Nome: ____________________________________ RA: ______________________

TESTE 5 - MS650 - Métodos Matemáticos II, 23 de outubro de 2023.

(**Atenção:** *Procure responder todas as questões nesta folha. Use o verso e evite folhas soltas.)*

A equação do calor

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

sendo a constante $\kappa > 0$ a condutividade térmica, é uma equação paradigmática da Física-Matemática. Nessa versão mais simples, descreve a evolução temporal de um fluxo de calor unidimensional caraterizado pela temperatura $u(x,t)$. Aqui, estamos interessados em sistemas infinitos ($-\infty < x < \infty$) e isolados ($\partial_x u(\pm\infty, t) = 0$). Vamos supor também que a temperatura é dada na escala absoluta (Kelvin) e, portanto, $u(x,t)$ é uma função positiva.

1. (2.5 Pontos) Obtenha a solução geral da equação do calor da forma

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} K(t,\lambda) e^{i\lambda x} d\lambda,$$

$i.e.$, soluções que correspondem a transformadas de Fourier para cada instante t.

Solução. *Substituindo-se essa expressão na equação do calor, temos*

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\partial_t K + \kappa\lambda^2 K\right) e^{-i\lambda x} d\lambda = 0.$$

A EDO para K tem solução simples, $K(t,\lambda) = A(\lambda)e^{-\kappa\lambda^2 t}$, e ficamos com a solução final

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(\lambda) e^{i\lambda x - \kappa\lambda^2 t} d\lambda.$$

A situação é bastante parecida com a questão da equação de Schroedinger da P1.

2. (2.5 Pontos) Dentre os diversos funcionais interessantes no contexto da equação do calor, destacam-se o funcional energia interna

$$\mathcal{E}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} u dx,$$

e o funcional entropia

$$\mathcal{S}(t) = -\int_{-\infty}^{\infty} u \log u dx.$$

Discuta a evolução temporal desses funcionais, $i.e.$, dada uma solução da equação do calor, discuta o comportamento de $\dot{\mathcal{E}}$ e $\dot{\mathcal{S}}$ para essa solução. (Dica: calcule explicitamente $\dot{\mathcal{E}}$ e $\dot{\mathcal{S}}$, use a equação do calor e todos seus conhecimentos de integração por partes.☺)

Solução. *Comecemos pela energia interna. Teremos*

$$\dot{\mathcal{E}} = \int_{-\infty}^{\infty} \partial_t u dx = \kappa \int_{-\infty}^{\infty} \partial_x^2 u dx = \kappa \partial_x u\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0.$$

Quer dizer, para o sistema isolado ($\partial_x u(\pm\infty, t) = 0$), a energia interna é conservada, o que é algo esperado. Note porém que para outras condições de contorno, teríamos

$$\dot{\mathcal{E}} = \kappa\partial_x u(\infty, t) - \kappa\partial_x u(-\infty, t).$$

O termo $\kappa\partial_x u(x,t)$ tem interpretação de fluxo de calor e, portanto, vemos que a energia interna pode variar se houver calor sendo bombeado ou retirado do sistema, o que é também um comportamento esperado. Note que esse funcional é, a menos de constantes multiplicativas, a energia interna total "autêntica" do sistema, já *que é de fato esperado*[1] *que a energia interna de um elemento de comprimento dx seja proporcional a sua temperatura $u(x,t)$*

Vamos agora à entropia. A primeira observação é que essa entropia não é a entropia usual termodinâmica. Sim, há mais de uma "entropia". Vamos identificá-la a seguir. Temos

$$\dot{\mathcal{S}} = -\int_{-\infty}^{\infty} (\log u + 1)\partial_t u dx = -\kappa \int_{-\infty}^{\infty} (\log u + 1)\partial_x^2 u dx = -\kappa \int_{-\infty}^{\infty} \log u \partial_x^2 u dx - \kappa \int_{-\infty}^{\infty} \partial_x^2 u dx$$

O último termo é nulo (para sistemas isolados) pelo item anterior. Para o outro termo, temos

$$\partial_x (\log u \partial_x u) = \log u \partial_x^2 u + \frac{(\partial_x u)^2}{u} = \log u \partial_x^2 u + 4\left(\partial_x \sqrt{u}\right)^2.$$

Portanto, ficamos com

$$-\kappa \int_{-\infty}^{\infty} \log u \partial_x^2 u dx = 4\kappa \int_{-\infty}^{\infty} \left(\partial_x \sqrt{u}\right)^2 dx - \kappa \log u \partial_x u\Big|_{-\infty}^{\infty}.$$

O último termo é nulo para sistemas isolados. Ficamos finalmente com

$$\dot{\mathcal{S}} = 4\kappa \int_{-\infty}^{\infty} \left(\partial_x \sqrt{u}\right)^2 dx \geq 0,$$

quer dizer, a entropia nunca decresce para um sistema isolado! Tenho certeza que vocês já sabiam disso... Notem que se houver fluxo de calor nos extremos do sistema, a entropia pode sim decrescer. São esses termos de "fluxo de entropia" que nos denunciam que essa entropia não é a entropia termodinâmica usual. No caso da entropia usual, a variação de entropia é sempre proporcional a $\frac{\Delta Q}{T}$, sendo ΔQ o fluxo de calor, que aqui sabemos que corresponde a $\kappa\partial_x u$. Assim, o termo de superfície para a entropia termodinâmica devia ser $\kappa\frac{\partial_x u}{u}$, e não $\kappa \log u \partial_x u$. Um desdobramento interessante deste item é procurar que funcional tem 1) esse termo de superfície; e 2) seja não decrescente. Esse funcional, que não é difícil de ser encontrado merecerá o nome de entropia termodinâmica para o nosso sistema. Porém, para o nosso caso específico, esse funcional sofrerá de um problema, diremos, potencialmente explosivo.☺ Por isso optamos pelo nosso funcional, que é a chamada entropia (diferencial) de Shannon, e que tem interpretação no contexto de teoria de informação semelhante à interpretação da entropia termodinâmica.

Uma nota importante. A entropia como definida por nosso funcional pode ser negativa, o que não seria compatível com a noção física de entropia. Porém, isto pode ser facilmente "corrigido" com a seguinte alteração

$$\mathcal{S}_0(t) = -\int_{-\infty}^{\infty} u \log \frac{u}{u_0} dx,$$

sendo $u_0 = \max u(x,0)$. Notem que isto nada mais é do que a adição de uma constante à entropia do funcional original, pois

$$-\int_{-\infty}^{\infty} u \log \frac{u}{u_0} dx = -\int_{-\infty}^{\infty} u \log u dx + \log u_0 \int_{-\infty}^{\infty} u dx = -\int_{-\infty}^{\infty} u \log u dx + \mathcal{E} \log u_0,$$

e já sabemos que $\mathcal{E}$ é uma constante para sistemas isolados. Usualmente, a quantidade relevante é a variação de entropia $\Delta\mathcal{S}$ associada a uma solução da equação de calor e, nesses casos, a constante aditiva é irrelevante e podemos sempre ficar com a definição original do funcional de entropia.

3. (2.5 Pontos) Resolva o problema da equação do calor para um sistema isolado com condição inicial

$$u(x,0) = u_0 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}.$$

[1] Obviamente, há aproximações aqui, notadamente a chamada aproximação adiabática, que garante que o sistema é tal que pode-se admitir que um elemento de comprimento dx esteja em equilíbrio com temperatura $u(x,t)$.

Calcule a energia e a entropia, conforme os funcionais do item anterior, e esboce o gráfico de $\mathcal{S}(t)$. Discuta o que puder.

Solução. *Novamente, isto é muito parecido com a questão da P1. Do primeiro item, teremos*

$$u_0 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(\lambda) e^{i\lambda x} d\lambda,$$

e já sabemos que $A(\lambda) = u_0 \sigma e^{-\frac{\sigma^2\lambda^2}{2}}$. *A solução será então*

$$\begin{aligned} u(x,t) = \frac{u_0\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda x - \lambda^2\left(\frac{\sigma^2}{2}+\kappa t\right)} d\lambda \quad &= \quad \frac{u_0\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\left(\sqrt{\frac{\sigma^2}{2}+\kappa t}\lambda - \frac{ix}{2\sqrt{\frac{\sigma^2}{2}+\kappa t}}\right)^2 - \frac{x^2}{4\left(\frac{\sigma^2}{2}+\kappa t\right)}\right] d\lambda \\ &= \quad \frac{u_0\sigma}{\sqrt{\sigma^2+2\kappa t}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2+4\kappa t}\right). \end{aligned}$$

Notem que se trata de uma certa distribuição "gauziana" centrada na origem com desvio padrão $\tilde{\sigma}(t) = \sqrt{\sigma^2+2\kappa t}$, i.e.,

$$u(x,t) = \sqrt{2\pi}\mu_0\sigma\mathcal{N}(0,\tilde{\sigma}^2(t))$$

Com a evolução do tempo t, a gaussiana vai se "alargando" e se "achatando". Guardem esta imagem.

A energia livre será

$$\mathcal{E} = \frac{u_0\sigma}{\sqrt{\sigma^2+2\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2+4\kappa t}\right) dx = \sqrt{2\pi}\mu_0\sigma \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(0,\tilde{\sigma}^2(t)) dx = \sqrt{2\pi}u_0\sigma.$$

Quer dizer, apesar de se alargar e se achatar, a solução é tal que a energia livre dada por essa integral é constante. Outra imagem para ser guardada. Note que isto é esperado, já que essa solução corresponde efetivamente a um sistema isolado.

Para a entropia, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{S} \quad &= \quad -\frac{u_0\sigma}{\sqrt{\sigma^2+2\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2+4\kappa t}\right)\left(\log u_0 - \frac{1}{2}\log\left(1+\frac{2\kappa t}{\sigma^2}\right) - \frac{x^2}{2\sigma^2+4\kappa t}\right) dx \\ &= \quad u_0\sigma\left(\frac{\frac{1}{2}\log\left(1+\frac{2\kappa t}{\sigma^2}\right) - \log u_0}{\sqrt{\sigma^2+2\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2+4\kappa t}\right) dx + \frac{1}{2(\sigma^2+2\kappa t)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2+4\kappa t}\right) dx\right) \\ &= \quad \sqrt{2\pi}u_0\sigma\left(\frac{1}{2}\log\left(1+\frac{2\kappa t}{\sigma^2}\right) - \log u_0 + \frac{1}{2}\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}u_0\sigma\left(1+\log\left(1+\frac{2\kappa t}{\sigma^2}\right)\right) - \mathcal{E}\log u_0. \end{aligned} \tag{1}$$

Atentem ao último termo, que é o único negativo na expressão. É exatamente a constante que identificamos na definição alternativa do funcional da entropia. Como podemos ver, a entropia cresce de maneira logarítmica. Para $t = 0$, temos

$$\mathcal{S}(0) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}u_0\sigma - \mathcal{E}\log u_0$$

e $\lim_{t\to\infty} \mathcal{S}(t) = \infty$ *logaritmicamente. É interessante inspecionar a derivada da entropia*

$$\dot{\mathcal{S}} = \frac{\sqrt{2\pi}\kappa u_0\sigma}{\sigma^2+2\kappa t}.$$

O gráfico da função entropia é simples, trata-se de uma função logarítmica e, portanto, monotonamente crescente. Fisicamente, a entropia divergir para $t \to \infty$ significa, grosso modo, que a desordem cresce indefinidamente. Intuitivamente (eu espero!), é natural associar entropia maior a pacotes gaussianos "espalhados", simplesmente porque ocupam um espaço maior no espaço de fase. O equilíbrio para nossas soluções corresponde a um pacote "maximalmente" alargado e achatado e, portanto, de entropia muito maior que a entropia da condição inicial, que era um pacote localizado na origem.

Vamos agora ao ponto interessante.

4. (2.5 Pontos) Discuta tudo o que puder sobre a dinâmica temporal reversa do item anterior, *i.e.*, discuta todo o que puder sobre o comportamento da função $u(x,t)$ e os respectivos funcionais para $t \leq 0$, com a condição inicial dada.

   Solução. *A primeira observação a partir do item anterior é que, uma vez fixada a condição inicial* $u(x,0)$, *a solução* $u(x,t)$ *existe para todo* $t > 0$, *e é uma solução "bem comportada", uma gaussiana que se alarga e se achata, com energia interna constante e entropia (de Shannon) crescente, algo perfeitamente compatível com a descrição de um sistema termodinâmico isolado que evolui em direção ao equilíbrio térmico. Porem, a evolução para* $t < 0$ *é completamente diferente e, de certa forma, catastrófica. Note que essa solução corresponde ao caso da equação com* $\kappa < 0$, *uma modificação simples, mas que tem implicações profundas. A primeira observação é que a solução não existe para todo* $t < 0$*! É fácil ver que para*

$$t = t_0 = -\frac{\sigma^2}{2\kappa}$$

   a solução explode. Notem que a equação do calor tem coeficientes constantes! E mesmo assim, sua dinâmica reversa não está definida para todo t*. É como se houvesse um "tempo inicial" associado a cada uma dessas gaussianas, um "big bang" para essas soluções, um instante* t_0 *tal que para* $t < t_0$ *as soluções sequer existem. Elas "nascem" em* $t = t_0$*. Porém, olhando para as gaussianas do item anterior no limite* $t \to t_0$*, vemos que elas "nascem" como deltas! Quer dizer, a condição inicial* $u(x,0) = u_0 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ *corresponde, efetivamente, a uma condição do tipo* $u(x,t_0) \propto \delta(x)$*, sendo que simplesmente elas não existem para* $t < t_0$*. A constante de proporcionalidade por ser determinada, por exemplo, através da energia livre, que é constante ao longo da evolução temporal.*

   Porém, o ponto realmente interessante é a entropia. O que podemos afirmar sobre $\mathcal{S}(t_0)$*? Bem, calculando-se esse limite ingenuamente, teremos* $\mathcal{S}(t_0) = -\infty$*. A questão é como interpretar este resultado. Ora, da nossa intuição do item anterior, gaussianas mais estreitas devem estar associadas a configurações de entropia menor que gaussianas mais largas. Uma delta é a gaussiana mais estreita possível, portanto sua entropia deve ser a menor possível, e visto deste ângulo, já não parece estranho ter uma entropia* $\mathcal{S}(t_0) = -\infty$ *para uma delta, da mesma maneira que a entropia* $\mathcal{S}(\infty) = \infty$ *está associada à gaussiana mais achatada possível. O importante é que a evolução total do sistema, com* $t_0 \leq t < \infty$*, corresponde a entropia crescendo monotonicamente no intervalo* $(-\infty, \infty)$*, passamos de um sistema com conteúdo de informação "mínimo" (por exemplo, todas as (infinitas!) partículas amontoadas em* $x = 0$*) para um de informação "máxima" (todas as partículas espalhadas homogeneamente sobre a reta real).*

   Esta propriedade de que a evolução reversa da equação do fluxo de calor não é "bem comportada", de que existe um "tempo inicial" t_0 *para cada solução, aparece também em outras situações envolvendo outros fluxos. O caro mais célebre envolve uma equação não linear que lembra muito a equação do calor, é o chamado fluxo geométrico de Ricci, e essas ideias foram fundamentais para a já folclórica prova da conjectura de Poincaré de G. Perelman*[2]*. Comentarei mais a respeito na aula de quarta-feira. Eu não conheço nenhuma introdução "simples" à conjectura de Poincaré e muito menos à prova de Perelman, mas neste texto há vários artigos legíveis, acessíveis a vocês com algum esforço.*

[2] Jamais esperou isto num teste, certo Mr. P? Meu próximo desafio será colocar o Galois.