

**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

1	Introdução	4
2	Objetivos	5
2.1	Objetivo Geral	5
2.2	Objetivos específicos	5
3	Metodologia	5
4	Resultados e Discussões	5
4.0.1	Valores característicos (autovalores) do sistema perturbado pela adsorção . .	5
4.1	Descontinuidades de Contato	6
4.1.1	Algoritmo para determinação de uma curva integral associada a uma descontinuidade de contato (curvas de contato)	7
4.1.2	Alguns experimentos para determinar curvas de contato	8
4.2	Perturbação do termo de acumulação via a inclusão da adsorção	8
4.2.1	Valores característicos (autovalores) do sistema perturbado pela adsorção . .	9
4.2.2	Curvas integrais do sistema perturbado pela adsorção, associados à variação da concentração, que aproximam curvas de contato	9
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	10
4.2.4	Ramo das curvas de Hugoniot do sistema perturbado pela adsorção que aproximam curvas de contato	11
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	13
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.	15
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	16
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	17
4.3	Admissibilidade de choques do sistema perturbado pela adsorção associados à variação da concentração, via perfil viscoso	19
4.3.1	O sistema de EDOs que define perfis viscosos de choques do sistema perturbado pela adsorção associados à variação da concentração	19
4.3.2	Algoritmo para pesquisa da existência de ondas viajantes relativas às descontinuidades do sistema perturbado pela adsorção associadas à variação a concentração	20
4.4	Condição de admissibilidade de ondas de contato	21
4.4.1	Algoritmo para determinação de admissibilidade de descontinuidades de contato	21
4.4.2	Segmento PQ com seta possuindo vértice em Q	22
4.4.3	Pesquisa a menor distância do ponto P às faces do prisma	22

4.4.4	Esfera centrada em P de raio R	23
4.4.5	Pontos iniciais para integração do sistema (59)	23
5	Conclusões	23

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 μ_{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 geral 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 σ_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 σ_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

4.0.1 Valores característicos (autovalores) do sistema perturbado pela adsorção

Fazendo $U = \begin{bmatrix} u \\ v \\ z \end{bmatrix}$, $G(U) = \begin{bmatrix} u \\ v \\ zu \end{bmatrix}$ e $F(U) = \begin{bmatrix} f(u, v, z) \\ g(u, v, z) \\ zf(u, v, z) \end{bmatrix}$ o Sistema (1) pode ser escrito na forma vetorial como

$$\frac{\partial G(U)}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0. \quad (3)$$

Vamos simplificar a notação para

$$f \equiv f(u, v, z), \quad g \equiv g(u, v, z). \quad (4)$$

As matrizes jacobianas de G e de F são dadas por

$$DG(U) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ z & 0 & u \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad DF(U) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ z \frac{\partial f}{\partial u} & z \frac{\partial f}{\partial v} & f + z \frac{\partial f}{\partial z} \end{bmatrix}.$$

A matriz inversa da matriz $DG(U)$ é $[dG(U)]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{z}{u} & 0 & \frac{1}{u} \end{bmatrix}.$

A matriz jacobiana do Sistema (1) é dada por

$$A(u, v, z) = [dG(U)]^{-1} DF(U) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{f}{u} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Os autovalores da matriz A_α em (5) são os autovalores λ^s e λ^f do sistema 2×2 para a concentração z constante, [2], e o autovalor associado à variação da concentração z é dado por

$$\lambda^z(u, v, z) = \frac{f(u, v, z)}{u}. \quad (6)$$

Denominando o autovetor de A (ou campo característico) associado ao autovalor (ou valor característico) λ^z temos que a seguinte identidade é válida $\text{grad} \lambda^z \cdot e^z \equiv 0$. Isto significa λ^z é constante ao longo das curvas integrais do campo e^z e assim, o par $\{\lambda^z; e^z\}$ corresponde às chamadas descontinuidade de contato, discutidas a seguir.

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 σ_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

$$\begin{cases} \sigma_0(u^L - u^R) = f^L - f^R \\ \sigma_0(v^L - v^R) = g^L - g^R \\ \sigma_0(z^L u^L - z^R u^R) = z^L f^L - z^R f^R. \end{cases} \quad (7)$$

No plano $z = z^L = z^R$, a terceira equação em (7) 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

$$\sigma_0 = \frac{f^L}{u^L} = \frac{f^R}{u^R} = \lambda^z(U^L) = \lambda^z(U^R), \quad (8)$$

sendo que não há restrições de u^L ou u^R serem não nulos, pois tais denominadores são eliminados na fórmula de σ_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 $\sigma_0 = \lambda^z(U_0)$. Após um cálculo ostensivo, [2], chega-se que tal campo característico é dado por

$$X(U) = (X_1(U), X_2(U), X_3(U)), \quad (9)$$

em que

$$\begin{cases} X_1(U) = (\sigma_0 - \frac{\partial g}{\partial v}) \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial z}, \\ X_2(U) = (\sigma_0 - \frac{\partial f}{\partial u}) \frac{\partial g}{\partial z} + \frac{\partial g}{\partial u} \frac{\partial f}{\partial z}, \\ X_3(U) = (\sigma_0 - \frac{\partial f}{\partial u})(\sigma_0 - \frac{\partial g}{\partial v}) - \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial u} \end{cases} \quad (10)$$

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 (10) 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.

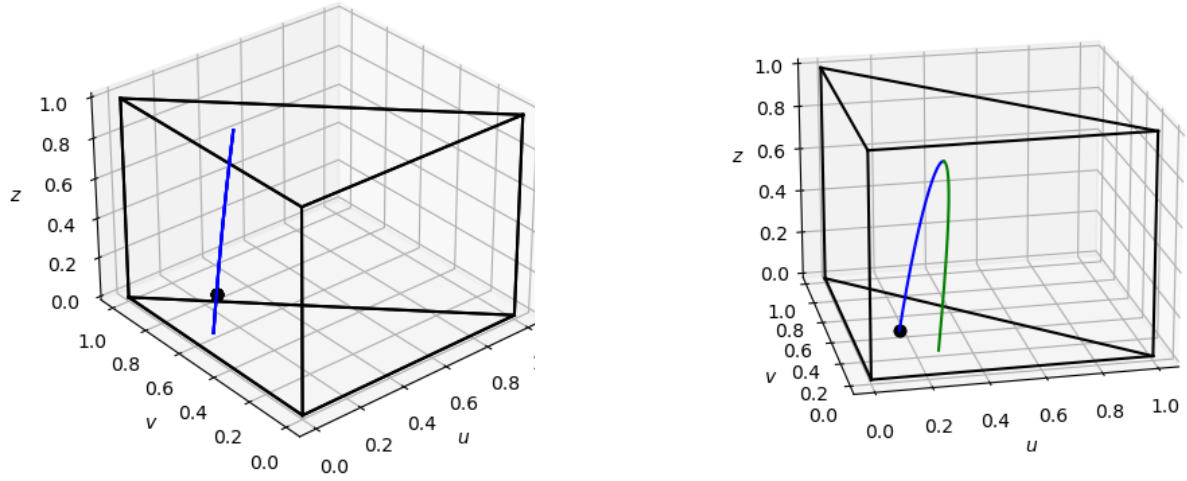


Figura 1: Curvas integrais do campo em (10), associadas às ondas de contato do sistema em (1). **Esquerda:** $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$. **Direita:** $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$.

4.1.2 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:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u, v, z)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial g(u, v, z)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial (z u + \alpha a(z))}{\partial t} + \frac{\partial (z f(u, v, z))}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (11)$$

Obs. Para as simulações numéricas consideramos $a(z) = \sin(z)$ e $0 < \alpha < 1$.

4.2.1 Valores característicos (autovalores) do sistema perturbado pela adsorção

Considerando $U = \begin{bmatrix} u \\ v \\ z \end{bmatrix}$, $G_\alpha(U) = \begin{bmatrix} u \\ v \\ zu + \alpha a(z) \end{bmatrix}$ e $F_\alpha(U) = \begin{bmatrix} f(u, v, z) \\ g(u, v, z) \\ zf(u, v, z) \end{bmatrix}$ o Sistema (11) pode ser escrito na forma vetorial como

$$\frac{\partial G_\alpha(U)}{\partial t} + \frac{\partial F_\alpha(U)}{\partial x} = 0. \quad (12)$$

Vamos simplificar a notação para

$$f \equiv f(u, v, z), \quad g \equiv g(u, v, z), \quad \frac{da(z)}{dz} \equiv a'(z). \quad (13)$$

As matrizes jacobianas de G_α e de F_α são dadas por

$$DG_\alpha(U) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ z & 0 & u + \alpha a'(z) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad DF_\alpha(U) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ z \frac{\partial f}{\partial u} & z \frac{\partial f}{\partial v} & f + z \frac{\partial f}{\partial z} \end{bmatrix}.$$

$$\text{A matriz inversa da matriz } DG_\alpha(U) \text{ é } [DG_\alpha(U)]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{-z}{u + \alpha a'(z)} & 0 & \frac{1}{u + \alpha a'(z)} \end{bmatrix}.$$

A matriz jacobiana do Sistema (11) é dada por

$$A_\alpha(u, v, z) = [DG_\alpha(U)]^{-1} DF_\alpha(U) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{f}{u + \alpha a'(z)} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

Os autovalores da matriz A_α em (14) são os autovalores λ^s e λ^f do sistema 2×2 para a concentração z constante, [2], e o autovalor associado à variação da concentração z é dado por

$$\lambda_\alpha^z = \frac{f(u, v, z)}{u + \alpha a'(z)}, \quad (15)$$

que como se nota é uma perturbação do autovalor λ^z do sistema (1) dada em (6), em que $\alpha = 0$.

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 λ_α^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 $r = r(u, v, z)$:

$$\begin{cases} (\frac{\partial f}{\partial u} - \lambda_\alpha^z)p + \frac{\partial f}{\partial v}q + \frac{\partial f}{\partial z}r = 0 \\ \frac{\partial g}{\partial u}p + (\frac{\partial g}{\partial v} - \lambda_\alpha^z)q + \frac{\partial g}{\partial z}r = 0. \end{cases} \quad (16)$$

Temos, então, que resolver o sistema (16) 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:

$$D_r(u, v, z) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} - \lambda_\alpha^z & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} - \lambda_\alpha^z \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$D_p(u, v, z) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial v} - \lambda_\alpha^z & \frac{\partial g}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$D_q(u, v, z) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial z} & \frac{\partial f}{\partial u} - \lambda_\alpha^z \\ \frac{\partial g}{\partial z} & \frac{\partial g}{\partial u} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

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

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 (16) é dada por

$$p(u, v, z) = D_p(u, v, z), \quad q(u, v, z) = D_q(u, v, z), \quad r(u, v, z) = D_r(u, v, z). \quad (20)$$

Normalizando $(p, q, r)^T$ em (20) ficamos com campo característico associado ao autovalor λ_α^z dado por:

$$V_\alpha(u, v, z) = \frac{1}{\sqrt{[p(u, v, z)]^2 + [q(u, v, z)]^2 + [r(u, v, z)]^2}} \begin{pmatrix} p(u, v, z) \\ q(u, v, z) \\ r(u, v, z) \end{pmatrix} \quad (21)$$

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 (17), (18) e (19). e as componentes p , q e r como em (20).
- (b) Defina a função “norma”:

$$N(u, v, z) = \sqrt{[p(u, v, z)]^2 + [q(u, v, z)]^2 + [r(u, v, z)]^2} \quad (22)$$

- (c) Defina as componentes do campo a ser integrado como em (23):

$$P(u, v, z) = \frac{p(u, v, z)}{N(u, v, z)}, \quad Q(u, v, z) = \frac{q(u, v, z)}{N(u, v, z)}, \quad R(u, v, z) = \frac{r(u, v, z)}{N(u, v, z)}. \quad (23)$$

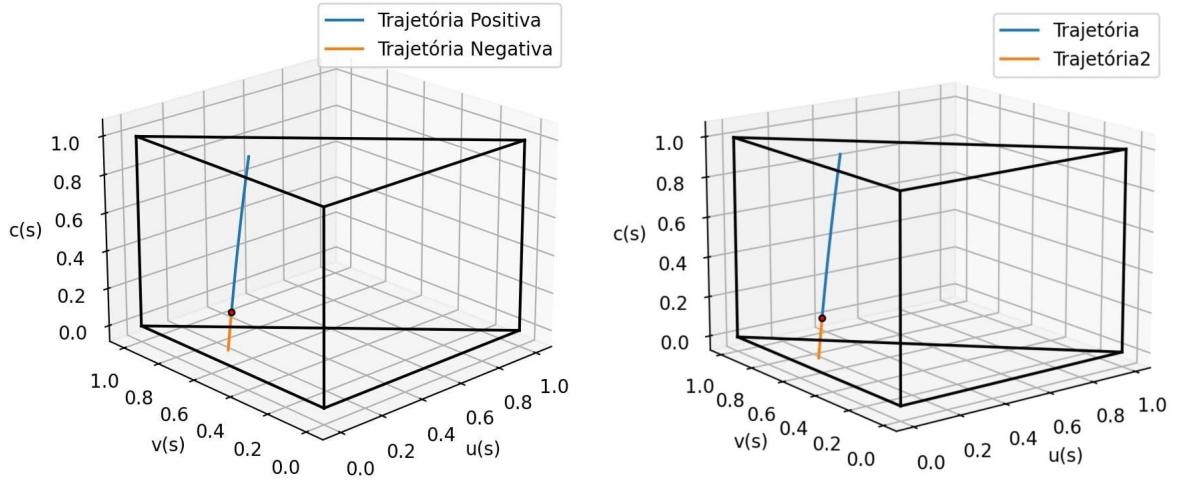


Figura 2: **Esquerda:** Curva integral do sistema em (24) por $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$. **Direita:** Ramo da curva de Hugoniot obtida como uma curva integral do sistema em (48) por $U_0 = (0.1, 0.6, 0.2)$. Ambas as curvas são aproximações da curva integral (de contato) exibida na Figura 1(esquerda) e foram obtidas a partir do sistema em (11) com $\alpha = 10^{-3}$.

(d) Defina o sistema a ser integrado:

$$\frac{dU(s)}{ds} = V_\alpha(s), \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} \frac{du}{ds} = P(u, v, z), \\ \frac{dv}{ds} = Q(u, v, z), \\ \frac{dz}{ds} = R(u, v, z), \end{cases} \quad (24)$$

- (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 (24) 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

$$U_0 = (u_0, v_0, z_0) \quad (25)$$

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

Aqui introduzimos a notação

$$f_0 \equiv f(u_0, v_0, z_0), \quad g_0 \equiv g(u_0, v_0, z_0). \quad (26)$$

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

Com relação ao sistema perturbado (11)), 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”:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha[u - u_0] - [f(u, v, z) - f_0] &= 0 \\ \sigma_\alpha[v - v_0] - [g(u, v, z) - g_0] &= 0 \\ \sigma_\alpha[(zu + \alpha a(z)) - (z_0 u_0 + \alpha a(z_0))] - [zf(u, v, z) - z_0 f_0] &= 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Multiplicando a primeira equação em (27) por z e substituindo na terceira obtemos

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

Obs. Note que se $z \equiv z_0$, então a terceira equação em (28) 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 (28) obtemos que

$$\sigma_\alpha = \frac{f_0 \times [z - z_0]}{u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]}, \quad \text{desde que } z \neq z_0. \quad (29)$$

Observe que se definirmos

$$h^0(z) = \begin{cases} \frac{a(z) - a(z_0)}{z - z_0}, & \text{se } z \neq z_0 \\ a'(z), & \text{se } z = z_0, \end{cases} \quad (30)$$

a equação (29) pode ser escrita como

$$\sigma_\alpha = \frac{f_0}{u_0 + \alpha h^0(z)}. \quad (31)$$

Obs. Tomando $U_0 = U^L$ e $U = U^R$, com $z^L \neq z^R$, uma descontinuidade do Sistema 11 entre U^L e U^R tem velocidade

$$\sigma_\alpha = \frac{f(U^L)}{u^L + \alpha h^L(z^R)} = \frac{f(U^L) \times [z^R - z^L]}{u^L[z^R - z^L] + \alpha[a(z^R) - a(z^L)]}. \quad (32)$$

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 (11) correspondentes à descontinuidades satisfazendo as relações de Rankine-Hugoniot em (28), com velocidade σ_α dada em (32).

Admitindo $z \neq z_0$ então eliminamos σ_α das três equações em (28) e obtemos o sistema de duas equações nas três incógnitas u , v e z :

$$\begin{aligned} \frac{f-f_0}{u-u_0} - \frac{g-g_0}{v-v_0} &= 0, \\ \frac{f-f_0}{u-u_0} - \frac{f_0(z-z_0)}{u_0[z-z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]} &= 0. \end{aligned} \quad (33)$$

Para evitar divisões por zero, vamos eliminar denominadores nas equações (33) 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

$$\begin{aligned} F(u, v, z) &= (f - f_0) \times (v - v_0) - (g - g_0) \times (u - u_0) = 0, \\ G(u, v, z) &= (f - f_0) \times \{u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]\} - f_0 \times (z - z_0) \times (u - u_0) = 0. \end{aligned} \quad (34)$$

Portanto, o ramo da curva de Hugoniot que sai do plano $z = z_0$ é dado pela curva solução do sistema (34) constituído de duas equações nas três incógnitas u , v e z .

Para determinar a curva solução do sistema(34) podemos proceder usando o método numérico de Newton, ou transformar tal sistema (34) 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 (34).

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

$$\frac{\partial F}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial u} \times (v - v_0) - \frac{\partial g}{\partial u} \times (u - u_0) - (g - g_0), \quad (35)$$

$$\frac{\partial F}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial v} \times (v - v_0) - \frac{\partial g}{\partial v} \times (u - u_0) + (f - f_0), \quad (36)$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} \times (v - v_0) - \frac{\partial g}{\partial z} \times (u - u_0) \quad (37)$$

$$\frac{\partial G}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial u} \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]) - f_0 \times (z - z_0) \quad (38)$$

$$\frac{\partial G}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial v} \times (u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]), \quad (39)$$

$$\frac{\partial G}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} \times \{u_0[z - z_0] + \alpha[a(z) - a(z_0)]\} + (f - f_0) \times \{u_0 + \alpha a'(z)\} - f_0 \times (u - u_0). \quad (40)$$

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

Dderivando as duas equações do sistema (34), com relação à variável s , e usando a regra da cadeia, obtemos o sistema algébrico nas variáveis $\frac{du}{ds}$, $\frac{dv}{ds}$ e $\frac{dz}{ds}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial u} \frac{du}{ds} + \frac{\partial F}{\partial v} \frac{dv}{ds} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{dz}{ds} = 0, \\ \frac{\partial G}{\partial u} \frac{du}{ds} + \frac{\partial G}{\partial v} \frac{dv}{ds} + \frac{\partial G}{\partial z} \frac{dz}{ds} = 0. \end{cases} \quad (41)$$

Para resolver o sistema (41) via a regra de Cramer, precisamos dos seguintes determinantes montados a partir dos coeficientes:

$$Det_z = \frac{\partial(F, G)}{\partial(u, v)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial u} & \frac{\partial F}{\partial v} \\ \frac{\partial G}{\partial u} & \frac{\partial G}{\partial v} \end{pmatrix}, \quad (42)$$

$$Det_v = \frac{\partial(F, G)}{\partial(u, z)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial u} & \frac{\partial F}{\partial z} \\ \frac{\partial G}{\partial u} & \frac{\partial G}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (43)$$

$$Det_u = \frac{\partial(F, G)}{\partial(v, z)} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial v} & \frac{\partial F}{\partial z} \\ \frac{\partial G}{\partial v} & \frac{\partial G}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (44)$$

Estes três determinantes definem o campo de vetores

$$\mathcal{H}(u, v, z) = (Det_u(u, v, z), -Det_v(u, v, z), Det_z(u, v, z)) \quad (45)$$

Admitindo que pelo menos um dos determinantes acima é não nulo, isto é, que (u, v, z) não é ponto singular do campo em (45), tomamos a norma de \mathcal{H}

$$N_H(u, v, z) = \sqrt{(Det_u)^2 + (Det_v)^2 + (Det_z)^2} \quad (46)$$

e definimos o campo normalizado:

$$\begin{cases} \mathcal{H}_1(u, v, z) = \frac{Det_u(u, v, z)}{N_H(u, v, z)} \\ \mathcal{H}_2(u, v, z) = \frac{-Det_v(u, v, z)}{N_H(u, v, z)} \\ \mathcal{H}_3(u, v, z) = \frac{Det_z(u, v, z)}{N_H(u, v, z)}, \end{cases} \quad (47)$$

e finalmente chegamos aos sistema de EDOs

$$\begin{cases} \frac{du}{ds} = \mathcal{H}_1(u, v, z) \\ \frac{dv}{ds} = \mathcal{H}_2(u, v, z) \\ \frac{dz}{ds} = \mathcal{H}_3(u, v, z) \end{cases} \quad (48)$$

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 (25), integramos alguns passos o Sistema (24) com este dado inicial $U_0 = (u_0, v_0, z_0)$ até atingir um ponto $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z})$ com $N_H(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z}) \neq 0$. Daí aplicamos o método de Newton no sistema (34) com aproximação inicial $\tilde{U} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z})$ obtendo o ponto U_1 como resultado. Então

usamos o ponto $U_1 = (u_1, v_1, z_1)$ como o ponto inicial para a integração do Sistema (48). Ou seja, integramos o PVI:

$$\begin{cases} \frac{du}{ds} = \mathcal{H}_1(u, v, z), & u(0) = u_1 \\ \frac{dv}{ds} = \mathcal{H}_2(u, v, z), & v(0) = v_1 \\ \frac{dz}{ds} = \mathcal{H}_3(u, v, z), & z(0) = z_1. \end{cases} \quad (49)$$

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.

- (a) 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 $0 \leq u \leq 1, 0 \leq v \leq 0, 0 \leq u + v \leq 1, 0 \leq z \leq 1$.
- (b) Calcule os determinantes D_r, D_p e D_q em (17), (18), (19) no ponto U_0 .
- (c) Se $abs(D_r) + abs(D_p) + abs(D_q) > tol$, integre o PVI (24) com $h > 0$ até obter um ponto $\tilde{U} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z})$ com $N_H(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{z}) \neq 0$.
- (c') Aplique o método de Newton ao sistema algébrico (34) com aproximação inicial sendo \tilde{U} e obtenha um novo U_1 .
- (d) Armazene os pontos U_0 e o novo U_1 numa lista1.
- (e) Calcule os determinantes Det_z, Det_v em Det_u em (42), (43) e (44) no ponto U_1 .
- (f) Faça o produto interno $PI_1 = \langle (\mathcal{H}_1(U_1), \mathcal{H}_2(U_1), \mathcal{H}_3(U_1)), (P(U_1), Q(U_1), R(U_1)) \rangle$. Se $PI_1 \geq 0$ faça $h_2 = h$, porém, se $PI_1 < 0$ faça $h_2 = -h$ e integre o sistema em (48), ou (49), com passo h_2 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 .
- (g) Volte ao item (c), porém com $h = -h$ para obter novos pontos \tilde{U} e U_1 e armazenando o novo U_1 numa lista2.
- (h) Repita o item (f), com $h_2 = -h_2$, armazenando apenas os pontos interiores ao prisma também na lista2.
- (i) Concatene a lista1 e a lista2 numa única lista.
- (j) exiba as partes do ramos da curva de Hugoniot que estejam no prisma, no espaço (u, v, z) .

Exemplos de integração do sistema em (48) ou (49) 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.

Parei a revisão aqui em 05/05/25.

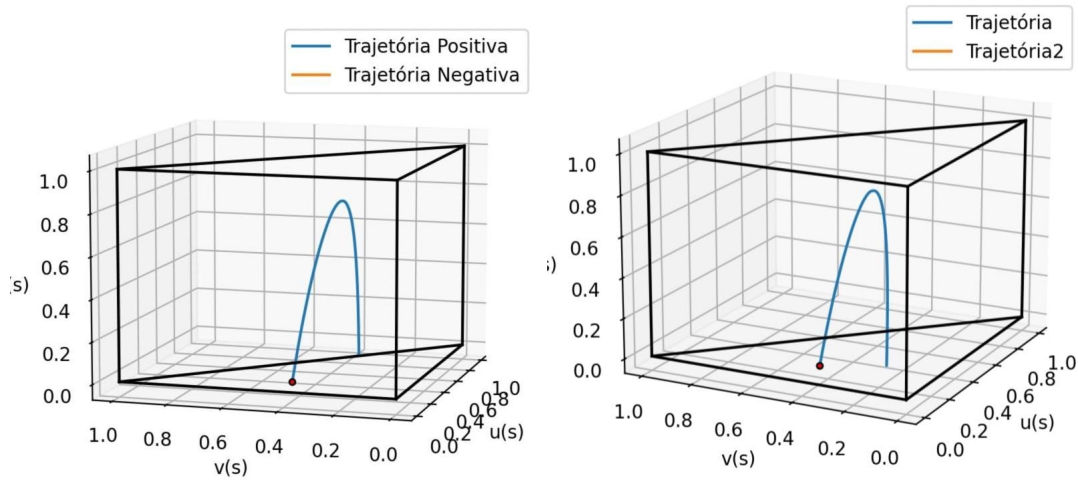


Figura 3: **Esquerda:** Curva integral do sistema em (24) por $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$. **Direita:** Ramo da curva de Hugoniot obtida como uma curva integral do sistema em (48) por $U_0 = (0.17, 0.42, 0.0)$. Ambas as curvas são aproximações da curva integral exibida na Figura 1(direita) e foram obtidas a partir do sistema em (11).

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:

- (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 (24) 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 (34)
- (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 (34) 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

$$H(u, v, z; u_a, v_a, z_a, h) = (u - u_a)^2 + (v - v_a)^2 + (z - z_a)^2 - h^2 = 0. \quad (50)$$

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 (35)-(40), restam calcular as derivadas da função H . Assim,

$$\frac{\partial H}{\partial u} = 2(u - u_a), \quad (51)$$

$$\frac{\partial H}{\partial v} = 2(v - v_a), \quad (52)$$

$$\frac{\partial H}{\partial z} = 2(z - z_a). \quad (53)$$

A matriz jacobiana a ser atualizada em cada passo n é

$$J(u, v, z) = \frac{\partial(F, G, H)}{\partial(u, v, z)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial u} & \frac{\partial F}{\partial v} & \frac{\partial F}{\partial z} \\ \frac{\partial G}{\partial u} & \frac{\partial G}{\partial v} & \frac{\partial G}{\partial z} \\ \frac{\partial H}{\partial u} & \frac{\partial H}{\partial v} & \frac{\partial H}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (54)$$

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 conterá 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 (24) 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 (54) 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 (11) (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

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u,v,z)}{\partial x} = \epsilon_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial g(u,v,z)}{\partial x} = \epsilon_1 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \\ \frac{\partial(zu + \alpha a(z))}{\partial t} + \frac{\partial(zf(u,v,z))}{\partial x} = \epsilon_1 \frac{\partial}{\partial x} \left(z \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \epsilon_2 \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}. \end{cases} \quad (55)$$

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 (55) torna-se o Sistema (1).

Com as considerações acima, dizemos que a descontinuidade do sistema perturbado (11), associada à variação da concentração z , entre os pontos U_α^L e U_α^R com velocidade σ_α , dada em (32), é admissível se puder ser obtida como o limite de soluções (suaves) do Sistema 55, 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 ϵ_1, ϵ_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

$$f_\alpha^L \equiv f(U_\alpha^L), \quad f_\alpha^R \equiv f(U_\alpha^R), \quad g_\alpha^L \equiv g(U_\alpha^L), \quad g_\alpha^R \equiv g(U_\alpha^R). \quad (56)$$

Suponhamos agora que o Sistema 55, 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 55 e multiplicando as equações resultantes por ϵ_1 obtemos o seguinte sistema de EDOs de segunda ordem:

$$\begin{cases} -\sigma_\alpha \frac{du}{ds} + \frac{df(u,v,z)}{ds} = \frac{d^2 u}{ds^2} \\ -\sigma_\alpha \frac{dv}{ds} + \frac{dg(u,v,z)}{ds} = \frac{d^2 v}{ds^2} \\ -\sigma_\alpha \frac{d(zu + \alpha a(z))}{ds} + \frac{d(zf(u,v,z))}{ds} = \frac{d(z \frac{du}{ds})}{ds} + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \frac{d^2 z}{ds^2}. \end{cases} \quad (57)$$

Integrando as equações no Sistema 57 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

$$\begin{cases} \sigma_\alpha u(s) - \sigma_\alpha u_\alpha^R - f(u(s), v(s), z(s)) + f_\alpha^R = -\frac{du(s)}{ds} \\ \sigma_\alpha v(s) - \sigma_\alpha v_\alpha^R - g(u(s), v(s), z(s)) + g_\alpha^R = -\frac{dv(s)}{ds} \\ \sigma_\alpha [z(s)u(s) + \alpha a(z(s))] - \sigma_\alpha [z_\alpha^R u_\alpha^R + \alpha a(z_\alpha^R)] - z(s)f(s) + z_\alpha^R f^R = -z(s)\frac{du(s)}{ds} - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \frac{dz(s)}{ds}. \end{cases} \quad (58)$$

Susbtituindo a primeira equação em 58 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 3×3 :

$$\begin{cases} \frac{du(s)}{ds} = [f(u(s), v(s), z(s)) - f_\alpha^R] - \sigma_\alpha [u(s) - u_\alpha^R] \\ \frac{dv(s)}{ds} = [g(u(s), v(s), z(s)) - g_\alpha^R] - \sigma_\alpha [v(s) - v_\alpha^R] \\ \frac{dz(s)}{ds} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \{ f_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \sigma_\alpha (u_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \alpha [a(z(s)) - a(z_\alpha^R)]) \}. \end{cases} \quad (59)$$

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 (28), segue que os lados direito das três equações em 59 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 (59). Assim, a existência de uma onda viajante associada aos pontos U_α^L e U_α^R significa a existência de uma órbita do sistema de EDOs (59) que “saí” de U_α^L e “chega” em U_α^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 α , ϵ_1 e ϵ_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 (48) 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 (59), isto é, com

$$\begin{aligned} X_1^\alpha(U) &= [f(u, v, z) - \sigma_\alpha u] - [f_\alpha^R - \sigma_\alpha u_\alpha^R] \\ X_2^\alpha(U) &= [g(u, v, z) - \sigma_\alpha v] - [g_\alpha^R - \sigma_\alpha v_\alpha^R] \\ X_3^\alpha(U) &= \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \{ f_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \sigma_\alpha (u_\alpha^R [z - z_\alpha^R] - \alpha [a(z(s)) - a(z_\alpha^R)]) \}. \end{aligned} \quad (60)$$

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

$$J(U) = \begin{bmatrix} \frac{\partial X_1^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial X_1^\alpha}{\partial v} & \frac{\partial X_1^\alpha}{\partial z} \\ \frac{\partial X_2^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial X_2^\alpha}{\partial v} & \frac{\partial X_2^\alpha}{\partial z} \\ \frac{\partial X_3^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial X_3^\alpha}{\partial v} & \frac{\partial X_3^\alpha}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (61)$$

e substitua o ponto U_α^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_α^L .
- (h) Verifique se alguma destas órbitas se aproxima de U_α^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 (59), 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 11 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 α 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 α , ϵ_1 e ϵ_2 pequenos.
- (e) Fixe arbitrariamente um ponto U_α^L com U_α^L próximo de U^L .
- (f) Determine o ramo da curva de Hugoniot do sistema perturbado pelo ponto U_α^L , usando o algoritmo apresentado na subseção (4.2.3).
- (g) Determine o ponto U_α^R na curva de Hugoniot por U_α^L que esteja mais próximo de U^R e calcule $\sigma_\alpha = \frac{f(U_\alpha^L)}{u_\alpha^L + \alpha h^L(z_\alpha^R)}$ próximo.
- (h) Verifique a admissibilidade via perfil viscoso da descontinuidade entre U_α^L e U_α^R , com velocidade de propagação σ_α , usando o algoritmo apresentado na subseção (4.3.2)
- (i) Faça mais experimentos a partir do item (d), para outros pontos U_α^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.

4.4.2 Segmento PQ com seta possuindo vértice em Q

Sejam $P = (u_P, v_P, z_P)$ e $Q = (u_Q, v_Q, z_Q)$.

Seja M um ponto no segmento PQ distante d do extremo Q , com $0 < d \leq 1/3$ dado por $M = P + (1 - d)(Q - P) = Q - d(Q - P)$.

O plano Π ortogonal à PQ pelo ponto $M = (u_M, v_M, z_M)$ tem equação

$$\Pi : (u_Q - u_P)(u - u_M) + (v_Q - v_P)(v - v_M) + (z_Q - z_P)(z - z_M) = 0.$$

Seja $r > 0$ pequeno, por exemplo $r = d/3$, circunferência no plano Π , de raio r centrada em M , tem equações paramétricas:

- Se $z_Q - z_P \neq 0$, então

$$u = u_M + r \cos(\theta), \quad v = v_M + r \sin(\theta), \quad z = z_M - \frac{r}{(z_Q - z_P)} ((u_Q - u_P) \cos(\theta) + (v_Q - v_P) \sin(\theta)).$$

- Se $z_Q - z_P = 0$ e $v_Q - v_P \neq 0$, então

$$u = u_M + r \cos(\theta), \quad z = z_M + r \sin(\theta), \quad v = v_M - \frac{r(u_Q - u_P)}{(v_Q - v_P)} \cos(\theta).$$

- Se $z_Q - z_P = 0$, $v_Q - v_P = 0$, então

$$v = v_M + r \cos(\theta), \quad z = z_M + r \sin(\theta), \quad u = u_M.$$

Obs. Para programar, os parâmetros de entrada são as três coordenadas de P , as três coordenadas de Q , d e r .

Considere quatro pontos na circunferência:

$$\theta = 0 \implies M_1, \quad \theta = \pi/2 \implies M_2, \quad \theta = \pi \implies M_3, \quad \theta = 2 * \pi \implies M_4.$$

Trace os segmentos: M_1M_2 , M_2M_3 , M_3M_4 e M_4M_1 .

Trace os segmentos: M_1Q , M_2Q , M_3Q e M_4Q .

4.4.3 Pesquisa a menor distância do ponto P às faces do prisma

Seja $P = (u_P, v_P, z_P)$ com $0 \leq u_P \leq 1$, $0 \leq v_P \leq 1$, $0 \leq u_P + v_P \leq 1$, $0 \leq z_P \leq 1$.

- Distância de P ao plano $u = 0$: $d_1 = u_P$.
- Distância de P ao plano $v = 0$: $d_2 = v_P$.
- Distância de P ao plano $u + v = 1$: $d_3 = \frac{1}{2}(1 - (u_P + v_P))$.
- Distância de P ao plano $z = 0$: $d_4 = z_P$.
- Distância de P ao plano $z = 1$: $d_5 = 1 - z_P$.
- Distância do ponto P ao ponto $Q = (u_Q, v_Q, z_Q)$: $d_{PQ} = \sqrt{(u_P - u_Q)^2 + (v_P - v_Q)^2 + (z_P - z_Q)^2}$

4.4.4 Esfera centrada em P de raio R

Seja $R = \frac{1}{2} \times \min\{d_1, d_2, \dots, d_5, d_{PQ}\}$:

$$u = u_P + R \cos(\theta) \sin(\phi)$$

$$v = v_P + R \cos(\theta) \sin(\phi)$$

$$z = z_P + R \cos(\phi)$$

$$\theta \in [0, 2\pi) \text{ e } \phi \in [0, \pi].$$

4.4.5 Pontos iniciais para integração do sistema (59)

Tome K_θ a quantidade de pontos em θ .

Tome K_ϕ a quantidade de pontos em ϕ .

Tome $\Delta\theta = \frac{2\pi}{K_\theta}$ e $\Delta\phi = \frac{\pi}{K_\phi}$.

Trace órbitas com passo $h > 0$ pelos pontos $U(\theta_k, \phi_m)$, com $\theta_k = k \times \Delta\theta$ e $\phi_m = m \times \Delta\phi$, $k = 1, 2, \dots, K_\theta$ $m = 1, 2, \dots, K_\phi$.

Inclua as setas a cada, digamos, 10 segmentos.

Trace órbitas com passo $h < 0$ pelos pontos $U(\theta_k, \phi_m)$, com $\theta_k = k \times \Delta\theta$ e $\phi_m = m \times \Delta\phi$, $k = 1, 2, \dots, K_\theta$ $m = 1, 2, \dots, K_\phi$.

Obs. Inclua as setas a cada, digamos, 10 passos de integração efetuados.

Obs. Plote os pontos U_α^L e U_α^R .

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^a 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).