

**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA**

**COORDENAÇÃO GERAL DE PROGRAMAS  
ACADÊMICOS E DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA**

**PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA  
VIGÊNCIA 2024–2025, MODALIDADE PIVIC**

**Projeto/Project: Leis de Conservação Aplicadas ao Meios Porosos/Conservation Laws  
applied to Porous Media**

**Plano/Plan: Admissibilidade de ondas de choque com perfis viscosos/Viscous profile  
admissibility of shock waves**

**Aluno/Student: João Victor Bezerra de Oliveira, Centro de Informática, Curso de  
Bacharelado em Ciência de Dados e Inteligência Artificial**

**Orientador/adviser: Prof. Dr. Aparecido Jesuino de Souza, Centro de Informática, Depto de  
Computação Científica da UFPB.**

**João Pessoa, Agosto de 2024.**

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Objetivos</b>	<b>4</b>
2.1	Objetivo Geral . . . . .	4
2.2	Objetivos específicos . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>4</b>
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>5</b>
4.1	Descontinuidades de Contato . . . . .	5
4.1.1	Algoritmo para determinação de uma curva integral associada a uma descontinuidade de contato (curvas de contato) . . . . .	6
4.1.2	Alguns experimentos para determinar curvas de contato . . . . .	6
4.2	Perturbação do termo de acumulação via a inclusão da adsorção . . . . .	6
4.2.1	Valores característicos (autovalores) do sistema perturbado pela adsorção . . . . .	7
4.2.2	Curvas integrais do sistema perturbado pela adsorção, associados à variação da concentração, que aproximam curvas de contato . . . . .	7
4.2.3	Algoritmo para a programação das curvas integrais do campo característico do sistema perturbado pela adsorção, associado à variação da concentração, que aproximam as curvas de contato . . . . .	8
4.2.4	Ramo das curvas de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproximam curvas de contato . . . . .	9
4.2.5	O ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproxima a curva de contato visto como solução de um sistema de EDOs . . . . .	11
4.2.6	Algoritmo para a integração do ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção em que $z$ varia, que aproxima da curva de contato via sistema de EDOs. . . . .	13
4.2.7	O ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproxima a curva de contato via o método de Newton para duas equações . . . . .	13
4.2.8	O ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproxima a curva de contato via o método de Newton para as três equações . . . . .	15
4.3	Admissibilidade de choques do sistema perturbado pela adsorção associados à variação da concentração, via perfil viscoso . . . . .	16
4.3.1	O sistema de EDOs que define perfis viscosos de choques do sistema perturbado pela adsorção associados à variação da concentração . . . . .	17
4.3.2	Algoritmo para pesquisa da existência de ondas viajantes relativas às descontinuidades do sistema perturbado pela adsorção associadas à variação a concentração . . . . .	18
4.4	Condição de admissibilidade de ondas de contato . . . . .	19
4.4.1	Algoritmo para determinação de admissibilidade de descontinuidades de contato . . . . .	19
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>20</b>

**Resumo.** Neste plano trabalhamos com a implementação computacional em linguagem Python das curvas integrais e das curvas de Hugoniot de um sistema do tipo advecção-difusão obtido como uma perturbação de um sistema de leis de conservação que modela a injeção de água com polímero num sistema trifásico num meio poroso. O objetivo é aproximar as curvas de contato do sistema de leis de conservação e testar a admissibilidade das ondas de choque do tipo descontinuidade de contato via o critério de adsorção e perfil viscoso aplicado ao sistema perturbado. Apresentamos alguns resultados ainda parciais sobre as curvas integrais e as curvas de Hugoniot do sistema perturbado e a proposta para o teste da admissibilidade das descontinuidades de contato.

**Palavras chave:** Equações diferenciais. Métodos numéricos. Soluções descontínuas.

**Abstract.** In this plan we work with the computational implementation in the Python language of the integral and Hugoniot curves of an advection-diffusion type system obtained as a perturbation of a system of conservation laws that models the injection of water with polymer into a three-phase porous medium. The aim is to approximate the contact curves of the system of conservation laws and test the admissibility of shock waves of the contact discontinuity type via the vanishing adsorption criterion for contact discontinuities. We present some partial results on the integral curves and Hugoniot curves of the perturbed system and the proposal for testing the admissibility of contact discontinuities.

**Keywords:** Differential equations. Numerical methods. Discontinuous solutions.

## 1 Introdução

Uma modelagem do escoamento trifásico unidimensional (água, óleo e gás, com um polímero dissolvido na fase água) num meio poroso é obtido a partir das leis de conservação de massa e da lei de Darcy. Após adimensionalizações e várias manipulações algébricas obtém-se o seguinte sistema de três leis de conservação

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u,v,c)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial g(u,v,c)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial(zu)}{\partial t} + \frac{\partial(cf(u,v,z))}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

No sistema em 1 as variáveis independentes são a posição  $x$  e o tempo  $t$ , enquanto as funções incógnitas são  $u(x, t)$  (a saturação de água),  $v(x, t)$  (a saturação de óleo) e  $z$  (a concentração do polímero dissolvido na água). Há uma terceira função incógnita,  $w(x, t)$ , que não aparece explicitamente no sistema (a saturação da fase gás). Por serem saturações tem-se que  $u + v + w \equiv 1$ . As funções de fluxo no sistema em (1) são  $f = \lambda_w/\lambda$ ,  $g = \lambda_o/\lambda$ , em que  $\lambda_w(u, z) = k_w(u)/\mu_w(z)$ ,  $\lambda_o(v) = k_o(v)/\mu_o$  e  $\lambda_g(u, v) = k_g(w)/\mu_g$  são as mobilidades das fases e  $\lambda = \lambda_w + \lambda_o + \lambda_g$  é a mobilidade total. Consideramos o modelo quadrático de Corey em que  $k_w(u) = u^2$ ,  $k_o(v) = v^2$ , e  $k_g = w^2$ ; consideramos também que  $\mu_w(z) = \mu_{w0} 2^z$ , em que  $\mu_{w0}$  é um valor de referência para a viscosidade da fase água sem o polímero. Como valores de referência fixamos  $\mu_{w0} = 1.0$ ,  $\mu_o = 4.0$  e  $\mu_g = 0.25$ .

## 2 Objetivos

### 2.1 Objetivo Geral

Da mesma forma que em [3, 4], para modelos bifásicos, o objetivo geral do projeto é determinar soluções do sistema em (1), sujeito às condições iniciais constantes por partes, representando os dados de injeção e de produção no escoamento, conhecido na literatura matemática como um problema de Riemann, [6]:

$$U(x, 0) = \begin{cases} U^L, & \text{se } x < 0; \\ U^R, & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (2)$$

em que  $U = (u, v, z)$ .

### 2.2 Objetivos específicos

Fixamos nossa atenção nas ondas de contato que fazem parte das chamadas ondas fundamentais presentes na sequência de ondas que constitui soluções de problemas de Riemann. Consideramos uma onda de contato entre  $U^L$  e  $U^R$ , que se propaga com velocidade  $\sigma_0$ , admissível na solução de um problema de Riemann quando ao perturbar o sistema de leis de conservação, pela introdução de um pequeno termo de adsorção e mantendo os dados iniciais próximos dos considerados no problema de Riemann, a correspondente onda de choque obedecer o chamado critério do perfil viscoso do sistema perturbado. Tal critério de admissibilidade consiste em determinar se o sistema de equações diferenciais ordinárias, [1] associado a tal choque entre  $U^L$  e  $U^R$  de velocidade  $\sigma_0$  possui órbitas conectando os ponto  $U^L$  ao ponto  $U^R$ , ao variar o parâmetro que descreve tal órbita de  $-\infty$  à  $+\infty$ . Conseguimos programar, e testar, as curvas integrais do sistema em (1), associadas as ondas de contato, assim como as curvas integrais e os ramos das curvas de Hugoniot do sistema perturbado pela inclusão da adsorção, as quais aproximam as curvas integrais do sistema não perturbado (1). A programação do espaço de fase do sistema de EDOs que fornece a admissibilidade ainda está em desenvolvimento.

## 3 Metodologia

O desenvolvimento do plano se deu com a interação constante entre orientando e orientador presencialmente ou remotamente ao menos uma vez por semana. Nestas reuniões eram discutidos os avanços realizados até então, a teoria para o passo seguinte e as estratégias de programação. Com relação à programação, foi utilizada linguagem Python e a importação das bibliotecas numpy, scipy e matplotlib.

## 4 Resultados e Discussões

### 4.1 Descontinuidades de Contato

Suponha que o sistema de leis de conservação em (1) possua uma solução por uma descontinuidade de contato separando os dados iniciais constantes

$$\begin{cases} u(x, 0) = u^L \\ v(x, 0) = v^L \\ z(x, 0) = z^L \end{cases} \quad \text{para } x < 0, \quad \begin{cases} u(x, 0) = u^R \\ v(x, 0) = v^R \\ z(x, 0) = z^R \end{cases} \quad \text{para } x > 0,$$

em que  $\sigma_0$  é a velocidade de propagação da descontinuidade ao longo do meio poroso.

Introduzindo a notação  $f(u^L, v^L, z^L) = f^L$ ,  $g(u^L, v^L, z^L) = g^L$ ,  $a(z^L) = a^L$ ,  $f(u^R, v^R, z^R) = f^R$ ,  $g(u^R, v^R, z^R) = g^R$  e  $a(z^R) = a^R$ , a tal descontinuidade de contato deve satisfazer a relação de Rankine-Hugoniot

$$\begin{cases} \sigma_0(u^L - u^R) = f^L - f^R \\ \sigma_0(v^L - v^R) = g^L - g^R \\ \sigma_0(z^L u^L - z^R u^R) = z^L f^L - z^R f^R. \end{cases} \quad (3)$$

No plano  $z = z^L = z^R$ , a terceira equação em (3) é múltipla da primeira e portanto é irrelevante. Já para  $z^L \neq z^R$ , multiplicando a primeira equação por  $z^R$  e substituindo na terceira, obtemos que a velocidade de propagação de tal descontinuidade de contato é

$$\sigma_0 = \frac{f^L}{u^L} = \frac{f^R}{u^R}, \quad (4)$$

sendo que não há restrições de  $u^L$  ou  $u^R$  serem não nulos, pois tais denominadores são eliminados na fórmula de  $\sigma_0$  devido à expressão da função de fluxo  $f$ .

O critério de admissibilidade de uma onda de contato numa solução de um problema de Riemann que estamos interessados é a aproximação de uma tal onda de contato por uma onda viajante de um sistema parabólico obtido por uma pequena perturbação do sistema de leis de conservação em (1) através da inclusão da adsorção no termo de acumulação e pequenos termos de difusão no lado direito das equações que o formam.

Fixado  $U_0 = U^L$  e fazendo  $U^R$  variar obtemos a chamada *curva de contato por  $U_0$* , a qual consiste de todos os pontos  $U(s)$  cuja solução do problema de Riemann com  $U^L = U_0$  e  $U^R = U(s)$  tem uma solução por uma descontinuidade de contato. Uma maneira de obter esta mesma curva de contato por  $U_0$  é usar que tal curva também é a curva integral do campo característico da matriz jacobiana do sistema (1), associado à velocidade  $\sigma_0$ . Após um cálculo ostensivo, [2], chega-se que tal campo característico é dado por

$$X(U) = (X_1(U), X_2(U), X_3(U)), \quad (5)$$

em que

$$\begin{cases} X_1(U) = (\sigma_0 - \frac{\partial g}{\partial v}) \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial z}, \\ X_2(U) = (\sigma_0 - \frac{\partial f}{\partial u}) \frac{\partial g}{\partial z} + \frac{\partial g}{\partial u} \frac{\partial f}{\partial z}, \\ X_3(U) = (\sigma_0 - \frac{\partial f}{\partial u})(\sigma_0 - \frac{\partial g}{\partial v}) - \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial u} \end{cases} \quad (6)$$

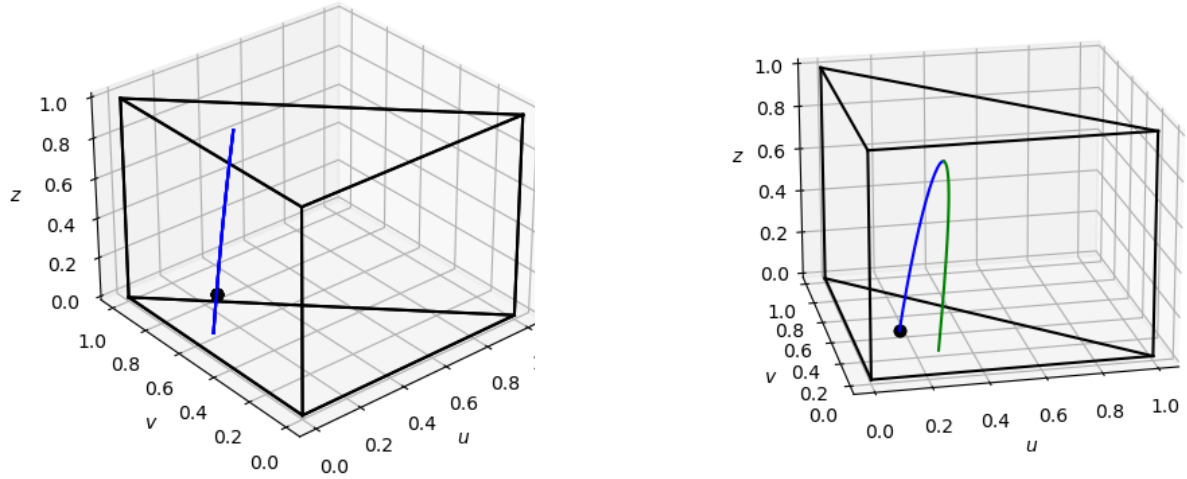


Figura 1: Curvas integrais do campo em (6), associadas às ondas de contato do sistema em (1). **Esquerda:**  $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$ . **Direita:**  $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$ .

#### 4.1.1 Algoritmo para determinação de uma curva integral associada a uma descontinuidade de contato (curvas de contato)

- Fixe um ponto  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  no prisma  $0 \leq u \leq 1, 0 \leq v \leq 1, 0 \leq u + v \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ .
- Fixe um passo de integração  $h$  e a quantidade máxima de passos  $N$ .
- Integre o sistema (6) a partir de  $U_0$  e armazene os pontos interiores ao prisma numa determinada lista, separando, se necessário, a duas ou mais partes desconexas da curva em listas diferentes.
- Faça  $h = -h$  e calcule outros pontos da curva em uma nova lista.
- Exiba as partes da curva de contato que estejam no prisma, no espaço  $(u, v, z)$ .

Este algoritmo está implementado no programa pyELI/cqp.

#### 4.1.2 Alguns experimentos para determinar curvas de contato

No primeiro experimento consideramos o ponto inicial  $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$ . Já no segundo experimento consideramos o ponto inicial  $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$ . Em ambos os casos consideramos o passo de integração sendo  $h = 0.2$ . As curvas de contato correspondentes estão exibidas na Figura 1 com pontos de vista adequados para melhor visualização. Note que no primeiro caso a curva é monótona em  $z$ , enquanto no segundo caso a variável  $z$  atinge um valor máximo e tem um aspecto côncavo para baixo.

## 4.2 Perturbação do termo de acumulação via a inclusão da adsorção

Consideremos inicialmente a seguinte perturbação do sistema de leis de conservação (1) pela introdução do termo de adsorção do polímero pela rocha, denotado por  $\alpha a(z)$ , com  $\alpha > 0$ ,  $a(z)$  uma

função contínua crescente ( $a'(z) > 0$ ) e côncava para baixo ( $a''(z) < 0$ ), no termo de acumulação da terceira equação:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u,v,z)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial g(u,v,z)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial(zu + \alpha a(z))}{\partial t} + \frac{\partial(zf(u,v,z))}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

**Obs.** Para as simulações numéricas consideramos  $a(z) = \text{sen}(z)$  e  $0 < \alpha < 1$ .

#### 4.2.1 Valores característicos (autovalores) do sistema perturbado pela adsorção

Vamos simplificar a notação para

$$f \equiv f(u, v, z), \quad g \equiv g(u, v, z). \quad (8)$$

A matriz jacobiana do Sistema (7) é dada por

$$A_\alpha(u, v, z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{f}{u + \alpha \frac{da(z)}{dz}} \end{bmatrix} \quad (9)$$

Os autovalores da matriz  $A_\alpha$  em (9) são os autovalores  $\lambda^s$  e  $\lambda^f$  do sistema  $2 \times 2$  para a concentração  $z$  constante, [2], e o autovalor associado à variação da concentração  $z$  é dado por

$$\lambda_\alpha^z = \frac{f(u, v, z)}{u + \alpha \frac{da(z)}{dz}}, \quad (10)$$

que como se nota é uma perturbação da velocidade  $\sigma_0$  da descontinuidade de contato do sistema de leis de conservação (1) dada em (4), na qual  $\alpha = 0$ .

#### 4.2.2 Curvas integrais do sistema perturbado pela adsorção, associados à variação da concentração, que aproximam curvas de contato

Denotando o campo característico associado ao autovalor  $\lambda_\alpha^z$  por  $(p, q, r)^T$ , temos que resolver o seguinte sistema nas variáveis  $p = p(u, v, z)$ ,  $q = q(u, v, z)$  e  $r = r(u, v, z)$ :

$$\begin{cases} (\frac{\partial f}{\partial u} - \lambda_\alpha^z)p + \frac{\partial f}{\partial v}q + \frac{\partial f}{\partial z}r = 0 \\ \frac{\partial g}{\partial u}p + (\frac{\partial g}{\partial v} - \lambda_\alpha^z)q + \frac{\partial g}{\partial z}r = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Temos, então, que resolver o sistema (11) que possui duas equações e as três incógnitas  $p$ ,  $q$  e  $r$ , o que nos fornece várias possibilidades de acordo com o anulamento ou não dos seguintes determinantes:

$$D_r(u, v, z) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} - \lambda_\alpha^z & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} - \lambda_\alpha^z \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$D_p(u, v, z) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial v} - \lambda_\alpha^z & \frac{\partial g}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$D_q(u, v, z) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial z} & \frac{\partial f}{\partial u} - \lambda_\alpha^z \\ \frac{\partial g}{\partial z} & \frac{\partial g}{\partial u} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

Note que se  $D_r(u, v, z) = 0$ , então  $(u, v, z)$  deve ser um ponto de coincidência entre  $\lambda_\alpha^z$  e algum dos dois outros valores característicos de  $A_\alpha$ .

Temos, então, quatro possibilidades:

- (i)  $(u, v, z)$  não é ponto de coincidência, isto é,  $D_r \neq 0$ ;
- (ii)  $(u, v, z)$  é ponto de coincidência, isto é,  $D_r = 0$ , mas  $D_p \neq 0$ ;
- (iii)  $(u, v, z)$  é ponto de coincidência, isto é,  $D_r = 0$ , além de que  $D_p = 0$ , mas  $D_q \neq 0$ ;
- (iv)  $(u, v, z)$  é ponto singular, isto é,  $D_r = 0$ ,  $D_p = 0$  e  $D_q = 0$ .

Nas possibilidades (i), (ii) e (iii) uma solução do sistema (11) é dada por

$$p(u, v, z) = D_p(u, v, z), \quad q(u, v, z) = D_q(u, v, z), \quad r(u, v, z) = D_r(u, v, z). \quad (15)$$

Normalizando  $(p, q, r)^T$  em (15) ficamos com campo característico associado ao autovalor  $\lambda_\alpha^z$  dado por:

$$V_\alpha(u, v, z) = \frac{1}{\sqrt{[p(u, v, z)]^2 + [q(u, v, z)]^2 + [r(u, v, z)]^2}} \begin{pmatrix} p(u, v, z) \\ q(u, v, z) \\ r(u, v, z) \end{pmatrix} \quad (16)$$

Na possibilidade (iv) não há o que fazer. O ponto  $(u, v, z)$  é singular e  $(p, q, z)$  não está definido.

#### 4.2.3 Algoritmo para a programação das curvas integrais do campo característico do sistema perturbado pela adsorção, associado à variação da concentração, que aproximam as curvas de contato

- (a) Defina as funções determinantes  $D_r$ ,  $D_p$  e  $D_q$  como em (12), (13) e (14). e as componentes  $p$ ,  $q$  e  $r$  como em (15).
- (b) Defina a função “norma”:

$$N(u, v, z) = \sqrt{[p(u, v, z)]^2 + [q(u, v, z)]^2 + [r(u, v, z)]^2} \quad (17)$$

- (c) Defina as componentes do campo a ser integrado como em (18):

$$P(u, v, z) = \frac{p(u, v, z)}{N(u, v, z)}, \quad Q(u, v, z) = \frac{q(u, v, z)}{N(u, v, z)}, \quad R(u, v, z) = \frac{r(u, v, z)}{N(u, v, z)}. \quad (18)$$



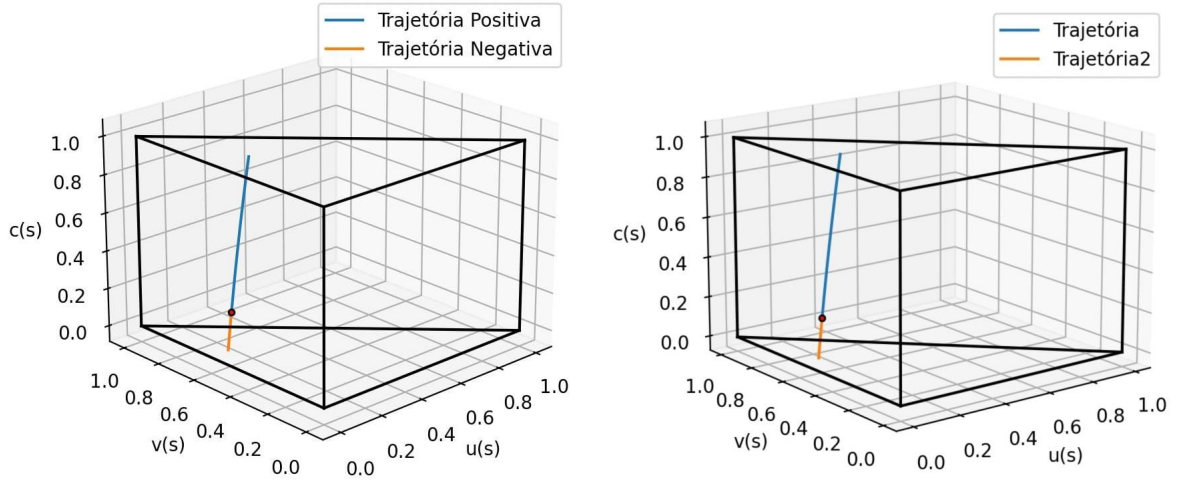


Figura 2: **Esquerda:** Curva integral do sistema em (19) por  $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$ . **Direita:** Ramo da curva de Hugoniot obtida como uma curva integral do sistema em (43) por  $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$ . Ambas as curvas são aproximações da curva integral (de contato) exibida na Figura 1(esquerda) e foram obtidas a partir do sistema em (7) com  $\alpha = 10^{-3}$ ?

(d) Defina o sistema a ser integrado:

$$\frac{dU(s)}{ds} = V_\alpha(s), \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} \frac{du}{ds} = P(u, v, z), \\ \frac{dv}{ds} = Q(u, v, z), \\ \frac{dz}{ds} = R(u, v, z), \end{cases} \quad (19)$$

- (e) Fixe um passo  $h$  de integração, uma quantidade  $N$  máxima de passos, e escolha um ponto inicial  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  no prisma  $0 \leq u \leq 1, 0 \leq v \leq 0, 0 \leq u + v \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ .
- (f) Integre a partir de  $U_0$  obtendo  $U_n, n = 1, 2, \dots, N$ , e armazene apenas os pontos que pertencem ao prisma, parando a integração quando  $n$  atingir a quantidade máxima de passos  $N$ .
- (g) Inverta o sentido da integração fazendo  $h = -h$  e reinicie a integração como no item (f), porém não armazenando novamente o ponto  $U_0$ .
- (h) Concatene os valores calculados com  $h > 0$  e com  $h < 0$  num único “vetor(array)”.
- (i) Exiba as partes da curva integral que estejam no interior ao prisma, no espaço tridimensional  $(u, v, z)$ .

Exemplos de integração do sistema em (19) estão exibidos nas Figuras 2 e 3 à esquerda.

#### 4.2.4 Ramo das curvas de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproximam curvas de contato

Novamente fixemos um ponto

$$U_0 = (u_0, v_0, z_0) \quad (20)$$

no prisma  $u \geq 0, v \geq 0, 0 \leq u + v \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ .

Aqui introduzimos a notação

$$f_0 \equiv f(u_0, v_0, z_0), \quad g_0 \equiv g(u_0, v_0, z_0). \quad (21)$$

**Obs.** Normalmente toma-se  $U_0 = U^L$  (Hugoniot “forward”) ou  $U_0 = U^R$  (Hugoniot “backward”).

Com relação ao sistema perturbado (7)), uma curva de Hugoniot por um ponto  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  que não esteja no plano  $z = z_0$  deve satisfazer a relação de Rankine-Hugoniot “perturbada”:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha[u - u_0] - [f(u, v, z) - f_0] &= 0 \\ \sigma_\alpha[v - v_0] - [g(u, v, z) - g_0] &= 0 \\ \sigma_\alpha[(zu + \alpha a(z)) - (z_0 u_0 + \alpha a(z_0))] - [zf(u, v, z) - z_0 f_0] &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Multiplicando a primeira equação em (22) por  $z$  e substituindo na terceira obtemos

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha[u - u_0] - [f(u, v, z) - f_0] &= 0 \\ \sigma_\alpha[v - v_0] - [g(u, v, z) - g_0] &= 0 \\ \sigma_\alpha\{[u_0(z - z_0)] + \alpha[a(z) - a(z_0)]\} - f_0[z - z_0] &= 0. \end{aligned} \quad (23)$$

**Obs.** Note que se  $z \equiv z_0$ , então a terceira equação em (23) se anula e ficamos com a relação de Rankine-Hugoniot do sistema restrito ao plano  $z = z_0$ . Neste caso obtemos os ramos da curva de Hugoniot que jazem no plano  $z = z_0$  (concentração fixa  $z_0$ ).

Outros ramos da curva de Hugoniot por  $(u_0, v_0, z_0)$ , que é o que de fato estamos interessados, podem ser obtidos **possibilitando**  $z \neq z_0$ , ou seja, permitindo que a concentração  $z$  varie. Com esta possibilidade, de que tenhamos também  $z \neq z_0$ , da terceira equação em (23) obtemos que

$$\sigma_\alpha = \frac{f_0 \times [z - z_0]}{u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]}, \quad \text{desde que } z \neq z_0. \quad (24)$$

Observe que se definirmos

$$h^0(z) = \begin{cases} \frac{a(z) - a(z_0)}{z - z_0}, & \text{se } z \neq z_0 \\ a'(z), & \text{se } z = z_0, \end{cases} \quad (25)$$

a equação (24) pode ser escrita como

$$\sigma_\alpha = \frac{f_0}{u_0 + \alpha h^0(z)}. \quad (26)$$

**Obs.** Tomando  $U_0 = U^L$  e  $U = U^R$ , com  $z^L \neq z^R$ , uma descontinuidade do Sistema 7 entre  $U^L$  e  $U^R$  tem velocidade

$$\sigma_\alpha = \frac{f(U^L)}{u^L + \alpha h^L(z^R)} = \frac{f(U^L) \times [z^R - z^L]}{u^L[z^R - z^L] + \alpha[a(z^R) - a(z^L)]}. \quad (27)$$

Assim, espera-se que uma descontinuidade de contato do Sistema (1), entre  $U^L$  e  $U^R$  de velocidade  $\sigma_0 = f(U)/u^L$ , seja obtida como o limite, quando  $\alpha \rightarrow 0$ , de soluções do Sistema (7) correspondentes à descontinuidades satisfazendo as relações de Rankine-Hugoniot em (23), com velocidade  $\sigma_\alpha$  dada em (27).

Admitindo  $z \neq z_0$  então eliminamos  $\sigma_\alpha$  das três equações em (23) e obtemos o sistema de duas equações nas três incógnitas  $u$ ,  $v$  e  $z$ :

$$\begin{aligned} \frac{f-f_0}{u-u_0} - \frac{g-g_0}{v-v_0} &= 0, \\ \frac{f-f_0}{u-u_0} - \frac{f_0(z-z_0)}{u_0[z-z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]} &= 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Para evitar divisões por zero, vamos eliminar denominadores nas equações (28) multiplicando a primeira por  $(u - u_0)(v - v_0)$  e a segunda por  $(u - u_0) \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)])$ , obtendo

$$\begin{aligned} F(u, v, z) &= (f - f_0) \times (v - v_0) - (g - g_0) \times (u - u_0) = 0, \\ G(u, v, z) &= (f - f_0) \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]) - f_0 \times (z - z_0) \times (u - u_0) = 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Portanto, o ramo da curva de Hugoniot que sai do plano  $z = z_0$  é dado pela curva solução do sistema (29) constituído de duas equações nas três incógnitas  $u$ ,  $v$  e  $z$ .

Para determinar a curva solução do sistema(29) podemos proceder usando o método numérico de Newton, ou transformar tal sistema (29) num sistema de equações diferenciais ordinárias. Seguiremos, então, a segunda opção, de integrar um sistema de EDOs. Para isto devemos calcular as derivadas parciais das funções  $F(u, v, z)$  e  $G(u, v, z)$  em (29).

#### 4.2.5 O ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproxima a curva de contato visto como solução de um sistema de EDOs

Para obter o sistema de EDOs que define o ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado que aproxima do ramo de contato do sistema em (1) devemos calcular as derivadas parciais de  $F$  e de  $G$  e definir o campo. Neste sentido, temos

$$\frac{\partial F}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial u} \times (v - v_0) - \frac{\partial g}{\partial u} \times (u - u_0) - (g - g_0), \quad (30)$$

$$\frac{\partial F}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial v} \times (v - v_0) - \frac{\partial g}{\partial v} \times (u - u_0) + (f - f_0), \quad (31)$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} \times (v - v_0) - \frac{\partial g}{\partial z} \times (u - u_0) \quad (32)$$

$$\frac{\partial G}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial u} \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]) - f_0 \times (z - z_0) \quad (33)$$

$$\frac{\partial G}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial v} \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]), \quad (34)$$

$$\frac{\partial G}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]) + (f - f_0) \times (u_0 + \alpha \frac{da(z)}{dz}) - f_0 \times (u - u_0). \quad (35)$$

Vamos supor que o ramo da curva de Hugoniot no qual  $z$  varia seja parametrizado por  $s$ .

Derivando as duas equações do sistema (29), com relação à variável  $s$ , e usando a regra da cadeia, obtemos o sistema algébrico nas variáveis  $\frac{du}{ds}$ ,  $\frac{dv}{ds}$  e  $\frac{dz}{ds}$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial u} \frac{du}{ds} + \frac{\partial F}{\partial v} \frac{dv}{ds} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{dz}{ds} = 0, \\ \frac{\partial G}{\partial u} \frac{du}{ds} + \frac{\partial G}{\partial v} \frac{dv}{ds} + \frac{\partial G}{\partial z} \frac{dz}{ds} = 0. \end{cases} \quad (36)$$

Para resolver o sistema (36) via a regra de Cramer, precisamos dos seguintes determinantes montados a partir dos coeficientes:

$$Det_z = \frac{\partial(F, G)}{\partial(u, v)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial u} & \frac{\partial F}{\partial v} \\ \frac{\partial G}{\partial u} & \frac{\partial G}{\partial v} \end{pmatrix}, \quad (37)$$

$$Det_v = \frac{\partial(F, G)}{\partial(u, z)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial u} & \frac{\partial F}{\partial z} \\ \frac{\partial G}{\partial u} & \frac{\partial G}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (38)$$

$$Det_u = \frac{\partial(F, G)}{\partial(v, z)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial v} & \frac{\partial F}{\partial z} \\ \frac{\partial G}{\partial v} & \frac{\partial G}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (39)$$

Estes três determinantes definem o campo de vetores

$$\mathcal{H}(u, v, z) = (Det_u(u, v, z), -Det_z(u, v, z), Det_v(u, v, z)) \quad (40)$$

Admitindo que pelo menos um dos determinantes acima é não nulo, isto é, que  $(u, v, z)$  não é ponto singular do campo em (40), tomamos a norma de  $\mathcal{H}$

$$N_H(u, v, z) = \sqrt{(Det_u)^2 + (Det_v)^2 + (Det_z)^2} \quad (41)$$

e definimos o campo normalizado:

$$\begin{cases} \mathcal{H}_1(u, v, z) = \frac{Det_u(u, v, z)}{N_H(u, v, z)} \\ \mathcal{H}_2(u, v, z) = \frac{-Det_z(u, v, z)}{N_H(u, v, z)} \\ \mathcal{H}_3(u, v, z) = \frac{Det_v(u, v, z)}{N_H(u, v, z)}, \end{cases} \quad (42)$$

e finalmente chegamos aos sistema de EDOs

$$\begin{cases} \frac{du}{ds} = \mathcal{H}_1(u, v, z) \\ \frac{dv}{ds} = \mathcal{H}_2(u, v, z) \\ \frac{dz}{ds} = \mathcal{H}_3(u, v, z) \end{cases} \quad (43)$$

Para calcular o ramo da curva de Hugoniot que aproxima a curva de contato pelo ponto  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  fixado em (20), integramos alguns passos o Sistema (19) com este dado inicial  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  até atingir um ponto  $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z})$  com  $N_H(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z}) \neq 0$  e fazemos  $U_1 = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z})$ . Em seguida usamos o ponto  $U_1 = (u_1, v_1, z_1)$  como o ponto inicial para a integração do Sistema (43). Ou seja,

integraremos o PVI:

$$\begin{cases} \frac{du}{ds} = \mathcal{H}_1(u, v, z), & u(0) = u_1 \\ \frac{dv}{ds} = \mathcal{H}_2(u, v, z), & v(0) = v_1 \\ \frac{dz}{ds} = \mathcal{H}_3(u, v, z), & z(0) = z_1. \end{cases} \quad (44)$$

Assim, o ramo da curva de Hugoniot, em que  $z$  varia, poderá ser obtida ponto a ponto enquanto  $N_H(u_n, v_n, z_n) \neq 0$ .

#### 4.2.6 Algoritmo para a integração do ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção em que $z$ varia, que aproxima da curva de contato via sistema de EDOs.

- Fixe um passo  $h$  de integração, uma quantidade  $N$  máxima de passos, uma tolerância  $tol > 0$  pequena e escolha um ponto inicial  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  no prisma  $0 \leq u \leq 1, 0 \leq v \leq 0, 0 \leq u + v \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ .
- Calcule os determinantes  $D_r, D_p$  e  $D_q$  em (12), (13), (14) no ponto  $U_0$ .
- Se  $abs(D_r) + abs(D_p) + abs(D_q) > tol$ , integre o PVI (19) com  $h > 0$  até obter um ponto  $U_1 = (u_1, v_1, z_1)$  com  $N_H(u_1, v_1, z_1) \neq 0$ .
- Armazene os pontos  $U_0$  e  $U_1$  numa lista1.
- Calcule os determinantes  $Det_z, Det_v$  em  $Det_u$  em (37), (38) e (39) no ponto  $U_1$ .
- Integre o sistema em (44) obtendo  $U_n = (u_n, v_n, z_n), n = 2, 3, \dots, N$  armazenando **apenas** os pontos interiores ao prisma e satisfazendo  $N_H(U_n, V_n, Z_n) > 0$  na lista1, parando a integração quando  $n$  atingir o valor máximo  $N$ .
- Volte ao item (c), porém com  $h = -h$ , obtendo um novo ponto  $U_1$  e armazenando-o numa lista2.
- Repita o item (f) armazenando **apenas** os pontos interiores ao prisma também na lista2.
- Concatene a lista1 e a lista2 numa única lista.
- exiba as partes do ramos da curva de Hugoniot que estejam no prisma, no espaço  $(u, v, z)$ .

Exemplos de integração do sistema em (43) estão exibidos nas Figuras 2 e 3 à direita. **Porém o algoritmo não funcionou bem em vários outros exemplos em que a curva deveria atingir algum ponto de coincidência.**

#### 4.2.7 O ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproxima a curva de contato via o método de Newton para duas equações

**Objetivo:** A partir do ponto inicial  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  obter um primeiro ponto  $U_1 = (u_1, v_1, z_1)$  na curva de Hugoniot, via o método de Newton. Uma vez determinado  $U_1$ , repete-se o procedimento para obter um segundo ponto da curva de Hugoniot, digamos  $U_2 = (u_2, v_2, z_2)$ . Repete-se este procedimento para obter uma coleção de pontos  $U_3, U_4, \dots, U_N$  da curva de Hugoniot que iniciou em  $U_0$ .

**Algoritmo:**

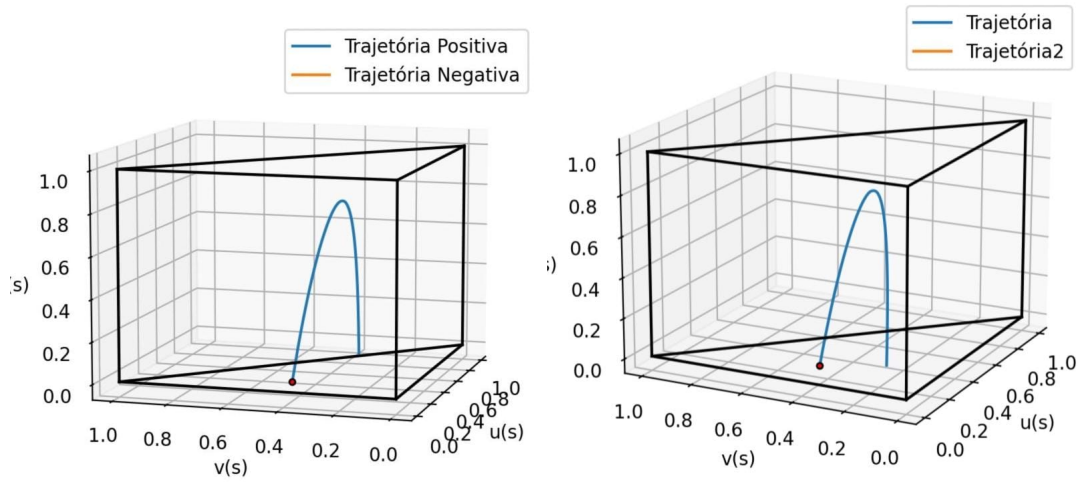


Figura 3: **Esquerda:** Curva integral do sistema em (19) por  $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$ . **Direita:** Ramo da curva de Hugoniot obtida como uma curva integral do sistema em (43) por  $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$ . Ambas as curvas são aproximações da curva integral exibida na Figura 1(direita) e foram obtidas a partir do sistema em (7).

- (1) Defina um passo  $h > 0$  e uma quantidade máxima de passos  $N$ . Crie uma lista, digamos  $U_{pos}$ , que conterá pontos do ramo da curva de Hugoniot interiores ao prisma e armazene nela o ponto inicial  $U_0$ .
- (2) A partir do ponto inicial  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  fazer um passo de integração do Sistema de EDOs (19) obtendo um ponto  $U_1^{(0)} = (u_1^{(0)}, v_1^{(0)}, z_1^{(0)})$ .
- (3) Congele o valor de  $z$  fazendo  $z_1 = z_1^{(0)}$  e substituindo-o nas funções  $F$  e  $G$  do Sistema (29)
- (4) Aplique o método de Newton no “sistema congelado” para obter três (ou mais) correções de  $U_1^{(0)}$  da seguinte maneira:
  - (4.1) substitua  $U_1^{(0)}$  nas funções  $F$  e  $G$  obtendo um vetor  $B_0 = (F(U_1^{(0)}), G(U_1^{(0)}))^T$  e na jacobiana  $\frac{\partial(F,G)}{\partial(u,v)}$  obtendo uma matriz quadrada  $J_0$ ;
  - (4.2) considerando  $S = (S_1, S_2)$ , resolva o sistema linear  $J_0 S = -B_0$  e faça  $U_1^{(1)} = (u_1^{(0)} + S_1, v_1^{(0)} + S_2, z_1)^T$ ;
  - (4.3) substitua  $U_1^{(1)}$  nas funções  $F$  e  $G$  obtendo um vetor  $B_1 = (F(U_1^{(1)}), G(U_1^{(1)}))^T$  e na jacobiana  $\frac{\partial(F,G)}{\partial(u,v)}$  obtendo uma matriz quadrada  $J_1$ ;
  - (4.4) considerando  $S = (S_1, S_2)$ , resolva o sistema linear  $J_1 S = -B_1$  e faça  $U_1^{(2)} = (u_1^{(1)} + S_1, v_1^{(1)} + S_2, z_1)^T$ ;
  - (4.5) substitua  $U_1^{(2)}$  nas funções  $F$  e  $G$  obtendo um vetor  $B_2 = (F(U_1^{(2)}), G(U_1^{(2)}))^T$  e na jacobiana  $\frac{\partial(F,G)}{\partial(u,v)}$  obtendo uma matriz quadrada  $J_2$ ;
  - (4.6) considerando  $S = (S_1, S_2)$ , resolva o sistema linear  $J_2 S = -B_2$  e faça  $U_1^{(3)} = (u_1^{(2)} + S_1, v_1^{(2)} + S_2, z_1)^T$  e assim por diante se decidir por mais iterações;
  - (4.7) **caso**  $U_1^{(3)}$  esteja no interior do prisma, armazene-o na lista  $U_{pos}$ .  
**caso**  $U_1^{(3)}$  não esteja no interior do prisma encerre a lista  $U_{pos}$ .
- (5) Faça  $U_0 = U_1^{(3)}$  e repita os passos acima obtendo novos pontos do ramo da curva de Hugoniot e armazenando-os na lista  $U_{pos}$ . Ao atingir a quantidade máxima de passos  $N$  ou uma das fronteiras do prisma, encerra-se a lista  $U_{pos}$ .

- (6) Faça  $h = -h$  e defina uma nova lista, digamos,  $U_{neg}$ . Armazene nela o ponto  $U_0$ .
- (7) Repita os itens (2) a (5), mas agora armazenando os pontos obtidos via o método de Newton na lista  $U_{neg}$ .
- (8) Plote as listas  $U_{neg}$  e  $U_{pos}$  numa mesma figura tridimensional interior ao prisma.

**Obs.** Este método funciona bem até que o ramo da curva de Hugoniot por  $U_0$  atinja um ponto numa das superfícies de coincidência.

#### 4.2.8 O ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproxima a curva de contato via o método de Newton para as três equações

Neste caso vamos acrescentar ao sistema (29) uma nova equação que significa a parametrização pelo comprimento de arco e assim ficando com três equações nas três incógnitas  $u$ ,  $v$  e  $z$ . Esta equação é dada por

$$H(u, v, z; u_a, v_a, z_a, h) = (u - u_a)^2 + (v - v_a)^2 + (z - z_a)^2 - h^2 = 0. \quad (45)$$

em que  $U_a = (u_a, v_a, z_a)$  é o ponto calculado no passo  $n$  e  $U$  é o ponto a ser obtido no passo  $n + 1$ .

Como já temos as derivadas parciais das funções  $F$  e  $G$  calculadas nas equações (30)-(35), restam calcular as derivadas da função  $H$ . Assim,

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 2(u - u_a), \quad (46)$$

$$\frac{\partial H}{\partial v} = 2(v - v_a), \quad (47)$$

$$\frac{\partial H}{\partial z} = 2(z - z_a). \quad (48)$$

A matriz jacobiana a ser atualizada em cada passo  $n$  é

$$J(u, v, z) = \frac{\partial(F, G, H)}{\partial(u, v, z)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial u} & \frac{\partial F}{\partial v} & \frac{\partial F}{\partial z} \\ \frac{\partial G}{\partial u} & \frac{\partial G}{\partial v} & \frac{\partial G}{\partial z} \\ \frac{\partial H}{\partial u} & \frac{\partial H}{\partial v} & \frac{\partial H}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (49)$$

#### Algoritmo

- (1) Defina o ponto base  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  para determinar o ramo da curva de Hugoniot com  $z$  variando.
- (2) Defina um passo  $h > 0$ , uma quantidade máxima de iterações  $N_p$  por passo e uma tolerância  $tol$ . Crie uma lista, digamos  $U_{pos}$ , que conterà pontos do ramo da curva de Hugoniot (obtidos com  $h > 0$ ) interiores ao prisma e armazene nela o ponto inicial  $U_0$ .
- (3) A partir do ponto inicial  $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$  faça um passo de integração, com  $h > 0$ , do Sistema de EDOs (19) obtendo um ponto  $U_1^{(0)} = (u_1^{(0)}, v_1^{(0)}, z_1^{(0)})$ .
- (4) Faça  $U_a = U_0$  e aplique as iterações do método de Newton no sistema  $F(u, v, z) = 0$ ,  $G(u, v, z) = 0$ ,  $H(u, v, z; u_a, v_a, z_a, h) = 0$  para corrigir  $U_1^{(0)}$  como a seguir:

- (4.1) Substitua o ponto  $U_1^{(0)}$  na matriz jacobiana  $J(u, v, z)$  definida em (49) obtendo a matriz  $J_1$ .
- (4.2) Substitua o ponto  $U_1^{(0)}$  na função vetorial  $(F(u, v, z), G(u, v, z), H(u, v, z, u_a, v_a, z_a, h))$  obtendo o termo independente  $B_1$ .
- (4.3) Faça  $S = (s_1, s_2, s_3)$  e resolva o sistema linear  $J_1 S = -B_1$  obtendo a solução  $S^*$  e então faça  $U_1^{(1)} = U_1^{(0)} + S^*$ .
- (4.4) Refaça os itens (4.1), (4.2) e (4.3), porém trocando  $U_1^{(0)}$  por  $U_1^{(1)}$ , obtendo um novo  $S^*$  e então faça  $U_1^{(2)} = U_1^{(1)} + S^*$ .
- (4.5) Repita o item (4.4) obtendo  $U_1^{(3)}, \dots, U_1^{(k)}$ , até que  $\max\{|s_1^*|, |s_2^*|, |s_3^*|\} < tol$  ou até atingir o número máximo  $N_p$  de iterações por passo, isto é, até  $k = N_p$ .
- (4.6) Faça  $U_1$  como sendo o último  $U_1^{(k)}$  obtido no item (4.5).

**Caso**  $U_1$  esteja no interior do prisma armazene-o na lista  $U_{pos}$ .

**Caso**  $U_1$  não esteja no interior do prisma termine a lista  $U_{pos}$ .

- (5) **Caso**  $U_1$  esteja no interior do prisma, faça  $U_a = U_1$  e  $U_2^{(0)} = U_a + h(U_a - U_0)$  como sendo a primeira aproximação para o ponto  $U_2$  a ser obtido via as iterações do método de Newton para sistema  $F(u, v, z) = 0$ ,  $G(u, v, z) = 0$ ,  $H(u, v, z, u_a, v_a, z_a, h) = 0$ . Repita o item (4) e seus sub-itens, trocando  $U_1^{(k)}$  por  $U_2^{(k)}$ ,  $k = 0, 1, \dots$  e obtendo o segundo ponto,  $U_2$ , do ramo da curva de Hugoniot em questão.
- (6) **Caso**  $U_2$  esteja no interior do prisma, faça  $U_a = U_2$  e  $U_3^{(0)} = U_a + h(U_a - U_1)$  como sendo a primeira aproximação para o ponto  $U_3$  a ser obtido via as iterações do método de Newton para sistema  $F(u, v, z) = 0$ ,  $G(u, v, z) = 0$ ,  $H(u, v, z, u_a, v_a, z_a, h) = 0$ . Repita o item (4) e seus sub-itens, trocando  $U_1^{(k)}$  por  $U_3^{(k)}$ ,  $k = 0, 1, \dots$  e obtendo o terceiro ponto,  $U_3$ , do ramo da curva de Hugoniot em questão.
- (7) Repita o item (6), com as devidas adaptações, até que o ponto  $U_n$ , para algum  $n$ , saia para o exterior do prisma, sendo que  $U_a = U_{n-1}$  e  $U_n^{(0)} = U_a + h(U_a - U_{n-2})$ .
- (8) Faça  $h = -h$  e defina a lista  $U_{neg}$  na qual serão armazenados os pontos do ramo da curva de Hugoniot em questão, para  $h < 0$ .
- (9) Repita os itens (3)-(7) trocando  $h$  por  $-h$ .
- (10) Plote as duas listas  $U_{pos}$  e  $U_{neg}$  numa mesma figura tridimensional mostrando o ramo da curva obtido no interior do prisma.

### 4.3 Admissibilidade de choques do sistema perturbado pela adsorção associados à variação da concentração, via perfil viscoso

Na construção das soluções dos problemas de Riemann uma condição de admissibilidade é necessária para escolher soluções descontínuas (ondas de choque) que sejam fisicamente admissíveis. A condição do perfil viscoso que consideraremos consiste de uma outra perturbação do Sistema (7) (já perturbado pela introdução da adsorção) pela introdução de termos difusivos do



seu lado direito através dos parâmetros  $\epsilon_1 > 0$  e  $\epsilon_2 > 0$ , obtendo o sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u,v,z)}{\partial x} = \epsilon_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial g(u,v,z)}{\partial x} = \epsilon_1 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \\ \frac{\partial(z u + \alpha a(z))}{\partial t} + \frac{\partial(z f(u,v,z))}{\partial x} = \epsilon_1 \frac{\partial}{\partial x} \left( z \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \epsilon_2 \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}. \end{cases} \quad (50)$$

**Obs.** Segundo [5], deve ser considerada a razão  $\kappa = \epsilon_2/\epsilon_1$  constante. Por exemplo,  $\kappa = 1$ .

**Obs.** Note que ao considerarmos  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$  e  $\alpha = 0$ , o Sistema (50) torna-se o Sistema (1).

Com as considerações acima, dizemos que a descontinuidade do sistema perturbado (7), associada à variação da concentração  $z$ , entre os pontos  $U_\alpha^L$  e  $U_\alpha^R$  com velocidade  $\sigma_\alpha$ , dada em (27), é admissível se puder ser obtida como o limite de soluções (suaves) do Sistema 50, com dados iniciais  $U(x,0) = U_\alpha^L$ , se  $x < 0$  e  $U(x,0) = U_\alpha^R$ , se  $x > 0$ , quando os parâmetros  $\epsilon_1, \epsilon_2$  tenderem à zero.

#### 4.3.1 O sistema de EDOs que define perfis viscosos de choques do sistema perturbado pela adsorção associados à variação da concentração

Inicialmente adaptamos a notação fazendo

$$f_\alpha^L \equiv f(U_\alpha^L), \quad f_\alpha^R \equiv f(U_\alpha^R), \quad g_\alpha^L \equiv g(U_\alpha^L), \quad g_\alpha^R \equiv g(U_\alpha^R). \quad (51)$$

Suponhamos agora que o Sistema 50, com condições iniciais  $U(x,0) = U_\alpha^L$ , se  $x < 0$  e  $U(x,0) = U_\alpha^R$  se  $x > 0$ , possua uma solução por onda viajante dependente da razão  $s = \frac{x - \sigma_\alpha t}{\epsilon_1}$ .

Da regra da cadeia temos que  $\frac{d}{dt} = -\frac{\sigma}{\epsilon_1} \frac{d}{ds}$  e que  $\frac{d}{dx} = \frac{1}{\epsilon_1} \frac{d}{ds}$ .

Substituindo nas equações do Sistema 50 e multiplicando as equações resultantes por  $\epsilon_1$  obtemos o seguinte sistema de EDOs de segunda ordem:

$$\begin{cases} -\sigma_\alpha \frac{du}{ds} + \frac{df(u,v,z)}{ds} = \frac{d^2 u}{ds^2} \\ -\sigma_\alpha \frac{dv}{ds} + \frac{dg(u,v,z)}{ds} = \frac{d^2 v}{ds^2} \\ -\sigma_\alpha \frac{d(z u + \alpha a(z))}{ds} + \frac{d(z f(u,v,z))}{ds} = \frac{d(z \frac{du}{ds})}{ds} + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \frac{d^2 z}{ds^2}. \end{cases} \quad (52)$$

Integrando as equações no Sistema 52 de  $s$  até  $+\infty$  e impondo as condições de contorno como as constantes  $u(+\infty) = u_\alpha^R$ ,  $v(+\infty) = v_\alpha^R$ ,  $z(+\infty) = z_\alpha^R$ ,  $u(-\infty) = u_\alpha^L$ ,  $v(-\infty) = v_\alpha^L$ ,  $z(-\infty) = z_\alpha^L$

vamos obter

$$\begin{cases} \sigma_\alpha u(s) - \sigma_\alpha u_\alpha^R - f(u(s), v(s), z(s)) + f_\alpha^R = -\frac{du(s)}{ds} \\ \sigma_\alpha v(s) - \sigma_\alpha v_\alpha^R - g(u(s), v(s), z(s)) + g_\alpha^R = -\frac{dv(s)}{ds} \\ \sigma_\alpha [z(s)u(s) + \alpha a(z(s))] - \sigma_\alpha [z_\alpha^R u_\alpha^R + \alpha a(z_\alpha^R)] - z(s)f(s) + z_\alpha^R f^R = -z(s)\frac{du(s)}{ds} - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \frac{dz(s)}{ds}. \end{cases} \quad (53)$$

Substituindo a primeira equação em 53 na terceira, a terceira equação fica

$$\sigma_\alpha u_\alpha^R [z_\alpha^R - z(s)] + \sigma_\alpha [a(z_\alpha^R) - a(z(s))] + [z(s) - z_\alpha^R] f^R = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \frac{dz(s)}{ds}.$$

Em resumo, temos que considerar o sistema autônomo de EDOs  $3 \times 3$ :

$$\begin{cases} \frac{du(s)}{ds} = [f(u(s), v(s), z(s)) - f_\alpha^R] - \sigma_\alpha [u(s) - u_\alpha^R] \\ \frac{dv(s)}{ds} = [g(u(s), v(s), z(s)) - g_\alpha^R] - \sigma_\alpha [v(s) - v_\alpha^R] \\ \frac{dz(s)}{ds} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \{ f_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \sigma_\alpha (u_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \alpha [a(z(s)) - a(z_\alpha^R)]) \}. \end{cases} \quad (54)$$

Considerando tanto  $u(s) \equiv u_\alpha^L$ ,  $v(s) \equiv v_\alpha^L$  e  $z(s) \equiv z_\alpha^L$ , como considerando  $u(s) \equiv u_\alpha^R$ ,  $v(s) \equiv v_\alpha^R$  e  $z(s) \equiv z_\alpha^R$  e  $\sigma_\alpha = \frac{f(U_\alpha^L)}{u_\alpha^L + \alpha h^L(z_\alpha^R)}$ , das equações de Hugoniot em (23), segue que os lados direito das três equações em 54 se anulam, o que significa que tanto o ponto  $U_\alpha^L = (u_\alpha^L, v_\alpha^L, z_\alpha^L)$  como o ponto  $U_\alpha^R = (u_\alpha^R, v_\alpha^R, z_\alpha^R)$  são pontos de equilíbrio do sistema de EDOs (54). Assim, a existência de uma onda viajante associada aos pontos  $U_\alpha^L$  e  $U_\alpha^R$  significa a existência de uma órbita do sistema de EDOs (54) que “sai” de  $U_\alpha^L$  e “chega” em  $U_\alpha^R$ , em outras palavras, deve se ter uma órbita  $\Phi_\alpha(s) = (u(s), v(s), z(s))$  tal que  $\lim_{s \rightarrow -\infty} \Phi_\alpha(s) = U_\alpha^L$  e  $\lim_{s \rightarrow \infty} \Phi_\alpha(s) = U_\alpha^R$ .

#### 4.3.2 Algoritmo para pesquisa da existência de ondas viajantes relativas às descontinuidades do sistema perturbado pela adsorção associadas à variação a concentração

- Fixe  $\alpha$ ,  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  constantes positivas pequenas.
- Fixe um ponto  $U_\alpha^R = (u_\alpha^R, v_\alpha^R, z_\alpha^R)$ .
- Fixe um ponto  $U_\alpha^L = (u_\alpha^L, v_\alpha^L, z_\alpha^L)$  sobre um ramo da curva de Hugoniot por  $U_0 = U_\alpha^R$  obtida como solução do PVI em (43) e calcule  $\sigma_\alpha = \frac{f(U_\alpha^L)}{u_\alpha^L + \alpha h^L(z_\alpha^R)}$ .
- Tome o campo  $X^\alpha(U) = (X_1^\alpha(U), X_2^\alpha(U), X_3^\alpha(U))$  definido pelas três expressões que aparecem do lado direito do Sistema (54), isto é, com

$$\begin{aligned} X_1^\alpha(U) &= [f(u, v, z) - \sigma_\alpha u] - [f_\alpha^R - \sigma_\alpha u_\alpha^R] \\ X_2^\alpha(U) &= [g(u, v, z) - \sigma_\alpha v] - [g_\alpha^R - \sigma_\alpha v_\alpha^R] \\ X_3^\alpha(U) &= \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \{ f_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \sigma_\alpha (u_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \alpha [a(z(s)) - a(z_\alpha^R)]) \}. \end{aligned} \quad (55)$$

(e) Linearize  $X^\alpha(U)$  em torno de  $U_\alpha^L$ , isto é, calcule a matriz jacobiana do campo  $X^\alpha$

$$J(U) = \begin{bmatrix} \frac{\partial X_1^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial X_1^\alpha}{\partial v} & \frac{\partial X_1^\alpha}{\partial z} \\ \frac{\partial X_2^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial X_2^\alpha}{\partial v} & \frac{\partial X_2^\alpha}{\partial z} \\ \frac{\partial X_3^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial X_3^\alpha}{\partial v} & \frac{\partial X_3^\alpha}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (56)$$

e substitua o ponto  $U_\alpha^L$  em tal matriz jacobiana, obtendo  $J(U_\alpha^L)$ .

- (f) Determine os autovalores e autovetores da matriz  $J(U_\alpha^L)$ .
- (g) Determine órbitas  $(u_\alpha(n), v_\alpha(n), z_\alpha(n))$ ,  $n = 0, 1, \dots, N$ , por pontos iniciais  $U_0$  nas direções dos autovetores associados aos autovalores **positivos**, com  $U_0$  próximos de  $U_\alpha^L$ .
- (h) Verifique se alguma destas órbitas se aproxima de  $U_\alpha^R$  para  $n$  grande, verificando se  $\max\{|u_\alpha(n) - u_\alpha^R|, |v_\alpha(n) - v_\alpha^R|, |z_\alpha(n) - z_\alpha^R|\} < 10^{-p}$ , para algum número natural  $p$  fixado.

**Obs.** A implementação computacional deste algoritmo desta subseção 4.3.2, isto é, do sistema em (54), está em desenvolvimento, e neste momento de confecção do relatório ainda não há resultados efetivos.

#### 4.4 Condição de admissibilidade de ondas de contato

Finalmente, seguindo o trabalho [5], dizemos que uma descontinuidade de contato do Sistema (1) entre  $U^L$  e  $U^R$  com velocidade  $\sigma_0 = f(U^L)/u^L$ , é admissível se puder ser obtida como o limite de soluções, com perfis viscosos, do Sistema 7 com dados iniciais  $U(x, 0) = U_\alpha^L$ , se  $x < 0$ , e  $U(x, 0) = U_\alpha^R$ , se  $x > 0$ , com a condição de que  $U_\alpha^L \rightarrow U^L$ ,  $U_\alpha^R \rightarrow U^R$ , quando  $\alpha$  tende a zero.

##### 4.4.1 Algoritmo para determinação de admissibilidade de descontinuidades de contato

- (a) Fixe um ponto  $U_0 = U^L$  no prisma  $0 \leq u \leq 1, 0 \leq v \leq 1, 0 \leq u + v \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ .
- (b) Determine a curva de contato por  $U^L$  utilizando o algoritmo apresentado na subseção (4.1.1).
- (c) Fixe um ponto  $U^R$  na curva de contato associada por  $U^L$ .
- (d) Fixe os parâmetros  $\alpha, \epsilon_1$  e  $\epsilon_2$ .
- (e) Fixe arbitrariamente um ponto  $U_\alpha^L$  com  $U_\alpha^L$  próximo de  $U^L$ .
- (f) Determine o ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pelo ponto  $U_\alpha^L$ , usando o algoritmo apresentado na subseção (4.2.3).
- (g) Determine o ponto  $U_\alpha^R$  na curva de Hugoniot por  $U_\alpha^L$  que esteja mais próximo de  $U_\alpha^R$  e calcule  $\sigma_\alpha = \frac{f(U_\alpha^L)}{u_\alpha^L + \alpha h^L(z_\alpha^R)}$ .
- (h) Verifique a admissibilidade via perfil viscoso da descontinuidade entre  $U_\alpha^L$  e  $U_\alpha^R$ , com velocidade de propagação  $\sigma_\alpha$ , usando o algoritmo apresentado na subseção (4.3.2)
- (i) Faça mais experimentos a partir do item (d), para outros pontos  $U_\alpha^R$ .

(j) Conclua se há indicação de admissibilidade da descontinuidade de contato entre  $U^L$  e  $U^R$ .

**Obs.:** A implementação computacional deste algoritmo desta subseção 4.4.1 depende da implementação do algoritmo da subseção 4.3.2, e dos anteriores, e no momento de confecção do relatório ainda não há resultados efetivos.

## 5 Conclusões

Os estudos que realizamos mostram que a combinação de técnicas analíticas e computacionais fornece meios adequados para a descrição de soluções de equações diferenciais baseadas em modelos realísticos de aplicações. Embora os resultados aqui ainda sejam parciais, a técnica é promissora para estudar sistemas provenientes do escoamento unidimensional em meios porosos.

## Referências

- [1] Boyce, W., DiPrima, R., Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Contorno, 10<sup>a</sup> ed., LTC, (2015).
- [2] de Souza A. J., Marchesin, D., The three-phase polymer model in porous media, *Proceedings of the HYP2022, Málaga, ES*, Springer, 445–456, (2024).
- [3] Isaacson, E., Global solution of a Riemann problem for a Non-Strictly Hyperbolic System of Conservation Laws Arising in Enhanced Oil Recovery, *Rockefeller University preprint*, (1982).
- [4] Johansen, T., Winther, R., The solution of the Riemann problem for a hyperbolic system of conservation laws modeling polymer flooding, *SIAM journal of Mathematical Analysis*, **19**,3, 541–566, (1988).
- [5] Petrova, Y., Plohr, B., Marchesin, D., Vanishing adsorption admissibility criterion for contact discontinuities in the polymer model, *arXiv:2211.10326v1 [math.AP]*, 18 Nov 2022.
- [6] Smoller, J., Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations, Second Edition, *Springer*, (1994).