



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Faculdade de Engenharia

Rogério Pazetto Saldanha da Gama

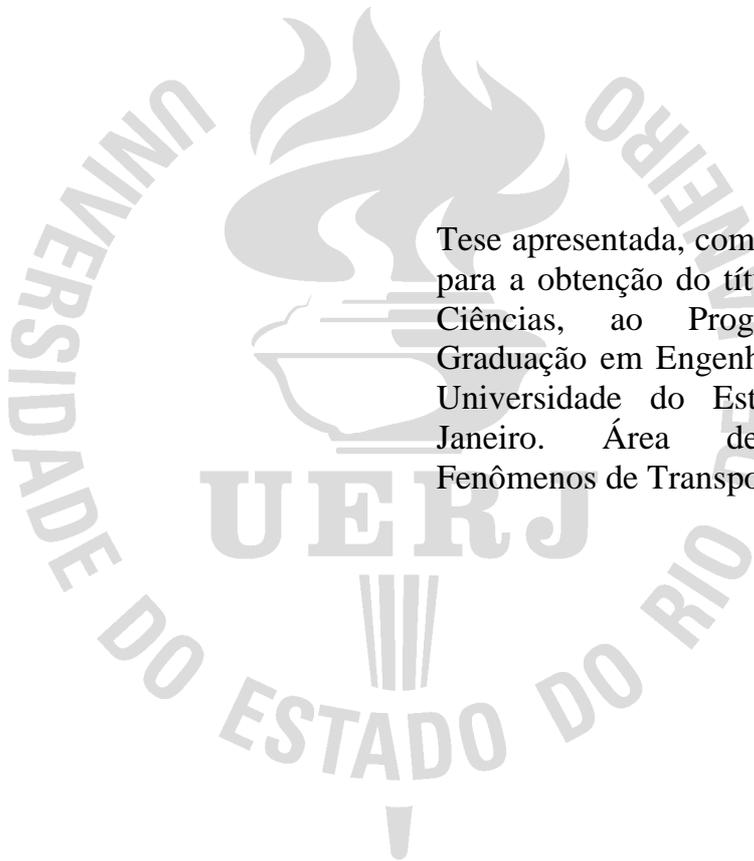
**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE
UM ESCOAMENTO ATRAVÉS DE MEIO POROSO
COM RESTRIÇÃO UNILATERAL E COM TRANSPORTE
DE CONTAMINANTES QUIMICAMENTE REAGENTES**

Rio de Janeiro

2024

Rogério Pazetto Saldanha da Gama

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE
UM ESCOAMENTO ATRAVÉS DE MEIO POROSO
COM RESTRIÇÃO UNILATERAL E COM TRANSPORTE
DE CONTAMINANTES QUIMICAMENTE REAGENTES**



Tese apresentada, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciências, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Fenômenos de Transporte.

Orientador: Prof. Dr. Rogério Martins Saldanha da Gama
Coorientadora: Prof. Dr. Maria Laura Martins-Costa

Rio de Janeiro

2024

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/B

G184 Gama, Rogério Pazetto Saldanha da.
Modelagem e simulação numérica de um escoamento através de meio poroso com restrição unilateral e com transporte de contaminantes quimicamente reagentes / Rogério Pazetto Saldanha da Gama. – 2024.
104 f.

Orientador: Rogério Martins Saldanha da Gama.

Coorientadora: Maria Laura Martins-Costa.

Tese (Doutorado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia.

1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Materiais porosos - Teses. 3. Reações químicas - Teses. 4. Escoamento - Teses. 5. Riemann-Hilbert, Problemas de - Teses. I. Gama, Rogério Martins Saldanha da. II. Martins-Costa, Maria Laura. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia. IV. Título.

CDU 531.72

Bibliotecária: Júlia Vieira -- CRB7/6022

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

Rogério P.S. da Gama

Assinatura

20/12/2024

Data

Rogério Pazetto Saldanha da Gama

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM ESCOAMENTO ATRAVÉS DE MEIO POROSO COM RESTRIÇÃO UNILATERAL E COM TRANSPORTE DE CONTAMINANTES QUIMICAMENTE REAGENTES

Tese apresentada, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciências, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Fenômenos de Transporte.

Aprovada em 20 de Dezembro de 2024.

Banca Examinadora:

Documento assinado digitalmente
MARIA LAURA MARTINS COSTA
Data: 26/12/2024 10:26:22-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. Maria Laura Martins Costa (Co-Orientadora)
Departamento de Engenharia Mecânica – UFF

Documento assinado digitalmente
JOSE JULIO PEDROSA FILHO
Data: 29/12/2024 17:18:41-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. José Julio Pedrosa Filho
Departamento de Análise – Instituto de Matemática – UERJ

Documento assinado digitalmente
EDUARDO DIAS CORREA
Data: 26/12/2024 17:00:02-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. Eduardo Dias Correa
Departamento de Engenharia Mecânica – Faculdade de Engenharia – UERJ

Documento assinado digitalmente
HERALDO SILVA DA COSTA MATTOS
Data: 26/12/2024 10:49:48-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. Heraldo Silva da Costa Mattos
Departamento de Engenharia Mecânica – UFF

Documento assinado digitalmente
FELIPE BASTOS DE FREITAS RACHID
Data: 26/12/2024 13:43:54-0300
Verifique em <https://validar.itl.gov.br>

Prof. Dr. Felipe Bastos de Freitas Rachid
Departamento de Engenharia Mecânica – UFF

Rio de Janeiro
2024

AGRADECIMENTOS

À Universidade do Estado do Rio de Janeiro, pela acolhida e estrutura. Em especial ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, seus funcionários e professores e demais alunos.

Aos meus orientadores, Professora Maria Laura Martins-Costa e Professor Rogério Martins Saldanha da Gama, pelo suporte e incansável disposição para a troca de idéias.

À minha família, e em particular ao meu pai (que foi orientador desta Tese), pelo apoio constante.

DEDICATÓRIA

Ao meu pai, à minha mãe, à minha irmã e à minha tia Gilza.

Omnia in vita duo saltem latera habet.
(autor desconhecido)

RESUMO

GAMA, Rogério Pazetto Saldanha da. *Modelagem e simulação numérica de um escoamento através de meio poroso com restrição unilateral e com transporte de contaminantes quimicamente reagentes*. 2024. 104 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2024.

Esta tese estuda escoamentos de fluidos newtonianos contendo poluentes quimicamente reagentes através de meios porosos com restrições, modelados usando uma abordagem de Teoria de Misturas e uma relação constitutiva para a pressão – dada por uma função contínua e diferenciável da saturação, que sempre garante a preservação da hiperbolicidade do problema. A equação da pressão também permite uma supersaturação (controlada) da matriz porosa ultrapequena e a transição de escoamento insaturado para saturado (e vice-versa). Assumindo densidades de concentração ultrapequenas de constituintes poluentes que podem reagir entre si, mas nunca reagem com o constituinte fluido, todos apresentam densidades de massa da mesma ordem de grandeza, medidas de um ponto de vista de Mecânica do Contínuo. Estas hipóteses levam a supor velocidades iguais para os constituintes poluentes e o constituinte fluido: a velocidade da mistura. Como o constituinte sólido, que representa a matriz porosa, é rígido e está em repouso, e o gás inerte tem uma densidade mássica minúscula (incluída para propiciar alguma compressibilidade à mistura), basta resolver as equações de conservação de massa para o constituinte fluido e para os constituintes poluentes e a equação de conservação de momentum do constituinte fluido, originando um sistema hiperbólico não homogêneo. A sua simulação numérica combina o método de Glimm com uma estratégia de fatoração do operador para levar em conta a variação da massa dos poluentes causada pelas reações químicas dos poluentes entre si. Apesar da comprovada convergência do método Glimm, ele não é adequado para aproximar sistemas hiperbólicos não homogêneos, a menos que seja combinado com uma técnica de fatoração de operadores. Embora outras abordagens já tenham tratado este problema, a novidade é combinar o método de Glimm com a fatoração de operadores para considerar a variação de massa dos poluentes causada por suas reações químicas. O esquema de Glimm avança no tempo usando um número previamente selecionado de problemas de Riemann associados. A relação constitutiva para a pressão – uma função crescente da saturação, com a primeira derivada também crescente, convexa e positiva, permite obter expressões explícitas para os invariantes de Riemann. A solução completa (exata) do problema de Riemann associado é apresentada. Os resultados mostram a evolução da velocidade do constituinte fluido, da saturação e das concentrações dos constituintes poluentes na mistura para dados iniciais selecionados, que são influenciados pelos termos de arraste de Darcy e Forchheimer no escoamento e pelas reações químicas que ocorrem entre os poluentes.

Palavras-chave: Teoria de Misturas; Problema de Riemann; Esquema de Glimm; Meios porosos; Reações químicas; Restrição cinemática unilateral.

ABSTRACT

GAMA, Rogério Pazetto Saldanha da. *Combining Glimm's Scheme and operator splitting for simulating constrained flows of fluids with chemically reacting pollutants in porous media*. 2024. 104 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2024.

This thesis studies constrained Newtonian fluid flows containing reacting pollutants through porous media, modeled using a Mixture Theory perspective and a constitutive relation for the pressure – namely, a continuous and differentiable function of the saturation that ensures always preserving the problem hyperbolicity. The pressure equation also permits an ultra-small porous matrix (controlled) supersaturation and the transition from unsaturated to saturated flow (and vice versa). Assuming tiny pollutant constituent concentration densities that may react among themselves but never react with the fluid constituent, they all present the same order of magnitude mass densities, measured from a Continuum Mechanics viewpoint. These hypotheses lead to the assumption of equal velocities for the pollutant constituents and the fluid constituent: the mixture velocity. Since the solid constituent that represents the porous matrix is rigid and at rest, and the inert gas has a tiny mass density (included to provide some compressibility to the mixture), it suffices to solve the mass conservation equations for the fluid constituent and for the pollutant constituents and the fluid constituent's momentum balance, giving rise to a non-homogeneous hyperbolic system. Its numerical simulation combines Glimm's method with an operator-splitting strategy to account for the pollutants' mass variation caused by the pollutants' chemical reactions among themselves. Despite the Glimm method's proven convergence, it is not adequate to approximate non-homogeneous hyperbolic systems unless combined with an operator-splitting technique. Although other approaches have already addressed this problem, the novelty is combining Glimm's method with operator-splitting to account for the pollutants' mass variation caused by the pollutants' chemical reactions among themselves. Glimm's scheme marches in time using a formerly selected number of associated Riemann problems. The constitutive relation for the pressure – an increasing function of the saturation, with the first derivative also increasing, convex, and positive, allows obtaining explicit expressions for the Riemann invariants. The complete (exact) solution of the associated Riemann problem is presented. The results show the evolution of the fluid constituent velocity, of the saturation, and of the pollutant constituents' concentrations in the mixture for selected initial data that suffer the influence of the Darcy and Forchheimer drag terms on the flow and of the chemical reactions among the pollutants.

Keywords: Mixture Theory; Riemann Problem; Glimm's scheme; Porous media; Chemical reactions; Kinematical constraint.

LISTA DE FIGURAS

| Número | Título | Pág. |
|------------|--|------|
| Figura 3.1 | Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-rarefação e condição inicial: $\varphi_L = 0.2$, $\varphi_R = 0.5$, $u_L = u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.5$. | 50 |
| Figura 3.2 | Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-rarefação e condição inicial $\varphi_L = 0.2$, $\varphi_R = 0.5$, $u_L = u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.5$. | 51 |
| Figura 3.3 | Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-choque e condição inicial: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.1$, $u_L = 0.1$, $u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. | 52 |
| Figura 3.4 | Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-choque e condição inicial $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.1$, $u_L = 0.1$, $u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. | 53 |
| Figura 3.5 | Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-choque e condição inicial: $\varphi_L = 0.3$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.2$, $u_R = -0.2$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. | 54 |
| Figura 3.6 | Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-choque e condição inicial $\varphi_L = 0.3$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.2$, $u_R = -0.2$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. | 55 |
| Figura 3.7 | Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-rarefação e condição inicial: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.6$, $u_L = -1.0$, $u_R = 0.5$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. | 56 |
| Figura 3.8 | Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-rarefação e condição inicial: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.6$, $u_L = -1.0$, $u_R = 0.5$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. | 57 |
| Figura 4.1 | Condição inicial qualquer. | 59 |
| Figura 4.2 | Condição inicial com uma discretização. | 59 |
| Figura 4.3 | Escolha aleatória. | 60 |
| Figura 4.4 | A aproximação por degraus. | 60 |
| Figura 4.5 | Ilustração do Esquema de Glimm. | 62 |
| Figura 4.6 | Resultados obtidos para o problema (4.10) a partir do esquema de Glimm. | 65 |

| | | |
|-------------|---|----|
| Figura 4.7 | Resultados obtidos com o problema (4.11), a partir do esquema de Glimm. O problema (4.11) é análogo ao problema (4.10), diferindo apenas na condição inicial. | 66 |
| Figura 4.8 | Resultados obtidos com o problema (4.11), a partir do esquema de Glimm, alterando apenas a condição inicial referente a φ . Aqui, no instante inicial, $\varphi = 0.5$ para $0 < x < 1$ e $\varphi = 0.1$ para $-1 < x < 0$. O problema (4.11) é análogo ao problema (4.10), diferindo apenas na condição inicial. | 67 |
| Figura 4.9 | Resultados obtidos com o problema (4.11), alterando a condição inicial para φ e ω_1 . Aqui, no instante inicial, $\varphi = 0.5$ para $0 < x < 1$ e $\varphi = 0.1$ para $-1 < x < 0$. A condição inicial para ω_1 é uma reta com valores entre 0.0 e 0.8. | 68 |
| Figura 4.10 | Resultados obtidos com o problema (4.11), alterando a condição inicial para φ e ω_1 . Aqui, no instante inicial, $\varphi = 0.3$ para $0 < x < 1$ e $\varphi = 0.1$ para $-1 < x < 0$. A condição inicial para ω_1 é a mesma da figura 4.9. | 69 |
| Figura 5.1 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.01$, obtidos com o problema (5.6). | 76 |
| Figura 5.2 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$, obtidos com o problema (5.6). | 77 |
| Figura 5.3 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$, com saltos para ω_1 e ω_2 na condição inicial, obtidos com o problema (5.6). | 78 |
| Figura 5.4 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. | 80 |
| Figura 5.5 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = -0.5$. | 81 |
| Figura 5.6 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. | 82 |
| Figura 5.7 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. | 83 |
| Figura 5.8 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$. | 84 |

| | | |
|--------------|---|----|
| Figura 5.9 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são saturação constante, diferentes degraus para a velocidade u e diferentes valores constantes para ω_1 , ω_2 , e ω_3 . | 85 |
| Figura 5.10 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$. | 86 |
| Figura 5.11 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são diferentes degraus para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u . | 87 |
| Figura 5.12 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$ | 88 |
| Figura 5.13 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um degrau para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u . | 89 |
| Figura 5.14 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. | 90 |
| Figura 5.15 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um salto para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u . | 91 |
| Figura 5.16 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. | 92 |
| Figura 5.16a | Superposição das Figuras 5.15 e 5.16, para facilitar a comparação da influência dos termos de atrito. | 93 |
| Figura 5.17 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um salto para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u . | 94 |
| Figura 5.18 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. | 95 |
| Figura 5.19 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$. | 96 |
| Figura 5.20 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um salto para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u . | 97 |
| Figura 5.21 | Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. | 98 |

LISTA DE TABELAS

| | Título | Pág. |
|------------|--------------------------------------|-------------|
| Tabela 3.1 | Possíveis Soluções | 34 |
| Tabela 3.2 | Condições para as Soluções Possíveis | 35 |

SUMÁRIO

| | Pág |
|--|-----|
| INTRODUÇÃO..... | 13 |
| OBJETIVO..... | 16 |
| 1. O MODELO MATEMÁTICO..... | 17 |
| 1.1. A RESTRIÇÃO UNILATERAL..... | 26 |
| 2. O PROBLEMA DE RIEMANN..... | 27 |
| 2.1 UM EXEMPLO..... | 43 |
| 3. O ESQUEMA DE GLIMM..... | 58 |
| 3.1. IMPLEMENTAÇÃO DO ESQUEMA DE GLIMM..... | 70 |
| 4. O PROBLEMA NÃO HOMOGÊNIO (E A FATORAÇÃO)..... | 73 |
| 4.1 UM EXEMPLO..... | 75 |
| 5. CONCLUSÕES E SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS..... | 99 |
| REFERÊNCIAS..... | 101 |

1. INTRODUÇÃO

Os fenômenos de transporte em meios porosos apresentam diversas aplicações, algumas das quais com relevantes impactos ambientais, como o sequestro de dióxido de carbono (captura e armazenamento de dióxido de carbono atmosférico para reduzir ou evitar emissões de gases com efeito de estufa), a penetração de produtos químicos que contaminam o solo, ou a eliminação de resíduos radioativos. Entre as aplicações significativas na área de petróleo e gás estão a simulação de escoamento de reservatórios de petróleo, a recuperação avançada de petróleo (por exemplo, por inundação de água) e a produção de gás natural, por exemplo. Outra aplicação relevante são os escoamentos de águas subterrâneas (que podem incluir a migração de contaminantes e que podem ocorrer em aquíferos – uma formação geológica que contém água que se move através dela). Essencialmente, o estudo dos escoamentos de águas subterrâneas é essencial para o desenvolvimento e gestão dos recursos hídricos.

Além disso, os escoamentos através de meios porosos são aplicados a células de combustível (essencialmente escoamentos de combustíveis de hidrocarbonetos e de oxidantes através de meios porosos gerando eletricidade e calor por reações eletroquímicas), secagem, filtração, gerenciamento de energia geotérmica, drenagem de terras agrícolas, coleta de energia geotérmica, coletores de energia solar e transferência de massa através de membranas, para citar algumas das inúmeras aplicações (ver, por exemplo, Bear, 1972; Scheidegger, 1974; Bear, 1979; Kaviani, 1995; Ma et al., 2005; Ingham e Pop, 2005; Belghit and Benyaich, 2014).

A técnica de média volumétrica propõe equações de conservação, hipóteses acerca do comportamento das fases e interfaces e hipóteses constitutivas em escala microscópica, calculando posteriormente a média sobre um volume representativo (denominado REV) das equações desenvolvidas, permitindo obter as equações em nível macroscópico. Esta metodologia, proposta inicialmente por Whitaker (1969), é amplamente utilizada para descrever escoamentos em meios porosos. Alguns exemplos são: Vafai e Tien (1981), Vafai (1984), Whitaker (1996), Goyeau et al. (1997), Tien e Vafai (1989) e Alazmi e Vafai (2006).

A Teoria de Misturas, empregada no presente trabalho, considera sempre uma descrição macroscópica dos constituintes contínuos superpostos da mistura (cada ponto da mistura ocupado, simultaneamente, por todos os constituintes da mistura) com uma

aparente independência termomecânica. A Teoria de Misturas descreve adequadamente muitos fenômenos relevantes, como o comportamento de polímeros (materiais compósitos), escoamentos através de meios porosos ou escoamentos com hélio líquido (Francaviglia, 2006). As leis de conservação são propostas para todos os constituintes com termos de fonte adicionais para levar em conta a interação entre os constituintes (e considerar a aparente independência termomecânica dos constituintes) e para a mistura como um todo (ver, por exemplo, Atkin e Craine, 1976; Bowen, 1982; Bedford e Drumheller, 1983; Rajagopal e Tao, 1995). O modelo mecânico requer equações constitutivas propostas através de um procedimento sistemático, satisfazendo sempre o princípio da objetividade e a segunda lei da termodinâmica (ver: Coleman e Noll, 1963; Costa Mattos et al., 1995).

Modelos multiescala (por exemplo, Hassanizadeh e Gray, 1990; Gray e Hassanizadeh, 1991; Murad et al., 1995; Murad e Cushman, 1996) empregam as equações de conservação e fazem hipóteses sobre o comportamento de fases e interfaces em escala microscópica, posteriormente calculando a média sobre o REV das equações desenvolvidas, para obter equações em macroescala. Uma abordagem de Teoria de Misturas é então empregada em macroescala para obter as equações constitutivas que satisfaçam a segunda lei da termodinâmica, dando origem a um modelo mecânico completo. Wang (2000) usa uma abordagem sistemática, empregando os princípios da Mecânica do Contínuo (objetividade e Segunda Lei da Termodinâmica) para propor uma generalização da lei de Darcy para um escoamento em um meio poroso (em uma macroescala) que relaciona o gradiente de pressão, a velocidade do fluido e seu gradiente, levando em conta efeitos geométricos e termofísicos.

A combinação de uma técnica de fatoração de operadores com o esquema de Glimm foi anteriormente usada com sucesso em vários problemas hiperbólicos não lineares com relevância física. Sod (1977) resolveu as equações de escoamento de dinâmica de gases com simetria cilíndrica, considerando um choque cilíndrico convergente, combinando estas duas metodologias. A combinação destas duas ferramentas foi empregada, por exemplo no trabalho de Marchesin e Paes-Leme (1983), que simularam escoamentos transientes de gás em dutos, utilizando as equações de dinâmica de gases e levando em consideração o atrito Moody; foi também usada no estudo de escoamentos através de meios porosos insaturados (Saldanha da Gama e Sampaio, 1987; Saldanha da Gama e Martins-Costa, 1997; Martins-Costa e Saldanha da Gama, 2001), na resposta de hastes elásticas não lineares (Saldanha da Gama, 1990), e

na propagação de ondas em tubos elasto-viscoplásticos sujeitos a danos (Freitas Rachid et al., 1994) e no transporte de poluentes na atmosfera (Martins-Costa e Saldanha da Gama, 2003; 2006; Porto et al., 2011).

Utilizando uma abordagem de Teoria de Misturas, Saldanha da Gama et al. (2023) propuseram uma equação constitutiva contínua e diferenciável para a pressão em função da saturação com uma primeira derivada contínua e crescente. O modelo permite uma pequena supersaturação – permitindo uma deformação muito pequena do meio poroso e mantendo a natureza hiperbólica do problema. A simulação numérica utiliza o esquema de Glimm, que marcha no tempo utilizando a solução do problema de Riemann associado. Saldanha da Gama et al. (2023) apresentaram uma revisão abrangente de trabalhos anteriores que tratam de escoamentos hiperbólicos através de meios porosos com restrições e da transição de fluxo insaturado-saturado. O trabalho de Martins-Costa et al. (2024) pode ser considerado uma extensão de Saldanha da Gama et al. (2023) porque o modelo mecânico não está mais reduzido a um sistema hiperbólico não linear e não homogêneo. A relação constitutiva de fonte de momentum do constituinte fluido, além do termo proporcional ao gradiente de concentração do constituinte fluido, leva em conta o arraste, contendo um termo linear e um termo quadrático (geralmente chamados de termos de Darcy e Forchheimer na literatura). Este termo torna o problema não homogêneo. Sua simulação combina o esquema de Glimm com um procedimento de fatoração de operadores, que separa a parte evolutiva no tempo da parte puramente hiperbólica, com o objetivo de descrever a influência dos termos de arrasto na evolução dos campos de saturação e velocidade.

Esta tese também utiliza a combinação do esquema de Glimm com a fatoração de operadores para considerar não só o referido arraste na fonte de momentum – com suas parcelas linear e quadrática, como também a presença de um fluido contendo poluentes em suspensão. Este fluido poderia ser considerado uma pseudo-mistura do constituinte fluido com os constituintes fluidos, que reagem quimicamente entre si, mas não reagem com o constituinte fluido – o chamado fluido principal. O problema matemático resultante é um sistema hiperbólico não linear e não homogêneo, cujas aproximações mostram a evolução no tempo da velocidade do constituinte fluido, da saturação e das concentrações dos poluentes, que são influenciados pelos termos não homogêneos do sistema: os termos de arraste de Darcy e Forchheimer e os termos que simulam as reações químicas entre os poluentes.

1.1. OBJETIVO

Esta tese trabalho tem como foco o estudo de um escoamento de um fluido newtoniano contendo poluentes em suspensão (que reagem quimicamente entre si) através de uma matriz porosa insaturada com restrição unilateral, modelado à luz da Teoria Contínua de Misturas. A simulação do sistema hiperbólico não linear e não homogêneo que resulta do modelo mecânico, emprega uma técnica de fatoração de operadores combinada ao método de Glimm.

Esta metodologia de simulação numérica vem sendo utilizada em diversos problemas relevantes em Engenharia, entre os quais estão um estudo dos danos induzidos por transientes de pressão em tubos cheios de líquido em altas temperaturas (Freitas Rachid et al., 1994), um estudo do escoamento insaturado através de uma matriz porosa rígida considerando um termo de arraste linear na fonte de momentum (Martins-Costa e Saldanha da Gama, 2001), um estudo do transporte de poluentes na atmosfera considerando uma geometria esférica (Martins-Costa e Saldanha da Gama, 2006) e o estudo de um escoamento em um meio poroso que admite uma supersaturação muito pequena, mantendo a natureza hiperbólica do problema e leva em conta um termo linear e um termo quadrático (termos de Darcy e Forchheimer) na fonte de momentum do constituinte fluido, além do termo proporcional ao gradiente de concentração (Martins-Costa et al., 2024).

2. O MODELO MATEMÁTICO

Partindo de uma descrição à luz da Teoria Contínua de Misturas, vamos considerar uma mistura contínua composta por $n_p + 3$ constituintes. O primeiro, representante do meio poroso rígido e em repouso, não terá suas equações de conservação abordadas, uma vez que é suposto rígido e em repouso. O segundo representa um gás inerte com baixíssima densidade, será considerado apenas para prover a mistura de alguma compressibilidade. Suas equações de conservação também não serão tratadas, como consequência da hipótese de baixíssima densidade. O terceiro constituinte representa um líquido que escoar através do meio poroso. À luz da Mecânica do Contínuo Clássica, esse líquido será suposto incompressível (densidade constante, mais restrito do que a hipótese de escoamento isocórico).

Além dos três constituintes anteriormente citados, vamos admitir a existência de mais n_p constituintes, cada um deles representando algum tipo de elemento em suspensão na mistura (por exemplo, poluentes), todos eles supostos com pequena concentração, de tal forma que dispensaremos o estudo das equações da quantidade de movimento, nos restringindo apenas à equação de conservação de massa para cada um destes constituintes presentes com pequena concentração.

Quando se consideram constituintes com pequenas concentrações é possível admitir que suas velocidades sejam aproximadamente iguais à velocidade do líquido principal a qual será aproximadamente igual à velocidade da mistura.

Considerando que a massa do fluido principal (um líquido) se conserva (este constituinte não reage com os demais) temos que:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho_f dV = 0 \quad (2.1)$$

onde ρ_f é a densidade do constituinte fluido na mistura.

A densidade de um constituinte na mistura é uma razão local entre a massa deste constituinte e o volume da mistura. Assim, ao integrar a densidade de um constituinte na mistura sobre um dado volume de mistura, teremos a massa deste constituinte contida no referido volume.

Voltando à equação (2.1), podemos usar o Teorema do Transporte de Reynolds para escrever:

$$\int_{\Omega_t} \left\{ \frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \text{div}(\rho_f \mathbf{v}_f) \right\} dV = 0 \quad (2.2)$$

onde \mathbf{v}_f é a velocidade do constituinte que representa o líquido principal. Levando em conta que Ω_t é uma região arbitrária, ficamos com:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \text{div}(\rho_f \mathbf{v}_f) = 0 \quad (2.3)$$

Neste ponto são definidos alguns conceitos usuais em escoamentos em meios porosos. A porosidade (ε) de uma matriz porosa, assim como a densidade mássica do fluido (ρ_F) são medidas sob um ponto de vista (clássico) de Mecânica do Contínuo. Como ρ_f é a densidade do constituinte fluido na mistura, a fração de fluido é definida como:

$$\phi = \frac{\rho_f}{\rho_F} \quad (2.4)$$

A saturação ψ é a razão entre a fração de fluido ϕ e a porosidade do meio poroso (medida sob um ponto de vista de Mecânica do Contínuo):

$$\psi = \frac{\phi}{\varepsilon} = \frac{\rho_f}{\varepsilon \rho_F} \quad (2.5)$$

A saturação ψ , definida na equação (2.5), não pode ultrapassar o valor unitário. Porém, neste trabalho, uma supersaturação ínfima é admitida, permitindo uma deformação muito pequena da matriz porosa. (Esta deformação é tão pequena que o constituinte sólido não necessita as equações de conservação de massa e momentum.) Neste contexto, considera-se uma variável é a saturação “ampliada”, φ , que é dada por:

$$\phi = \frac{\phi}{\varepsilon + \delta} \text{ onde a saturação original satisfaz: } \psi = \frac{\phi}{\varepsilon} < 1 + \frac{\delta}{\varepsilon}, \quad \delta \ll \varepsilon \quad (2.6)$$

Vale ressaltar que esta definição requer que a quantidade δ seja uma constante positiva muito pequena. Essa supersaturação minúscula já foi considerada anteriormente, por exemplo em Martins-Costa et al. (2017), em Saldanha da Gama et al. (2023) ou em Martins-Costa et al. (2024).

A definição da concentração ω_i de um poluente na mistura é feita considerando ρ_F a densidade do fluido principal, visto como um meio contínuo incompressível. Assim sendo, podemos definir as concentrações dos constituintes poluentes ω_i como:

$$\omega_i = \frac{\rho_i}{\varepsilon \rho_F} \quad (2.7)$$

sendo ρ_i a densidade do *i-ésimo* constituinte poluente na mistura.

O balanço de massa para os constituintes poluentes é dado por:

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \operatorname{div} \mathbf{v}_i - r_i \right\} dV = 0 \quad i = 1, n_p \quad (2.8)$$

onde r_i é a taxa de geração de massa do *i-ésimo* constituinte poluente (que pode ser causada por reações químicas) e n_p representa o número de constituintes poluentes considerados. A forma local do balanço de massa é obtida porque a equação (2.7) é válida para qualquer volume arbitrário $\Omega(t)$, logo o integrando tem que ser nulo:

$$\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \operatorname{div} \mathbf{v}_i = r_i \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_i \mathbf{v}_i = r_i \quad (2.9)$$

Para garantir a conservação de massa dos constituintes envolvidos em reações químicas, teremos que:

$$\sum_{i=1}^{n_p} r_i = 0 \quad (2.10)$$

Suporemos que a quantidade de poluentes na mistura é tão pequena que suas velocidades podem ser aproximadas por \mathbf{v}_f , a velocidade do constituinte que representa o líquido principal, denotado por constituinte fluido ao longo deste trabalho.

$$\mathbf{v}_i \cong \mathbf{v}_f \quad (2.11)$$

A equação de balanço de massa para os constituintes poluentes pode ser reescrita empregando a definição da concentração ω_i e usando a aproximação de que os constituintes poluentes se movem com a velocidade do constituinte fluido, \mathbf{v}_f , tem-se:

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \text{div}(\omega_i \mathbf{v}_f) = r_i \quad i = 1, n_p \quad (2.12)$$

Para o decaimento da concentração do *i-ésimo* constituinte na mistura será suposta a hipótese constitutiva mais simples – o decaimento obedece a:

$$r_i = \hat{r}_i(\omega_j) \quad (2.13)$$

A relação constitutiva (2.13) descreve a taxa de produção do poluente considerando, neste caso, tanto sua geração como sua destruição, que pode ser causada por reações químicas.

O balanço de quantidade de movimento linear para o constituinte fluido da mistura que representa o líquido (fluido Newtoniano incompressível) é dado por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} \rho_f \mathbf{v}_f dV = \sum \mathbf{F}_{EXT} \quad (2.14)$$

ou, mais especificamente:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_f} \rho_f \mathbf{v}_f dV = \int_{\Omega_f} (\rho_f \mathbf{b}_f + \mathbf{m}_f) dV + \int_{\partial\Omega_f} \mathbf{T}_f \mathbf{n} dA \quad (2.15)$$

onde \mathbf{T}_f representa o tensor parcial de tensões, \mathbf{b}_f a força de corpo, e \mathbf{m}_f a força difusiva de interação, todos atuando sobre o constituinte fluido.

Aplicando o teorema da divergência:

$$\int_{\Omega} \left\{ \rho_f \left[\frac{\partial \mathbf{v}_f}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}_f) \mathbf{v}_f \right] - \mathbf{m}_f - \rho_f \mathbf{b}_f - \text{div } \mathbf{T}_f \right\} dV = 0 \quad (2.16)$$

O integrando da equação (2.16) é sempre nulo porque esta equação é válida para qualquer volume arbitrário $\Omega(t)$, então sua forma local é dada por:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \mathbf{v}_f}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}_f) \mathbf{v}_f \right] = \text{div } \mathbf{T}_f + \mathbf{m}_f + \rho_f \mathbf{b}_f \quad (2.17)$$

Williams (1978), fazendo uma analogia com o tensor tensão de Cauchy, supôs que o tensor parcial de tensões fosse proporcional à pressão e ao gradiente de velocidade – na verdade ao tensor de taxa de deformação – atuando sobre o constituinte do fluido. Allen (1986) afirmou que as tensões normais eram dominantes em relação ao cisalhamento e às trações interfásicas na mistura. Isto levou a uma hipótese simplificadora para a equação constitutiva do tensor parcial de tensões \mathbf{T}_f atuando sobre o constituinte do fluido: que ele deveria ser proporcional à pressão \bar{p} que atua sobre ele, sendo dada por:

$$\mathbf{T}_f = -\varepsilon \phi \bar{p} \mathbf{1} \quad (2.18)$$

A Teoria de Misturas requer termos de fonte adicionais para levar em conta a interação termomecânica entre os constituintes da mistura. Neste caso, existe uma fonte

de momentum atuando sobre o constituinte fluido representado pelo termo \mathbf{m}_f (com dimensão de força) devido à interação do constituinte fluido com os demais constituintes da mistura. A fonte de momentum é responsável pela força de arraste exercida pelo constituinte sólido (representando o meio poroso), pelo constituinte gasoso com densidade de massa desprezível e pelos constituintes poluentes no constituinte fluido. O termo de arraste é usualmente referido na literatura como a soma dos termos de Darcy e de Forchheimer (Srinivasan e Rajagopal, 2014; Nield, 1991; Martins-Costa et al., 2024) e por um termo que tenta modelar o efeito das forças capilares sob o ponto de vista da Teoria de Misturas, que considera o fato dos escoamentos através de meios porosos insaturados apresentarem uma forte dependência da saturação, supondo, então, que o termo de fonte dependa também do gradiente de saturação (Williams, 1978; Saldanha da Gama e Martins-Costa, 1997; Martins-Costa e Saldanha da Gama, 2001; Martins-Costa et al., 2024). Neste caso a equação constitutiva para a força difusiva de interação \mathbf{m}_f é dada por:

$$\mathbf{m}_f = -\frac{\mu_f \varepsilon^2}{K} \phi^2 \mathbf{v}_f - \frac{\rho_f \varepsilon^2 \bar{F}}{K^{1/2}} \phi^2 |\mathbf{v}_f| \mathbf{v}_f - \frac{\mu_f \varepsilon^2 D}{K} \nabla \phi \quad (2.19)$$

onde μ_f é a viscosidade do fluido, \bar{F} é o número de Forchheimer e K é a permeabilidade específica da matriz porosa – todas as variáveis medidas num contexto de Mecânica do Contínuo. A variável D é um coeficiente de difusão. Na equação (2.19), existem dois termos de arraste: o primeiro termo exhibe uma dependência linear na velocidade do constituinte do fluido (o termo de Darcy), enquanto o segundo termo apresenta uma dependência quadrática na velocidade do constituinte do fluido (o termo de Forchheimer), já o terceiro o termo estaria ausente em escoamentos saturados. A força de corpo atuando no constituinte fluido \mathbf{b}_f será dada pela aceleração da gravidade.

Substituindo as hipóteses constitutivas para a fonte de momentum e o tensor parcial de tensões no balanço de momentum linear, supondo que não haja influência das forças de corpo (essencialmente devidas à aceleração da gravidade) neste escoamento, tem-se o balanço de momentum linear para o constituinte fluido dado por:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \mathbf{v}_f}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}_f) \mathbf{v}_f \right] = -\varepsilon \nabla (\varphi \bar{p}) - \frac{\mu_f \varepsilon^2}{K} \varphi^2 \mathbf{v}_f - \frac{\rho_f \varepsilon^2 \bar{F}}{K^{1/2}} \varphi^2 |\mathbf{v}_f| \mathbf{v}_f - \frac{\mu_f \varepsilon^2 D}{K} \nabla \varphi \quad (2.20)$$

Os coeficientes dos termos de Darcy e de Forchheimer (Whitaker, 1996; Martins-Costa et al., 2024) são convenientemente expressos como:

$$\gamma_1 = \frac{\mu_f \varepsilon^2}{\rho_f K} \quad \text{e} \quad \gamma_2 = \frac{\varepsilon^2 \bar{F}}{K^{1/2}} \quad (2.21)$$

Enquanto a pressão pode ser convenientemente expressa como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\varphi}{\rho_f} \bar{p} \right) + \frac{\mu_f \varepsilon D \rho_f}{K} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.22)$$

A seguinte relação constitutiva, que garante a restrição unilateral, pode ser considerada para a pressão (Saldanha da Gama et al., 2023; Martins-Costa et al., 2024):

$$p = \hat{p}(\varphi) = \varphi + \alpha^2 \frac{\varphi}{1-\varphi} - 2\alpha \ln(1-\varphi), \quad \alpha \geq 0 \quad (2.23)$$

com $\lim_{p \rightarrow \infty} \varphi = 1$

A pressão p foi definida na equação (2.22). Ela depende da saturação e de um parâmetro positivo. Deve-se notar que a equação (2.23) fornece um limite superior para a saturação garantindo uma simulação fisicamente compatível e confiável para a porção homogênea do operador hiperbólico do escoamento unidimensional a ser tratado nesta tese. A hiperbolicidade do sistema é garantida, independentemente do valor da fração de fluido, pois a supersaturação (minúscula) permitida é controlada. Uma característica interessante e importante da relação constitutiva proposta para a pressão na equação (2.22) é que os invariantes de Riemann podem ser expressos por expressões em uma forma fechada. Isto é muito conveniente para a simulação da porção homogênea do sistema hiperbólico através do método de Glimm. Além disso, a supersaturação tem um limite a priori, mesmo para valores de pressão enormes.

Supondo que todas as variáveis dependam apenas do tempo t e da coordenada na direção do escoamento x , com u representando a velocidade na direção do escoamento e fazendo a pressão $\bar{p} = \hat{p}(\varphi)$, o sistema, na forma unidimensional, pode ser escrito como:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) = -\gamma_1 \varphi^2 u - \gamma_2 \varphi^2 |u|u, \quad \text{com } p = \hat{p}(\varphi) \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) = r_i, \quad i = 1, n_p \end{cases} \quad (2.24)$$

É importante notar que neste trabalho as forças externas serão apenas aquelas devidas à pressão, aos efeitos gravitacionais e à interação entre o fluido principal e o meio poroso. Nesse caso, a equação diferencial que representa a quantidade de movimento linear é a segunda equação do sistema mostrado na equação (2.24), onde p representa uma pressão e os termos no segundo membro representam uma força de interação interna.

Para os constituintes que representam os poluentes, vamos considerar que:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} \rho_i dV = \int_{\Omega_i} r_i dV \rightarrow \int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_i v_i) dV = \int_{\Omega_i} r_i dV \rightarrow \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_i v_i) = r_i \quad (2.25)$$

No caso de 3 poluentes teremos:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} \rho_1 dV &= \int_{\Omega_i} r_1 dV \rightarrow \int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 v_1) dV = \int_{\Omega_i} r_1 dV \\
\rightarrow \frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 v_1) &= r_1 \\
\frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} \rho_2 dV &= \int_{\Omega_i} r_2 dV \rightarrow \int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 v_2) dV = \int_{\Omega_i} r_2 dV \\
\rightarrow \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 v_2) &= r_2 \\
\frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} \rho_3 dV &= \int_{\Omega_i} -(r_1 + r_2) dV \rightarrow \int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_3 v_3) dV = \int_{\Omega_i} -(r_1 + r_2) dV \\
\rightarrow \frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho_3 v_3) &= -(r_1 + r_2)
\end{aligned} \tag{2.26}$$

o que dá origem ao seguinte subsistema de equações:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 v) &= r_1 \\
\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_2 v) &= r_2 \\
\frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_3 v) &= -(r_1 + r_2)
\end{aligned} \tag{2.27}$$

onde ρ_i representa a densidade do constituinte i na mistura (razão local entre a massa do constituinte e o volume de mistura).

Usando a definição de concentração de cada poluente na mistura e supondo que os constituintes (poluentes) estejam presentes sempre em pequenas quantidades, pode-se escrever as equações em termos das concentrações,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \omega_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\omega_1 v) &= \frac{r_1}{\varepsilon \rho} \\
\frac{\partial \omega_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\omega_2 v) &= \frac{r_2}{\varepsilon \rho} \\
\frac{\partial \omega_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\omega_3 v) &= -\frac{(r_1 + r_2)}{\varepsilon \rho}
\end{aligned} \tag{2.28}$$

2.1. A RESTRIÇÃO UNILATERAL

Apesar de óbvio, é fundamental ressaltar que a quantidade de fluido incompressível contida num poro não pode ter um volume maior do que o volume o poro. Óbvio! Mas essa restrição cinemática precisa ser matematicamente descrita.

Vamos considerar que a pressão seja uma função da saturação φ , ou seja, $p = \hat{p}(\varphi)$. A saturação neste caso (meio poroso rígido e fluido principal incompressível) é definida por:

$$\varphi = \frac{\rho_f}{\varepsilon \rho_F} \quad (2.29)$$

onde ρ_f é a densidade do fluido principal tratado como constituinte da mistura (razão entre a massa de fluido e o volume de mistura), ρ_F é a densidade do fluido principal tratado como um contínuo clássico e ε é a porosidade (suposta neste trabalho uma constante).

Para atender à restrição cinemática mencionada é preciso que a pressão tenda para o infinito à medida que a saturação tende para a unidade. Em outras palavras, é preciso que:

$$\lim_{\varphi \rightarrow 1} p = +\infty \text{ e que } \lim_{p \rightarrow +\infty} \varphi = 1 \quad (2.30)$$

Por exemplo, a pressão pode ser dada por:

$$p = \hat{p}(\varphi) = \alpha^2 \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3} \quad (2.31)$$

Ou ainda:

$$p = \hat{p}(\varphi) = \varphi + \alpha^2 \frac{\varphi}{1-\varphi} \quad (2.32)$$

3. O PROBLEMA DE RIEMANN

Vamos considerar o seguinte sistema de equações diferenciais parciais (que é não linear e hiperbólico):

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0, \quad p = \hat{p}(\varphi)\end{aligned}\tag{3.1}$$

onde a variável φ é sempre positiva. A variável φ pode representar, por exemplo, a saturação. A variável u pode representar uma velocidade adimensional. No caso de um meio poroso rígido a variável φ seria a fração de fluido dividida pela porosidade. O problema (3.1) pode ser reescrito na seguinte forma (mais conveniente):

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi u \end{bmatrix} + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi u \end{bmatrix} = 0, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ p' - u^2 & 2u \end{bmatrix}\tag{3.2}$$

Vamos considerar agora o problema de Cauchy

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0\end{aligned}\tag{3.3}$$

$$(\varphi, u) = \begin{cases} (\varphi_L, u_L), & -\infty < x < 0, \quad t = 0 \\ (\varphi_R, u_R), & 0 < x < \infty, \quad t = 0 \end{cases}$$

O problema (3.3) é chamado “Problema de Riemann” e sua solução (no sentido generalizado) depende somente da razão x/t . Em outras palavras, (3.1) pode ser representado como:

$$\begin{aligned}\frac{d\varphi}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{d}{d\eta}(\varphi u) \frac{\partial \eta}{\partial x} &= 0 \\ \frac{d}{d\eta}(\varphi u) \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{d}{d\eta}(\varphi u^2 + p) \frac{\partial \eta}{\partial x} &= 0\end{aligned}\tag{3.4}$$

onde a variável de similaridade é definida por:

$$\eta = x/t \Rightarrow \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{1}{t}\eta; \quad \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{1}{t} \quad (3.5)$$

Dessa forma a equação (3.2) dá origem a:

$$\begin{bmatrix} -x/t & 1 \\ p'-u^2 & 2u-x/t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\varphi \\ d(\varphi u) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Para que a equação (3.2) seja satisfeita é preciso que φ e u sejam constantes ou então que $\eta = \lambda$ ($\lambda \rightarrow$ autovalor de \mathbf{A} e $(d\varphi, d(\varphi u)) \rightarrow$ autovetor de \mathbf{A}).

Os autovalores da matriz \mathbf{A} são dados, em ordem crescente, por:

$$\lambda_1 = u - \sqrt{p'} \quad \text{e} \quad \lambda_3 = u + \sqrt{p'} \quad (3.7)$$

onde não se empregou o índice 2 por conveniência, em função do problema que será abordado mais adiante, quando for levada em conta a transferência de massa.

Os autovetores são obtidos a partir das equações apresentadas a seguir:

$$\begin{aligned} -\lambda d\varphi + d(\varphi u) &= 0 \\ (p'-u^2)d\varphi + (2u-\lambda)d(\varphi u) &= 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Para cada autovalor, as equações (3.7) e (3.8) dão origem às seguintes relações, que são denominadas “Invariantes de Riemann”:

$$\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u = \text{constante} \rightarrow (\text{associado ao autovalor } \lambda_1 = u - \sqrt{p'}) \quad (3.9)$$

$$-\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u = \text{constante} \rightarrow (\text{associado ao autovalor } \lambda_3 = u + \sqrt{p'}) \quad (3.10)$$

Os Invariantes de Riemann podem ser expressos em função dos autovalores, na seguinte forma:

$$\left(\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'} \right) + \lambda_1 = \text{constante} \quad (\text{associado ao autovalor } \lambda_1)$$

$$-\left(\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'} \right) + \lambda_3 = \text{constante} \quad (\text{associado ao autovalor } \lambda_3)$$
(3.11)

Vamos nos limitar a situações em que a relação funcional entre a pressão e a variável φ satisfaça a seguinte relação: $2p' + \varphi p'' > 0$.

Uma vez que $\lambda = x/t$, dois estados (φ_L, u_L) e (φ_R, u_R) serão conectados por uma função contínua de x/t satisfazendo a equação (3.9) se, e somente se, φ diminuir a medida que η aumentar (tal conexão será chamada de 1-rarefação). Por outro lado, dois estados (φ_B, u_B) e (φ_R, u_R) serão conectados por uma função contínua de x/t satisfazendo a equação (3.10) se, e somente se, φ aumentar a medida que η aumenta (tal conexão será chamada de 3-rarefação).

Voltando agora ao problema mostrado na equação (3.3). Para conectar o estado (φ_L, u_L) ao estado (φ_R, u_R) vamos considerar um estado intermediário (φ_*, u_*) . Para que o estado constante (φ_L, u_L) seja conectado por meio de uma função contínua de x/t ao estado intermediário constante (φ_*, u_*) , é preciso que:

$$\int_a^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_L = \int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_L > \varphi_*, \quad 0 < a < 1$$
(3.12)

Por outro lado, para conectar o estado constante (φ_*, u_*) ao estado constante (φ_R, u_R) , por meio de uma função contínua de x/t , precisamos que:

$$-\int_a^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_R = -\int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_R > \varphi_*, \quad 0 < a < 1$$
(3.13)

Nesse caso, φ_* e u_* são obtidos a partir do seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} \int_a^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_L &= \int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_L > \varphi_*, \quad 0 < a < 1 \\ -\int_a^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_R &= -\int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_R > \varphi_*, \quad 0 < a < 1 \end{aligned} \quad (3.14)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} u_* &= \frac{u_L + u_R}{2} + \int_{\varphi_R}^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \\ \int_{\varphi_L}^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi &= \frac{1}{2} \left(u_L - u_R + \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right) \end{aligned} \quad (3.15)$$

desde que as desigualdades $\varphi_L > \varphi_*$ e $\varphi_R > \varphi_*$ sejam satisfeitas.

Para que haja a conexão através de funções contínuas e φ_* e u_* sejam obtidos da equação (3.15) é necessário que:

$$u_R - u_L \geq \left| \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right| \quad (3.16)$$

Uma vez que $2p' + \varphi p'' > 0$ vamos, por uma questão de conveniência, definir as funções (inversíveis) H e F como:

$$\begin{aligned} H &= \hat{H}(\varphi) = \int_a^{\varphi} \frac{\sqrt{\hat{p}'(\xi)}}{\xi} d\xi, \quad 0 < a < 1 \\ F &= \hat{F}(\varphi) = \int_a^{\varphi} \frac{\sqrt{\hat{p}'(\xi)}}{\xi} d\xi + \sqrt{\hat{p}'(\varphi)}, \quad 0 < a < 1 \end{aligned} \quad (3.17)$$

A desigualdade $2p' + \varphi p'' > 0$ assegura que:

$$F' = \frac{\sqrt{\hat{p}'(\varphi)}}{\varphi} + \frac{1}{2} \frac{\hat{p}''(\varphi)}{\sqrt{\hat{p}'(\varphi)}} > 0 \Rightarrow F = \hat{F}(\varphi) \text{ é inversível} \quad (3.18)$$

Dessa forma podemos definir a função $f \equiv F^{-1}$ de tal forma que:

$$\varphi = \hat{f}(\hat{F}(\varphi)) \quad (3.19)$$

Quando a desigualdade (3.16) for verificada teremos que:

$$\begin{aligned} \left(\int_a^\varphi \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'(\varphi)} \right) + \eta &= \left(\int_a^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'(\varphi_L)} \right) + \lambda_{1L} \\ - \left(\int_a^\varphi \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'(\varphi)} \right) + \eta &= - \left(\int_a^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'(\varphi_R)} \right) + \lambda_{3R} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Assim, para uma conexão contínua entre os estados L e $*$ teremos:

$$\hat{F}(\varphi) + \eta = \hat{F}(\varphi_L) + \lambda_{1L} \rightarrow \varphi = \hat{f}(\hat{F}(\varphi_L) + \lambda_{1L} - \eta) \quad (3.21)$$

E, para uma conexão contínua entre os estados $*$ e R , teremos

$$-\hat{F}(\varphi) + \eta = -\hat{F}(\varphi_R) + \lambda_{3R} \rightarrow \varphi = \hat{f}(\hat{F}(\varphi_R) - \lambda_{3R} + \eta) \quad (3.22)$$

Dessa forma, se houver solução clássica (contínua), ela será dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \hat{f}(\hat{F}(\varphi_L) + \lambda_{1L} - \eta), & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \varphi_*, & \lambda_{1*} \leq \eta \leq \lambda_{3*} \\ \hat{f}(\hat{F}(\varphi_R) - \lambda_{3R} + \eta), & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \varphi_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \quad (3.23)$$

Além disso, levando em conta os Invariantes de Riemann, teremos:

$$\int_a^{\varphi} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u = \int_a^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_L \quad \rightarrow \quad u = \hat{H}(\varphi_L) - \hat{H}(\varphi) + u_L \quad (3.24)$$

e

$$-\int_a^{\varphi} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u = -\int_a^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_R \quad \rightarrow \quad u = -\hat{H}(\varphi_R) + \hat{H}(\varphi) + u_R \quad (3.25)$$

ou seja,

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \hat{H}(\varphi_L) - \hat{H}(\varphi) + u_L, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ u_*, & \lambda_{1*} \leq \eta \leq \lambda_{3*} \\ -\hat{H}(\varphi_R) + \hat{H}(\varphi) + u_R, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ u_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \quad (3.26)$$

Nas equações (3.23)-(3.26), temos:

$$\begin{aligned} \lambda_{1L} &= u_L - \sqrt{p'(\varphi_L)}, & \lambda_{1*} &= u_* - \sqrt{p'(\varphi_*)}, \\ \lambda_{3*} &= u_* + \sqrt{p'(\varphi_*)}, & \lambda_{3R} &= u_R + \sqrt{p'(\varphi_R)} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Essa solução é chamada 1-rarefação/3-rarefação.

Nem sempre teremos uma condição inicial satisfazendo a equação (3.16). Assim sendo, é preciso aumentar o espaço das soluções admissíveis, possibilitando a existência de descontinuidades.

As soluções descontínuas são construídas conectando-se dois estados por uma descontinuidade. Elas devem satisfazer as condições de entropia (ver: Lax, 1971; Keyfitz e Kranzer, 1978; Smoller, 1983) e as condições de salto de Rankine-Hugoniot (ver: Lax, 1971; Keyfitz e Kranzer, 1978; Smoller, 1983). A fim de satisfazer as condições de entropia, dois estados são conectados por uma descontinuidade se, e

somente se, não puderem ser conectados por uma função contínua (ver Lax, 1971; Godlewskiand e Raviart, 1991; Toro, 1999; Smoller, 1983; Dafermos, 2010).

As condições de salto associadas ao problema (3.3) são dadas por:

$$\frac{[\varphi u]}{[\varphi]} = \frac{[\varphi u^2 + p]}{[\varphi u]} = s \quad (3.28)$$

onde $[\bullet]$ denota o “salto de \bullet ”.

Desta forma, dois estados conectados por uma descontinuidade devem satisfazer as relações:

$$\frac{\varphi_2 u_2 - \varphi_1 u_1}{\varphi_2 - \varphi_1} = \frac{\varphi_2 u_2^2 - \varphi_1 u_1^2 + p_2 - p_1}{\varphi_2 u_2 - \varphi_1 u_1} = s \quad (3.29)$$

Como aqui todas as descontinuidades satisfarão as condições de entropia (Lax, 1971; Keyfitz e Kranzer, 1978; Smoller, 1983), elas serão chamadas de choques. A velocidade do choque é denotada por s e a posição do choque é caracterizada por $x/t = s$. Conforme já explicado, para satisfazer as condições de entropia, dois estados serão conectados por um choque se, e somente se, não puderem ser conectados por uma função contínua – uma rarefação.

Com relação às incógnitas φ e u , o estado à esquerda (φ_L, u_L) será conectado ao estado intermediário (φ_*, u_*) , por meio de um choque se $\varphi_L < \varphi_*$. Esse choque é chamado de 1-choque. A relação funcional entre esses dois estados é dada por:

$$u_* - u_L = -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_L} - \frac{1}{\varphi_*}\right)(p_* - p_L)}, \quad \varphi_L < \varphi_* \quad (3.30)$$

sendo a velocidade deste 1-choque dada por:

$$s_1 = \frac{\varphi_* u_* - \varphi_L u_L}{\varphi_* - \varphi_L} \quad (3.31)$$

O mesmo protocolo pode ser usado para a conexão entre o estado (φ_*, u_*) e o estado (φ_R, u_R) por meio de um choque, chamado 3-choque. Se $\varphi_R < \varphi_*$, então os estados (φ_*, u_*) e (φ_R, u_R) são tais que:

$$u_* - u_R = \sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_*} - \frac{1}{\varphi_R}\right)(p_R - p_*)}, \quad \varphi_R < \varphi_* \quad (3.32)$$

sendo a velocidade de propagação do 3-choque dada por:

$$s_3 = \frac{\varphi_R u_R - \varphi_* u_*}{\varphi_R - \varphi_*} \quad (3.33)$$

Assim, as possíveis soluções, no sentido generalizado, para a equação (3.3) são dadas pela Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Possíveis Soluções

| | |
|-------------------------|---|
| 1-rarefação/3-rarefação | $\rightarrow \varphi_L > \varphi_* < \varphi_R$ e $u_L < u_* < u_R$ |
| 1-choque/3-choque | $\rightarrow \varphi_L < \varphi_* > \varphi_R$ e $u_L > u_* > u_R$ |
| 1-rarefação/3-choque | $\rightarrow \varphi_L > \varphi_* > \varphi_R$ e $u_L < u_* > u_R$ |
| 1-choque/3-rarefação | $\rightarrow \varphi_L < \varphi_* < \varphi_R$ e $u_L > u_* < u_R$ |

As condições para a ocorrência de cada uma das soluções dadas pela Tabela 3.1 são ilustradas na tabela 3.2.

Tabela 3.2: Condições para as Soluções Possíveis

| |
|--|
| $u_R - u_L \geq \left \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right \Leftrightarrow 1 - \text{Rarefação} / 3 - \text{Rarefação}$ |
| $u_R - u_L \leq -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_R} - \frac{1}{\varphi_L}\right)(p_L - p_R)} \Leftrightarrow 1 - \text{Choque} / 3 - \text{Choque}$ |
| $-\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_R} - \frac{1}{\varphi_L}\right)(p_L - p_R)} < u_R - u_L < \left \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right , \varphi_L > \varphi_R \Leftrightarrow 1 - \text{Rarefação} / 3 - \text{Choque}$ |
| $-\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_R} - \frac{1}{\varphi_L}\right)(p_L - p_R)} < u_R - u_L < \left \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right , \varphi_L < \varphi_R \Leftrightarrow 1 - \text{Choque} / 3 - \text{Rarefação}$ |

Neste ponto, é interessante notar que, quando o estado intermediário (φ_*, u_*) coincidir com o estado à esquerda (φ_L, u_L) , a solução será apenas 2-rarefação ou 2-choque. Se o estado intermediário (φ_*, u_*) coincidir com o estado à direita (φ_R, u_R) a solução será apenas 1-rarefação ou 1-choque.

A solução completa para 1-rarefação/3-rarefação já foi apresentada. No caso de 1-choque/3-choque a solução é dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ \varphi_*, & s_1 < \eta < s_3 \\ \varphi_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.34)$$

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ u_*, & s_1 < \eta < s_3 \\ u_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases}$$

onde φ_* e u_* são obtidos a partir do seguinte sistema de equações:

$$u_* - u_L = -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_L} - \frac{1}{\varphi_*}\right)(p_* - p_L)}, \quad \varphi_L < \varphi_*$$

$$u_* - u_R = \sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_*} - \frac{1}{\varphi_R}\right)(p_R - p_*)}, \quad \varphi_R < \varphi_*$$
(3.35)

No caso de 1-rarefação/3-choque, a solução é dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \hat{f}(\hat{F}(\varphi_L) + \lambda_{1L} - \eta), & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \varphi_*, & \lambda_{1*} \leq \eta < s_3 \\ \varphi_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.36)$$

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \hat{H}(\varphi_L) - \hat{H}(\varphi) + u_L, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ u_*, & \lambda_{1*} \leq \eta < s_3 \\ u_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases}$$

sendo φ_* e u_* obtidos a partir do sistema de equações a seguir:

$$u_* - u_L = \hat{H}(\varphi_L) - \hat{H}(\varphi_*), \quad \varphi_L > \varphi_*$$

$$u_* - u_R = \sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_*} - \frac{1}{\varphi_R}\right)}(p_R - p_*), \quad \varphi_R < \varphi_* \quad (3.37)$$

No caso de 1- choque /3- rarefação a solução é dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ \varphi_*, & s_1 < \eta \leq \lambda_{2*} \\ \hat{f}(\hat{F}(\varphi_R) - \lambda_{3R} + \eta), & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \varphi_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \quad (3.38)$$

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ u_*, & s_1 < \eta \leq \lambda_{2*} \\ -\hat{H}(\varphi_R) + \hat{H}(\varphi) + u_R, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ u_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases}$$

sendo φ_* e u_* obtidos a partir do sistema de equações a seguir:

$$u_* - u_L = -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_L} - \frac{1}{\varphi_*}\right)}(p_* - p_L), \quad \varphi_L < \varphi_* \quad (3.39)$$

$$u_* - u_R = -\hat{H}(\varphi_R) + \hat{H}(\varphi_*), \quad \varphi_R > \varphi_*$$

Nesta etapa serão incorporadas ao problema as equações de transporte de massa (por exemplo de poluentes – aqui limitados a 3 constituintes). O sistema de equações diferenciais parciais (que se mantém não linear e hiperbólico) agora consiste em $n_p + 2$ equações (neste trabalho vamos nos limitar a $n_p = 3$), dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0, \quad p = \hat{p}(\varphi) \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, n_p \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde a variável φ e as variáveis ω_i são sempre positivas. O problema (3.40) pode ser reescrito na seguinte forma (mais conveniente):

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi u \\ \omega_i \end{bmatrix} + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi u \\ \omega_i \end{bmatrix} = 0, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ p' - u^2 & 2u & 0 \\ -\omega_i u / \varphi & \omega_i / \varphi & u \end{bmatrix}, \quad i = 1, 2, \dots, n_p \quad (3.41)$$

Vamos considerar agora o novo problema de Cauchy:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0 \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$(\theta, u, \omega_i) = \begin{cases} (\theta_L, u_L, \omega_{iL}), & -\infty < x < 0, \quad t = 0 \\ (\theta_R, u_R, \omega_{iR}), & 0 < x < \infty, \quad t = 0 \end{cases}$$

$$i = 1, 2, \dots, n_p$$

O problema (3.42) é também um “Problema de Riemann” e sua solução (no sentido generalizado) depende somente da razão x/t . Em outras palavras, o sistema (3.40) pode ser representado como:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{d}{d\eta}(\varphi u) \frac{\partial \eta}{\partial x} &= 0 \\ \frac{d}{d\eta}(\varphi u) \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{d}{d\eta}(\varphi u^2 + p) \frac{\partial \eta}{\partial x} &= 0 \\ \frac{d\omega_i}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{d}{d\eta}(\omega_i u) \frac{\partial \eta}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde a variável de similaridade η já foi definida anteriormente.

Dessa forma, a equação (3.43) dá origem a:

$$\begin{bmatrix} -x/t & 1 & 0 \\ p' - u^2 & 2u - x/t & 0 \\ -u\omega_i/\varphi & \omega_i/\varphi & u - x/t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\varphi \\ d(\varphi u) \\ d\omega_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

Para que a equação (3.44) seja satisfeita é preciso que φ , u e ω_i sejam constantes ou então que $\eta = \lambda$ ($\lambda \rightarrow$ autovalor de \mathbf{A} e $(d\varphi, d(\varphi u), d\omega_i) \rightarrow$ autovetor de \mathbf{A}).

Os autovalores da nova matriz \mathbf{A} , em ordem crescente, são dados por:

$$\lambda_1 = u - \sqrt{p'}, \quad \lambda_2 = u \quad \text{e} \quad \lambda_3 = u + \sqrt{p'} \quad (3.45)$$

E os autovetores são obtidos a partir das equações a seguir:

$$\begin{aligned} -\lambda d\varphi + d(\varphi u) &= 0 \\ (p' - u^2) d\varphi + (2u - \lambda) d(\varphi u) &= 0 \\ -(u\omega_i/\varphi) d\varphi + (\omega_i/\varphi) d(\varphi u) + (u - \lambda) d\omega_i &= 0 \end{aligned} \quad (3.46)$$

Para cada autovalor, as equações (3.46) nos levam a:

$$\left. \begin{aligned} \int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u = \text{constante} \\ \frac{\omega_i}{\varphi} = \text{constante} \end{aligned} \right\} \text{(associado ao autovalor } \lambda_1 = u - \sqrt{p'}) \quad (3.47)$$

$$\left. \begin{aligned} u = \text{constante} \\ \varphi = \text{constante} \end{aligned} \right\} \text{(associado ao autovalor } \lambda_2 = u) \quad (3.48)$$

$$\left. \begin{aligned} -\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u = \text{constante} \\ \frac{\omega_i}{\varphi} = \text{constante} \end{aligned} \right\} \text{(associado ao autovalor } \lambda_3 = u + \sqrt{p'}) \quad (3.49)$$

ou, numa forma alternativa,

$$\begin{aligned} \left(\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'} \right) + \lambda_1 = \text{constante} \quad \text{(associado ao autovalor } \lambda_1) \\ \lambda_2 = \text{constante} \quad \text{(associado ao autovalor } \lambda_2) \\ -\left(\int \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + \sqrt{p'} \right) + \lambda_3 = \text{constante} \quad \text{(associado ao autovalor } \lambda_3) \end{aligned} \quad (3.50)$$

Voltando agora ao problema (3.42). Para conectar o estado $(\varphi_L, u_L, \omega_{iL})$ ao estado constante $(\varphi_*, u_*, \omega_{i*})$, com relações funcionais contínuas entre φ e x/t e entre u e x/t , é preciso que:

$$\int_a^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_L = \int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_L > \varphi_*, \quad 0 < a < 1 \quad (3.51)$$

Por outro lado, para conectar o estado constante $(\varphi_{**}, u_{**}, \omega_{i**})$ ao estado constante $(\varphi_R, u_R, \omega_{iR})$, com relações funcionais contínuas entre φ e x/t e entre u e x/t , é preciso que:

$$-\int_a^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_R = -\int_a^{\varphi_{**}} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_{**}, \quad \text{com } \varphi_R > \varphi_{**}, \quad 0 < a < 1 \quad (3.52)$$

Aqui é interessante chamar a atenção que, devido a (3.48), teremos sempre:

$$\varphi_{**} = \varphi_* \quad \text{e} \quad u_{**} = u_* \quad (3.53)$$

Nesse caso, φ_* e u_* são obtidos a partir do sistema de equações (já tratado):

$$\begin{aligned} \int_a^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_L &= \int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_L > \varphi_*, \quad 0 < a < 1 \\ -\int_a^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_R &= -\int_a^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi + u_*, \quad \text{com } \varphi_R > \varphi_*, \quad 0 < a < 1 \end{aligned} \quad (3.54)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} u_* &= \frac{u_L + u_R}{2} + \int_{\varphi_R}^{\varphi_L} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \\ \int_{\varphi_L}^{\varphi_*} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi &= \frac{1}{2} \left(u_L - u_R + \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right) \end{aligned} \quad (3.55)$$

desde que as desigualdades $\varphi_L > \varphi_*$ e $\varphi_R > \varphi_*$ sejam satisfeitas.

O comportamento das quantidades ω_i 's através de uma 1-rarefação é tal que:

$$\frac{\omega_i}{\varphi} = \text{constante} \quad \Rightarrow \quad \omega_i = \frac{\omega_{iL}}{\varphi_L} \varphi, \quad \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \quad (3.56)$$

O comportamento das quantidades ω_i 's através de uma 3-rarefação é tal que

$$\frac{\omega_i}{\varphi} = \text{constante} \Rightarrow \omega_i = \frac{\omega_{iR}}{\varphi_R} \varphi, \quad \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \quad (3.57)$$

Uma vez que for a das rarefações 1 e 2 a velocidade é uma constante, então $\lambda_2 = u = \text{constante}$. Dessa forma, não existirá uma 2-rarefação. Consequentemente, para uma solução do tipo 1-rarefação/2-choque/3-rarefação teremos:

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \frac{\omega_{iL}}{\varphi_L} \varphi, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \omega_{i*} = \frac{\omega_{iL}}{\varphi_L} \varphi_*, & \lambda_{1*} \leq \eta \leq u_* \\ \omega_{i**} = \frac{\omega_{iR}}{\varphi_R} \varphi_*, & u_* \leq \eta \leq \lambda_{3*} \\ \frac{\omega_{iR}}{\varphi_R} \varphi, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \omega_{iR}, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \quad (3.58)$$

Levando em conta as condições de salto de Rankine-Hugoniot (Lax, 1971; Keyfitz e Kranzer, 1978; Smoller, 1983):

$$\frac{[\varphi u]}{[\varphi]} = \frac{[\varphi u^2 + p]}{[\varphi u]} = \frac{[\omega_i u]}{[\omega_i]} = s$$

$$\omega_{iL} u_L - \omega_{i*} u_* = s_1 (\omega_{iL} - \omega_{i*}) \Rightarrow \omega_{i*} = \omega_{iL} \frac{(u_L - s_1)}{(u_* - s_1)} \quad (3.59)$$

$$\omega_{iR} u_R - \omega_{i**} u_* = s_3 (\omega_{iR} - \omega_{i**}) \Rightarrow \omega_{i**} = \omega_{iR} \frac{(u_R - s_3)}{(u_* - s_3)}$$

Assim, para uma solução do tipo 1-choque/2-choque/3-rarefação, temos:

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta < s_1 \\ \omega_{i*} = \omega_L \frac{(u_L - s_1)}{(u_* - s_1)}, & s_1 < \eta < u_* \\ \omega_{i**} = \frac{\omega_{iR} \varphi_*}{\theta_R}, & u_* < \eta \leq \lambda_{3*} \\ \frac{\omega_{iR}}{\varphi_R} \varphi, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \omega_{iR}, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \quad (3.60)$$

Para 1-rarefação/2-choque/3-choque, temos:

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \frac{\omega_{i*}}{\varphi_L} \varphi, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \omega_{i*} = \frac{\omega_{iL} \varphi_*}{\varphi_L}, & \lambda_{1*} \leq \eta < u_* \\ \omega_{i**} = \omega_{iR} \frac{(u_R - s_3)}{(u_* - s_3)}, & u_* < \eta < s_3 \\ \omega_{iR}, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.61)$$

Para 1-choque/2-choque/3-choque, temos:

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta < s_1 \\ \omega_{i*} = \omega_{iL} \frac{(u_L - s_1)}{(u_* - s_1)}, & s_1 < \eta < u_* \\ \omega_{i**} = \omega_{iR} \frac{(u_R - s_3)}{(u_* - s_3)}, & u_* < \eta < s_3 \\ \omega_{iR}, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.62)$$

3.1 UM EXEMPLO

Vamos considerar agora uma situação particular para a qual se consegue uma solução exata em forma fechada para o Problema de Riemann. Para tal, suponhamos que a pressão obedeça a seguinte relação constitutiva:

$$p = \hat{p}(\varphi) = \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3} \quad (3.63)$$

Neste caso ficamos com:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \theta \\ \varphi u \\ \omega_i \end{bmatrix} + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \theta \\ \varphi u \\ \omega_i \end{bmatrix} = 0, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ p' - u^2 & 2u & 0 \\ -\omega_i u / \varphi & \omega_i / \varphi & u \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

com $p' = \frac{\varphi^2}{(1-\varphi)^4}$, $i = 1, 2, \dots, n_p$

Levando em conta a variável de similaridade $\eta = x/t$, teremos:

$$\begin{bmatrix} -x/t & 1 & 0 \\ \frac{\varphi^2}{(1-\varphi)^4} - u^2 & 2u - x/t & 0 \\ -u\omega_i / \varphi & \omega_i / \varphi & u - x/t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\varphi \\ d(\varphi u) \\ d\omega_i \end{bmatrix} = 0 \quad (3.65)$$

Os autovalores da matriz \mathbf{A} são dados, então, por:

$$\lambda_1 = u - \frac{\varphi}{(1-\varphi)^2}, \quad \lambda_2 = u \quad \text{e} \quad \lambda_3 = u + \frac{\varphi}{(1-\varphi)^2} \quad (3.66)$$

Os Invariantes de Riemann serão:

$$\left. \begin{aligned} \int \frac{1}{(1-\varphi)^2} d\varphi + u = \text{constante} \\ \frac{\omega_i}{\varphi} = \text{constante} \end{aligned} \right\} (\text{associado a } \lambda_1) \quad (3.67)$$

$$\left. \begin{aligned} u = \text{constante} \\ \varphi = \text{constante} \end{aligned} \right\} (\text{associado a } \lambda_2) \quad (3.68)$$

$$\left. \begin{aligned} -\int \frac{1}{(1-\varphi)^2} d\varphi + u = \text{constante} \\ \frac{\omega_i}{\varphi} = \text{constante} \end{aligned} \right\} (\text{associado a } \lambda_3) \quad (3.69)$$

ou, numa forma alternativa,

$$\begin{aligned} \left(\int \frac{1}{(1-\varphi)^2} d\varphi + \frac{\varphi}{(1-\varphi)^2} \right) + \lambda_1 = \text{constante} \quad (\text{associado a } \lambda_1) \\ \lambda_2 = \text{constante} \quad (\text{associado a } \lambda_2) \\ -\left(\int \frac{1}{(1-\varphi)^2} d\varphi + \frac{\varphi}{(1-\varphi)^2} \right) + \lambda_3 = \text{constante} \quad (\text{associado a } \lambda_3) \end{aligned} \quad (3.70)$$

o que fornece:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(1-\varphi)^2} + \lambda_1 = \text{constante} \quad (\text{associado a } \lambda_1) \\ \lambda_2 = \text{constante} \quad (\text{associado a } \lambda_2) \\ -\frac{1}{(1-\varphi)^2} + \lambda_3 = \text{constante} \quad (\text{associado a } \lambda_3) \end{aligned} \quad (3.71)$$

A relação funcional entre a pressão e φ assegura que $2p' + \varphi p'' > 0$. Assim sendo, ao longo de uma 1-rarefação,

$$\varphi = 1 - \frac{1}{\sqrt{\text{constante} - \eta}} = 1 - \frac{1}{\sqrt{(1 - \varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta}} \quad (3.72)$$

e, ao longo de uma 3-rarefação,

$$\varphi = 1 - \sqrt{-\frac{1}{\text{constante} - \eta}} = 1 - \sqrt{\frac{1}{(1 - \varphi)^{-2} - \lambda_{3R} + \eta}} \quad (3.73)$$

Não existe 2-rarefação.

Desta forma, no caso de:

$$u_R - u_L \geq \left| \int_{\varphi_L}^{\varphi_R} \frac{\sqrt{p'}}{\varphi} d\varphi \right| \Leftrightarrow u_R - u_L \geq \left| \frac{1}{(1 - \varphi_R)^2} - \frac{1}{(1 - \varphi_L)^2} \right| \quad (3.74)$$

Teremos a solução dada por 1-rarefação/2-choque/3-rarefação:

$$\begin{aligned}
\varphi &= \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ 1 - \left\{ (1 - \varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta \right\}^{-1/2}, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \varphi_*, & \lambda_{1*} \leq \eta \leq \lambda_{3*} \\ 1 - \left\{ (1 - \varphi_R)^{-2} - \lambda_{3R} + \eta \right\}^{-1/2}, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \varphi_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \\
u &= \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ (1 - \varphi_L)^{-1} + u_L - \left\{ (1 - \varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta \right\}^{1/2}, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ u_*, & \lambda_{1*} \leq \eta \leq \lambda_{3*} \\ -(1 - \varphi_R)^{-1} + u_R + \left\{ (1 - \varphi_R)^{-2} - \lambda_{3R} + \eta \right\}^{1/2}, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ u_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \\
\omega_i &= \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \frac{\omega_{iL}}{\varphi_L} \left\{ 1 - \left\{ (1 - \varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta \right\}^{-1/2} \right\}, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \frac{\omega_{iL} \varphi_*}{\varphi_L}, & \lambda_{1*} \leq \eta \leq u_* \\ \frac{\omega_{iR} \varphi_*}{\varphi_R}, & u_* \leq \eta \leq \lambda_{3*} \\ \frac{\omega_{iR}}{\varphi_R} \left\{ 1 - \left\{ (1 - \varphi_R)^{-2} - \lambda_{3R} + \eta \right\}^{-1/2} \right\}, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \omega_{iR}, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases} \tag{3.75}
\end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned}
\varphi_* &= 1 - \frac{2}{\left(\frac{1}{1 - \varphi_L} + \frac{1}{1 - \varphi_R} + u_L - u_R \right)} \\
u_* &= \frac{u_L + u_R}{2} + \frac{1}{(1 - \varphi_L)^2} - \frac{1}{(1 - \varphi_R)^2}
\end{aligned} \tag{3.76}$$

e

$$\begin{aligned}
\lambda_{1L} &= u_L - \frac{\varphi_L}{(1 - \varphi_L)^2}, & \lambda_{1*} &= u_* - \frac{\varphi_*}{(1 - \varphi_*)^2}, \\
\lambda_{3*} &= u_* + \frac{\varphi_*}{(1 - \varphi_*)^2} \quad \text{e} \quad \lambda_{1R} &= u_R + \frac{\varphi_R}{(1 - \varphi_R)^2}
\end{aligned} \tag{3.77}$$

Quando:

$$u_R - u_L \leq -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_R} - \frac{1}{\varphi_L}\right)\left(\frac{\varphi_L^3}{3(1-\varphi_L)^3} - \frac{\varphi_R^3}{3(1-\varphi_R)^3}\right)} \quad (3.78)$$

a solução será 1-choque/2-choque/3-choque, dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ \varphi_*, & s_1 < \eta < s_3 \\ \varphi_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases}$$

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ u_*, & s_1 < \eta < s_3 \\ u_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases}$$

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta < s_1 \\ \omega_{i*} = \omega_{iL} \frac{(u_L - s_1)}{(u_* - s_1)}, & s_1 < \eta < u_* \\ \omega_{i**} = \omega_{iR} \frac{(u_R - s_3)}{(u_* - s_3)}, & u_* < \eta < s_3 \\ \omega_{iR}, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.79)$$

sendo os valores intermediários φ_* e u_* obtidos a partir do sistema de equações a seguir:

$$u_* - u_L = -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_L} - \frac{1}{\varphi_*}\right)\left(\frac{\varphi_*^3}{3(1-\varphi_*)^3} - \frac{\varphi_L^3}{3(1-\varphi_L)^3}\right)}, \quad \varphi_L < \varphi_*$$

$$u_* - u_R = \sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_*} - \frac{1}{\varphi_R}\right)\left(\frac{\varphi_R^3}{3(1-\varphi_R)^3} - \frac{\varphi_*^3}{3(1-\varphi_*)^3}\right)}, \quad \varphi_R < \varphi_* \quad (3.80)$$

E as velocidades dos choques são dadas por:

$$s_1 = \frac{\varphi_* u_* - \varphi_L u_L}{\varphi_* - \varphi_L}, \quad s_2 = u_* \quad \text{e} \quad s_3 = \frac{\varphi_R u_R - \varphi_* u_*}{\varphi_R - \varphi_*} \quad (3.81)$$

Quando:

$$-\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_R} - \frac{1}{\varphi_L}\right)\left(\frac{\varphi_L^3}{3(1-\varphi_L)^3} - \frac{\varphi_R^3}{3(1-\varphi_R)^3}\right)} < u_R - u_L < \left|\frac{1}{(1-\varphi_R)^2} - \frac{1}{(1-\varphi_L)^2}\right|, \varphi_L > \varphi_R \quad (3.82)$$

a solução será 1-rarefação/2-choque/3-choque, dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ 1 - \left\{ (1-\varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta \right\}^{-1/2}, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \varphi_*, & \lambda_{1*} \leq \eta < s_3 \\ \varphi_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases}$$

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ (1-\varphi_L)^{-1} + u_L - \left\{ (1-\varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta \right\}^{1/2}, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ u_*, & \lambda_{1*} \leq \eta < s_3 \\ u_R, & s_3 < \eta < \infty \end{cases}$$

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta \leq \lambda_{1L} \\ \frac{\omega_{iL}}{\varphi_L} \left\{ 1 - \left\{ (1-\varphi_L)^{-2} + \lambda_{1L} - \eta \right\}^{-1/2} \right\}, & \lambda_{1L} < \eta < \lambda_{1*} \\ \omega_{i*} = \frac{\omega_{iL} \varphi_*}{\varphi_L}, & \lambda_{1*} \leq \eta < u_* \\ \omega_{i**} = \omega_{iR} \frac{(u_R - s_3)}{(u_* - s_3)}, & u_* < \eta < s_3 \\ \omega_{iR}, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.83)$$

onde φ_* e u_* são obtidos do sistema de equações a seguir:

$$u_* - u_L = \frac{1}{1-\varphi_L} - \frac{1}{1-\varphi_*}, \quad \varphi_L > \varphi_*$$

$$u_* - u_R = \sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_*} - \frac{1}{\varphi_R}\right)\left(\frac{\varphi_R^3}{3(1-\varphi_R)^3} - \frac{\varphi_*^3}{3(1-\varphi_*)^3}\right)}, \quad \varphi_R < \varphi_* \quad (3.84)$$

Quando:

$$-\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_R} - \frac{1}{\varphi_L}\right)\left(\frac{\varphi_L^3}{3(1-\varphi_L)^3} - \frac{\varphi_R^3}{3(1-\varphi_R)^3}\right)} < u_R - u_L < \left|\frac{1}{(1-\varphi_R)^2} - \frac{1}{(1-\varphi_L)^2}\right|, \varphi_L < \varphi_R \quad (3.85)$$

a solução será 1-choque/2-choque/3-rarefação, dada por:

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ \varphi_*, & s_1 < \eta \leq \lambda_{2*} \\ 1 - \left\{ (1-\varphi_R)^{-2} - \lambda_{3R} + \eta \right\}^{-1/2}, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ \varphi_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases}$$

$$u = \begin{cases} u_L, & -\infty < \eta < s_1 \\ u_*, & s_1 < \eta \leq \lambda_{3*} \\ -(1-\varphi_R)^{-1} + u_R + \left\{ (1-\varphi_R)^{-2} - \lambda_{3R} + \eta \right\}^{1/2}, & \lambda_{3*} < \eta < \lambda_{3R} \\ u_R, & \lambda_{3R} \leq \eta < \infty \end{cases}$$

$$\omega_i = \begin{cases} \omega_{iL}, & -\infty < \eta < s_1 \\ \omega_* = \omega_{iL} \frac{(u_L - s_1)}{(u_* - s_1)}, & s_1 < \eta < u_* \\ \omega_{i**} = \omega_{iR} \frac{(u_R - s_3)}{(u_* - s_3)}, & u_* < \eta < s_3 \\ \omega_{iR}, & s_3 < \eta < \infty \end{cases} \quad (3.86)$$

onde φ_* e u_* são obtidos do sistema de equações a seguir:

$$u_* - u_L = -\sqrt{\left(\frac{1}{\varphi_L} - \frac{1}{\varphi_*}\right)\left(\frac{\varphi_*^3}{3(1-\varphi_*)^3} - \frac{\varphi_L^3}{3(1-\varphi_L)^3}\right)}, \quad \varphi_L < \varphi_* \quad (3.87)$$

$$u_* - u_R = -\frac{1}{1-\varphi_R} + \frac{1}{1-\varphi_*}, \quad \varphi_R > \varphi_*$$

As figuras a seguir mostram alguns resultados gráficos considerando 4 equações ($i = 2$).

A Figura 3.1 apresenta a evolução da solução do problema de Riemann considerando o intervalo espacial $-1 < x < 1$. Além da condição inicial, apresentada na primeira linha, dada por: $\varphi_L = 0.2$, $\varphi_R = 0.5$, $u_L = u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.5$, são apresentados 3 instantes de tempo diferentes. Neste caso, temos uma solução do tipo 1-choque/2-choque/3-rarefação.

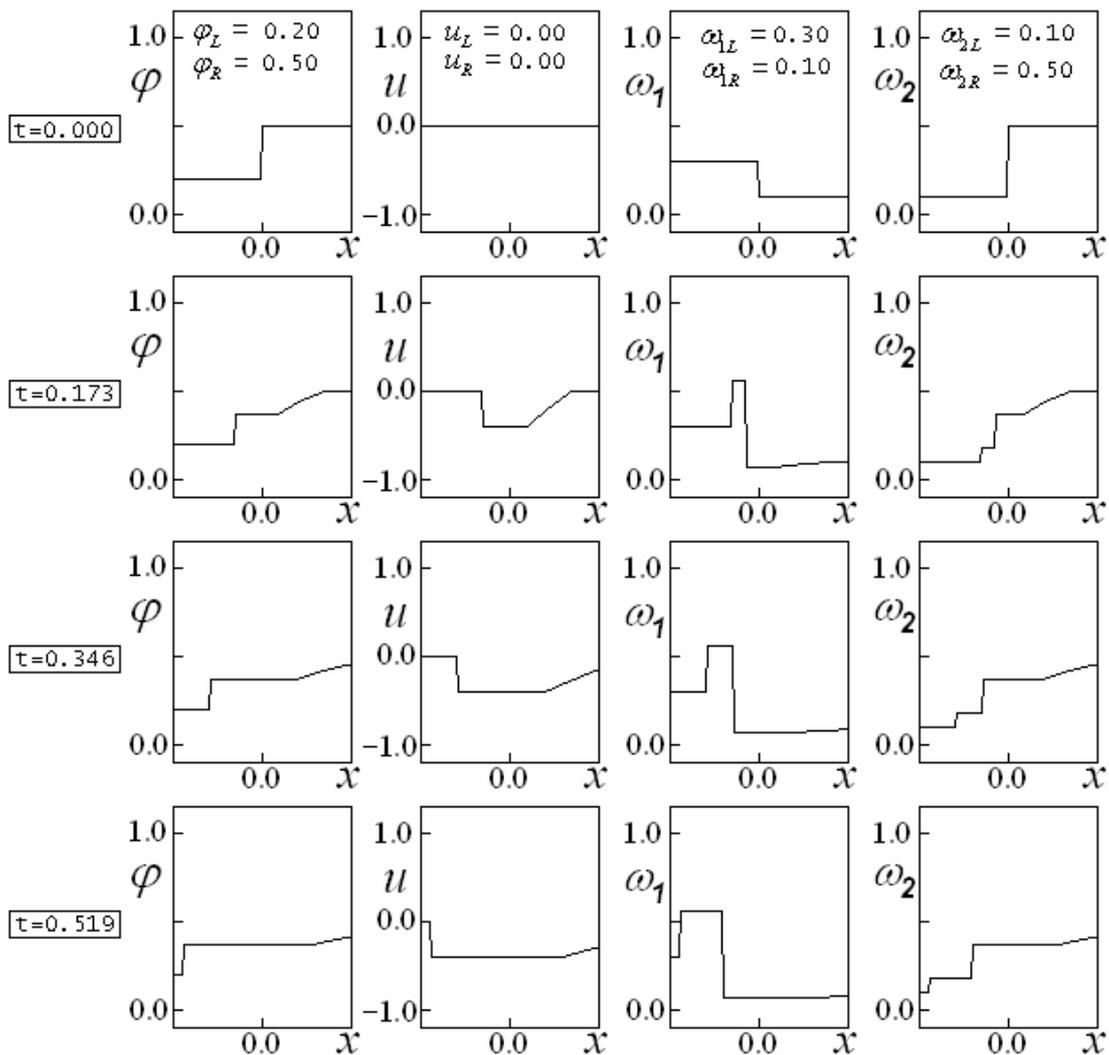


Figura 3.1 – Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-rarefação e condição inicial: $\varphi_L = 0.2$, $\varphi_R = 0.5$, $u_L = u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.5$. Pág 38

A Figura 3.2 apresenta a representação no plano $x-t$ da solução do problema de Riemann para uma condição inicial dada por: $\varphi_L = 0.2$, $\varphi_R = 0.5$, $u_L = u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.5$. Neste caso temos uma solução é do tipo: 1-choque/2-choque/3-rarefação, sendo: $s_1 = -0.84998$, $s_2 = -0.39773$, $\lambda_{3S} = 0.56726$ e $\lambda_{3R} = 2.00000$.

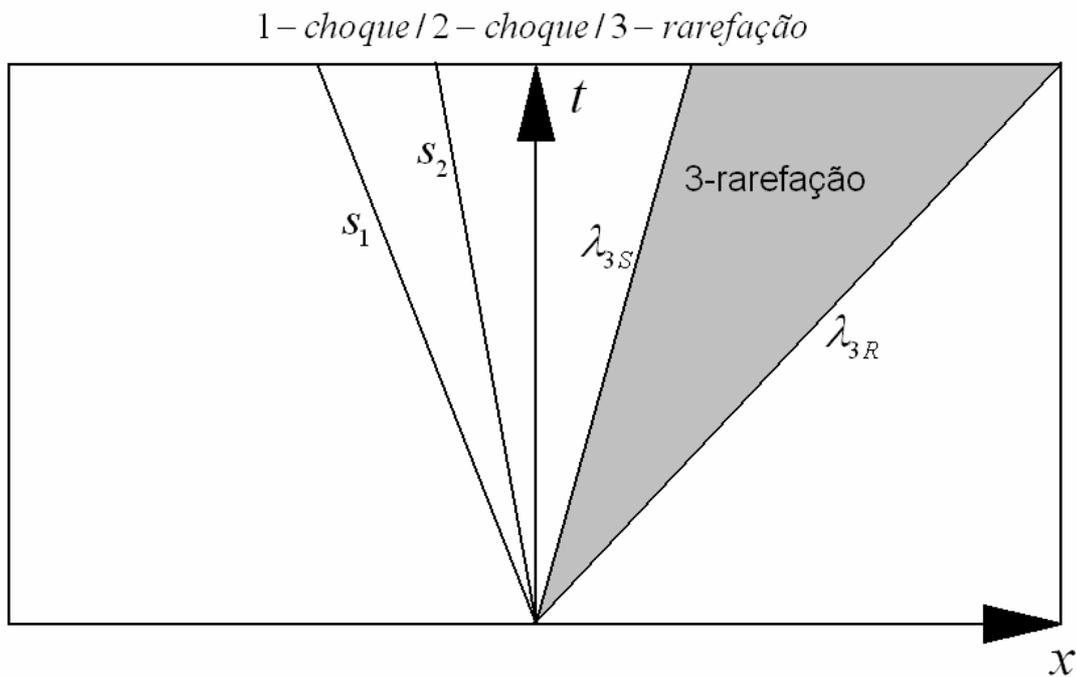


Figura 3.2 – Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-rarefação e condição inicial $\varphi_L = 0.2$, $\varphi_R = 0.5$, $u_L = u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.5$.

A Figura 3.3 apresenta a evolução da solução do problema de Riemann considerando o intervalo espacial $-1 < x < 1$. Além da condição inicial, apresentada na primeira linha, dada por: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.1$, $u_L = 0.1$, $u_R = 0.0$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$, são apresentados 3 instantes de tempo diferentes. Neste caso, temos uma solução do tipo 1-rarefação/2-choque/3-choque.

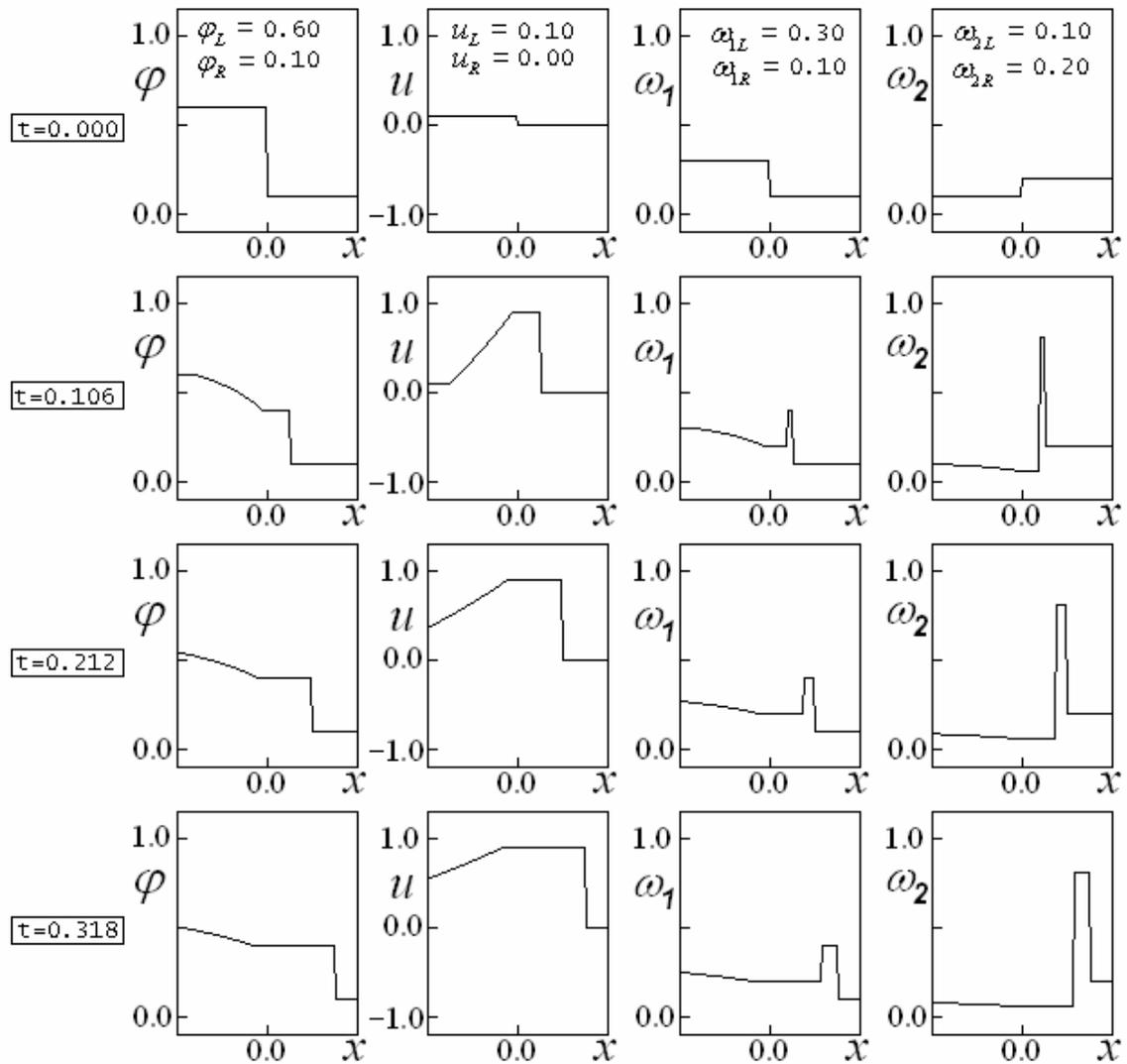


Figura 3.3 – Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-choque e condição inicial: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.1$, $u_L = 0.1$, $u_R = 0.0$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_R = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$.

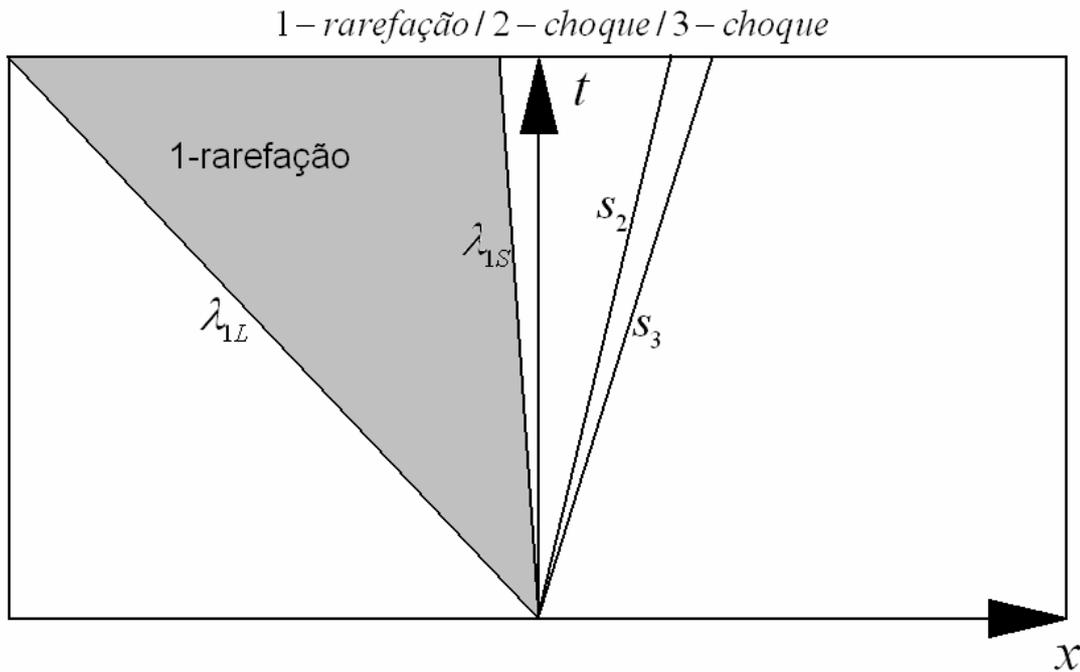


Figura 3.4 – Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-choque e condição inicial $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.1$, $u_L = 0.1$, $u_R = 0.0$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_R = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$.

A Figura 3.4 apresenta a representação no plano $x-t$ da solução do problema de Riemann para uma condição inicial dada por: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.1$, $u_L = 0.1$, $u_R = 0.0$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_R = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. Neste caso temos uma solução é do tipo: 1-rarefação/2-choque/3-choque, sendo: $\lambda_{1L} = -3.6500$, $\lambda_{1S} = -0.25893$, $s_2 = 0.90916$ e $s_3 = 1.20379$.

A Figura 3.5 apresenta a evolução da solução do problema de Riemann considerando o intervalo espacial $-1 < x < 1$. Além da condição inicial, apresentada na primeira linha, dada por: $\varphi_L = 0.3$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.2$, $u_R = -0.2$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_R = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$, são apresentados 3 instantes de tempo diferentes. Neste caso, temos uma solução do tipo 1-choque/2-choque/3-choque.

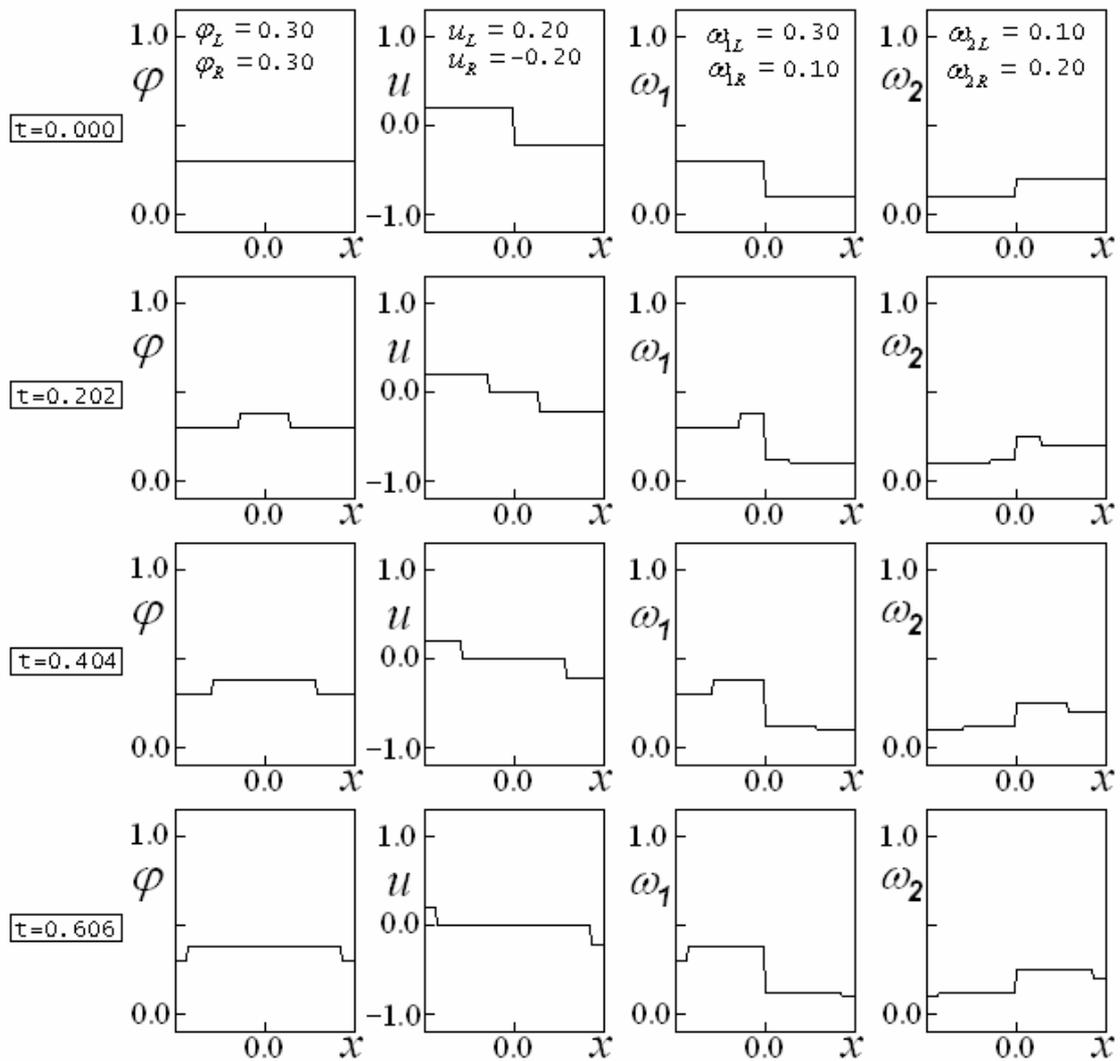


Figura 3.5 – Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-choque e condição inicial: $\varphi_L = 0.3$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.2$, $u_R = -0.2$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$.

A Figura 3.6 apresenta a representação no plano $x-t$ da solução do problema de Riemann para uma condição inicial dada por: $\varphi_L = 0.3$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.2$, $u_R = -0.2$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. Neste caso temos uma solução é do tipo: 1-choque/2-choque/3-choque.

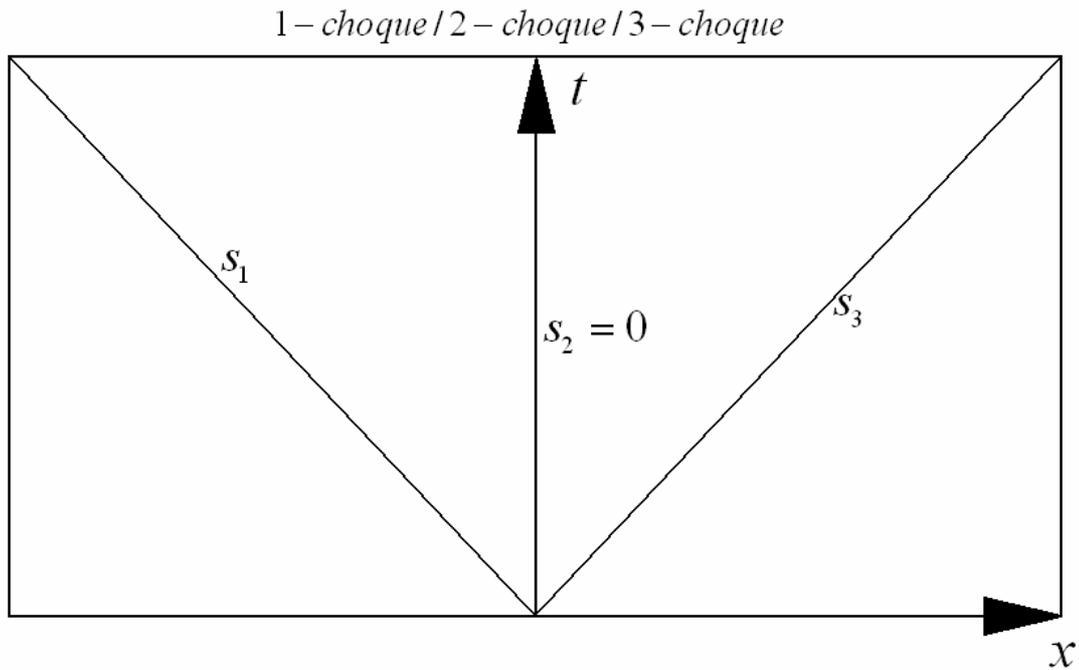


Figura 3.6 – Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-choque/2-choque/3-choque e condição inicial $\varphi_L = 0.3$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.2$, $u_R = -0.2$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$.

A Figura 3.7 apresenta a evolução da solução do problema de Riemann considerando o intervalo espacial $-1 < x < 1$. Além da condição inicial, apresentada na primeira linha, são apresentados 3 instantes de tempo diferentes, além da condição inicial, apresentada na primeira linha; que é dada por: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.6$, $u_L = -1.0$, $u_R = 0.5$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. Neste caso temos uma solução do tipo 1-rarefação/2-choque/3-rarefação.

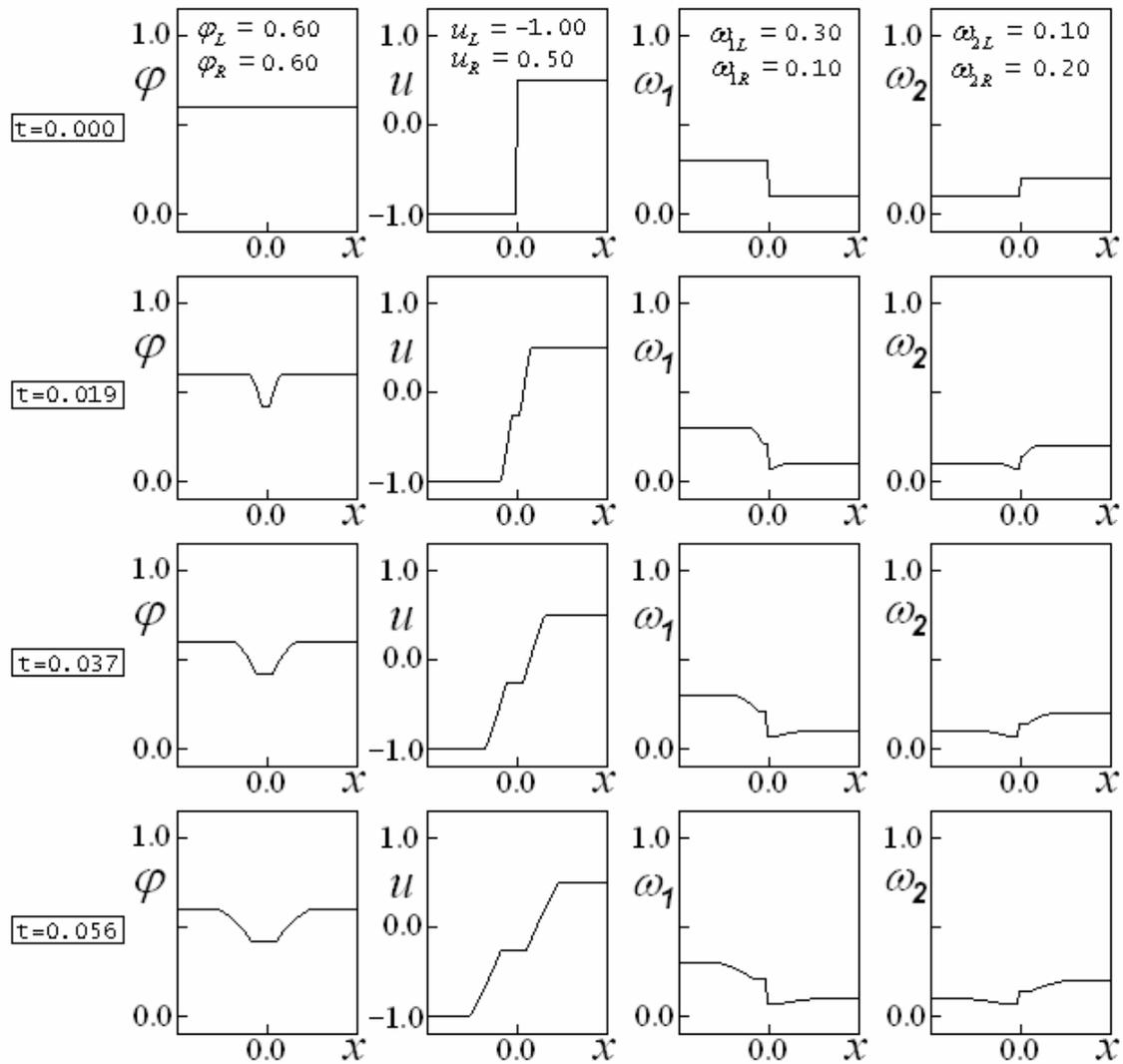


Figura 3.7 – Evolução da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-rarefação e condição inicial: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.6$, $u_L = -1.0$, $u_R = 0.5$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$.

A Figura 3.8 apresenta a representação no plano $x-t$ da solução do problema de Riemann para uma condição inicial dada por: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.6$, $u_L = -1.0$, $u_R = 0.5$, $\omega_{1L} = 0.3$, $\omega_{1R} = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$. Neste caso temos uma solução é do tipo: 1-rarefação/2-choque/3-rarefação.

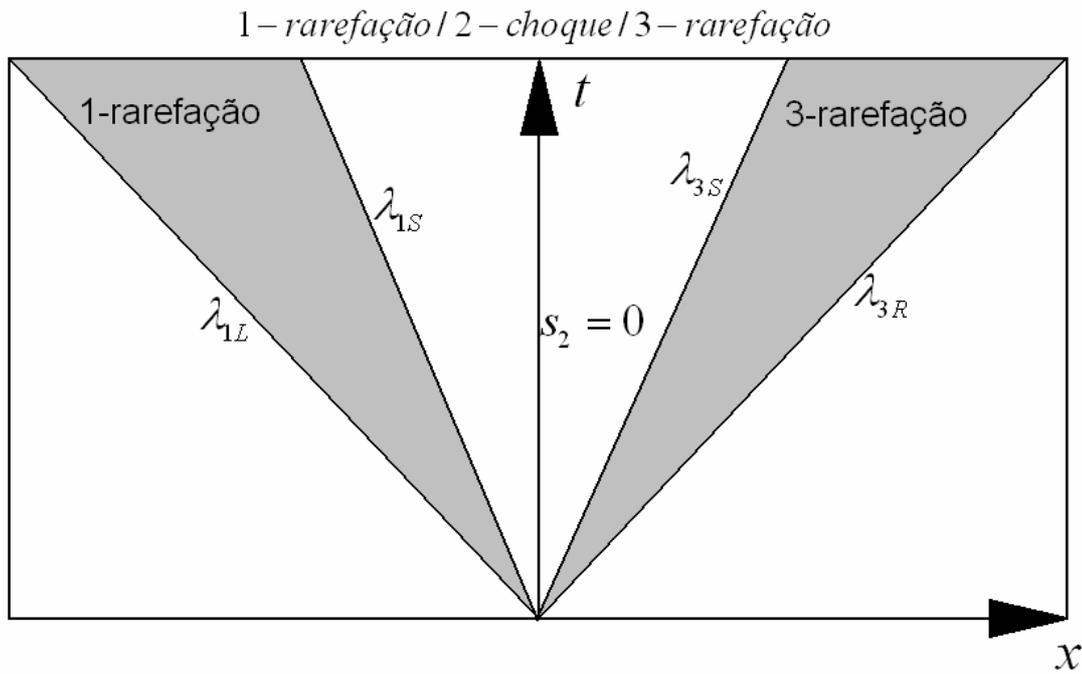


Figura 3.8 – Representação no plano $x-t$ da Solução do Problema de Riemann com solução 1-rarefação/2-choque/3-rarefação e condição inicial: $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.6$, $u_L = -1.0$, $u_R = 0.5$, $\omega_L = 0.3$, $\omega_R = 0.1$, $\omega_{2L} = 0.1$ e $\omega_{2R} = 0.2$.

4. O ESQUEMA DE GLIMM

O método de Glimm (Glimm, 1965; Chorin, 1976) avança no tempo de um dado instante de tempo para o instante subsequente, usando a solução do problema de Riemann associado para cada dois passos de tempo consecutivos. O esquema semi-analítico de Glimm, aplicado a problemas de valor inicial, marcha no tempo empregando a solução de um número previamente definido de problemas de Riemann associados. Neste sentido, a solução de sistemas unidimensionais não lineares hiperbólicos de valor inicial marcha no tempo empregando a solução dos problemas de Riemann associados. O primeiro passo é aproximar a condição inicial arbitrária (uma função da posição) usando funções constantes por partes. O passo seguinte é resolver um problema de Riemann que use como condição inicial uma função degrau para cada dois passos consecutivos. A unicidade da solução é garantida satisfazendo a condição de Courant-Friedrichs-Lewy, que também assegura que não haja interação entre choques de problemas de Riemann adjacentes.

O esquema de Glimm consiste num procedimento numérico que se destina a simular, neste trabalho, o seguinte problema hiperbólico não linear:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0, \quad p = \hat{p}(\varphi) \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, n_p \end{aligned} \tag{4.1}$$

sujeito a uma condição inicial qualquer.

O esquema de Glimm é baseado na resolução do Problema de Riemann e consiste numa aproximação da condição inicial a partir de uma escolha aleatória. Mais especificamente, consideremos uma dada condição inicial (para qualquer uma das funções envolvidas no problema (4.1)) como a ilustrada na Figura 4.1.

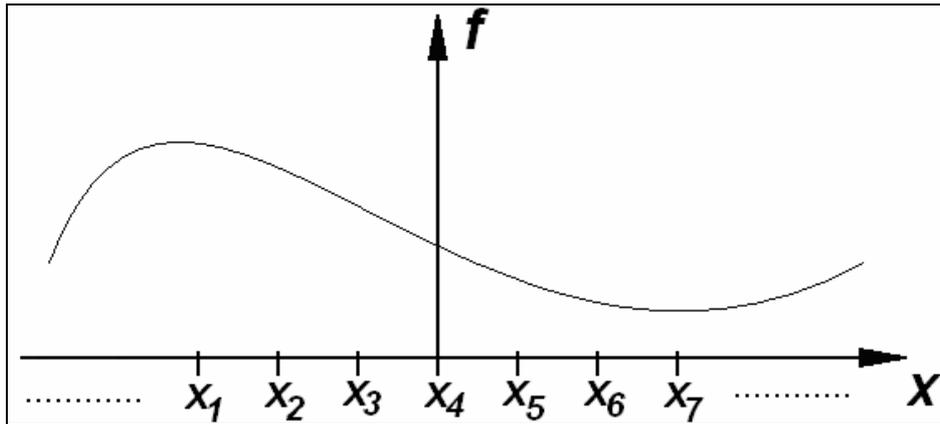


Figura 4.1 – Condição inicial qualquer.

Esta função seria aproximada por uma condição inicial mostrada na Figura 4.2:

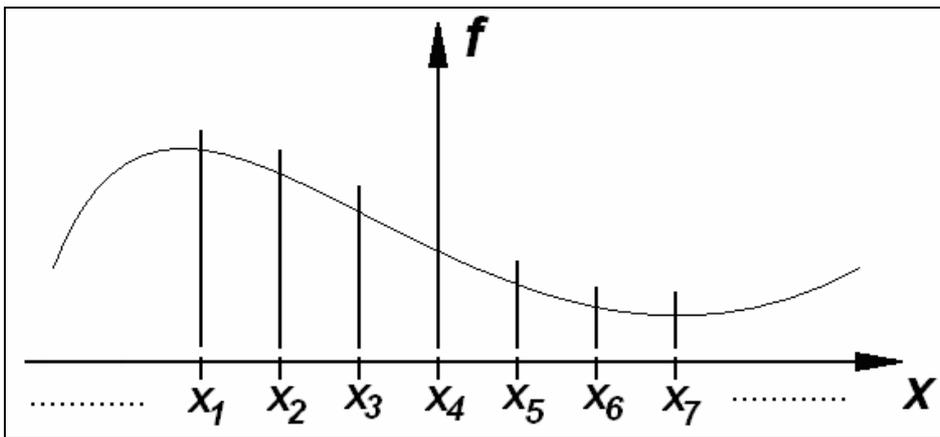


Figura 4.2 – Condição inicial com uma discretização.

onde os pontos seriam aleatoriamente escolhidos da seguinte forma:

$$f(x) \approx f(x_k + \theta \Delta x) = \text{constante, para } x_k < x < x_k + \Delta x = x_{k+1}, \quad \Delta x = x_{k+1} - x_k \quad (4.2)$$

com θ sendo um número aleatório entre 0 e 1. Esta função seria aproximada, por exemplo, pela escolha aleatória mostrada na Figura 4.3.

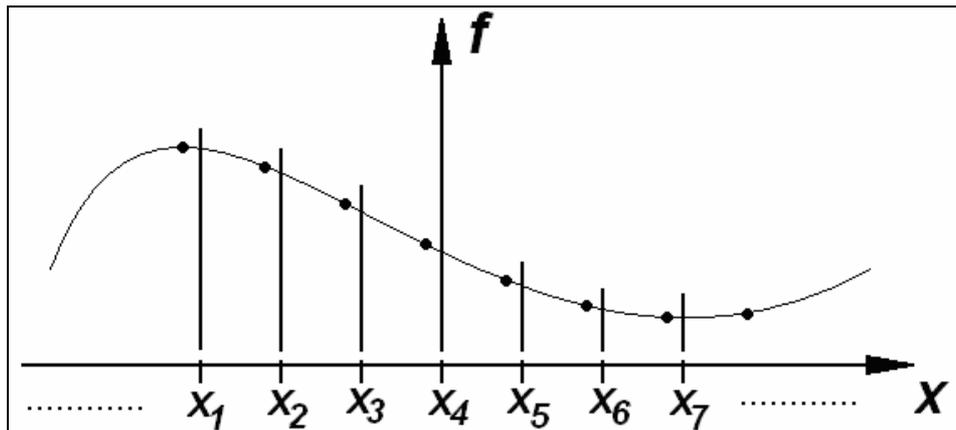


Figura 4.3 – Escolha aleatória.

A partir da escolha aleatória mostrada na Figura 4.3 é construída uma função degrau, que vai permitir a implementação do problema de Riemann. A aproximação por degraus é apresentada na Figura 4.4.

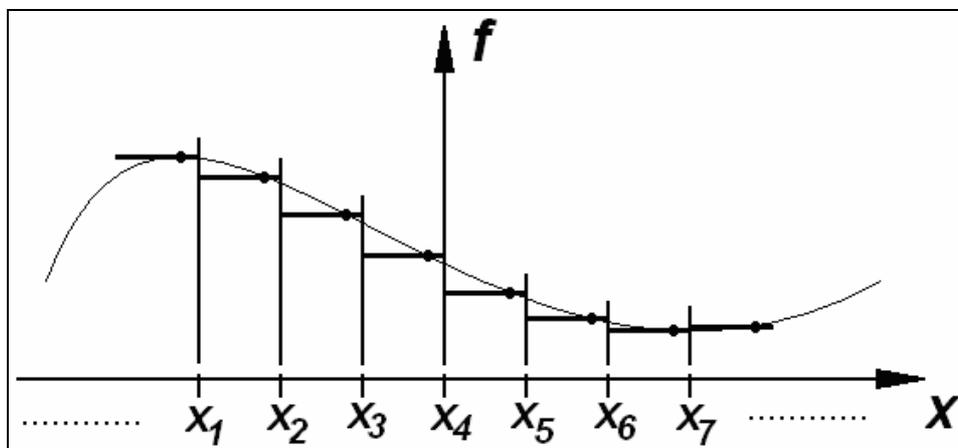


Figura 4.4 – A aproximação por degraus.

Para cada 2 degraus consecutivos podemos construir um Problema de Riemann, cuja solução já é conhecida, centrado em cada um dos x_k 's.

Considerando que serão utilizados K degraus com a mesma largura, o k -ésimo Problema de Riemann, o qual fornecerá a aproximação para o instante t_n será dado por

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0, \quad p = \hat{p}(\varphi) \\
\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, n_p
\end{aligned} \tag{4.3}$$

$$(\varphi, u, \omega_i) = \begin{cases} (\varphi, u, \omega_i)|_{k-1}, & -\infty < x - x_k < 0, \quad t - t_n = 0 \\ (\varphi, u, \omega_i)|_k, & 0 < x - x_k < \infty, \quad t - t_n = 0 \end{cases}$$

onde o estado $(\varphi, u, \omega_i)|_k$ corresponde ao degrau à direita do ponto x_k .

Aqui a solução (no sentido generalizado) dependerá apenas da razão $(x - x_k)/(t - t_n)$.

Após obtida a aproximação no instante t_{n+1} , uma nova escolha aleatória deve ser realizada, gerando um novo conjunto de degraus. O instante t_{n+1} deve ser pequeno o suficiente para evitar a interação entre 2 Problemas de Riemann adjacentes. A condição de Courant-Friedrichs-Lewy impede essa interação. Tal condição é dada por:

$$t_{n+1} < \frac{\Delta x}{2|\lambda|_{MAX}} + t_n \tag{4.4}$$

onde $|\lambda|_{MAX}$ é a maior velocidade de propagação (em módulo), levando em conta todos os Problemas de Riemann considerados.

Enquanto uma informação (referente a um Problema de Riemann) não chega até o Problema de Riemann adjacente, tudo se passa como se o domínio fosse infinito...

Uma vez obtida a aproximação no instante t_{n+1} , outra escolha aleatória é realizada e procede-se ao avanço para o instante de tempo t_{n+2} . Todo o protocolo é repetido.

É interessante observar que se $\theta < 0.5$ o ponto escolhido estará associado ao Problema de Riemann (centrado em x_k) à esquerda. Se $\theta > 0.5$ o ponto escolhido estará associado ao Problema de Riemann (centrado em x_{k+1}) à direita.

Vamos ilustrar o procedimento considerando o caso fictício sugerido a seguir, para o qual é conhecida a aproximação por degraus no instante t_{20} . Vamos considerar apenas os pontos x_4 , x_5 e x_6 , conforme sugerido na Figura 4.5.

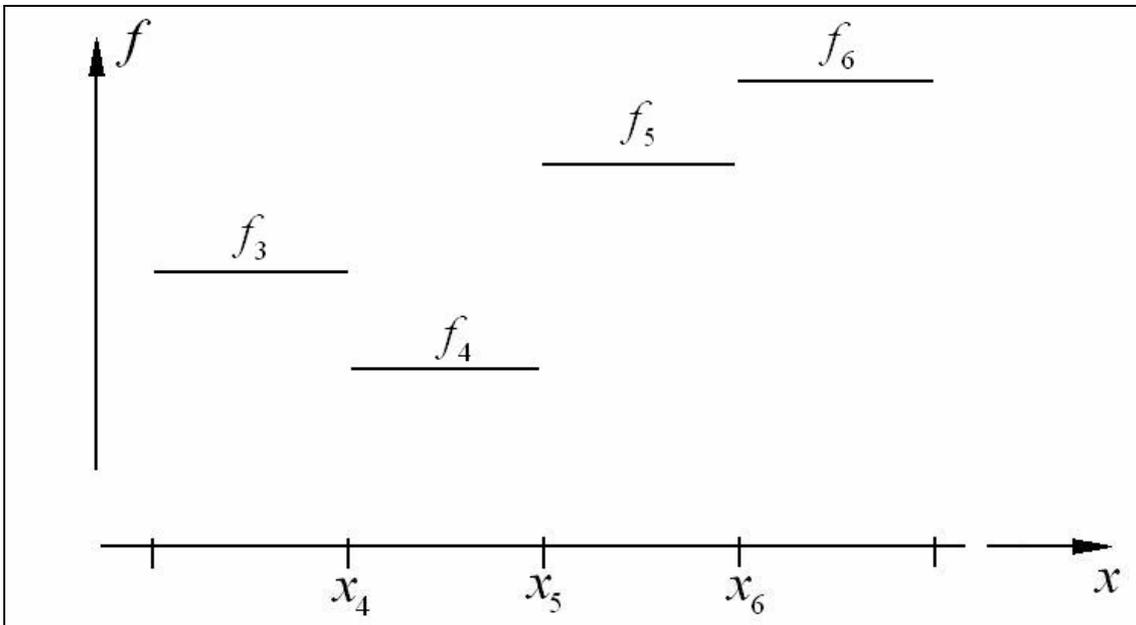


Figura 4.5 – Ilustração do Esquema de Glimm.

O “quarto” Problema de Riemann tem como condição inicial (que corresponderia ao instante t_{20}) o seguinte:

$$f_{20,4}(x, t_{20}) = \begin{cases} f_3 = \text{constante}, & x < x_4 \\ f_4 = \text{constante}, & x > x_4 \end{cases} \quad (4.5)$$

Vamos denotar por $f_{20,4}(x, t)$ a solução obtida para o Problema de Riemann obtida e considerando o domínio (satisfazendo à condição CFL) $t_{20} < t < t_{21}$ e $x_4 - \Delta x/2 < x < x_4 + \Delta x/2$

O “quinto” Problema de Riemann tem como condição inicial (que corresponderia ao instante t_{20}) o seguinte:

$$f_{20,5}(x, t_{20}) = \begin{cases} f_4 = \text{constante}, & x < x_5 \\ f_5 = \text{constante}, & x > x_5 \end{cases} \quad (4.6)$$

Vamos denotar por $f_{20,5}(x, t)$ a solução obtida para o Problema de Riemann obtida e considerando o domínio (satisfazendo à condição CFL) $t_{20} < t < t_{21}$ e $x_5 - \Delta x/2 < x < x_5 + \Delta x/2$

O “sexto” Problema de Riemann tem como condição inicial (que corresponderia ao instante t_{20}) o seguinte:

$$f_{20,6}(x, t_{20}) = \begin{cases} f_5 = \text{constante}, & x < x_6 \\ f_6 = \text{constante}, & x > x_6 \end{cases} \quad (4.7)$$

Vamos denotar por $f_{20,6}(x, t)$ a solução obtida para o Problema de Riemann obtida e considerando o domínio (satisfazendo à condição CFL) $t_{20} < t < t_{21}$ e $x_6 - \Delta x/2 < x < x_6 + \Delta x/2$

Consideremos inicialmente uma escolha aleatória que tenha gerado um número θ entre 0 e 0.5. Neste caso os novos valores dos degraus seriam:

$$\begin{aligned} f_4 &= f_{20,5}(x_5 + \theta\Delta x, t_{21}) \\ f_5 &= f_{20,6}(x_6 + \theta\Delta x, t_{21}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Se o número aleatório fosse maior que 0.5 e menor que 1 os novos valores dos degraus seriam:

$$\begin{aligned} f_5 &= f_{20,5}(x_5 + \theta\Delta x, t_{21}) \\ f_6 &= f_{20,6}(x_6 + \theta\Delta x, t_{21}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

e assim por diante.

Teremos, então, a nova “condição inicial”, correspondente ao instante de tempo t_{21} .

Essa ideia é generalizada para todas as funções incógnitas envolvidas, ou seja, para φ , u e para os ω_i .

A Figura 4.6 apresenta uma aproximação obtida com o esquema de Glimm para o problema definido na equação (4.10).

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0, \quad p = \hat{p}(\varphi) = \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3} \\
 \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= 0, \quad i = 1, 2, 3 \\
 \\
 \varphi &= 0.1 + 0.8x^2 \quad -1 < x < 1, \quad t = 0 \\
 u &= 0.0 \quad -1 < x < 1, \quad t = 0 \\
 \omega_1 &= \begin{cases} 0.15 & -1 < x < 0, \quad t = 0 \\ 0.08 & 0 < x < 1, \quad t = 0 \end{cases} \\
 \omega_2 &= 0.1 \quad -1 < x < 1, \quad t = 0 \\
 \omega_3 &= \begin{cases} 0.10 & -1 < x < 0, \quad t = 0 \\ 0.15 & 0 < x < 1, \quad t = 0 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

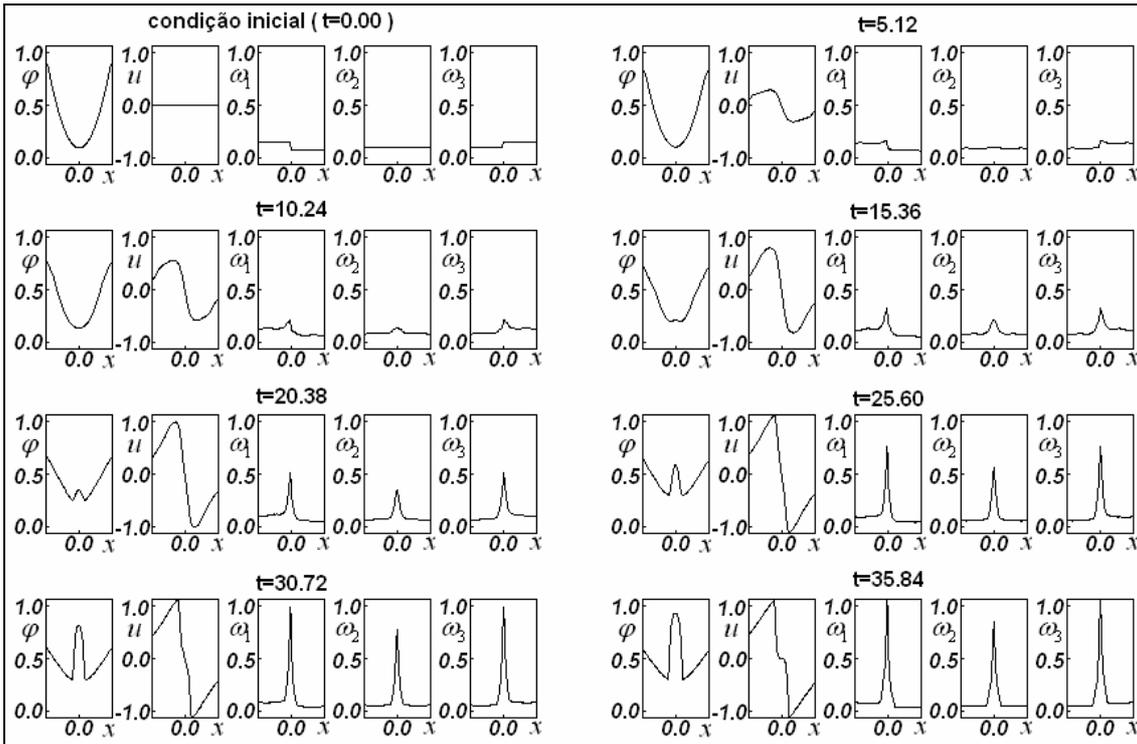


Figura 4.6 – Resultados obtidos para o problema (4.10) a partir do esquema de Glimm.

A Figura 4.7 apresenta os resultados obtidos para o problema (4.11), que difere do problema (4.10) apenas na condição inicial.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) = 0, \quad p = \hat{p}(\varphi) = \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3}$$

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

$$\varphi = \begin{cases} 0.5 & -1 < x < 0, \quad t = 0 \\ 0.1 & 0 < x < 1, \quad t = 0 \end{cases}$$

$$u = 0.0 \quad -1 < x < 1, \quad t = 0$$

$$\omega_1 = \begin{cases} 0.15 & -1 < x < -0.5, \quad t = 0 \\ 0.4 & -0.5 < x < 0, \quad t = 0 \\ 0.08 & 0 < x < 1, \quad t = 0 \end{cases}$$

$$\omega_2 = 0.1 \quad -1 < x < 1, \quad t = 0$$

$$\omega_3 = \begin{cases} 0.10 & -1 < x < 0, \quad t = 0 \\ 0.15 & 0 < x < 1, \quad t = 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

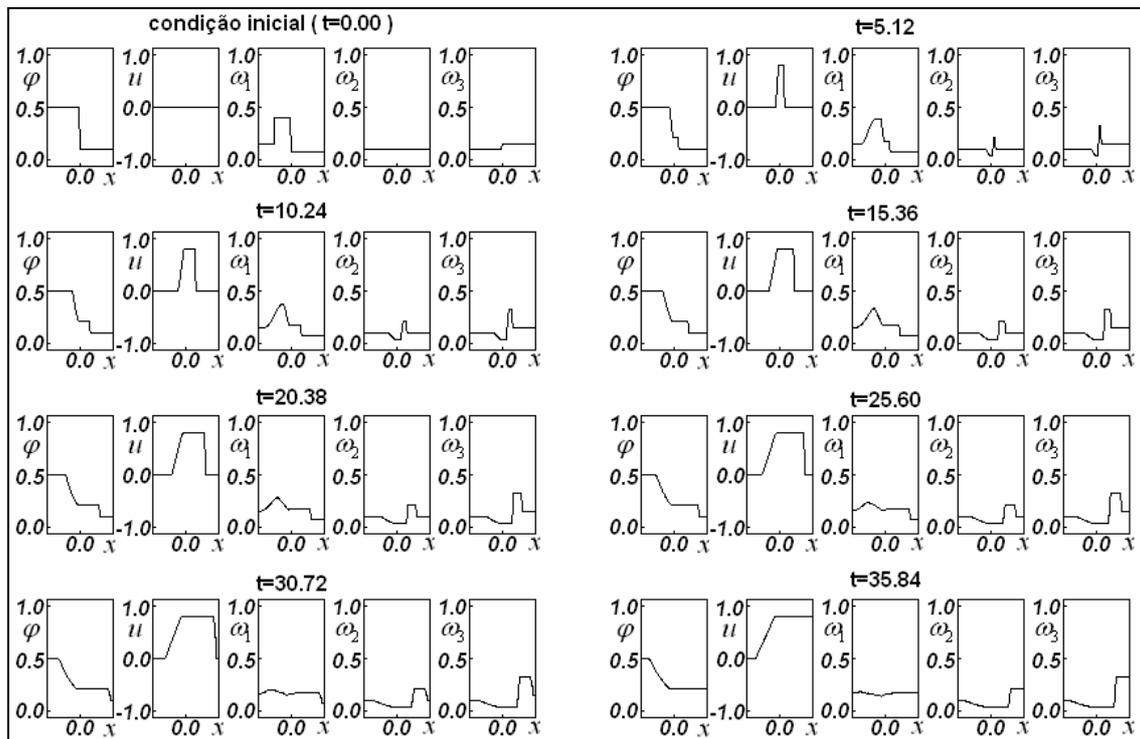


Figura 4.7 – Resultados obtidos com o problema (4.11), a partir do esquema de Glimm. O problema (4.11) é análogo ao problema (4.10), diferindo apenas na condição inicial.

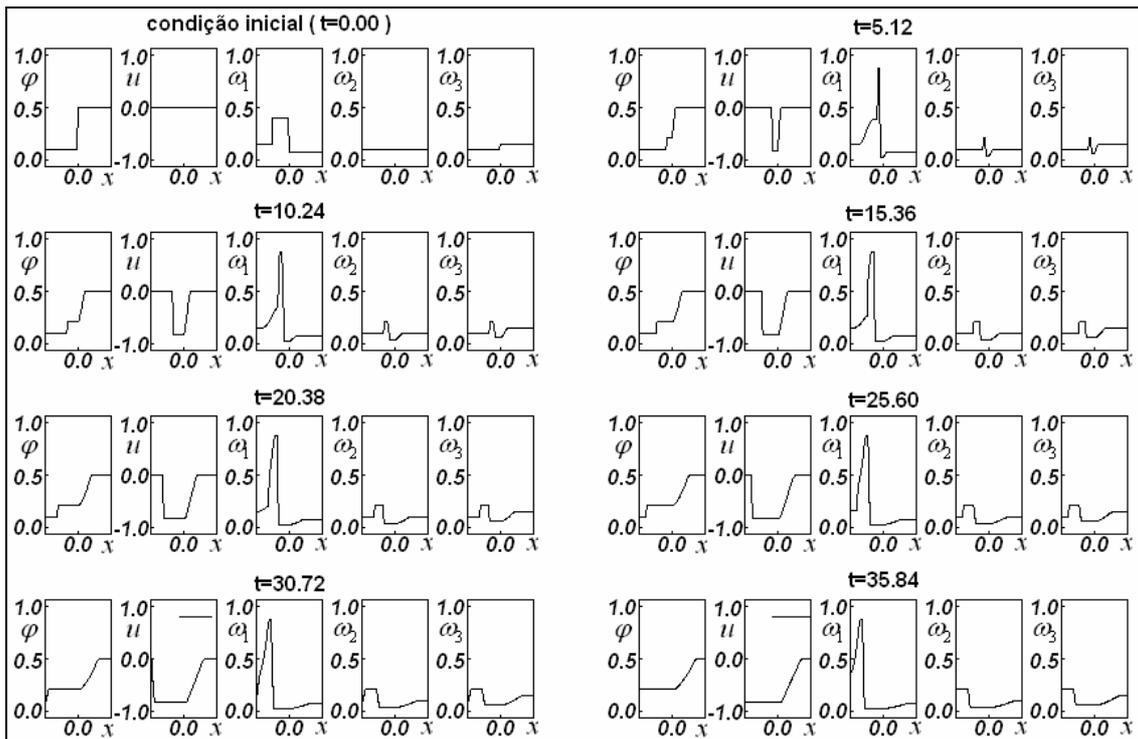


Figura 4.8 – Resultados obtidos com o problema (4.11), a partir do esquema de Glimm, alterando apenas a condição inicial referente a φ . Aqui, no instante inicial, $\varphi = 0.5$ para $0 < x < 1$ e $\varphi = 0.1$ para $-1 < x < 0$. O problema (4.11) é análogo ao problema (4.10), diferindo apenas na condição inicial.

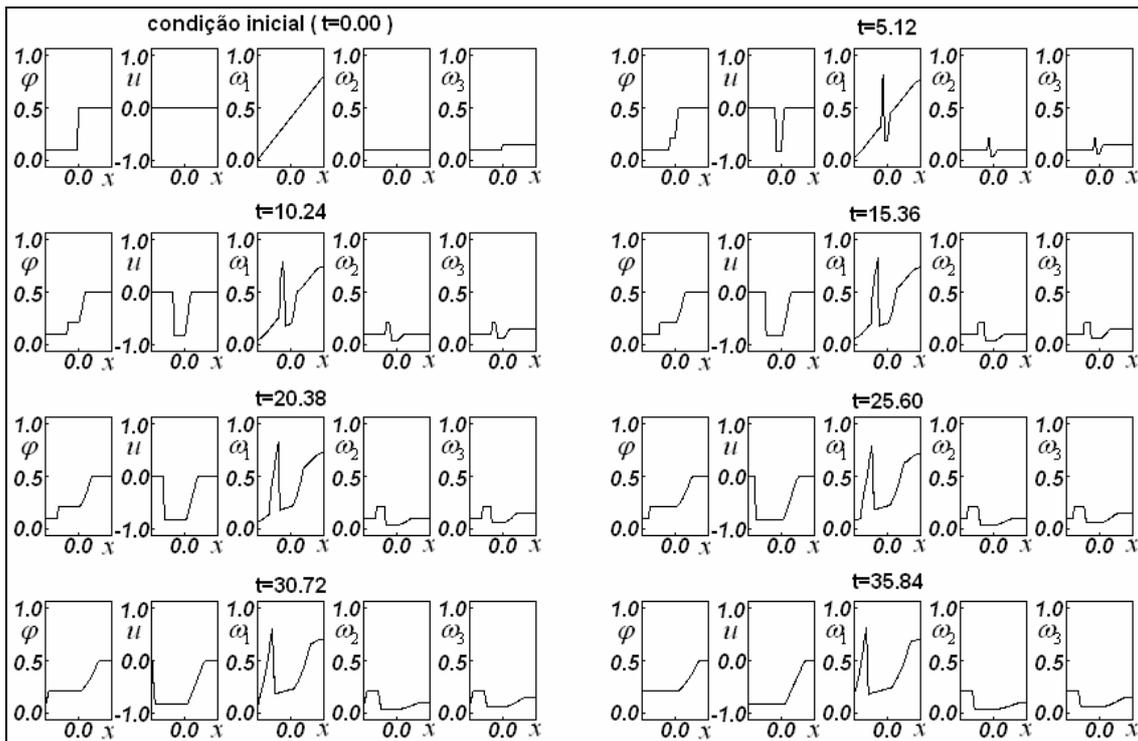


Figura 4.9 – Resultados obtidos com o problema (4.11), alterando a condição inicial para φ e ω . Aqui, no instante inicial, $\varphi=0.5$ para $0 < x < 1$ e $\varphi=0.1$ para $-1 < x < 0$. A condição inicial para ω_1 é uma reta com valores entre 0.0 e 0.8.

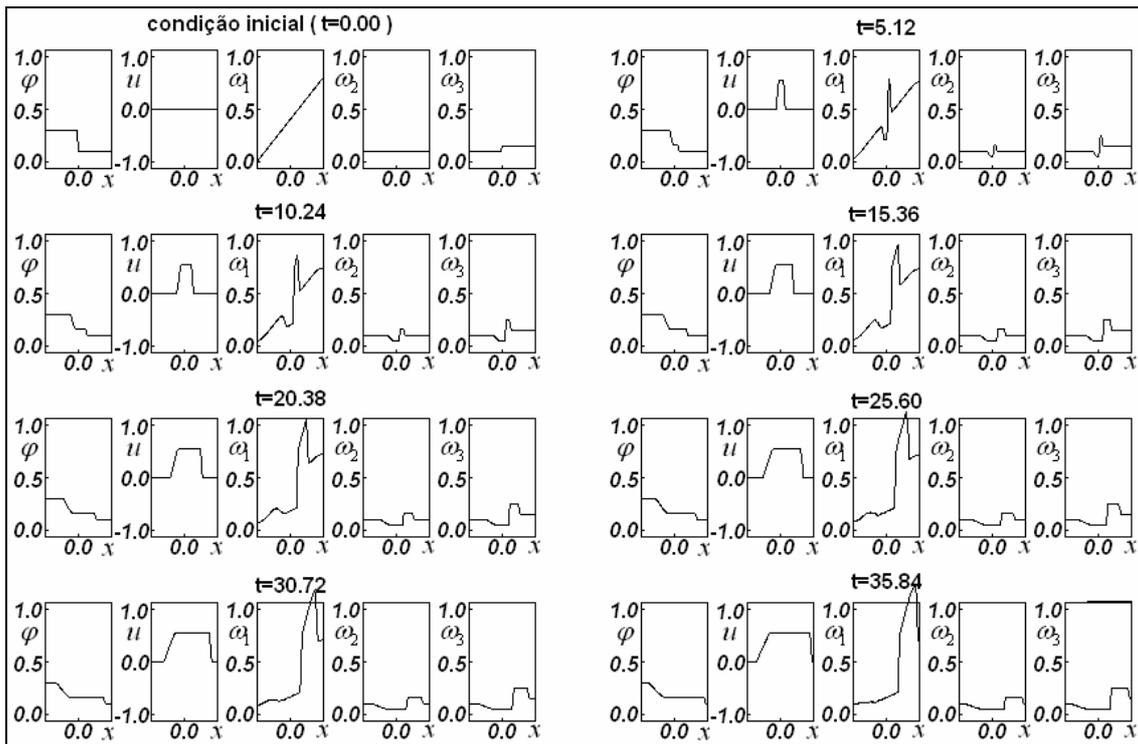


Figura 4.10 – Resultados obtidos com o problema (4.11), alterando a condição inicial para φ e ω_1 . Aqui, no instante inicial, $\varphi = 0.3$ para $0 < x < 1$ e $\varphi = 0.1$ para $-1 < x < 0$. A condição inicial para ω_1 é a mesma da figura 4.9.

4.1. IMPLEMENTAÇÃO DO ESQUEMA DE GLIMM

A fim de detalhar a implementação do esquema semi-analítico de Glimm a ser aplicado ao problema de valor inicial associado ao sistema hiperbólico unidimensional descrito na equação (4.1), define-se a seguinte lei de conservação, com o vetor \mathbf{v} representando as incógnitas:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{v}) + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}(\mathbf{v}) \quad \text{com} \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi u \\ \omega_i \end{bmatrix} \quad \mathbf{f}(\mathbf{v}) = \begin{bmatrix} \varphi u \\ \varphi u^2 + p \\ \omega_i u \end{bmatrix}, \quad i=1, n_p \quad (4.12)$$

$$\mathbf{v}(x, 0) = \mathbf{v}^0(x)$$

O domínio espacial $[-L, +L]$ é discretizado em $2M$ células computacionais dadas pelos intervalos reais $I_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ de mesmo comprimento $\Delta x = x_{j+1/2} - x_{j-1/2} = L/M$, com $j=1, \dots, 2M$. Para cada intervalo espacial I_j , a localização de seu centro x_j e de seus extremos $x_{j-1/2}, x_{j+1/2}$ são dados, respectivamente por:

$$x_j = -L + \left(j - \frac{1}{2}\right) \Delta x \quad x_{j-1/2} = x_j - \frac{\Delta x}{2} \quad x_{j+1/2} = x_j + \frac{\Delta x}{2} \quad (4.13)$$

A condição inicial $\mathbf{v}^0(x)$ é convertida em uma função constante por partes em cada intervalo espacial I_j , assumindo os valores $\mathbf{v}_j^0 = \mathbf{v}^0(x_j)$, $j=1, \dots, 2M$, e esses valores são renovados a cada passo de tempo. No passo de tempo $t = t_n$ funções constantes por partes obtidas a partir de uma escolha randômica são consideradas para o intervalo espacial I_j . Os estados são denotados por $\mathbf{v}_{j-1/2}^n$ e $\mathbf{v}_{j+1/2}^n$. A solução evolui a partir destes dados para um instante de tempo subsequente $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, $\Delta t > 0$.

Os pares $\mathbf{v}_{j-1/2}^n$ e $\mathbf{v}_{j+1/2}^n$ definem estados à esquerda e à direita nos limites do intervalo espacial I_j , onde $I_j \equiv [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$, define problemas de Riemann locais centrados em x_j . Esses problemas de Riemann têm soluções exatas.

O avanço da solução do tempo t_n até o tempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ em um intervalo espacial I_j envolve uma escolha randômica de um estado. Este estado escolhido depende de um número randômico θ no intervalo $(-1/2, +1/2)$. Em seguida a solução é atualizada da seguinte forma:

$$\mathbf{v}_j^{n+1} = \begin{cases} \mathbf{v}_{j-1/2}^{n+1} \left(\theta \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & 0 \leq \theta < \frac{1}{2} \\ \mathbf{v}_{j+1/2}^{n+1} \left(\theta \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & -\frac{1}{2} < \theta < 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

originando uma nova função constante por partes.

De acordo com Olivier e Grönig (1986) a repetição momentânea do sinal de θ pode causar erros nas posições das ondas de choque ou de rarefação. Isto poderia ser observado, por exemplo, se o número θ fosse sempre positivo.

Nesta tese a aplicação do esquema de Glimm considera quatro sequências distintas, a fim de minimizar qualquer erro nas posições das ondas de choque ou de rarefação. Em cada passo de tempo, de t_n até t_{n+1} , serão obtidas quatro diferentes soluções pelo método de Glimm. A primeira solução é originada pela sequência $\{+\theta_n\}$ e é denotada por: $(\mathbf{v}_j^{n+1})_+^1$ no intervalo espacial I_j , sendo dada por:

$$(\mathbf{v}_j^{n+1})_+^1 = \begin{cases} \mathbf{v}_{j-1/2}^{n+1} \left(\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & 0 \leq \theta_n < \frac{1}{2} \\ \mathbf{v}_{j+1/2}^{n+1} \left(\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & -\frac{1}{2} < \theta_n < 0 \end{cases} \quad (4.15)$$

A segunda solução é determinada empregando a sequência $\{-\theta_n\}$, que é simétrica à sequência $\{+\theta_n\}$, e é denotada por: $(\mathbf{v}_i^{n+1})_-^1$ sendo dada, no intervalo espacial I_j , por:

$$(\mathbf{v}_j^{n+1})_-^1 = \begin{cases} \mathbf{v}_{j-1/2}^{n+1} \left(-\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & 0 \leq -\theta_n < \frac{1}{2} \\ \mathbf{v}_{j+1/2}^{n+1} \left(-\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & -\frac{1}{2} < -\theta_n < 0 \end{cases} \quad (4.16)$$

Em seguida, a terceira solução e a quarta são obtidas de forma similar, a partir das sequências $\{+\theta_n\}$ e sua simétrica $\{-\theta_n\}$, respectivamente, como:

$$(\mathbf{v}_j^{n+1})_+^2 = \begin{cases} \mathbf{v}_{j-1/2}^{n+1} \left(\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & 0 \leq \theta_n < \frac{1}{2} \\ \mathbf{v}_{j+1/2}^{n+1} \left(\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & -\frac{1}{2} < \theta_n < 0 \end{cases} \quad (4.17)$$

e

$$(\mathbf{v}_j^{n+1})_-^2 = \begin{cases} \mathbf{v}_{j-1/2}^{n+1} \left(-\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & 0 \leq -\theta_n < \frac{1}{2} \\ \mathbf{v}_{j+1/2}^{n+1} \left(-\theta_n \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) & -\frac{1}{2} < -\theta_n < 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

Finalmente, obtém-se uma solução que pode ser considerada independente do sinal de θ_n . A solução vem da seguinte média aritmética:

$$\bar{\mathbf{v}}_j^{n+1} = \frac{(\mathbf{v}_j^{n+1})_+^1 + (\mathbf{v}_j^{n+1})_-^1 + (\mathbf{v}_j^{n+1})_+^2 + (\mathbf{v}_j^{n+1})_-^2}{4} \quad (4.19)$$

5. O PROBLEMA NÃO HOMOGÊNEO (E A FATORAÇÃO)

Vamos considerar agora que a massa de cada um dos constituintes (poluentes, por exemplo) contidos na mistura não seja constante. Mais especificamente, vamos supor que os constituintes possam reagir e que suas massas não sejam conservadas (havendo, por exemplo, reações entre eles). Nestes casos as equações consideradas na seção anterior passam a ter a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= m, \quad p = \hat{p}(\varphi); \quad m = -\gamma_1 \varphi^2 u - \gamma_2 \varphi^2 |u|u \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= r_i, \quad i = 1, 2, \dots, n_p \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde r_i representa a taxa de geração de massa do constituinte i . O termo m representa um sorvedouro de quantidade de movimento devido, por exemplo, ao atrito viscoso.

Para a simulação deste tipo de problema vamos considerar uma fatoração do operador. Em outras palavras, vamos empregar o seguinte protocolo:

1) Considerando o problema (5.1), a partir do instante de tempo t_n , avança-se no tempo com o seguinte sistema de equações, que representam o problema homogêneo associado ao sistema (5.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u^2 + p) &= 0, \quad p = \hat{p}(\varphi) \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_i u) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, n_p \end{aligned} \quad (5.2)$$

até o instante de tempo t_{n+1} .

2) Uma vez encontrada a aproximação para as funções φ , u e ω_i no instante de tempo t_{n+1} , considera-se esta aproximação como condição inicial e avança-se, novamente, no tempo de t_n até t_{n+1} (usando o mesmo intervalo de tempo empregado para avançar no problema (5.2)), com o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) &= m, \quad m = -\gamma_1 \varphi^2 u - \gamma_2 \varphi^2 |u| u \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} &= r_i, \quad i = 1, 2, \dots, n_p \end{aligned} \quad (5.3)$$

O resultado obtido será a aproximação no instante t_{n+1} . Após isso, uma nova escolha aleatória deve ser efetuada.

Tal protocolo impõe que o intervalo de tempo $t_{n+1} - t_n$ seja pequeno o suficiente para que os efeitos, que são simultâneos, possam ser tratados como sequenciais. No caso destes problemas, o produto $(t_{n+1} - t_n)r_i$ deve ser pequeno para permitir o uso da fatoração do operador.

O sistema de equações (5.3) será aproximado por um esquema de Euler para avanço no tempo. Uma vez que, em (5.3) a função φ é independente do tempo, teremos a seguinte aproximação:

$$\begin{aligned} \varphi|_{t_{n+1}} &= \varphi|_{t_n} \\ u|_{t_{n+1}} &= \left(\varphi|_{t_n}\right)\left(u|_{t_n}\right)\left(m|_{t_n}\right)(t_{n+1} - t_n) \\ \omega_i|_{t_{n+1}} &= \left(\omega_i|_{t_n}\right)\left(r_i|_{t_n}\right)(t_{n+1} - t_n), \quad i = 1, 2, \dots, n_p \end{aligned} \quad (5.4)$$

5.1 UM EXEMPLO

Vamos considerar agora uma situação em que cada constituinte em suspensão na mistura sofre uma redução de massa proporcional à própria concentração (por exemplo devido a uma reação química que gera um outro constituinte). O atrito será desconsiderado. A pressão será dada por (a mesma da seção 3.1)

$$p = \hat{p}(\varphi) = \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3} \quad (5.5)$$

Supondo 2 constituintes, sendo os dois primeiros reagindo para gerar o terceiro. Neste caso a geração de massa do constituinte resultante será igual à redução da massa dos constituintes que reagem. O sistema de equações fica então

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\varphi u^2 + \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3} \right) &= 0 \\ \frac{\partial \omega_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_1 u) &= -\alpha \omega_1 \\ \frac{\partial \omega_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_2 u) &= -\beta \omega_2 \\ \frac{\partial \omega_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_3 u) &= \alpha \omega_1 + \beta \omega_2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

As Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 apresentam alguns resultados, ilustrando uma comparação direta entre a condição inicial e a concentração dos constituintes em suspensão em cada instante de tempo, para instantes de tempo selecionados.

A Figura 5.1 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade do constituinte fluido u (que se confunde com a velocidade da mistura) e concentração dos constituintes poluentes, a saber ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando o termo de atrito viscoso $m=0$, como mostrado no problema (5.6) e considerando os parâmetros $\alpha = \beta = 0.01$. A condição inicial, ilustrada no primeiro conjunto de 5 quadros, considera uma função

degrau para a saturação (com $\varphi = 0.5$ para $x < 0$ e $\varphi = 0.2$ para $x > 0$), velocidade do constituinte fluido nula e diferentes valores constantes para concentração dos constituintes poluentes: $\omega_1 = 0.3$, $\omega_2 = 0.2$ e $\omega_3 = 0$. As linhas pontilhadas (associadas às variáveis ω_1 , ω_2 , e ω_3) indicam a condição inicial, para efeito de comparação em cada instante de tempo.

Como o atrito não é considerado neste caso e a condição inicial para a saturação é um degrau, a simulação da saturação e da velocidade pode ser verificada a partir da solução do Problema de Riemann associado. Quanto à evolução das concentrações dos poluentes, a linha tracejada permite avaliar (qualitativamente) a sua conservação de massa. Em outras palavras, a área sob as curvas representantes das concentrações é invariante no tempo.

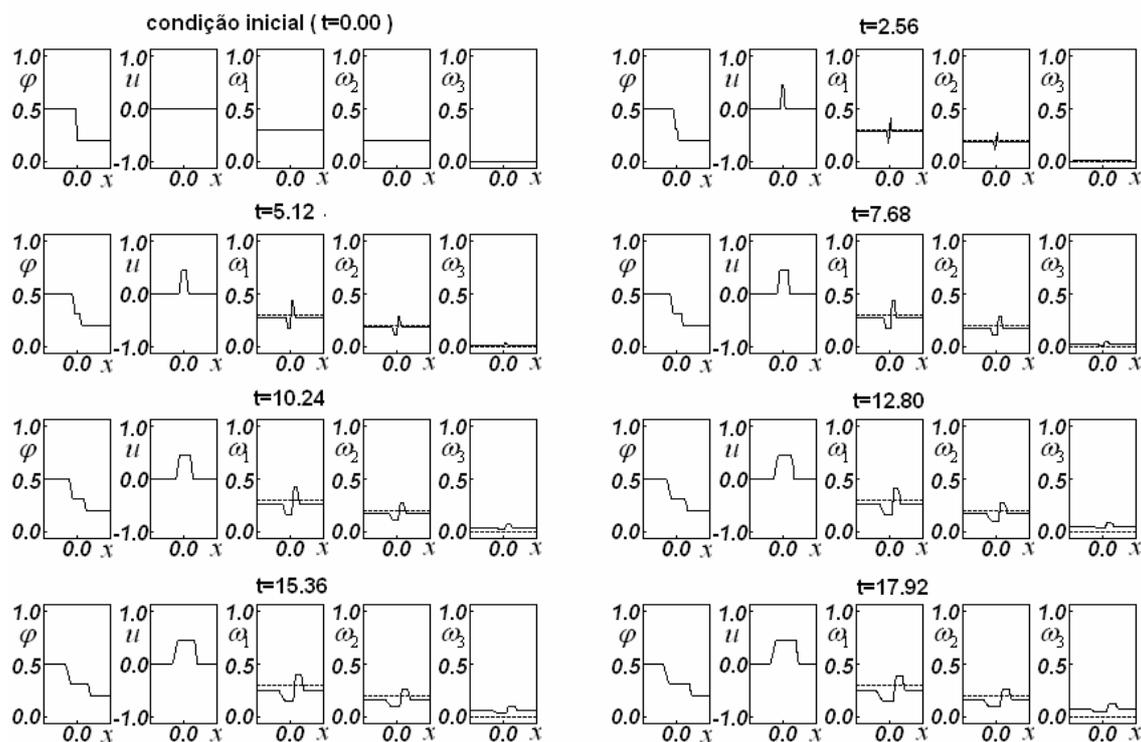


Figura 5.1 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.01$, obtidos com o problema (5.6).

A Figura 5.2 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade do constituinte fluido u e concentração dos constituintes poluentes, a saber ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando o termo de atrito viscoso $m=0$, como mostrado no problema (5.6) e considerando os parâmetros $\alpha=\beta=0.05$. A condição inicial, ilustrada no primeiro conjunto de 5 quadros, é a mesma considerada na Figura 5.1. As linhas pontilhadas (associadas às variáveis ω_1 , ω_2 , e ω_3) indicam a condição inicial, para efeito de comparação em cada instante de tempo.

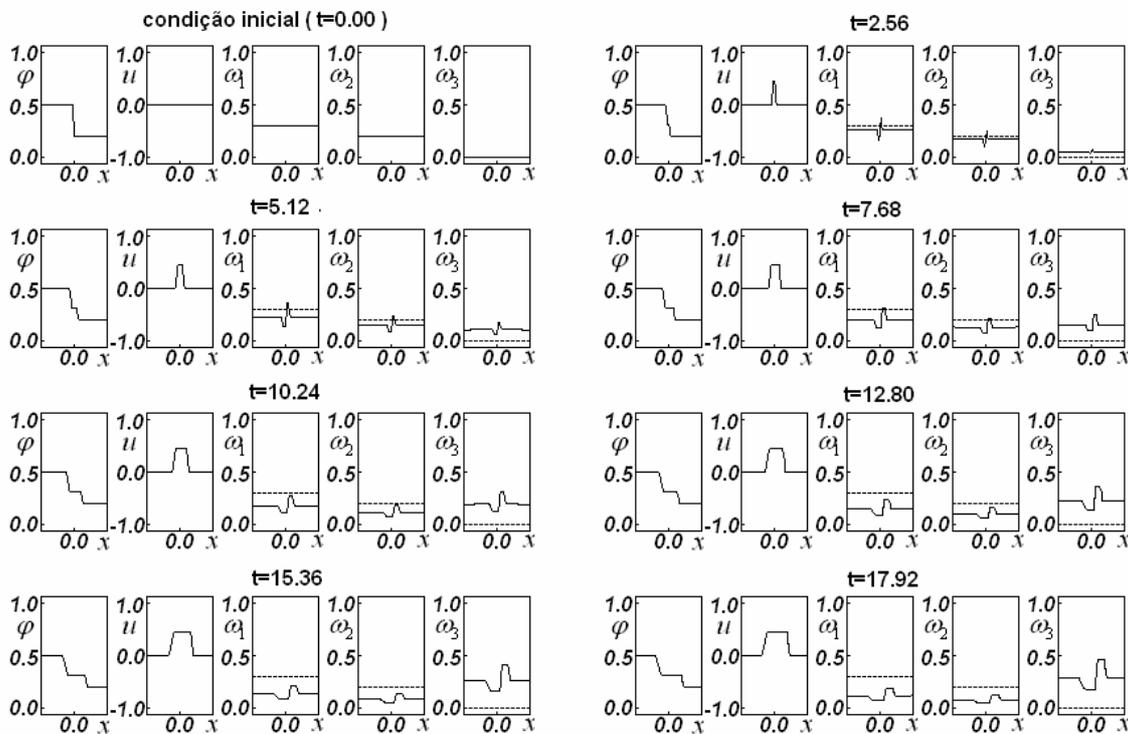


Figura 5.2 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha=\beta=0.05$, obtidos com o problema (5.6).

Comparando-se as Figuras 5.1 e 5.2 observa-se um incremento na geração do poluente 3 ao mesmo tempo em que fica evidente um rápido decaimento na concentração dos poluentes 1 e 2. Enquanto na Figura 5.1 tínhamos $\alpha=\beta=0.01$, na Figura 5.2 temos $\alpha=\beta=0.05$ (5 vezes maior).

A Figura 5.3 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade do constituinte fluido u e concentração dos constituintes poluentes, a saber ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando o termo de atrito viscoso ($m=0$), como mostrado no problema (5.6) e considerando os parâmetros $\alpha=\beta=0.05$. A condição inicial, ilustrada no primeiro conjunto de 5 quadros, considera a mesma função degrau para a saturação, e a velocidade do constituinte fluido nula assim como $\omega_3=0$, como nas figuras 5.1 e 5.2, porém ω_1 e ω_2 apresentam diferentes saltos, a saber, para $x<-0.5$: $\omega_1=0.3$, para $-0.5<x<0$: $\omega_1=0.5$ e para $x>0$: $\omega_1=0.3$ e $x<0$: $\omega_2=0.2$, para $0<x<0.5$: $\omega_2=0.5$ e para $x>0.5$: $\omega_2=0.2$.

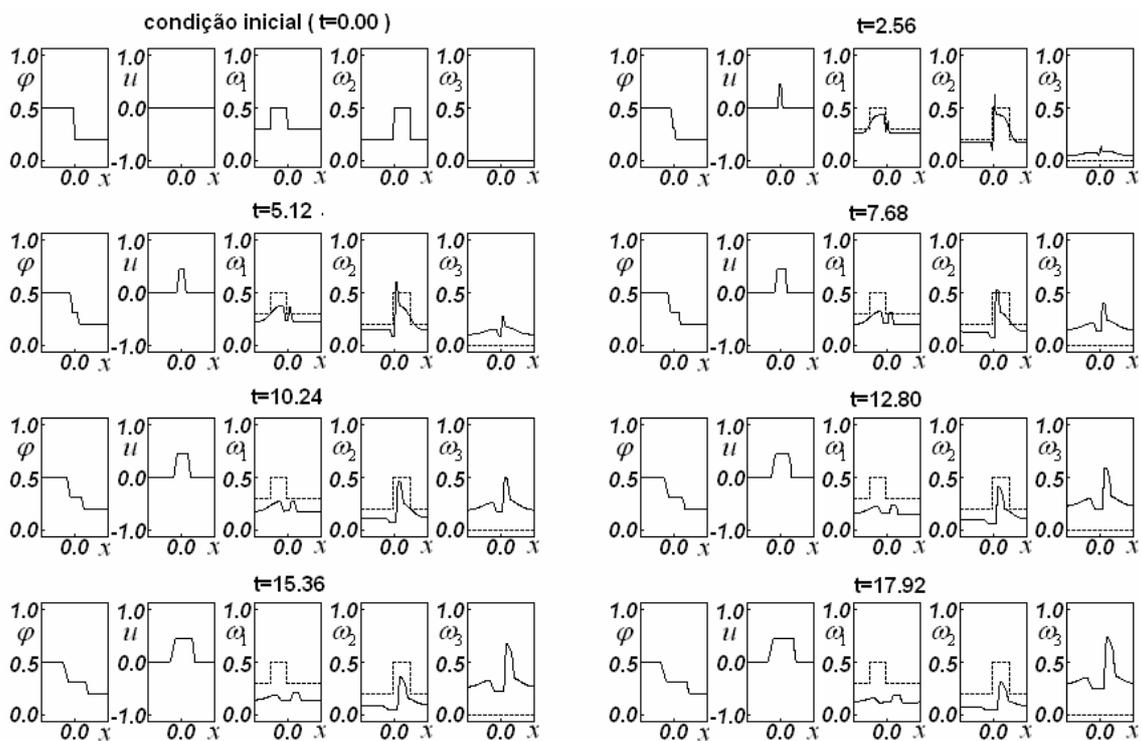


Figura 5.3 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha=\beta=0.05$, com saltos para ω_1 e ω_2 na condição inicial, obtidos com o problema (5.6).

As Figuras 5.2 e 5.3 são análogas com diferença apenas na condição inicial para as variáveis ω_1 e ω_2 . As linhas pontilhadas (associadas às variáveis ω_1 , ω_2 , e ω_3)

indicam a condição inicial, para efeito de comparação em cada instante de tempo e permitem avaliar a preservação total da massa. Nota-se que os saltos nas condições iniciais para ω_1 e ω_2 afetam fortemente a evolução.

A equação (5.6) será modificada, para incluir os termos de atrito viscoso – a saber os termos de Darcy, proporcionais ao coeficiente γ_1 e os termos de Forchheimer, , proporcionais ao coeficiente γ_2 , enquanto mantem-se a geração de massa do constituinte resultante como igual à redução da massa dos constituintes que reagem. O sistema de equações, agora completo, é dado pela equação (5.7), apresentada a seguir:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi u) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\varphi u) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\varphi u^2 + \frac{\varphi^3}{3(1-\varphi)^3} \right) &= -\gamma_1 \varphi^2 u - \gamma_2 \varphi^2 |u| u \\
 \frac{\partial \omega_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_1 u) &= -\alpha \omega_1 \\
 \frac{\partial \omega_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_2 u) &= -\beta \omega_2 \\
 \frac{\partial \omega_3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\omega_3 u) &= \alpha \omega_1 + \beta \omega_2
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

As Figuras 5.4 a 5.8 apresentam alguns resultados, ilustrando uma comparação direta entre a condição inicial e a concentração dos constituintes em suspensão em cada instante de tempo, levando em conta os efeitos dos termos de arraste de Darcy e Forchheimer, apresentados na equação (5.7), para instantes de tempo selecionados, na saturação, na velocidade e nas concentrações ω_1 , ω_2 , e ω_3 . Assim como nas Figuras 5.1 a 5.3, as linhas pontilhadas (associadas às variáveis ω_1 , ω_2 , e ω_3), sempre que presentes, indicam a condição inicial, para efeito de comparação em cada instante de tempo.

Na Figura 5.4 a condição inicial para a saturação considera um valor constante ($\varphi=0.6$), para a velocidade tem-se $u=+1$, para $x<0$ e $u=-1$, para $x>0$ e diferentes valores constantes para as concentrações $\omega_1=0.3$, $\omega_2=0.2$ e $\omega_3=0$, como nas Figuras 5.1 e 5.2.

Como, neste caso, o termo de atrito não foi considerado ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$), as diferenças no comportamento das variáveis devem-se, essencialmente, à alta taxa de reação entre os poluentes $\alpha = \beta = 0.05$.

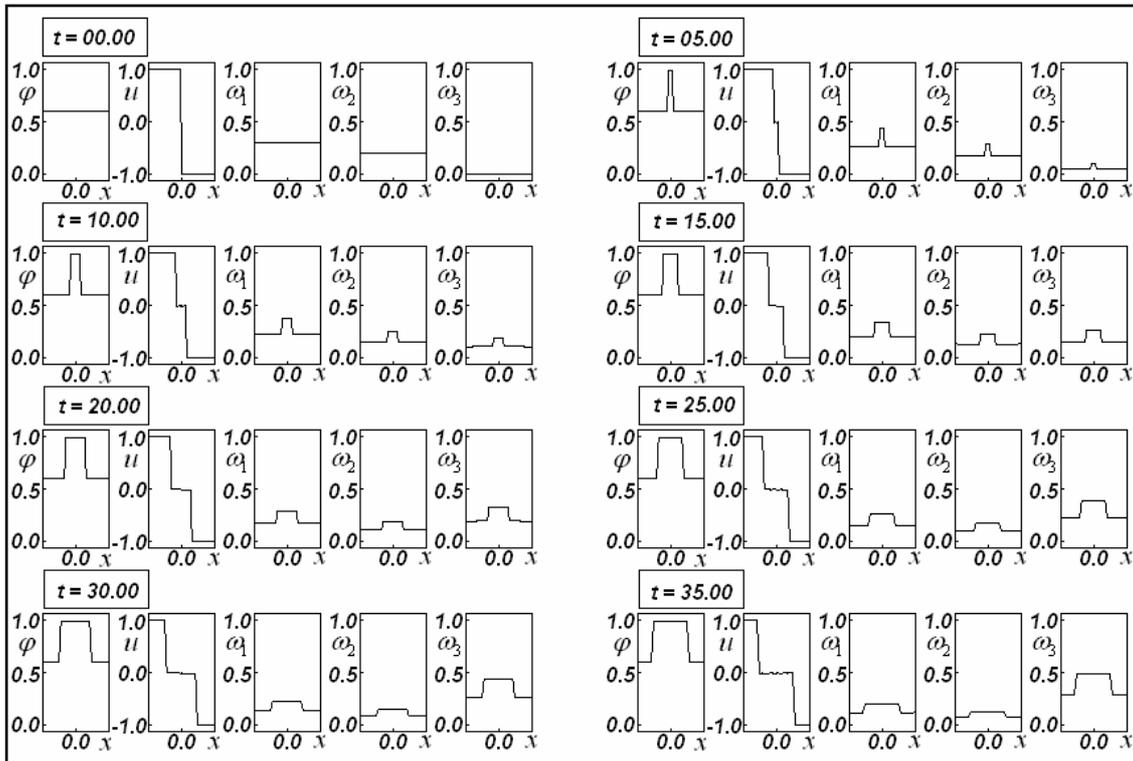


Figura 5.4 – Evolução da saturação ϕ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$.

Na Figura 5.5 é mantida a mesma a condição inicial considerada na Figura 5.4, porém o atrito é levado em conta, sendo considerados coeficientes negativos para os termos de Darcy e de Forchheimer: $\gamma_1 = \gamma_2 = -0.5$, além de alta taxa de reação entre os poluentes: $\alpha = \beta = 0.05$. É interessante notar, a partir da comparação entre as Figuras 5.4 e 5.5, a forte influência do atrito em todas as distribuições, em particular as concentrações dos poluentes.

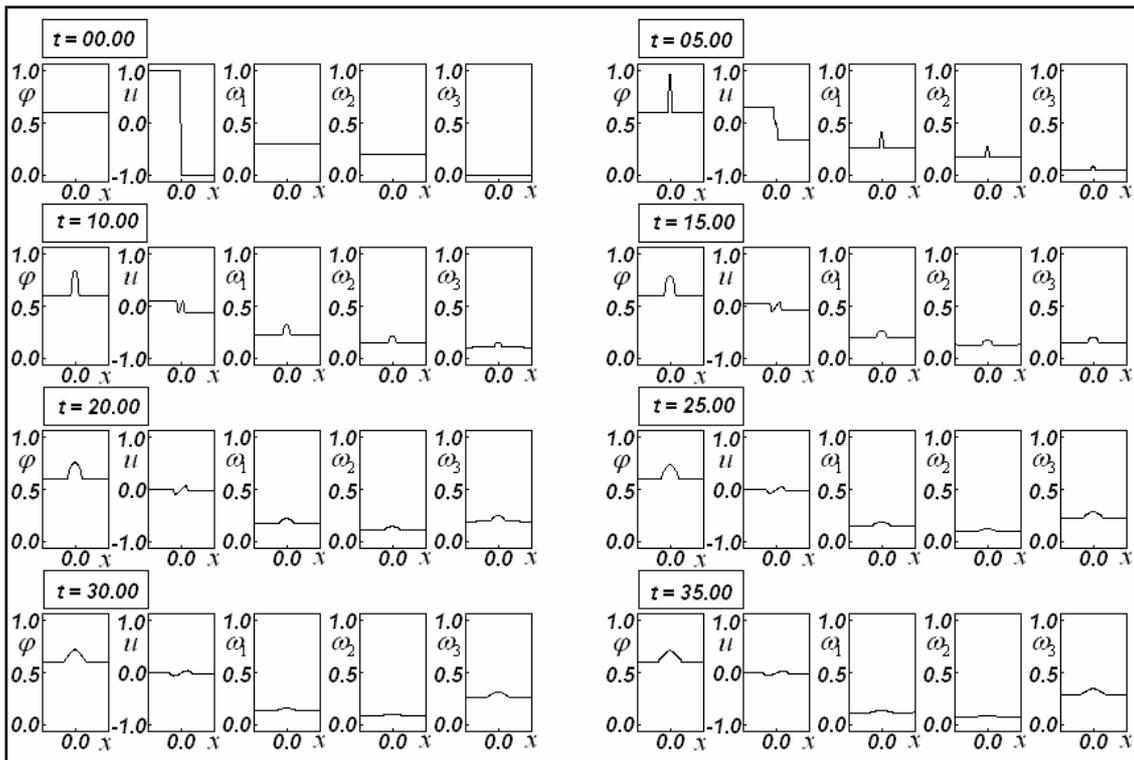


Figura 5.5 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = -0.5$.

Na Figura 5.6 a condição inicial considera um degrau para a saturação (com $\varphi = 0.5$ para $x < 0$ e $\varphi = 0.2$ para $x > 0$), a velocidade é nula e as concentrações ω_1 , ω_2 e ω_3 mantém os mesmos valores constantes das Figuras anteriores (exceto a Figura 5.3), com os mesmos valores para os coeficientes de ω_1 e ω_2 , ou seja: $\alpha = \beta = 0.05$. Como no caso da Figura 5.4, o atrito não é considerado ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$). As linhas pontilhadas (associadas às variáveis ω_1 , ω_2 , e ω_3) indicam a condição inicial, para efeito de comparação em cada instante de tempo. A conservação de massa pode ser avaliada qualitativamente.

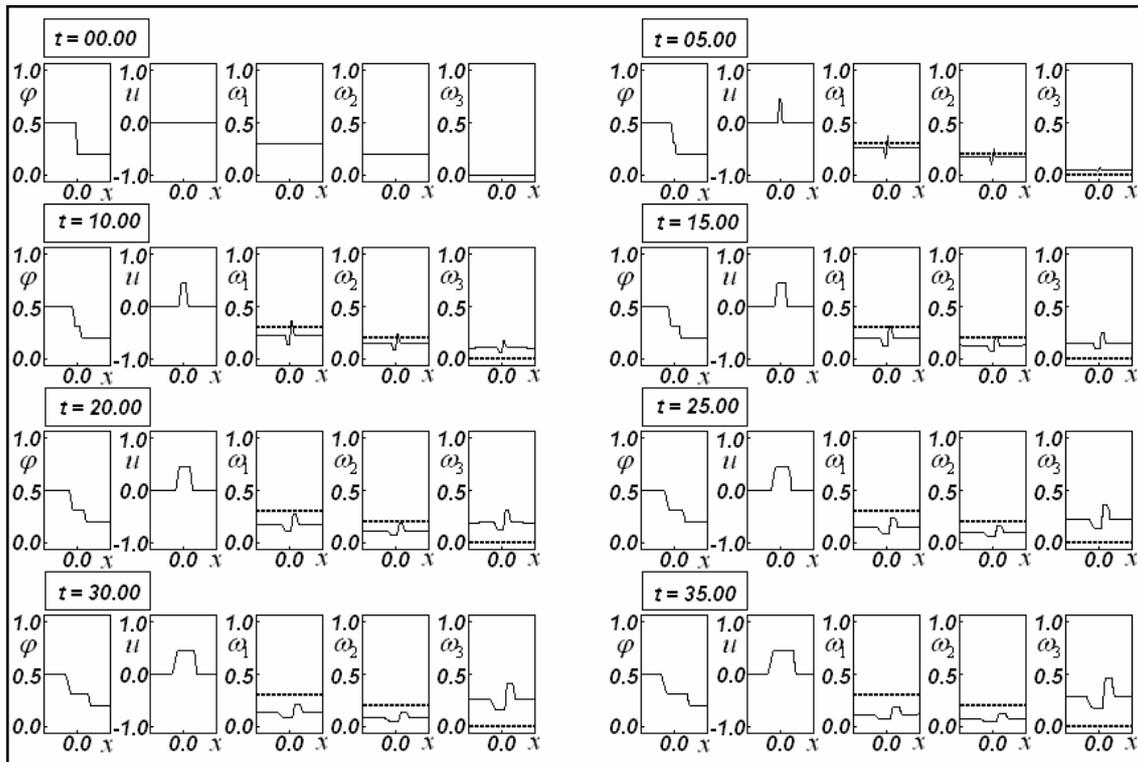


Figura 5.6 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$.

A condição inicial da Figura 5.7 é a mesma da Figura 5.6. Os coeficientes das concentrações ω_1 e ω_2 ($\alpha = \beta = 0.05$) são os mesmos empregados para obter as Figuras 5.2 a 5.6, já os termos de arraste de Darcy (linear) e Forchheimer (quadrático) são levados em conta, com valores positivos, a saber: $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. Comparando as Figuras 5.7 e 5.6 (onde $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$) nota-se a influência desse arraste. É uma situação com muito atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$) e alta taxa de reação entre os poluentes $\alpha = \beta = 0.05$. É interessante notar como o atrito influenciou muito todas as distribuições, em particular as concentrações dos poluentes.

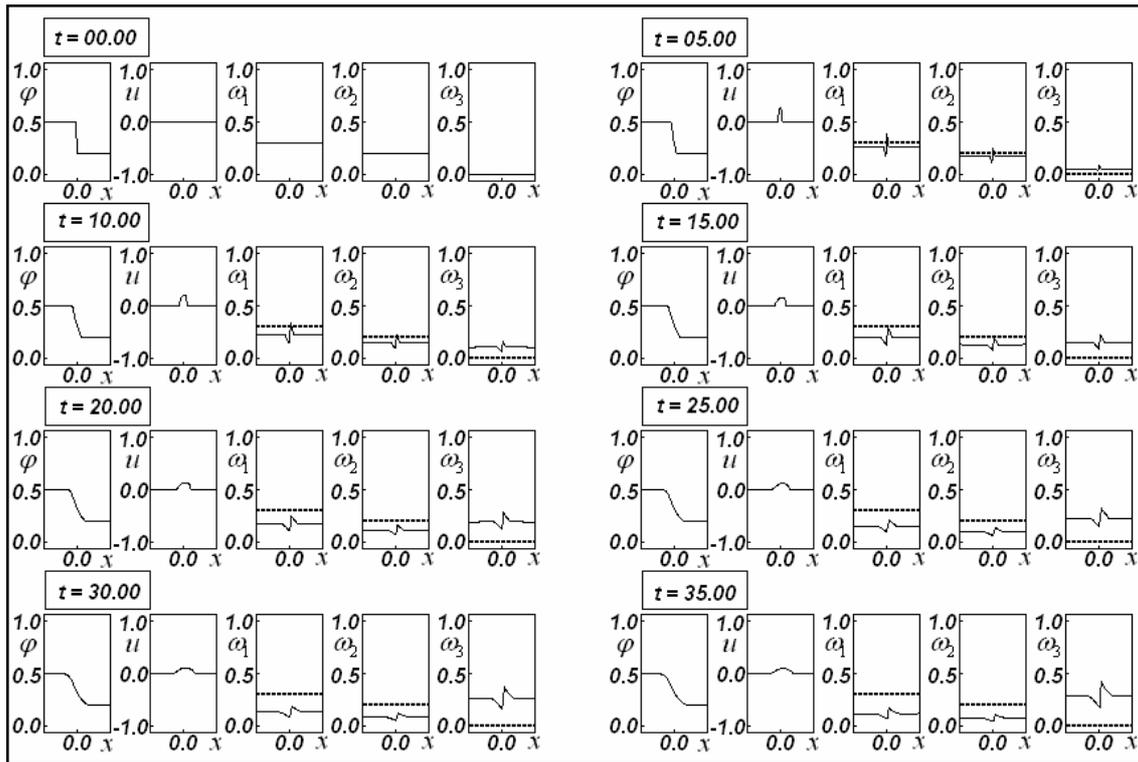


Figura 5.7 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$.

A condição inicial da Figura 5.8 é a mesma das Figuras 5.6 e 5.7. Os coeficientes das concentrações ω_1 e ω_2 ($\alpha = \beta = 0.05$) são os mesmos empregados para obter as Figuras 5.2 a 5.6, já os termos de arraste de Darcy (linear) e Forchheimer (quadrático) são levados em conta, com valores positivos, a saber: $\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$. Esses coeficientes são cinco vezes maiores que aqueles considerados na Figura 5.7.

Esta é uma situação com grande efeito de atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$) e alta taxa de reação entre os poluentes $\alpha = \beta = 0.05$. É interessante notar como o atrito influenciou de forma radical as distribuições, especialmente a velocidade.

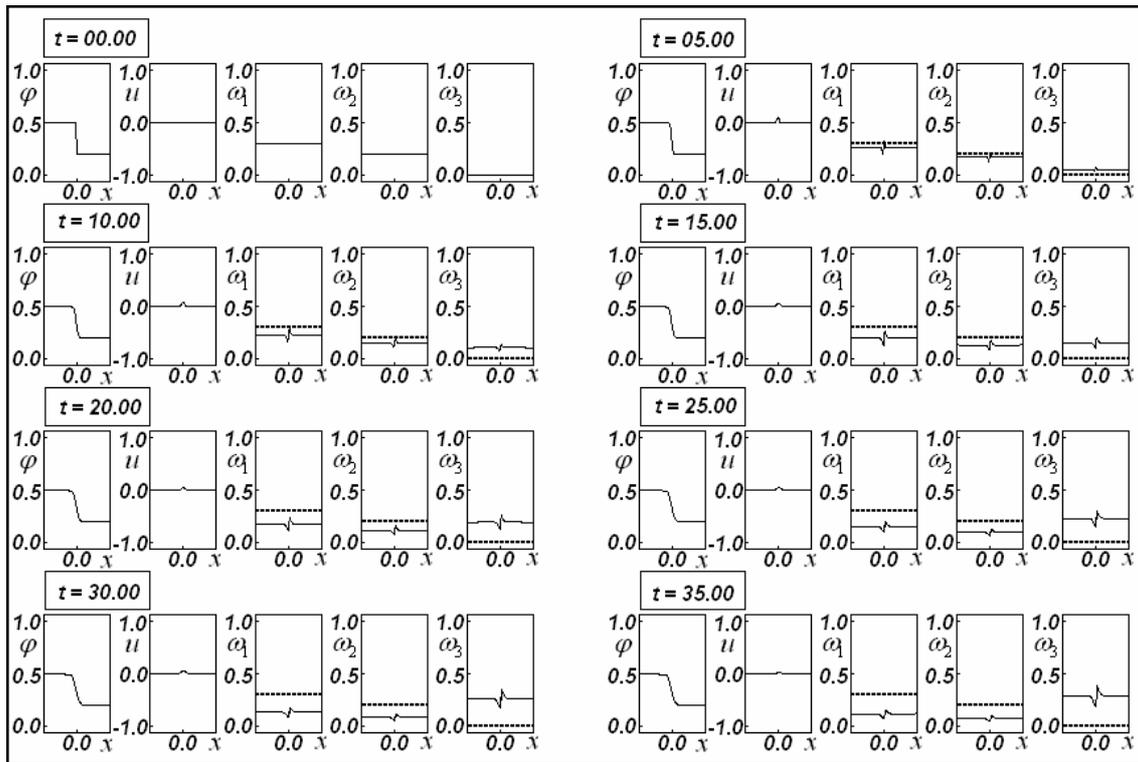


Figura 5.8 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$.

A influência do arraste que atua como um “amortecimento” pode ser mais bem compreendida, ao se comparar as Figuras 5.6 a 5.8. Ele tem influência não só na saturação φ e na velocidade do constituinte fluido u (que se confunde com a velocidade da mistura, devido à pequena quantidade de constituintes poluentes). Sua influência também é verificada na concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 .

As Figuras 5.9 a 5.21 consideram sempre os seguintes valores constantes para concentração dos constituintes poluentes: $\omega_1 = 0.3$, $\omega_2 = 0.2$ e $\omega_3 = 0$ e seus coeficientes são: $\alpha = \beta = 0.05$. As linhas pontilhadas em preto (associadas às variáveis ω_1 , ω_2 , e ω_3) indicam a condição inicial, para efeito de comparação em cada instante de tempo. Além destas linhas, nos gráficos de saturação há uma linha pontilhada em

vermelho, que indica o limite máximo para a saturação, que indica o limite máximo para a saturação ($\varphi_{MAX} = 1.0$). Nota-se que este limite jamais é ultrapassado.

A Figura 5.9 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade fluido u e concentração dos constituintes poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando o termo de atrito viscoso ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$). A condição inicial, ilustrada no primeiro conjunto de 5 quadros, considera uma saturação constante (saturação) e diferentes degraus para a velocidade do constituinte fluido (com $u = +1.0$ para $x < -0.5$, $u = 0.0$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $u = -1.0$ para $x > +0.5$).

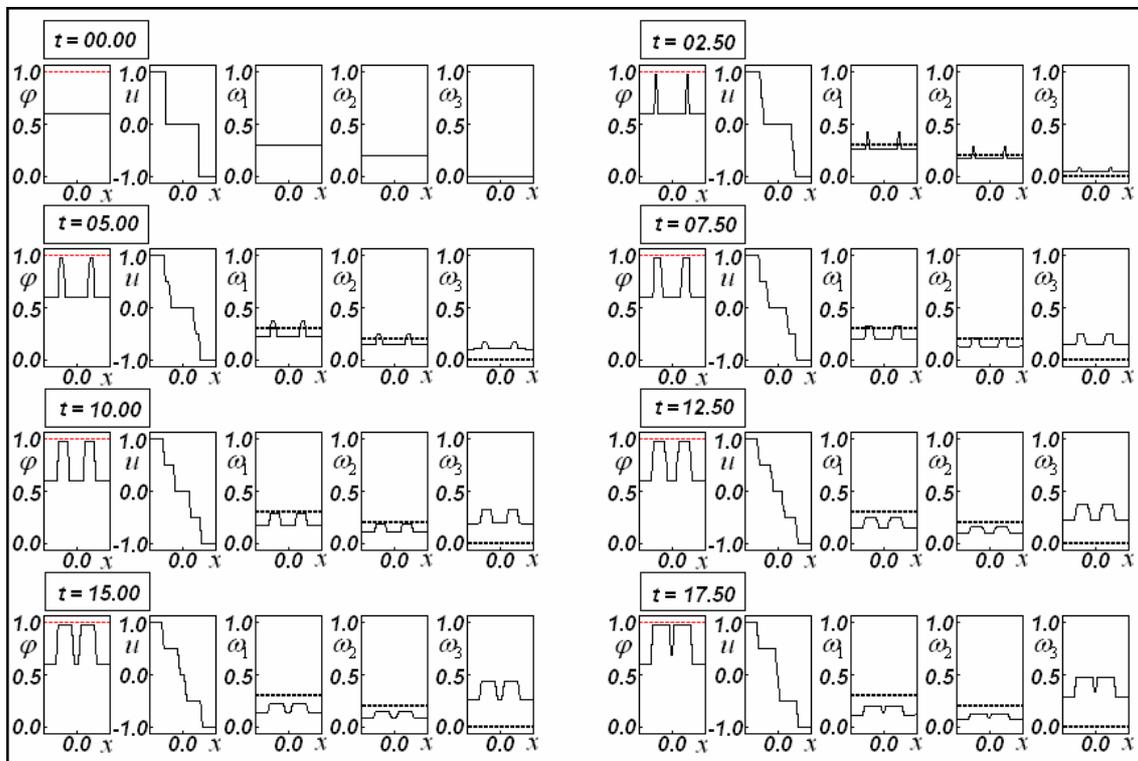


Figura 5.9 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são saturação constante, diferentes degraus para a velocidade u e diferentes valores constantes para ω_1 , ω_2 , e ω_3 .

A Figura 5.10 apresenta a evolução da saturação ϕ , velocidade fluido u e concentração dos constituintes poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , utilizando as mesmas condições iniciais consideradas na Figura 5.9, mas levando em conta os termos linear e quadrático de atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$).

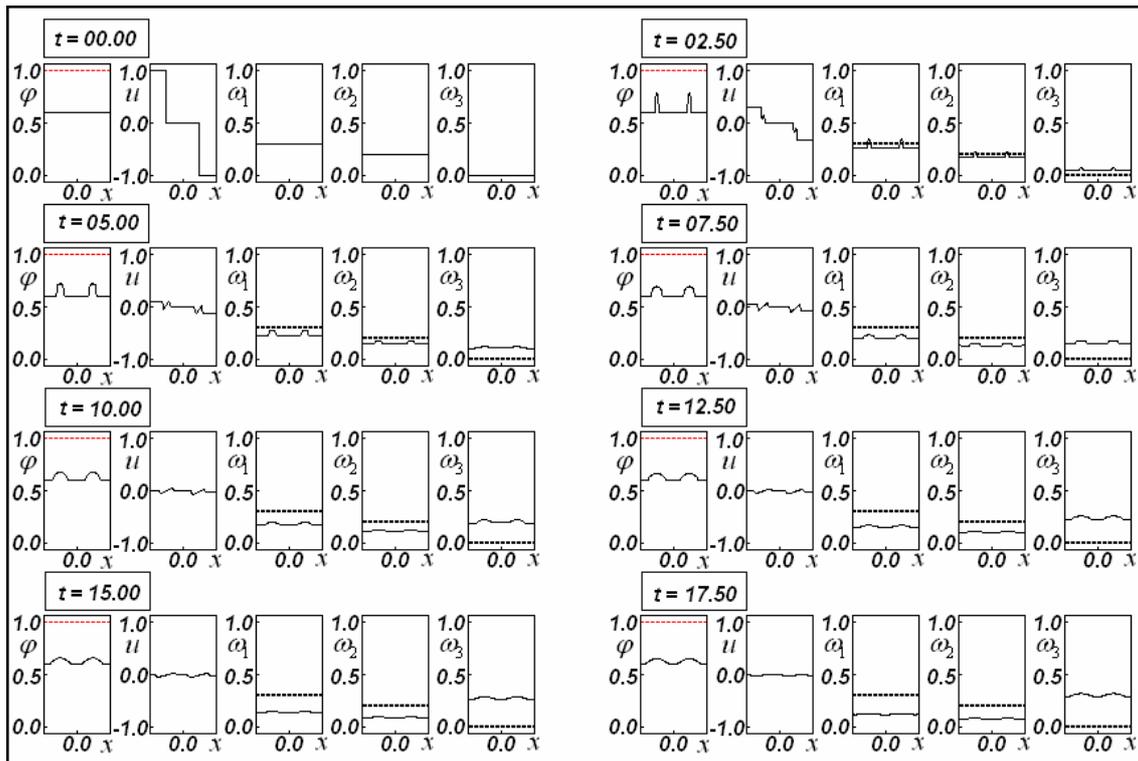


Figura 5.10 – Evolução da saturação ϕ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$.

A Figura 5.11 apresenta a evolução da saturação ϕ , velocidade fluido u e concentração dos constituintes poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando os termos de atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$) e utilizando como condições iniciais, ilustradas no primeiro conjunto de 5 quadros, diferentes degraus para a saturação ($\phi = 0.9$ para $x < -0.5$, $\phi = 0.6$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $\phi = 0.3$ para $x > +0.5$) e para a velocidade ($u = +1.0$ para $x < -0.5$, $u = 0.0$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $u = -1.0$ para $x > +0.5$). Observa-se que a saturação

atinge o valor limite ($\varphi_{MAX} = 1.0$) em todos os instantes de tempo considerados, exceto pela condição inicial, ilustrado na linha pontilhada em vermelho.

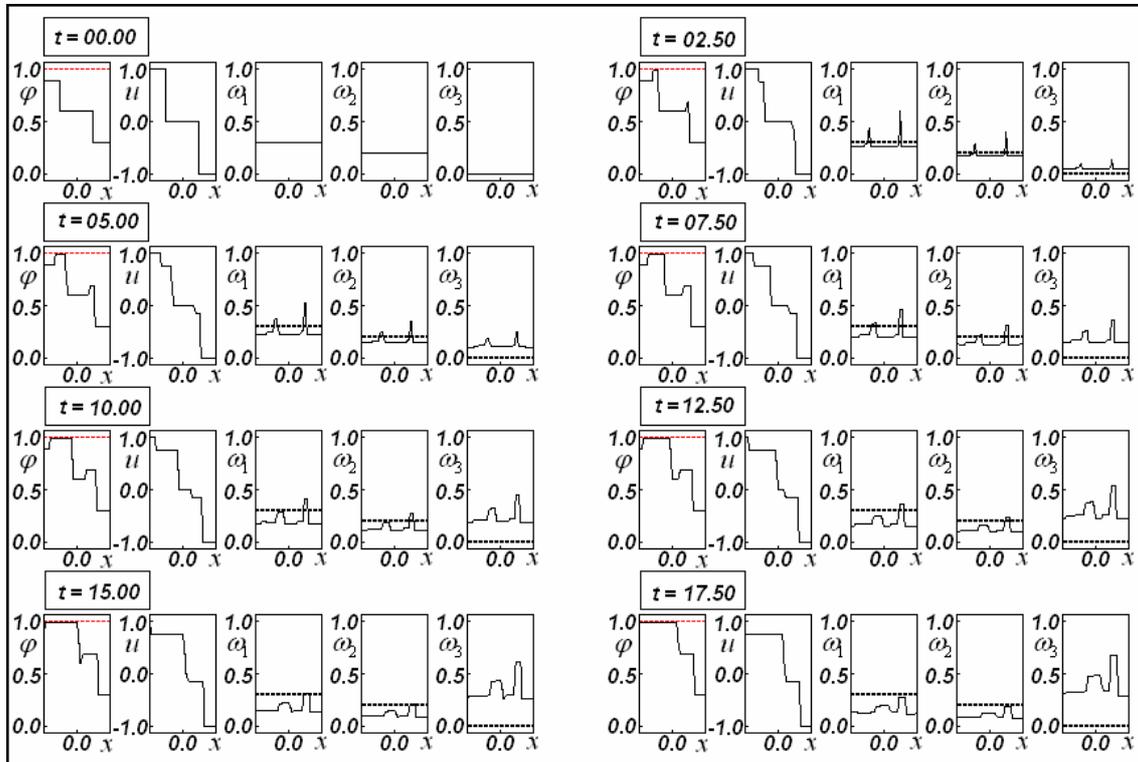


Figura 5.11 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são diferentes degraus para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u .

A Figura 5.12 considera as mesmas condições iniciais da Figura 5.11, mas considera a presença do atrito, sendo os coeficientes dos termos de Darcy e de Forchheimer dados, respectivamente, por $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$. Observa-se que a dissipação provocada pelos termos de atrito não permite que a saturação alcance seu limite máximo ($\varphi_{MAX} = 1.0$) em nenhum instante de tempo, já que a saturação não alcança a linha pontilhada em vermelho.

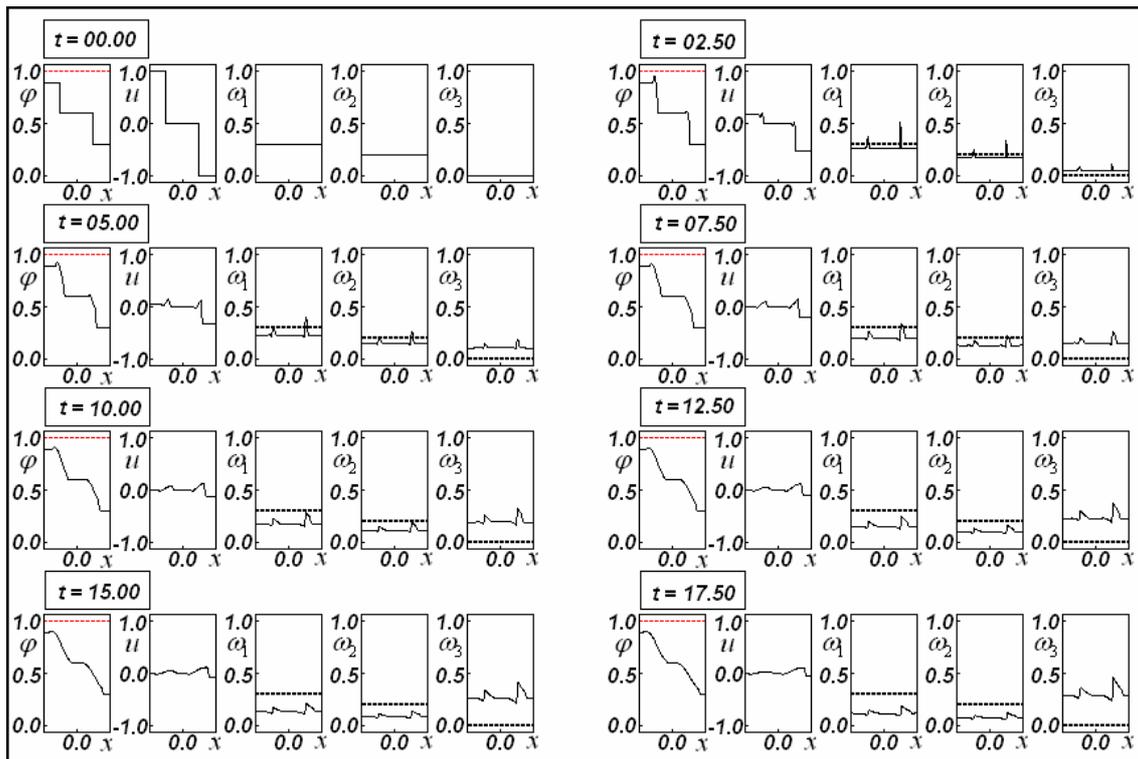


Figura 5.12 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$

A Figura 5.13 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade fluido u e concentração dos constituintes poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando os termos de atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$) e utilizando como condições iniciais, ilustradas no primeiro conjunto de 5 quadros, um degrau para a saturação ($\varphi = 0.9$ para $x < 0$ e $\varphi = 0.3$ para $x > 0$) e para a velocidade ($u = +1.0$ para $x < -0.5$, $u = 0.0$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $u = -1.0$ para $x > +0.5$). Ao se desprezar o atrito o valor limite para a saturação ($\varphi_{MAX} = 1.0$) é alcançado durante a sua evolução em todos os instantes de tempo considerados, após seu valor inicial, como pode ser visto nas curvas de saturação, que atingem a linha pontilhada em vermelho.

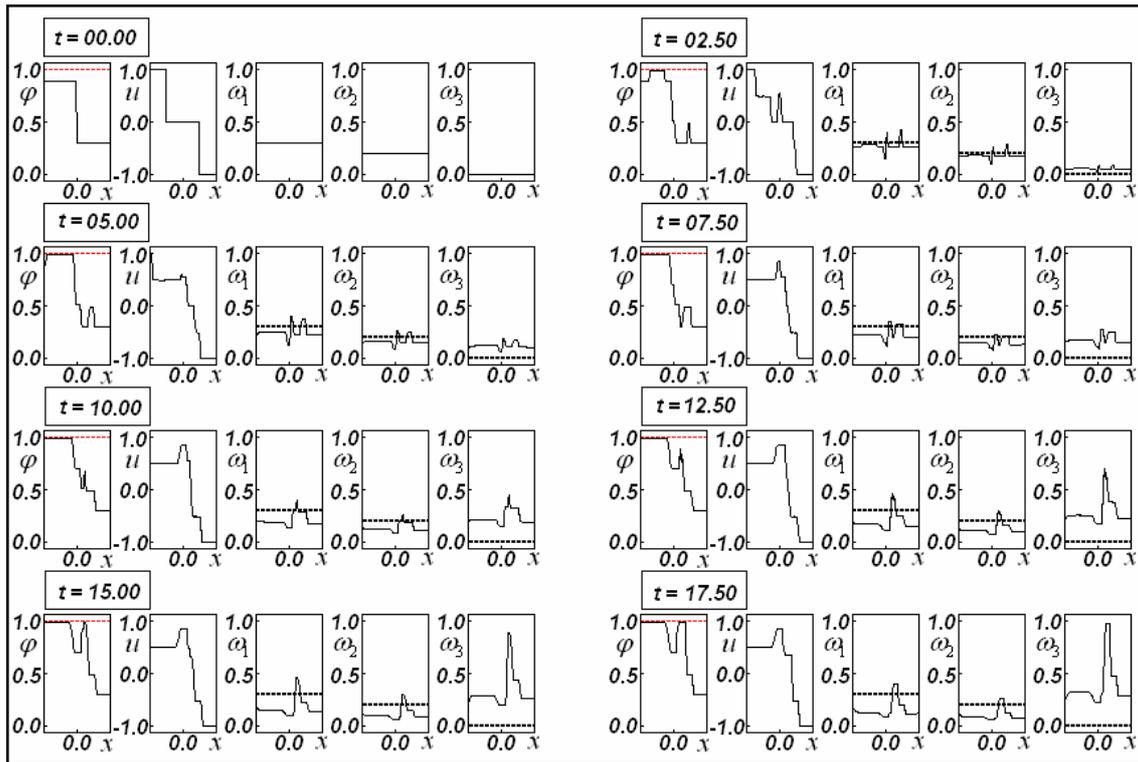


Figura 5.13 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um degrau para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u .

A Figura 5.14 considera as mesmas condições iniciais da Figura 5.13, mas leva em conta a presença do atrito, sendo os coeficientes dos termos linear e quadrático dados, respectivamente, por $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. Este valor é duas vezes maior que o valor considerado na Figura 5.12, portanto a dissipação provocada pelos termos de atrito é bem acentuada, mas, ainda assim, permite que a saturação alcance seu limite máximo ($\varphi_{MAX} = 1.0$) para $t = 2.50$, o segundo instante de tempo mostrado, logo após a condição inicial. Nota-se uma forte dissipação na velocidade e nas concentrações dos poluentes.

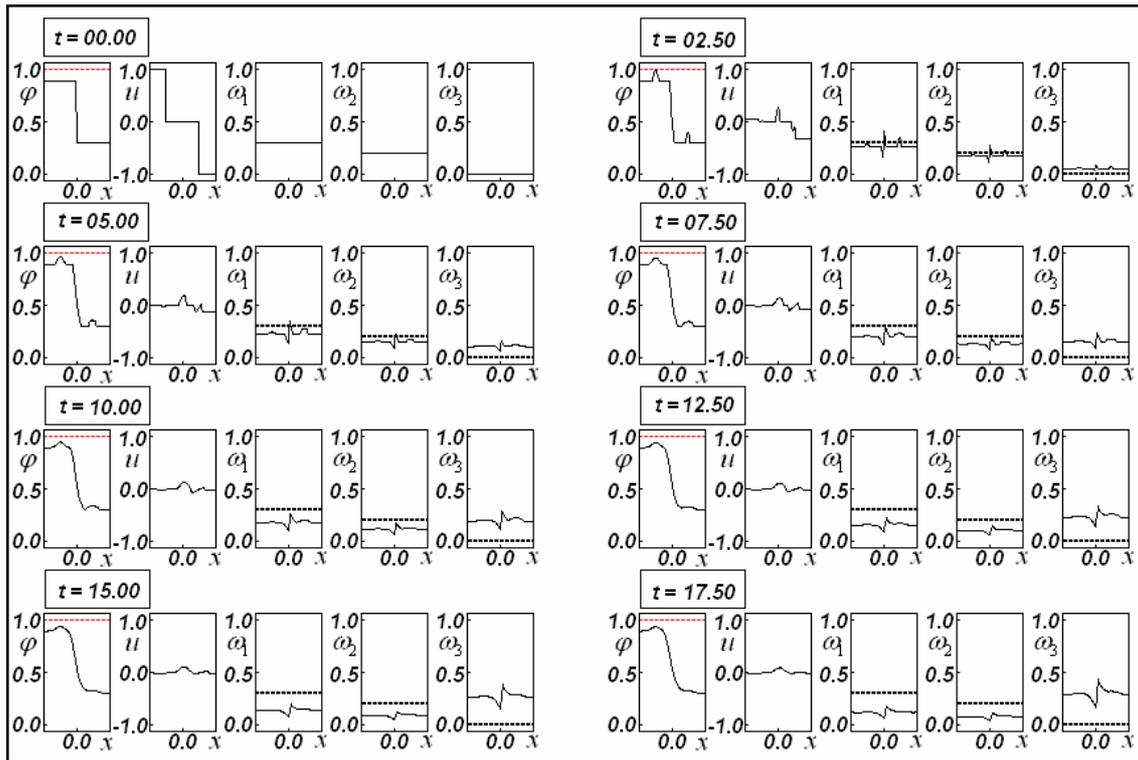


Figura 5.14 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$.

A Figura 5.15 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade fluido u e concentração dos constituintes poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , desprezando os termos de atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$) e utilizando como condições iniciais, ilustradas no primeiro conjunto de 5 quadros, um salto para a saturação ($\varphi = 0.3$ para $x < -0.5$, $\varphi = 0.9$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $\varphi = 0.3$ para $x > +0.5$) e os mesmos degraus para a velocidade usados a partir da Figura 5.9. Mesmo desprezando o atrito, a saturação não alcança a linha pontilhada em vermelho ($\varphi_{MAX} = 1.0$).

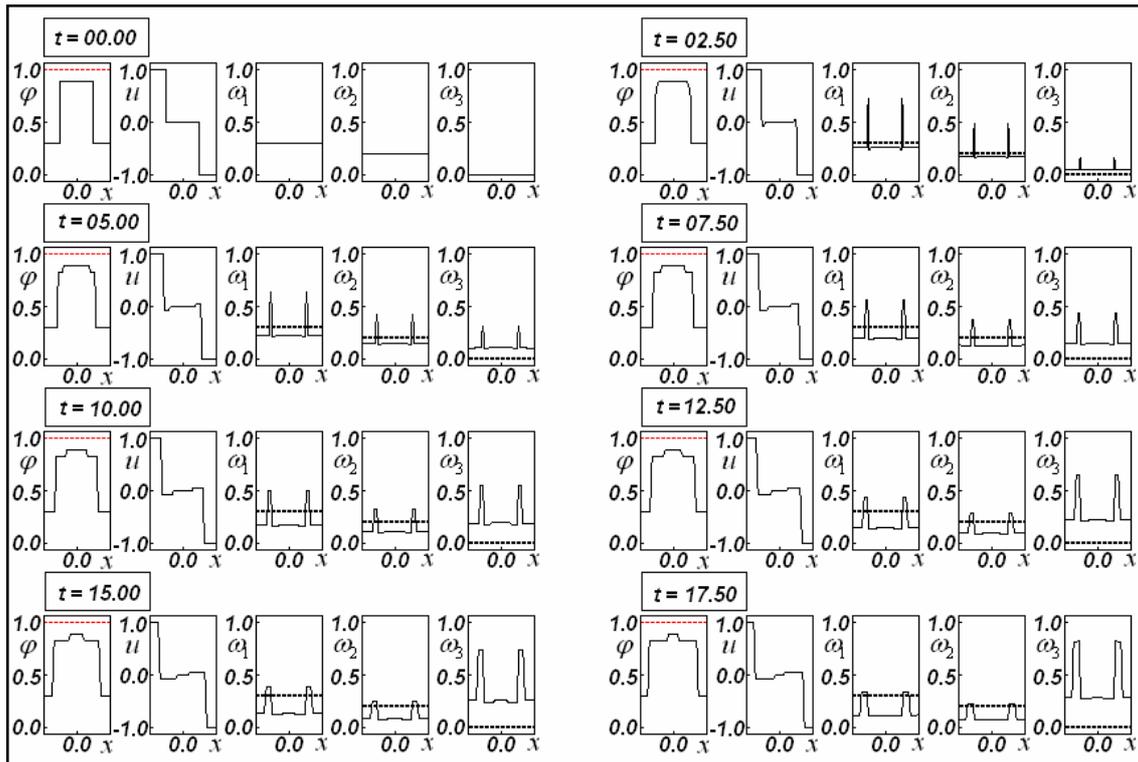


Figura 5.15 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um salto para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u .

A Figura 5.16 apresenta a evolução da saturação φ , velocidade fluido u e concentração dos constituintes poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , levando em conta os termos de atrito ($\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$) e utilizando as mesmas condições iniciais utilizadas para obter a Figura 5.15. Nota-se a forte influência dos termos de atrito em todas as distribuições. Uma melhor visualização pode ser notada ao serem superpostas as Figuras 5.15 e 5.16, como apresentado na Figura 5.16a.

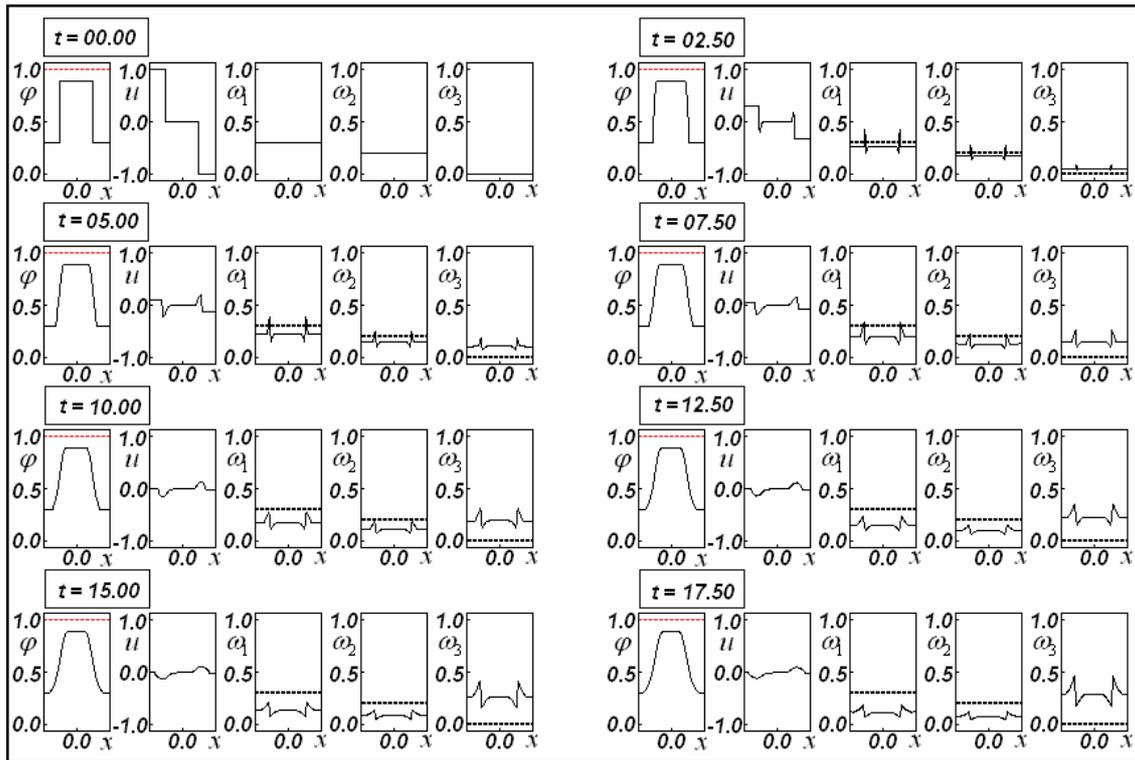


Figura 5.16 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$.

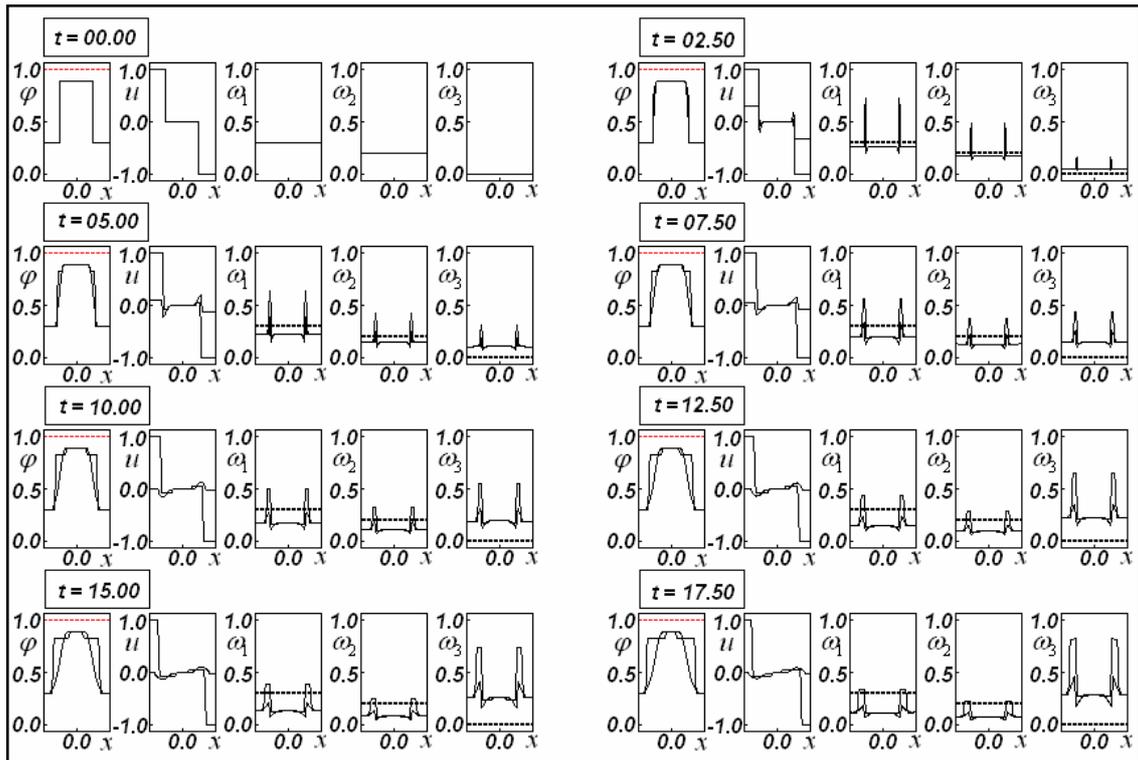


Figura 5.16a – Superposição das Figuras 5.15 e 5.16, para facilitar a comparação da influência dos termos de atrito.

A Figura 5.17 considera como condições iniciais, ilustradas no primeiro conjunto de 5 quadros, um salto para a saturação ($\varphi = 0.4$ para $x < -0.5$, $\varphi = 0.9$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $\varphi = 0.4$ para $x > +0.5$) e os mesmos degraus para a velocidade já considerados a partir da Figura 5.9 e despreza os termos devido ao atrito: $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. Observa-se que a linha tracejada em vermelho, representando a saturação máxima admissível não é atingida neste caso, apesar da ausência dos termos de atrito.

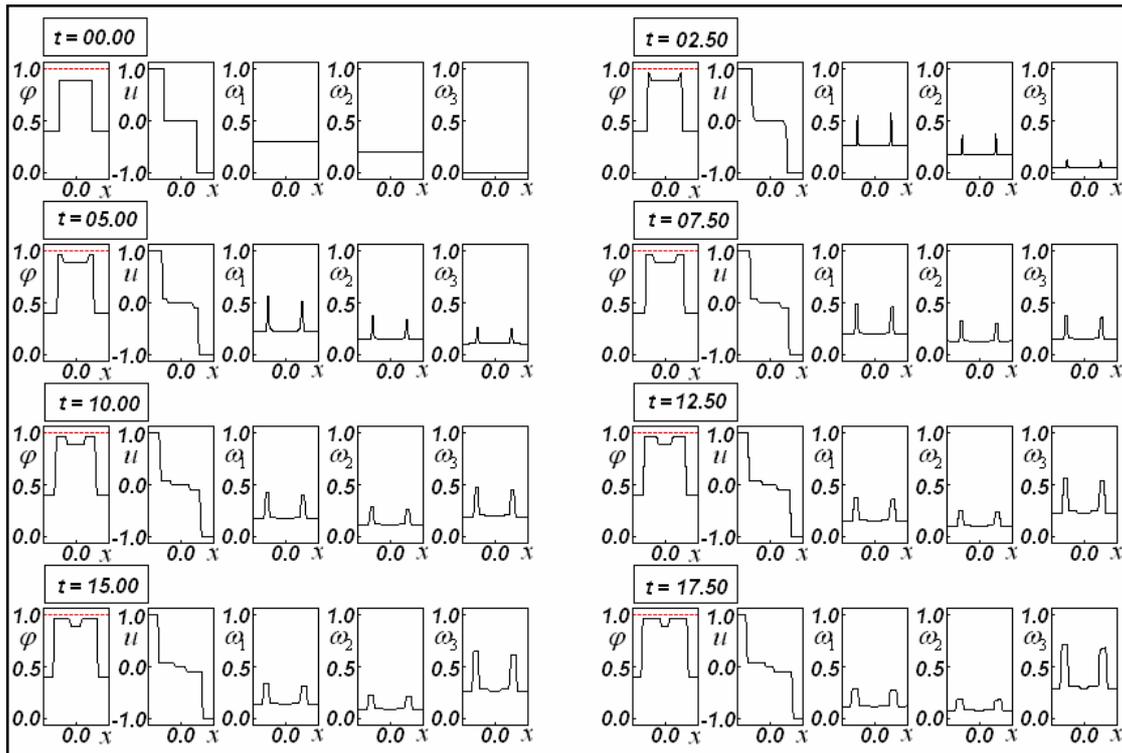


Figura 5.17 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um salto para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u .

A Figura 5.18 considera como as mesmas condições iniciais empregadas para obter a Figura 5.17, porém os termos que representam o atrito são levados em conta: $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$. A presença do atrito permite observar a dissipação ao longo da evolução de todas as variáveis.

A fim de observar melhor esta dissipação, foi construída a figura 5.19, com as mesmas condições iniciais empregadas para obter as Figuras 5.17 e 5.18, mas considerando um coeficiente para os dois termos de atrito cinco vezes maior que aquele usado na Figura 5.18 – $\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$.

Comparando as Figuras 5.17 a 5.19 observa-se que a presença de um termo de atrito com magnitude tão elevada levou a velocidades quase estagnadas. Além disso, as velocidades muito baixas têm pequena influência no comportamento dos poluentes.

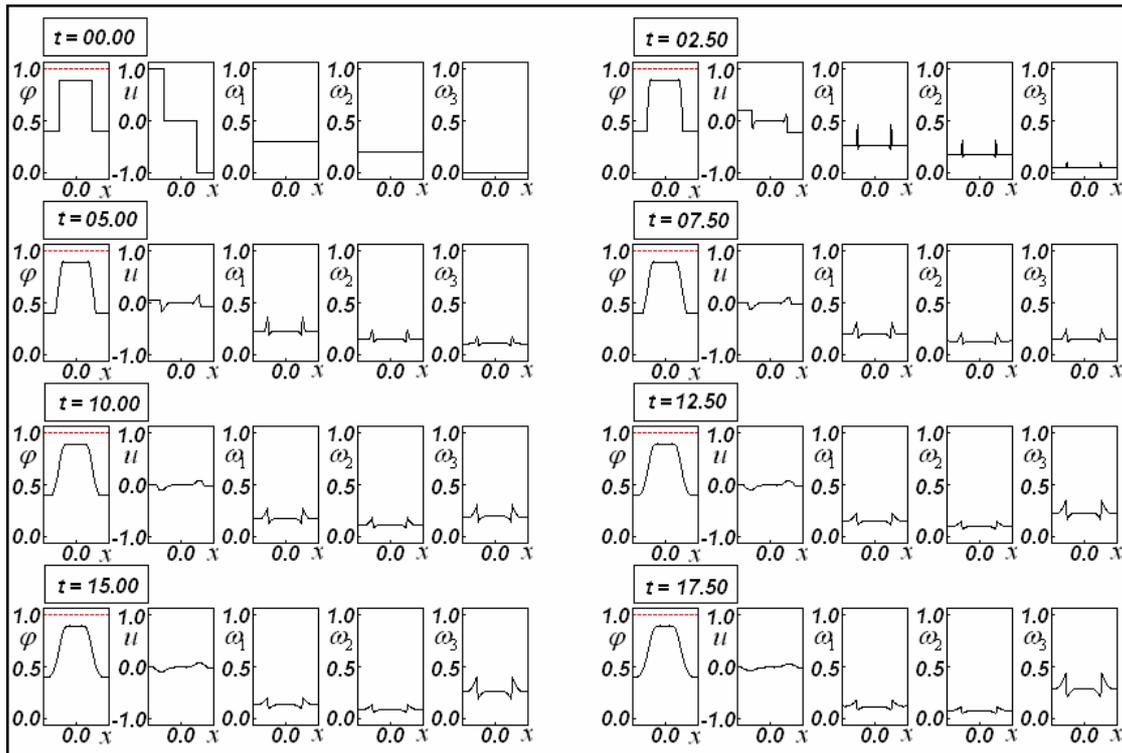


Figura 5.18 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$.

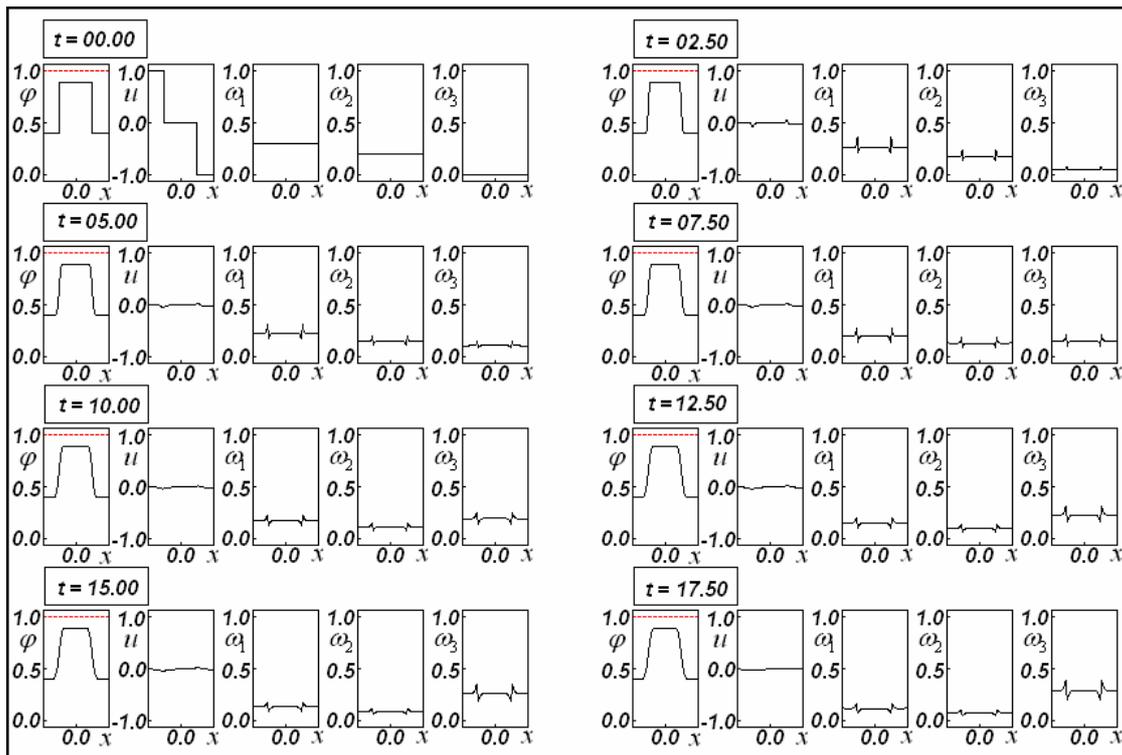


Figura 5.19 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 5.0$.

A Figura 5.20 considera como condições iniciais, ilustradas no primeiro conjunto de 5 quadros, um salto para a saturação ($\varphi = 0.4$ para $x < -0.5$, $\varphi = 0.95$ para $-0.5 < x < +0.5$ e $\varphi = 0.4$ para $x > +0.5$) e os mesmos degraus para a velocidade já considerados a partir da Figura 5.9 e despreza os termos devido ao atrito: $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. O salto da condição inicial, neste caso, atinge um valor mais elevado e a linha de saturação máxima admissível (a linha tracejada em vermelho) é atingida para todos os instantes de tempo considerados, após a condição inicial, neste caso em que não se considera o atrito.

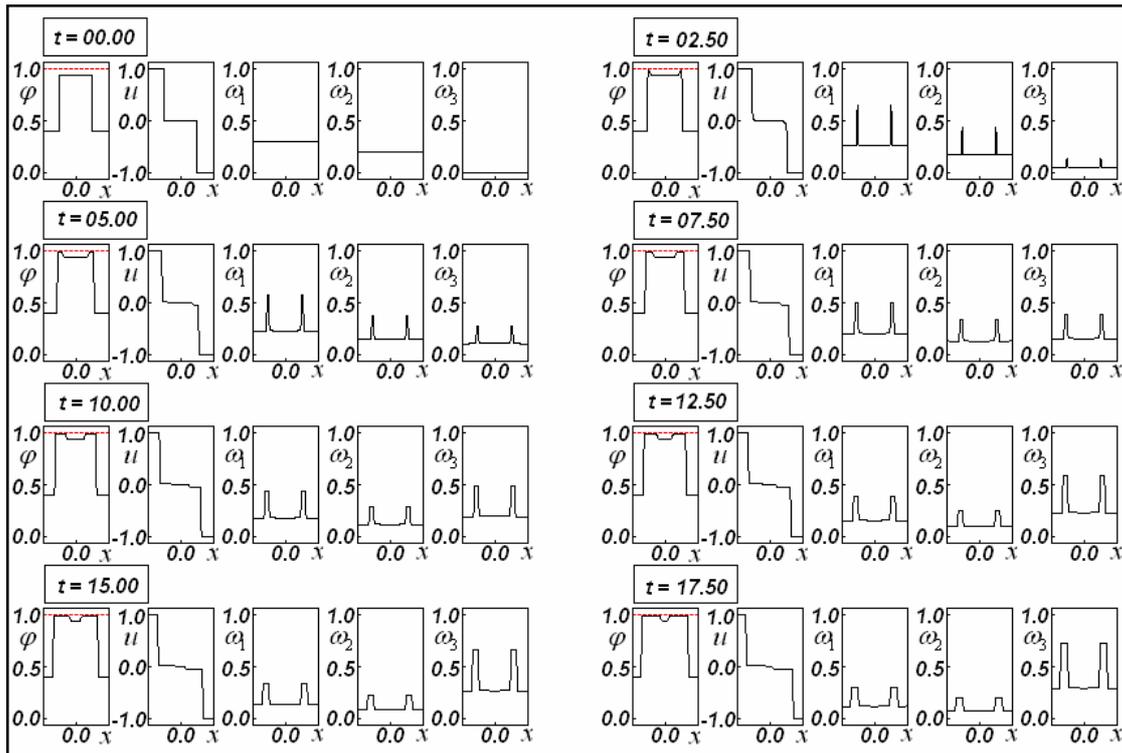


Figura 5.20 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0$. As condições iniciais são um salto para a saturação e diferentes degraus para a velocidade u .

A Figura 5.21 considera como as mesmas condições iniciais empregadas para obter a Figura 5.20, mas leva em conta os termos linear e quadrático do atrito: $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$, o que possibilita verificar a dissipação ao longo da evolução de todas as variáveis.

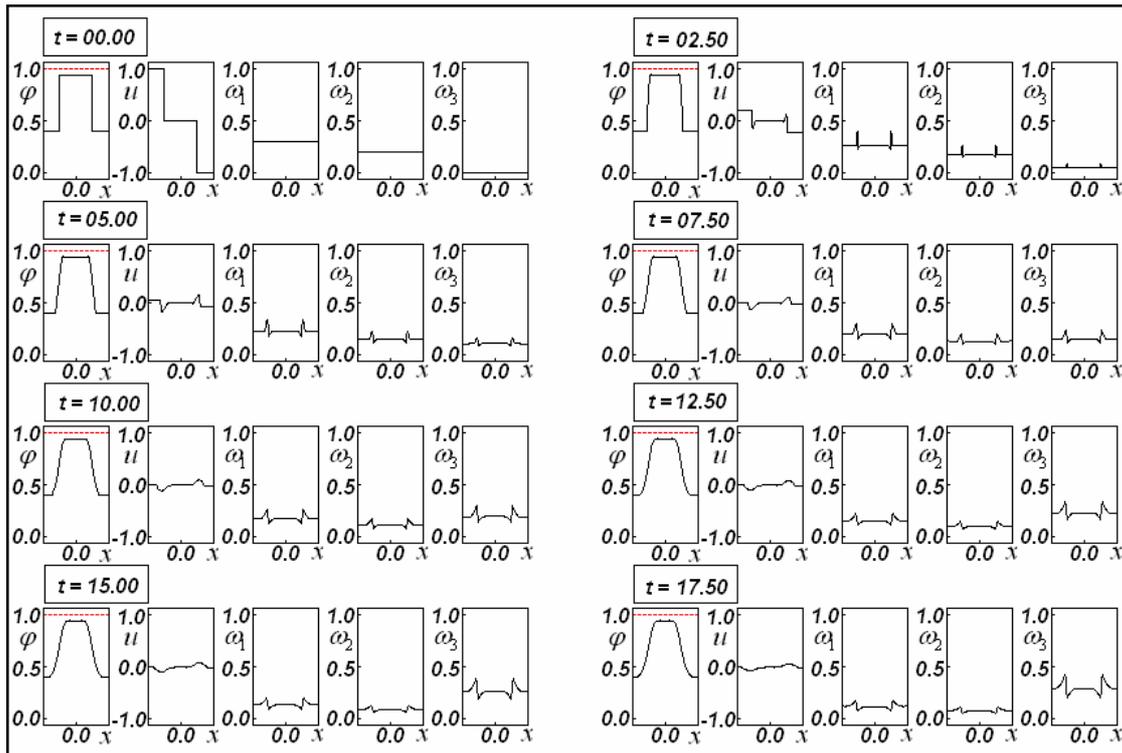


Figura 5.21 – Evolução da saturação φ , velocidade u e concentração dos poluentes ω_1 , ω_2 , e ω_3 , para $\alpha = \beta = 0.05$ e $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.0$.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS

Esta tese empregou uma abordagem de teoria de misturas para simular um sistema hiperbólico não linear e não homogêneo representando escoamentos de fluidos contendo poluentes que reagem quimicamente, sujeitos a uma restrição, através de meios porosos. Além das reações químicas, permitidas entre os constituintes poluentes, são levados em conta os efeitos de arraste linear e não linear provocados pela presença da matriz porosa (usualmente denotados como termos de Darcy e Forchheimer) no termo da fonte de momentum. A influência desses dois componentes do termo que representa o arraste é muito relevante para problemas reais em engenharia, principalmente neste caso no qual o fluido que escoar através da matriz porosa contém poluentes.

A simulação numérica combinou uma variante do método de Glimm (que marcha no tempo com um número previamente escolhido de problemas de Riemann associados) com um procedimento de fatoração de operadores. A variante do método de Glimm implementada leva em conta o fato de que a implementação do esquema de Glimm depende do sinal de número aleatório. A estratégia empregada considera quatro evoluções de procedimento de avanço de tempo completamente independentes (cada uma com sua própria escolha aleatória) para que a média das quatro evoluções forneça os resultados reais. Essa estratégia fornece resultados mais precisos sobre as posições das ondas de choque e de rarefação. À medida que o intervalo espacial diminui, a precisão dos resultados melhora. A técnica de fatoração de operadores é empregada para lidar com a não homogeneidade do sistema.

A relação constitutiva conveniente empregada para tratar a pressão permite uma supersaturação minúscula e controlada da matriz porosa e permite obter expressões explícitas de forma fechada para os invariantes de Riemann. A combinação do esquema de Glimm com a fatoração do operador é uma ferramenta confiável que pode descrever adequadamente problemas envolvendo a transição de escoamento insaturado para saturado e vice-versa, empregando a mesma metodologia numérica. É importante ressaltar que o modelo utilizado permite preservar a natureza hiperbólica do problema, garantindo resultados físicos consistentes.

Observa-se claramente a influência dos termos de arraste linear e não linear nos campos de saturação, velocidade e concentração dos poluentes neste escoamento de um fluido com poluentes através de uma matriz porosa.

Como sugestão para trabalhos futuros, poderia ser levada em conta a estequiometria. Isto aumentaria significativamente o grau de complexidade do problema a ser tratado, mas, por outro lado, também aumentaria a sua relevância.

REFERÊNCIAS

- Alazmi, B.; Vafai, K. Analysis of variants within the porous media transport models. *J. Heat Transf.* **2006**, *122*, 303–326.
- Allen, M.B. Mechanics of multiphase fluid flows in variably saturated porous media. *Int. J. Eng. Sci.* **1986**, *24*, 339–351.
- Atkin, R.J.; Craine, R.E. Continuum Theories of Mixtures. Basic Theory and Historical Development. *Q. J. Mech. Appl. Math.* **1976**, *29*, 209–244.
- Bear, J. *Dynamics of Fluids in Porous Media*; Courier Corporation: Dover, UK; New York, NY, USA, **1972**.
- Bear, J. *Hydraulics of Groundwater*; Courier Corporation: Dover, UK; New York, NY, USA, **1979**.
- Bedford, A.; Drumheller, D.S. Theories of immiscible and structured mixtures. *Int. J. Multiph. Flow* **1983**, *21*, 863–960.
- Belghit, A.; Benyaich, M. Numerical Study of Heat Transfer and Contaminant Transport in an Unsaturated Porous Soil. *J. Water Resour. Prot.* **2014**, *6*, 1238–1247.
- Bowen, R.M. Compressible porous media models by the use of the theory of mixtures. *Int. J. Eng. Sci.* **1982**, *20*, 697–735.
- Chorin, A.J. Random choice solution of hyperbolic systems. *J. Comput. Phys.* **1976**, *22*, 517–533.
- Coleman, B.D.; Noll, W. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Arch. Ration. Mech. Anal.* **1963**, *13*, 168–178.
- Costa Mattos, H.S.; Martins-Costa, M.L.; Saldanha da Gama, R.M. On the modeling of momentum and energy transfer in incompressible mixtures. *Int. J. Non-Linear Mech.* **1995**, *30*, 419–431.
- Dafermos, C. *Hyperbolic Conservation Laws in Continuum Physics*; Springer-Verlag: Heidelberg-Berlin, Germany, **2010**.
- Francaviglia, M.; Palumbo, A.; Rogolino, P. Thermodynamics of mixtures as a problem with internal variables. *Gen. Theory J. Non-Equilib. Thermodyn.* **2006**, *31*, 419–429.

- Freitas Rachid, F.B.; Saldanha da Gama, R.M.; Costa Mattos, H. Modelling the hydraulic transients in damageable elasto- viscoplastic piping systems. *Appl. Math. Model.* **1994**, *18*, 207–215.
- Glimm, J. Solutions in the Large for Nonlinear Hyperbolic Systems of Equations. *Comm. Pure Appl. Math.* **1965**, *18*, 697–715.
- Godlewskiand, E.; Raviart, P.A. *Hyperbolic Systems of Conservation Laws, Mathématiques & Applications*; Ellipses: Paris, France, **1991**.
- Godunov, S.K. A Difference Scheme for Numerical Solution of Discontinuous Solution of Hydrodynamic Equations. *Mat. Sb.* **1959**, *47*, 271–307. (In Russian)
- Goyeau, B.; Benihaddadene, T.; Gobin, D.; Quintard, M. Averaged momentum equation for flow through a nonhomogeneous porous structure. *Transp. Porous Med.* **1997**, *28*, 19–50.
- Gray, W.G.; Hassanizadeh, S.M. Unsaturated flow theory including interfacial phenomena. *Water Resour. Res.* **1991**, *27*, 1855–1863.
- Hassanizadeh, S.M.; Gray, W.G. Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries, *Adv. Water Res.* **1990**, *13*, 169–186.
- Ingham, D.B.; Pop, I. Porous media in fuel cells. In *Transport Phenomena in Porous Media III*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, **2005**; pp. 418–440.
- Kaviany, M. *Principles of Heat Transfer in Porous Media, Mechanical Engineering Series*, 2nd ed.; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, **1995**.
- Keyfitz, B.; Kranzer, H. Existence and uniqueness of entropy solutions to the Riemann problem for hyperbolic systems of two nonlinear conservation laws. *J. Diff. Eqns.* **1978**, *27*, 444–476.
- Lax, P. Shock Waves and Entropy. In *Contributions to Nonlinear Functional Analysis*; Academic Press: New York, NY, USA, **1971**.
- Lochab, R.; Kumar, V. A comparative study of high-resolution methods for nonlinear hyperbolic problems. *Z. Angew. Math. Mech.* **2022**, *102*, e202100462.
- Ma, L.; Ingham, D.B.; Pourkashanian, M.C. Application of fluid flows through. In *Transport Phenomena in Porous Media III*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, **2005**.
- Marchesin D; Paes-Leme, P.J. Shocks in gas pipelines. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **1983**, *4*, 105–116.

- Martins-Costa, M.L.; Saldanha da Gama, R.M. Numerical simulation of one-dimensional flows through porous media with shock waves. *Int. J. Numer. Methods Eng.* **2001**, *52*, 1047–1067.
- Martins-Costa, M.L.; Saldanha da Gama, R.M. Glimm's method simulation for the pollutant transport in an isothermal atmosphere. *Comput. Mech.* **2003**, *32*, 214–223.
- Martins-Costa, M.L.; Saldanha da Gama, R.M. Simulation of pollutant motion and decay in polytropic atmospheres with spherical symmetry. *Int. Commun. Heat Mass Transf.* **2006**, *33*, 872–879.
- Martins-Costa, M.L.; Saldanha da Gama, R.M. A new constrained constitutive equation for unsaturated flows of incompressible liquids through rigid porous media. *J. Porous Media* **2011**, *14*, 205–217.
- Martins-Costa, M.L.; Freitas Rachid, F.B.; Saldanha da Gama, R.P.; Saldanha da Gama, R.M. Combining Glimm's Scheme and Operator Splitting for Simulating Constrained Flows in Porous Media. *Axioms* **2024**, *13*, 587.
- Murad, M.A.; Bennethum, L.S.; Cushman, J.H. A multiscale theory of swelling porous media I: Application to one-dimensional consolidation, *Transp. Porous Media* **1995**, *19*, 93–122.
- Murad, M.A.; Cushman, J.H. Multiscale flow and deformation in hydrophilic swelling porous media. *Int. J. Eng. Sci.* **1996**, *34*, 313–338.
- Olivier, H.; Grönig, H. The random choice method applied to two-dimensional shock focusing and diffraction. *J. Comput. Phys.* **1986**, *63*, 85–106.
- Porto, E.M.; Martins-Costa, M.L.; Saldanha da Gama, R.M. An alternative procedure for simulating one-dimensional transport phenomena with shock waves in a gas. *Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng.* **2011**, *27*, 157–172.
- Rajagopal, K.R.; Tao, L. *Mechanics of Mixtures, Vol. 35 of Advances in Mathematics for Applied Sciences*; World Scientific: Singapore, 1995.
- Saldanha da Gama, R.M.; Sampaio, R. A model for the flow of an incompressible Newtonian fluid through a nonsaturated infinite rigid porous medium. *Comput. Appl. Math.* **1987**, *6*, 195–205.
- Saldanha da Gama, R.M. An alternative procedure for simulating the dynamical response of non-linear elastic rods. *Int. J. Numer. Methods Eng.* **1990**, *29*, 123–139.

- Saldanha da Gama, R.M.; Martins-Costa, M.L. Incompressible fluid flow and heat transfer through a nonsaturated porous medium. *Comput. Mech.* **1997**, *20*, 479–494.
- Saldanha da Gama, R.M.; Pedrosa Filho, J.J.; Saldanha da Gama, R.P.; da Silva, D.C.; Alexandrino, C.H.; Martins-Costa, M.L. Numerical Simulation of Constrained Flows through Porous Media Employing Glimm’s Scheme. *Axioms* **2023**, *12*, 1023.
- Scheidegger, A.E. *The Physics of Flow through Porous Media*, 3rd ed.; University of Toronto Press: Toronto, ON, USA, **1974**.
- Smoller, J. *Shock-Waves and Reaction-Diffusion Equations*; Cambridge University Press: New York, NY, USA, **1983**.
- Sod, G.A. A numerical study of a converging cylindrical shock. *J. Fluid Mech.* **1977**, *83*, 785–794.
- Srinivasan, S.; Rajagopal, K.R. A thermodynamic basis for the derivation of the Darcy, Forchheimer and Brinkman models for flows through porous media and their generalizations. *Int. J. Non-Linear Mech.* **2014**, *58*, 162–166.
- Tien, C.L.; Vafai, K. Convective and radiative heat transfer in porous media. *Adv. Appl. Mech.* **1989**, *27*, 225–281.
- Toro, E.F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*; Springer: Berlin, Germany, **1999**.
- Vafai, K.; Tien, C.L. Boundary and Inertia Effects on Flow and Heat Transfer in Porous Media. *Int. J. Heat Mass Transf.* **1981**, *24*, 195–243.
- Vafai, K. Convective Flow and Heat Transfer in Variable-Porosity Media. *J. Fluid Mech.* **1984**, *147*, 233–259.
- Wang, L. Flows through Porous Media: A Theoretical Development at Macroscale. *Transp. Porous Med.* **2000**, *39*, 1–24.
- Whitaker, S. Advances in theory of fluid motion in porous media. *Ind. Eng. Chem.* **1969**, *61*, 14–28.
- Whitaker, S. The Forchheimer equation: A theoretical development. *Transp. Porous Med.* **1996**, *25*, 27–61.
- Williams, W.O. Constitutive equations for a flow of an incompressible viscous fluid through a porous medium. *Q. J. Appl. Math.* **1978**, *36*, 255–267.