Uma aplicação de transformadas de Laplace ao problema de transporte de contaminantes em rios e canais

Nelson Luís Dias
Lemma/UFPR: nldias@ufpr.br; www.lemma.ufpr

6 de junho de 2010

O problema a seguir foi resolvido em O'Loughlin e Bowmer (1975): o texto a seguir é uma adaptação da solução por transformada de Laplace, e um detalhamento do cálculo da integral que dá a solução. O mesmo problema foi resolvido de forma diferente da utilizada aqui por Dias (2003).

Resolva

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U\frac{\partial c}{\partial x} - D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = -Kc, \tag{1}$$

onde $U > 0$ é uma velocidade de advecção, $D > 0$ é um coeficiente de difusão, e $K > 0$ é um coeficiente de decaimento de 1ª ordem. As condições inicial e de contorno são

$$c(x,0) = 0, \qquad x \geq 0, \tag{2}$$

$$c(0,t) = c_0, \qquad t > 0, \tag{3}$$

$$\lim_{x\to\infty} c(x,t) = 0, \qquad t > 0. \tag{4}$$

A transformada de Laplace de (1) é

$$s\overline{c} - c(x,0) + U\frac{d\overline{c}}{dx} - D\frac{d^2\overline{c}}{dx^2} = -K\overline{c},$$

$$\frac{d^2\overline{c}}{dx^2} - \frac{U}{D}\frac{d\overline{c}}{dx} - \frac{(s+K)\overline{c}}{D} = 0. \tag{5}$$

Esta é uma equação diferencial ordinária homogênea, com coeficientes constantes; a equação característica é

$$\lambda^2 - \frac{U}{D}\lambda - \frac{(s+K)}{D} = 0, \tag{6}$$

donde

$$\lambda_1 = \frac{U}{2D} + \frac{1}{2}\left[\left(\frac{U}{D}\right)^2 + \frac{4(s+K)}{D}\right]^{1/2} > 0, \tag{7}$$

$$\lambda_2 = \frac{U}{2D} - \frac{1}{2}\left[\left(\frac{U}{D}\right)^2 + \frac{4(s+K)}{D}\right]^{1/2} < 0. \tag{8}$$

A solução geral é

$$\overline{c}(x,s) = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x}, \tag{9}$$

onde tanto A, B quanto λ_1, λ_2 são em geral funções de s. A condição inicial (2) já foi utilizada na obtenção de (5); a condição (4) impõe que

$$\lim_{x\to\infty} \overline{c}(x,s) = \mathscr{L}\left\{\lim_{x\to\infty} c(x,t)\right\} = \int_0^\infty 0\, e^{-st}\, dt = 0; \tag{10}$$

como $\lambda_2 < 0$, $\lim_{x\to\infty} Be^{\lambda_2 x} = 0$ automaticamente; por outro lado, como $\lambda_1 > 0$, $\lim_{x\to\infty} Ae^{\lambda_1 x} \neq 0$ *a não ser que* $A = 0$. Portanto, a solução limita-se a

$$\overline{c}(x,s) = B\exp\left\{\frac{Ux}{2D} - \frac{x}{2}\left[\left(\frac{U}{D}\right)^2 + \frac{4(s+K)}{D}\right]^{1/2}\right\} \tag{11}$$

A constante B é obtida fazendo-se a transformada de Laplace de (3):

$$\begin{aligned}\overline{c}(0,s) &= \int_{t=0}^\infty c(0,t)e^{-st}\, dt\\ &= \int_{t=0}^\infty c_0 e^{-st}\, dt\\ &= \frac{c_0}{s} = B.\end{aligned} \tag{12}$$

O nosso resultado para a transformada de Laplace, obtido com uma relativa facilidade, é

$$\overline{c}(x,s) = \frac{c_0}{s}\exp\left\{\frac{Ux}{2D} - \frac{x}{2}\left[\left(\frac{U}{D}\right)^2 + \frac{4(s+K)}{D}\right]^{1/2}\right\} \tag{13}$$

Agora vamos manipular este resultado:

$$\begin{aligned}\overline{c}(x,s) &= \frac{c_0}{s}\exp\left[\frac{Ux}{2D} - \frac{2x}{2\sqrt{D}}\left(\frac{U^2}{4D} + s + K\right)^{1/2}\right]\\ \overline{c}(x,s) &= \exp\left(\frac{Ux}{2D}\right)\frac{c_0}{s}\exp\left[-\frac{x}{\sqrt{D}}\left(\frac{U^2}{4D} + s + K\right)^{1/2}\right]\end{aligned} \tag{14}$$

Uma rápida busca em uma tabela de transformadas de Laplace mostra que

$$\mathscr{L}^{-1}\left\{\exp(-b\sqrt{s})\right\} = \frac{b}{2\sqrt{\pi t^3}}\exp(-b^2/4t), \tag{15}$$

enquanto que o argumento da exponencial é

$$\exp\left(-b\sqrt{s+a^2}\right), \tag{16}$$

onde $a^2 = [U^2/(4D) + K]$, e $b = x/\sqrt{D}$. Noto então que

$$\begin{aligned}
\mathscr{L}\left\{e^{-a^2t}f(t)\right\} &= \int_{t=0}^{\infty} e^{-st}e^{-a^2t}f(t)\,dt \\
&= \int_{t=0}^{\infty} e^{-(s+a^2)t}f(t)\,dt \\
&= \overline{f}(s+a^2);
\end{aligned}$$

portanto:

$$\mathscr{L}^{-1}\left\{\overline{f}(s+a^2)\right\} = e^{-a^2t}f(t). \tag{17}$$

Segue-se que

$$\mathscr{L}^{-1}\left\{\exp(-b\sqrt{s+a^2})\right\} = \frac{b}{2\sqrt{\pi t^3}}\exp\left[-\left(a^2t + \frac{b^2}{4t}\right)\right]. \tag{18}$$

enquanto que

$$\mathscr{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s}\right\} = 1. \tag{19}$$

Portanto, posso usar o teorema da convolução para obter

$$c(x,t) = c_0 \exp\left(\frac{Ux}{2D}\right)\int_{\tau=0}^{t}\frac{b}{2\sqrt{\pi\tau^3}}\exp\left[-(a^2\tau + b^2/4\tau)\right]\,d\tau. \tag{20}$$

Para tentar resolver a integral, faço a substituição de variável

$$\tau = \frac{b^2}{4u^2} \;\Rightarrow\; \tau^{-3/2} = \left(\frac{2u}{b}\right)^3;\; d\tau = -\frac{b^2}{2}u^{-3}\,du.$$

A integral fica

$$\begin{aligned}
&\int_{u=\infty}^{\frac{b}{2\sqrt{t}}}\frac{b}{2\sqrt{\pi}}\frac{8u^3}{b^3}\exp\left[-\left(\left(\frac{ab}{2u}\right)^2 + u^2\right)\right]\left[-\frac{b^2}{2}u^{-3}\,du\right] \\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{b}{2\sqrt{t}}}^{\infty}\exp\left[-\left(\left(\frac{ab}{2u}\right)^2 + u^2\right)\right]\,du.
\end{aligned} \tag{21}$$

A técnica padrão em uma situação destas é "completar o quadrado":

$$\begin{aligned}
\exp\left[-\left(\left(\frac{ab}{2u} + u\right)^2\right)\right] &= \exp\left[-\left(\left(\frac{ab}{2u}\right)^2 + ab + u^2\right)\right] \\
&= \exp(-ab)\exp\left[-\left(\left(\frac{ab}{2u}\right)^2 + u^2\right)\right].
\end{aligned} \tag{22}$$

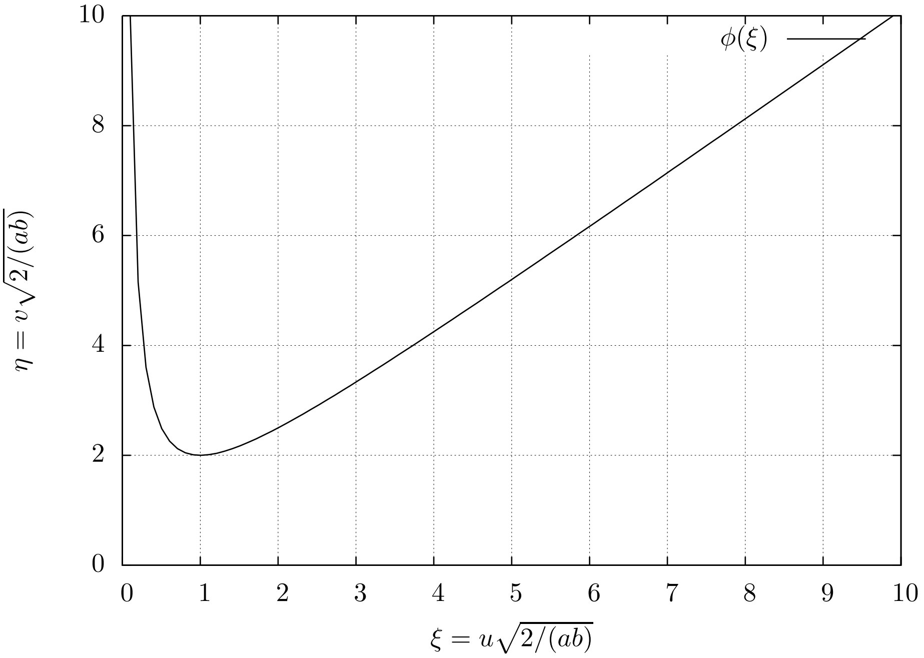

Figura 1: Os dois ramos da transformação $u(v)$.

O problema agora é calcular

$$I = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{ab} \int_{\frac{b}{2\sqrt{t}}}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{ab}{2u} + u\right)^2\right] du. \tag{23}$$

Faço então mais uma mudança de variável:

$$v = \frac{ab}{2u} + u, \tag{24}$$

que infelizmente não é monótona. A figura 1 mostra a função 24. O ponto de mínimo é (u_*, v_*), onde $u_* = \sqrt{ab/2}$, e $v_* = \sqrt{2ab}$. Os dois ramos da relação inversa $u = u(v)$ são

$$u = \frac{1}{2}\left[v - \sqrt{v^2 - 2ab}\right], \qquad u < u_*, \tag{25}$$

$$u = \frac{1}{2}\left[v + \sqrt{v^2 - 2ab}\right], \qquad u > u_*. \tag{26}$$

Portanto, a integral em (21) precisa ser calculada separadamente para os casos $u > u_*$ e $u < u_*$. Note que $u > u_*$ corresponde a

$$\frac{b}{2\sqrt{t}} > \sqrt{\frac{ab}{2}} \Rightarrow \frac{b^2}{4t} > \frac{ab}{2} \Rightarrow \frac{b}{2\sqrt{t}} > a\sqrt{t}. \tag{27}$$

O primeiro caso é aparentemente mais fácil, porque só depende do ramo "positivo":

$$
\begin{aligned}
I &= \frac{2e^{ab}}{\sqrt{\pi}} \int_{v_0}^{\infty} \exp(-v^2)\frac{1}{2}\left[1 + \frac{v}{\sqrt{v^2-2ab}}\right]\,dv \\
&= \frac{1}{2}\left[e^{-ab}\operatorname{erfc}\left(\sqrt{v_0^2-2ab}\right) + e^{ab}\operatorname{erfc}(v_0)\right], \\
&= \frac{1}{2}\left[e^{-ab}\operatorname{erfc}(\frac{b}{2\sqrt{t}} - a\sqrt{t}) + e^{ab}\operatorname{erfc}(\frac{b}{2\sqrt{t}} + a\sqrt{t})\right]. \qquad (28)
\end{aligned}
$$

No desenvolvimento acima, nós usamos $u_0 = b/(2\sqrt{t})$, e $v_0 = (ab)/(2u_0) + u_0$. A integral é facilmente calculada com `MAXIMA` (ou qualquer outra linguagem de processamento simbólico, ou manualmente):

```
(%i1) f : exp(a*b)/sqrt(%pi) * exp(-v^2)*(1 + v/sqrt(v^2-2*a*b)) ;
                                                        2
                              v                  a b - v
                      (---------------- + 1) %e
                               2
                       sqrt(v   - 2 a b)
(%o1)                 ---------------------------------
                                  sqrt(%pi)
(%i2) integrate(f,v,v0,inf);
Is  a b  positive, negative, or zero?

pos ;
Is  v0 - sqrt(2) sqrt(a b)  positive, negative, or zero?

pos ;
Is  v0 + sqrt(2) sqrt(a b)  positive, negative, or zero?

pos ;
          - a b            2                2 a b             2 a b
        %e      (erf(sqrt(v0   - 2 a b)) + %e      erf(v0) - %e      - 1)
(%o2) - ----------------------------------------------------------------
                                           2
(%i3) expand(%);
          - a b           2                a b              a b     - a b
        %e      erf(sqrt(v0   - 2 a b))   %e    erf(v0)   %e      %e
(%o3) - ----------------------------- - ------------- + ----- + -------
                      2                        2           2        2
```

No segundo caso, $u < u_*$, e precisamos dividir a integral em duas partes: uma com $u \in [u_0, u_*]$, e a outra com $u \in (u_*, \infty)$. No primeiro ramo, $u(v)$ é dado por (25), e no segundo, por (26):

$$
I = \frac{2e^{ab}}{\sqrt{\pi}} \int_{v_0}^{v_*} \exp(-v^2)\frac{1}{2}\left[1 - \frac{v}{\sqrt{v^2-2ab}}\right]\,dv + \frac{2e^{ab}}{\sqrt{\pi}} \int_{v_*}^{\infty} \exp(-v^2)\frac{1}{2}\left[1 + \frac{v}{\sqrt{v^2-2ab}}\right]\,dv. \qquad (29)
$$

Cada uma das duas integrais acima pode ser calculada com relativa facilidade (no meu caso, novamente com `MAXIMA`), resultando respectivamente em

$$
\frac{e^{-ab}}{2}\left[\operatorname{erf}\left(\sqrt{v_0^2-2ab}\right) - \operatorname{erf}\left(\sqrt{v_*^2-2ab}\right)\right] + \frac{e^{ab}}{2}\left[\operatorname{erf} v_* - \operatorname{erf} v_0\right],
$$

e

$$
\frac{e^{-ab}}{2}\left[1 - \operatorname{erf}\left(\sqrt{v_*^2-2ab}\right)\right] + \frac{e^{ab}}{2}\left[1 - \operatorname{erf} v_*\right].
$$

Reunindo estes resultados e usando $v_*^2 = 2ab$, $\operatorname{erf}(0) = 0$,

$$
\begin{aligned}
I &= \frac{1}{2}e^{-ab}\left[1 + \operatorname{erf}\left(\sqrt{v_0^2 - 2ab}\right)\right] + \frac{1}{2}e^{ab}\left[1 - \operatorname{erf}(v_0)\right] \\
&= \frac{1}{2}e^{-ab}\left[1 + \operatorname{erf}\left(a\sqrt{t} - \frac{b}{2\sqrt{t}}\right)\right] + \frac{1}{2}e^{ab}\left[1 - \operatorname{erf}(v_0)\right] \\
&= \frac{1}{2}e^{-ab}\left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{b}{2\sqrt{t}} - a\sqrt{t}\right)\right] + \frac{1}{2}e^{ab}\left[1 - \operatorname{erf}(v_0)\right] \\
&= \frac{1}{2}\left[e^{-ab}\operatorname{erfc}\left(\frac{b}{2\sqrt{t}} - a\sqrt{t}\right) + e^{ab}\operatorname{erfc}\left(\frac{b}{2\sqrt{t}} + a\sqrt{t}\right)\right]. \qquad (30)
\end{aligned}
$$

Repare que ambos os casos $u < u_*$ e $u > u_*$ levam à mesma solução em termos de t: os resultados 28 e 30 são idênticos. Para obter o resultado acima, nós usamos o fato de que erf é uma função ímpar.

Referências

Dias, N. L. (2003). Obtenção de uma solução analítica da equação de difusão-advecção com decaimento de 1ª ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, 8:181–188.

O'Loughlin, E. M. e Bowmer, K. H. (1975). Dilution and decay of aquatic herbicides in flowing channels. *J of Hydrology*, 26:217–235.