \zeta \frac{\Upsilon}{\Phi}, \quad \frac{d\Upsilon}{d\zeta} = -4\zeta^3 \frac{\Upsilon}{\Phi}, \quad (\text{G.34})$$

podemos integrar a Equação (G.34) numericamente com o método RKCK. As condições equivalentes para a Equação (G.34) podem ser encontradas substituindo (G.33) em (G.34) e considerando o limite quando $\zeta \rightarrow 0$. Pode-se então mostrar que

$$\Upsilon_0 = 2\psi_0, \quad (\text{G.35})$$

o que produz as condições iniciais $\Phi(0) = 0, \Upsilon(0) = \Upsilon_0$.

Apesar de $\Phi(\zeta)$ ser livre de singularidades na origem, (G.34) ainda produz uma divisão por zero em $\zeta = 0$. Isso pode ser superado tratando o passo na origem separadamente e aplicando o limite $\Phi \sim a_0\zeta$ quando $\zeta \rightarrow 0$.

A Figura G.10 apresenta $|\Phi(\zeta)|$ no plano complexo. Essa figura sugere uma sequência de *branch points*. Essas singularidades são vistas avançando radialmente a partir da origem e são artefato da integração numérica usada para gerar a figura, que sai radialmente a partir de $\zeta = 0$.

Nossa abordagem para calcular a distância da singularidade mais próxima, e logo o R , é uma aplicação direta do teorema de Cauchy-Goursat (Greenberg, 1998, teorema 23.3.1, pág. 1191; Henrici, 1974b, teorema 4.3e, pág. 201): se uma função Φ é analítica em todos os pontos dentro de um contorno C , então

$$\Gamma \equiv \oint_C \Phi(\zeta) d\zeta = 0. \quad (\text{G.36})$$

Note que o teorema não implica que se $\Gamma = 0$ então a região dentro de C é livre de singularidades; ele diz que se $\Gamma \neq 0$ então existe ao menos uma singularidade de Φ dentro de C .

Definimos $C(\rho)$ como um círculo no plano complexo de ζ centrado em $\zeta = 0$ com raio $|\zeta| = \rho^{1/2}$. Para estimar R , nós calculamos Γ para valores diferentes de ρ e determinamos

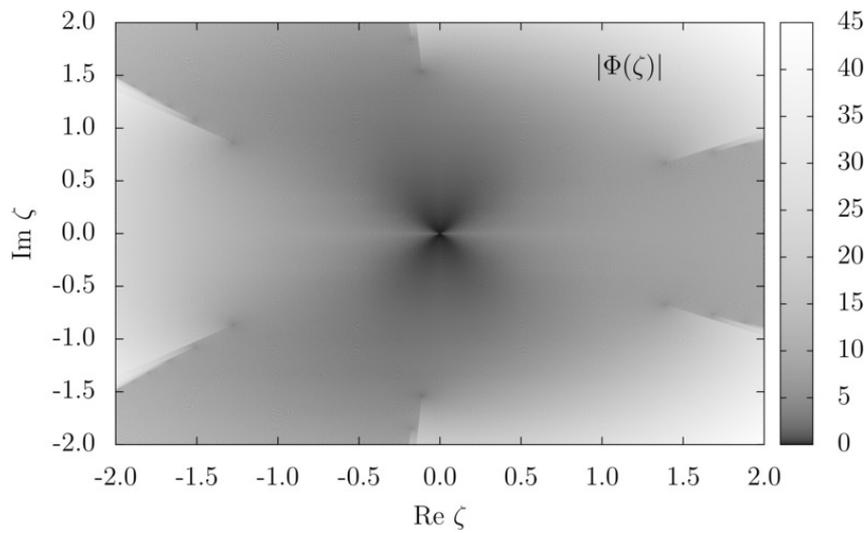


Figura G.10: $|\Phi(\zeta)|$ no plano complexo.

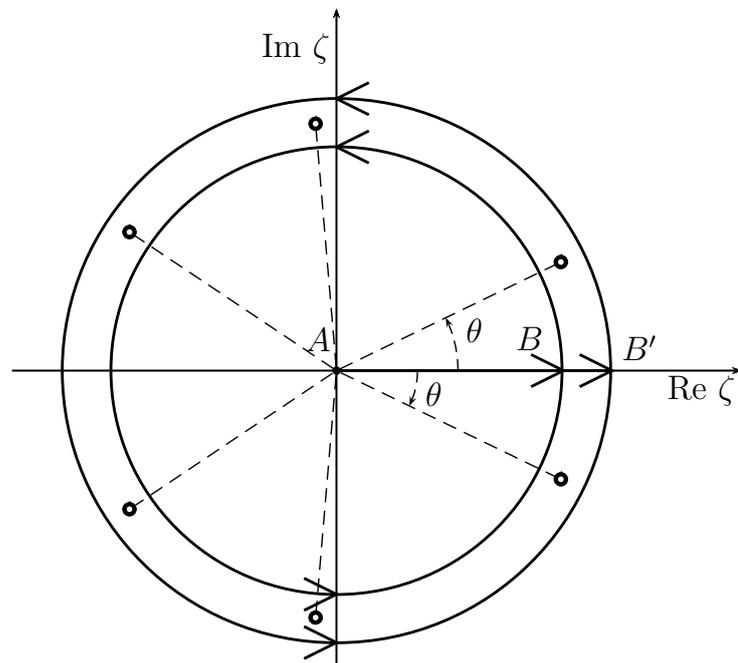


Figura G.11: Caminho de integração para identificar as singularidades no plano complexo de ζ . A localização das singularidades (seis círculos pequenos) foram aproximadas pelos resultados da integração feita para obter a Figura G.10.

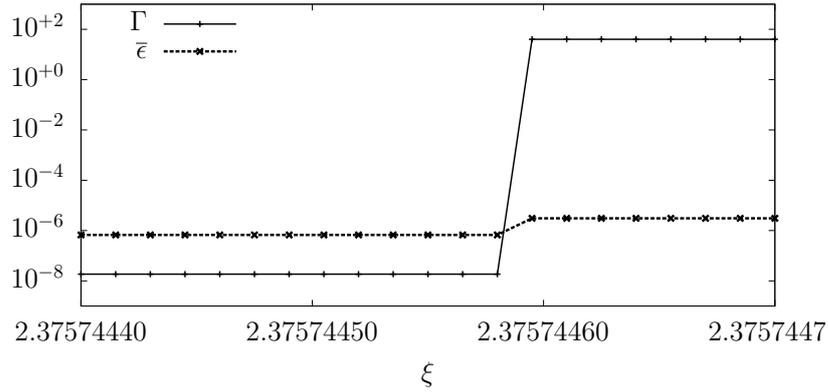


Figura G.12: Valores de Γ e de erros acumulados $\bar{\epsilon}$ calculados para vários valores de ρ .

que a região definida por dois valores consecutivos de ρ nos quais Γ vai de zero (forte evidência de um contorno C sem singularidades) para não-zero (certeza de uma singularidade dentro de C). O raio de convergência R deve estar entre esses dois raios. Para obter Γ devemos integrar Φ numericamente. Note que R fornece o raio de convergência para a série na variável independente ξ .

Os caminhos de integração então apresentados na Figura G.11. Sempre começamos da condição inicial em $\zeta = 0$ e integramos o sistema na reta real para obter Φ e Υ até o primeiro raio a ser analisado; esse é o caminho $A - B$ na figura. Nesse ponto uma nova integração circular numérica começa a calcular Γ como definido em (G.36). Essa integração começa em B , progride no sentido anti-horário em um círculo e termina no mesmo ponto B . Prosseguimos novamente na reta real até que o próximo raio é alcançado, que é representado na figura pelo caminho $B - B'$. Nesse ponto uma outra integração circular começa e que calcula um novo valor de Γ para um raio diferente de C (começando em B' e terminando em B'). Esse processo é repetido progressivamente até que Γ seja não-nulo.

É impossível, no entanto, obter valores exatamente nulos de Γ com integração numérica. Logo, as estimativas de erro fornecidas pelo método RKCK são usadas para produzir limites numéricos. No final da integração de um círculo, se $|\bar{\epsilon}| \geq |\Gamma|$, consideramos $\Gamma = 0$. Se $|\bar{\epsilon}| < |\Gamma|$, consideramos $\Gamma \neq 0$, onde $\bar{\epsilon}$ é o erro de Γ ao fim da integração numérica.

Os resultados finais desse método estão apresentados na Figura G.12. A integração em linha reta de 0 a $\rho^{1/2}$ tem uma tolerância de erro ε de 10^{-16} , e a integração circular tem tolerância de 10^{-10} .

Pelos dados da integração numérica, vemos que o ponto onde Γ deixa de ser zero e passa a ser não-nulo acontece entre 2,375744580 e 2,375744595, fazendo com que a estimativa para R por esse método seja de $R \approx 2,3757445$.

Apêndice H

Imagens do plano complexo

Neste Apêndice apresentamos $\phi(\xi)$ e $\xi(\phi)$ no plano complexo para várias condições iniciais. As Figuras H.1–H.41 apresentam $\phi(\xi)$ à esquerda e $\xi(\phi)$ à direita para valores ϕ_0 variando em passos de 0,05. Todas as figuras deste apêndice foram produzidas seguindo os padrões descritos no Capítulo 5.

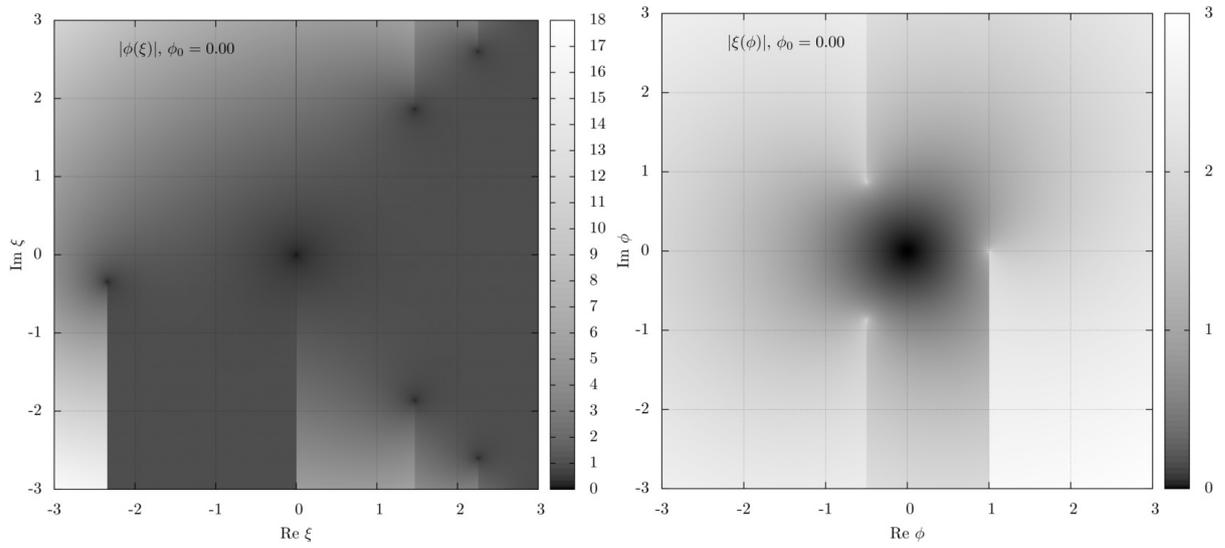


Figura H.1: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,0$.

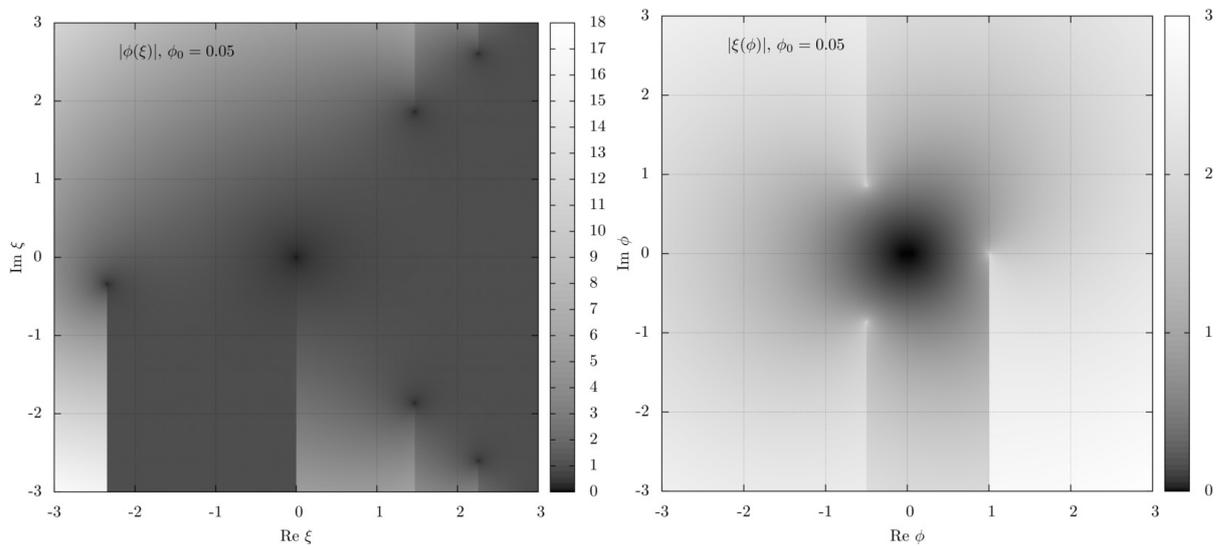


Figura H.2: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,05$.

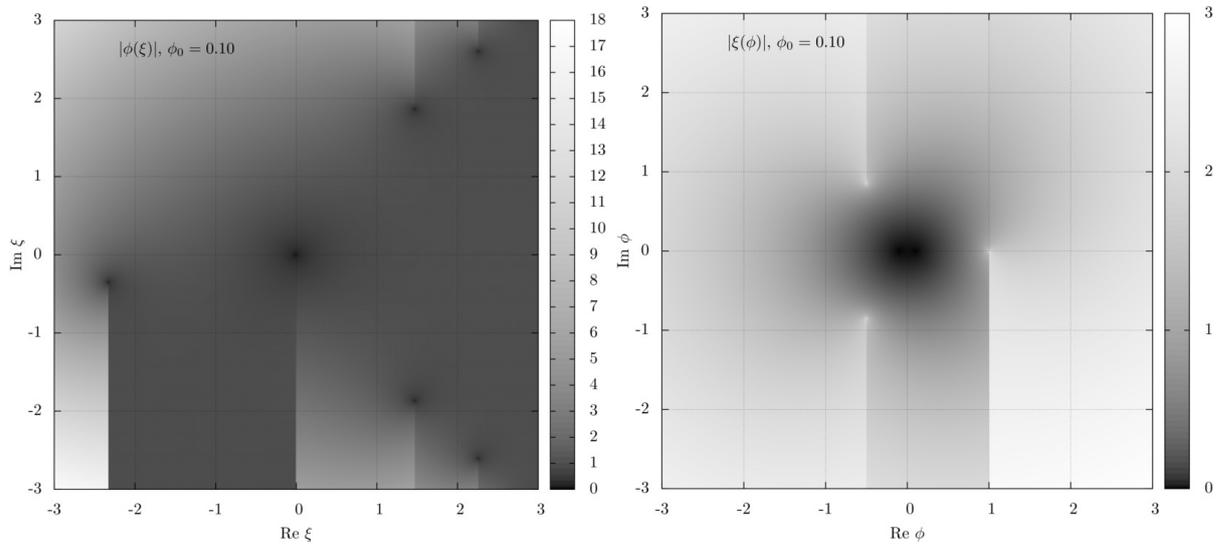


Figura H.3: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,1$.

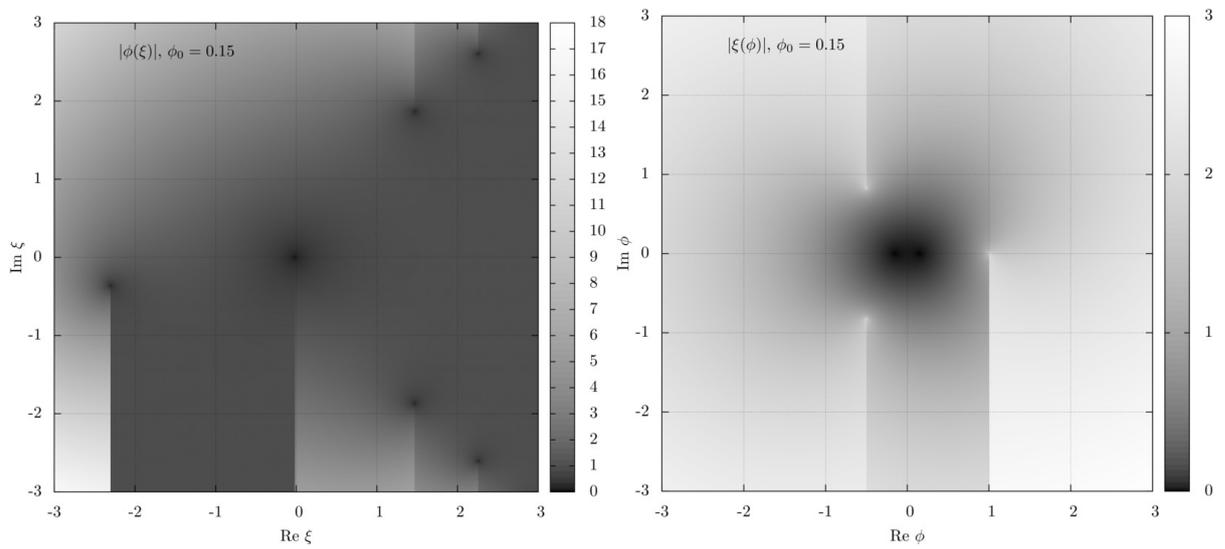


Figura H.4: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,15$.

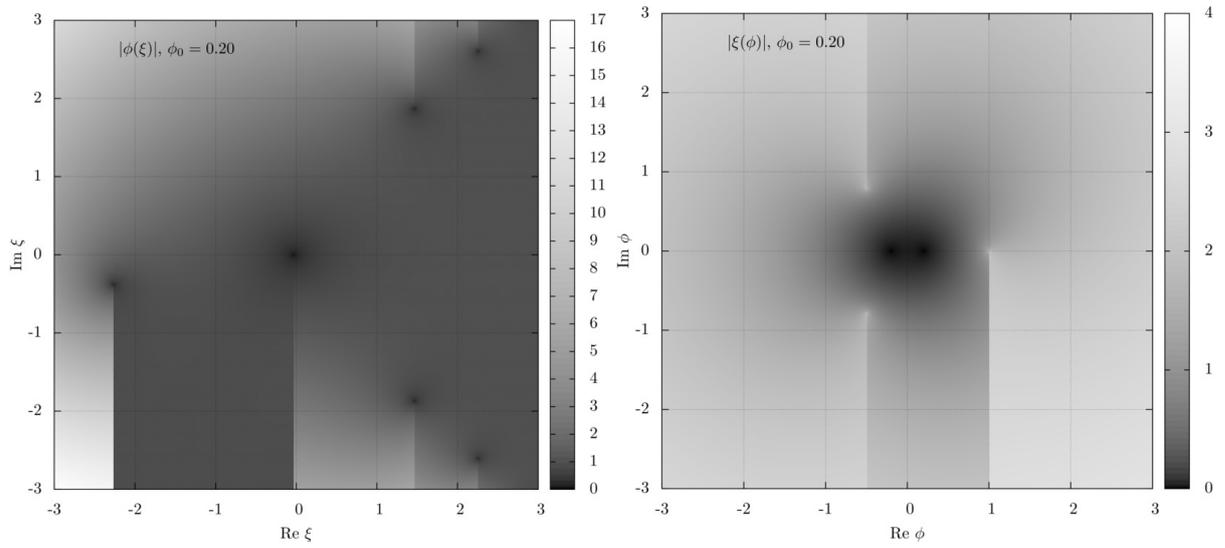


Figura H.5: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,2$.

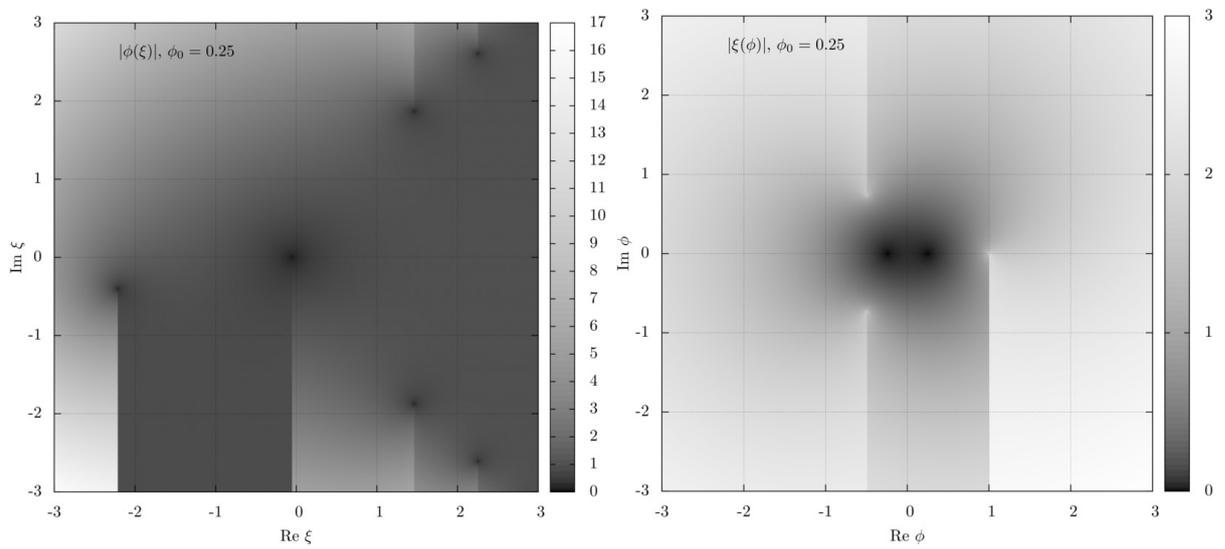


Figura H.6: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,25$.

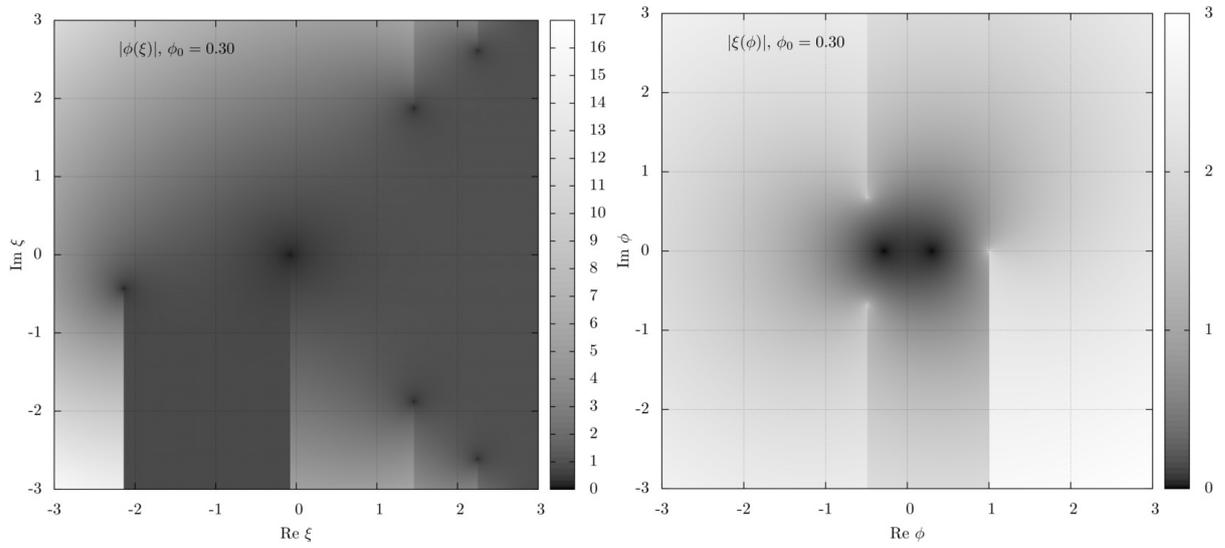


Figura H.7: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,3$.

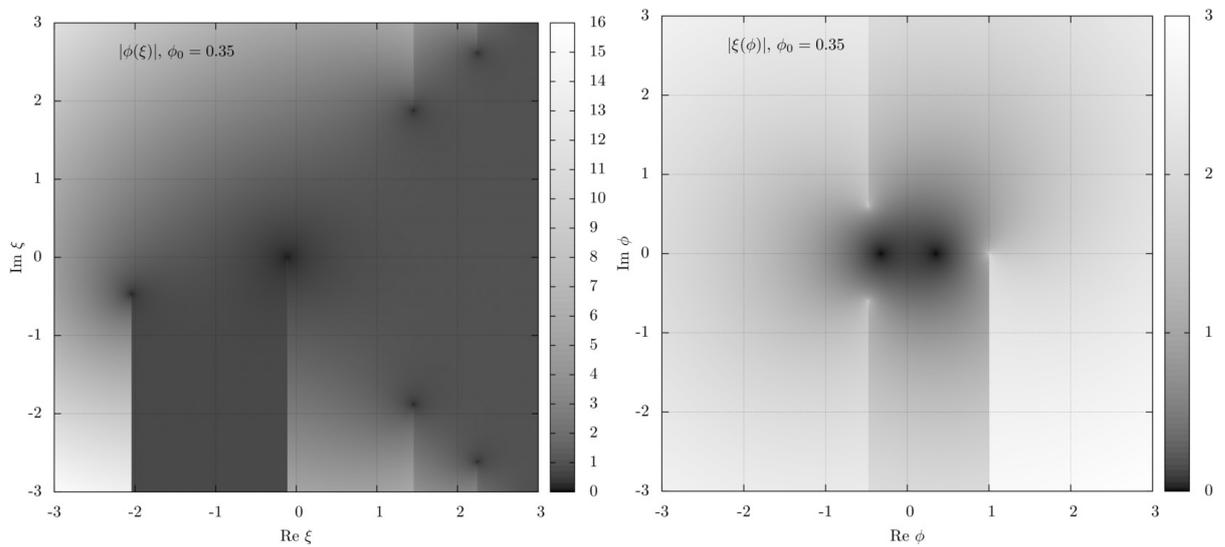


Figura H.8: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,35$.

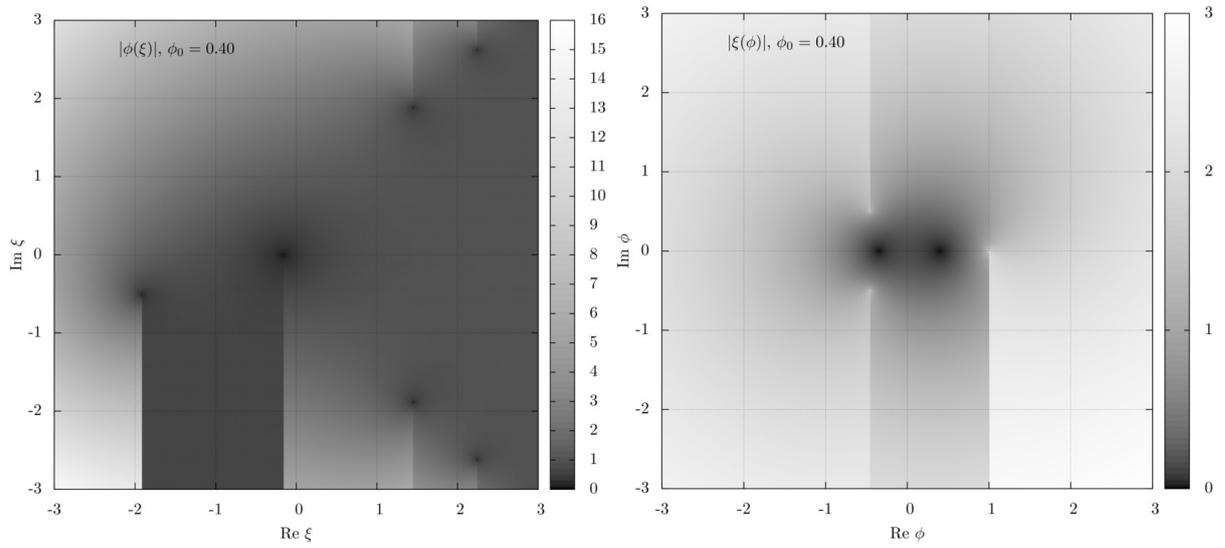


Figura H.9: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,4$.

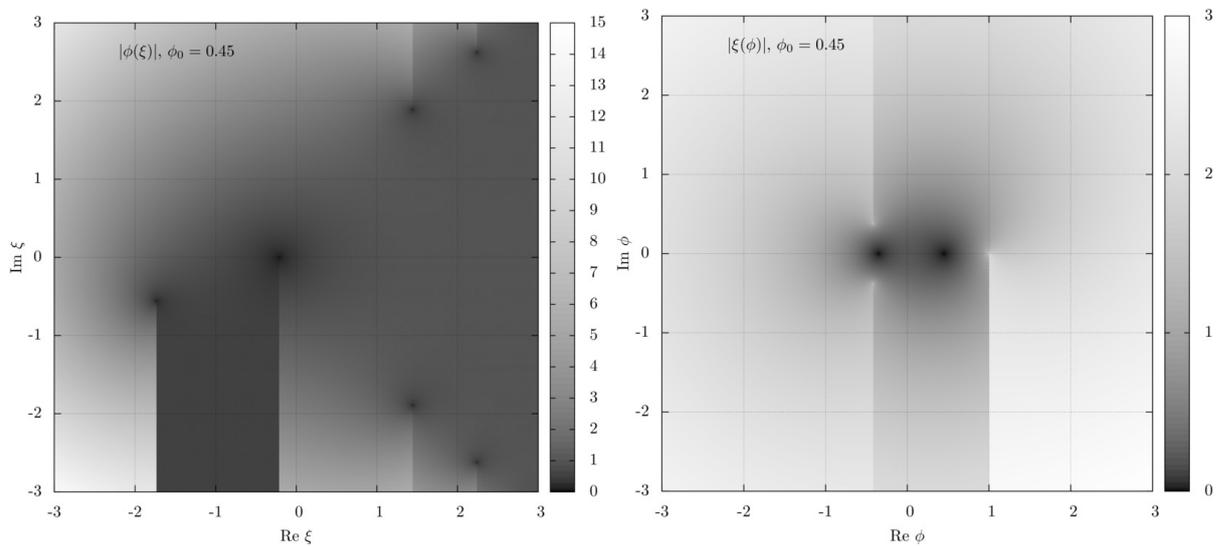


Figura H.10: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,45$.

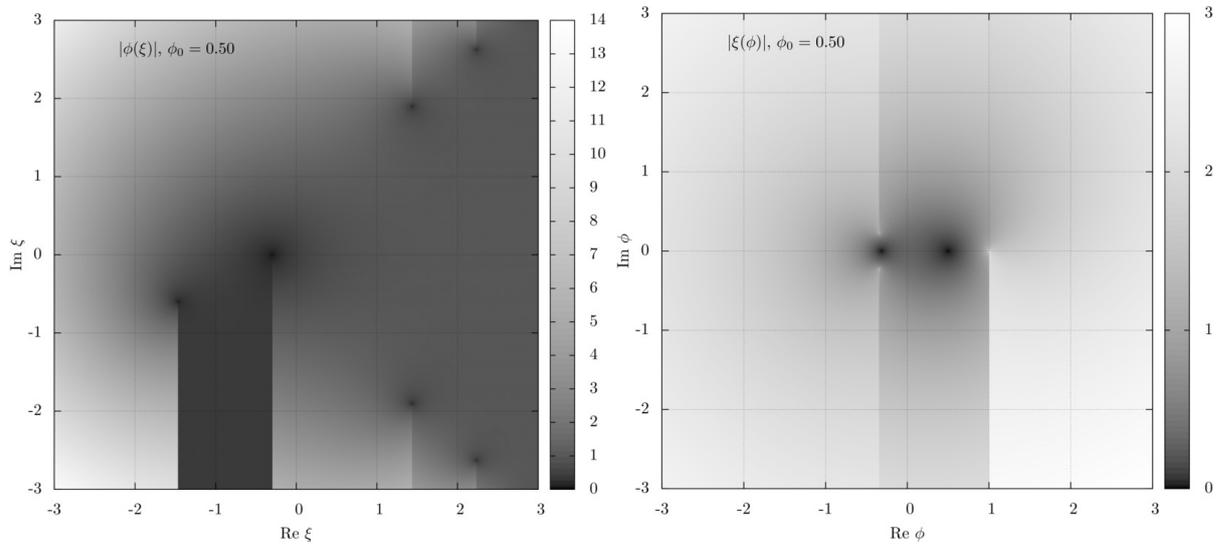


Figura H.11: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,5$.

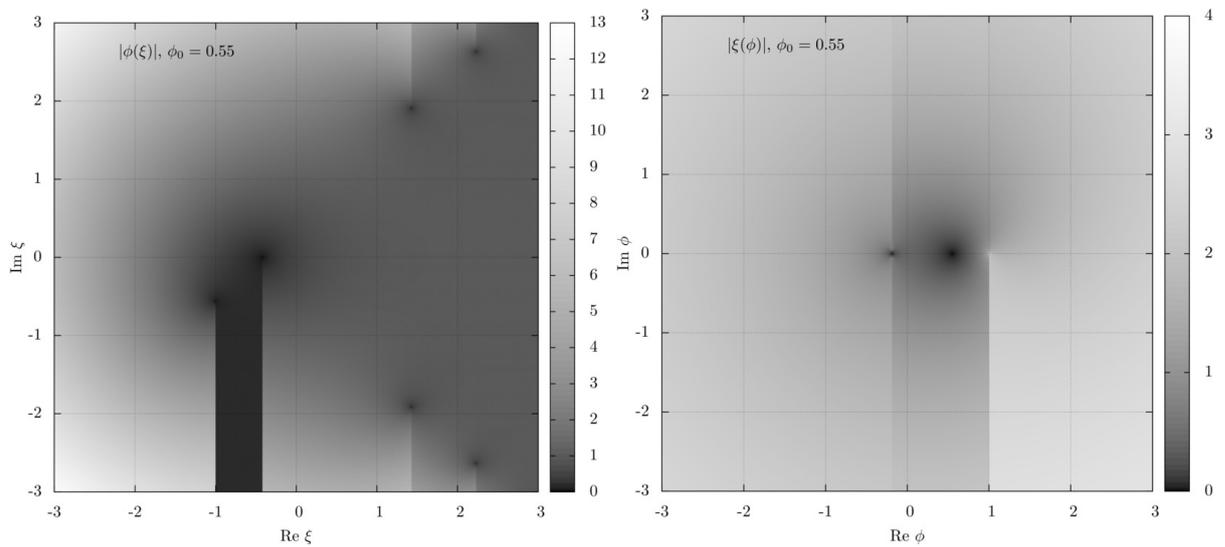


Figura H.12: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,55$.

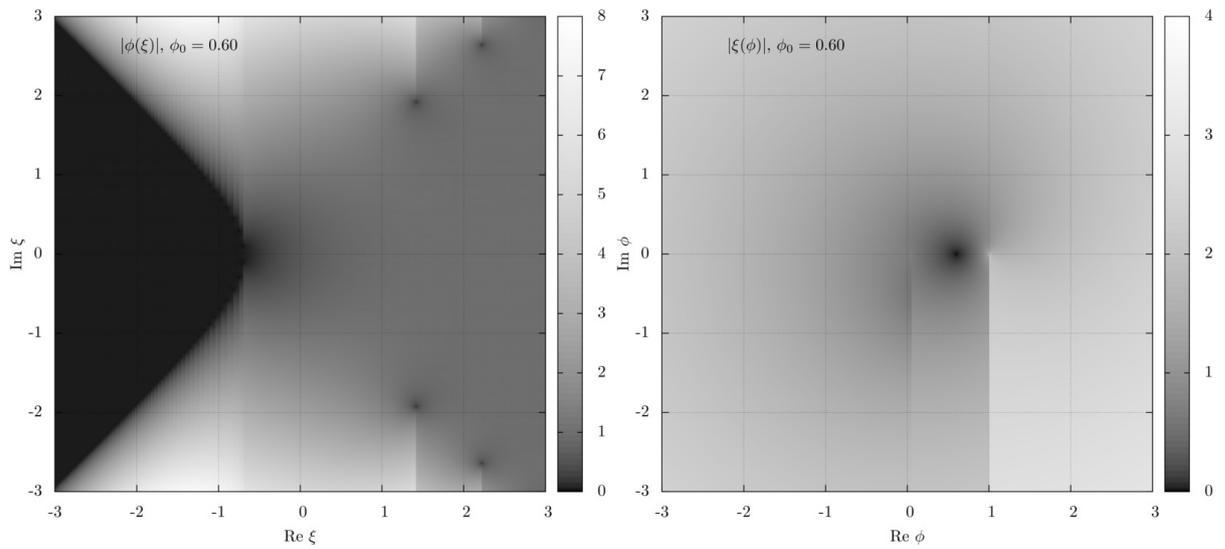


Figura H.13: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,6$.

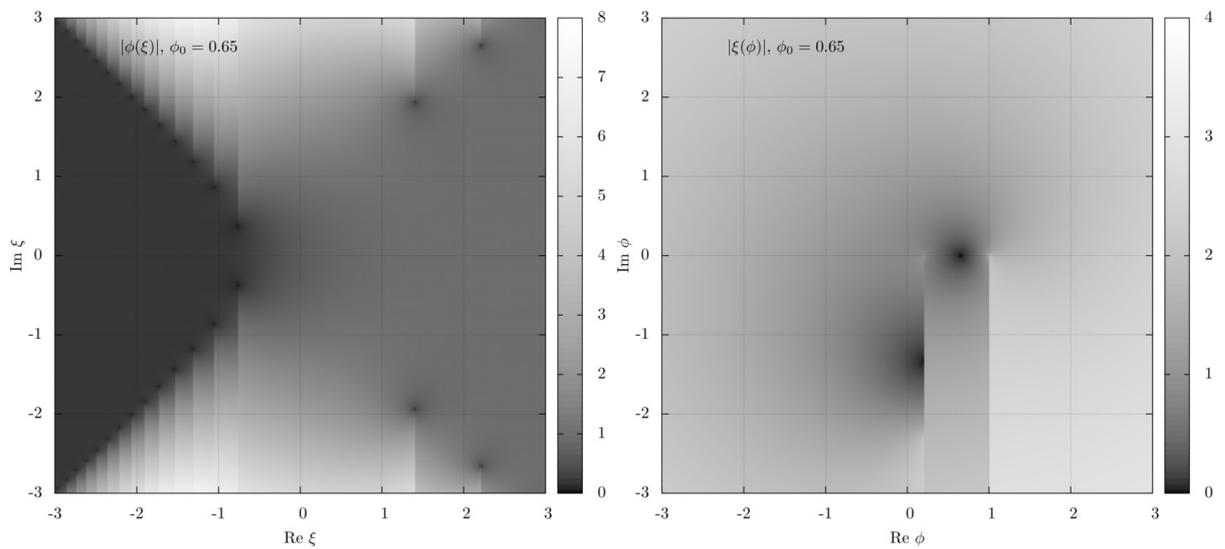


Figura H.14: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,65$.

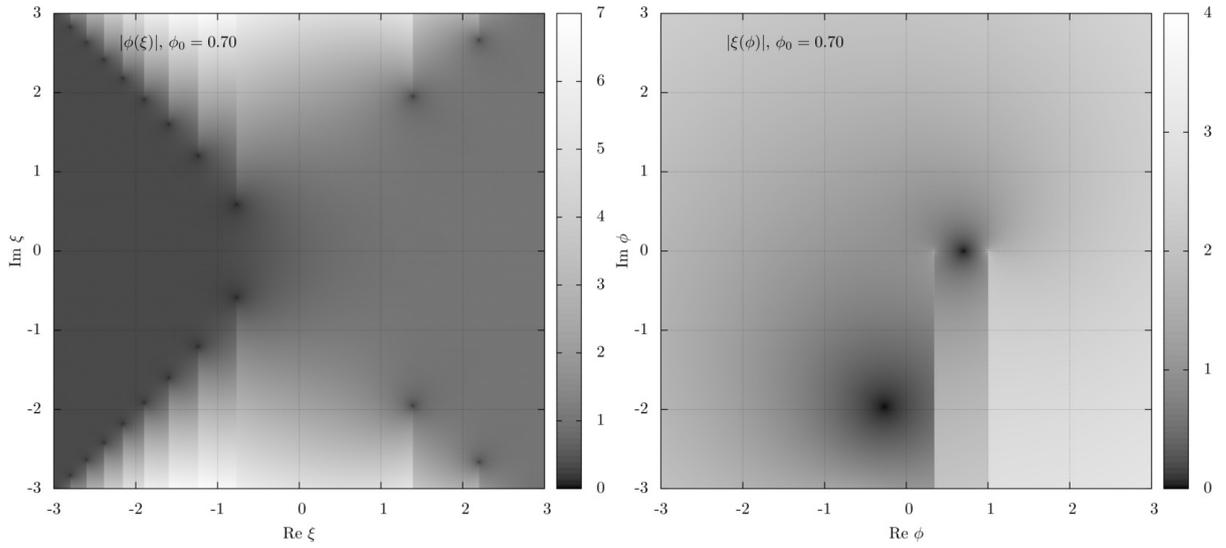


Figura H.15: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,7$.

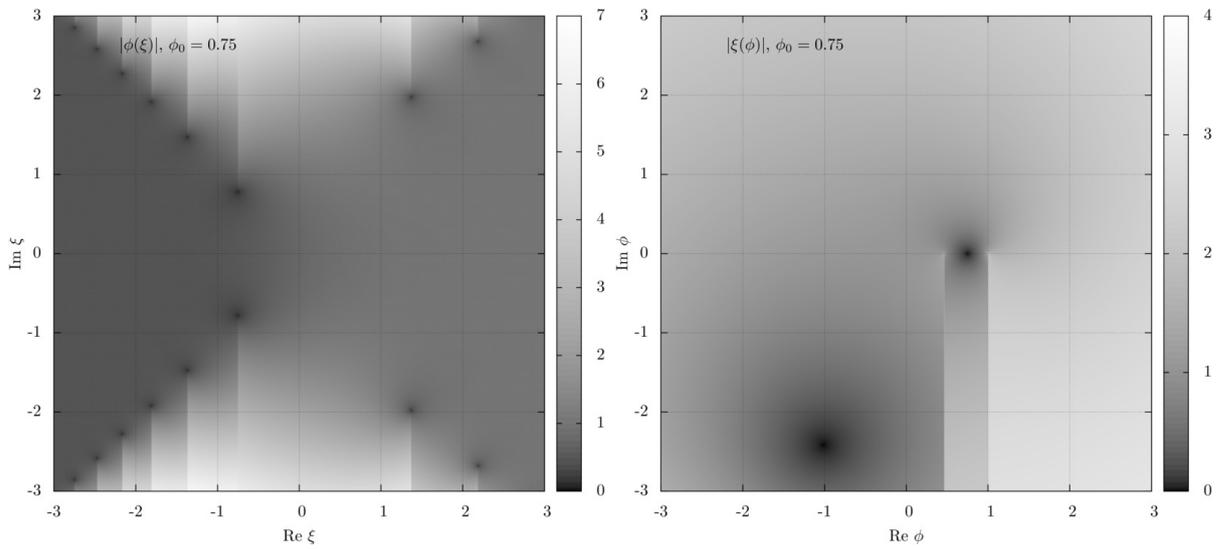


Figura H.16: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,75$.

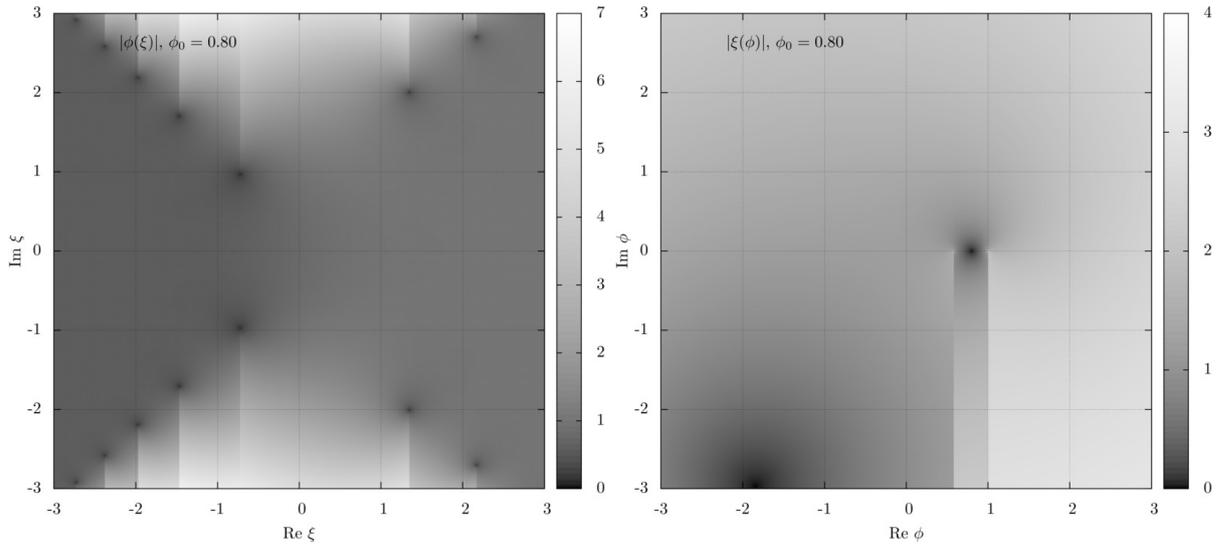


Figura H.17: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,8$.

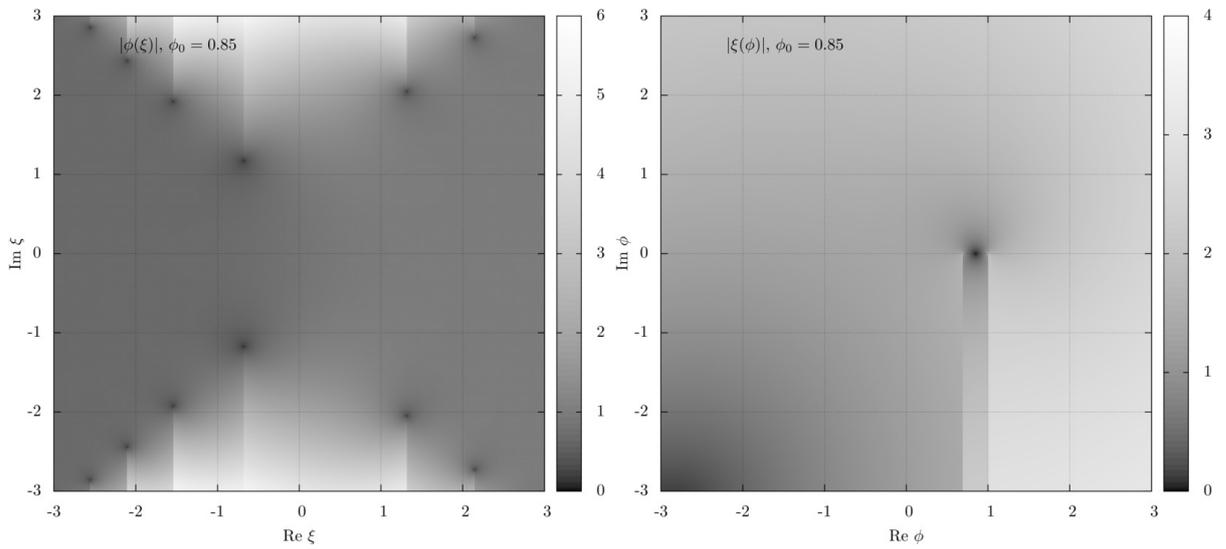


Figura H.18: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,85$.

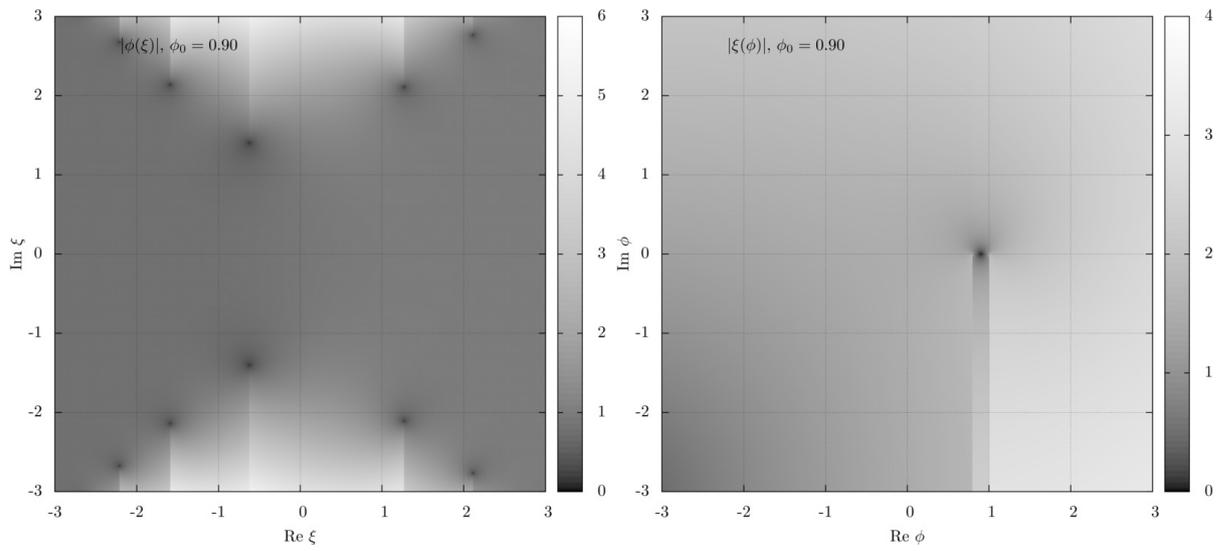


Figura H.19: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,9$.

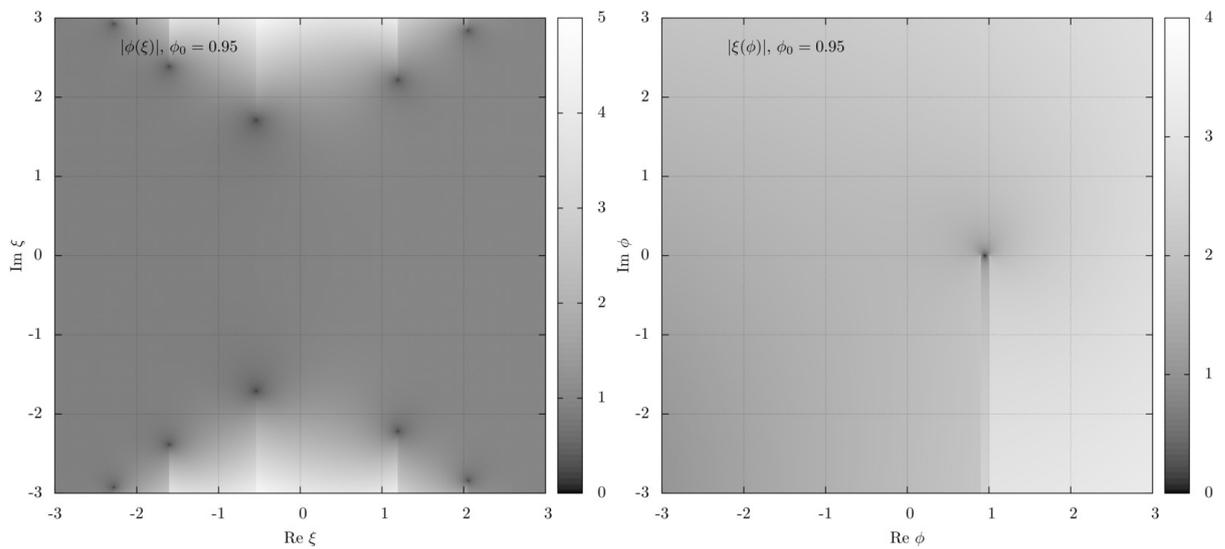


Figura H.20: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 0,95$.

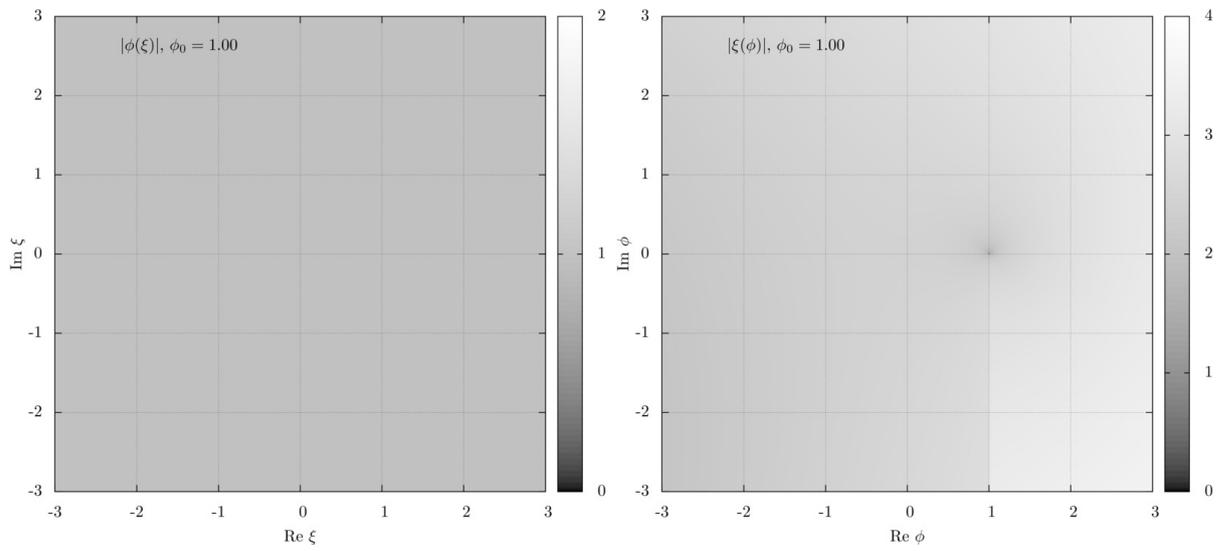


Figura H.21: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,0$.

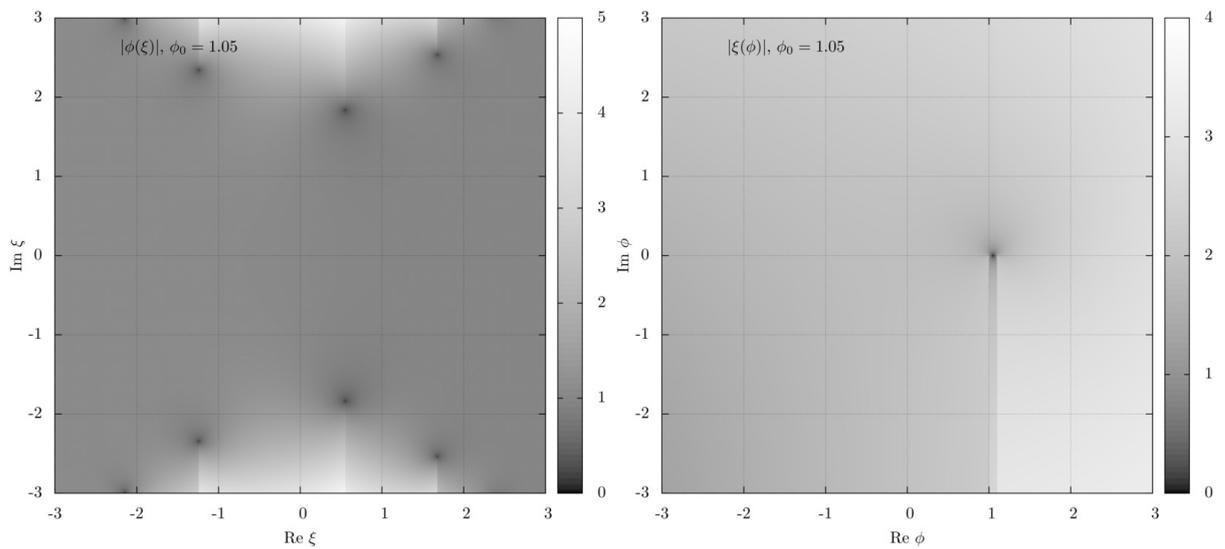


Figura H.22: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,05$.

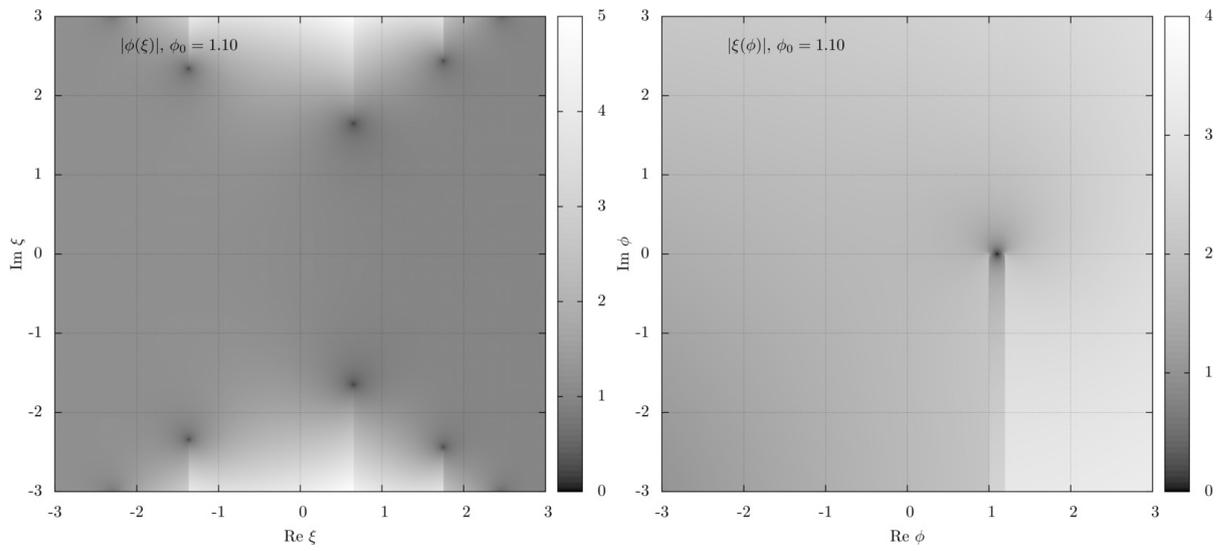


Figura H.23: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,1$.

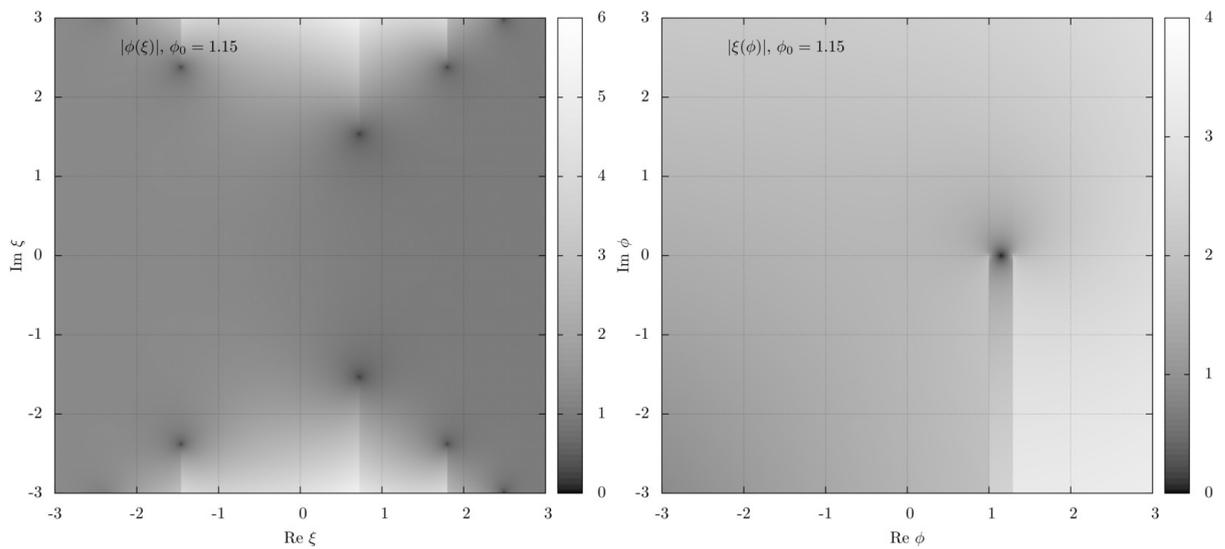


Figura H.24: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,15$.

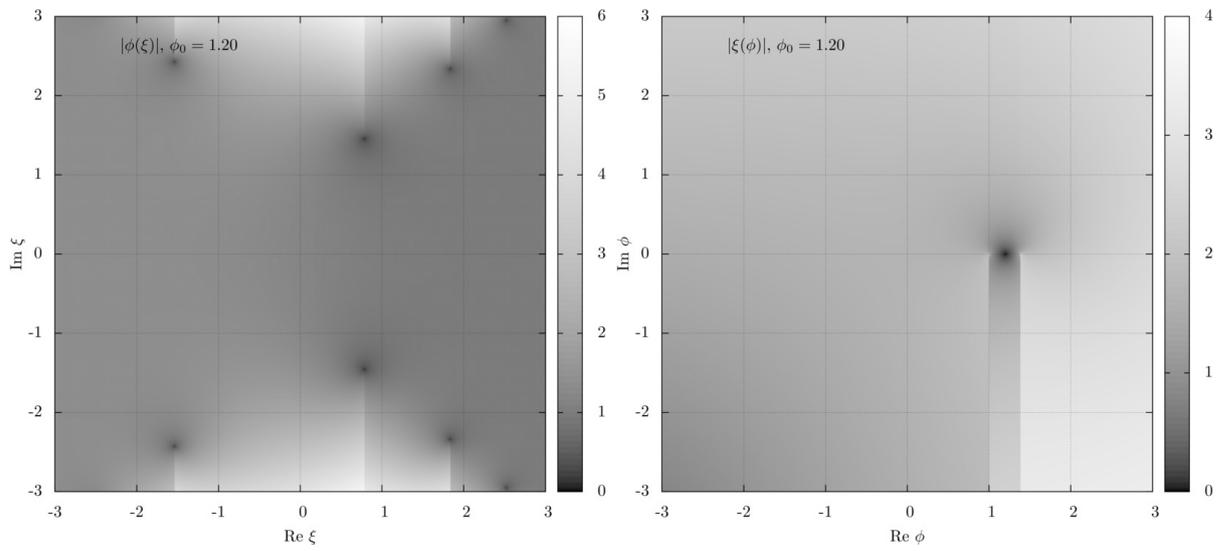


Figura H.25: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,2$.

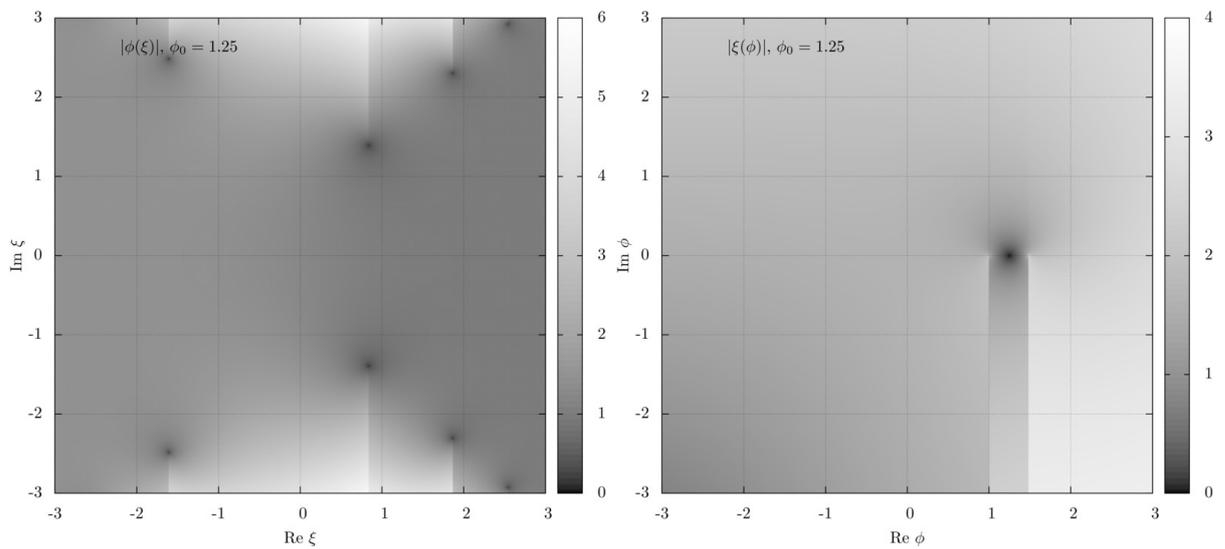


Figura H.26: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,25$.

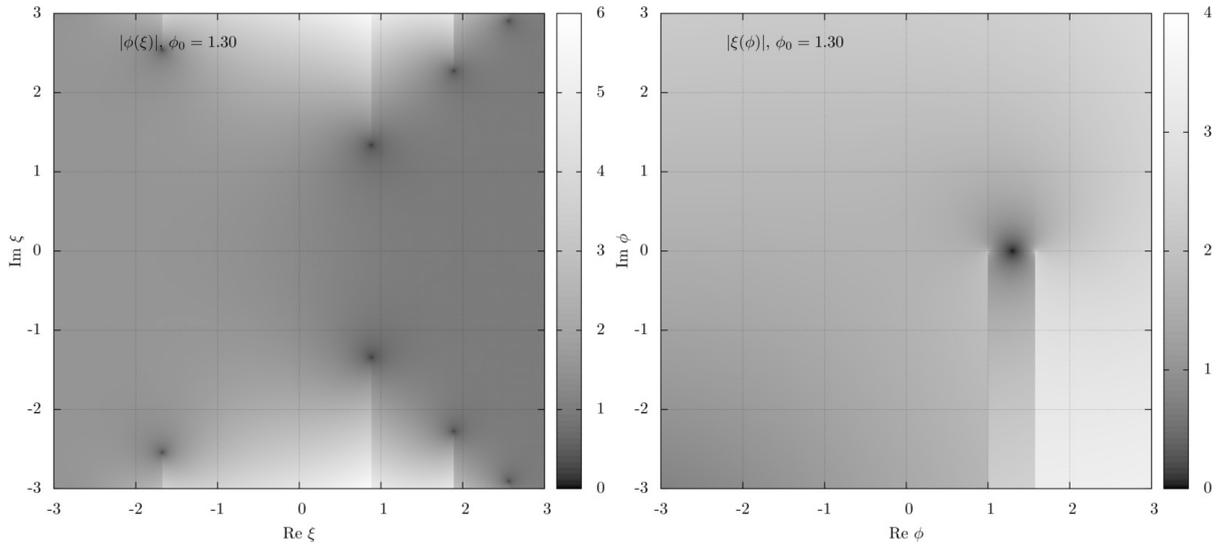


Figura H.27: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,3$.

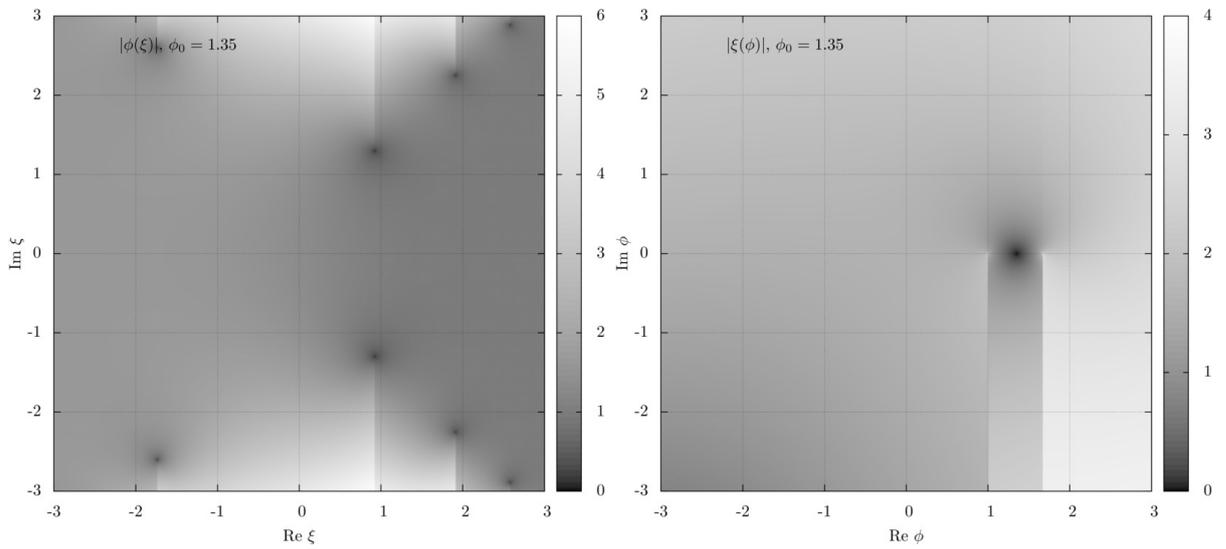


Figura H.28: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,35$.

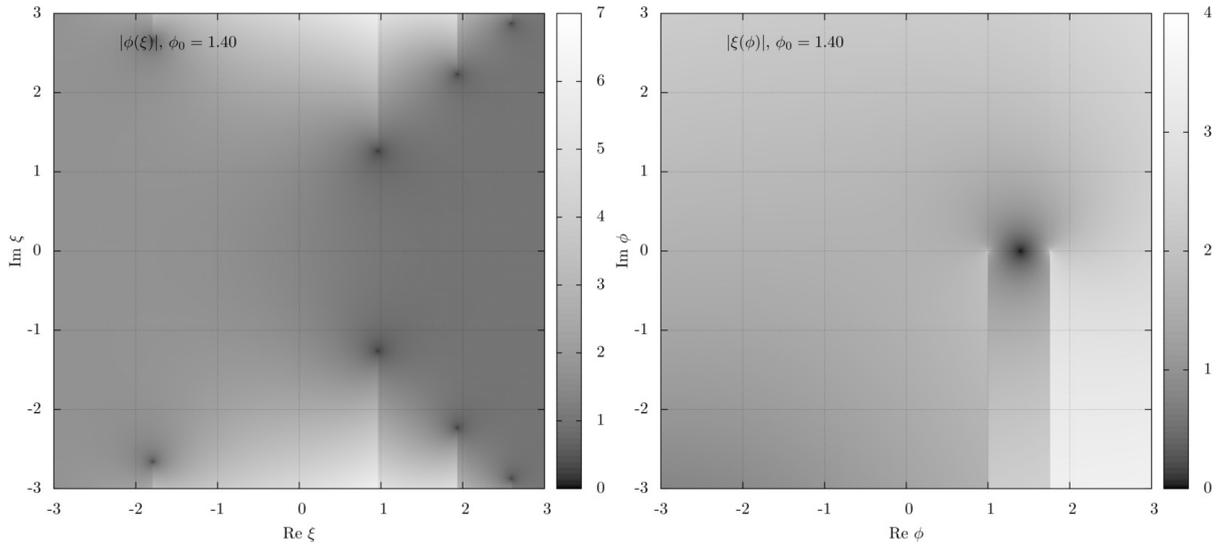


Figura H.29: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,4$.

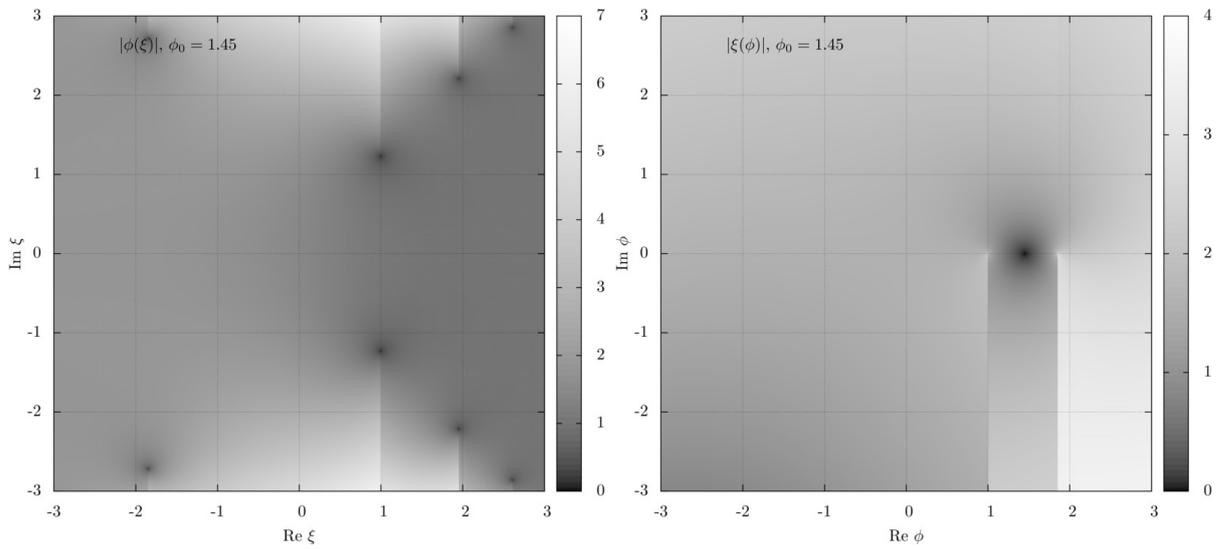


Figura H.30: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,45$.

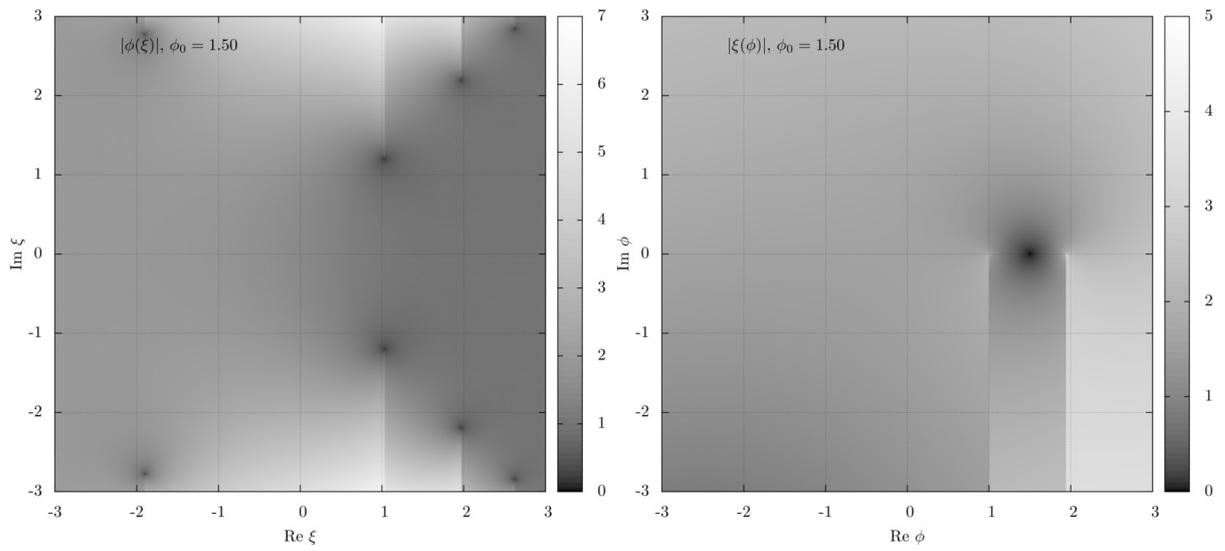


Figura H.31: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,5$.

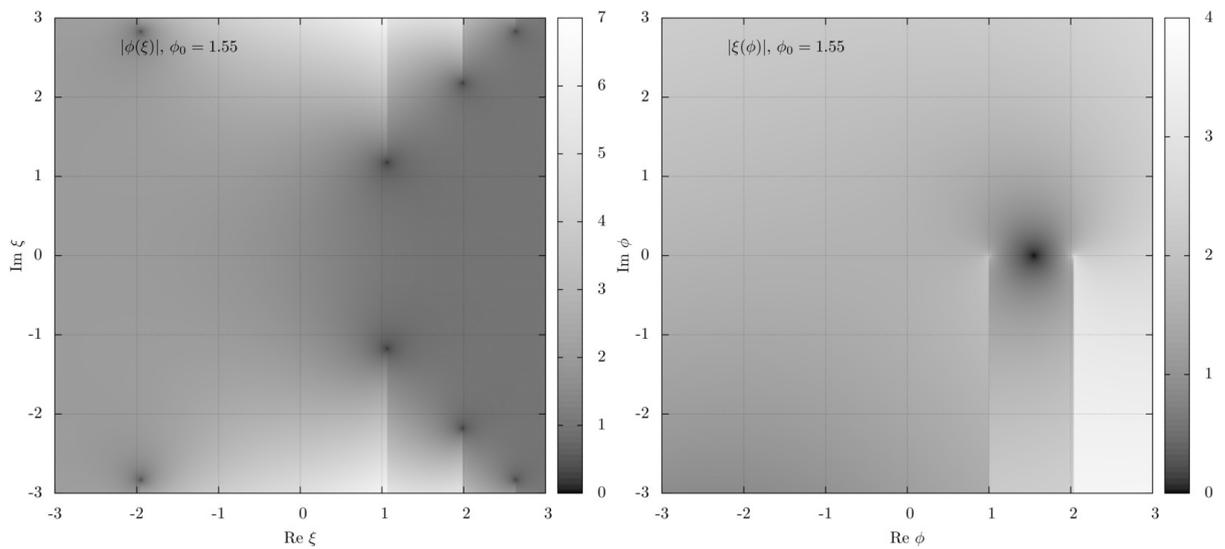


Figura H.32: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,55$.

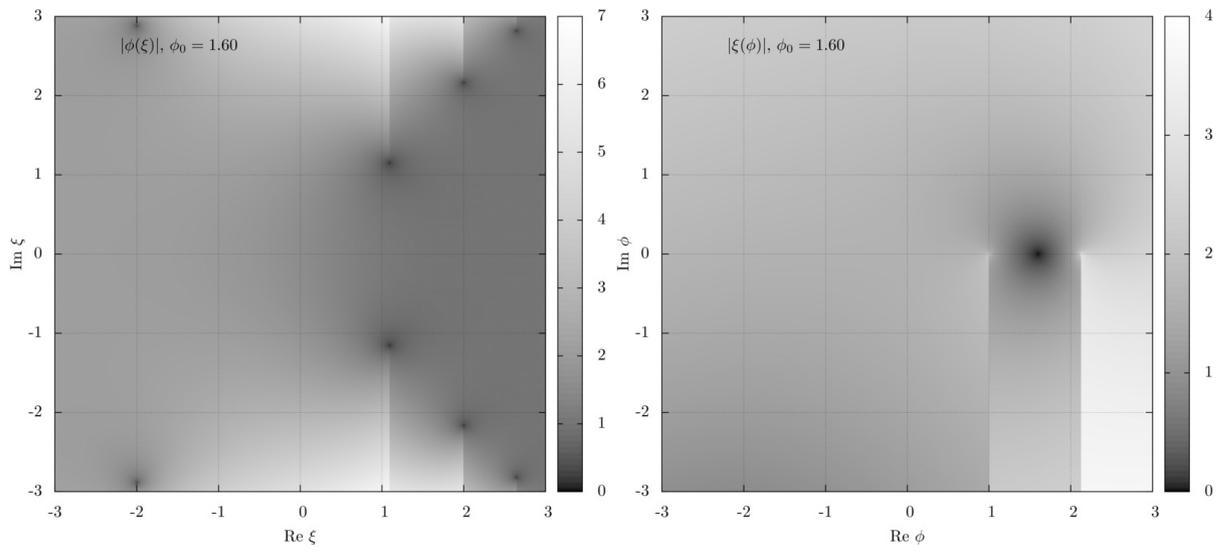


Figura H.33: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,6$.

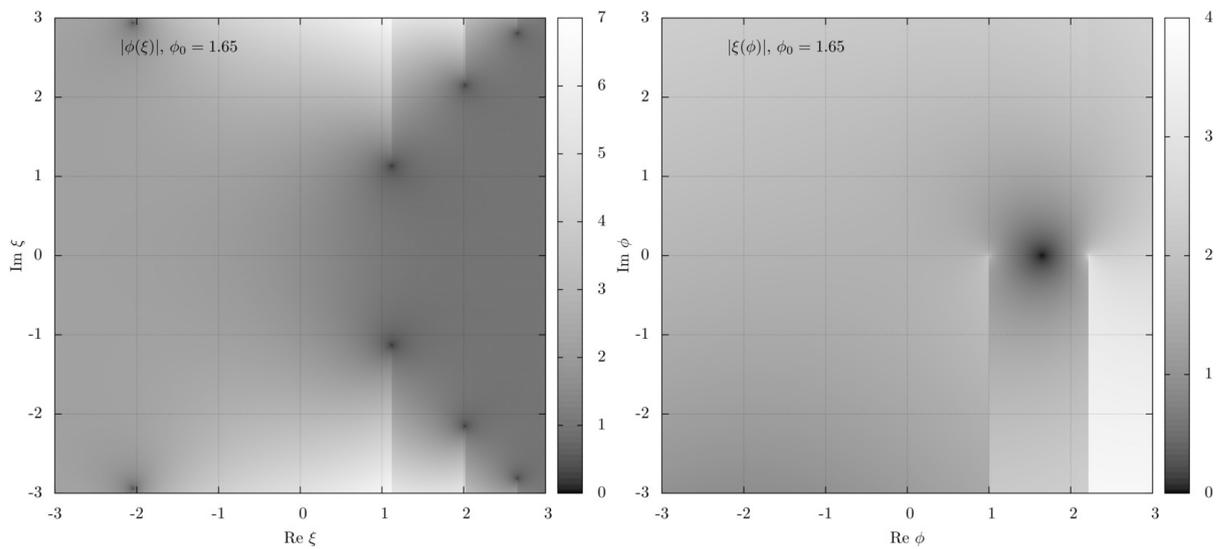


Figura H.34: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,65$.

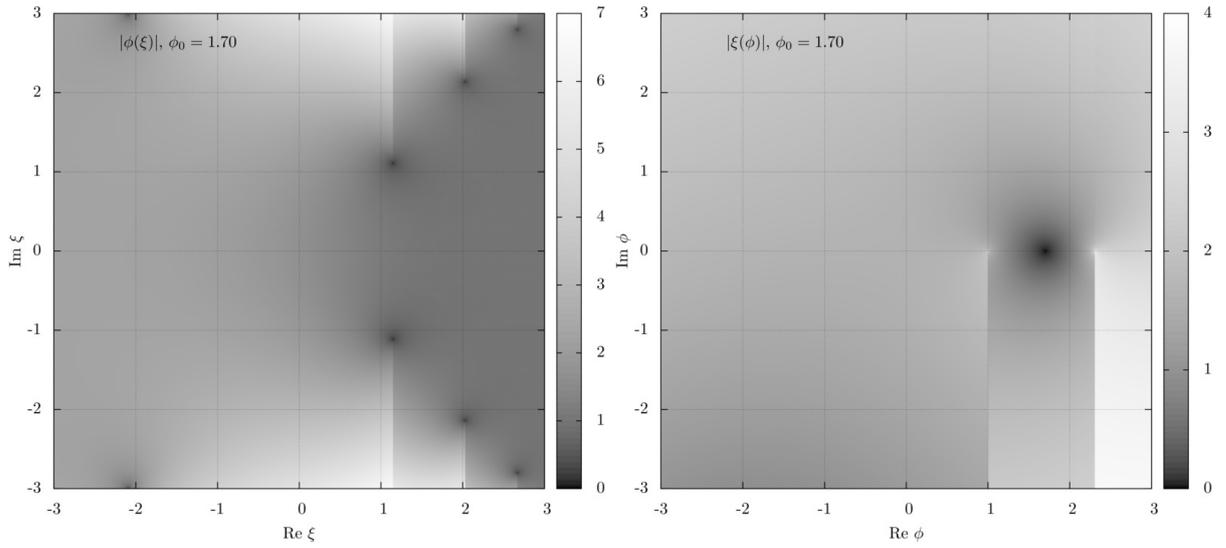


Figura H.35: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,7$.

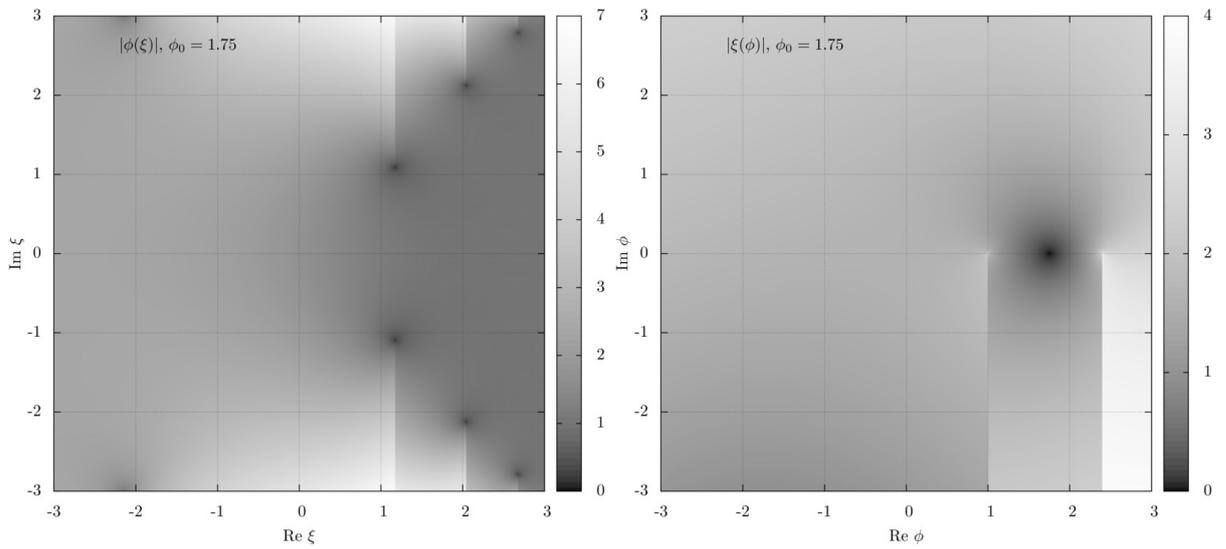


Figura H.36: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,75$.

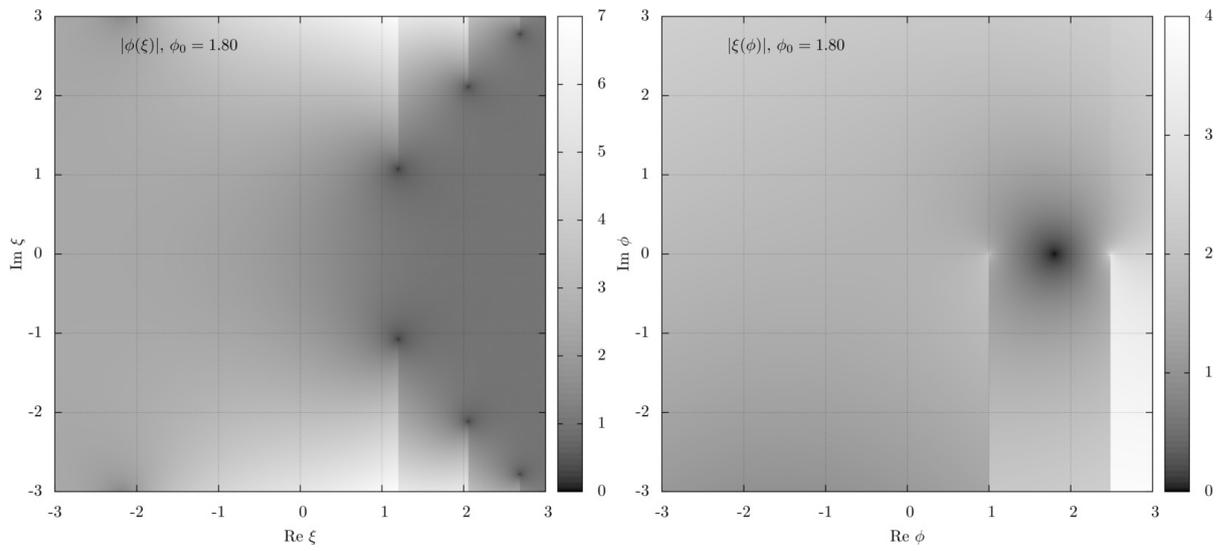


Figura H.37: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,8$.

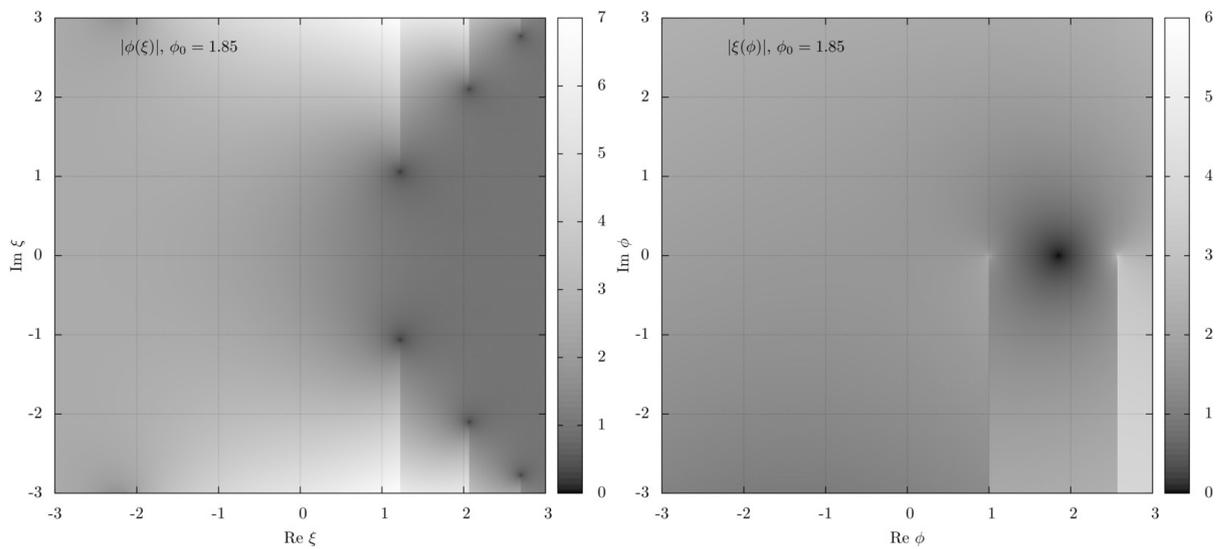


Figura H.38: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,85$.

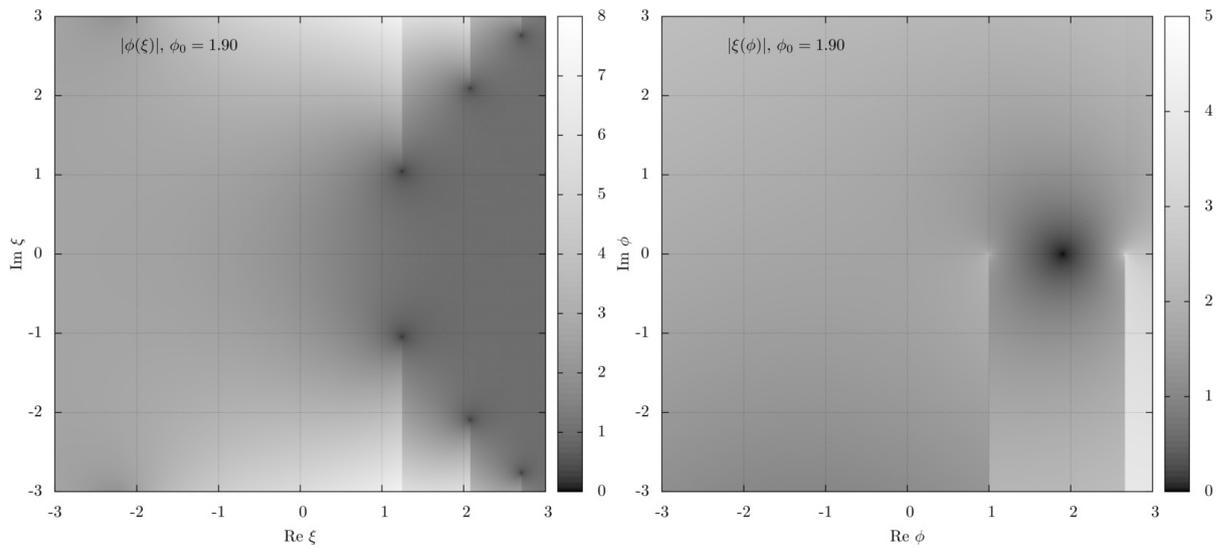


Figura H.39: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,9$.

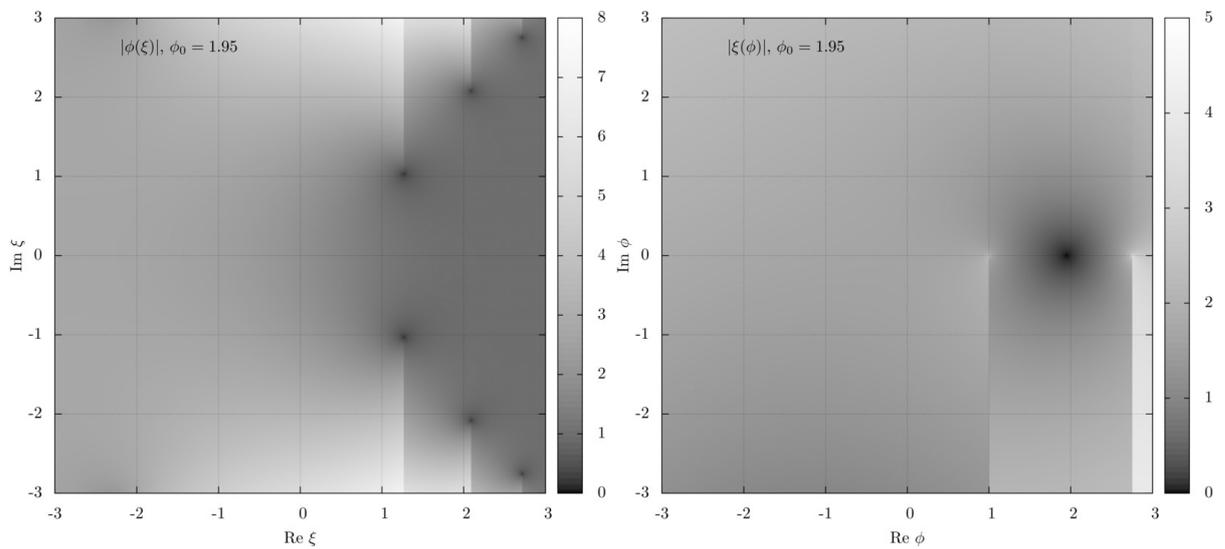


Figura H.40: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 1,95$.

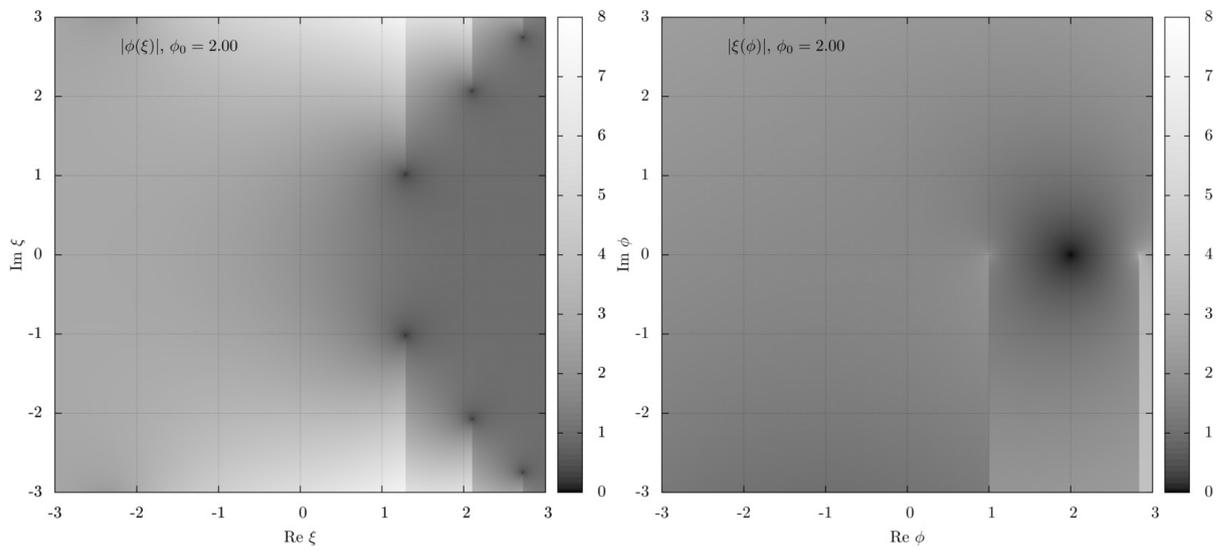


Figura H.41: $\phi(\xi)$ (esquerda) e $\xi(\phi)$ (direita) no plano complexo com condição inicial $\phi_0 = 2.0$.

Apêndice I

Alguns códigos em FORTRAN

Neste apêndice apresentamos dois códigos em FORTRAN 90 que foram usados no decorrer deste trabalho.

I.1 Resolução numérica na reta real

O programa principal junto com as sub-rotinas apresentadas nesta seção produzem os dados que geram a figura 4.1 para qualquer caso de $\phi_0 > 0$. Portanto o programa implementa a série desenvolvida no Capítulo 4 em vários pontos do domínio.

Listing I.1: Conteúdo da sub-rotina que calcula condições iniciais

```
!~
!~ SUBROTINAS QUE CALCULAM PSI_0 PARA PHI_0 PELA EXPRESSAO APROXIMADA
!~
!~
REAL (KIND=16) FUNCTION bc_neg(phi0)
IMPLICIT NONE
REAL(KIND=16) :: phi0, a,b,c,d,e
a                = 1.03307 _16
b                = 0.42704  _16
c                = 0.766737 _16
d                = 0.943232 _16
e                = 0.498194 _16
bc_neg = (1._16 - phi0**a)*(b + c*(phi0**d))**e
RETURN
```

```

END FUNCTION bc_neg

REAL (KIND=16) FUNCTION bc_pos(phi0)
!~
!~
IMPLICIT NONE
REAL(KIND=16) :: a,b,c,d,e,f,g,phi0,psi00
a   = 0.7335420_16
b   = 0.9992700_16
c   = 0.9838109_16
d   = 2.9478507_16
e   = 0.1864231_16
f   = 0.9675153_16
g   = 0.9341123_16
psi00 = 0.66411467243039259787436011867785_16
bc_pos = (((psi00**d) + a*(phi0**b))**((1._16/d)))*(1._16 - phi0**c)*&
((1._16 + f*(phi0**g))**e)
RETURN
END FUNCTION bc_pos

```

Listing I.2: Conteúdo da sub-rotina que contém os somatórios

```

!~
!~ AUTOR: TOMAS L. CHOR
!~
SUBROUTINE phi_sum(xi,Ntot,a,ponto,xia)
!
!      CALCULA PHI(XI) BASEADA NA SERIE GERAL
!-----
!
IMPLICIT NONE
INTEGER :: Ntot, i
REAL(KIND=16) :: xi, ponto, a(0:Ntot),xia

ponto = 0._16
DO i=Ntot,0,-1
    IF (a(i) .ne. 0._16) THEN
        ponto = ponto + a(i)*(xi-xia)**(real(i,16)/2._16)
    ENDIF
END DO

RETURN
END SUBROUTINE

SUBROUTINE psi_sum(xi,Ntot,a,ponto,xia)
!
!      CALCULA PSI(XI) BASEADA NA SERIE GERAL DE PHI
!-----

```

```

!
IMPLICIT NONE
INTEGER :: Ntot, n, k
REAL(KIND=16) :: xi, ponto, a(0:Ntot), xia, soma_k
ponto = 0._16
DO n=Ntot,0,-1
    soma_k = 0._16
    DO k=0,n+1
        soma_k = soma_k + a(k)*a(n-k+1)
    END DO
    IF (soma_k .ne. 0._16) THEN
        ponto = ponto + ((real(n,16)+1._16)/4._16)*(soma_k)&
            *(xi-xia)**((real(n,16)-1._16)/2._16)
    ENDIF
END DO
RETURN
END SUBROUTINE

```

```

SUBROUTINE ev_coef_taylor(a,Ntot,xia)
!
!     CALCULA A RELACAO DE RECORRENCIA PARA O CASO PHI_A \NE 0
!
!
IMPLICIT NONE
INTEGER :: Ntot,m,n,k
REAL(KIND=16) :: a(0:Ntot),soma,coefi0,coefi1,coefi2,coefi3,xia
DO n=0,Ntot-4
    soma=0._16
    DO k=1,n+3
        soma = soma + a(k)*a(n-k+4)
    ENDDO
    coefi1= ((real(n,16)+4._16)/2._16)
    coefi2= 4._16*real(n,16)*a(n)/(real(n,16)+2._16)
    coefi3= 4._16*xia*a(n+2)
    coefi0= -1._16/(a(0)*(real(n,16)+4._16))
    a(n+4) = coefi0*(coefi1*soma + coefi2 + coefi3)
ENDDO
END SUBROUTINE

```

```

SUBROUTINE ev_coef_frac(a,Ntot,xia)
!
!     CALCULA A RELACAO DE RECORRENCIA PARA O CASO PHI_A == 0
!
!
IMPLICIT NONE
INTEGER :: Ntot,m,n,k

```

```

REAL(KIND=16) :: a(0:Ntot),soma,coefi0,coefi1,coefi3,coefi2,xia

DO n=0,Ntot-3
    soma = 0._16
    DO k=2,n+2
        soma = soma + a(k)*a(n-k+4)
    END DO
    coefi1= ((real(n,16)+4._16)/2._16)
    coefi2= 4._16*real(n,16)*a(n)/(real(n,16)+2._16)
    coefi3= 4._16*xia*a(n+2)
    coefi0= -1._16/(a(1)*(real(n,16)+4._16))
    a(n+3) = coefi0*(coefi1*soma + coefi2 + coefi3)
END DO
END SUBROUTINE

```

Listing I.3: Conteúdo do programa principal

```

INCLUDE 'sub_general.f90'
INCLUDE 'bc.f90'
program phi_psi_series
!
!
! Autor: TOMAS L CHOR
! Data: 2013 08 30
!
! PROGRAMA CALCULA PHI(XI) E PSI(XI) A PARTIR DA SERIE GERAL COM UM
! NUMERO ARBITRARIO DE EXPANSOES EM SERIE
!
!-----
!
IMPLICIT NONE
!
!
REAL(KIND=16), ALLOCATABLE :: a(:),passos(:)
REAL(KIND=16) :: soma, pontopsi,pontophi, passo, xi&
, phia, psia, phi0, psi0,xia,xi_init,bc_neg,bc_pos
INTEGER :: i,Ntot,j,Nphi,Npassos
OPEN(unit=20,file='./phi_psi_series.txt')
phi0 = 0.6_16
IF (phi0 < 0._16) THEN
    PRINT*,'phi0 negativo'
    STOP
ELSE IF (phi0<1._16) THEN
    psi0 = bc_pos(phi0)
ELSE
    psi0 = bc_neg(phi0)
ENDIF
Ntot = 1000

```

```

Npassos=4
ALLOCATE(a(0:Ntot))
ALLOCATE(passos(Npassos))
passos(1)=.5_16
passos(2)=1.5_16
passos(3)=3.0_16
passos(4)=5.0_16 ! ESTE E O LIMITE FINAL DE XI

xi_init=0._16
xia = 0._16
phia = phi0
psia = psi0
IF (phia > 0._16) THEN
    a(0) = phia
    a(1) = 0._16
    a(2) = psia/a(0)
    a(3) = 0._16
    CALL ev_coef_taylor(a,Ntot,xia)
    print *,'Serie de taylor'
ELSE
    a(0) = 0._16
    a(1) = sqrt(2._16*psia)
    a(2) = -(4._16/3._16)*xia
    CALL ev_coef_frac(a,Ntot,xia)
    print *,'Serie fracional'
ENDIF

xi = xi_init
passo = 1.e-2_16
DO i=1,Npassos
    DO WHILE (xi<passos(i))
        CALL phi_sum(xi,Ntot,a,pontophi,xia)
        CALL psi_sum(xi,Ntot,a,pontopsi,xia)
        write(20,*)xi,pontophi,pontopsi
        print *,xi,pontophi,pontopsi
        xi=xi+passo
    END DO
    xia=xi
    phia=pontophi
    psia=pontopsi
    IF (phia > 0._16) THEN
        a(0) = phia
        a(1) = 0._16
        a(2) = psia/a(0)
        a(3) = 0._16
        CALL ev_coef_taylor(a,Ntot,xia)
        print *,'Serie de taylor'
    
```

```

ELSE
    a(0) = 0._16
    a(1) = sqrt(2._16*psia)
    a(2) = -(4._16/3._16)*xia
    CALL ev_coeff_frac(a,Ntot,xia)
    print *,'Serie fracional'
ENDIF
END DO
END PROGRAM

```

I.2 Resolução no plano complexo

O programa principal junto com as sub-rotinas apresentadas nesta seção produzem os dados que geram a Figura 5.8. O programa, portanto, realiza integrações sucessivas no plano complexo de $|\xi(\phi)|$ até a origem por dois caminhos diferentes que dão por resultado a localização de dois conjuntos de singularidades diferentes na configuração $\phi(\xi)$. Este programa utiliza a sub-rotina bc.f90, apresentada na seção anterior.

Listing I.4: Conteúdo da sub-rotina que contém as derivadas usadas no RKCK

```

SUBROUTINE derivs(x,y,dydx)
! SUBROTINA COM AS DERIVADAS DO SISTEMA DE ODEs PARA A EQ. DE BOUSSINESQ
!
! y(1) = xi
! y(2) = psi
!
IMPLICIT NONE
INTEGER, PARAMETER :: n = 2
COMPLEX(KIND=8) :: x, y(n), dydx(n)
dydx(1) = x/y(2)
dydx(2) = -2._8*y(1)
RETURN
END SUBROUTINE derivs

```

Listing I.5: Conteúdo da sub-rotina que contém o método RKCK

```

SUBROUTINE rkck(y,dydx,n,x,h,yout,yerr,derivs)
INTEGER :: n,NMAX
COMPLEX(KIND=8) :: h,x,dydx(n),y(n),yerr(n),yout(n)
EXTERNAL derivs
PARAMETER (NMAX=50)
!USES derivs

```

```

INTEGER :: i
COMPLEX (KIND=8) :: ak2(NMAX), ak3(NMAX), ak4(NMAX), ak5(NMAX), ak6(NMAX), &
&ytemp(NMAX), A2, A3, A4, A5, A6, B21, B31, B32, B41, B42, B43, B51, B52, B53, &
&B54, B61, B62, B63, B64, B65, C1, C3, C4, C6, DC1, DC3, DC4, DC5, DC6
PARAMETER (A2=.2, A3=.3, A4=.6, A5=1., A6=.875, B21=.2, B31=3./40., &
&B32=9./40., B41=.3, B42=-.9, B43=1.2, B51=-11./54., B52=2.5, &
&B53=-70./27., B54=35./27., B61=1631./55296., B62=175./512., &
&B63=575./13824., B64=44275./110592., B65=253./4096., C1=37./378., &
&C3=250./621., C4=125./594., C6=512./1771., DC1=C1-2825./27648., &
&DC3=C3-18575./48384., DC4=C4-13525./55296., DC5=-277./14336., &
&DC6=C6-.25)
do i=1,n
  ytemp(i)=y(i)+B21*h*dydx(i)
enddo
call derivs(x+A2*h,ytemp,ak2)
do i=1,n
  ytemp(i)=y(i)+h*(B31*dydx(i)+B32*ak2(i))
enddo
call derivs(x+A3*h,ytemp,ak3)
do i=1,n
  ytemp(i)=y(i)+h*(B41*dydx(i)+B42*ak2(i)+B43*ak3(i))
enddo
call derivs(x+A4*h,ytemp,ak4)
do i=1,n
  ytemp(i)=y(i)+h*(B51*dydx(i)+B52*ak2(i)+B53*ak3(i)+B54*ak4(i))
enddo
call derivs(x+A5*h,ytemp,ak5)
do i=1,n
  ytemp(i)=y(i)+h*(B61*dydx(i)+B62*ak2(i)+B63*ak3(i)+B64*ak4(i)+B65*ak5(i))
enddo
call derivs(x+A6*h,ytemp,ak6)
do i=1,n
  yout(i)=y(i)+h*(C1*dydx(i)+C3*ak3(i)+C4*ak4(i)+C6*ak6(i))
enddo
do i=1,n
  yerr(i)=h*(DC1*dydx(i)+DC3*ak3(i)+DC4*ak4(i)+DC5*ak5(i)+DC6*ak6(i))
enddo
return
END

```

Listing I.6: Conteúdo da sub-rotina que contém o controle de passo para o método RKCK

```

SUBROUTINE rkqs(y, dydx, n, x, htry, eps, yscal, hdid, hnext, derivs, yerr)
INTEGER :: n, NMAX
REAL(kind=8) :: eps, yscal(n)
COMPLEX(kind=8) :: hdid, hnext, htry, x, dydx(n), y(n)
EXTERNAL derivs
PARAMETER (NMAX=50)

```

```

!USES derivs,rkck
INTEGER i
COMPLEX(kind=8) :: h,htemp,yerr(n),ytemp(NMAX),xnew
REAL(kind=8) :: errmax,SAFETY,PGROW,PSHRNK,ERRCON
PARAMETER (SAFETY=0.9_16,PGROW=-.2_16,PSHRNK=-.25_16,ERRCON=1.89e-4_16)
h=htry
do while (.TRUE.)
  call rkck(y,dydx,n,x,h,ytemp,yerr,derivs)
  errmax=0.
  do i=1,n
    errmax=max(errmax,abs(abs(yerr(i))/yscal(i)))
  enddo
  errmax=errmax/eps
  if(errmax.gt.1.) then
    htemp=SAFETY*h*(errmax**PSHRNK)
    h=htemp
    xnew=x+h
    if(xnew.eq.x) then
      write(*,*) 'stepsize underflow in rkqs'
      read(*,*)
    endif
    cycle
  else
    if(errmax.gt.ERRCON) then
      hnext=SAFETY*h*(errmax**PGROW)
    else
      hnext=5._16*h
    endif
    hdid=h
    x=x+h
    do i=1,n
      y(i)=ytemp(i)
    enddo
    return
    exit
  endif
enddo
END

```

Listing I.7: Conteúdo da sub-rotina que contém os caminhos no plano complexo

```

!~
!~ SUB_PATHS.F90
!~ SUB-ROTINAS COM CAMINHOS DE INTEGRACAO PRE-DEFINIDOS
!~ AUTOR: TOMAS L. CHOR
!~
SUBROUTINE triangle_baixo(x,y,toterr,delta_im,xi02,n,eps,yscal)
!~

```

```

!~
IMPLICIT NONE
INTEGER :: n
COMPLEX(KIND=8) :: x, y(n), xi02, yout(n), dydx(n), h, yerr(n), &
hdid, hnext, htry
REAL(KIND=8) :: delta_im, toterr(n), eps, yscal(n), scala

!~ DEFINITION OF THE PATH DOWNWARDS
scala = 1.e-3_8
htry=cmplx(0.0_16, -scala)
DO WHILE (abs(imagpart(x)) < delta_im)
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    htry=hnext
END DO

!~ PATH TOWARDS THE ORIGIN
htry = -scala*x
DO WHILE (realpart(x)>0._8)
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    CALL rkck(y,dydx,n,x,h,yout,yerr,derivs)
    htry=hnext
END DO
h = - x
CALL rkck(y,dydx,n,x,h,yout,yerr,derivs)
x=x+h
y=yout
toterr = toterr + abs(yerr)
xi02 = y(1)
END SUBROUTINE

SUBROUTINE around_AH(x,y,toterr,xi11,n,center,eps,yscal)
!~
!~ (PHIO + 0 J) -> (PHIO - DELTA J ) -> (2-PHIO - DELTA J) ->
!~ (2-PHIO + DELTA J) -> (PHIO + DELTA J) -> (0 + 0 J)
!~
IMPLICIT NONE
INTEGER :: n
COMPLEX(KIND=8) :: x, y(n), xi11, dydx(n), yerr(n), yout(n), hdid, &
hnext, htry, h, center, pontoinit
REAL(KIND=8) :: delta, toterr(n), eps, yscal(n)
dydx = 0._8
yerr = 0._8

```

```

delta= .1_8
pontoinit=x
!~
!~ MARCHA P BAIXO
!~
htry=cplx(0._8,-1.e-4_8)
DO WHILE (imagpart(x)>imagpart(center) - delta)
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    htry=hnext
END DO
!~
!~ MARCHA P DIREITA
!~
htry=cplx(1.e-4_8,0._8)
DO WHILE (realpart(x)<realpart(center) + delta)
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    htry=hnext
END DO
!~
!~ MARCHA P CIMA
!~
htry=cplx(0._8,1.e-4_8)
DO WHILE (imagpart(x)<imagpart(center) + delta)
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    htry=hnext
END DO
!~
!~ MARCHA P ESQUERDA
!~
htry=cplx(-1.e-4_8,0._8)
DO WHILE (realpart(x)>realpart(pontoinit))
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    htry=hnext
END DO
!~
!~ MARCHA P ORIGEM
!~
htry=-1.e-3_8*x

```

```

DO WHILE (imagpart(x)>0._8)
    CALL derivs(x,y,dydx)
    CALL rkqs(y,dydx,n,x,htry,eps,yscal,hdid,hnext,derivs,yerr)
    toterr = toterr + abs(yerr)
    htry=hnext
END DO
h=-x
CALL rkck(y,dydx,n,x,h,yout,yerr,derivs)
x=x+h
y=yout
toterr = toterr + abs(yerr)
xi11=y(1)
END SUBROUTINE

```

Listing I.8: Conteúdo do programa principal

```

INCLUDE 'derivs.f90'
INCLUDE 'rkck.f90'
INCLUDE 'rkqs.f90'
INCLUDE 'bc.f90'
INCLUDE 'sub_paths.f90'
PROGRAM singularities
!
!
! PROGRAMA FEITO PARA ENCONTRAR SINGs. DA FUNCAO DE BOUSSINESQ
! AUTOR: TOMAS CHOR
! DATA: 2013 08 29
!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
IMPLICIT NONE
INTEGER, PARAMETER :: n = 2
COMPLEX(KIND=8) :: xi11,xi12,xi01,xi02,center,y(n),dydx(n),x,yerr(n),&
yout(n),ponto1,toterr_int(n),hdid,hnext,htry,h
REAL(KIND=8) :: scala,phi0,psi0,eps,yscal(n),toterr(n),delta_im,&
deltaphi0,phi0init,phi0final,bc_neg,bc_pos
INTEGER :: CONT,i
CHARACTER(len=700) :: SCRIPT
OPEN(unit=20,file='./singularities.txt',action='write')
!~ START DE VARIAVEIS
yout=complex(0.0_8,0.0_8)
toterr=complex(0.0_8,0.0_8)
dydx=cplx(0._8,0._8)
!~
!~ VARIAVEIS GLOBAIS
!~
center = cplx(1._8,0._8)
yscal(1)=1.0_8
yscal(2)=0.5_8

```

```

eps=1.e-10_8
deltaphi0 = 0.001_8
phi0init=0._8
scala = 1.e-4_8
phi0=phi0init
DO WHILE (phi0<1._8)
    psi0 = bc_pos(phi0)
    !~ CONDICOOES INICIAIS DO PROBLEMA
    x = cmplx(phi0,0.0_8)
    y(1) = cmplx(0.0_8,0.0_8)
    y(2) = cmplx(psi0,0.0_8)
    toterr = 0._8
    delta_im = 3._8*phi0/4._8
    CALL triangle_baixo(x,y,toterr,delta_im,xi01,n,eps,yscal)
    x = cmplx(phi0,0.0_8)
    y(1) = cmplx(0.0_8,0.0_8)
    y(2) = cmplx(psi0,0.0_8)
    toterr = 0._8
    CALL around_AH(x,y,toterr,xi11,n,center,eps,yscal)
    print *,'com phi_0 = ', phi0
    print *,xi01,xi02,toterr(1)
    WRITE(20,*) phi0,abs(xi01),abs(xi11),abs(xi12)
    phi0 = phi0 + deltaphi0
ENDDO
phi0=1._8 + deltaphi0
phi0final=3.0_8
DO WHILE (phi0<phi0final)
    psi0 = bc_neg(phi0)
    !~ CONDICOOES INICIAIS DO PROBLEMA
    x = cmplx(phi0,0.0_8)
    y(1) = cmplx(0.0_8,0.0_8)
    y(2) = cmplx(psi0,0.0_8)
    toterr = 0._8
    delta_im = 3._8*phi0/4._8
    CALL triangle_baixo(x,y,toterr,delta_im,xi01,n,eps,yscal)
    x = cmplx(phi0,0.0_8)
    y(1) = cmplx(0.0_8,0.0_8)
    y(2) = cmplx(psi0,0.0_8)
    toterr = 0._8
    CALL triangle_cima(x,y,toterr,delta_im,xi02,n,eps,yscal)
    print *,'com phi_0 = ', phi0
    print *,xi01,xi02,toterr(1)
    WRITE(20,*) phi0,abs(xi01)
    phi0 = phi0 + deltaphi0
ENDDO
END PROGRAM

```

Referências Bibliográficas

- Allan, F. (1997). Similarity solutions of a boundary layer problem over moving surfaces. *Applied Mathematics Letters*, 10(2):81 – 85.
- Barenblatt, G. I. (1952). On Some Unsteady Fluid and Gas Motions in a Porous Medium. *J. Appl. Math. Mech.*, 16(7):752–729.
- Basak, P. e Murty, V. (1977). Nonlinear Diffusion Applied to Groundwater Contamination Problems. *J. of Hydrol.*, 35(3-4):357–363.
- Basak, P. e Murty, V. (1978). Pollution of Groundwater Through Non-Linear Diffusion. *J. of Hydrol.*, 38(3-4):243–247.
- Basak, P. e Murty, V. (1981). Groundwater Quality Improvement Through Non-Linear Diffusion. *J. of Hydrol.*, 53(1-2):151–159.
- Bender, C. M. e Orszag, S. A. (1978). *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*. Springer.
- Blasius, H. (1908). The Boundary Layers in Fluids with Little Friction. *Z. Math. Phys.*, 56:1–37.
- Boussinesq, J. (1903). Sur le débit, en temps de sécheresse, d’une source alimentée par une nappe d’eaux d’infiltration. *C. R. Hebd. Seanc. Acad. Sci. Paris*, 23(1):252–260.
- Boussinesq, J. (1904). Recherches théoriques sur l’écoulement des nappes d’eau infiltrées dans le sol et sur le débit des sources. *J. Math. Pures Appl.*, 10:5–78. 5me Sér.

- Boyd, J. P. (1997). Pade approximant algorithm for solving nonlinear ordinary differential equation boundary value problems on an unbounded domain. *Computers in Physics*, 11(3):299–303.
- Boyd, J. P. (1999). The Blasius function in the complex plane. *Exp. Math.*, 8(4).
- Boyd, J. P. (2008). The Blasius Function: Computations Before Computers, the Value of Tricks, Undergraduate Projects, and Open Research Problems. *SIAM Rev.*, 50(4).
- Brutsaert, W. (2005). *Hydrology: An Introduction*. Cambridge University Press.
- Brutsaert, W. e Lopez, J. P. (1998). Basin-scale geohydrologic drought flow features of riparian aquifers in the southern Great Plains. *Water Resour. Res.*, 34(2):233–240.
- Brutsaert, W. e Nieber, J. L. (1977). Regionalized Drought Flow Hydrographs From a Mature Glaciated Plateau. *Water Resour. Res.*, 13(3):637–643.
- Busenberg, S. e Travis, C. (1983). Epidemic Models With Spatial Spread Due to Population Migration. *J. Math. Biol.*, 16(2):181–198.
- Callegari, A. e Nachman, A. (1978). Some Singular, Nonlinear Differential Equations Arising in Boundary Layer Theory. *J. Math. Anal. Appl.*, 64(1):96–105.
- Callegari, A. J. e Friedman, M. B. (1968). An Analytical Solution of a Nonlinear, Singular Boundary Value Problem in the Theory of Viscous Fluids. *J. Math. Anal. Appl.*, 21(1):510–529.
- Chor, T., Dias, N. L., e de Zárata, A. R. (2013). An exact series and improved numerical and approximate solutions for the Boussinesq equation. *Water Resour. Res.*, 49(11):7380–7387.
- Crank, J. (1975). *The Mathematics of Diffusion*. Clarendon Press, London, 2nd edition.
- Daly, E. e Porporato, A. (2004). A note on groundwater flow along a hillslope. *Water Resour. Res.*, 40(1).
- Fazio, R. (2008). Transformation methods for the Blasius problem and its recent variants. *World Congress on Eng. 2008, Vols I-II*.

- Greenberg, M. (1998). *Advanced Engineering Mathematics*. Prentice Hall, 2nd edition.
- Heaslet, M. A. e Alksne, A. (1961). Diffusion From a Fixed Surface With a Concentration-Dependent Coefficient. *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, 9(4):584–596.
- Henrici, P. (1974a). *Applied and Computational Complex Analysis*, volume 1. John Wiley & Sons.
- Henrici, P. (1974b). *Applied and Computational Complex Analysis*, volume 1. John Wiley & Sons.
- Hogarth, W. L. e Parlange, J. Y. (1999). Solving the Boussinesq equation using solutions of the Blasius equation. *Water Resour. Res.*, 35(3):885–887.
- Jeffrey, A. e Zwillinger, D. (2007). *Table of Integrals, Series, and Products*. Table of Integrals, Series, and Products Series. Elsevier Science.
- Kan, A. (2005). *Estimativa de Evapotranspiração Real com Base na Análise de Recessão dos Hidrogramas*. Tese de Doutorado, Programa de Pós Graduação em Métodos Numéricos, Universidade Federal do Paraná, Curitiba.
- Liu, P. e Wen, J. (1997). Nonlinear diffusive surface waves in porous media. *J. of Fluid Mech.*, 347:119–139.
- Luthin, J. (1973). *Drainage engineering*. R. E. Krieger Pub. Co., Huntington, NY 11743.
- Moutsopoulos, K. N. (2010). The Analytical Solution of the Boussinesq Equation for Flow Induced by a Step Change of the Water Table Elevation Revisited. *Transp. Porous Media*, 85(3):919–940.
- Parlange, J. Y., Braddock, R. D., e Sander, G. (1981). Analytical Approximations to the Solution of the Blasius Equation. *Acta Mech.*, 38(1-2):119–125.
- Parlange, J. Y., Hogarth, W. L., Govindaraju, R. S., Parlange, M. B., e Lockington, D. (2000). On an exact analytical solution of the Boussinesq equation. *Transp. Porous Media*, 39(3):339–345.

- Parlange, J. Y., Stagnitti, F., Heilig, A., Szilagyi, J., Parlange, M. B., Steenhuis, T. S., Hogarth, W. L., Barry, D. A., e Li, L. (2001). Sudden drawdown and drainage of a horizontal aquifer. *Water Resour. Res.*, 37(8):2097–2101.
- Polubarinova-Kochina, P. Y. (1962). *Theory of Ground Water Movement*. Books on Demand.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., e Flannery, B. P. (1993). *Numerical Recipes in FORTRAN; The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2nd edition.
- Punnis, B. (1956). Zur Differentialgleichung der Plattengrenzschicht von Blasius. *Archiv der Mathematik*, 7:165–171.
- Rupp, D. E. e Selker, J. S. (2006). On the use of the Boussinesq equation for interpreting recession hydrographs from sloping aquifers. *Water Resour. Res.*, 42(12).
- Sablani, S. S., Kacimov, A., Perret, J., Mujumdar, A. S., e Campo, A. (2005). Non-iterative estimation of heat transfer coefficients using artificial neural network models. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 48:665–679.
- Song, Z. Y., Li, L., e Lockington, D. (2007). Note on Barenblatt power series solution to Boussinesq equation. *Appl. Math. Mech. – English Ed.*, 28(6):823–828.
- Steenhuis, T. S., Parlange, J.-Y., Sanford, W. E., Heilig, A., Stagnitti, F., e Walter, M. F. (1999). Can we distinguish Richards’ and Boussinesq’s equations for hillslopes?: The Coweeta experiment revisited. *Water Resour. Res.*, 35(2):589–593.
- Telyakovskiy, A. S., Braga, G. A., e Furtado, F. (2002). Approximate similarity solutions to the Boussinesq equation. *Advances in Water Resources*, 25(2).
- Tolikas, P. K. e Sidiropoulos, E. (1984). Nonlinear Diffusion With Linearly Varying Diffusivity. *J. of Hydrol.*, 71(1-2):181–190.
- Töpfer, K. (1912). Bemerkung zu dem Aufsatz von H. Blasius: Grenzschichten in Flüssigkeiten mit kleiner Reibung. *Z. Math. Phys.*, 60:397–398.

- Upadhyaya, A. e Chauhan, H. S. (1998). Solutions of Boussinesq equation in semiinfinite flow region. *Journal of Irrigation And Drainage Engineering-ASCE*, 124(5):265–270.
- Yeh, W. (1970). Nonsteady Flow to Surface Reservoir. *J. Hydraul. Div., Proc. ASCE*, Vol. 96(N° 3):609–618.