



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

**RECONSTRUÇÃO DE TERMO FONTE E CONDIÇÕES DE CONTORNO EM ÓPTICA
HIDROLÓGICA COM SÉRIES DE FOURIER**

por

Fábio Dall Cortivo

Dissertação de Mestrado
Mestre em Modelagem Computacional

Rio Grande, RS, 18 de fevereiro de 2009.

**Reconstrução de Termo Fonte e Condições de Contorno em Óptica Hidrológica com
Séries de Fourier**

por

Fábio Dall Cortivo

Dissertação de Mestrado submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, PPGMC, da Fundação Universidade Federal do Rio Grande, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Modelagem Computacional

Área de Concentração: Multidisciplinar

Orientador: Dr. Mario Rocha Retamoso

Banca de Avaliação:

Dr. Mario Rocha Retamoso

Orientador(a) / FURG / Rio Grande - RS

Dra. Nisia Krusche

Membro da Banca /FURG / Rio Grande - RS

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho

Convidado(a) / INPE / SJCampos - SP

Aluno: Fábio Dall Cortivo

Prof. Dra. Silvia Silva da Costa Botelho

Coordenadora do PPGMC

Rio Grande, 18 de fevereiro de 2009

“As equações são mais importantes para mim, porque a política é para o presente, mas uma equação é algo para a eternidade.”
(Albert Einstein)

“Nossas dádivas são traidoras e nos fazem perder o bem que poderíamos conquistar se não fosse o medo de tentar.” (William Shakespeare)

“A Mente que se abre a uma nova idéia jamais volta ao seu tamanho original.” (Albert Einstein)

Agradecimentos

Primeiramente a Deus, por permitir que eu exista.

Aos meus pais, Algemiro e Nilce, meu eterno muito obrigado por toda a vida de sacrifícios que tiveram, a fim de me proporcionarem todas as condições para eu chegar até aqui e a minha maninha, Cristiane, pelo incentivo, apoio e correções ortográficas sugeridas.

Ao meu orientador, Dr. Mario Rocha Retamoso, por orientar um cara teimoso que discutia determinados assuntos como se fosse doutor já, pelo incentivo desde o terceiro ano de graduação a estudar Problemas Inversos, Equação de Transporte, Ótica Hidrológica, etc. . . . , e além de tudo, um exemplo de dedicação e sabedoria a ser seguido, meu muito obrigado.

Ao Dr. Roberto Pinto Souto, pela paciência em suas valiosas explicações.

Ao meu amigo, que ousou chamar de irmão, Henrique Casagrande, pela paciência em escutar minhas explicações, sem muitas vezes entender nada.

Aos meus amigos(as) Fernanda Casagrande, Felipe Reis, Amanda Fehn, Lucas Rosinski, Léo Jaime Silva entre muitos outros, pelo incentivo e apoio.

Não poderia deixar de agradecer a todos aqueles que não acreditaram na minha vitória, pois isto me dava mais força nos momentos difíceis.

Resumo

RECONSTRUÇÃO DE TERMO FONTE E CONDIÇÕES DE CONTORNO EM ÓPTICA HIDROLÓGICA COM SÉRIES DE FOURIER

O objetivo deste trabalho é resolver um problema inverso em Transferência Radiativa, que consiste na reconstrução de condições de contorno e termo fonte em Óptica Hidrológica. O problema direto consiste em resolver a Equação de Transferência Radiativa pelo Método das Ordenadas Discretas (S_N) e o sistema de equações diferenciais ordinárias com coeficientes constantes resultante é resolvido por diagonalização da matriz de coeficientes. As medidas radiométricas para a inversão foram obtidas sinteticamente de uma fonte e condições de contorno específicas. O problema inverso foi formulado como um problema de otimização não-linear de estimativa dos coeficientes de Fourier e da condição de fronteira pela minimização do funcional de diferenças quadráticas entre dados sintéticos e os dados calculados do modelo direto. Devido ao mal-condicionamento deste problema inverso precisamos usar a regularização de Tikhonov com escolha *a posteriori* do parâmetro de regularização pelo Método de Hansen. Simulações foram realizadas com diferentes níveis de ruído.

Autor: Fábio Dall Cortivo

Orientador: Dr. Mario Rocha Retamoso

FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Dissertação de Mestrado em Modelagem Computacional

Rio Grande, 18 de fevereiro de 2009.

Abstract

BOUNDARY CONDITIONS AND SOURCE TERM RECONSTRUCTION IN HYDROLOGIC OPTICS WITH FOURIER SERIES

The aim of this work is to solve an inverse problem in Radiative Transfer, which consists in a reconstruction of boundary conditions and source term in the Hydrologic Optics. The direct problem is to solve the Radiative Transfer Equation by Discrete Ordinates Method (S_N) and the system of ordinary differential equations with constant coefficients resultant was solved by diagonalization of coefficient matrix. The radiometric measures to the inversion were obtained synthetically from a specific source and boundary conditions. The inverse problem was formulated as a nonlinear optimization problem of estimate the coefficients of Fourier's series and the boundary condition by minimization of quadratic difference functional between synthetic and computed data obtained from de direct model. Due to the ill-conditioning of this inverse problem we needed to use the Tikhonov's regularization with choice *a posteriori* of regularization parameter by the Hansen's Method. The simulations were done using corrupted measures by different levels of Gaussian noise.

Author: Fábio Dall Cortivo

Orientador: Dr. Mario Rocha Retamoso

FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Dissertação de Mestrado em Modelagem Computacional

Rio Grande, 18 de fevereiro de 2009.

Sumário

<i>Introdução</i>	1
1 Ótica Hidrológica	6
1.1 Ângulo Sólido	6
1.2 Radiância	8
1.3 Irradiância	9
1.4 Propriedades Óticas da Água	11
1.4.1 Propriedades Óticas Inerentes (IOP's)	11
1.4.2 Propriedades Óticas Aparentes (AOP's)	15
1.5 Espalhamento Elástico	15
1.6 Espalhamento Inelástico	16
2 Equação de Transferência Radiativa	17
2.1 Um Breve Histórico da Equação de Transferência Radiativa	17
2.2 Algumas Aplicações	18
2.3 Dedução da Equação de Transferência Radiativa	19
2.3.1 Coeficientes de Absorção e Emissão de Radiação	20
2.4 Simetrias da Função Fase de Espalhamento	23
3 Problema Direto	25
3.1 Equação de Transferência Radiativa	26
3.2 Aproximação para a Função de Fase	27
3.3 Função de Fase de Henyey-Greenstein	28
3.4 Decomposição da Radiância e do Termo Fonte	30

3.5	<i>Método das Ordenadas Discretas</i>	32
3.6	<i>Propriedades da Matriz \mathbb{A}</i>	34
3.7	<i>Diagonalização</i>	36
4	<i>Problema Inverso</i>	43
4.1	<i>Formulação do Problema Inverso</i>	45
4.2	<i>Técnicas de Regularização</i>	48
4.2.1	<i>Regularização de Tikhonov</i>	49
4.3	<i>Escolha do Parâmetro de Regularização</i>	50
4.3.1	<i>Princípio da Discrepância de Morozov</i>	51
4.3.2	<i>Método de Hansen</i>	52
5	<i>Simulações Numéricas</i>	53
5.1	<i>Parâmetros Utilizados no Problema Direto e no Problema Inverso</i>	53
5.2	<i>Resultados do Problema Direto</i>	55
5.3	<i>Problema Inverso sem Ruído nos Dados</i>	56
5.3.1	<i>Estimativa de Fronteira e da Fonte</i>	56
5.4	<i>Problema Inverso com Ruído nos Dados e a Técnica de Regularização</i>	60
5.4.1	<i>Estimativa de Fonte</i>	64
6	<i>Conclusões e Sugestões</i>	73
A	<i>Polinômios de Legendre, Funções de Legendre Associadas, Harmônicos Esféricos e Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos</i>	76
A.1	<i>Função geratriz</i>	77
A.2	<i>Fórmula de Recorrência dos Polinômios de Legendre</i>	79
A.3	<i>Ortogonalidade</i>	80
A.4	<i>Série de Legendre</i>	82
A.5	<i>Funções de Legendre Associadas</i>	83
A.6	<i>Fórmula de Recorrência para Funções de Legendre Associadas</i>	84
A.7	<i>Ortogonalidade das Funções de Legendre Associadas</i>	85
A.8	<i>Polinômios Harmônicos e Harmônicos Esféricos</i>	89

A.9 Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos 92

Lista de Figuras

1.1	Representação gráfica de ângulo plano e ângulo sólido. FONTE: adaptado de [36].	7
1.2	Fluxo de radiação representado por um feixe com direção de propagação $\vec{\xi}$, confinado em um ângulo sólido infinitesimal $\partial\Omega$, passando por um elemento de área ∂A . FONTE: adaptado de [15].	8
1.3	Instrumento coletor de radiância. Tubo de Gershun. FONTE: adaptado de [36].	9
1.4	Instrumento coletor de irradiâncias planas e escalares. FONTE: adaptado de [36].	10
1.5	Geometria utilizada na descrição de IOP's. FONTE: adaptado de [36].	12
3.1	Representação gráfica de um corpo d'água e interação deste com a luz. FONTE: adaptado de [48].	27
4.1	Representação Gráfica. Problema Direto e Problema Inverso. FONTE: adaptado de [48].	44
4.2	Gráfico da curva $\ \Omega(\vec{x})\ \times \ \vec{y}_{exp}^\delta - \vec{y}_{mod}\ _2^2$. FONTE: adaptado de [48].	51
5.1	Representação gráfica do termo fonte utilizado no Problema Direto.	54
5.2	Radiâncias calculadas pelo modelo direto, usando a fonte parabólica, com 10 m de profundidade e 21 observações. (a) com ordem de quadratura $N = 20$. (b) com ordem de quadratura $N = 40$	55
5.3	Radiâncias calculadas pelo modelo direto, usando a fonte parabólica, com 5 m de profundidade e 6 observações. (a) com ordem de quadratura $N = 20$. (b) com ordem de quadratura $N = 40$	55

5.4	<i>Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	56
5.5	<i>Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	57
5.6	<i>Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	57
5.7	<i>Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	58
5.8	<i>Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	58
5.9	<i>Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	59
5.10	<i>Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	59
5.11	<i>Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	60
5.12	<i>Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	60
5.13	<i>Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	61
5.14	<i>Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	61
5.15	<i>Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.</i>	62
5.16	<i>Fonte e fronteira recuperadas, aplicando a regularização diretamente em todas as variáveis a serem estimadas, usando vários valores para γ. Ordem de quadratura $N = 20$, 8 termos na série, $\zeta_0 = 10$ com 11 observações. (a) Fonte. (b) Fronteira.</i>	62

5.17	<i>Fonte e fronteira recuperadas, aplicando a regularização nos valores funcionais da fonte e nos valores de fronteira, usando vários valores para γ. Ordem de quadratura $N = 20$, 8 termos na série, $\zeta_0 = 10$ com 11 observações. (a) Fonte. (b) Fronteira.</i>	63
5.18	<i>Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.</i>	64
5.19	<i>Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série.</i>	65
5.20	<i>Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Limites para $\gamma = 1.0 \cdot 10^{-8} \dots 1000.0$</i>	65
5.21	<i>Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.</i>	66
5.22	<i>Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série.</i>	66
5.23	<i>Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 63.09573$.</i>	67
5.24	<i>Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.</i>	67
5.25	<i>Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série.</i>	68
5.26	<i>Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 25.11886$.</i>	68
5.27	<i>Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 21 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.</i>	69
5.28	<i>Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 21 observações e 8 termos na série.</i>	69
5.29	<i>Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 39.81071$.</i>	70
5.30	<i>Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 15$, 16 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.</i>	70

5.31	<i>Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 15$, 16 observações e 8 termos na série.</i>	71
5.32	<i>Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 63.09573$.</i>	71
5.33	<i>Estimativa de fonte e fronteira. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 15, 31$ observações e 8 termos na série. (a) Fonte. (b) Fronteira.</i>	72
A.1	<i>Distância entre dois pontos no plano.</i>	78
A.2	<i>Representação de um ponto no espaço.</i>	89
A.3	<i>Representação e dois pontos no espaço em coordenadas esféricas.</i>	96

Lista de Tabelas

5.1	<i>Parâmetros utilizados no Problema Direto e Problema Inverso, para a geração do banco de dados de estudo.</i>	54
5.2	<i>Casos de estudo para o Problema Direto e o Problema Inverso.</i>	54
5.3	<i>Abreviaturas na legenda das figuras.</i>	54

Introdução

“O verdadeiro significado das coisas se encontra na capacidade de dizer as mesmas coisas com outras palavras.” (Charles Chaplin)

Nas últimas décadas, com o avanço dos recursos computacionais, um novo campo de estudos tem conquistado uma grande quantidade de pesquisadores. A essa área de estudos denominamos Problemas Inversos. Sua ascensão deve-se ao desenvolvimento da computação e ao seu grande número de aplicações em outras ciências. Mas o que são Problemas Inversos? Segundo Oleg Mikailivitch Alifanov, pesquisador russo na área de problemas inversos, *a solução de um problema inverso consiste em determinar todas causas baseado na observação de alguns efeitos.*

Conforme [28], dois problemas são ditos inversos um em relação ao outro se a formulação de um envolve todo (ou parcial) conhecimento da solução do outro. No problema direto, a informação sempre deve ser completa e precisa. No problema inverso, a informação pode ser incompleta e imprecisa. Seguindo esta definição, é possível determinar qual problema deverá ser considerado direto ou inverso.

Talvez o mais famoso problema inverso para a comunidade matemática seja: *Can one hear the shape of a drum?* Isto é: *Você consegue prever a forma de um tambor pelo som que ele emite?* [41, 27]. Este problema inverso permaneceu muito tempo sem solução, mas foi resolvido pela negativa, ou seja, existem dois tambores que emitem o mesmo som [24].

A principal característica dos Problemas Inversos é que geralmente são mal-postos. O matemático francês Jacques Hadamard formula a definição de um *problema bem posto*. Segundo essa definição, um problema é bem posto quando possui as seguintes características:

1. existência;
2. unicidade e;
3. estabilidade na solução.

Em outras palavras diz-se que a solução de tal problema existe, é única, e tem dependência contínua dos dados e, portanto, pequenas variações nas causas provocam pequenas variações nos efeitos. O que ocorre com os Problemas Inversos é que, em geral, alguns destes itens, ou até mesmo os três, falham e, por isso, são caracterizados como *problemas mal-postos*.

Na resolução de um problema inverso, a fundamentação de toda metodologia utilizada consiste no tratamento dos dados de modo a se obter a terceira característica de um problema bem posto. As duas primeiras, existência e unicidade, são obtidas mediante alguma adaptação do conceito de solução, bem como na topologia do conjunto sobre o qual o problema está definido. Desse modo, a instabilidade, inerente a essa classe de problemas, tem sido contornada mediante técnicas de regularização que suavizam as variações bruscas que ocorrem nas aproximações numéricas das soluções [37].

A questão de existência de soluções pode ser enfraquecida, bastando aumentar o espaço de solução para o problema. Em relação à unicidade, sua ausência significa que estão faltando informações do modelo. Essa falta de informações pode ser sanada impondo mais condições ao operador ou, então, escolhendo aquela solução que mais se adapta ao modelo entre as várias soluções encontradas.

Considere um modelo matemático definido por

$$\mathcal{F}(\vec{u}) = \vec{y}, \quad (1)$$

onde são conhecidos o operador \mathcal{F} , e as causas \vec{u} , assim determina-se os seus efeitos \vec{y} , de maneira “exata”. Tal problema é definido como *problema direto*. Agora suponha que seja conhecido o operador \mathcal{F} , e os efeitos \vec{y} . Então, o *problema inverso* consiste em determinar as causas \vec{u} fazendo,

$$\vec{u} = \mathcal{F}^{-1}(\vec{y}). \quad (2)$$

A manifestação de instabilidade se dá porque, na Eq. (2), não são conhecidos os valores exatos de \vec{y} , pois esses, nas situações concretas em que se trabalha com medições experimentais,

estas apresentam erros nas medidas. Portanto, o que tem-se de informação sobre o problema é \vec{y}^δ . Dessa forma, o novo problema inverso é formulado como:

$$\vec{u} = \mathcal{F}^{-1}(\vec{y}^\delta); \quad (3)$$

e é esse problema que, muitas vezes, não satisfaz a um ou a todos os itens sugeridos por Hadamard devido à sensibilidade do operador \mathcal{F} a essas pequenas perturbações nos efeitos.

Problemas inversos têm aplicações nas mais diversificadas áreas da ciência. Alguns exemplos são: Transferência de Calor, Tomografia Computadorizada, Óptica Hidrológica, Sensoriamento Remoto, Reconstrução de Imagens, entre outras [55, 28, 25].

Na medicina, a possibilidade de realizar um diagnóstico médico sem a necessidade de processos invasivos leva a um problema de reconstrução da densidade de órgãos internos do corpo humano através da análise de imagens desses órgãos, conforme [39, 40]. Tons claros indicam pouca absorção de radiação (ossos), e tons mais escuros indicam muita absorção. Na “chapa” de material sensível a essa radiação, fica impressa a quantidades de fótons que foram recebidos após a passagem da radiação pelo corpo. Se muitos fótons forem recebidos, indica que a matéria atravessada pelo feixe é pouco densa, por outro lado, se poucos fótons forem recebidos, indica que o órgão é muito denso. A diferença entre fótons emitidos e recebidos fornece a densidade da matéria esboçada no material sensível a essa radiação.

Nos problemas de difusão, em meio não-homogêneo, em regime estacionário [28]

$$\operatorname{div}(\kappa \nabla u) = 0 \quad \in \quad D, \quad (4)$$

o problema direto consiste em determinar as medidas u , conhecendo os valores das medidas na fronteira e o valor da função densidade. Um problema inverso agregado a esse problema consiste em: sabendo os valores das medidas u e os valores na fronteira, determinar a função densidade que gerou tais medidas.

Em Óptica Hidrológica, dadas as condições iniciais e de fronteira, incluindo as intensidades de energia radiante incidentes geradas por fontes internas, e as propriedades ópticas do meio, o modelo matemático para a Equação de Transferência Radiativa leva às intensidades de energia radiante resultantes, expressando a interação da luz com o meio e modelando

fenômenos como absorção e espalhamento.

Posto o problema direto, caracterizamos o problema inverso da óptica como: dadas as intensidades de energia radiante obtidas, por exemplo através de medições experimentais (*in situ*) ou sintéticas (geradas por computador), escolhe-se como incógnitas algumas (ou todas) propriedades ópticas do meio, ou então as condições iniciais, ou de fronteira, ou ainda fontes internas.

Problemas inversos em Óptica Hidrológica são pouco abordados na literatura e citando C. D. Mobley [36], esse tipo de problema seria “very much an unsolved problem” (grifo de Mobley). À complexidade de modelar a propagação de luz num meio espalhante, juntam-se outras dificuldades, tais como a sensibilidade a erros nas medidas experimentais, ou então, o conjunto extenso de parâmetros e condições de contorno supostamente conhecidos, que dependem de hipóteses assumidas e simplificações [49].

Os trabalhos de N. J. McCormik [31, 32] apresentam uma revisão dos tipos de problemas e métodos de inversão na área de Transferência Radiativa. Nesta classe de problemas, conforme os parâmetros a serem estimados, tem-se

1. determinação de condições iniciais;
2. determinação de condições de fronteira [2];
3. determinação de características do meio, tais como propriedades ópticas do meio ou fontes internas [42, 49].

Este trabalho elegerá como incógnitas para o problema inverso as condições de fronteira e a estimação de fontes internas de bioluminescência¹, tendo, como base, medidas geradas sinteticamente (por computador) para radiâncias, tomadas em vários pontos da profundidade óptica pré-estabelecida. A solução do problema direto foi obtida aplicando o Método das Ordenadas Discretas no termo integral da Equação de Transferência Radiativa [15], que dá origem a um sistema de equações diferenciais ordinárias, cuja matriz de coeficientes é diagonalizável, segundo [36].

O presente trabalho está organizado como segue. No Capítulo 1, serão dados os conceitos básicos relacionados à Óptica Hidrológica, tais como: conceito de ângulo sólido, radiância, irradiância, propriedades ópticas da água, e, por fim, conceitos de espalhamento elástico

¹Bioluminescência é o fenômeno de geração de luz por organismos através de reações químicas.

e inelástico. No Capítulo 2, serão apresentados comentários sobre a história da Equação de Transferência Radiativa, suas aplicações, sua dedução, e as simetrias da função de fase de espalhamento. No Capítulo 3, será feita a aproximação para a função de fase, baseado no Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos, decomposição da radiância e do termo fonte, usando a Decomposição de Chandrasekhar. Posteriormente, será falado sobre o Métodos das Ordenadas Discretas, propriedades da matriz resultante da aplicação de tal método, e por fim, o método da diagonalização, o qual é a proposta sugerida para a solução de tal sistema neste trabalho. No Capítulo 4, serão apresentados alguns detalhes sobre problemas inversos, bem como a formulação adotada neste trabalho. Será falado também sobre a técnica de regularização de Tikhonov, bem como sobre os métodos de escolha para o parâmetro de regularização, dentre tais métodos será falado sobre Princípio da Discrepância de Morozov e do Método de Hansen. No Capítulo 5, serão apresentados os resultados numéricos de algumas simulações realizadas, conclusões, comentários e, por fim, no Apêndice, o Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos, resultado fundamental no estudo da Equação de Transferência Radiativa.

Capítulo 1

Ótica Hidrológica

“O primeiro dever da inteligência é desconfiar dela mesma.” (Albert Einstein)

Neste capítulo, descreve-se alguns conceitos relacionados à Ótica Hidrológica. Partes deste capítulo foram extraídas de [36], e melhores detalhes sobre os tópicos aqui abordados podem ser encontrados na mesma referência.

A Ótica Hidrológica é o campo da Física que estuda o comportamento da luz na água, tentando definir propriedades ópticas do meio aquático tais como: características da água, espalhamento, absorção e comportamento da luz quando penetra na água. Duas grandezas que estão relacionadas a Ótica Hidrológica são a *radiância* e a *irradiância*.

Antes de falar sobre radiância e irradiância, será feito um breve comentário sobre *ângulo sólido*, unidade esta necessária para muitas definições em Ótica Hidrológica.

1.1 Ângulo Sólido

O conceito de ângulo sólido está ligado a figuras no espaço tri-dimensional e é uma extensão da definição de ângulo plano. Considere o arco ℓ como mostrado na Figura 1.1(a). O ângulo θ , cuja unidade de medida é radianos, formado entre os dois raios é definido pela razão

$$\theta = \frac{\ell}{r} \text{ rad,} \quad (1.1)$$

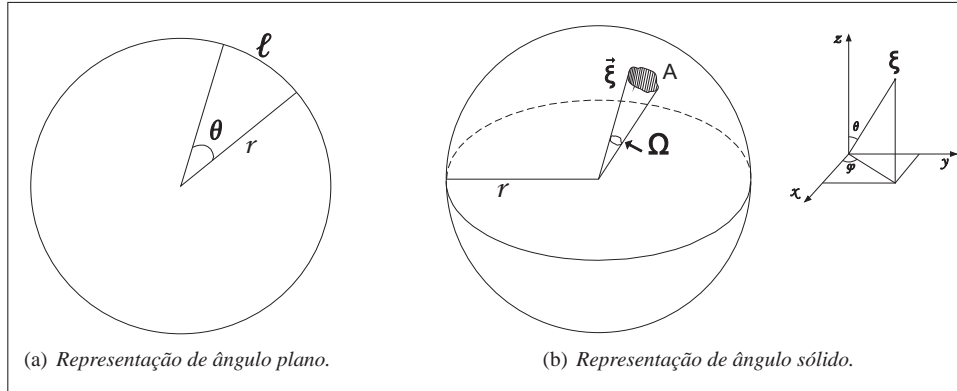


Figura 1.1: Representação gráfica de ângulo plano e ângulo sólido. FONTE: adaptado de [36].

onde ℓ representa o comprimento de arco e r o raio da circunferência. Se $\theta = 2\pi$, pela Eq. (1.1) temos o correspondente comprimento de uma circunferência: $\ell = 2\pi r$.

Na Figura 1.1(b), A representa a área achurada na superfície de uma esfera de raio r , $\vec{\xi}$ representa uma direção. O ângulo sólido Ω , cuja unidade de medida é esferoradianos, é definido como sendo a razão entre a área achurada pelo raio da esfera ao quadrado, assim

$$\Omega = \frac{A}{r^2} \quad \text{sr.}$$

Sabendo que a área da esfera é $4\pi r^2$, a medida de todos os ângulos sólidos é dada por $\Omega(\Xi) = 4\pi$ sr.

O elemento diferencial do ângulo sólido sobre as direções $\vec{\xi} = (\theta, \varphi)$ é dado em coordenadas polares por

$$\partial\Omega(\vec{\xi}) = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi.$$

O ângulo θ é chamado de ângulo polar, e o ângulo φ é chamado ângulo azimutal. A variação para cada θ e φ é, respectivamente

$$0 \leq \theta \leq \pi \quad \text{e} \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

No decorrer deste trabalho, a não ser que seja dito, sempre que houver referência referirmos ao ângulo θ , se estará falando de ângulo polar e quando houver referência a φ , se estará referindo ao ângulo azimutal. Para saber como é feita a representação de um ponto no espaço em coordenadas esféricas, consulte Apêndice A, p.96.

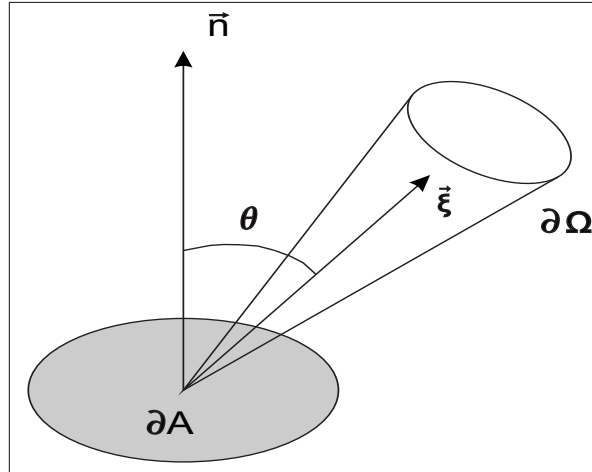


Figura 1.2: Fluxo de radiação representado por um feixe com direção de propagação $\vec{\xi}$, confinado em um ângulo sólido infinitesimal $\partial\Omega$, passando por um elemento de área ∂A . FONTE: adaptado de [15].

1.2 Radiância

Na radiometria, ciência que estuda a medição de energia radiante (eletromagnética), a grandeza fundamental é a radiância, que é a medida da energia de um feixe infinitesimal de radiação, num dado ponto, por unidade de tempo (∂t), por unidade de área (∂A), por unidade de ângulo sólido ($\partial\Omega$) e por unidade de comprimento de onda ($\partial\lambda$). Considera-se que o feixe esteja contido num ângulo sólido infinitesimal, centrado na direção em que aponta, conforme mostrado na Figura 1.2. A radiância L depende da posição \vec{x} , do instante t e da direção $\vec{\xi}$ consideradas, e o comprimento de onda λ , geralmente é especificado. Considerando que o feixe abrange uma faixa infinitesimal, centrada em λ , definimos *radiância espectral* por

$$L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) = \frac{\partial^4 Q}{\cos \theta \partial t \partial A \partial \Omega \partial \lambda} \quad [\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}]. \quad (1.2)$$

O termo ∂Q , é chamado de *energia radiante*, e pode ser representado por [48]

$$\partial^4 Q = \cos \theta \partial t \partial A \partial \Omega \partial \lambda L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \quad (1.3)$$

O instrumento usado para medição de radiâncias, conforme mostrado na Figura 1.3, é composto por um tubo coletor, o qual é apontado na direção considerada, que tem no fundo um difusor, destinado a tornar o campo de luz mais homogêneo, um filtro de comprimento de onda escolhido e um detector. Cabe salientar que, mesmo se a radiância depender da posição, ela não é um vetor, e sua unidade de medida no SI é a *candela*.

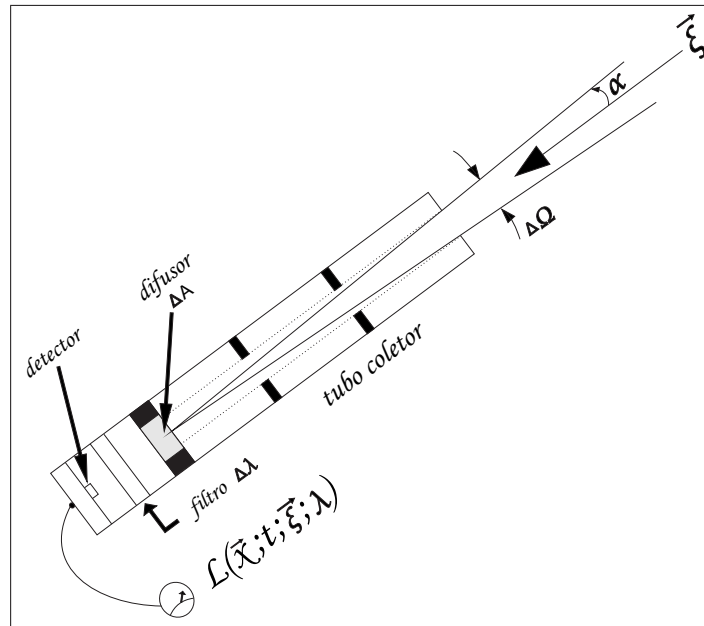


Figura 1.3: Instrumento coletor de radiação. Tubo de Gershun. FONTE: adaptado de [36].

Observa-se que a medição de radiações é algo bastante complexo, pois para cada feixe de luz vindo do sol, por exemplo, é necessário uma medição. Assim, geralmente é usada outra unidade de medida chamada *irradiância*, conforme definido abaixo.

1.3 Irradiância

A irradiância é a radiação integrada para uma faixa de ângulos sólidos. É classificada em *irradiâncias espectrais planas*, (E_u) e (E_d) , onde denota-se o sentido ascendente por u (*upward*) e o descendente por d (*downward*) e as *irradiâncias espectrais escalares*, (E_{0u}) e (E_{0d}) .

As irradiâncias espectrais planas são medidas por um sensor plano idêntico ao apresentado na Figura 1.3, no entanto, é removido o tubo coletor, Figura 1.4(a). Esse sensor é colocado voltado para cima ou para baixo, conforme deseja-se medir (E_d) ou (E_u) , respectivamente. Pelo fato de ser plano, esse sensor receberá feixes incidentes de todas as direções, correspondentes aos ângulos sólidos do hemisfério superior (Ξ_u) ou inferior (Ξ_d) , projetados na direção da normal ao sensor. Portanto, se o sensor estiver voltado para cima, ele mede a *irradiância*

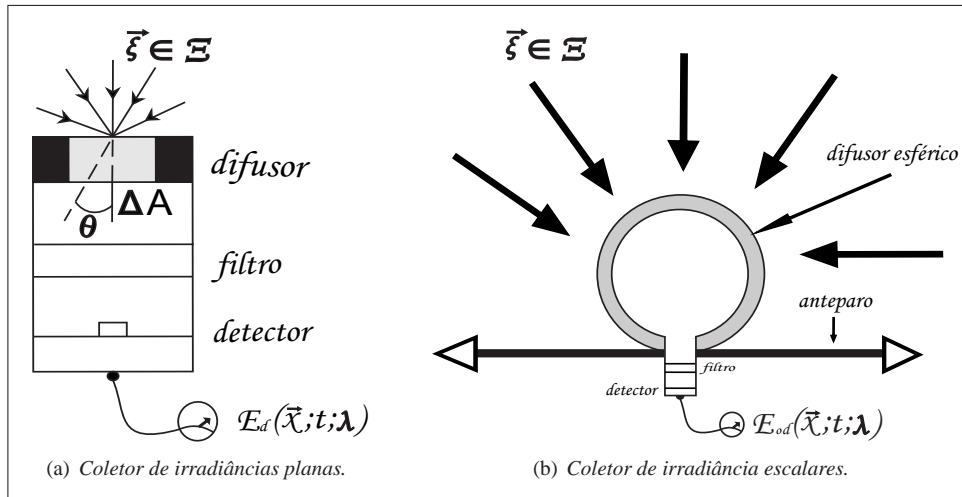


Figura 1.4: Instrumento coletor de irradiâncias planas e escalares. FONTE: adaptado de [36].

espectral plana descendente, definida por:

$$\begin{aligned}
 E_d(\vec{x}; t; \lambda) &= \int_{\vec{\xi} \in \Xi_d} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) |\cos \theta| \partial\Omega(\vec{\xi}) \\
 &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda) \cos \theta \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.
 \end{aligned}$$

O mesmo aparelho mostrado na Figura 1.4(a), voltado para baixo, mede a *irradiância espectral plana ascendente*, definida em forma de equação por:

$$\begin{aligned}
 E_u(\vec{x}; t; \lambda) &= \int_{\vec{\xi} \in \Xi_u} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) |\cos \theta| \partial\Omega(\vec{\xi}) \\
 &= \int_0^{2\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda) |\cos \theta| \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.
 \end{aligned}$$

Observe que o valor absoluto, apresentado nesta última equação é necessário, visto que,

$$\cos \theta < 0, \quad \text{se} \quad \frac{\pi}{2} < \theta \leq \pi.$$

Para a medição das *irradiâncias espectrais escalares*, considera-se o instrumento mostrado na Figura 1.4(b), montado sobre um anteparo opaco. O difusor esférico é sensível a fótons vindos de qualquer direção descendente. Esse instrumento, orientado para cima, como

mostrado na Figura 1.4(b), mede a (E_{0d}), a qual é definida por

$$\begin{aligned} E_{0d}(\vec{x}; t; \lambda) &= \int_{\vec{\xi} \in \Xi_d} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \partial\Omega(\vec{\xi}) \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda) \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi. \end{aligned}$$

O mesmo instrumento, no entanto, com o difusor voltado para baixo, mede a *irradiância espectral escalar ascendente* (E_{0u}), a qual é definida por

$$\begin{aligned} E_{0u}(\vec{x}; t; \lambda) &= \int_{\vec{\xi} \in \Xi_u} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \partial\Omega(\vec{\xi}) \\ &= \int_0^{2\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda) \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi. \end{aligned}$$

A *irradiância espectral escalar total* (E_0) é: $E_0(\vec{x}; t; \lambda) = E_{0d}(\vec{x}; t; \lambda) + E_{0u}(\vec{x}; t; \lambda)$, isto é:

$$E_0(\vec{x}; t; \lambda) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda) \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi.$$

Feitos esses comentários sobre os quatro tipos de irradiâncias, pode-se definir o *vetor espectral de irradiância* (\vec{E}),

$$\vec{E}(\vec{x}; t; \lambda) = \int_{\vec{\xi} \in \Xi} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \vec{\xi} \partial\Omega(\vec{\xi}) \quad [\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{nm}^{-1}], \quad (1.4)$$

onde $\vec{\xi}$ assume todas as direções na esfera unitária Ξ .

1.4 Propriedades Óticas da Água

Além da radiância e da irradiância, existem grandezas em Óptica Hidrológica que descrevem as Propriedades Óticas da Água. Essas se dividem em: *Propriedades Óticas Inerentes*, (IOP's), e as *Propriedades Óticas Aparentes*, (AOP's).

1.4.1 Propriedades Óticas Inerentes (IOP's)

Define-se essas propriedades da água como sendo as que dependem somente dos componentes da água.

Considere um pequeno volume de água ΔV com espessura Δr atingido por um pequeno

feixe de luz monocromática com potência espectral radiante $\Phi_i(\lambda)$, W nm^{-1} , conforme ilustrado na Figura 1.5. Uma porção $\Phi_a(\lambda)$ é absorvida dentro do volume de água. Outra porção $\Phi_s(\lambda)$ é espalhada para fora segundo um ângulo θ , e a porção remanescente $\Phi_t(\lambda)$ é transmitida pelo volume sem mudança de direção. Representando por $\Phi(\lambda)$ o total da potência espalhada em todas as direções, e assumindo *espalhamento inelástico*¹, pela lei de conservação de energia, temos:

$$\Phi_i(\lambda) = \Phi_a(\lambda) + \Phi_s(\lambda) + \Phi_t(\lambda).$$

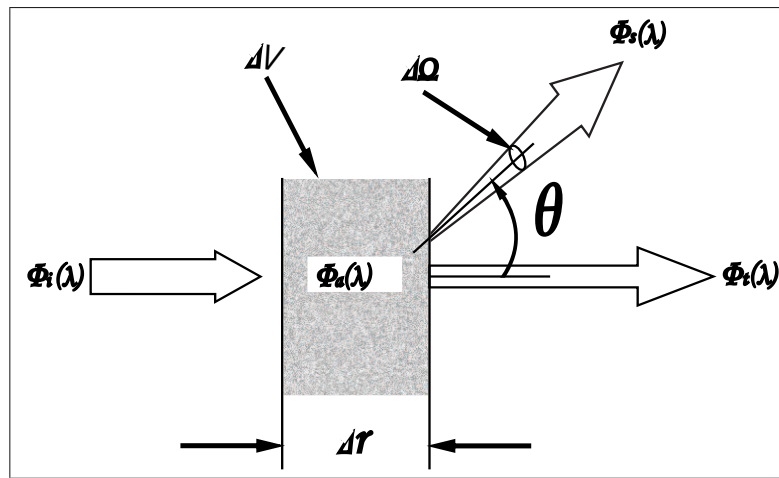


Figura 1.5: Geometria utilizada na descrição de IOP's. FONTE: adaptado de [36].

A *absorptância espectral*, $A(\lambda)$, é a razão entre a potência absorvida e a incidente no volume, ou seja,

$$A(\lambda) = \frac{\Phi_a(\lambda)}{\Phi_i(\lambda)};$$

a *espalhância espectral*, $B(\lambda)$, é a razão entre a potência espalhada em todas as direções e a potência radiante incidente:

$$B(\lambda) = \frac{\Phi_s(\lambda)}{\Phi_i(\lambda)};$$

e a *transmitância espectral* é dada por

$$T(\lambda) = \frac{\Phi_t(\lambda)}{\Phi_i(\lambda)}.$$

Claramente

$$A(\lambda) + B(\lambda) + T(\lambda) = 1.$$

¹Espalhamento inelástico ocorre quando o fóton sofre uma mudança no comprimento de onda durante o processo de espalhamento, mais detalhes na Seção 1.6.

As IOP's são definidas como:

1. **O coeficiente espectral de absorção:** É a redução da energia luminosa com a profundidade da água e com a absorção da luz pelas “substâncias” dissolvidas na água. Esse coeficiente é dado por:

$$a(\lambda) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{A(\lambda)}{\Delta r} \quad \text{m}^{-1}.$$

2. **O coeficiente espectral de espalhamento:** É a mudança de direção da incidência do feixe de luz quando este atinge a água. O espalhamento contribui com atenuação da luz debaixo d'água, fazendo aparecer um borramento no objeto que está sendo observado. É definido por:

$$b(\lambda) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{B(\lambda)}{\Delta r} \quad \text{m}^{-1}.$$

Esse espalhamento pode se dar de três maneiras:

- (a) *Refração:* Acontece quando um feixe de luz, incidindo obliquamente, muda de direção quando passa de um meio transparente para outro transparente que apresenta velocidade da luz diferente do primeiro meio. A refração modifica a velocidade da luz, mesmo que a direção permaneça a mesma (caso onde a luz incide perpendicularmente);
 - (b) *Reflexão:* Ocorre quando a luz incide sobre a superfície de separação entre dois meios com propriedades distintas. A reflexibilidade é a tendência dos raios de voltarem para o mesmo meio de onde vieram;
 - (c) *Difração:* É uma mudança no sentido da luz, que ocorre com as ondas (luz) quando elas passam por um orifício ou contornam um objeto cuja dimensão é da mesma ordem de grandeza que o seu comprimento de onda.
3. **O coeficiente espectral de atenuação do feixe:** Este é a soma do coeficiente espectral de absorção e do coeficiente espectral de espalhamento, assim

$$c(\lambda) = a(\lambda) + b(\lambda) \quad \text{m}^{-1}.$$

Na Figura 1.5, $\Delta\Omega$ é chamado *ângulo sólido* e θ é chamado de *ângulo de espalhamento* e sua variação é $0 \leq \theta \leq \pi$. A espalhância angular por unidade de distância e unidade de

ângulo sólido é definida por

$$\beta(\theta; \lambda) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \lim_{\Delta \Omega \rightarrow 0} \frac{B(\theta; \lambda)}{\Delta r \Delta \Omega} = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \lim_{\Delta \Omega \rightarrow 0} \frac{\Phi_s(\theta; \lambda)}{\Phi_i(\lambda) \Delta r \Delta \Omega} \quad \text{m}^{-1} \text{sr}^{-1}.$$

Integrando $\beta(\theta; \lambda)$ sobre todas as direções, resulta o total de potência espalhada por unidade de irradiância incidente e por unidade de volume da água. Assim, considerando que $\partial \Omega = \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi$, pode-se escrever o coeficiente espectral de espalhamento como,

$$b(\lambda) = \int_{\Xi} \beta(\theta; \lambda) \partial \Omega = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \beta(\theta; \lambda) \, d\varphi \, \text{sen } \theta \, d\theta = 2\pi \int_0^\pi \beta(\theta; \lambda) \, \text{sen } \theta \, d\theta. \quad (1.5)$$

Segundo [49], pode-se realizar esta integração devido ao fato que o espalhamento em águas naturais é simétrica em relação ao ângulo azimutal sobre a direção incidente, dessa forma, a integração é dividida em duas partes (aqui não está sendo considerado a dependência da polarização), o espalhamento para frente

$$b_f(\lambda) = 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} \beta(\theta; \lambda) \, \text{sen } \theta \, d\theta,$$

e o espalhamento para trás

$$b_b(\lambda) = 2\pi \int_{\frac{\pi}{2}}^\pi \beta(\theta; \lambda) \, \text{sen } \theta \, d\theta.$$

Com isso é possível definir a *função de fase espectral de espalhamento volumétrica*

$$\tilde{\beta}(\theta; \lambda) = \frac{\beta(\theta; \lambda)}{b(\lambda)} \quad \text{sr}^{-1}. \quad (1.6)$$

Desta última equação tira-se que $\beta(\theta; \lambda) = b(\lambda) \tilde{\beta}(\theta; \lambda)$, substituindo esta igualdade na Eq. (1.5), obtém-se a condição de normalização da função de fase, assim

$$b(\lambda) = 2\pi \int_0^\pi b(\lambda) \tilde{\beta}(\theta; \lambda) \, \text{sen } \theta \, d\theta \quad \Rightarrow \quad 2\pi \int_0^\pi \tilde{\beta}(\theta; \lambda) \, \text{sen } \theta \, d\theta = 1. \quad (1.7)$$

Uma fórmula muito usada para a função de fase na Óptica Hidrológica, proposta por Henyey-Greenstein (1941) [36], é definida por

$$\tilde{\beta}(g; \theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{\sqrt{(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^3}}.$$

Observe que essa função satisfaz a condição de normalização proposta na Eq. (1.7), para qualquer valor de g , [36].

Outra IOP importante em Óptica Hidrológica é o *albedo de espalhamento simples*, definido por

$$\omega_0(\lambda) = \frac{b(\lambda)}{c(\lambda)},$$

o qual representa a probabilidade de um fóton ser espalhado, ou absorvido, em uma direção qualquer [15]. Muitas vezes essa propriedade é chamada de *probabilidade de sobrevivência do fóton*.

1.4.2 Propriedades Ópticas Aparentes (AOP's)

As AOP's são aquelas propriedades que dependem das IOP's e da estrutura geométrica do campo de luz ambiente. Dividem-se em: *coeficiente de atenuação de irradiância*, que é uma estimativa da quantidade de luz que é atenuada por absorção ou espalhamento sobre um corpo d'água, e o *coeficiente de reflexão de irradiância*, que é um indicador do espalhamento e está relacionado com o brilho da água.

1.5 Espalhamento Elástico

Segundo [36], quando um fóton interage com um átomo ou molécula, o fóton pode ser absorvido, deixando o átomo ou molécula em um estado com energia interna mais alta. Diz-se que, se a molécula quase retorna, imediatamente, para seu estado de energia interno original, emitindo um fóton da mesma energia do fóton que foi absorvido, o processo é chamado *espalhamento elástico*. Uma molécula excitada pode emitir um fóton de menor energia (comprimento de onda mais longo) que o fóton incidente. Assim, a molécula permanece em um estado intermediário de excitação e pode emitir outro fóton, retornando, assim, ao seu estado de energia original, ou então, a energia retida pode ser convertida para energia térmica ou química. Em outras palavras, o espalhamento elástico ocorre quando o fóton **não** sofre uma mudança no comprimento de onda durante o processo de espalhamento.

1.6 *Espalhamento Inelástico*

Se uma molécula está inicialmente em um estado excitado, esta pode absorver um fóton incidente e emitir um fóton de maior energia (comprimento de onda mais curto) que o fóton absorvido, assim retornando para um estado de energia inferior. Neste caso, o fóton espalhado (emitido) tem um comprimento de onda diferente do fóton incidente (absorvido), este processo é chamado de *espalhamento inelástico*. Em outras palavras, o espalhamento inelástico ocorre quando o fóton sofre mudança no comprimento de onda durante o processo de espalhamento.

Portanto, toda ou parte da energia do fóton absorvida pode ser convertida em energia térmica ou química. A conversão da energia de um fóton em uma forma não-radiante é chamado de *true absorption*, ou algo como, na tradução livre, *absorção verdadeira*. O processo reverso também é possível, quando a energia química é convertida em luz, este processo é chamado de *true emission*, ou na tradução livre, *emissão verdadeira*.

Capítulo 2

Equação de Transferência Radiativa

*“A Matemática pura é, a sua
maneira, a poesia das idéias lógicas.”
(Albert Einstein)*

2.1 Um Breve Histórico da Equação de Transferência Radiativa

A equação de transporte é uma equação íntegro-diferencial, que foi originalmente desenvolvida por Boltzmann, em 1872, para a teoria cinética dos gases. Essa equação representa o balanço de partículas num elemento de volume no espaço de fase. O estudo de transporte de radiação em atmosferas estelares conduziu a várias soluções analíticas para problemas de transporte, por volta de 1930. Porém, as físicas desses problemas limitaram interesse a geometrias uni-dimensionais em meios semi-infinitos. Com o advento dos reatores de cadeia nuclear por volta de 1940, surgiu então o interesse de resolver problemas de transporte envolvendo partículas neutras numa grande quantidade de configurações geométricas em reatores nucleares [29]. Assim, vários métodos “elegantes” de solução para problemas de transporte foram propostos no início de 1940. Dentre pode-se citar a técnica de *Weiner-Hopf*, expansão em auto-funções singulares [12], entre outros métodos específicos, como o problema de Milne. No entanto, esses métodos só podem ser aplicados em problemas muito idealizados, isto é, onde alguns termos da equação são desconsiderados e mediante hipóteses sobre a geometria e do problema físico.

Com o advento dos computadores e com a enorme aplicabilidade da teoria de transporte em algumas áreas de engenharia e física, surgiu o interesse em desenvolver técnicas computaci-

onais eficientes para a sua resolução. Dentre os vários métodos determinísticos, propostos para essa finalidade, encontram-se os seguintes: Método Ordenadas Discretas (S_N) [15, 52], Métodos dos Harmônicos Esféricos (P_N) [46], *invariant imbedding* [36, 49], F_N [21, 19], Método Monte Carlo [36], $\mathcal{L}TS_N$ [53, 45, 10, 11, 23, 8, 42, 9, 43, 47], AS_N [14].

2.2 Algumas Aplicações

Antes de comentar sobre algumas aplicações, alguns comentários a respeito de espectro eletromagnético e de como este é dividido em função da frequência ou do seu comprimento de onda.

Chama-se de espectro eletromagnético o intervalo completo da radiação eletromagnética. Esse intervalo contém desde as ondas de rádio, as microondas, o infravermelho, a luz visível (radiação solar), os raios ultravioleta, os raios X, até a radiação gama. O que diferencia uma onda eletromagnética de outra é sua frequência ou, equivalentemente, seu comprimento de onda¹.

A radiação visível é constituída por uma estreita faixa do espectro eletromagnético, apresentando frequências compreendidas entre $4.6^{14}Hz$ e $6.7^{14}Hz$, ou então, segundo [36], entre 400nm e 700nm. Essas são capazes de excitar as células fotosensíveis da retina do olho, causando a sensação de visão.

Cabe salientar aqui que a transmissão da radiação solar na atmosfera é um processo complexo e de difícil descrição devido ao grande número de propriedades físicas da atmosfera que a influenciam.

Muitos processos radiativos ocorrem no nosso dia a dia e como exemplo básico, podemos citar a radiação solar que serve para iluminar e aquecer nosso planeta. Estamos tão acostumados com tal fenômeno que, raramente nos questionamos sobre tal fenômeno. Você já parou para pensar: Por que o céu é azul? Por que o arco-íris é colorido? Por que as nuvens são brancas? Por que a água do mar apresenta diferentes colorações? Ou então, por que roupas escuras aquecem mais quando expostas ao sol? Por que acontece o efeito estufa? Por que um carro, exposto ao sol, aquece quando está com as janelas fechadas? Estas e muitas outras questões podem ser enumeradas envolvendo problemas diários de transferência de calor por

¹Todas as ondas eletromagnéticas propagam-se, aproximadamente, no ar e no vácuo, com a mesma velocidade.

radiação. A resposta para essas perguntas está ligada à absorção da energia radiativa emitida pelo sol. Roupas escuras aquecem mais quando expostas ao sol, pois absorvem mais a energia radiativa do que as roupas claras. O fenômeno que ocorre no interior do carro é o mesmo que ocorre em estufas, onde as plantas devem ficar mais aquecidas que o ambiente.

O arco-íris não está ligado diretamente à transferência de calor, mas sim à capacidade que uma gota d'água tem de separar a luz visível em todas as faixas de frequências, ou seja, em cada uma das cores. Nessa situação a gota d'água age como um prisma. Explicação para esse fenômeno é encontrado com facilidade em livros de Ensino Médio.

Seguindo a idéia de transferência de calor, uma aplicação da Equação de Transferência Radiativa se dá na agricultura, em que o estudo dessa equação procura melhorar a eficiência de estufas determinando as curvas de transmitância de vidros e plásticos usados na sua confecção. Na indústria, o domínio sobre a Equação de Transporte visa a obter maneiras de oferecer a redução de consumo de energia em fornos e processos de secagem.

As águas naturais caracterizam-se por apresentar diversos constituintes, embora na modelagem possa se supor um único constituinte. Nessa situação, o campo luminoso deve-se à iluminação atmosférica e a eventuais fontes submersas, como por exemplo, aquelas de Bioluminescência.

A luz, ao percorrer um meio qualquer, sofre absorção e espalhamento. Este comportamento é modelado pela Equação de Transferência Radiativa, a qual descreve o campo luminoso no interior do meio, desde que conhecidas as suas características ópticas e, no caso de águas naturais, dado o campo luminoso incidente na superfície e as fontes submersas [22]. A determinação destas propriedades ópticas do meio é de grande importância no estudo de comportamentos biológicos, químicos e geológicos de águas naturais e sua conexão com o meio ambiente.

2.3 Dedução da Equação de Transferência Radiativa

Segundo [48], a Equação de Transferência Radiativa busca modelar a interação da radiação no meio, governada principalmente pelos processos de absorção e espalhamento aos quais é submetida. Dessa interação, resulta um balanço da quantidade de energia radiante, chamada também de *radiância espectral*, representada pela Eq. (1.2). Outra medida radiométrica de interesse é a *irradiância*, representada pela Eq. (1.4). Essa radiação, não é apenas uma medida de

feixes isolados e sim uma medida do fluxo em todas as direções de propagação.

2.3.1 Coeficientes de Absorção e Emissão de Radiação

Um feixe de radiação atravessando um meio será enfraquecido pela interação com a matéria. Se a energia radiante, ∂Q , tornar-se $\partial Q + \partial(\partial Q)_c$ após atravessar uma espessura ∂s na direção desta propagação, pode-se escrever que

$$\partial(\partial Q)_c = -c_\lambda \partial Q \partial s.$$

Usando a Eq. (1.3), pode-se escrever a equação acima como

$$\partial(\partial Q)_c = -c_\lambda L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \partial t \partial A \partial \Omega \partial \lambda \partial s, \quad (2.1)$$

a quantidade c_λ introduzida desse modo, define o *coeficiente de atenuação* do meio. De maneira análoga à atenuação, existem os respectivos *coeficiente de absorção* $a(\lambda)$ e o *coeficiente de espalhamento* $b(\lambda)$, somando esses coeficientes, resulta em $c_\lambda = c(\lambda) = a(\lambda) + b(\lambda)$, conforme descritos na Seção 1.4.1.

Além da atenuação, há também a energia emitida pelo meio num elemento de volume (∂V) que, para as direções confinadas a um elemento de ângulo sólido ($\partial \Omega$), é dada por

$$\partial(\partial Q)_j = j_\lambda \partial t \partial V \partial \Omega \partial \lambda = j_\lambda \partial t \partial s \partial A \partial \Omega \partial \lambda, \quad (2.2)$$

onde j_λ é o *coeficiente de emissão* do meio. Assim, a variação líquida de energia resulta em um balanço entre a energia atenuada e a emitida no meio, portanto

$$\partial(\partial Q)_{\text{liq}} = \partial(\partial Q)_c + \partial(\partial Q)_j. \quad (2.3)$$

Usando novamente a Eq. (1.3), pode-se expressar a variação líquida por

$$\partial(\partial Q)_{\text{liq}} = \partial L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \partial \lambda \partial A \partial \Omega \partial t. \quad (2.4)$$

Agora, substituindo as Eqs. (2.1), (2.2) e (2.4) em (2.3), obtém-se

$$\partial L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) = -c_\lambda L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) \partial s + j_\lambda \partial s \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda)}{c_\lambda \partial s} = -L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) + \frac{j_\lambda}{c_\lambda}.$$

O termo $\frac{j_\lambda}{c_\lambda}$ é uma razão entre os coeficientes de emissão e de atenuação, o qual chamamos de *função fonte*, representada por \mathcal{F}_λ . Assim escreve-se a equação anterior como

$$\frac{\partial L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda)}{c_\lambda \partial s} = -L(\vec{x}; t; \vec{\xi}; \lambda) + \mathcal{F}_\lambda, \quad (2.5)$$

que é chamada de *equação de transferência radiativa*.

Feitas essas considerações, é de interesse também saber qual a energia radiante que inside na seção de área (∂A) e é espalhada na direção $\vec{\xi}' = (\theta', \varphi')$, num elemento de ângulo sólido ($\partial \Omega'$), com intervalo de tempo (∂t), numa faixa de comprimento de onda ($\partial \lambda$), assim

$$\partial Q' = L(\vec{x}; t; \vec{\xi}'; \lambda) \partial A \partial t \partial \lambda \partial \Omega'.$$

Essa energia é espalhada em todas as direções, assim

$$b_\lambda \partial s \partial Q' = b_\lambda \partial s L(\vec{x}; t; \vec{\xi}'; \lambda) \partial A \partial t \partial \lambda \partial \Omega'. \quad (2.6)$$

Além disso, deseja-se mostrar a fração dessa energia que é espalhada dentro de um ângulo sólido ($\partial \Omega$), com direção $\vec{\xi} = (\theta, \varphi)$. Essa fração é proporcional à probabilidade da radiação que se propaga na direção $\vec{\xi}'$, ao ser espalhada irá se propagar na direção $\vec{\xi}$. Tal função que representa esta situação é dada por

$$\frac{\tilde{\beta}(\vec{\xi}'; \vec{\xi}) \partial \Omega}{4\pi}, \quad (2.7)$$

onde $\tilde{\beta}(\vec{\xi}'; \vec{\xi})$ é chamada de *função fase de espalhamento*.

Ao multiplicar a Eq. (2.6) por esta fração, e integrar para todas as direções incidentes, tem-se a equação para o total de energia que emerge de um determinado elemento de volume, $\partial V = \partial s \partial A$, dessa forma

$$(\partial Q)_j = b_\lambda \partial V \partial t \partial \lambda \partial \Omega \int_{\vec{\xi}' \in \Xi} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}'; \lambda) \frac{\tilde{\beta}(\vec{\xi}'; \vec{\xi})}{4\pi} \partial \Omega', \quad (2.8)$$

onde Ξ é o conjunto de todas as direções na esfera unitária Ξ .

Segundo [15], não se pode de maneira geral, explicar a emissão em um meio exclusivamente pelo espalhamento. Onde isso ocorre, tem-se o que na literatura se denomina como *scattering medium*, ou na tradução livre, *meio espalhante*. Neste caso, tem-se

$$j_\lambda = j_\lambda^{(s)}.$$

Considere agora que seja um meio espalhante, usando as Eqs. (2.2), (2.8) e a igualdade acima, tem-se

$$j_\lambda^{(s)} = b_\lambda \int_{\vec{\xi}' \in \Xi} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}'; \lambda) \frac{\tilde{\beta}(\vec{\xi}'; \vec{\xi})}{4\pi} \partial\Omega'.$$

Usando agora a definição de função fonte para a Equação de Transferência Radiativa, obtém-se

$$\mathcal{F}^{(s)} = \frac{j_\lambda^{(s)}}{c_\lambda} = \frac{b_\lambda}{c_\lambda} \int_{\vec{\xi}' \in \Xi} L(\vec{x}; t; \vec{\xi}'; \lambda) \frac{\tilde{\beta}(\vec{\xi}'; \vec{\xi})}{4\pi} \partial\Omega',$$

onde a expressão $\frac{b_\lambda}{c_\lambda}$, é chamado de *albedo de espalhamento simples* (ϖ_0), conforme definido na Seção 1.4.1.

Pode-se escrever a equação anterior em função do ϖ_0 , e dos ângulos polar θ' e azimutal φ' , no lugar de $\vec{\xi}'$ e de Ω' , sabendo que $\partial\Omega' = \sin \theta' d\theta' d\varphi'$, encontra-se

$$\mathcal{F}^{(s)}(\theta', \varphi') = \frac{\varpi_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \tilde{\beta}(\theta, \varphi; \theta', \varphi') L(\vec{x}; t; \theta', \varphi'; \lambda) \sin \theta' d\theta' d\varphi'.$$

Assim, Eq. (2.5) toma a forma²

$$\frac{\partial L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda)}{c_\lambda \partial s} + L(\vec{x}; t; \theta, \varphi; \lambda) = \frac{\varpi_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \tilde{\beta}(\theta, \varphi; \theta', \varphi') L(\vec{x}; t; \theta', \varphi'; \lambda) \sin \theta' d\theta' d\varphi'.$$

Fazendo $\mu = \cos \theta$ e omitindo a dependência do comprimento de onda, por conveniência, pode-se reescrever a equação anterior como

$$\frac{\partial L(\vec{x}; t; \mu, \varphi)}{c_\lambda \partial s} + L(\vec{x}; t; \mu, \varphi) = \frac{\varpi_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \tilde{\beta}(\mu, \varphi; \mu', \varphi') L(\vec{x}; t; \mu', \varphi') d\mu' d\varphi', \quad (2.9)$$

²O vetor \vec{x} representa as coordenadas x, y, z , de um ponto no espaço.

sujeita as condições de contorno

$$\begin{cases} L(\vec{0}, \mu, \varphi) & = F\delta(\mu - \mu_0)\delta(\varphi - \varphi_0) \\ L(\vec{x}_0, -\mu, \varphi) & = 0, \end{cases} \quad (2.10)$$

onde $\mu \in (0, 1]$ e $\varphi \in (0, 2\pi)$.

2.4 Simetrias da Função Fase de Espalhamento

Conforme definido do Apêndice A, p.96, o ângulo Θ , formado entre a direção incidente $\vec{\xi}'$ e espalhada $\vec{\xi}$, pode ser representado por

$$\cos \Theta = \cos \theta' \cos \theta + \sin \theta' \sin \theta \cos(\varphi' - \varphi)$$

Fazendo $\mu = \cos \theta$, $\mu' = \cos \theta'$, escreve-se a equação anterior como

$$\cos \Theta = \mu' \mu + \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi' - \varphi) \quad (2.11)$$

A Eq. (2.11) possui várias relações de simetria para a função fase de espalhamento em águas naturais, [36], $\tilde{\beta}(\vec{\xi}'; \vec{\xi}) = \tilde{\beta}(\mu', \varphi'; \mu, \varphi)$, as quais são enumeradas abaixo.

1. Invariância segundo a troca de μ' e μ

$$\tilde{\beta}(\mu', \varphi'; \mu, \varphi) = \tilde{\beta}(\mu, \varphi; \mu', \varphi')$$

2. Invariância segundo a troca de φ' e φ

$$\tilde{\beta}(\mu', \varphi'; \mu, \varphi) = \tilde{\beta}(\mu', \varphi; \mu, \varphi')$$

3. Invariância segundo a mudança simultânea de sinais de μ' e μ

$$\tilde{\beta}(\mu', \varphi'; \mu, \varphi) = \tilde{\beta}(-\mu', \varphi'; -\mu, \varphi)$$

4. Invariância segundo aumento simultâneo em φ' e φ

$$\tilde{\beta}(\mu', \varphi'; \mu, \varphi) = \tilde{\beta}(\mu', \varphi' + \varphi_0; \mu, \varphi + \varphi_0)$$

5. Um caso especial da propriedade anterior, tomando $\varphi_0 = -\varphi'$, com ajuda da propriedade 2, escreve-se

$$\tilde{\beta}(\mu', \varphi'; \mu, \varphi) = \tilde{\beta}(\mu', 0; \mu, \varphi - \varphi') = \tilde{\beta}(\mu', 0; \mu, -(\varphi - \varphi'))$$

Capítulo 3

Problema Direto

“Não se pode ensinar tudo a alguém, apenas ajudá-lo a encontrar por si mesmo.” (Galileu Galilei)

O problema direto da Óptica Hidrológica consiste na resolução da Equação de Transferência Radiativa sendo conhecida a distribuição espectral de radiâncias na atmosfera, no fundo (condições de contorno), as IOP's (absorção e função de fase) e as fontes internas de luz como por exemplo: bioluminescência e fluorescência.

Outra hipótese básica na transferência radiativa é o *princípio da linearidade*, o qual é válido para fótons de baixa energia. Baseado nisso, a energia radiante incidente provoca no meio uma resposta diretamente proporcional à intensidade radiante associada a essa radiação. Isso pode ser aplicado perfeitamente à Óptica Hidrológica [49].

Soluções analíticas exatas para a Equação de Transferência Radiativa são difíceis, ou até mesmo impossíveis de serem encontradas por métodos elementares. Entretanto, pode-se obter uma transformação da Equação de Transferência Radiativa em outras onde, o tratamento é menos complexo, havendo, assim, meios de solução analítica ou numérica, através de métodos amplamente conhecidos. Um desses métodos consiste em discretizar a variável angular no termo integral da Equação de Transferência Radiativa, com isso transforma-se tal equação em um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, cujos métodos de solução são bastante consolidados.

No problema aqui considerado, assume-se que o problema seja estacionário, ou seja,

sem dependência do tempo e unidimensional, variando unicamente na profundidade (z), configurando uma *geometria plano-paralela*. Esta geometria implica em supor que a água tem uma extensão horizontal infinita, sem variações horizontais das IOP's, hipótese aceitável para a maioria das aplicações em Oceanografia.

3.1 Equação de Transferência Radiativa

Como citado anteriormente, considera-se aqui que as propriedades do meio, tais como absorção e espalhamento, variam predominantemente com a direção vertical (z), em relação às direções horizontais (x e y). Com isso pode-se adotar uma geometria onde o domínio é estratificado em planos paralelos, conhecida como geometria plano-paralela. Sabendo que $\partial z = \cos \theta \partial s = \mu \partial s$, e omitindo a dependência do tempo, podemos escrever a Eq. (2.9) como

$$\mu \frac{\partial L(z, \mu, \varphi)}{c(z) \partial z} + L(z, \mu, \varphi) = \frac{\varpi_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \tilde{\beta}(\mu, \varphi; \mu', \varphi') L(z, \mu', \varphi') d\mu' d\varphi' + S(z, \mu, \varphi), \quad (3.1)$$

onde $S(z, \mu, \varphi)$, é chamado de *termo fonte*. Nesta equação, vemos claramente a dependência vertical em z do coeficiente de atenuação c .

Muitas vezes, representamos adimensionalmente a dependência dos valores da Equação de Transferência Radiativa com a profundidade por meio da *variável ótica* ζ . A relação entre a variação em ζ e z , é dada por

$$\partial \zeta = c(z) \partial z.$$

Assim, para uma dada *profundidade geométrica* z^* , a correspondente *profundidade ótica* τ é obtida pela expressão

$$\tau = \zeta^* = \int_0^{z^*} c(z) \partial z.$$

Com isso escrevemos a Eq. (3.1) em termos da variável ótica ζ , assim

$$\mu \frac{\partial L(\zeta, \mu, \varphi)}{\partial \zeta} + L(\zeta, \mu, \varphi) = \frac{\varpi_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \tilde{\beta}(\mu, \varphi; \mu', \varphi') L(\zeta, \mu', \varphi') d\mu' d\varphi' + S(\zeta, \mu, \varphi), \quad (3.2)$$

sujeita às condições de contorno

$$\begin{cases} L(0, \mu, \varphi) = f_+(\mu, \varphi) \\ L(\zeta_0, -\mu, \varphi) = f_-(\mu, \varphi), \end{cases} \quad (3.3)$$

onde $\mu \in (0, 1]$ e $\varphi \in (0, 2\pi)$. Com isso a Eq. (3.2) configura um problema de transferência radiativa monocromática em geometria plano-paralela e sujeita às condições de contorno (3.3).

A Figura 3.1 ilustra a interação da luz com uma camada d'água.

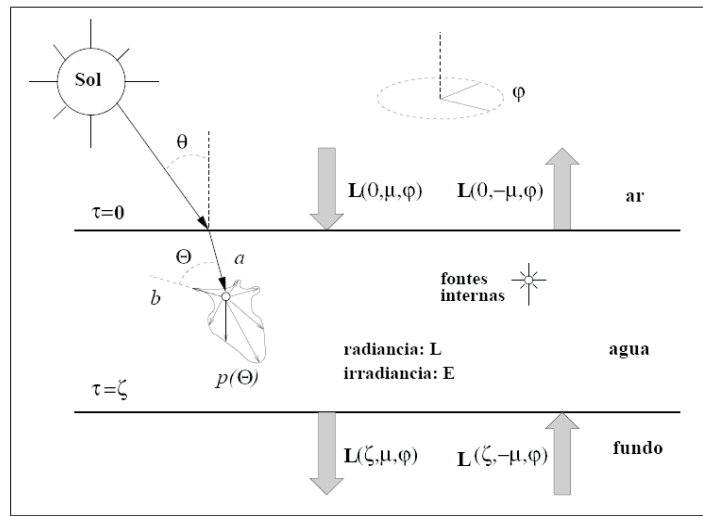


Figura 3.1: Representação gráfica de um corpo d'água e interação deste com a luz. FONTE: adaptado de [48].

3.2 Aproximação para a Função de Fase

O termo $\tilde{\beta}(\mu, \varphi; \mu', \varphi')$ é chamado função de fase, conforme definido no Capítulo 2, p. 21. Indica-se o argumento da função de fase, ou seja, $(\mu, \varphi; \mu', \varphi')$ por $\cos \Theta$. O ângulo $\cos \Theta$ é definido pela Eq. (A.43) e indica o cosseno do ângulo formado por vetores com extremidade sobre uma esfera unitária. A representação geométrica pode ser vista na Figura A.3, assim

$$\tilde{\beta}(\mu, \varphi; \mu', \varphi') = \tilde{\beta}(\cos \Theta).$$

Segundo [15], pode-se expandir a função de fase em Polinômios de Legendre, e portanto

$$\tilde{\beta}(\cos \Theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n P_n(\cos \Theta), \quad (3.4)$$

onde ω_n são constantes a serem determinadas com $\omega_0 = 1$, $P_0(\cos \Theta) = 1$, e na prática trunca-se

a série em um número finito de termos N .

Conforme apresentamos o termo $P_n(\cos \Theta)$ depende das variáveis $(\mu, \varphi; \mu', \varphi')$ e destas μ' e φ' são as variáveis de integração no termo integral na Eq. (3.2). Para separar essas variáveis usa-se o *Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos*, Teorema A.13. Assim,

$$P_n(\cos \Theta) = P_n(\mu)P_n(\mu') + 2 \sum_{m=1}^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\mu)P_n^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi'), \quad (3.5)$$

onde, $\mu = \cos \theta$ e $\mu' = \cos \theta'$. Veja Figura A.3. Substituindo Eq. (3.5) na Eq. (3.4), obtém-se

$$\tilde{\beta}(\cos \Theta) = 1 + \sum_{n=1}^N \omega_n \left[P_n(\mu)P_n(\mu') + 2 \sum_{m=1}^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\mu)P_n^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi') \right]. \quad (3.6)$$

Feita a decomposição do termo $P_n(\cos \Theta)$, nos Harmônicos Esféricos é preciso determinar quem são os coeficientes ω_n presentes na Eq. (3.6).

3.3 Função de Fase de Henyey-Greenstein

É conveniente ter uma fórmula analítica para expressar a função de fase, por exemplo a função de Henyey-Greenstein [36], p. 114, definida por¹

$$\tilde{\beta}(g, \Theta) = \frac{1 - g^2}{\sqrt{(1 - 2g \cos \Theta + g^2)^3}}, \quad (3.7)$$

onde g é um parâmetro que indica a média dos cossenos dos ângulos de espalhamento.

Deseja-se encontrar a expansão em série de Legendre para a função de fase definida na Eq. (3.7). Para isso observe que,

$$\frac{1 - g^2}{\sqrt{(1 - 2g \cos \Theta + g^2)^3}} = \frac{1}{\sqrt{1 - 2g \cos \Theta + g^2}} + 2g \frac{d}{dg} \frac{1}{\sqrt{1 - 2g \cos \Theta + g^2}}. \quad (3.8)$$

Usando as Eqs. (A.5) e (A.6), reescrevemos a Eq. (3.8) como

$$\frac{1 - g^2}{\sqrt{(1 - 2g \cos \Theta + g^2)^3}} = \sum_{n=0}^{\infty} g^n P_n(\cos \Theta) + 2g \frac{d}{dg} \sum_{n=0}^{\infty} g^n P_n(\cos \Theta).$$

Admitindo que a última série presente no lado direito seja uniformemente convergente, pode-se

¹A fração $\frac{1}{4\pi}$ não está sendo levada em conta, conforme referência, pois na aproximação feita no Capítulo 2, Eq. (2.7) este valor já foi considerado na Equação de Transferência Radiativa.

diferenciar termo a termo tal série, e assim

$$\frac{d}{dg} \sum_{n=0}^{\infty} g^n P_n(\cos \Theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dg} g^n P_n(\cos \Theta) = \sum_{n=1}^{\infty} n g^{n-1} P_n(\cos \Theta)$$

portanto,

$$\frac{1 - g^2}{\sqrt{(1 - 2g \cos \Theta + g^2)^3}} = \sum_{n=0}^{\infty} g^n P_n(\cos \Theta) + 2g \sum_{n=1}^{\infty} n g^{n-1} P_n(\cos \Theta).$$

Agora observe que

$$\sum_{n=0}^{\infty} g^n P_n(\cos \Theta) = 1 + g P_1(\cos \Theta) + g^2 P_2(\cos \Theta) + \dots \quad (3.9)$$

e

$$2g \sum_{n=1}^{\infty} n g^{n-1} P_n(\cos \Theta) = 2g P_1(\cos \Theta) + 4g^2 P_2(\cos \Theta) + \dots \quad (3.10)$$

Somando (3.9) e (3.10), termo a termo, tem-se

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} g^n P_n(\cos \Theta) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} n g^{n-1} P_n(\cos \Theta) &= 1 + 3g P_1(\cos \Theta) + 5g^2 P_2(\cos \Theta) + \dots \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) g^n P_n(\cos \Theta), \end{aligned}$$

assim,

$$\frac{1 - g^2}{\sqrt{(1 - 2g \cos \Theta + g^2)^3}} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (2n + 1) g^n P_n(\cos \Theta). \quad (3.11)$$

Finalmente comparando Eq. (3.11) com Eq. (3.6), conclui-se que os coeficientes desconhecidos para a expansão da função de fase em Série de Legendre, são dados por

$$\omega_n = (2n + 1) g^n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.12)$$

Substituindo tais coeficientes em (3.6), obtém-se

$$\tilde{\beta}(\cos \Theta) = 1 + \sum_{n=1}^N (2n + 1) g^n \left[P_n(\mu) P_n(\mu') + 2 \sum_{m=1}^n \frac{(n - m)!}{(n + m)!} P_n^m(\mu) P_n^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi') \right]. \quad (3.13)$$

3.4 Decomposição da Radiância e do Termo Fonte

Feita a expansão para a função de fase, faz-se a decomposição da radiância e do termo fonte, usando a Decomposição de Chandrasekhar, [19].

A radiância, como foi mostrado tem dependência de (ζ, μ, φ) . Para separar a variável azimutal φ das demais, usa-se a Decomposição de Chandrasekhar em relação a um ângulo de referência φ_0 . Dessa forma, é considerada a expansão de $L(\zeta, \mu, \varphi)$ em sua Série de Fourier em cossenos truncada, a saber

$$L(\zeta, \mu, \varphi) = L_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi), \quad (3.14)$$

onde $L_k(\zeta, \mu)$ são os coeficientes da decomposição da radiância. O mesmo método pode ser aplicado nas condições de contorno (3.3), assim

$$\begin{cases} L(0, \mu, \varphi) = \sum_{k=0}^{\tilde{N}} L_k(0, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi) = f_+(\mu) & \text{se } \mu > 0 \\ L(\zeta_0, \mu, \varphi) = \sum_{k=0}^{\tilde{N}} L_k(\zeta_0, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi) = f_-(\mu) & \text{se } \mu < 0 \end{cases}. \quad (3.15)$$

O termo fonte também é decomposto em sua Série de Fourier em cossenos truncada, portanto

$$S(\zeta, \mu, \varphi) = S_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} S_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi). \quad (3.16)$$

Substituindo as Eqs. (3.16), (3.14) e (3.13) na Eq. (3.2), obtém-se

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial \zeta} L_0(\zeta, \mu) + \mu \frac{\partial}{\partial \zeta} \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi) + L_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi) = \\ & \frac{\varpi_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \left\{ 1 + \sum_{n=1}^N \omega_n \left[P_n(\mu) P_n(\mu') + 2 \sum_{m=1}^n \kappa_n^m P_n^m(\mu) P_n^m(\mu') \cos m(\varphi - \varphi') \right] \right\} \times \\ & \left\{ L_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi') \right\} d\mu' d\varphi' + S_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} S_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi), \end{aligned}$$

onde

$$\omega_n = (2n + 1)g^n \quad \text{e} \quad \kappa_n^m = \frac{(n - m)!}{(n + m)!}. \quad (3.17)$$

Efetando o produto dos termos à direita da igualdade na equação acima e integrando

na variável $\varphi' \in (0, 2\pi)$, obtém-se

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial \zeta} L_0(\zeta, \mu) + \mu \frac{\partial}{\partial \zeta} \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi) + L_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi) = \\ & \frac{\varpi_0}{4\pi} \left[2\pi \int_{-1}^1 L^m(\zeta, \mu') d\mu' + 2\pi \sum_{n=1}^N \omega_n P_n(\mu) \int_{-1}^1 P_n(\mu') L^m(\zeta, \mu') d\mu' + 2\pi \sum_{n=1}^N \omega_n \sum_{m=1}^n \kappa_n^m \times \right. \\ & \left. P_n^m(\mu) \cos m(\varphi_0 - \varphi) \int_{-1}^1 P_n^m(\mu') L^m(\zeta, \mu') d\mu' \right] + S_0(\zeta, \mu) + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} S_k(\zeta, \mu) \cos k(\varphi_0 - \varphi). \end{aligned}$$

Para “eliminar” os termos $\cos k(\varphi_0 - \varphi)$ e $\cos m(\varphi_0 - \varphi)$ presentes na equação acima multiplica-se toda a equação por $\cos j(\varphi_0 - \varphi)$ e integra-se em $\varphi \in (0, 2\pi)$. Fazendo isto obtém-se

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial \zeta} L_0(\zeta, \mu) \int_0^{2\pi} d\varphi + \mu \frac{\partial}{\partial \zeta} \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \int_0^{2\pi} \cos k(\varphi_0 - \varphi) \cos j(\varphi_0 - \varphi) d\varphi + L_0(\zeta, \mu) \int_0^{2\pi} d\varphi + \\ & \sum_{k=1}^{\tilde{N}} L_k(\zeta, \mu) \int_0^{2\pi} \cos k(\varphi_0 - \varphi) \cos j(\varphi_0 - \varphi) d\varphi = \frac{\varpi_0}{2} \left[\int_{-1}^1 L^m(\zeta, \mu') d\mu' \times \right. \\ & \int_0^{2\pi} \cos j(\varphi_0 - \varphi) d\varphi + \sum_{n=1}^N \omega_n P_n(\mu) \int_{-1}^1 P_n(\mu') L^m(\zeta, \mu') \int_0^{2\pi} \cos j(\varphi_0 - \varphi) d\varphi d\mu' + \\ & \left. \sum_{n=1}^N \omega_n \sum_{m=1}^n \kappa_n^m P_n^m(\mu) \int_{-1}^1 P_n^m(\mu') L^m(\zeta, \mu') \int_0^{2\pi} \cos m(\varphi_0 - \varphi) \cos j(\varphi_0 - \varphi) d\varphi d\mu' \right] + \\ & S_0(\zeta, \mu) \int_0^{2\pi} d\varphi + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} S_k(\zeta, \mu) \int_0^{2\pi} \cos k(\varphi_0 - \varphi) \cos j(\varphi_0 - \varphi) d\varphi. \end{aligned}$$

Resolvendo as integrais acima e levando em conta as relações de ortogonalidade das funções trigonométricas, obtém-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial \zeta} L^m(\zeta, \mu) + L^m(\zeta, \mu) = \frac{\varpi_0}{2} \sum_{n=0}^N \omega_n \sum_{m=0}^n \kappa_n^m P_n^m(\mu) \int_{-1}^1 P_n^m(\mu') L^m(\zeta, \mu') d\mu' + S^m(\zeta, \mu), \quad (3.18)$$

onde ω_n e κ_n^m , são dados pela Eq. (3.17). As equações resultantes são equações íntegro-diferenciais nos coeficientes $L^m(\zeta, \mu)$. Será descrito agora como transformar cada uma das equações íntegro-diferenciais em um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, mediante uma aproximação do termo integral presente em cada equação. Essa aproximação é conhecida como Método das Ordenadas Discretas, S_N , sugerido por [15].

3.5 Método das Ordenadas Discretas

A Equação de Transferência Radiativa é uma equação do tipo íntegro-diferencial e, portanto, de difícil solução. Existem técnicas semi-analíticas e numéricas para a solução da mesma. Técnicas semi-analíticas, como pôde-se ver pelas páginas anteriores, muitas vezes continuam a ser soluções aproximadas, devido a simplificações e aproximações que são feitas. Dessa forma, nesses últimos anos, com o avanço da informática, técnicas numéricas de soluções foram otimizadas, obtendo-se excelentes resultados com tempos de computação reduzidos. Um método muito utilizado na literatura, é o *Método das Ordenadas Discretas*, comumente chamado de *Método S_N* , que consiste em subdividir o domínio da variável angular em um número finito de direções. Dessa forma, podemos transformar a Equação de Transferência Radiativa em um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, possível de ser resolvido por métodos analíticos ou numéricos.

O Método das Ordenadas Discretas é um meio eficiente de solução da equação de transporte. Para problemas de transporte em geometria plana, tal método é fundamentalmente uma substituição da integral referente à transferência angular por uma fórmula de quadratura.

Baseado nisso, aproximamos o termo integral associando à variável angular, na Eq. (3.18), por quadratura de Gauss-Legendre, e assim

$$\int_{-1}^1 P_n^m(\mu') L^m(\zeta, \mu') d\mu' \approx \sum_{k=1}^N P_n^m(\mu_k) L^m(\zeta, \mu_k) \bar{\omega}_k, \quad (3.19)$$

onde $\{\mu_k\}$ representa o conjunto das direções discretas, e $\{\bar{\omega}_k\}$ os pesos de quadratura, definidos por [6],

$$\bar{\omega}_k = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^N \frac{\mu - \mu_j}{\mu_k - \mu_j} d\mu.$$

A fórmula de quadratura gaussiana, amplamente usada em integração numérica, é bastante apropriada para o método das ordenadas discretas porque satisfaz o critério de simetria de direções e pesos em relação a $\mu = 0$, e os pesos, por serem sempre positivos, também satisfazem à condição da integral do fluxo angular ser positiva. Substituindo a aproximação (3.19) em (3.18), e aplicando o método da colocação das N raízes μ_k do N -ésimo Polinômio de Legendre,

obtém-se

$$\frac{d}{d\zeta} L_i^m(\zeta) + \frac{1}{\mu_i} L_i^m(\zeta) = \frac{\varpi_0}{2\mu_i} \sum_{n=0}^N (2n+1) g^n \times \\ \sum_{m=0}^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\mu_i) \sum_{k=1}^N P_n^m(\mu_k) L_k^m(\zeta) \bar{\omega}_k + \frac{1}{\mu_i} S_i^m(\zeta),$$

com $i = 1, 2, \dots, N$, e as direções μ_k são ordenadas de forma decrescente: $-1 < \mu_N < \mu_{N-1} < \dots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \dots < \mu_1 < 1$. Invertendo a ordem de soma, [15], nesta última equação obtém-se,

$$\frac{d}{d\zeta} L_i^m(\zeta) = -\frac{1}{\mu_i} L_i^m(\zeta) + \frac{\varpi_0}{2\mu_i} \sum_{n=m}^N (2n+1) \frac{(n-m)!}{(n+m)!} g^n P_n^m(\mu_i) \sum_{k=1}^N P_n^m(\mu_k) L_k^m(\zeta) \bar{\omega}_k + \frac{1}{\mu_i} S_i^m(\zeta), \quad (3.20)$$

onde $m = 0, 1, 2, \dots, N$ e $k, i = 1, 2, \dots, N$. A expressão (3.20) representa um conjunto de N equações diferenciais ordinárias de primeira ordem para $L_i^m(\zeta)$, uma para cada ponto ou nó de quadratura. Pode-se escrever a Eq. (3.20) de forma matricial, para isso faz-se

$$\mathbf{L}_+^m(\zeta) = \left[L_1^m(\zeta), L_2^m(\zeta), \dots, L_{\frac{N}{2}}^m(\zeta) \right]^T, \quad \mathbf{L}_-^m(\zeta) = \left[L_{\frac{N}{2}+1}^m(\zeta), L_{\frac{N}{2}+2}^m(\zeta), \dots, L_N^m(\zeta) \right]^T, \\ \mathbf{S}_+^m(\zeta) = \left[\frac{S_1^m(\zeta)}{\mu_1}, \frac{S_2^m(\zeta)}{\mu_2}, \dots, \frac{S_{\frac{N}{2}}^m(\zeta)}{\mu_{\frac{N}{2}}} \right]^T, \quad \mathbf{S}_-^m(\zeta) = \left[\frac{S_{\frac{N}{2}+1}^m(\zeta)}{\mu_{\frac{N}{2}+1}}, \frac{S_{\frac{N}{2}+2}^m(\zeta)}{\mu_{\frac{N}{2}+2}}, \dots, \frac{S_N^m(\zeta)}{\mu_N} \right]^T,$$

dessa forma tem-se

$$\mathbf{L}^m(\zeta) = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+^m(\zeta) \\ \mathbf{L}_-^m(\zeta) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}^m(\zeta) = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_+^m(\zeta) \\ \mathbf{S}_-^m(\zeta) \end{bmatrix}, \quad (3.21)$$

onde o sob-escrito “+” representa as direções $\mu_k > 0$ (ou $\mu_k \in \Xi_d$) e o sob-escrito “-” representa as direções $\mu_k < 0$ (ou $\mu_k \in \Xi_u$). Dessa forma escreve-se (3.20) como,

$$\frac{d}{d\zeta} \mathbf{L}^m(\zeta) = \mathbb{A}^m \mathbf{L}^m(\zeta) + \mathbf{S}^m(\zeta), \quad (3.22)$$

onde

$$\mathbb{A}_{i,j}^m = \begin{cases} -\frac{1}{\mu_i} + \frac{\varpi_0}{2\mu_i} \sum_{n=m}^N (2n+1) \frac{(n-m)!}{(n+m)!} g^n P_n^m(\mu_i) P_n^m(\mu_j) \bar{\omega}_j & \text{se } i = j \\ \frac{\varpi_0}{2\mu_i} \sum_{n=m}^N (2n+1) \frac{(n-m)!}{(n+m)!} g^n P_n^m(\mu_i) P_n^m(\mu_j) \bar{\omega}_j & \text{se } i \neq j \end{cases}, \quad (3.23)$$

com $i = 1, 2, \dots, N$. As condições de contorno associadas ao problema (3.22), são dadas por

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}_+^m(0) \\ \mathbf{L}_-^m(\zeta_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_+^m(\mu) \\ \mathbf{f}_-^m(\mu) \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

Esta exposição, será restrita ao caso $m = 0$, assim as Eqs. (3.22) e (3.23) são escritas, respectivamente, como

$$\frac{d}{d\zeta} \mathbf{L}(\zeta) = \mathbb{A} \mathbf{L}(\zeta) + \mathbf{S}(\zeta), \quad (3.25)$$

e

$$\mathbb{A}_{i,j} = \begin{cases} -\frac{1}{\mu_i} + \frac{\varpi_0}{2\mu_i} \sum_{n=0}^N (2n+1) g^n P_n^0(\mu_i) P_n^0(\mu_j) \bar{\omega}_j & \text{se } i = j \\ \frac{\varpi_0}{2\mu_i} \sum_{n=0}^N (2n+1) g^n P_n^0(\mu_i) P_n^0(\mu_j) \bar{\omega}_j & \text{se } i \neq j \end{cases},$$

onde P_n^0 representa a Função de Legendre Associada de ordem zero e grau n , ou então, Polinômio de Legendre de grau n^2 .

3.6 Propriedades da Matriz \mathbb{A}

As raízes μ_i dos Polinômios de Legendre apresentam a propriedade de serem simétricas em relação a origem, ou seja, $\mu_i = -\mu_{N+1-i}$, $i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$. Os pesos de quadratura $\bar{\omega}_i$, também apresentam simetria em relação a origem, no entanto, são todos positivos, assim $\bar{\omega}_i = \bar{\omega}_{N+1-i}$, $i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$.

²A partir daqui, será omitido o sobre-escrito ⁰, por simplicidade de notação.

Definição 3.1. A função delta de Kronecker, $\delta_{i,j}$, é definida por

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases},$$

onde $i, j \in \mathbb{N}$.

Usando a definição acima, pode-se escrever a matriz \mathbb{A} como

$$\mathbb{A}_{i,j} = \frac{1}{\mu_i} (\mathbb{B}_{i,j} - \delta_{i,j}), \quad (3.26)$$

onde

$$\mathbb{B}_{i,j} = \frac{\varpi_0}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) g^n P_n(\mu_i) P_n(\mu_j) \bar{\omega}_j.$$

Segundo [36], $\mathbb{B}_{i,j}$ são valores conhecidos e que dependem somente das IOP's, diretamente através do ϖ_0 e indiretamente dos coeficientes de $\tilde{\beta}$ e dos pesos de quadratura. Assim quem muda o sinal nas entradas da matriz \mathbb{A} é a expressão $\frac{1}{\mu_i}$, presente na Eq. (3.26). Levando em conta o exposto no início desta Seção, pode-se concluir que $\mathbb{A}_{i,j} = -\mathbb{A}_{N+1-i, N+1-j}$, para $i, j = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$. Defina agora duas matrizes \mathbb{E} e \mathbb{F} , ambas com dimensões $\frac{N}{2} \times \frac{N}{2}$, da seguinte forma

$$\mathbb{E}_{i,j} = \frac{1}{\mu_i} (\mathbb{B}_{i,j} - \delta_{i,j}) \quad \text{e} \quad \mathbb{F}_{i,j} = \frac{1}{\mu_i} \mathbb{B}_{i,j}, \quad i, j = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}.$$

Desta forma pode-se escrever a matriz \mathbb{A} em forma de matriz de blocos, ou seja,

$$\mathbb{A} = \begin{bmatrix} \mathbb{E} & -\mathbb{F} \\ \mathbb{F} & -\mathbb{E} \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Finalmente, usando a Eq. (3.21) e esta última representação para a matriz \mathbb{A} , pode-se escrever a Eq. (3.22) como

$$\frac{d}{d\zeta} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{E} & -\mathbb{F} \\ \mathbb{F} & -\mathbb{E} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{S}_+(\zeta) \\ \mathbf{S}_-(\zeta) \end{bmatrix}.$$

A referência [36] afirma que a matriz \mathbb{A} , resultante da aplicação do Método de Ordenadas Discretas, possui um conjunto **completo**³ de autovalores, sendo assim possível de diagonalizar

³Quando houver referência a um conjunto completo de autovalores, diz-se que **todos** os autovalores são distintos.

a matriz \mathbb{A} . Tal propriedade é usada para desenvolvimento deste trabalho. Na próxima Seção será feito o detalhamento desse método.

Observação 3.1. À medida que $\varpi_0 \rightarrow 1$, a matriz \mathbb{A} tem dois autovalores que tendem a zero. Quando $\varpi_0 \equiv 1$, a matriz apresenta dois autovalores complexos.

Observação 3.2. À medida que a ordem de quadratura aumenta, a matriz apresenta dois autovalores que tendem ao infinito.

Observação 3.3. As observações anteriores foram baseadas em testes numéricos. Não foi feita nenhuma demonstração matemática comprovando que tal fato ocorre sempre. Detalhes matemáticos sobre as observações feitas acima podem ser encontradas em [12].

Segundo [36], as simetrias da função fase de espalhamento, apresentadas no Capítulo 2, p. 23, são responsáveis pelos blocos anti-simétricos apresentados na Eq. (3.27). Essa estrutura da matriz, por sua vez, leva a certas simetrias nos autovalores e nos autovetores. Mobley, afirma que argumentos físicos simples convencem que esta afirmação é verdadeira.

3.7 Diagonalização

O sistema de EDO's, apresentado na Eq. (3.22), apresenta dificuldade de ser resolvido, pois as equações estão *acopladas*, ou seja, as equações envolvem mais de uma incógnita, com isso é necessário que tais equações sejam resolvidas simultaneamente. Por outro lado se pudéssemos escrever cada equação dependendo de uma única variável, então cada uma poderia ser resolvida independentemente de todas as outras, o que é uma tarefa muito mais fácil. Seguindo essa idéia, uma maneira interessante de resolver tal problema seria poder transformar o sistema num sistema de equações *desacoplado*, no qual cada equação contém apenas uma incógnita. Para que isso ocorra, é necessário transformar a matriz \mathbb{A} em uma matriz *diagonal*.

Admita que $\vec{v}^{(1)}, \dots, \vec{v}^{(N)}$ sejam os autovetores e $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ sejam os autovalores associados à matriz \mathbb{A} . Forma-se, assim, uma matriz \mathbb{P} cujas colunas são os autovetores, como tais vetores são linearmente independentes, conclui-se que $\det \mathbb{P} \neq 0$, portanto \mathbb{P} é inversível e assim \mathbb{P}^{-1} existe. Baseado nisso, pode-se concluir que

$$\mathbb{A}\mathbb{P} = \mathbb{P}\mathbb{D}, \quad (3.28)$$

onde \mathbb{D} é uma matriz diagonal contendo apenas os autovalores de \mathbb{A} . Multiplicando, à esquerda, a Eq. (3.28) por \mathbb{P}^{-1} , obtém-se

$$\mathbb{P}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{P} = \mathbb{P}^{-1}\mathbb{P}\mathbb{D} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{P}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{P} = \mathbb{D},$$

ou então

$$\mathbb{A} = \mathbb{P}\mathbb{D}\mathbb{P}^{-1}.$$

Usando a igualdade $\mathbb{A} = \mathbb{P}\mathbb{D}\mathbb{P}^{-1}$, pode-se escrever o sistema (3.22) como

$$\frac{d}{d\zeta}\mathbf{L}(\zeta) = \mathbb{P}\mathbb{D}\mathbb{P}^{-1}\mathbf{L}(\zeta) + \mathbf{S}(\zeta). \quad (3.29)$$

Admita agora a transformação $\mathbf{L}(\zeta) = \mathbb{P}\mathbf{y}(\zeta)$, então $\frac{d}{d\zeta}\mathbf{L}(\zeta) = \mathbb{P}\frac{d}{d\zeta}\mathbf{y}(\zeta)$, substituindo estas igualdades na Eq. (3.29), obtém-se

$$\mathbb{P}\frac{d}{d\zeta}\mathbf{y}(\zeta) = \mathbb{P}\mathbb{D}\mathbb{P}^{-1}\mathbb{P}\mathbf{y}(\zeta) + \mathbf{S}(\zeta),$$

multiplicando, à esquerda, ambos os lados da equação acima por \mathbb{P}^{-1} , obtém-se

$$\mathbb{P}^{-1}\mathbb{P}\frac{d}{d\zeta}\mathbf{y}(\zeta) = \mathbb{P}^{-1}\mathbb{P}\mathbb{D}\mathbb{P}^{-1}\mathbb{P}\mathbf{y}(\zeta) + \mathbb{P}^{-1}\mathbf{S}(\zeta),$$

e assim

$$\frac{d}{d\zeta}\mathbf{y}(\zeta) = \mathbb{D}\mathbf{y}(\zeta) + \mathbf{q}(\zeta), \quad (3.30)$$

onde \mathbf{q} é o produto da matriz inversa dos autovetores pelo termo fonte. A Eq. (3.30) é um sistema de N equações diferenciais ordinárias de primeira ordem *desacopladas* para y_1, \dots, y_N . A solução para esse problema é dada através do método do fator integrante, [5], e tem a forma

$$\mathbf{y}(\zeta) = e^{\mathbb{D}\zeta}\mathbf{c} + \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}(\zeta-\tau)}\mathbf{q}(\tau) d\tau. \quad (3.31)$$

Aplicando a mesma transformação, ou seja, $\mathbf{L}(\zeta) = \mathbb{P}\mathbf{y}(\zeta)$, nas condições de contorno, tem-se

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_+(\zeta) \\ \mathbf{y}_-(\zeta) \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} \tilde{\mathbb{P}}_{11} & \tilde{\mathbb{P}}_{12} \\ \tilde{\mathbb{P}}_{21} & \tilde{\mathbb{P}}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_+(\zeta) \\ \mathbf{y}_-(\zeta) \end{bmatrix},$$

onde $\mathbb{P}_{i,j}$ é a representação de cada bloco da matriz de autovetores e $\tilde{\mathbb{P}}_{i,j}$, é a representação de cada bloco da matriz inversa de autovetores. Efetuando a multiplicação matricial acima, será obtido

$$\mathbf{y}_+(\zeta) = \tilde{\mathbb{P}}_{11}\mathbf{L}_+(\zeta) + \tilde{\mathbb{P}}_{12}\mathbf{L}_-(\zeta) \quad (3.32)$$

$$\mathbf{y}_-(\zeta) = \tilde{\mathbb{P}}_{21}\mathbf{L}_+(\zeta) + \tilde{\mathbb{P}}_{22}\mathbf{L}_-(\zeta) \quad (3.33)$$

Seguindo a natureza do problema, faz-se $\mathbf{y}_+(0)$ na Eq. (3.32), e $\mathbf{y}_-(\zeta_0)$ na Eq. (3.33) e assim obtém-se

$$\mathbf{y}_+(0) = \tilde{\mathbb{P}}_{11}\mathbf{L}_+(0) + \tilde{\mathbb{P}}_{12}\mathbf{L}_-(0)$$

$$\mathbf{y}_-(\zeta_0) = \tilde{\mathbb{P}}_{21}\mathbf{L}_+(\zeta_0) + \tilde{\mathbb{P}}_{22}\mathbf{L}_-(\zeta_0)$$

Agora observe das condições de contorno (3.24), em $\zeta = 0$, que se conhece apenas as radiâncias para as direções descendentes, ou seja, para as direções cujos $\mu_i > 0$. Para os valores de $\mu_i < 0$, conhece-se os valores das radiâncias em $\zeta = \zeta_0$. Dessa forma, os valores $\mathbf{L}_-(0)$ são desconhecidos e os valores para $\mathbf{L}_+(\zeta_0)$ também são desconhecidos. A partir disso não é possível determinar os valores de $\mathbf{y}_+(0)$ e $\mathbf{y}_-(\zeta_0)$! No entanto, admita temporariamente que $\tilde{\mathbb{P}}_{11}\mathbf{L}_+(0) + \tilde{\mathbb{P}}_{12}\mathbf{L}_-(0) = \mathbf{k}_1$ e que $\tilde{\mathbb{P}}_{21}\mathbf{L}_+(\zeta_0) + \tilde{\mathbb{P}}_{22}\mathbf{L}_-(\zeta_0) = \mathbf{k}_2$, assim

$$\mathbf{y}_+(0) = \mathbf{k}_1 \quad (3.34)$$

$$\mathbf{y}_-(\zeta_0) = \mathbf{k}_2 \quad (3.35)$$

A matriz \mathbb{D} , que aparece na Eq. (3.31), é uma matriz diagonal contendo apenas os autovalores da matriz \mathbb{A} . Admita que tais autovalores estejam organizados em ordem decrescente, ou seja, $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{\frac{N}{2}} < 0 < \lambda_{\frac{N}{2}+1} < \lambda_{\frac{N}{2}+2} < \dots < \lambda_{N-1} < \lambda_N$, e que a matriz de autovetores tenha sido organizada na mesma ordem de tais autovalores. Representa-se por \mathbb{D}^- uma matriz diagonal que contém apenas os autovalores **negativos**, e por \mathbb{D}^+ , uma matriz diagonal que contém apenas os autovalores **positivos**. Dessa forma, a solução (3.31) pode ser separada em duas partes, uma contendo apenas os autovalores negativos e outra contendo

apenas os autovalores positivos, assim

$$\mathbf{y}_+(\zeta) = e^{\mathbb{D}^- \zeta} \mathbf{c}_1 + \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau \quad (3.36)$$

$$\mathbf{y}_-(\zeta) = e^{\mathbb{D}^+ \zeta} \mathbf{c}_2 + \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau. \quad (3.37)$$

Agora aplicando a condição de contorno (3.34) na Eq. (3.36), e a condição de contorno (3.35) na Eq. (3.37) tem-se, respectivamente

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_+(0) &= e^{\mathbb{D}^- 0} \mathbf{c}_1 + \int_0^0 e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau = \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{y}_-(\zeta_0) &= e^{\mathbb{D}^+ \zeta_0} \mathbf{c}_2 + \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^+(\zeta_0-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau = \mathbf{k}_2. \end{aligned}$$

Da primeira equação tira-se que

$$\mathbf{c}_1 = \mathbf{k}_1, \quad (3.38)$$

e da segunda equação temos,

$$\mathbf{k}_2 = e^{\mathbb{D}^+ \zeta_0} \mathbf{c}_2 + \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^+(\zeta_0-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau \quad \Rightarrow \quad \mathbf{c}_2 = e^{-\mathbb{D}^+ \zeta_0} \mathbf{k}_2 - e^{-\mathbb{D}^+ \zeta_0} \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^+(\zeta_0-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau,$$

portanto

$$\mathbf{c}_2 = e^{-\mathbb{D}^+ \zeta_0} \mathbf{k}_2 - \int_0^{\zeta_0} e^{-\mathbb{D}^+ \tau} \mathbf{q}(\tau) d\tau = e^{-\mathbb{D}^+ \zeta_0} \mathbf{k}_2 + \int_{\zeta_0}^0 e^{-\mathbb{D}^+ \tau} \mathbf{q}(\tau) d\tau. \quad (3.39)$$

Substituindo (3.38) em (3.36) e (3.39) em (3.37), tem-se

$$\mathbf{y}_+(\zeta) = e^{\mathbb{D}^- \zeta} \mathbf{k}_1 + \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau \quad (3.40)$$

e,

$$\mathbf{y}_-(\zeta) = e^{\mathbb{D}^+ \zeta} \left[e^{-\mathbb{D}^+ \zeta_0} \mathbf{k}_2 + \int_{\zeta_0}^0 e^{-\mathbb{D}^+ \tau} \mathbf{q}(\tau) d\tau \right] + \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau.$$

Essa última equação pode ser escrita após efetuar as devidas multiplicações

$$\mathbf{y}_-(\zeta) = e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\zeta_0)} \mathbf{k}_2 + \int_{\zeta_0}^0 e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau + \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau. \quad (3.41)$$

Teorema 3.1. *Seja f uma função integrável nos intervalos fechados $[a, b]$, $[a, c]$ e $[c, b]$, então*

$$\int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx = \int_a^b f(x) dx$$

onde $a < c < b$.

Aplicando o resultado do Teorema anterior na Eq. (3.41), obtém-se

$$\mathbf{y}_-(\zeta) = e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\zeta_0)} \mathbf{k}_2 + \int_{\zeta_0}^{\zeta} e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau. \quad (3.42)$$

Portanto, a solução para as equações desacopladas, resultantes do sistema de EDO's, (3.22) é dada pelas Eqs. (3.40) e (3.42). A solução $\mathbf{y}_+(\zeta)$, se referem às direções positivas, ($\mu > 0$) avaliadas nos autovalores negativos, (\mathbb{D}^-), e as soluções $\mathbf{y}_-(\zeta)$ se referem às direções negativas, ($\mu < 0$), avaliadas nos autovalores positivos, (\mathbb{D}^+). As soluções encontradas ainda não podem ser avaliadas em função dos comentários feitos na página 38. Para contornar este problema, é necessário voltar às variáveis originais, ou seja $\mathbf{L}_+(\zeta)$ e $\mathbf{L}_-(\zeta)$, para isso usa-se a transformação $\mathbf{L}(\zeta) = \mathbb{P} \mathbf{y}(\zeta)$. Escrevendo a matriz \mathbb{P} em forma de matrizes de blocos, tem-se

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_+(\zeta) \\ \mathbf{y}_-(\zeta) \end{bmatrix}.$$

Donde tira-se que

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{\mathbb{D}^-\zeta} \mathbf{k}_1 + \int_0^{\zeta} e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau \\ e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\zeta_0)} \mathbf{k}_2 + \int_{\zeta_0}^{\zeta} e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

ou então⁴

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta) \\ \mathbf{L}_-(\zeta) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{\mathbb{D}^-\zeta} & 0 \\ 0 & e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\zeta_0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \int_0^{\zeta} e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau & 0 \\ 0 & \int_{\zeta_0}^{\zeta} e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \mathbf{q}(\tau) d\tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \boldsymbol{\beta}_2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

⁴Na Eq. (3.44), considera-se o termo fonte $q(\tau)$ como um função escalar. A multiplicação da matriz inversa dos autovetores pelo vetor de direções, $\boldsymbol{\mu}$, a qual foi comentada na Eq. (3.30), está associados aos vetores $\boldsymbol{\beta}_1$ e $\boldsymbol{\beta}_2$.

Para determinar os valores do vetor de constantes \mathbf{k}'_s , aplica-se a condição de contorno (3.24), $\mathbf{L}_+(0)$, em (3.44), assim tem-se

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(0) \\ \mathbf{L}_-(0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-\mathbb{D}^+\zeta_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \int_{\zeta_0}^0 e^{-\mathbb{D}^+\tau} q(\tau) d\tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Agora, aplica-se a condição de contorno (3.24), $\mathbf{L}_-(\zeta_0)$ em (3.44) obtém-se

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(\zeta_0) \\ \mathbf{L}_-(\zeta_0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{\mathbb{D}^-\zeta_0} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^-(\zeta_0-\tau)} q(\tau) d\tau & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Como são conhecidos apenas os valores de $\mathbf{L}_+(0)$ e $\mathbf{L}_-(\zeta_0)$, pega-se a primeira linha do sistema (3.45) e a segunda linha do sistema (3.46), efetuando as devidas multiplicações matriciais, obtém-se um novo sistema, o qual é possível ser resolvido por algum método iterativo. Tal sistema tem a forma

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(0) \\ \mathbf{L}_-(\zeta_0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12}e^{-\mathbb{D}^+\zeta_0} \\ \mathbb{P}_{21}e^{\mathbb{D}^-\zeta_0} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{P}_{12} \int_{\zeta_0}^0 e^{-\mathbb{D}^+\tau} q(\tau) d\tau \\ \mathbb{P}_{21} \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^-(\zeta_0-\tau)} q(\tau) d\tau & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

onde pode-se escrever

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(0) \\ \mathbf{L}_-(\zeta_0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{P}_{12} \int_{\zeta_0}^0 e^{-\mathbb{D}^+ \tau} q(\tau) d\tau \\ \mathbb{P}_{21} \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^-(\zeta_0 - \tau)} q(\tau) d\tau & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_1 \\ \boldsymbol{\beta}_2 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} e^{\mathbb{D}^+ \zeta_0} \\ \mathbb{P}_{21} e^{\mathbb{D}^- \zeta_0} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{bmatrix}. \quad (3.47) \end{aligned}$$

Nesse ponto, quando se define a função $q(\tau)$, as únicas variáveis desconhecidas no sistema acima são exatamente os valores do vetor de constantes $\mathbf{k}'s$. Determinando tais valores, volta-se ao sistema (3.44), e aplica-se os valores encontrados na solução do sistema acima.

Capítulo 4

Problema Inverso

“A imaginação é mais importante que a ciência, porque a ciência é limitada, ao passo que a imaginação abrange o mundo inteiro.” (Albert Einstein)

Como comentado na introdução, um problema inverso consiste em determinar as causas baseado na observação de efeitos de certo fenômeno. Essa relação causa-efeito pode ser representada matematicamente por $\mathcal{F}(\vec{u}) = \vec{y}$, onde $\vec{u} \in \mathbb{U}$ representando as causas, $\vec{y} \in \mathbb{Y}$ os efeitos, e \mathcal{F} representa um operador matemático.

Segundo [48], no problema direto, aplicam-se as leis conhecidas da físicas, utilizando parâmetros conhecidos (causas) para calcular a solução (efeitos). No problema inverso, faz-se exatamente o contrário, ou seja, a partir dos efeitos conhecidos tenta-se estimar os parâmetros ou funções que provocaram esses efeitos.

Segundo [51], um problema inverso é definido matematicamente como mal-posto (*ill-posed*), se não assegura a existência, unicidade ou estabilidade da solução. Isso faz com que problemas inversos sejam de difícil tratamento matemático. Na Figura 4.1, foi mostrado uma representação gráfica de problema direto \times problema inverso.

Quando se trabalha com problemas lineares, discretos e finitos, o operador \mathcal{F} se reduz a uma matriz $m \times n$, onde m é a quantidade de valores observados/medidos armazenados num vetor $\vec{y} = [y_1, y_2, \dots, y_m]^T$, e n é o número de parâmetros a serem estimados no vetor

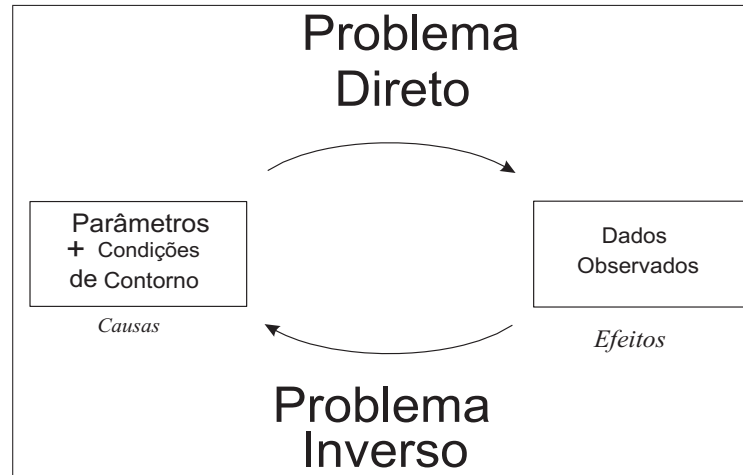


Figura 4.1: Representação Gráfica. Problema Direto e Problema Inverso. FONTE: adaptado de [48].

$\vec{u} = [u_1, u_2, \dots, u_n]^T$. Quando $m = n$, basta resolver o sistema $\mathbb{A}\vec{u} = \vec{y}$. Se $m > n$, então o sistema é sobredeterminado, ou seja, há mais dados que parâmetros a serem estimados. Nesse caso, a solução pode ser encontrada via mínimos quadrados, que consiste em estimar uma solução \vec{u} , de forma que o quadrado da norma euclidiana do resíduo $(\vec{y} - \mathbb{A}\vec{u})$ seja mínimo [48]. Ou seja,

$$\vec{u} = \min \|\vec{y} - \mathbb{A}\vec{u}\|_2^2 = \min \mathcal{J}(\vec{u}),$$

onde $\mathcal{J}(\vec{u})$ é a função objetivo.

Se o problema for *explícito*, pode-se derivar a função objetivo em relação a u_k , $k = 1, 2, \dots, n$ e igualar a zero, assim obtém-se:

$$\mathbb{A}^T \mathbb{A} \vec{u} = \mathbb{A}^T \vec{y}.$$

A solução desse sistema linear \vec{u} é o minimante da função objetivo.

Neste trabalho, o operador \mathcal{F} é não-linear discreto, representando a solução do problema direto da equação íntegro-diferencial descrita pela Eq. (3.2), por algum método numérico. Dessa forma, por não haver uma expressão analítica para achar a solução, devemos adotar um método *implícito* para a resolução do problema inverso, no qual buscamos encontrar a solução do problema de modo iterativo, caracterizando, assim um, problema de otimização da função objetivo.

Admitindo que $\vec{y} = \vec{y}_{\text{exp}}$ e $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{y}_{\text{mod}}$, dois vetores com o mesmo número de entradas, a

função objetivo pode ser escrita como

$$\mathcal{J}(\vec{x}) = \min \sum_{i=1}^n \|\vec{y}_{\text{exp}} - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2, \quad (4.1)$$

onde \vec{y}_{exp} representa os dados experimentais e, \vec{y}_{mod} representa o resultado numérico do “modelo direto” para alguma solução candidata \vec{x} .

Sabendo que problemas inversos são mal-postos, a solução \vec{x} da função objetivo, Eq. (4.1), na grande maioria das vezes, é instável, onde pequenas variações em \vec{y}_{exp} resultam em grande variação em \vec{x} . Apesar de obtermos diferentes soluções para \vec{x} , todas elas ajustam os dados observacionais, dentro de uma precisão numérica adequada. Para contornar esse problema, são buscadas soluções com maior suavidade, ou regularidade, ou estabilidade que ajuste os dados. Serão feitos mais comentários sobre tais técnicas na Seção 4.2.

4.1 Formulação do Problema Inverso

Estabelecido o problema direto da Óptica Hidrológica, isto é, a distribuição do campo luminoso a partir do conhecimento das propriedades óticas do meio, bem como das condições de contorno, às quais está sujeito o meio sob o qual a luz se propaga, o correspondente problema inverso surge quando queremos determinar propriedades físicas, fontes internas e/ou condições de contorno precisam ser estimadas a partir do conhecimento de medidas radiométricas tomadas no interior da camada de água.

Segundo [42], em águas oceânicas, a não-unicidade do problema inverso pode ser abordada da seguinte forma: em uma determinada região, a porção de água até uma determinada profundidade apresenta um conjunto de propriedades óticas (IOP's) e uma distribuição de radiância L_1 conhecida sob a água. Quando mudamos as condições de fronteira, como a direção dos ventos ou a posição do sol sobre a superfície da água, ocorre alguma mudança na distribuição de radiância que passará a ser $L_2 \neq L_1$, embora as IOP's continuem as mesmas. A partir disso, podemos formular um problema inverso da seguinte forma: é possível recuperar estas IOP's conhecendo essa variação na distribuição do campo de luz? Admitindo que tivesse ocorrido alguma alteração nas IOP's, pode-se determinar se a variação no campo de luz foi provocada pela mudança nas condições de fronteira ou nas próprias propriedades do meio?

A não estabilidade desse tipo de problema inverso mostra que pequenos erros nas medidas radiométricas podem levar a enormes erros nas propriedades do meio, ou até mesmo a resultados sem significado físico [36].

Nos últimos anos, varias metodologias de inversão para problemas inversos em transferência radiativa tem sido importante tópico de pesquisa em muitos campos da ciência e da engenharia [32].

Nestes últimos anos, vários estudos voltados à Óptica Hidrológica têm sido publicados. A determinação de fontes de bioluminescência emitidas por organismos marinhos foi assunto de [49]. Estimção de fontes de bioluminescência e condições de contorno, foi trabalho de [42, 43, 8, 9, 7]. Estimção de IOP's, encontra-se [48].

Baseado no trabalho de [42], onde o problema direto foi resolvido através do método $\mathcal{L}TS_N$, o qual estimou fontes internas e condições de contorno, o presente trabalho segue a mesma linha, ou seja, estimar fontes internas de bioluminescência e condições de contorno, no entanto utilizando o Método das Ordenadas Discretas, e após a diagonalização da matriz resultante da aplicação de tal método.

A formulação apresentada na Eq. (3.44) é valida para qualquer fonte $q(\tau) \in C^1[0, \zeta_0]$, onde C^1 representa o conjunto de todas as funções que têm pelo menos a primeira derivada contínua. Quando resolve-se um problema direto, o termo $q(\tau)$ é conhecido, e como comentado no Capítulo 3, basta resolver as integrais que aparecem no sistema (3.44) e determinar as constantes usando as condições de iniciais/contorno.

No problema inverso, o termo $q(\tau)$, chamado *termo fonte*, pode ser substituído por alguma outra função, onde tentamos determinar algum parâmetro que represente a função $q(\tau)$ utilizada no problema direto. Neste trabalho, será substituído o termo fonte por uma Série de Fourier do tipo

$$q(\tau) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}}, \quad (4.2)$$

onde $\{a_i\}_{i=0,1,2,\dots,\infty}$ representa os coeficientes de Fourier, e \tilde{L} representa o período na série. Na prática, trunca-se a série em um número finito de termos \tilde{n} .

Usando tal função no sistema (3.44), obtém-se as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_+(\zeta) = & \mathbb{P}_{11}e^{\mathbb{D}^-\zeta}\mathbf{k}_1 + \mathbb{P}_{12}e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\zeta_0)}\mathbf{k}_2 + \mathbb{P}_{11} \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\tilde{n}} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}} \right] d\tau \boldsymbol{\beta}_1 + \\ & + \mathbb{P}_{12} \int_{\zeta_0}^\zeta e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\tilde{n}} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}} \right] d\tau \boldsymbol{\beta}_2, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_-(\zeta) = & \mathbb{P}_{21}e^{\mathbb{D}^-\zeta}\mathbf{k}_1 + \mathbb{P}_{22}e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\zeta_0)}\mathbf{k}_2 + \mathbb{P}_{12} \int_0^\zeta e^{\mathbb{D}^-(\zeta-\tau)} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\tilde{n}} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}} \right] d\tau \boldsymbol{\beta}_1 + \\ & + \mathbb{P}_{22} \int_{\zeta_0}^\zeta e^{\mathbb{D}^+(\zeta-\tau)} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\tilde{n}} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}} \right] d\tau \boldsymbol{\beta}_2. \end{aligned}$$

Aplicando as condições de contorno (3.24) nas equações acima, será obtido

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{L}_+(0) \\ \mathbf{L}_-(\zeta_0) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{12} \int_{\zeta_0}^0 e^{\mathbb{D}^+\tau} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\tilde{n}} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}} \right] d\tau \boldsymbol{\beta}_1 \\ \mathbb{P}_{21} \int_0^{\zeta_0} e^{\mathbb{D}^-(\zeta_0-\tau)} \left[\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\tilde{n}} a_k \cos \frac{k\pi\tau}{\tilde{L}} \right] d\tau \boldsymbol{\beta}_2 \end{bmatrix} = \\ = \begin{bmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12}e^{\mathbb{D}^+\zeta_0} \\ \mathbb{P}_{21}e^{\mathbb{D}^-\zeta_0} & \mathbb{P}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{bmatrix}. \quad (4.3) \end{aligned}$$

Há o surgimento do seguinte problema: os coeficientes $\{a_i\}_{i=1,2,\dots,\tilde{n}}$ são desconhecidos, pois se está tentando estimar o termo fonte, e o vetor de constantes \mathbf{k} também é desconhecido! Então, torna-se impossível resolver o sistema acima por qualquer método numérico que não seja baseado em otimização.

De frente desse problema, resolve-se o problema inverso de duas maneiras. Uma delas consiste em deixar a encargo da rotina de otimização a determinação do valor de todas as constantes, e a outra consiste em usar os valores dos coeficientes de contorno que retornaram do problema direto, e assim, as únicas constantes que a rotina determinaria seriam as referentes aos coeficientes da série. Em ambos os casos, a solução é baseada na minimização do funcional

$$\mathcal{J}(\vec{x}) = \min \sum_{i=1}^n \|\vec{y}_{\text{exp}} - \mathbb{A}\vec{x}\|_2^2, \quad (4.4)$$

onde \vec{x} é um vetor de constantes que contém as constantes k , e os coeficientes da expansão em série, no primeiro caso. Observe que isso é possível, pois a segunda expressão do lado esquerdo da Eq. (4.3) representa uma soma, portanto, não há nenhum problema quanto às dimensões dos vetores apresentados no funcional (4.4). Portanto, atribui-se uma estimativa inicial para tais valores desconhecidos, e então resolve-se o sistema. Caso a estimativa inicial não seja adequada, a rotina de otimização se encarrega de determinar uma nova estimativa. Para o segundo caso, procede-se da mesma forma, ou seja, dando um chute inicial para as constantes da série. O processo, em ambos os casos, para quando o valor mínimo do funcional for atingido.

No primeiro caso, o sistema sempre apresentará solução para qualquer estimativa inicial, pois quem determina se existe ou não solução para o sistema é a matriz de autovetores que aparece no lado direito da Eq. (4.3)! Para mais detalhes, com exemplos, ver Capítulo 5.

4.2 Técnicas de Regularização

Seria bom se fossem conhecidos os valores exatos de \vec{y}_{exp} . Mas isto na prática não ocorre, devido a erros de medição, imprecisão dos aparelhos utilizados, etc. Então o que se conhece, na realidade, são os valores de \vec{y}_{exp} perturbados com algum nível de ruído, δ , conforme comentado na introdução. Assim, são conhecidos, na realidade, os valores aproximados de \vec{y}_{exp} , que chamaremos de $\vec{y}_{\text{exp}}^\delta$. Essa pequena perturbação nos dados experimentais torna sensível o problema inverso, e com isto, o cálculo de uma solução aproximada significativa e estável desse sistema geralmente requer que seja substituído por outro sistema próximo e que seja muito menos sensível às perturbações. A essa substituição dá-se o nome de regularização.

Baseado nisso, em vez de minimizar o funcional definido em (4.1), minimiza-se o seguinte funcional

$$\mathcal{J}(\vec{x}) = \min \sum_{i=1}^n \|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2 + \gamma \Omega(\vec{x}), \quad (4.5)$$

onde γ é um escalar positivo, chamado de *parâmetro de regularização*, e Ω é um operador matemático, chamado *operador de regularização*.

Como comentado no início deste capítulo, o acréscimo do termo $\gamma \Omega(\vec{x})$ ao funcional tem a finalidade de ajustar os dados com maior suavidade, ou regularidade, ou estabilidade. A referência [48] afirma que existem três maneiras de obter um bom resultado para a solução do

problema com tal/tais características.

A primeira é impor uma restrição às soluções candidatas, de modo que se admitam somente aquelas que atendam a um critério de suavidade. Logo, pode-se minimizar o funcional (4.1), que pode ser escrito como

$$\mathcal{J}(\vec{x}) = \min \sum_{i=1}^n \|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2 \quad \text{sujeito a} \quad \|\Omega(\vec{x})\|_2^2 \leq \rho^2, \quad (4.6)$$

onde ρ é o grau de tendenciosidade máximo, ou suavidade máxima. Esse é o caso onde há máximo ajuste dos dados, isto é, ajuste quase exato para uma determinada suavidade, onde se escolhe \vec{x} de modo a solucionar o problema dado pela Eq. (4.6).

De forma análoga, uma outra abordagem, pode-se escolher uma solução que minimize $\|\Omega(\vec{x})\|_2$ para $\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2 \leq \varepsilon$, onde ε é o erro máximo permitido no ajuste dos dados. Neste caso existe uma máxima suavidade da solução, sujeito aos dados experimentais a serem ajustados dentro de uma precisão menor ou igual aos erros.

$$\mathcal{J}(\vec{x}) = \min \|\Omega(\vec{x})\|_2^2 \quad \text{sujeito a} \quad \|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2 \leq \varepsilon^2.$$

E, por fim, uma terceira abordagem que encontre \vec{x} , de modo que ambas as restrições sejam satisfeitas, isto é,

$$\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2 \leq \varepsilon \quad \text{e} \quad \|\Omega(\vec{x})\|_2 \leq \rho, \quad (4.7)$$

que é equivalente a resolver o problema (4.5).

O valor de γ deve ser escolhido de forma que atenda ao compromisso entre suavidade×ajuste dos dados, isto é, não pode ser tão alto que suavize demais, nem tão baixo que pouco regularize a solução.

4.2.1 Regularização de Tikhonov

A regularização de Tikhonov é um dos mais populares métodos de regularização para problemas mal-postos. O início desse estudo deu-se por volta da década de 40 a 50, por A. N. Tikhonov. Segundo [42], Tikhonov iniciou suas investigações a respeito do mal-condicionamento de um problema inverso associado ao problema de Cauchy para a equação de Laplace, formulando o problema inverso como um problema de otimização. Detalhes dessa

regularização podem ser encontradas em [55, 28, 38, 37, 51].

Existem três tipos de regularização de Tikhonov, as quais são:

1. Regularização de ordem zero, a qual é definida matematicamente por

$$\Omega(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{\alpha} x_i^2.$$

Esta leva em conta a magnitude dos elementos de \vec{x} ;

2. Regularização de Tikhonov de primeira ordem, ou ordem um, a qual considera uma aproximação da primeira derivada de \vec{x} , e é definida por

$$\Omega(\vec{x}) = \sum_{i=2}^{\alpha} (x_i - x_{i-1})^2,$$

3. Regularização de Tikhonov de segunda ordem, ou ordem dois, definida por

$$\Omega(\vec{x}) = \sum_{i=2}^{\alpha-1} (x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1})^2, \quad (4.8)$$

a qual considera uma aproximação da segunda derivada de \vec{x} .

A constante α representa o número total de parâmetros/variáveis a serem regularizadas.

4.3 Escolha do Parâmetro de Regularização

A escolha do parâmetro de regularização não segue critérios analíticos exatos, pode-se, assim, qualificar tal escolha como um procedimento de tentativa e erro. Em geral procede-se a inversão do problema para vários valores de γ e avalia-se qual é o valor mais adequado em função da suavidade da solução inversa. De um modo geral, valores muito altos para γ fornecem curvas muito suaves (excessivamente lisas), tendendo a perder consistência com os dados do problema. Por outro lado, valores muito baixos para γ eliminam a influência da regularização, levando a distribuições irregulares na solução do problema. Dentre os métodos de escolha de tal parâmetro citaremos dois: O *Princípio da Discrepância de Morozov* e o *Método de Hansen*.

Os valores de γ a serem testados aumentam com um passo logarítmico, da seguinte forma:

1. Minimiza o funcional (4.5) com $\gamma_0 = 0$, e salva o valor de $\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2$;
2. Inicia um contador, $i = 1$, e atribui-se um valor para $\gamma_1 \rightarrow 0$ e um valor final para $\gamma = \gamma_f$;
3. Minimiza o funcional (4.5) para γ_i ;
4. Salva os valores de γ_i , $\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2$ e $\Omega(\vec{x})$;
5. Faz-se, $\gamma_{i+1} = \gamma_i \cdot 10^{\frac{1}{10}}$, testa se $\gamma_{i+1} \leq \gamma_f$. Se sim, volta ao item 3, caso contrário,
6. Fim.

O termo $\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2$ é chamado de *fidelidade*, e o termo $\Omega(\vec{x})$ é chamado de *suavidade*. O gráfico resultante, em escala log-log, de tal algoritmo é mostrado na Figura 4.2.

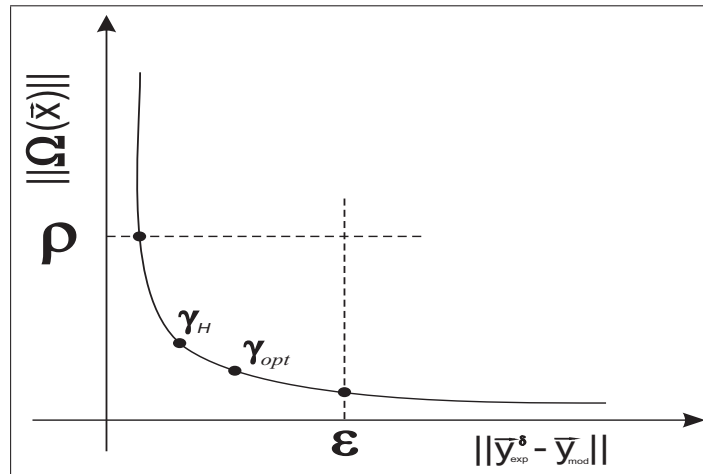


Figura 4.2: Gráfico da curva $\|\Omega(\vec{x})\| \times \|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2$. FONTE: adaptado de [48].

O passo logarítmico para a busca de $\gamma(\varepsilon)$ se justifica através da Figura 4.2, que recebe o nome de *curva-L*. Observe que em intervalos da curva-L mais próximos ao eixo vertical, uma pequena variação de γ resulta em grande variação no valor de $\|\Omega(\vec{x})\|$. O mesmo ocorre com relação a $\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2$, para os intervalos da curva-L mais próximos do eixo horizontal. Portanto, o passo logarítmico ameniza o efeito dessas variações bruscas nesses intervalos críticos, tornando a busca de $\gamma(\varepsilon)$ mais eficiente. O valor de γ_{opt} é encontrado através do Princípio da Discrepância de Morozov e o valor de γ_H é pelo método de Hansen.

4.3.1 Princípio da Discrepância de Morozov

O Princípio da Discrepância de Morozov, [37, 48], é baseado na busca de um $\gamma(\varepsilon)$, tal que $\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2 = \varepsilon$. Parte-se do pressuposto de que o erro ε^2 para $\gamma = \gamma(\varepsilon)$, conseqüente

de ruído nos dados observados, é corretamente estimado. Para o caso em que os dados experimentais estão contaminados por ruído aditivo, independente e gaussiano, o valor esperado do resíduo é dado por

$$E(\varepsilon^2) = E(\|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{mod}}\|_2^2) = \sum_{i=1}^m \delta^2 = m\delta^2,$$

onde δ representa o ruído nos dados, e m o número de dados observados/medidos. Portanto, tendo uma estimativa para ε^2 , pode-se fazer a busca da solução utilizando o critério de Morozov. Um algoritmo para busca do parâmetro de regularização, utilizando tal método, pode ser encontrado em [48].

A aplicação desse método produz a curva apresentada da Figure 4.2, no entanto, o valor ótimo de γ é determinado pela Eq. (4.7).

4.3.2 Método de Hansen

O valor de γ_H , mostrado na Figura 4.2, corresponde a um método de busca de γ , localizado no ponto da curva onde sua curvatura é máxima. A escolha recai nesse ponto, pois é onde se dá a relação mais equilibrada de suavidade \times ajuste dos dados (fidelidade), e onde a variação de γ é reduzido. Tal método é denominado *Método de Hansen*, ou método da curva-L, o qual não requer nenhuma informação prévia da solução \vec{x} a ser estimada, nem qualquer informação da discrepância dos valores obtidos com a solução \vec{x} encontrada.

Apesar de não existirem resultados teóricos rigorosos que provem a eficiência dessa metodologia, as experiências mostradas em [26] demonstram a robustez de tal método.

Capítulo 5

Simulações Numéricas

“Os números governam o mundo.” (Platão)

O problema trabalho aqui é formulado como apresentado na Eq. (3.44) para o problema direto, onde o termo fonte $q(\zeta)$ usado é dado pela seguinte expressão

$$q(\zeta) = \kappa \left(-\frac{4\zeta^2}{\zeta_0^2} + \frac{4\zeta}{\zeta_0} \right), \quad (5.1)$$

onde ζ_0 representa a profundidade máxima, κ é um escalar com a finalidade de “dosar” a intensidade da função fonte. A representação gráfica para tal função é mostrada na Figura 5.1. O valor de κ que aparece na Eq. (5.1) foi adotado $\kappa = 0.25$ para todos os casos de teste, fazendo assim com que em todos os casos a intensidade da fonte não ultrapasse tal valor. O valor para o albedo de espalhamento simples, ϖ_0 , adotado foi $\varpi_0 = 0.9$, e o termo g , presente na função de fase de Henyey-Greenstein, foi adotado com sendo $g = 0.9$.

5.1 Parâmetros Utilizados no Problema Direto e no Problema Inverso

Para resolução de tal trabalho, foram feitos vários modelos. Dentre esses, foram escolhidos alguns casos para estudo. A Tabela 5.1, apresenta os valores dos parâmetros utilizados. De posse dessas informações, foram selecionados os casos de estudo conforme mostrado na Tabela 5.2.

As condições de contorno foram consideradas constantes, para as direções conhecidas,

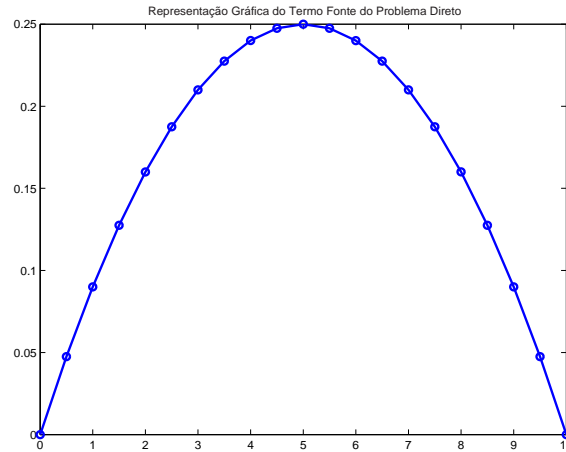


Figura 5.1: Representação gráfica do termo fonte utilizado no Problema Direto.

Tabela 5.1: Parâmetros utilizados no Problema Direto e Problema Inverso, para a geração do banco de dados de estudo.

Ordem de quadratura N	Profundidade (m)	Pontos de Observação	Termos na Série	Ruído nos Dados
20	5	6 e 11	3 a 15	5% e 10%
	10	11 e 21		
	15	16 e 31		
40	5	6 e 11	3 a 15	5% e 10%
	10	11 e 21		
	15	16 e 31		

Tabela 5.2: Casos de estudo para o Problema Direto e o Problema Inverso.

Ordem de quadratura N	Profundidade (m)	Pontos de Observação	Termos na Série	Ruído nos Dados
20	5	6 e 11	8	10%
	10	11 e 21		
	15	16 e 31		

ou seja,

$$\begin{cases} L_+(0) = 3.0 \\ L_-(\zeta_0) = 0.0 \end{cases} \quad (5.2)$$

A minimização do funcional apresentado na Eq. (4.1) deu-se através das radiâncias como dado de inversão. Na Tabela 5.3, são apresentadas as abreviaturas da legenda nas figuras.

Tabela 5.3: Abreviaturas na legenda das figuras.

Exa	Valor Exato
Est	Valor Estimado
Est ^{SRu}	Valores Estimados Sem Ruído nos Dados
Est ^{CRu}	Valores Estimados Com Ruído nos Dados
Est ^{CRe}	Valores Estimados Com Regularização
Est ^{§Re}	Valores Estimados Sem Regularização

5.2 Resultados do Problema Direto

No problema direto, o único termo que afeta a solução para cada caso é a profundidade e os pontos de observação, para cada ordem de quadratura escolhida. Não serão apresentadas aqui, todas as figuras dos casos testes. Serão apresentadas apenas quatro gráficos para ilustrar a solução obtida.

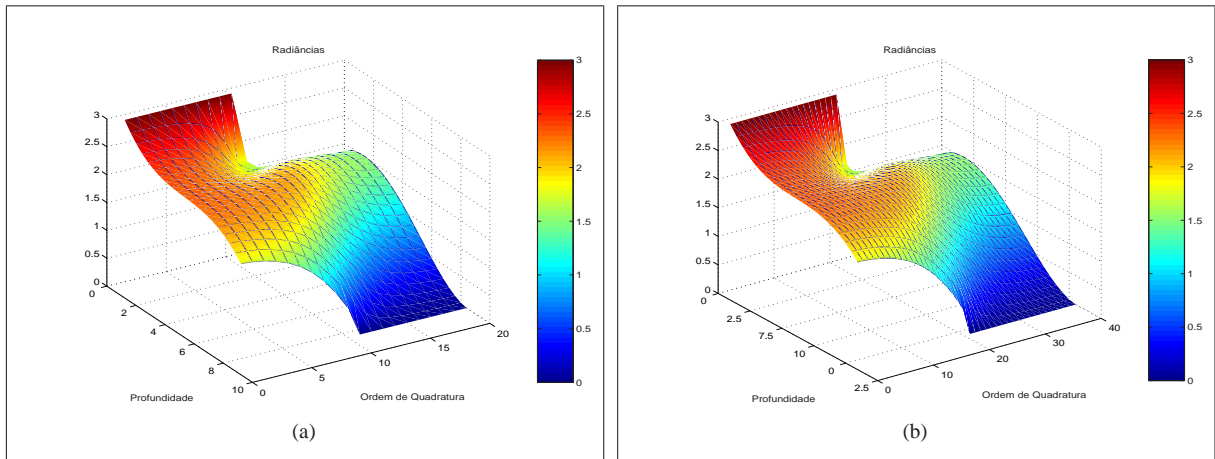


Figura 5.2: Radiâncias calculadas pelo modelo direto, usando a fonte parabólica, com 10 m de profundidade e 21 observações. (a) com ordem de quadratura $N = 20$. (b) com ordem de quadratura $N = 40$.

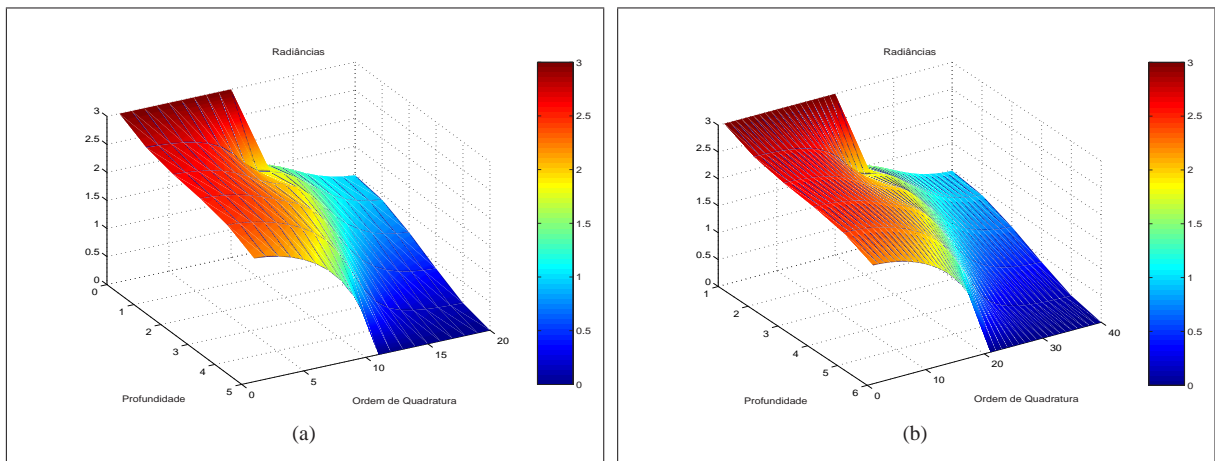


Figura 5.3: Radiâncias calculadas pelo modelo direto, usando a fonte parabólica, com 5 m de profundidade e 6 observações. (a) com ordem de quadratura $N = 20$. (b) com ordem de quadratura $N = 40$.

Como podemos observar, para mesma ordem de quadratura e mesma profundidade, mesmo com diferentes pontos de observação, os gráficos são “praticamente” idênticos. A influência dos pontos de observação afeta o problema inverso, que será comentado mais adiante.

5.3 Problema Inverso sem Ruído nos Dados

O primeiro passo ao se resolver um problema inverso, é resolve-lo usando os dados exatos. Isso só é possível quando se trabalha com dados sintéticos, ou seja, dados obtidos por meio de computador, que é o caso do presente trabalho. Os dados (radiâncias) utilizadas como dados de inversão foram obtidos através da solução da Equação de Transferência Radiativa em computador, simulando, assim, possíveis medidas radiométricas obtidas *in situ*. Foram adotados dois métodos de estimativa: estimativa simultânea de fronteira e fonte, e estimativa somente da fonte.

5.3.1 Estimativa de Fronteira e da Fonte

Em todos os casos testados, fazendo estimativa de fronteira e fonte, com dados de inversão **sem** ruído, as inversões ocorreram, isto é, a fronteira e a fonte foram reconstruídas. A reconstrução não foi “boa”, da fonte, apenas nos casos em que foram utilizados poucos termos na série (3 ou 4) e poucos pontos de observação (6 observações para 5 metros), mesmo assim o funcional $\mathcal{J}(\vec{x}) \rightarrow 0$. Nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6 é apresentada a reconstrução da fonte, e nas Figuras 5.7, 5.8 e 5.9 são apresentadas as fronteiras recuperadas.

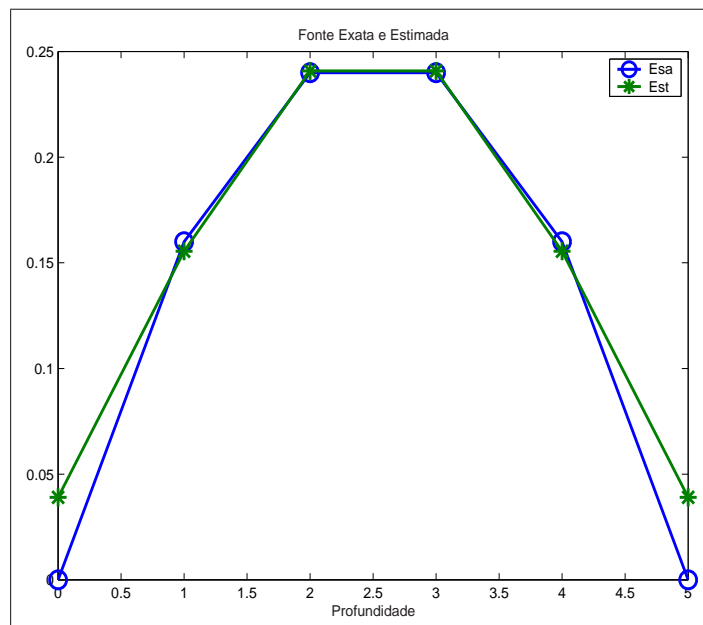


Figura 5.4: Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

Observe que as Figuras 5.5 e 5.6 apresentam a mesma reconstrução, mesmo para pro-

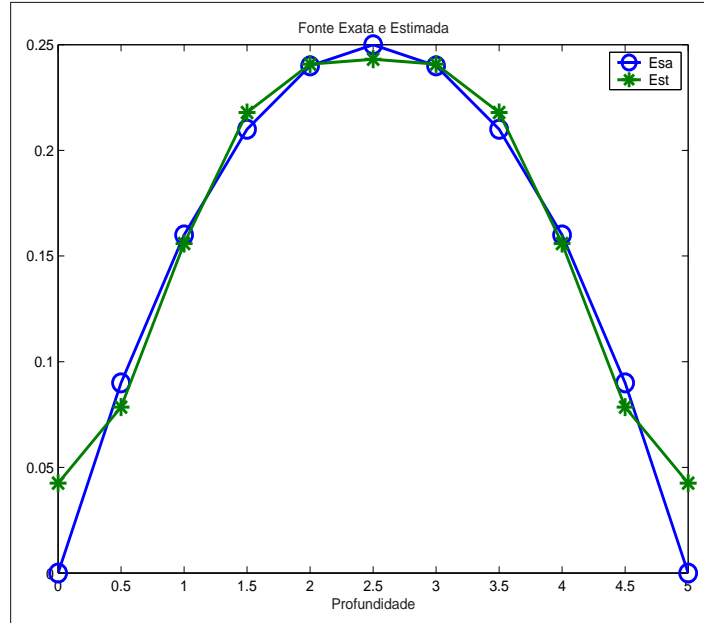


Figura 5.5: Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

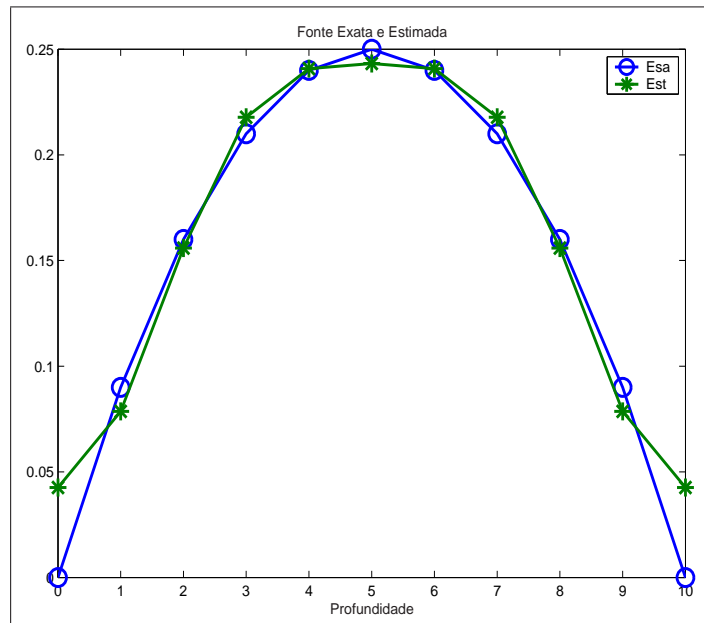


Figura 5.6: Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

fundidades distintas. O que está influenciando é o número de observações que foram feitas. Já nas Figuras 5.7, 5.8 e 5.9, são apresentadas as respectivas fronteiras recuperadas para as fontes apresentadas nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6.

Nas Figuras 5.10, 5.11 e 5.12 são apresentados os mesmos casos mostrados nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6, no entanto, com 8 termos na série.

Nas Figuras 5.13, 5.14 e 5.15 são apresentadas as fronteiras recuperadas para os casos

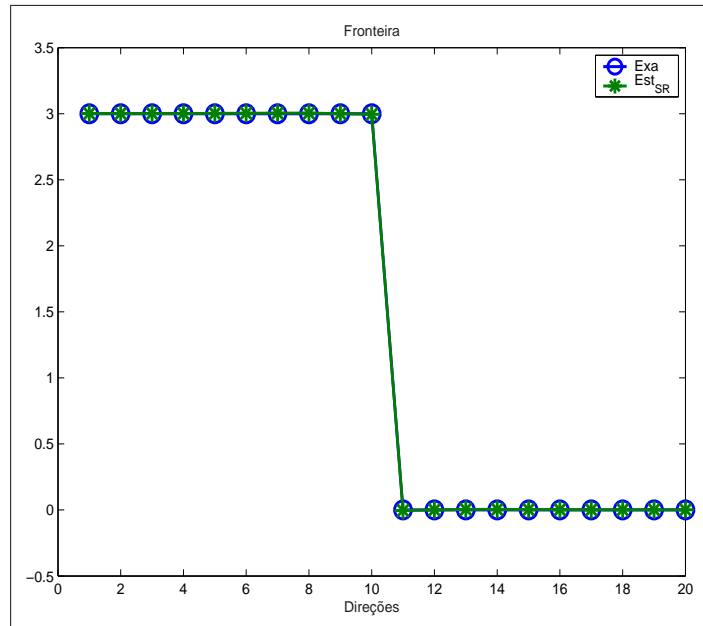


Figura 5.7: Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

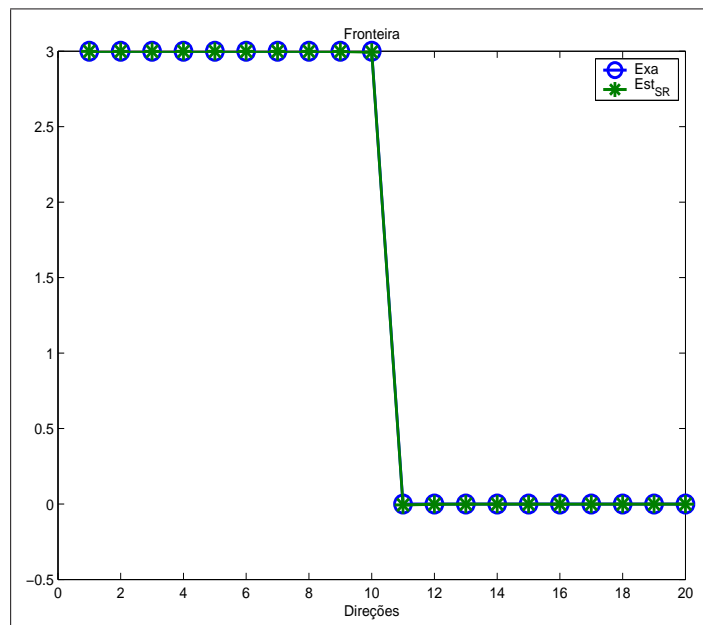


Figura 5.8: Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

de fonte, respectivamente, mostrados nas Figuras 5.10, 5.11 e 5.12. Como se pode observar, aparentemente, o número de termos na série não influencia a reconstrução das fronteiras.

Como falado anteriormente, os casos aqui mostrados tratam-se dos “piores” casos, (Figuras 5.4, 5.5 e 5.6), onde a reconstrução não foi boa, comparada com os demais casos (Figuras 5.10, 5.11 e 5.12) e, mesmo assim, temos uma “boa” aproximação para a fonte e a fronteira. Deve-se observar também que o número de termos na série afeta a reconstrução das fontes.

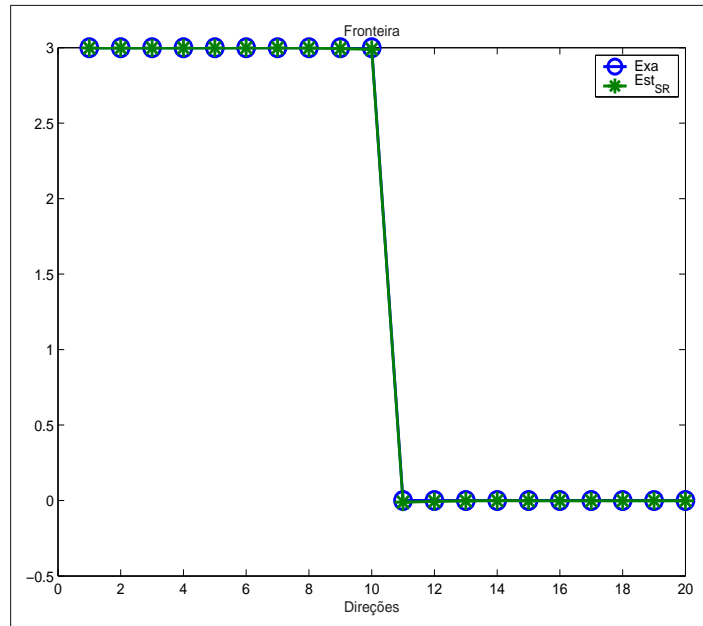


Figura 5.9: Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 3 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

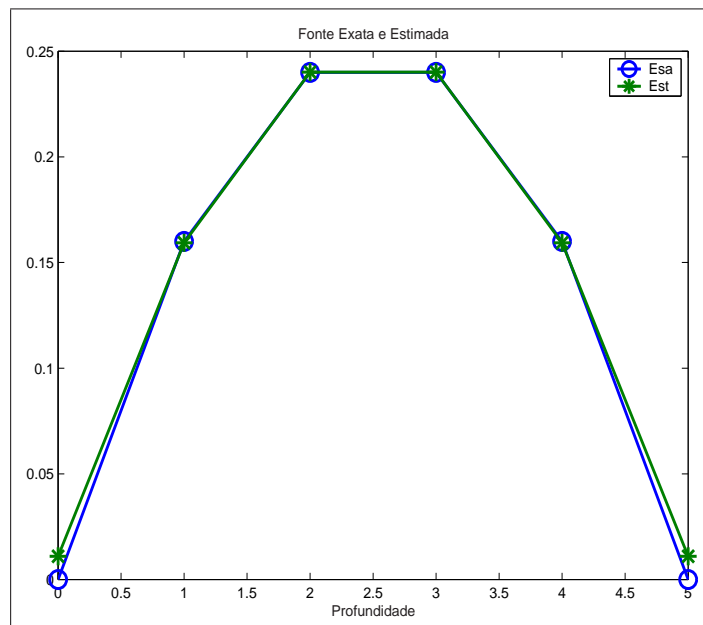


Figura 5.10: Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

Sabe-se que, na prática, não se tem disponíveis os valores exatos das radiâncias, e sim, valores aproximados. Para simular tal situação, adiciona-se uma pequena perturbação nos dados resultantes da solução da Equação de Transferência Radiativa. Na próxima Seção, será tratado disso e serão apresentados os resultados de inversão obtidos com esses dados perturbados.

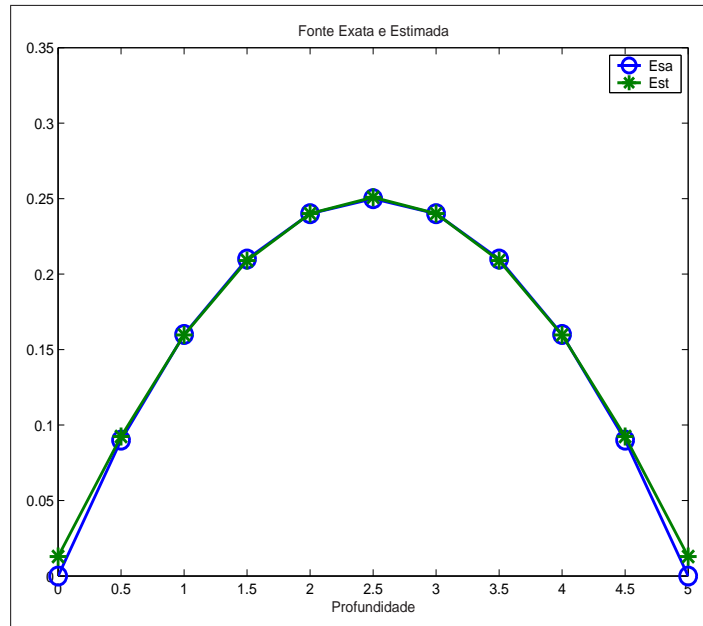


Figura 5.11: Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

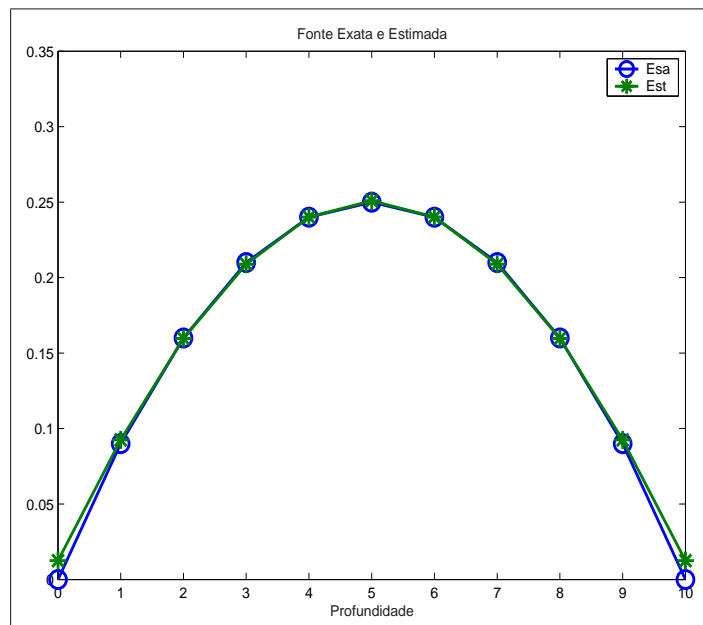


Figura 5.12: Fonte recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

5.4 Problema Inverso com Ruído nos Dados e a Técnica de Regularização

Como citado anteriormente, todos os problemas foram resolvidos usando as radiâncias como dados de inversão. Tais valores foram obtidos através de computador (sinteticamente) e acrescidos de um nível de ruído gaussiano de 10%. A otimização do problema inverso foi feita de modo iterativo, usando como rotinas de otimização a Biblioteca NAG, a qual resolve tais problemas de otimização baseado na minimização do funcional definido na Eq. (4.1), sujeito a

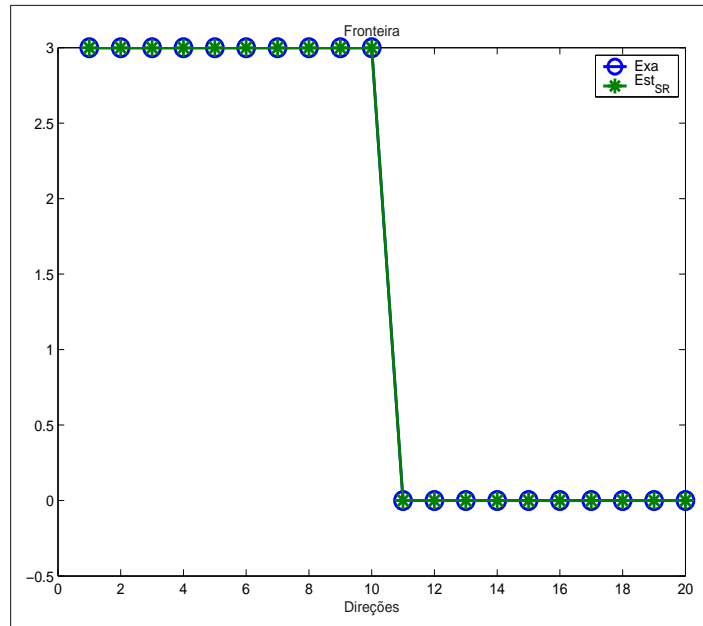


Figura 5.13: Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

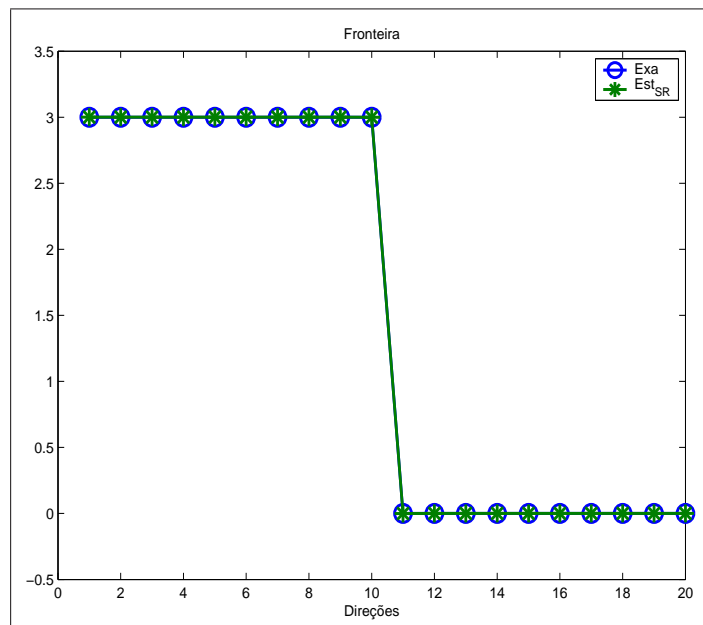


Figura 5.14: Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

restrições para os valores do vetor \vec{x} a ser encontrado.

A técnica de regularização adotada foi a de Tikhonov de ordem 2, e a busca do parâmetro de regularização foi baseada no princípio da curva-L, ou Método de Hansen, conforme definido na Seção 4.3.2. Primeiramente buscou-se minimizar o funcional definido pela Eq. (4.1), para dados de entrada sem ruído (resultados mostrados anteriormente), e posteriormente o funcional definido da Eq. (4.5), para dados de entrada com ruído.

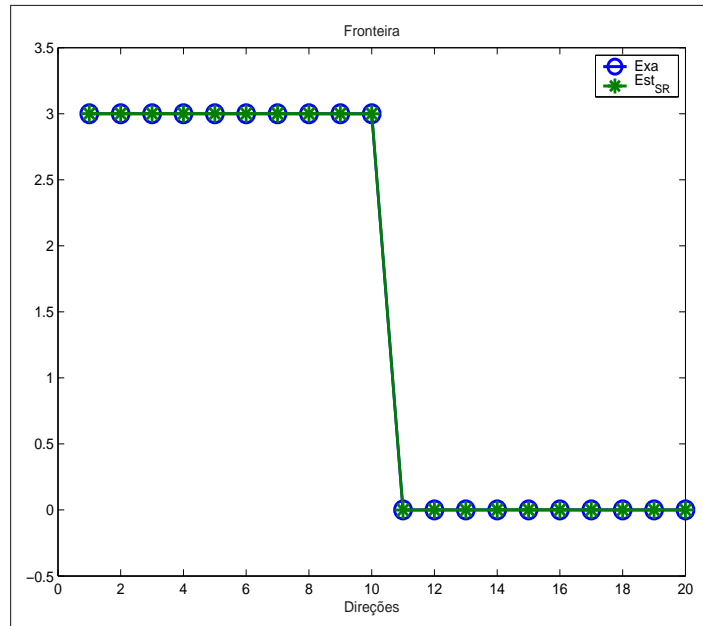


Figura 5.15: Fronteira recuperada com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão sem ruído.

Seguindo a idéia anterior, ou seja, fazendo a reconstrução simultânea de fronteira e fonte, e aplicando a regularização diretamente nos coeficientes de contorno (vetor \mathbf{k} , presente na Eq. (4.3)) e nos coeficientes da série, $\{a_i\}_{i=0,1,2,\dots,\tilde{n}}$, tem-se como resultados para fronteira e fonte os gráficos mostrado na Figura 5.16.

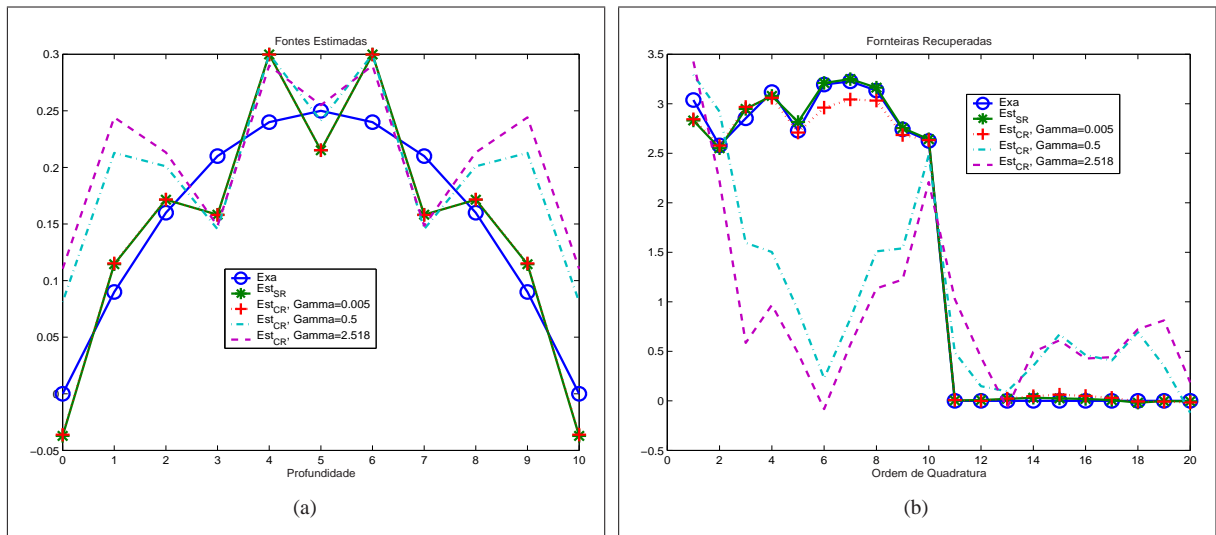


Figura 5.16: Fonte e fronteira recuperadas, aplicando a regularização diretamente em todas as variáveis a serem estimadas, usando vários valores para γ . Ordem de quadratura $N = 20$, 8 termos na série, $\zeta_0 = 10$ com 11 observações. (a) Fonte. (b) Fronteira.

Observa-se que os resultados não são bons, pois quando utilizamos um valor muito pequeno para γ , a regularização não afeta os resultados e, à medida que são aumentados os valores para γ , este também não traz bons resultados.

Uma outra idéia que testada foi a de se utilizar dois parâmetros de regularização, um para os coeficientes do contorno e outro para os coeficientes da série. Nessa tentativa foi montado um funcional de otimização conforme mostrado na equação abaixo,

$$\mathcal{J}(\vec{x}) = \|\vec{y}_{\text{exp}}^\delta - \vec{y}_{\text{calc}}\|_2^2 + \gamma\Omega(\vec{k}) + \beta\Omega(\vec{a}),$$

onde \vec{k} representa os coeficientes do contorno e \vec{a} , representa os coeficientes da série, e γ e β são parâmetros de regularização.

Novamente não se obteve bons resultados, pois além de ter dois caminhos de busca para tais parâmetros, o que seria responsável pela regularização dos coeficientes da série possuía ordem de grandeza muito elevada, não que isso não fosse permitido, mas dificultaria muito a determinação de tal valor. E, ainda, os métodos de regularização para os coeficientes do contorno seria diferente do método de regularização para os coeficientes da série.

Outra idéia testada foi aplicar a regularização diretamente nos valores funcionais da fonte e nos valores de fronteira. Tais resultados são mostrados nas Figuras 5.17. Como se pode

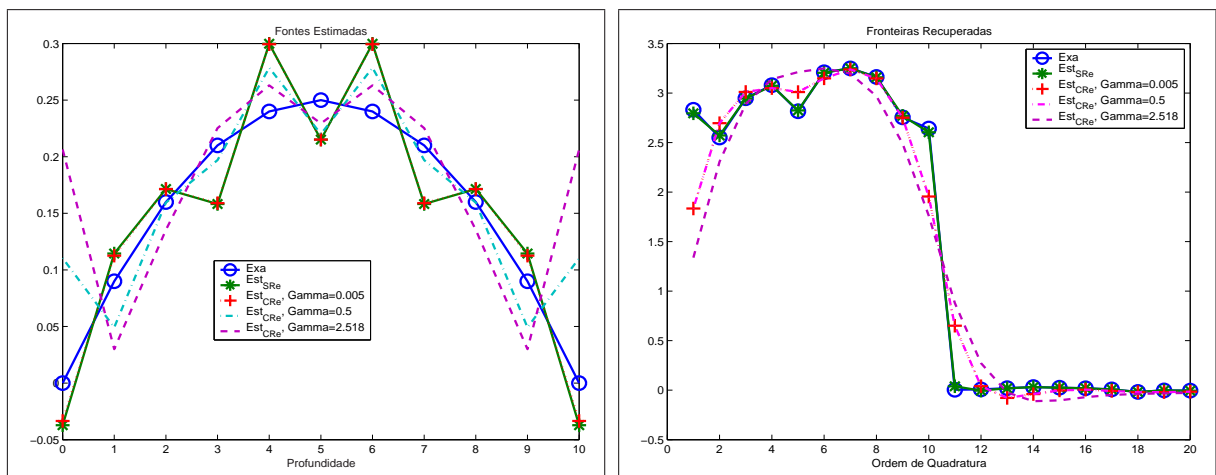


Figura 5.17: Fonte e fronteira recuperadas, aplicando a regularização nos valores funcionais da fonte e nos valores de fronteira, usando vários valores para γ . Ordem de quadratura $N = 20$, 8 termos na série, $\zeta_0 = 10$ com 11 observações. (a) Fonte. (b) Fronteira.

observar, não se obteve sucesso novamente na reconstrução simultânea de fronteira e fonte. O problema aqui exposto é o mesmo mostrado nas Figuras 5.16.

Em função de tal problema, então, buscou-se regularizar somente os valores funcionais da fonte em cada ponto de observação, assim, não havendo preocupação mais com os valores do vetor de constantes \vec{k} e nem com os valores dos coeficientes da série.

Nas próximas páginas, serão apresentados os resultados de cada problema teste, bem como os comentários necessários. Os valores aqui mostrados para o parâmetro de regularização, apresentarão apenas quatro casas decimais, no entanto o código que resolveu todos os casos aqui expostos rodou com precisão dupla (*double precision*).

5.4.1 Estimativa de Fonte

Nesta Seção serão expostos resultados aplicando a técnica de regularização nos casos onde é feita a estimativa somente do termo fonte.

Problema 1:

Nesse problema consideremos o caso conforme descrição nas legendas. Pode-se observar que houve a reconstrução da fonte para dados de inversão sem ruído, mas para dados com ruído não há uma boa representação. Inserindo a regularização, pode-se observar pela Figura 5.20 que esta não apresenta o formato de L, como desejado.

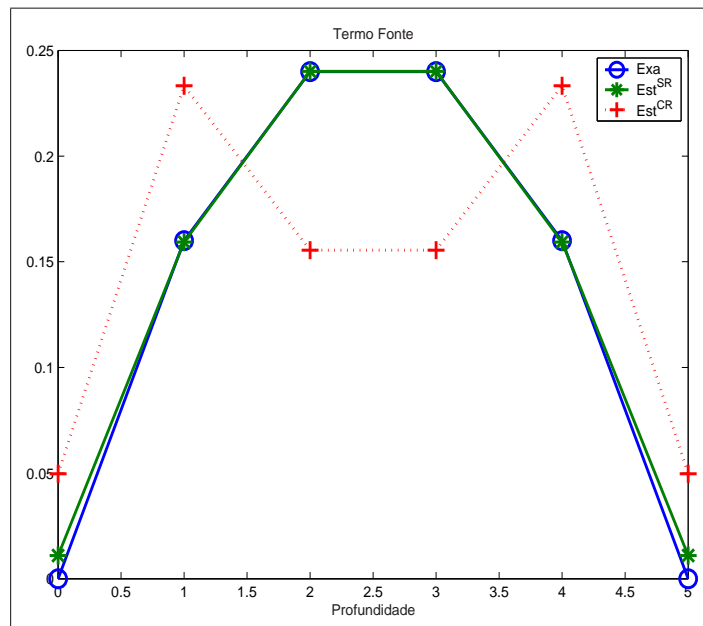


Figura 5.18: Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.

Nesta situação não há um valor para γ que suavize as variações apresentadas na inversão com dados perturbados com ruído. Apesar da curva-L não se formar, mesmo assim foram testados alguns valores de γ aleatórios para uma possível reconstrução, mas nada foi conseguido.

Problema 2:

Este problema, Figuras 5.21, 5.22 e 5.23 trata-se do mesmo considerado na Figura 5.11.

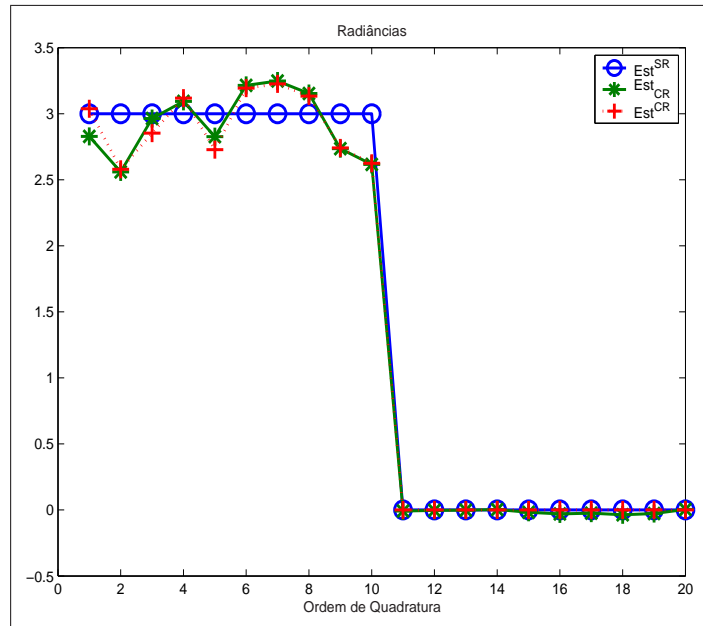


Figura 5.19: Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 6 observações e 8 termos na série.

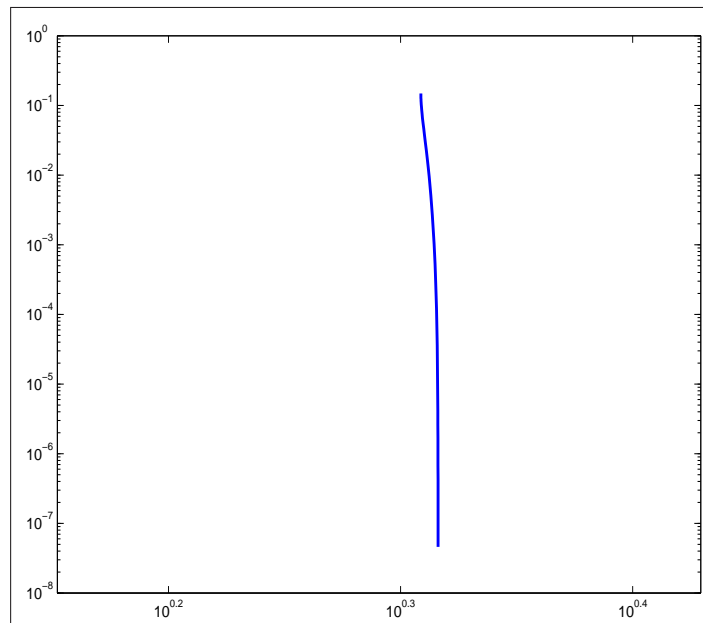


Figura 5.20: Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Limites para $\gamma = 1.0 \cdot 10^{-8} \dots 1000.0$

Para este caso foram obtidos os seguintes resultados. Apesar da oscilação presente na fonte reconstruída sem a regularização, com a aplicação da regularização foi obtido um ótimo resultado. Pode-se observar que o formato do gráfico de testes de γ apresenta um formato bem acentuado, representando a influência do termo de regularização no problema. Fazendo uma comparação desse caso com o problema 1, tem-se a mesma profundidade para ambos os problemas, no entanto, no primeiro temos muito pouca informação do meio, ao contrário do segundo problema. Isso nos diz que o número de pontos de observação está influenciando na reconstrução do termo

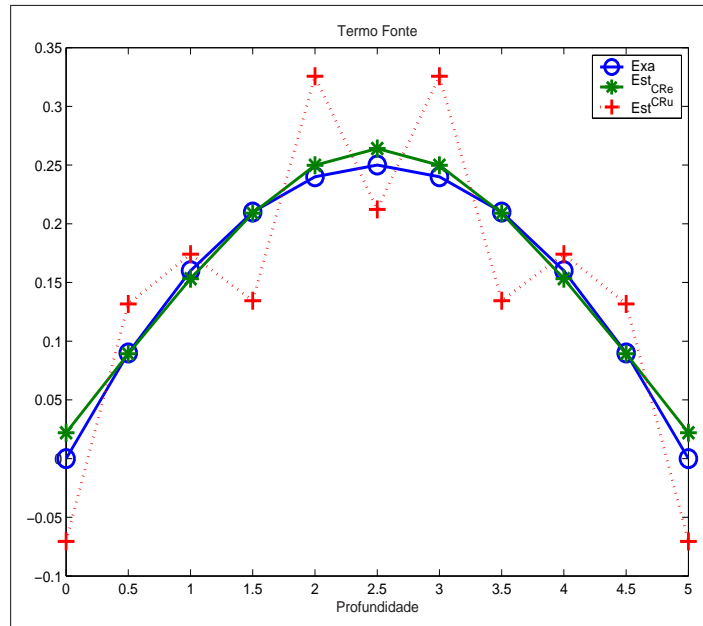


Figura 5.21: Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.

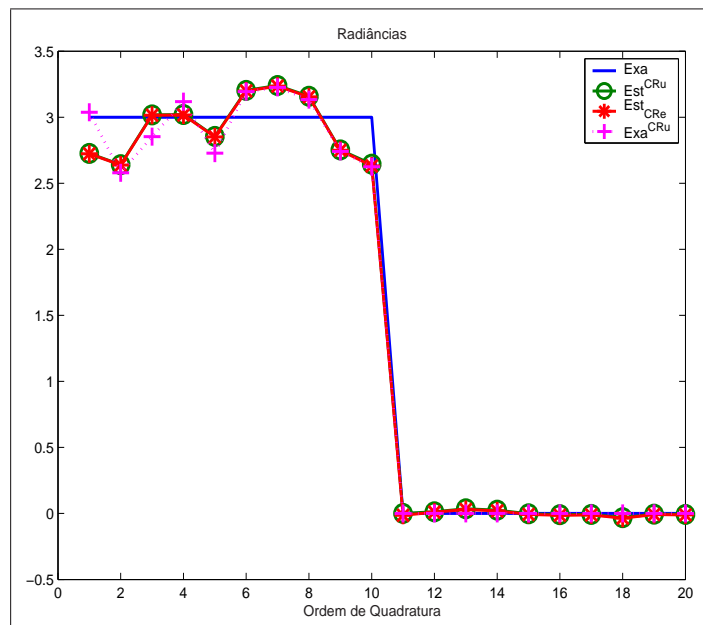


Figura 5.22: Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 5$, 11 observações e 8 termos na série.

fonte.

Problema 3:

O problema aqui considerado, Figuras 5.24, 5.25 e 5.26 é o apresentado na Figura 5.16. Nessa figura, pode-se observar que a idéia de regularização lá aplicada não resultou em bons resultado. Porém, aplicando a idéia dos dois problemas anteriores obtém-se os seguintes resultados. Observou-se que a técnica de regularização bem aplicada, ao contrário da apresentada na Figura 5.16, nos dá bons resultados. Comparando esse problema com o problema 1, observa-se

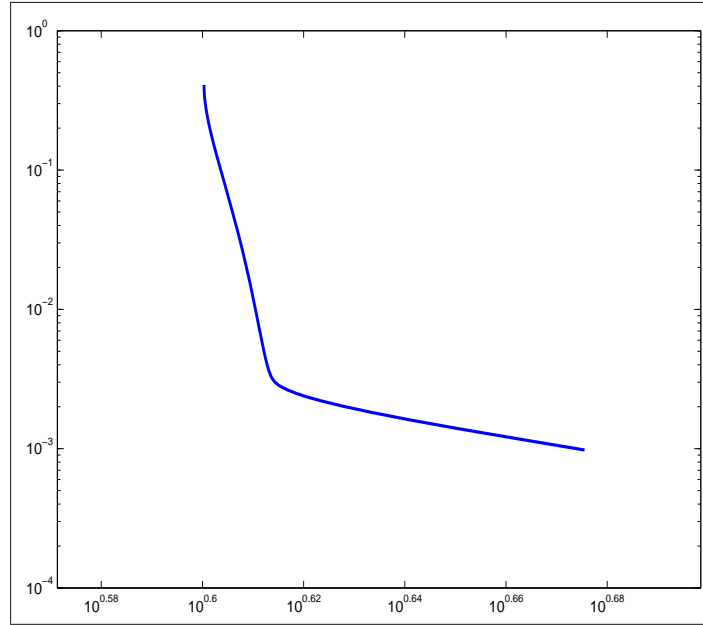


Figura 5.23: Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 63.09573$.

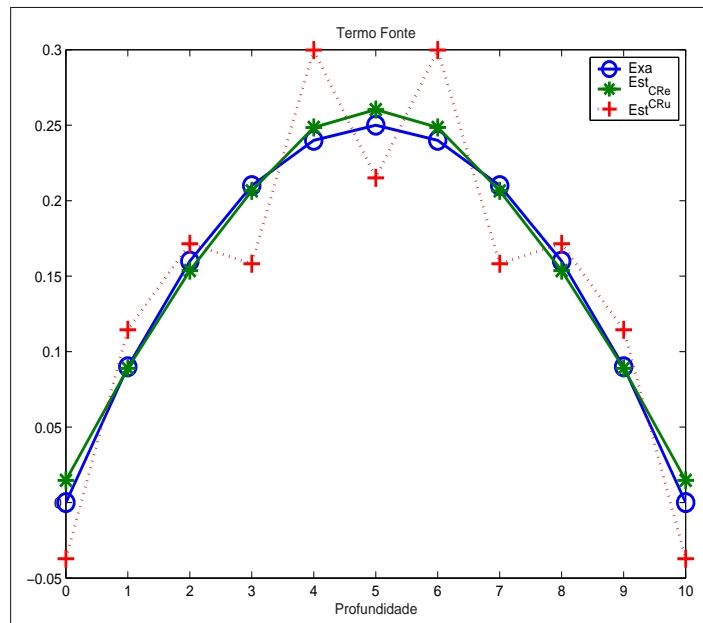


Figura 5.24: Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.

que o espaçamento entre os pontos de observação é o mesmo, no entanto, são em maior número, o que nos fornece mais informações sobre o problema.

Problema 4:

Nas Figuras 5.27, 5.28 e 5.29 considerou-se um caso que não foi comentado nos exemplos anteriores. Os valores para os parâmetro são mostrados na legenda de cada figura.

A determinação do parâmetro de regularização para esse problema apresentou grande dificuldade, devido à curva-L não apresentar um formato tão acentuado como nos problemas

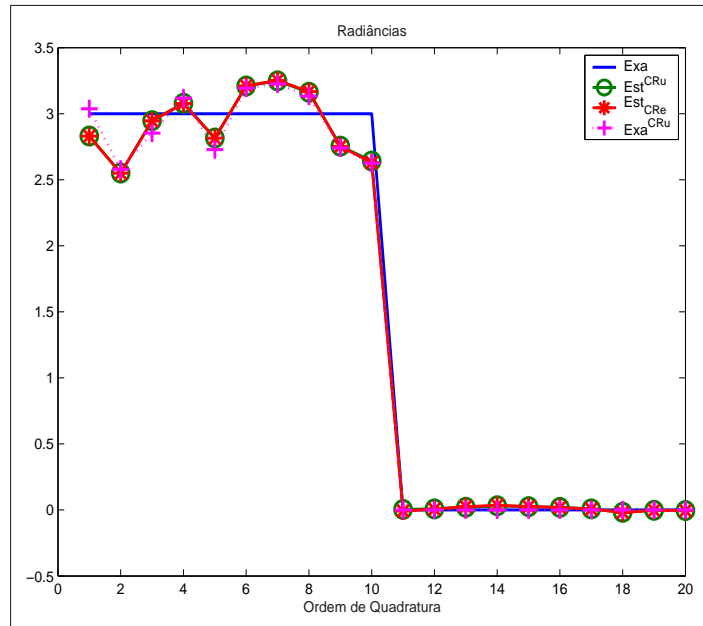


Figura 5.25: Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 11 observações e 8 termos na série.

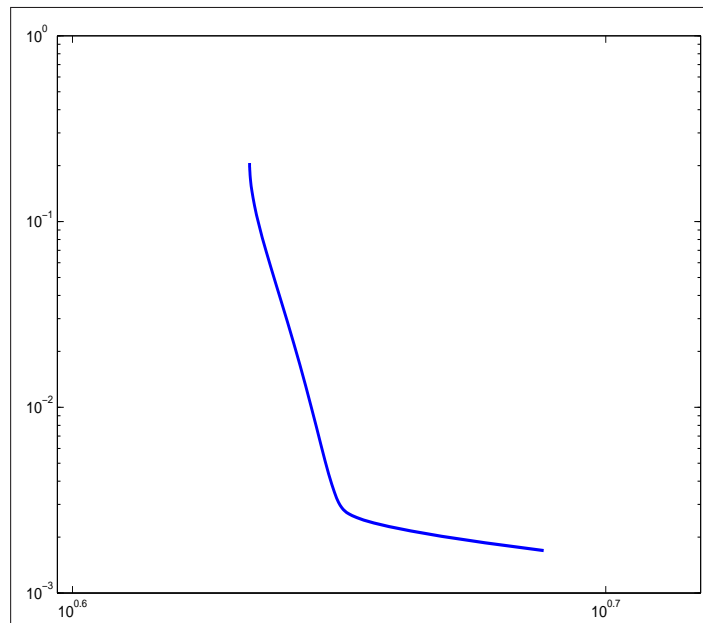


Figura 5.26: Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 25.11886$.

anteriores. Para se conseguir isso, foi necessário testar valores para tal parâmetro entre 1 e 12.000! A escolha foi feita baseada nos casos anteriores, porém, nesse caso é necessário tomar cuidado na escolha de tal parâmetro, conforme citado em [48], p. 69.

Problema 5:

Nas Figuras 5.30, 5.31 e 5.32 considerou-se 15 metros de profundidade. Este caso é semelhante ao exposto nos problemas 1 e 3, onde tem-se o mesmo espaçamento entre as observações.

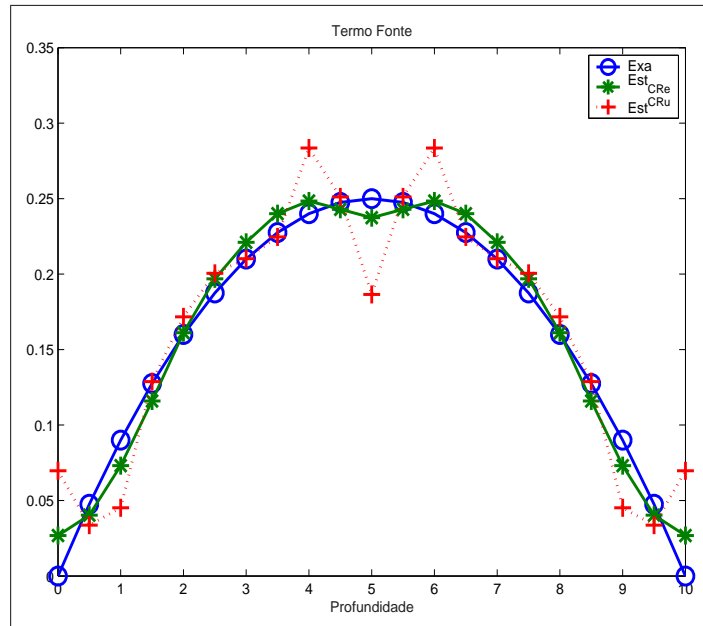


Figura 5.27: Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 21 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.

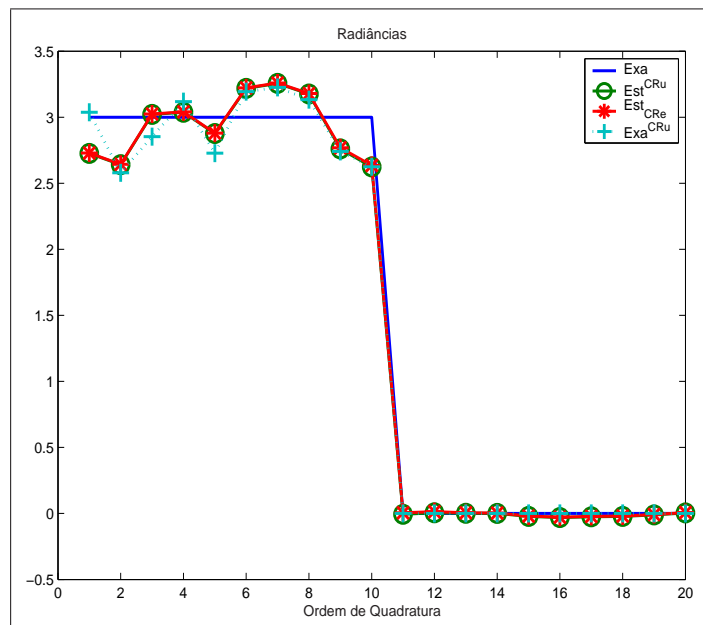


Figura 5.28: Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 10$, 21 observações e 8 termos na série.

Porém, se pensarmos no problema como sendo um sistema linear $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$, no problema 1 temos variáveis livres, pois estamos com 8 incógnitas (termos na série) e 6 observações. Isso faz com que o sistema apresente mais de uma solução. Como é visto em tal problema, a regularização não traz os resultados desejados. Já no problema 3, pensando da mesma forma, temos 8 incógnitas e 11 observações, isso faz com que não se tenha variáveis livres, fazendo assim que o sistema apresente solução quando a regularização é inserida.

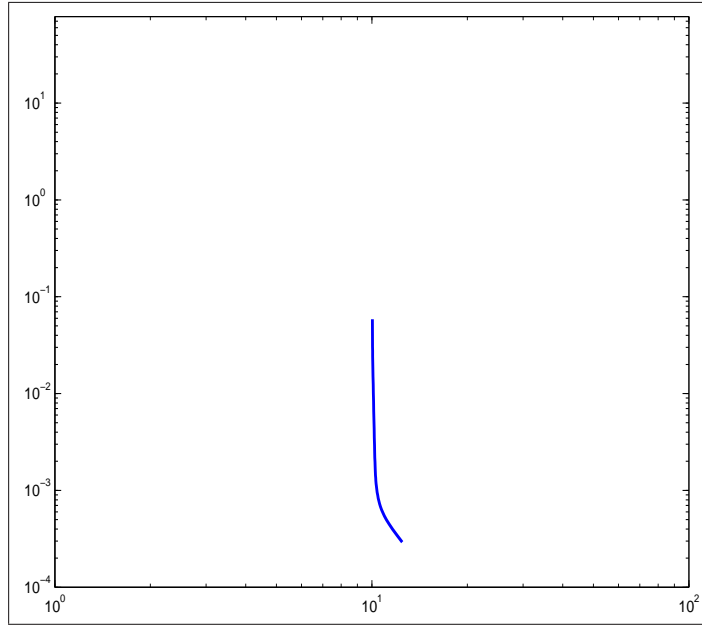


Figura 5.29: Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 39.81071$.

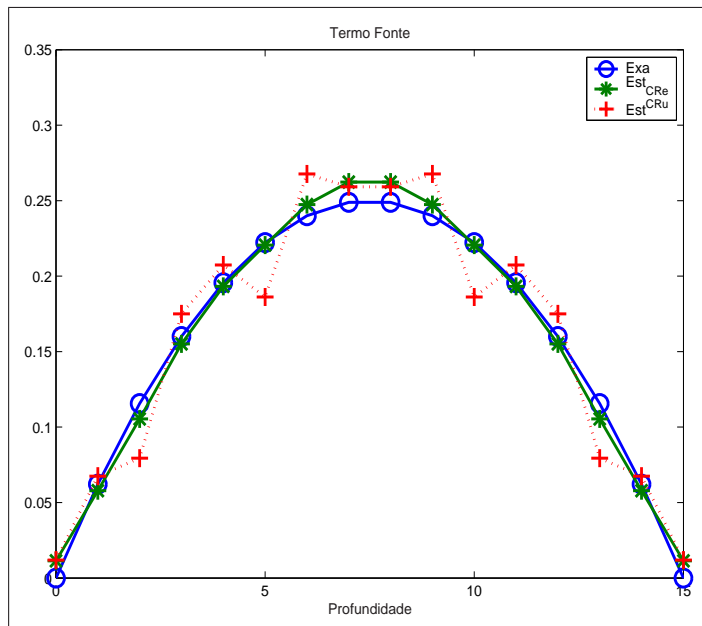


Figura 5.30: Fontes recuperadas com ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 15$, 16 observações e 8 termos na série. Dados de inversão com e sem ruído.

O problema 5, apresenta-se na mesma situação do problema 3, mas no problema 5, o número de observações é muito maior que o número de incógnitas. Baseado nisto, e observando a Figura 5.30, o ruído nos dados não influenciou muito na solução do problema inverso, o que permite afirmar que, em função desta diferença entre termos na série e observações, a solução do problema torna-se de “fácil” obtenção. Por outro lado, a escolha do parâmetro de regularização tornou-se mais difícil, pois foi necessário testar valores para γ entre $1.0 \cdot 10^{-5}$ e 3.000.

Problema 6:

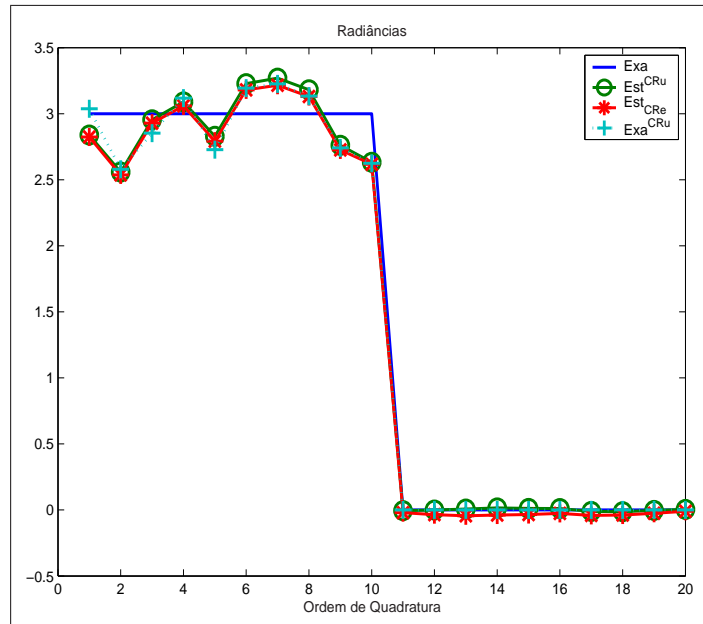


Figura 5.31: Fronteiras recuperadas. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 15$, 16 observações e 8 termos na série.

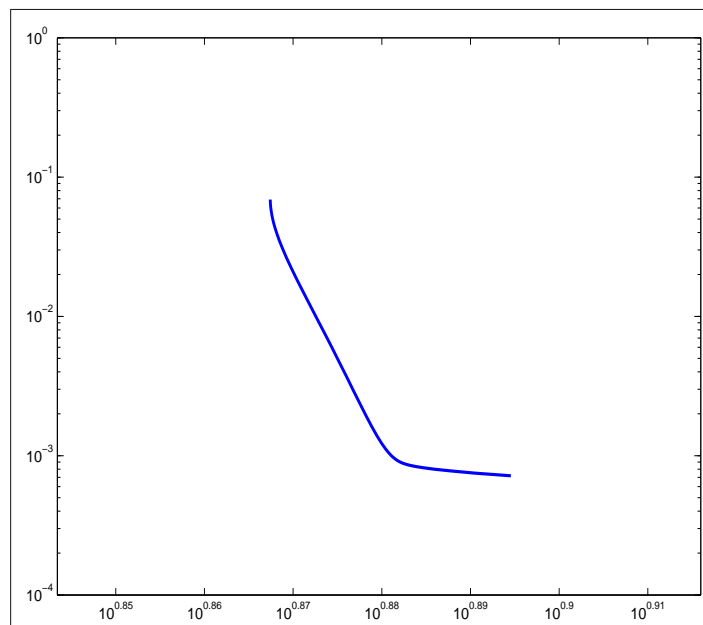


Figura 5.32: Curva-L obtida com vários valores de γ testados. Valor utilizado de $\gamma = 63.09573$.

Nesse problema, mesmo com a inserção de ruído nos dados, a fonte reconstruída é muito próxima da fonte verdadeira, dessa forma, torna-se desnecessário a regularização. O motivo pelo qual a fonte foi bem reconstruída, deve-se ao fato de que temos muita informação do meio.

Atribuímos tal resultado ao fato de haver muito mais observações do que termos na série, o que faz com que a solução do problema se torne estável e de fácil obtenção.

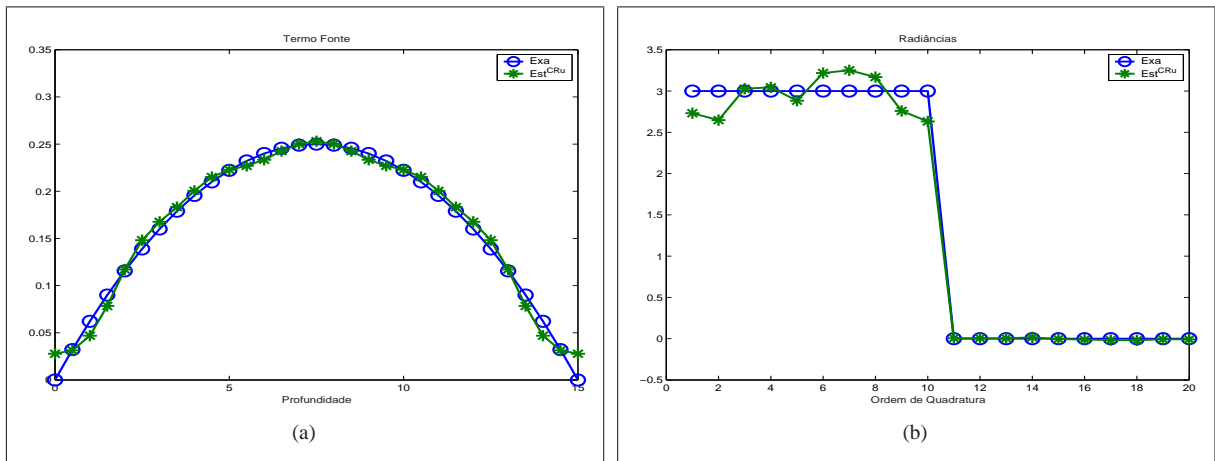


Figura 5.33: Estimativa de fonte e fronteira. Ordem de quadratura $N = 20$, $\zeta_0 = 15$, 31 observações e 8 termos na série. (a) Fonte. (b) Fronteira.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões

O Problema Inverso aqui trabalhado é de estimação de função, no entanto, a função incógnita a ser estimada foi parametrizada por uma série de Fourier, Eq. (4.2), e a estimativa recaiu sobre os coeficientes da série. Dessa forma, passou-se de um problema de estimativa de função para um problema de estimativa de parâmetros (coeficientes da expansão). Uma dificuldade maior recai sobre o problema aqui tratado, porque são dois tipos diferentes de parâmetros/funções a serem estimados. Coeficientes da série para a fonte e os próprios valores das condições de contorno.

O número de termos que foi utilizado para a reconstrução da fonte no exemplos mostrados foi escolhido baseado em observações de todos os casos testes, não foi feita por algum critério mais específico. Uma estratégia para tal estimativa seria a TSVD (Decomposição em Valores Singulares Truncada), onde o número de termos (ordem de truncamento) é o operador de regularização, e este número poderia ser determinado por algum critério: discrepância ou então a curva-L.

Além dos 6 problemas apresentados aqui, foram feitos outros testes com outro número de termos na série. As conclusões obtidas foram as seguintes:

1. em todos os casos apresentados na Tabela 5.1, a fonte e a fronteira foram recuperadas para dados de inversão sem ruído.
2. Como visto pelo problema 6, quando se trabalha com muitos pontos de observação, o ruído nos dados praticamente não afeta a reconstrução do problema. Isso foi verificado para qualquer número de termos utilizados na série, a partir de 21 pontos de observação.

3. Aplicando a técnica de regularização em todas as às variáveis do problema, conforme Figura 5.16, em nenhum caso, foram obtidos bons resultados. O mesmo é válido para o caso apresentado nas Figuras 5.17.
4. Para os casos onde estimou-se a fonte, os problemas onde não ocorria a reconstrução da fonte eram os que apresentavam poucos termos na série e poucos pontos de observações. Tal fato é apresentado nas Figuras 5.18, 5.19 e 5.20. Se colocados mais termos na série, a reconstrução se tornava cada vez “pior”, diminuindo o número de termos, então a reconstrução apresentava menos oscilações, mas mesmo assim não era possível obter bons resultados.
5. Foram feitos também alguns casos de estimativa apenas de fronteira, mas não foi possível encontrar um valor para o parâmetro de regularização que diminuísse as oscilações presentes em função da inserção do ruído.
6. Um possível idéia a ser testada seria trabalhar com dois parâmetros de regularização, conforme comentado anteriormente.
7. Utilizar funções ortogonais para a estimativa de fonte e fronteira.
8. Investigar o efeito da regularização na variável espacial versus coeficientes da expansão.
9. Acredita-se que o fato de não obter-se bons resultados nos exemplos mostrados nas Figuras 5.16 e 5.17 deve-se a técnica de regularização aplicada, pois foram construídos, em alguns casos, os gráficos dos coeficientes da fronteira e da fonte. Baseado nesses gráficos, uma conclusão é de que seria mais eficiente uma regularização do tipo mínima entropia, e não Tikhonov como foi aplicado. No entanto, não foi feito nenhum teste com tal técnica de regularização.
10. Acredita-se que utilizando funções ortogonais para reconstrução simultânea de fronteira e fonte pode-se obter bons resultados. Para essa situação, haveria quatro Problemas Inversos: determinar o número de termos para a expansão da fonte; determinar os coeficientes para a expansão da fonte; determinar o número de termos para as condições de contorno; determinar os coeficientes para a expansão das condições de contorno.

11. Uma outra estratégia seria a inversão em dois passos: Passo-1: Resolve o Problema Inverso para condições de contorno; Passo-2: resolve o Problema Inverso para a fonte, com as condições de contorno fixas. Então fixa-se a fonte e retorna ao Passo-1.

Apêndice A

Polinômios de Legendre, Funções de Legendre Associadas, Harmônicos Esféricos e Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos

A tentativa de determinarmos causas e conseqüências de determinados fenômenos físicos, com mais detalhes, nos obriga a encontrarmos um modelo matemático, ou seja, um conjunto de equações que os descreva. Nesta tentativa, surgem as equações diferenciais parciais EDP's.

Ao estudar fenômenos estacionários, oscilações, condução de calor, difusão, entre outros, as equações que surgem muitas vezes para descrever tais fenômenos, são as EDP's do tipo elíptico. Uma equação que aparece com bastante freqüência neste tipo de problema é a *equação de Laplace*. A solução desta equação, nos leva aos chamados Polinômios de Legendre .

Neste apêndice será dada uma descrição das principais propriedades, fórmulas de recorrência, etc, para os Polinômios de Legendre, Funções de Legendre Associadas e Harmônicos Esféricos. Iniciaremos com um estudo dos Polinômios de Legendre, em seguida as Funções de Legendre Associadas e após os Harmônicos Esféricos e a conclusão se dará com a demonstração do **Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos**.

A equação de Laplace em coordenadas cartesianas têm a forma

$$\nabla^2 u(x, y, z) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0, \quad (\text{A.1})$$

a qual quando escrita em termos de coordenadas esféricas ρ , φ , e θ se transforma em

$$\nabla^2 u(\rho, \varphi, \theta) = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial u}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\rho^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = 0, \quad (\text{A.2})$$

onde ρ é o raio da esfera, φ o ângulo azimutal, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ e θ o ângulo polar, $0 \leq \theta \leq \pi$.

Aplicando o método de separação das variáveis [18] nesta última equação, uma das equações que aparece é

$$(1 - \cos^2 \theta)y'' - 2 \cos \theta y' + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - \cos^2 \theta} \right] y = 0.$$

Fazendo $x = \cos \theta$, encontra-se

$$[(1 - x^2)y']' + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] y = 0 \quad (\text{A.3})$$

que é chamada de *Equação de Legendre Associada*. Para o caso $m = 0$

$$(1 - x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0 \quad (\text{A.4})$$

que recebe o nome de *equação de Legendre*.

Em [16] é sugerido uma solução representada por uma série de potências do tipo

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n,$$

que é substituída em (A.4) e então é verificado que a suposta série é solução para a equação de Legendre e a solução encontrada recebe o nome de Polinômios de Legendre.

A.1 Função geratriz

Nesta seção construiremos uma função geratriz para os Polinômios de Legendre partindo da solução da Eq. (A.1) no espaço euclidiano tridimensional, a função $\frac{1}{R}$, onde R representa

a distância entre dois pontos no espaço, ou seja, $R = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$ é solução da Eq. (A.1).

Considerando o caso no \mathbb{R}^2 , escrevendo $\nabla^2 u = 0$ nas coordenadas polares r e φ tem-se,

$$\nabla^2 u(r, \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = 0.$$

Considere R como sendo a distância entre os pontos P e P_0 , conforme figura abaixo, e seja \vec{r} e \vec{r}_0 os vetores que representam os segmentos \overline{OP} e $\overline{OP_0}$ e seja φ o ângulo formado entre \vec{r} e \vec{r}_0 .

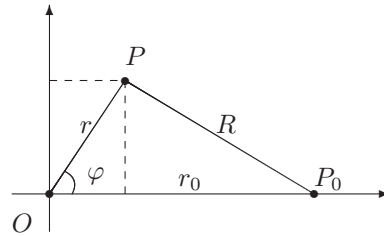


Figura A.1: Distância entre dois pontos no plano.

As coordenadas para os pontos P e P_0 são $P = (r \cos \varphi, r \sin \varphi)$ e $P_0 = (r_0, 0)$. Pela fórmula da distância tem-se

$$\begin{aligned} \text{dist}(P, P_0) = R &= \sqrt{(r \cos \varphi - r_0)^2 + (r \sin \varphi - 0)^2} \\ R &= \sqrt{r^2 - 2rr_0 \cos \varphi + r_0^2}, \end{aligned}$$

e portanto,

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2rr_0 \cos \varphi + r_0^2}}.$$

Tomando $x = \cos \varphi$ e $\rho = \frac{r}{r_0} < 1$, se $r < r_0$, obtém-se

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{r_0^2 - 2\rho r_0^2 x + \rho^2 r_0^2}} = \frac{1}{r_0} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\rho x + \rho^2}}$$

e se, $\rho = \frac{r_0}{r} < 1$ para $r > r_0$ tem-se

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{r^2 - 2\rho r^2 x + \rho^2 r^2}} = \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\rho x + \rho^2}}$$

Em ambos os casos $\rho < 1$ e, $-1 \leq x \leq 1$.

A função

$$\psi(\rho, x) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2\rho x + \rho^2}}, \quad 0 < \rho < 1, \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (\text{A.5})$$

é chamada *função geratriz* dos Polinômios de Legendre.

Fazendo um desenvolvimento em série de potência, em torno de $\rho = 0$, para a Eq. (A.5) resulta em

$$\psi(\rho, x) = 1 + x\rho + \left(-\frac{1}{2} + \frac{3x^2}{2}\right)\rho^2 + \left(-\frac{3x}{2} + \frac{5x^3}{2}\right)\rho^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)\rho^n \quad (\text{A.6})$$

onde $P_n(x)$ são os polinômios de n -ésima potência e denominados de *Polinômios de Legendre*.

A.2 Fórmula de Recorrência dos Polinômios de Legendre

Pode-se encontrar facilmente uma fórmula de recorrência para os Polinômios de Legendre a partir da Eq. (A.5). Para isto deriva-se a função geratriz dos Polinômios de Legendre em relação a ρ , assim

$$\frac{\partial \psi(\rho, x)}{\partial \rho} = \frac{x - \rho}{\sqrt{(1 - 2\rho x + \rho^2)^3}} = \sum_{n=1}^{\infty} n P_n(x) \rho^{n-1}.$$

Multiplicando ambos os lados por $1 - 2\rho x + \rho^2$, tem-se

$$\frac{x - \rho}{\sqrt{1 - 2\rho x + \rho^2}} = \sum_{n=1}^{\infty} (1 - 2\rho x + \rho^2) n P_n(x) \rho^{n-1}.$$

Usando as Eqs. (A.5) e (A.6) pode-se escrever o membro à esquerda da equação acima da seguinte forma

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (x - \rho) P_n(x) \rho^n &= \sum_{n=1}^{\infty} (1 - 2\rho x + \rho^2) n P_n(x) \rho^{n-1} \\ \sum_{n=1}^{\infty} x P_{n-1}(x) \rho^{n-1} - \sum_{n=1}^{\infty} P_{n-1}(x) \rho^n &= \sum_{n=1}^{\infty} n P_n(x) \rho^{n-1} - \sum_{n=1}^{\infty} 2n x P_n(x) \rho^n + \sum_{n=1}^{\infty} n P_n(x) \rho^{n+1} \\ x P_n(x) \rho^n - P_{n-1}(x) \rho^n &= (n + 1) P_{n+1}(x) \rho^n - 2n x P_n(x) \rho^n + (n - 1) P_{n-1}(x) \rho^n. \end{aligned}$$

Cancelando o termo ρ^n que aparece em ambos os lados da igualdade, encontra-se

$$xP_n(x) - P_{n-1}(x) = (n+1)P_{n+1}(x) - 2nxP_n(x) + (n-1)P_{n-1}(x)$$

e portanto

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad (\text{A.7})$$

que é chamada de fórmula de recorrência dos Polinômios de Legendre.

Definição A.1. Os Polinômios de Legendre de grau 0 e grau 1 são definidos, respectivamente, por

$$P_0(x) = 1 \quad \text{e} \quad P_1(x) = x.$$

A.3 Ortogonalidade

Teorema A.1. Os Polinômios de Legendre são ortogonais entre si, ou seja,

$$\langle P_n(x), P_m(x) \rangle = \int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x) dx = 0, \quad \text{se} \quad m \neq n \quad (\text{A.8})$$

$$\langle P_n(x), P_m(x) \rangle = \int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x) dx = \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1} \quad \text{se} \quad m = n. \quad (\text{A.9})$$

Demonstração: De fato, se $P_m(x)$ e $P_n(x)$ satisfazem a equação diferencial de Legendre, então

$$(1-x^2)P_m''(x) - 2xP_m'(x) + m(m+1)P_m(x) = 0$$

$$(1-x^2)P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0.$$

Agora, multiplicando a primeira equação por $P_n(x)$, a segunda por $P_m(x)$ e subtraindo obtém-se,

$$\begin{aligned} (1-x^2)[P_n(x)P_m''(x) - P_m(x)P_n''(x)] - 2x[P_n(x)P_m'(x) - \\ + P_m(x)P_n'(x)] = [(n(n+1) - m(m+1))]P_m(x)P_n(x) \end{aligned}$$

a qual pode ser escrita

$$\frac{d}{dx} [(1-x^2)(P_n(x)P'_m(x) - P_m(x)P'_n(x))] = [n(n+1) - m(m+1)]P_m(x)P_n(x).$$

Integrando a equação acima em $x \in (-1, 1)$, tem-se

$$[n(n+1) - m(m+1)] \int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x) dx = (1-x^2) [P_n(x)P'_m(x) - P_m(x)P'_n(x)] \Big|_{x=-1}^{x=1}.$$

O lado direito desta última expressão é nulo e como $n \neq m$ segue que $[n(n+1) - m(m+1)] \neq 0$

e portanto

$$\int_{-1}^1 P_m(x)P_n(x) dx = 0, \quad \text{se } m \neq n.$$

Quando $m = n$ é possível encontrar a Eq. (A.9) através da função geratriz dos Polinômios de Legendre

$$\frac{1}{\sqrt{1-2\rho x + \rho^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)\rho^n.$$

Elevando ambos os membros desta última equação tem-se

$$\frac{1}{1-2\rho x + \rho^2} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} P_m(x)P_n(x)\rho^{n+m}.$$

Integrando a equação acima em relação a $x \in (-1, 1)$, e admitindo convergência uniforme da série à direita, e como $m = n$ resulta,

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{1-2\rho x + \rho^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx \right\} \rho^{2n} - \frac{1}{2\rho} \ln(1-2\rho x + \rho^2) \Big|_{-1}^1 = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx \right\} \rho^{2n} \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{1}{\rho} \ln \left(\frac{1+\rho}{1-\rho} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx \right\} \rho^{2n}. \quad (\text{A.11})$$

Expandindo em série de potências em torno de $\rho = 0$, o lado esquerdo da última equação acima, obtém-se

$$\frac{1}{\rho} \ln \left(\frac{1+\rho}{1-\rho} \right) = 2 + \frac{2\rho^2}{3} + \frac{2\rho^4}{5} + \frac{2\rho^6}{7} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2\rho^{2n}}{2n+1}$$

e portanto

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2\rho^{2n}}{2n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx \right\} \rho^{2n}.$$

Cancelando o termo ρ^{2n} , tem-se a igualdade desejada

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1}, \quad \text{se } m = n.$$

■

Da ortogonalidade dos Polinômios de Legendre e da Eq. (A.9) segue que:

Teorema A.2. *O conjunto de funções $\{\varphi_n(x)\}$*

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x), \quad (\text{A.12})$$

forma um sistema ortonormal e completo sobre o intervalo $(-1, 1)$.

Demonstração: Veja [44], Cap. III, Sec. 9 p. 190-191. ■

A.4 Série de Legendre

Suponha que se deseja encontrar uma aproximação em Série de Legendre para uma função $f(x)$. Se $f(x)$ e $f'(x)$ são seccionalmente contínuas, então em todo ponto de continuidade de $f(x)$ no intervalo $(-1, 1)$ existirá um desenvolvimento em Série de Legendre. As constantes de Fourier para este desenvolvimento em relação as funções (A.12) para uma função $f(x)$ definida sobre o intervalo $(-1, 1)$ são dadas por

$$c_n = \langle f, \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \int_{-1}^1 f(\xi) P_n(\xi) d\xi.$$

Assim a série de Fourier generalizada correspondente a $f(x)$ é

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(x) \int_{-1}^1 f(\xi) P_n(\xi) d\xi,$$

e assim pode-se expandir a função $f(x)$ através da série

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{\infty} A_n P_n(x), \quad -1 < x < 1$$

onde

$$A_n = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_n(x) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

A.5 Funções de Legendre Associadas

A equação de Laplace em coordenadas esféricas é da forma (A.2). Se u e suas derivadas são contínuas no interior de uma esfera, $\rho < \rho'$, estas funções devem ser periódicas em φ e com período de 2π . Então a separação de variáveis nos leva às soluções particulares [16],

$$\rho^n (A_m \cos m\varphi + B_m \sin m\varphi) P_n^m(x), \quad m, n = 0, 1, 2, \dots$$

Definição A.2. Seja m um número inteiro e positivo e $x \in (-1, 1)$, então as funções

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_n(x)}{dx^m}, \quad m = 1, 2, \dots, n$$

onde $(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$ indicam as raízes, são chamadas de *Funções de Legendre Associadas de n -ésimo grau e de m -ésima ordem*¹.

Observe que o símbolo $P_n^{(m)}(x)$ denota a m -ésima derivada de $P_n(x)$, assim

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} P_n^{(m)}(x). \quad (\text{A.13})$$

Da fórmula de Rodrigues, tem-se

$$P_n^m(x) = \frac{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}}{2^n n!} \frac{d^{n+m}(x^2-1)^n}{dx^{n+m}}, \quad m = 1, 2, \dots, n,$$

onde as funções $P_n^m(x)$ satisfazem a Eq. (A.3).

¹Observe que $P_n^m(\pm 1) = 0$, se $m \neq 0$

A.6 Fórmula de Recorrência para Funções de Legendre Associadas

Para obter uma fórmula de recorrência para as funções de Legendre associadas, inicia-se através da Eq. (A.7). Derivando (A.7) em relação a x , tem-se²

$$\begin{aligned} (n+1)P'_{n+1}(x) - (2n+1)P_n(x) - (2n+1)xP'_n(x) + nP'_{n-1}(x) &= 0 \\ (n+1)[P'_{n+1}(x) - xP'_n(x)] - n[xP'_n(x) - P'_{n-1}(x)] - (2n+1)P_n(x) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Da Eq. (A.14) tem-se

$$P'_{n+1}(x) - xP'_n(x) = (n+1)P_n(x) \quad \text{e} \quad xP'_n(x) = P'_{n+1}(x) - (n+1)P_n(x) \quad (\text{A.16})$$

e portanto substituindo as igualdades (A.16) em (A.15) tem-se

$$\begin{aligned} (n+1)^2 P_n(x) - n[P'_{n+1}(x) - (n+1)P_n(x) - P'_{n-1}(x)] - (2n+1)P_n(x) &= 0 \\ 2n^2 P_n(x) + nP_n(x) &= nP'_{n+1}(x) - nP'_{n-1}(x), \end{aligned}$$

e assim,

$$(2n+1)P_n(x) = P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x). \quad (\text{A.17})$$

Diferenciando m vezes a Eq. (A.17) tem-se

$$(2n+1) \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) = \frac{d^m}{dx^m} P'_{n+1}(x) - \frac{d^m}{dx^m} P'_{n-1}(x)$$

ou,

$$(2n+1) \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) = \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_{n+1}(x) - \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_{n-1}(x).$$

Multiplicando essa última equação por $(1-x^2)^{\frac{m+1}{2}}$, obtém-se

$$(2n+1)(1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) = (1-x^2)^{\frac{m+1}{2}} \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_{n+1}(x) - (1-x^2)^{\frac{m+1}{2}} \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_{n-1}(x),$$

²Usando o Teorema de Cauchy pode-se chegar em uma fórmula de recorrência para os Polinômios de Legendre dada pela seguinte expressão

$$P'_{n+1}(x) - xP'_n(x) = (n+1)P_n(x). \quad (\text{A.14})$$

Para detalhes de como obter tal expressão, consulte [44].

usando a Definição A.2, tem-se

$$\begin{aligned} (2n+1)(1-x^2)^{\frac{1}{2}}P_n^m(x) &= P_{n+1}^{m+1}(x) - P_{n-1}^{m+1}(x) \\ &= (n+m)(n+m-1)P_{n-1}^{m-1}(x) - (n-m+1)(n-m+2)P_{n+1}^{m-1}(x) \end{aligned}$$

A.7 Ortogonalidade das Funções de Legendre Associadas

Tal como no caso dos Polinômios de Legendre, para cada m fixado, o conjunto $P_n^m(x)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, é ortogonal sobre o intervalo $(-1, 1)$, ou seja:

Teorema A.3. *Sejam m, n e k números inteiros e positivos, então*

$$\begin{aligned} \langle P_n^m(x), P_k^m(x) \rangle &= \int_{-1}^1 P_n^m(x) P_k^m(x) dx = 0, \quad \text{se } n \neq k \\ \langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle &= \int_{-1}^1 P_n^m(x) P_n^m(x) dx = \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx = \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!}, \quad \text{se } n = k. \end{aligned} \tag{A.18}$$

Demonstração: De fato, se $P_n^m(x)$ e $P_k^m(x)$ satisfazem a equação diferencial associada de Legendre, então

$$\begin{aligned} (1-x^2) \frac{d^2 P_n^m(x)}{dx^2} - 2x \frac{dP_n^m(x)}{dx} + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_n^m(x) &= 0 \\ (1-x^2) \frac{d^2 P_k^m(x)}{dx^2} - 2x \frac{dP_k^m(x)}{dx} + \left[k(k+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_k^m(x) &= 0. \end{aligned}$$

Multiplicando a primeira equação por $P_k^m(x)$ e a segunda por $P_n^m(x)$ e subtraindo obtém-se

$$\begin{aligned} (1-x^2) \left[\frac{d^2 P_n^m(x)}{dx^2} P_k^m(x) - \frac{d^2 P_k^m(x)}{dx^2} P_n^m(x) \right] - 2x \left[\frac{dP_n^m(x)}{dx} P_k^m(x) - \frac{dP_k^m(x)}{dx} P_n^m(x) \right] \\ + [n(n+1) - k(k+1)] P_n^m(x) P_k^m(x) = 0 \end{aligned}$$

a qual pode ser escrita como

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \left\{ P_k^m(x) \frac{dP_n^m(x)}{dx} - P_n^m(x) \frac{dP_k^m(x)}{dx} \right\} \right] + [n(n+1) - k(k+1)] P_n^m(x) P_k^m(x) = 0.$$

Integrando a equação acima com respeito a $x \in (-1, 1)$, obtém-se

$$[n(n+1) - k(k+1)] \int_{-1}^1 P_n^m(x) P_k^m(x) dx = \left[(1-x^2) P_k^m(x) \frac{dP_n^m(x)}{dx} - P_n^m(x) \frac{dP_k^m(x)}{dx} \right]_{x=-1}^{x=1}.$$

O termo à direita dessa última equação é nulo e como $n \neq k$ segue que $[n(n+1) - k(k+1)] \neq 0$, portanto

$$\int_{-1}^1 P_n^m(x) P_k^m(x) dx = 0 \quad \text{se} \quad n \neq k.$$

Quando $n = k$ observe que da Definição A.2 tem-se

$$\begin{aligned} P_n^{m+1}(x) &= (1-x^2)^{\frac{m}{2}} (1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dx} [(1-x^2)^{-\frac{m}{2}} P_n^m(x)] \\ &= (1-x^2)^{\frac{1}{2}} \frac{dP_n^m(x)}{dx} + m(1-x^2)^{-\frac{1}{2}} x P_n^m(x). \end{aligned}$$

Elevando ambos os membros ao quadrado na última expressão e integrando com respeito a $x \in (-1, 1)$, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 [P_n^{m+1}(x)]^2 dx &= \int_{-1}^1 (1-x^2) \left[\frac{dP_n^m(x)}{dx} \right]^2 dx + 2m \int_{-1}^1 x P_n^m(x) \frac{dP_n^m(x)}{dx} dx \\ &\quad + \int_{-1}^1 \frac{m^2 x^2}{1-x^2} [P_n^m(x)]^2 dx. \quad (\text{A.19}) \end{aligned}$$

Abrindo a primeira integral do lado direito tem-se

$$\int_{-1}^1 (1-x^2) \left[\frac{dP_n^m(x)}{dx} \right]^2 dx = \int_{-1}^1 \frac{dP_n^m(x)}{dx} \frac{dP_n^m(x)}{dx} dx - \int_{-1}^1 x^2 \frac{dP_n^m(x)}{dx} \frac{dP_n^m(x)}{dx} dx. \quad (\text{A.20})$$

Aplicando a técnica de integração por partes na Eq. (A.20), tem-se

$$u = \frac{dP_n^m(x)}{dx} \quad \Rightarrow \quad \frac{du}{dx} = \frac{d^2 P_n^m(x)}{dx^2} \quad \text{e} \quad \frac{dv}{dx} = \frac{dP_n^m(x)}{dx} \quad \Rightarrow \quad v = P_n^m(x)$$

na primeira integral do lado direito da Eq. (A.20) e para a segunda integral da Eq. (A.20), tem-se

$$u = x^2 \frac{dP_n^m(x)}{dx} \quad \Rightarrow \quad \frac{du}{dx} = x^2 \frac{d^2 P_n^m(x)}{dx^2} + 2x \frac{dP_n^m(x)}{dx}$$

e

$$\frac{dv}{dx} = \frac{dP_n^m(x)}{dx} \quad \Rightarrow \quad v = P_n^m(x).$$

Assim aplicando a fórmula de integração por partes e desconsiderando os termos que são nulos encontra-se,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1-x^2) \left[\frac{dP_n^m(x)}{dx} \right]^2 dx &= - \int_{-1}^1 P_n^m(x) \frac{d^2 P_n^m(x)}{dx^2} dx - \\ &+ \int_{-1}^1 P_n^m(x) \left[x^2 \frac{d^2 P_n^m(x)}{dx^2} + 2x \frac{dP_n^m(x)}{dx} \right] dx \\ &= - \int_{-1}^1 P_n^m(x) \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_n^m(x)}{dx} \right] dx. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

A segunda integral do lado direito da Eq. (A.19) também é resolvida por partes. Tendo

$$u = xP_n^m(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{du}{dx} = \left[x \frac{dP_n^m(x)}{dx} + P_n^m(x) \right] \quad \text{e,} \quad \frac{dv}{dx} = \frac{dP_n^m(x)}{dx} \quad \Rightarrow \quad v = P_n^m(x),$$

assim

$$\int_{-1}^1 xP_n^m(x) \frac{dP_n^m(x)}{dx} dx = \underbrace{[x \{P_n^m(x)\}^2]_{-1}^1}_0 - \int_{-1}^1 xP_n^m(x) \frac{dP_n^m(x)}{dx} dx - \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx.$$

Desta forma resulta que

$$\int_{-1}^1 xP_n^m(x) \frac{dP_n^m(x)}{dx} dx = -\frac{1}{2} \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx. \quad (\text{A.22})$$

Como $P_n^m(x)$ é solução da Eq. (A.3), tem-se

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_n^m(x)}{dx} \right] + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_n^m(x) = 0.$$

Multiplicado esta última equação por $P_n^m(x)$ e integrando em relação a $x \in (-1, 1)$, obtém-se

$$\int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] dx = - \int_{-1}^1 P_n^m(x) \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_n^m(x)}{dx} \right] dx. \quad (\text{A.23})$$

Substituindo (A.21) em (A.23) encontra-se

$$\int_{-1}^1 (1-x^2) \left[\frac{dP_n^m(x)}{dx} \right]^2 dx = \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] dx \quad (\text{A.24})$$

Substituindo (A.24) e (A.22) em (A.19) obtém-se

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 [P_n^{m+1}(x)]^2 dx &= \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] dx - m \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx + \\
 &\quad + \int_{-1}^1 \frac{m^2 x^2}{1-x^2} [P_n^m(x)]^2 dx \\
 &= \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 \left\{ n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2} - m + \frac{m^2 x^2}{1-x^2} \right\} dx \\
 &= \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 \left[\frac{(1-x^2)n(n+1) - m^2 - m(1-x^2) + m^2 x^2}{1-x^2} \right] dx.
 \end{aligned}$$

Simplificando a expressão entre parênteses obtemos a fórmula de recorrência

$$\int_{-1}^1 [P_n^{m+1}(x)]^2 dx = [n(n+1) - m(m+1)] \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx.$$

Desta fórmula obtém-se

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx &= (n-m+1)(n-m+2) \cdots n(n+m) \times \\
 &\quad (n+m-1) \cdots (n+1) \underbrace{\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx}_{\frac{2}{2n+1}} \\
 &= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad \text{se } n = k.
 \end{aligned}$$

■

Teorema A.4. Da Eq. (A.18) segue que para qualquer número inteiro m o conjunto de funções

$\{\varphi_n^m(x)\}$

$$\varphi_n^m(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(x), \quad n = m, m+1, \dots \quad (\text{A.25})$$

forma um sistema ortonormal e completo em $(-1, 1)$.

Demonstração: Veja [44], Cap III, Sec. 17, p. 248-249.

■

A.8 Polinômios Harmônicos e Harmônicos Esféricos

Definição A.3. Um polinômio homogêneo V de n -ésimo grau nas variáveis x, y, z que satisfaz a equação

$$\nabla^2 V(x, y, z) = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = 0$$

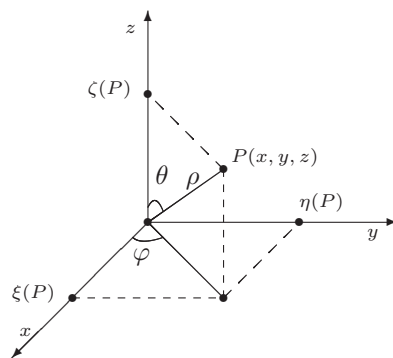
é denominado de *Polinômio de Laplace de n -ésimo grau*.

Teorema A.5. *Existe somente $2n + 1$ Polinômios de Laplace de n -ésimo grau linearmente independentes.*

Demonstração: Veja [44], Cap. III, Sec. 18, p. 253-255. ■

Considere $V(x, y, z)$ um Polinômio de Laplace de n -ésimo grau qualquer e considere x, y, z as coordenadas cartesianas de um ponto M com respeito a um conjunto de eixos ortogonais com origem em $\vec{0}$.

Seja $\overline{OM} = \rho$ e seja P o ponto de intersecção do segmento \overline{OM} com a esfera unitária ω com centro em $\vec{0}$. Denote por $\xi(P), \eta(P), \zeta(P)$ as coordenadas de P , então



$$V(x, y, z) = \rho^n V(\xi(P), \eta(P), \zeta(P))$$

Figura A.2: Representação de um ponto no espaço.

Em termos das coordenadas esféricas, pode-se escrever o ponto P da seguinte forma

$$\xi(P) = \rho \cos \varphi \sin \theta, \quad \eta(P) = \rho \sin \theta \sin \varphi, \quad \zeta(P) = \rho \cos \theta$$

onde $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ e $0 \leq \theta \leq \pi$, portanto

$$V(x, y, z) = \rho^n V(\cos \varphi \sin \theta, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta).$$

Definição A.4. A função

$$Y(P) = Y(\theta, \varphi) = V(\cos \varphi \sen \theta, \sen \theta \sen \varphi, \cos \theta) \quad (\text{A.26})$$

é chamada função de Laplace ou *harmônico esférico de n -ésima ordem*.

A função $Y(\theta, \varphi)$ é um polinômio nas variáveis $\cos \varphi \sen \theta$, $\sen \theta \sen \varphi$, $\cos \theta$ e da Definição A.4 segue que os harmônicos esféricos $Y(P)$ de n -ésima ordem são aquelas funções do ponto $P = (\theta, \varphi)$ da esfera unitária ω tal que a função $\rho^n Y(P)$ do ponto $M = (\rho, P)$ é um polinômio de Laplace de n -ésimo grau.

Teorema A.6. Denota-se por $Y_n^m(\theta, \varphi)$ os $2n + 1$ harmônicos esféricos

$$Y_n^m(\theta, \varphi) = V_m(\cos \varphi \sen \theta, \sen \theta \sen \varphi, \cos \theta), \quad m = 0, 1, 2, \dots, 2n$$

onde $V_m(x, y, z)$ são $2n + 1$ polinômios harmônicos de n -ésimo grau, veja [44] 18.1b, então os harmônicos esféricos são linearmente independentes.

Demonstração: Veja [44], Cap. III, Sec. 18, p. 256-257. ■

Teorema A.7. Para um polinômio $Y(\theta, \varphi)$ nas variáveis $\cos \varphi \sen \theta$, $\sen \theta \sen \varphi$, $\cos \theta$ ser um harmônico esférico de n -ésimo grau é necessário e suficiente que ele satisfaça a equação diferencial parcial de segunda ordem

$$\frac{1}{\sen \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sen \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sen^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + n(n+1)Y = 0. \quad (\text{A.27})$$

Demonstração: Veja [44], Cap. III, Sec. 18, p. 257-261. ■

Definição A.5. Todo sistema de $2n + 1$ harmônicos esféricos de n -ésima ordem linearmente independentes é chamado de *sistema fundamental de harmônicos esféricos de n -ésima ordem*.

Corolário A.1. Se $P_n(x)$ é um Polinômio de Legendre de n -ésimo grau, as $2n + 1$ funções do ponto $P \equiv (\theta, \varphi)$ na esfera ω

$$\begin{aligned} U_n^0(P) &= P_n(\cos \theta) \\ U_n^m(P) &= P_n^{(m)}(\cos \theta) \sen^m \theta \cos m\varphi, \quad m = 1, 2, \dots, n \\ V_n^m(P) &= P_n^{(m)}(\cos \theta) \sen^m \theta \sen m\varphi \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

formam um sistema fundamental de harmônicos esféricos de n -ésima ordem.

Demonstração: Pelo Teorema A.7, veja [44] Cap III, Sec 18.3, as funções definidas em (A.28) são harmônicos esféricos de n -ésima ordem, assim é necessário provar que são linearmente independentes.

Suponha que existam constantes $h_0, h_1, \dots, h_n, k_1, k_2, \dots, k_n$ tal que obtém-se a identidade

$$h_0 P_n(\cos \theta) + \sum_{m=1}^n P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta [h_m \cos m\varphi + k_m \operatorname{sen} m\varphi] = 0. \quad (\text{A.29})$$

Multiplicando ambos os lados por $\cos m\varphi$ e integrando em relação a $\varphi \in (0, 2\pi)$ tem-se,

$$\int_0^{2\pi} h_0 P_n(\cos \theta) \cos m\varphi d\varphi = \frac{h_0}{m} P_n(\cos \theta) \operatorname{sen} m\varphi \Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} = 0$$

e

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sum_{m=1}^n h_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta \cos^2 m\varphi d\varphi &= \sum_{m=1}^n h_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta \int_0^{2\pi} \cos^2 m\varphi d\varphi \\ &= \sum_{m=1}^n h_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta \left[\frac{\varphi}{2} + \frac{\operatorname{sen} 2m\varphi}{4m} \right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \\ &= h_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta. \end{aligned}$$

A expressão abaixo é nula devido as propriedades de ortogonalidade das funções trigonométricas, portanto

$$\int_0^{2\pi} \sum_{m=1}^n k_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta \operatorname{sen} m\varphi \cos m\varphi d\varphi = 0.$$

Finalmente segue que

$$h_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta = 0. \quad (\text{A.30})$$

Da mesma forma, multiplicando (A.29) por $\operatorname{sen} m\varphi$ e integrando em $\varphi \in (0, 2\pi)$, encontra-se

$$k_m P_n^{(m)}(\cos \theta) \operatorname{sen}^m \theta = 0. \quad (\text{A.31})$$

Donde concluímos de (A.30) e (A.31) que h_m e k_m são todos nulos para $m = 0, 1, 2, \dots, n$. ■

As duas últimas equações do sistema (A.28) envolvem os termos $P_n^{(m)}(\cos \theta)$. Da

Eq. (A.13) tem-se que

$$P_n^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} P_n^{(m)}(x) \quad \Rightarrow \quad P_n^{(m)}(x) = \frac{P_n^m(x)}{(1 - x^2)^{\frac{m}{2}}}.$$

Tomando $x = \cos \theta$, obtém-se

$$P_n^{(m)}(\cos \theta) = \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\text{sen}^m \theta}. \quad (\text{A.32})$$

Substituindo (A.32) no (A.28), tem-se que o sistema de $2n + 1$ harmônicos esféricos do ponto $P = (\theta, \varphi)$ na esfera ω é dado por

$$\begin{aligned} U_n^0(P) &= P_n(\cos \theta) \\ U_n^m(P) &= P_n^m(\cos \theta) \cos m\varphi, \quad m = 1, 2, \dots, n \\ V_n^m(P) &= P_n^m(\cos \theta) \text{sen } m\varphi \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

A.9 Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos

Definição A.6. Se $Y(\theta, \varphi)$ é um harmônico esférico, conforme Teorema A.7, então ele admite a seguinte decomposição em Série de Fourier [44],

$$Y(\theta, \varphi) = A_0 P_n(\cos \theta) + \sum_{m=1}^n [A_m P_n^m(\cos \theta) \cos m\varphi + B_m P_n^m(\cos \theta) \text{sen } m\varphi]$$

onde A_0 , A_m e B_m , são constantes a serem determinadas.

Teorema A.8. *Dois harmônicos esféricos de ordem diferentes são ortogonais sobre a esfera ω , ou seja,*

$$\int_{\omega} Y_n(P) Y_m(P) d\omega(P) = 0 \quad \text{se} \quad n \neq m,$$

onde $d\omega(P) = \text{sen } \theta d\theta d\varphi$ denota o elemento de área na superfície da esfera ω .

Demonstração: Se $Y_n(P)$ e $Y_m(P)$ satisfazem a equação diferencial parcial de segunda ordem

(A.27), então³

$$\begin{aligned}\frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_n}{\partial \varphi^2} &= -n(n+1)Y_n \\ \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_m}{\partial \varphi^2} &= -m(m+1)Y_m.\end{aligned}$$

Multiplicando a primeira destas equações por $Y_m(P) \operatorname{sen} \theta$ e a segunda por $Y_n(P) \operatorname{sen} \theta$,

$$\begin{aligned}Y_m \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} \right] + \frac{Y_m}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^2 Y_n}{\partial \varphi^2} &= -n(n+1)Y_n Y_m \operatorname{sen} \theta \\ Y_n \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right] + \frac{Y_n}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^2 Y_m}{\partial \varphi^2} &= -m(m+1)Y_m Y_n \operatorname{sen} \theta\end{aligned}\quad (\text{A.34})$$

Subtraindo as Eqs. (A.34), tem-se

$$\begin{aligned}Y_m \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} \right] - Y_n \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right] + \frac{Y_m}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^2 Y_n}{\partial \varphi^2} - \frac{Y_n}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^2 Y_m}{\partial \varphi^2} = \\ -n(n+1)Y_n Y_m \operatorname{sen} \theta + m(m+1)Y_m Y_n \operatorname{sen} \theta.\end{aligned}\quad (\text{A.35})$$

Re-agrupando os obtém-se dessa última equação

$$Y_m \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} \right] - Y_n \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right] = \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \left(Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right) \right]\quad (\text{A.36})$$

e

$$\frac{Y_m}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^2 Y_n}{\partial \varphi^2} - \frac{Y_n}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^2 Y_m}{\partial \varphi^2} = \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \varphi} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \varphi} \right].\quad (\text{A.37})$$

Substituindo (A.37) e (A.36) em (A.35) encontra-se

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \theta} \left[\operatorname{sen} \theta \left(Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right) \right] + \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \varphi} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \varphi} \right] = \\ [m(m+1) - n(n+1)]Y_m Y_n \operatorname{sen} \theta.\end{aligned}$$

³Aqui omitiremos o argumento P , para simplificar a notação.

Agora, integrando com respeito a $\theta \in (0, \pi)$ e $\varphi \in (0, 2\pi)$, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\text{sen } \theta \left(Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right) \right] \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi + \\ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{\text{sen } \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \varphi} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \varphi} \right] \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi = \\ [m(m+1) - n(n+1)] \int_\omega Y_m(P) Y_n(P) \, d\omega(P). \quad (\text{A.38}) \end{aligned}$$

Resolvendo a primeira integral na variável θ , tem-se

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\text{sen } \theta \left(Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right) \right] \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi = \\ \int_0^{2\pi} \left[\text{sen } \theta \left(Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \theta} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \theta} \right) \right]_{\theta=0}^{\theta=\pi} d\varphi = 0 \quad (\text{A.39}) \end{aligned}$$

e a segunda em relação a φ , obtém-se

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \varphi} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \varphi} \right] d\theta \, d\varphi = \int_0^\pi \left[Y_m \frac{\partial Y_n}{\partial \varphi} - Y_n \frac{\partial Y_m}{\partial \varphi} \right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} d\theta = 0. \quad (\text{A.40})$$

Portanto, substituindo (A.40) e (A.39) em (A.38) e como $m \neq n$ segue que $[m(m+1) - n(n+1)] \neq 0$ e assim

$$\int_\omega Y_m(P) Y_n(P) \, d\omega(P) = 0 \quad \text{se} \quad m \neq n.$$

■

Teorema A.9. *Os harmônicos esféricos fundamentais de n -ésima ordem definidos em (A.33), são mutuamente ortogonais sobre a esfera ω .*

Demonstração: De fato, tomando a integral do produto de duas das funções do sistema (A.33) sobre a esfera, tem-se

$$\begin{aligned} \int_\omega U_n^0(P) U_n^m(P) \, d\omega(P) &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} P_n(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta) \cos m\varphi \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi \\ &= \int_0^\pi P_n(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta) \left[\frac{\text{sen } m\varphi}{m} \right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \text{sen } \theta \, d\theta = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{\omega} U_n^0(P) V_n^m(P) d\omega(P) &= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} P_n(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta) \sin m\varphi \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \int_0^{\pi} P_n(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos m\varphi}{m} \Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \sin \theta d\theta = 0, \end{aligned}$$

e finalmente

$$\begin{aligned} \int_{\omega} U_n^m(P) V_n^m(P) d\omega(P) &= \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} P_n^m(\cos \theta) \cos m\varphi P_n^m(\cos \theta) \sin m\varphi \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= \int_0^{\pi} [P_n^m(\cos \theta)]^2 \frac{\sin^2 m\varphi}{2m} \Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \sin \theta d\theta = 0. \end{aligned}$$

■

Teorema A.10. *O produto de dois harmônicos esféricos idênticos definidos em (A.33) é dado por*

$$\int_{\omega} [U_n^0(P)]^2 d\omega(P) = \frac{4\pi}{2n+1} \quad (\text{A.41})$$

$$\int_{\omega} [U_n^m(P)]^2 d\omega(P) = \int_{\omega} [V_n^m(P)]^2 d\omega(P) = \frac{2\pi}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!}, \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (\text{A.42})$$

Demonstração: Da primeira equação tem-se que

$$\begin{aligned} \int_{\omega} [U_n^0(P)]^2 d\omega(P) &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} [P_n(\cos \theta)]^2 \sin \theta d\theta d\varphi = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} [P_n(\cos \theta)]^2 \sin \theta d\theta \\ &= 2\pi \int_0^{\pi} [P_n(\cos \theta)]^2 \sin \theta d\theta \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{4\pi}{2n+1}. \end{aligned}$$

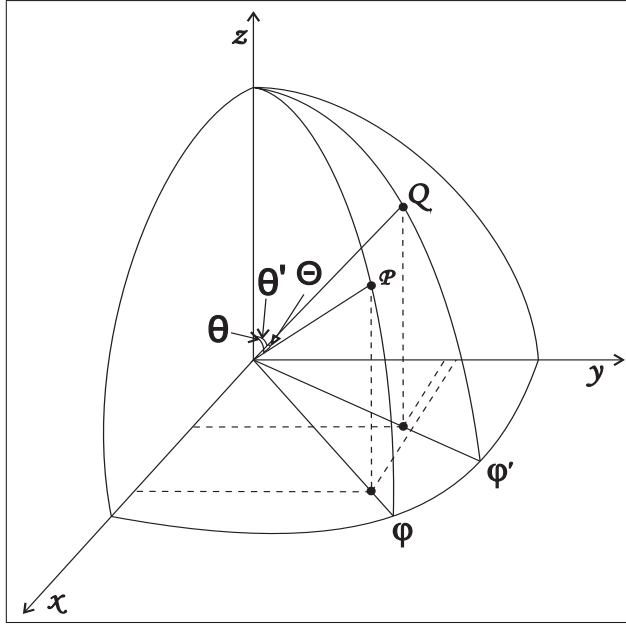
Para demonstrar a fórmula para $V_n^m(P)$ veja que

$$\begin{aligned} \int_{\omega} [V_n^m(P)]^2 d\omega(P) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} [P_n^m(\cos \theta) \sin m\varphi]^2 \sin \theta d\theta \\ &= \int_0^{2\pi} \sin^2 m\varphi d\varphi \int_0^{\pi} [P_n^m(\cos \theta)]^2 \sin \theta d\theta \\ &= \pi \int_{-1}^1 [P_n^m(x)]^2 dx = \frac{2\pi}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \end{aligned}$$

Para mostrar para $U_n^m(P)$, o cálculo é semelhante. ■

Considere dois pontos P e Q na esfera ω e indique por $\Theta(P, Q)$ o ângulo entre 0 e π formado pelos vetores \vec{OP} e \vec{OQ} , conforme Figura A.3. Tomando P fixo, e Q variando sobre

ω , $P_n[\cos \Theta(P, Q)]$ é um harmônico esférico de n -ésima ordem nas coordenadas esféricas de Q . Se θ, φ e θ', φ' são as coordenadas esféricas de P e Q , respectivamente, em relação a um ponto estacionário P_0 em ω , e se nos referirmos os pontos da ω para um sistema cartesiano, com o eixo positivo z coincidindo com OP_0 , e o plano zx coincidindo com o primeiro meridiano, e seja $P = (x, y, z)$ e $Q = (x', y', z')$, então



$$\begin{cases} x = \cos \varphi \operatorname{sen} \theta \\ y = \operatorname{sen} \varphi \operatorname{sen} \theta \\ z = \cos \theta \end{cases} \quad \begin{cases} x' = \cos \varphi' \operatorname{sen} \theta' \\ y' = \operatorname{sen} \varphi' \operatorname{sen} \theta' \\ z' = \cos \theta' \end{cases}$$

Figura A.3: Representação e dois pontos no espaço em coordenadas esféricas.

e portanto

$$\cos \Theta = \frac{\langle \vec{OP}, \vec{OQ} \rangle}{\|\vec{OP}\| \|\vec{OQ}\|} = \frac{xx' + yy' + zz'}{\|\vec{OP}\| \|\vec{OQ}\|}.$$

As normas $\|\vec{OP}\| = \|\vec{OQ}\| = 1$, pois é o raio da esfera, assim

$$\begin{aligned} \cos \Theta &= \cos \varphi \operatorname{sen} \theta \cos \varphi' \operatorname{sen} \theta' + \operatorname{sen} \varphi \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi' \operatorname{sen} \theta' + \cos \theta \cos \theta' \\ &= \cos \theta \cos \theta' + \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \theta' [\cos \varphi \cos \varphi' + \operatorname{sen} \varphi \operatorname{sen} \varphi'] \\ &= \cos \theta \cos \theta' + \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \theta' \cos(\varphi - \varphi') \end{aligned} \tag{A.43}$$

Teorema A.11. O polinômio $P_n(\cos \Theta)$ é um polinômio nas variáveis $\cos \theta'$, $\operatorname{sen} \theta'$, $\cos \varphi'$ e $\operatorname{sen} \varphi'$ e satisfaz

$$\frac{1}{\operatorname{sen} \theta'} \frac{\partial}{\partial \theta'} \left[\operatorname{sen} \theta' \frac{\partial P_n(\cos \Theta)}{\partial \theta'} \right] + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta'} \frac{\partial^2 P_n(\cos \Theta)}{\partial \varphi'^2} + n(n+1)P_n(\cos \Theta) = 0.$$

Demonstração: Veja [44] Cap. III, Sec. 19, p. 265-266. ■

Teorema A.12. *Seja $Y_n(P)$ um harmônico esférico de n -ésima ordem e $P_m[\cos \Theta(P, Q)]$ um polinômio, então*

$$\begin{aligned} \frac{2n+1}{4\pi} \int_{\omega} Y_n(Q) P_m[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) &= 0, \quad \text{se } m \neq n \\ \frac{2n+1}{4\pi} \int_{\omega} Y_n(Q) P_m[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) &= Y_n(P), \quad \text{se } m = n. \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

Demonstração: A primeira fórmula é consequência da ortogonalidade de dois harmônicos esféricos de ordem diferente.

Para mostrar a segunda fórmula observe que as funções $\rho^n Y_n$ juntamente com suas derivadas parciais de segunda ordem são funções contínuas nas coordenadas x, y, z no ponto (ρ, P) ambos dentro da esfera unitária ω , e $\rho^n Y_n$ satisfaz a equação $\nabla^2 \rho^n Y_n = 0$, temos pelo teorema de Gauss/Stokes que o ponto (ρ', P) dentro da esfera ω , $0 \leq \rho' < 1$,

$$\rho'^n Y_n(P) = \frac{1}{4\pi} \int_{\omega} \left[\rho^n Y_n(Q) \frac{d\frac{1}{r}}{d\vec{n}} - \frac{1}{r} \frac{d\rho^n Y_n(Q)}{d\vec{n}} \right] d\omega(Q) \quad (\text{A.45})$$

onde $\frac{1}{r}$ é o inverso da distância r do ponto (ρ', P) e do ponto variável (ρ, Q) em ω , e \vec{n} é o vetor normal interior a superfície de ω .

Em ω tem-se

$$\rho^n Y_n(Q) = Y_n(Q), \quad \frac{d\rho^n Y_n(Q)}{d\vec{n}} = -n Y_n(Q) \quad (\text{A.46})$$

e então deve-se calcular $\frac{1}{r}$ e $\frac{d\frac{1}{r}}{d\vec{n}}$ na ω .

Seja $\rho' = \overline{OP}$ e $\rho = \overline{OQ}$, com $\rho' < \rho$ e Θ é o ângulo formado por P e Q . Usando a fórmula de recorrência dos Polinômios de Legendre, Eq. (A.5), tem-se que

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{\sqrt{\rho'^2 - 2\rho\rho' \cos \Theta + \rho^2}} = \frac{1}{\rho} \left(1 - 2\frac{\rho'}{\rho} \cos \Theta + \left(\frac{\rho'}{\rho}\right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\rho'^m}{\rho^{m+1}} P_m(\cos \Theta). \quad (\text{A.47})$$

Calculando a derivada direcional, na direção \overline{QO} , obtém-se

$$\frac{d\frac{1}{r}}{d\rho} = \sum_{m=0}^{\infty} (m+1) \frac{\rho'^m}{\rho^{m+2}} P_m(\cos \Theta) \quad (\text{A.48})$$

e para $\rho = 1$, isto é, sobre a superfície da esfera ω , tem-se das equações (A.47) e (A.48), respectivamente

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{r}\right)_\omega &= \sum_{m=0}^{\infty} \rho^m P_m[\cos \Theta(P, Q)], \\ \left(\frac{d\frac{1}{r}}{d\vec{n}}\right)_\omega &= \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)\rho^m P_m[\cos \Theta(P, Q)]. \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Substituindo (A.46) e (A.49) em (A.45) obtém-se

$$\begin{aligned} \rho^n Y_n(P) &= \frac{1}{4\pi} \int_\omega Y_n(Q) \left[\sum_{m=0}^{\infty} (m+1)\rho^m P_m[\cos \Theta(P, Q)] \right. \\ &\quad \left. + n \sum_{m=0}^{\infty} \rho^m P_m[\cos \Theta(P, Q)] \right] d\omega(Q) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_\omega Y_n(Q) \left[\sum_{m=0}^{\infty} (n+m+1)\rho^m P_m[\cos \Theta(P, Q)] \right] d\omega(Q). \end{aligned}$$

Agora integrando termo a termo o lado direito e lavando em conta que a série é uniformemente convergente, tem-se pela ortogonalidade de Y_n e P_m , $m \neq n$, que

$$\rho^n Y_n(P) = \frac{(2n+1)\rho^n}{4\pi} \int_\omega Y_n(Q) P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q).$$

Cancelando o termo ρ^n em ambos os lados, obtém-se

$$Y_n(P) = \frac{2n+1}{4\pi} \int_\omega Y_n(Q) P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q)$$

e o teorema está demonstrado. ■

Teorema A.13 (Teorema da Adição dos Harmônicos Esféricos). *Seja $P = (\theta, \varphi)$ um ponto fixo sobre a esfera e $Q = (\theta', \varphi')$, então usando (A.43) e o sistema (A.33) encontra-se*

$$\begin{aligned} P_n[\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')] &= \\ P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') + 2 \sum_{m=1}^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta') \cos m(\varphi - \varphi'). \end{aligned}$$

Demonstração: Como P é fixo, então a função $P_n[\cos \Theta(P, Q)]$ é um harmônico esférico em Q de n -ésima ordem, pelo Teorema A.11, e portanto pela Definição A.6 admite a seguinte

decomposição

$$P_n[\cos \Theta(P, Q)] = A_0 P_n(\cos \theta') + \sum_{m=1}^n [A_m P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' + B_m P_n^m(\cos \theta') \operatorname{sen} m\varphi'] \quad (\text{A.50})$$

onde A_0 , A_m e B_m são constantes a serem determinadas.

Multiplicando ambos os lados da Eq. (A.50) por $P_n(\cos \theta')$ e integrando sobre ω , obtém-se

$$\begin{aligned} \int_{\omega} P_n(\cos \theta') P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) &= \int_{\omega} A_0 P_n(\cos \theta') P_n(\cos \theta') d\omega(Q) + \\ &+ \int_{\omega} \sum_{m=1}^n P_n(\cos \theta') [A_m P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' + B_m P_n^m(\cos \theta') \operatorname{sen} m\varphi'] d\omega(Q). \end{aligned}$$

Tendo em vista que a última integral na equação acima é zero, pois envolve funções trigonométricas, tem-se então

$$\int_{\omega} P_n(\cos \theta') P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) = A_0 \int_{\omega} [P_n(\cos \theta')]^2 d\omega(Q).$$

Usando a Eq. (A.41) do Teorema A.10 e usando a Eq. (A.44) do Teorema A.12 obtém-se, respectivamente,

$$A_0 \int_{\omega} [P_n(\cos \theta')]^2 d\omega(Q) = \frac{4\pi A_0}{2n+1}$$

e

$$\int_{\omega} P_n(\cos \theta') P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) = \frac{4\pi P_n(\cos \theta')}{2n+1}.$$

Portanto

$$A_0 = P_n(\cos \theta) \quad (\text{A.51})$$

Agora multiplicando a Eq. (A.50) por $P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi'$ e integrando sobre ω tem-se

$$\begin{aligned} \int_{\omega} P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) &= \int_{\omega} A_0 P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' P_n(\cos \theta') d\omega(Q) + \\ &+ \int_{\omega} \sum_{m=1}^n P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' [A_m P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' + B_m P_n^m(\cos \theta') \operatorname{sen} m\varphi'] d\omega(Q) \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

Dessa última equação tem-se que

$$\int_{\omega} A_0 P_n^m(\cos \theta') P_n(\cos \theta') \cos m\varphi' d\omega(Q) = \int_0^{\pi} A_0 P_n^m(\cos \theta') P_n(\cos \theta') \sin \theta' d\theta' \times$$

$$\int_0^{2\pi} \cos m\varphi' d\varphi' = 0$$

e

$$\int_{\omega} \sum_{m=1}^n P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' [A_m P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' + B_m P_n^m(\cos \theta') \sin m\varphi'] d\omega(Q) =$$

$$\sum_{m=1}^n \int_{\omega} A_m [P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi']^2 d\omega(Q) +$$

$$+ \sum_{m=1}^n \int_0^{\pi} B_m [P_n^m(\cos \theta')]^2 \sin \theta' d\theta' \underbrace{\int_0^{2\pi} \cos m\varphi' \sin m\varphi' d\varphi'}_0$$

Assim a Eq. (A.52) fica

$$\int_{\omega} P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) = A_m \int_{\omega} [P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi']^2 d\omega(Q)$$

Da Eq. (A.42) do Teorema A.10, tem-se

$$A_m \int_{\omega} [P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi']^2 d\omega(Q) = \frac{2\pi}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} A_m$$

e pela Eq. (A.44) do Teorema A.12, obtém-se

$$\int_{\omega} P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi' P_n[\cos \Theta(P, Q)] d\omega(Q) = \frac{4\pi}{2n+1} P_n^m(\cos \theta) \cos m\varphi.$$

Portanto

$$A_m = \frac{2(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) \cos m\varphi \quad (\text{A.53})$$

De maneira análoga, multiplicando a Eq. (A.50) por $P_n^m(\cos \theta') \sin m\varphi'$ e integrando sobre ω , iremos obter

$$B_m = \frac{2(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) \sin m\varphi. \quad (\text{A.54})$$

Substituindo (A.54), (A.53) e (A.51) em (A.50), obtém-se

$$P_n[\cos \Theta(P, Q)] = P_n(\cos \theta)P_n(\cos \theta') + \\ + \sum_{m=1}^n \left[\frac{2(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta)P_n^m(\cos \theta') \cos m\varphi \cos m\varphi' + \right. \\ \left. + \frac{2(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta)P_n^m(\cos \theta') \sin m\varphi \sin m\varphi' \right]$$

e portanto

$$P_n[\cos \Theta(P, Q)] = P_n(\cos \theta)P_n(\cos \theta') + 2 \sum_{m=1}^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta)P_n^m(\cos \theta') \cos m(\varphi - \varphi')$$

e assim o teorema está demonstrado. ■

Referências Bibliográficas

- [1] G. B. Arfken. Mathematical Methods for Physicists.
- [2] L. B. Barichello, R. D. Garcia, and C. E. Siewert. On inverse boundary-condition problems in radiative transfer. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer., 57(3):405 – 410, 1997.
- [3] L. B. Barichello and M. T. M. B. Vilhena. An analytical solution for the one-dimensional discrete problem using laplace transform. XIV CNMAC - Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - Nova Friburgo, RJ, 1991.
- [4] L. B. Barichello and M. T. M. B. Vilhena. A general approach to the one group one dimensional transport equation. Kerntechnik, 58(3):182 – 184, 1993.
- [5] W. E. Boyce and R. C. DiPrima. Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno. LTC, Rio De Janeiro, 7^a edition, 2002.
- [6] R. L. Burden and J. D. Faires. Análise Numérica. Thomson, São Paulo, 2003.
- [7] H. F. Campos Velho, M. R. Retamoso, and M. T. M. B. Vilhena. Several experimental array and different radiometric measurements for estimating boundary conditions in natural waters. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2001.
- [8] H. F. Campos Velho, M. R. Retamoso, M. T. M. B Vilhena, and F. M. Ramos. Estimation of boundary conditions in hydrologic optics. Applied Numerical Mathematics, 1/2(40):87–100, 2000.
- [9] H. F. Campos Velho, S. Stephany, E. S. Chalhoub, F. M. Ramos, M. R. Retamoso, and M. T. M. B. Vilhena. New approaches on inverse hydrologic optics. Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional - Minisymposium on Inverse Problems on Medicine, Engineering and Geophysics, 2000.

- [10] A. V. Cardona and M. T. Vilhena. A solution of linear transport equation using chebyshev polynomials and laplace transform. Kerntechnik, 59:278, 1994.
- [11] A. V. Cardona and M. T. Vilhena. A solution of linear transport equation using walsh function and laplace transform. Annals of Nuclear Energy, 21:495, 1994.
- [12] K. M. Case and P. F. Zweifel. Linear Transport Theory. Addison-Wesley, New York, 1967.
- [13] Smithsonian Environmental Research Center. Phytoplankton lab: Hydrologic optics primer. <http://www.serc.si.edu/labs/phytoplankton/primer/hydrops.jsp>.
- [14] E. S. CHALHOUB and R. D. M. GARCIA.
- [15] S. Chandrasekhar. Radiative Transfer. Dover, New York, 1960.
- [16] R. V. Churchill. Séries de Fourier e Problemas de Valores de Contorno. Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 2^a edition, 1978.
- [17] B. Davison. Neutron Transport Theory. Oxford University Press, Oxford, 1957.
- [18] J. W. Dettman. Applied Complex Variables. Dover, New York, 1984.
- [19] C. Devaux and C. E. Siewert. The F_N method fro radiative transfer problems without azimuthal symmetry. Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP), 31:592 – 604, 1980.
- [20] H. Fritzsche. Programação Não-Linear; Análise e Métodos. Edgard Blücher LTDA, São Paulo, 1990.
- [21] R. D. M. Garcia. A review of the facile F_N method in particle transport theory. Transport Theory and Statistical Physics, 14(4):391 – 435, 1985.
- [22] M. G Godinho. Reconstrução de Perfis de Fontes de Bioluminescência Usando Algoritmo Genético. Tese doutorado, ITA, Campo Montenegro - São José dos Campos, SP, Brasil, 2000.
- [23] G. A. Gonçalves. Solução $\mathcal{L} TS_N$ da Equação Adjunta de Transporte de Nêutrons com Fonte Arbitrária para Elevada Ordem de Quadratura Numa Placa Homogênea. Dissertação

- tação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil, 1999.
- [24] C. Gordon, D. L. Webb, and S. Wolpert. One cannot hear the shape of a drum. Bulletin of the American Mathematical Society, 27(1):134–138, 1992.
- [25] C. W. Groetsch. Inverse Problems. The Mathematical Association of America, Washington, 1999.
- [26] P. C. Hansen. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the l-curve. SIAM Review, 34(4):561–580, 1992.
- [27] M. Kac. Can one hear the shape of a drum? American Mathematical Monthly, 73(4, part 2):1–23, 1966.
- [28] A. Kirsch. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems, volume AMS 120. Springer - Verlag, New York, 1996.
- [29] E. E. Lewis and W. F. Miller. Computational Methods of Neutron Transport. American Nuclear Society, Inc, Illinois, 1993.
- [30] N. J. McCormick. A critique of inverse solutions to slab geometry transport problems. Progress in Nuclear Energy, 8:235 – 245, 1981.
- [31] N. J. McCormick. Methods for solving inverse problems for radiation transport: An update. Transport Theory and Statistical Physics, 15(6&7):759 – 772, 1986.
- [32] N. J. McCormick. Inverse radiative transfer problems: A review. Nuclear Science and Engineering, 112:185 – 198, 1992.
- [33] N. J. McCormick. Analytical transport theory application in optical oceanography. Ann. Nucl. Energy, 23(4/5):381 – 395, 1996.
- [34] N. J. McCormick. Analytic inverse radiative transfer equations for atmospheric and hydrologic optics. J. Opt. Soc. Am., 21(6):1009 – 1017, 2004.
- [35] M. Metcalf. Fortran 90/95 Explained. Oxford, New York, 2^a edition, 1999.
- [36] C. D. Mobley. Light and Water: Radiative Transfer in Natural Waters. Academic Press, Inc, California, 1994.

- [37] V. A. Morozov. Regularization Methods for Ill-Posed Problems. CRC Press. Inc., Florida, 1993.
- [38] A. J. S. Neto and F. D. M. Neto. Problemas Inversos: Conceitos Fundamentais e Aplicações. EdUERJ, Rio de Janeiro, 2005.
- [39] A. R. Peirro. Fundamentos matemáticos da tomografia computadorizada: Métodos de transformação. Revista Matemática Universitária, (11):53–65, 1990.
- [40] A. R. Peirro and A. N. Iussem. Fundamentos matemáticos da tomografia computadorizada: Métodos de expansão em série. Revista Matemática Universitária, (12):57–85, 1990.
- [41] M. H. Protter. Can one hear the shape of a drum? revisited. SIAM Review, 2(29):185–197, 1987.
- [42] M. R. Retamoso. Estimativa de Condições de Contorno e Termo Fonte em Óptica Hidrológica. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil, 2000.
- [43] M. R. Retamoso, H. F. Campos Velho, and M. T. M. B. Vilhena. Estimation of boundary conditions from different experimental data using $\mathcal{L}TS_N$ method and tikhonov regularization. pages 209–214, 2002.
- [44] G. Sansone. Orthogonal Functions, volume IX. Interscience Publishers, Inc, New York, 1959.
- [45] C. F. Segatto and M. T. Vilhena. Extension of the $\mathcal{L}TS_N$ formulation for discrete ordinates problem without azimuthal symmetry. Annals of Nuclear Energy, 21(11):701 – 710, 1994.
- [46] C. E. Siewert and Jr. J. R. Thomas. A particular solution for the P_N method in spherical geometry. J. Quant. Spectrosc. Radiant. Transfer, 46(5):459–462, 1991.
- [47] M. R. R. Simch. Formulação $\mathcal{L}TS_N$ para Problemas em Transferência Radiativa com Polarização em Geometria Plana. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil, 2004.

- [48] R. P. Souto. Recuperação de Perfis Verticais de Propriedade Óticas Inerentes a Partir da Radiação Emergente da Água. Tese de doutorado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, São José dos Campos, SP, Brasil, 2006.
- [49] S. Stephany. Reconstrução de Propriedades Óticas e de Fontes de Bioluminescência em Águas Naturais. Tese de doutorado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE, São José dos Campos, SP, Brasil, 1997.
- [50] A. Tjonov and A. Samarsky. Ecuaciones de la Fisica Matematica. Editorial Mir, Moscou, 2^a edition, 1980.
- [51] A. N. Tikhonov and V. S. Arsenin. Solutions of Ill-posed problems. V.H. Winston and Sons, Washington, 1997.
- [52] M. T. Vilhena, C. F. Segatto, and L. B. Barichello. A particular solution for the S_N radiative transfer problems. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer., 53(4):467 – 469, 1995.
- [53] M. T. M. B. Vilhena and L. B. Barichello. The $\mathcal{L} TS_N$ method: A new analytical approach to solve the neutron transport equation. Kerntechnik, 56(5):334 – 336, 1991.
- [54] C. R. Vogel. Computational Methods for Inverse Problems. SIAM, Philadelphia, 2002.
- [55] Groetsch. C. W. Inverse Problems in the Mathematical Sciences. Vieweg, Cincinnati, 1993.
- [56] H. C. Yi, R. Snachez, and N. J. McCormick. Bioluminescence estimation from ocean *in situ* irradiances. Applied Optics, 31(6):822 – 830, 1992.
- [57] T. Zheng, N. J. McCormick, and R. Sanchez. Ocean source and optical property estimation from explicit and implicit algorithms. Applied Optics, 33(15):3265 – 3275, 1994.